

Modellierung der Gefüge - Eigenschafts - Korrelation bei Dualphasenstahl

Dissertation

zur Erlangung des Grades
des Doktors der Ingenieurwissenschaften
der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
der Universität des Saarlandes

von

Frederik Scherff, M. Sc.

Saarbrücken

2019

Tag des Kolloquiums: 22.07.2019

Dekan:	Prof. Dr. Guido Kickelbick
Berichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. Stefan Diebels
	Prof. Dr. mont. Christian Motz
Vorsitz:	Prof. Dr.-Ing. Frank Mücklich
Akad. Mitarbeiter:	Dr.-Ing. Frank Aubertin

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen der Kooperation zwischen der *Universität des Saarlandes* und der *AG der Dillinger Hüttenwerke* am *Lehrstuhl für Technische Mechanik* (Prof. Dr.-Ing. Stefan Diebels) angefertigt.

Als meinem Doktorvater gilt Stefan Diebels besonderer Dank. Seine stetige Förderung und die vielen fachlichen Diskussionen, beginnend mit meiner Zeit als studentische Hilfskraft und der Anfertigung meiner Bachelor- und Masterarbeit, haben diese Arbeit überhaupt erst möglich gemacht.

Herrn Prof. Dr. mont. Christian Motz vom *Lehrstuhl für Experimentelle Methodik der Werkstoffwissenschaften* danke ich für die gute Zusammenarbeit und für die Übernahme des zweiten Gutachtens. Schon während meiner Promotion war er stets ein verlässlicher Ansprechpartner.

Ebenso danke ich meinen Projektpartnerinnen Lena Eisenhut vom *Lehrstuhl für Experimentelle Methodik der Werkstoffwissenschaften* und Jessica Gola vom *Lehrstuhl für Funktionswerkstoffe*, stellvertretend für ihre Lehrstühle im Gesamten, für die gute Zusammenarbeit und die Hilfe in experimentellen Fragen. Dr.-Ing. Sebastian Scholl und Dr.-Ing. Kinshuk Srivastava danke ich stellvertretend für meinen Industriepartner *AG der Dillinger Hüttenwerke*. Die Arbeit mit ihnen, sowohl fachlich als auch menschlich, hat gezeigt, wie erfreulich Industriekooperationen ablaufen können.

Meinen Kollegen am *Lehrstuhl für Technische Mechanik* danke ich für die schöne Arbeitsatmosphäre und den kollegialen Zusammenhalt, sie haben nicht unwesentlich zum Erfolg dieser Arbeit beigetragen. Besonders hervorheben möchte ich hier meine Bürokollegen Dr.-Ing. Florian Goldschmidt, Vanessa Dörlich und Martin Reis, von denen Florian Goldschmidt sich zu Beginn meiner Arbeit zusätzlich als mein *Numerik-Mentor* hervorgetan hat, sowie Thomas Bleistein und Ralf Derr, die mich seit Beginn meiner Zeit am *Lehrstuhl für Technische Mechanik* als Kollegen begleitet haben. PD Dr.-Ing. Dr. rer. nat. Anne Jung danke ich für die vielen fachlichen Diskussionen, oft bis in die Nacht hinein, und die hilfreichen Anregungen beim Anfertigen dieser Arbeit. Auch meinen Kollegen Dr.-Ing. Tobias Scheffer und Dr.-Ing. Henning Seibert, die den Beginn meiner wissenschaftlichen Arbeit als Betreuer entscheidend geprägt haben, gilt mein Dank.

Zuletzt danke ich vor allem meiner Familie. Ohne eure große Unterstützung hätte ich diesen Lebensweg so nicht einschlagen können. Annika danke ich zusätzlich für die Beharrlichkeit, mich zu einem zügigen Abschluss meiner Arbeit anzuspornen, und für das Ertragen meines hohen Zeiteinsatzes für diese Promotion.

Vielen Dank!

Saarbrücken, April 2019

Frederik Scherff

Zusammenfassung

Dualphasenstahl zeichnet sich durch eine für Strukturwerkstoffe wünschenswerte Kombination aus hoher Dehnbarkeit bei gleichzeitig hoher Festigkeit aus. Die Ursache der Eigenschaften liegt in seinem Gefüge bzw. seiner Mikrostruktur, bestehend aus weichem Ferrit und hartem Martensit, begründet.

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Modellierung dieser Gefüge-Eigenschafts-Korrelation durch numerische Simulationen auf Basis dreidimensionaler Mikrostrukturen. Die Betrachtung umfasst alle zur Modellierung relevanten Schritte, von der experimentellen Untersuchung der Materialeigenschaften über die numerische Umsetzung der Materialtheorie bis hin zur Simulation der mechanischen Eigenschaften. Ein Verfahren zur Bestimmung der Größe des repräsentativen Volumenelements wird dazu ebenso entwickelt wie eine praktikable Methode zur Steigerung der numerischen Effizienz.

Die Erzeugung virtueller Dualphasenstahl-Mikrostrukturen ist ein zusätzlicher Schwerpunkt der Arbeit. Zu diesem Zweck wird ein Modell zur numerischen Erstellung virtueller Mikrostrukturen entsprechend vorgegebener Geometrieparameter entwickelt und validiert. Ziel des Vorgehens ist, nicht nur bekannte Stähle in der Simulation zu untersuchen, sondern auch die Möglichkeit zur Evaluation neuer Mikrostrukturen zu schaffen.

Abstract

Dual-phase steel is characterized by a combination of high ductility and high strength that is preferable for structural materials. This is due to its microstructure consisting of soft ferrite and hard martensite.

The present work deals with the modelling of microstructure-property correlation by numerical simulations on the basis of three-dimensional microstructures. The analysis includes all steps relevant for modelling, from the experimental investigation of material properties and the numerical implementation of the material theory up to the simulation of the mechanical properties. A method for the determination of the size of the representative volume element will be developed as well as a straightforward method to increase numerical efficiency.

The generation of virtual dual-phase steel microstructures is a further focus of the work. For this purpose a model for the numerical construction of virtual microstructures according to given geometry parameters is developed and validated. The aim of the procedure is to not only investigate known steels in the simulation, but also to create the possibility of evaluating new microstructures.

Inhaltsverzeichnis

1	Modellierung von Dualphasenstahl - Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Zielsetzung und Aufbau der Arbeit	3
2	Stand der Forschung mikrostrukturbasierter Simulationen	7
2.1	Simulation auf Basis realer Mikrostrukturen	8
2.2	Simulation auf Basis virtueller Mikrostrukturen	10
2.3	Unterscheidung nach Kornstruktur und Phasenstruktur	12
2.4	Konsequenz für die Arbeit	14
3	Kontinuumsmechanische Grundlagen	15
3.1	Kinematik	15
3.2	Bilanzgleichungen	19
3.3	Materialtheorie	21
3.3.1	Elastizität	22
3.3.2	Plastizität	23
4	Numerische Umsetzung	31
4.1	Grundlagen der FEM	31
4.2	Umsetzung der Materialtheorie	35
4.3	Allgemeiner Programmablauf	42
4.4	Datenreduktion	45
5	Experimentelle Charakterisierung von Dualphasenstahl	51
5.1	Dualphasenstahl	51
5.2	Uniaxialer Zugversuch	55
5.3	3D-Tomographie	63
5.4	Härtemessung	67
6	Auswertung der Nanoindentierung	71
6.1	Untersuchung der Einzelphasen	71
6.2	Untersuchung der Grenzschicht Martensit-Ferrit	76
7	Bestimmung des repräsentativen Volumenelements	81
7.1	Experimentelle Bestimmung der RVE-Größe	82

7.2	Validierung	85
8	Ergebnisse der mechanischen Simulation	91
8.1	Datenreduktion	91
8.1.1	Bestimmung der Referenzsimulation	92
8.1.2	Nutzen und Verifikation	94
8.1.3	Lokale Betrachtung der Datenreduktion	101
8.2	Validierung und Verifikation des Simulationsprozesses	104
8.2.1	Validierung der Simulation des Stahls DP1	105
8.2.2	Untersuchung alternativer Materialmodelle	106
8.2.3	Verifikation der numerischen Umsetzung	111
8.2.4	Validierung der Simulation des Stahls DP3	113
8.3	Zusammenfassung - mechanische Simulation	115
9	Virtuelle Mikrostrukturen	117
9.1	Strukturerzeugung	117
9.2	Validierung	122
10	Fazit und Ausblick	127
10.1	Zusammenfassung und Bewertung der erzielten Ergebnisse	127
10.2	Ausblick auf Folgearbeiten	130
	Literaturverzeichnis	133
	Anhang	151
A	Veröffentlichungen	151
B	Vorträge	151
C	Poster	153

1

Modellierung von Dualphasenstahl - Einleitung

1.1 Motivation

In der heutigen Zeit gelten oft Superlegierungen, moderne Kunststoffe und komplexe Verbundwerkstoffe als die Materialien der Zukunft. Dennoch ist Stahl der bedeutendste Konstruktionswerkstoff der Moderne. Seit der Entdeckung durch die Hethiter im zweiten Jahrtausend v. Chr. [76] hat seine Bedeutung als Werkstoff stetig zugenommen. Mit der industriellen Revolution im 19. Jahrhundert hat sich diese Entwicklung rasant beschleunigt hin zu einer Produktion von knapp 1,7 Milliarden Tonnen Stahl im Jahr 2017 [28]. Das bedeutet, dass die Produktionsmenge von Stahl die Produktionsmenge aller anderen Metalle um mehr als den Faktor 10 übersteigt und die Produktionsmenge aller Kunststoffe um mehr als den Faktor 5 [114, 133]. Aufgrund der großen Vielfalt möglicher Mikrostrukturzustände und Legierungsbestandteile, haben sich im Laufe der Zeit verschiedene Oberklassen an Stahlwerkstoffen herausgebildet (Abbildung 1.1). Eine dieser Klassen sind Dualphasenstähle. Sie sind aufgebaut aus einer Matrix aus weichem Ferrit, in die harte Martensitbereiche eingebettet sind. Als Folge dieses mikrostrukturellen Aufbaus zeichnen sich Dualphasenstähle durch eine hohe Dehnbarkeit bei gleichzeitig hoher Festigkeit aus [166].

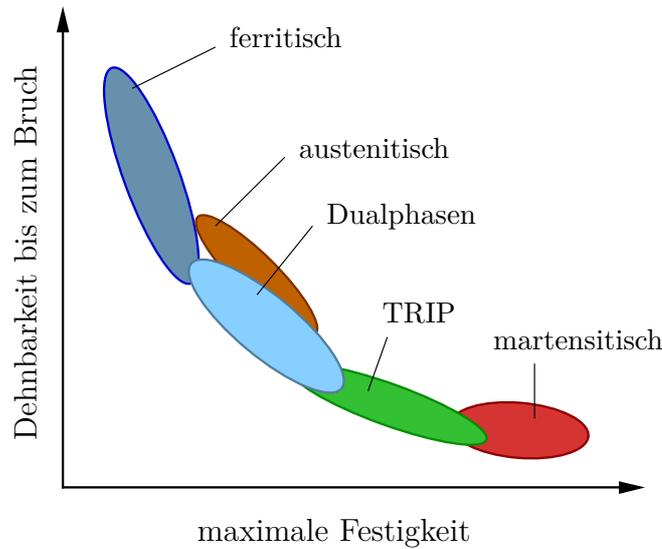


Abbildung 1.1: Schematische Einteilung verschiedener Stahl-Klassen entsprechend ihrer Festigkeit und Dehnbarkeit, modifiziert nach Raabe et al. [136].

Dies stellt eine besonders wünschenswerte Eigenschaftskombination für Stahlwerkstoffe dar. Anwendung findet Dualphasenstahl vor allem als Feinblech für festigkeitsrelevante und energieabsorbierende Bauteile in der Automobil- und Luftfahrtindustrie [26, 165]. Die besonderen Eigenschaften führen jedoch zu einem steigenden Interesse, Dualphasenstähle auch in Grobblechen beispielsweise im Rohrleitungsbau einzusetzen [71, 75, 106].

So wie Dualphasenstahl aufgrund seiner herausragenden mechanisch-technologischen Eigenschaften in verschiedenen industriellen Anwendungen mit großer Bedeutung verwendet wird, werden auch verschiedene Simulationmethoden genutzt, um seine Eigenschaften im Einsatz weiter zu optimieren. Klassische kontinuumsmechanische Modelle beschreiben den Werkstoff als homogenes, einphasiges Kontinuum und versuchen die Eigenschaften des Dualphasenstahls nur mit Hilfe komplexer Materialmodelle abzubilden [135, 164]. Aufgrund seiner ausgeprägten Gefüge-Eigenschafts-Korrelation hat diese Herangehensweise jedoch bedeutende Nachteile. Die Eigenschaften eines Dualphasenstahls werden entscheidend durch sein Gefüge bzw. seine Mikrostruktur bestimmt, z. B. durch die Menge, Form und Verteilung von Martensit im Ferrit [26, 166]. Modelle mit Betrachtung des Stahls als einphasiges Kontinuum sind exakt auf einen Stahl festgelegt, wodurch schon geringe strukturelle Änderungen eine Neuanpassung des Modells erfordern. Zum Teil wird der Einfluss der Mikrostruktur durch Erweiterung der Materialmodelle beachtet, indem vorliegende

Informationen zum inneren Aufbau des Stahls die Parameter des Materialmodells beeinflussen [143, 144]. Vollständig kann das Zusammenspiel von Ferrit und Martensit in der Mikrostruktur von Dualphasenstahl jedoch nur beschrieben werden, wenn beide Phasen direkt in die Betrachtung einbezogen werden. Dies wird umgesetzt durch mikrostrukturbasierte Simulationen im Rahmen der Finite Elemente Methode (FEM) [187]. Solche Simulationen bieten die Möglichkeit, die genauen Effekte der mikrostrukturellen Beschaffenheit des Stahls in die Betrachtung einfließen zu lassen, indem die beiden Phasen des Stahls als diskrete Bereiche des FE-Netzes modelliert werden.

1.2 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

In der vorliegenden Arbeit wird die gesamte Prozesskette der numerischen Untersuchung von Dualphasenstahl von der experimentellen Bestimmung der Mikrostruktureigenschaften über die Implementierung der numerischen Modelle bis hin zur Simulation der mechanischen Eigenschaften auf Basis der dreidimensionalen Mikrostruktur dargelegt. Als eines der bedeutendsten Experimente zur Charakterisierung von Werkstoffen dient hier der uniaxiale Zugversuch. Die einzelnen Phasen des Stahls werden als elastisch-plastisches Material modelliert. Der experimentelle Zugversuch wird dabei im Dehnungsbereich von unter 10% betrachtet, sodass Effekte wie Schädigung und die Einschnürung der Probe nicht in die Untersuchung einfließen. Als zu untersuchendes Material dient ein thermomechanisch gewalzter Stahl der *AG der Dillinger Hüttenwerke*. Neben der bloßen Modellierung von Dualphasenstahl auf Basis seiner Mikrostruktur liegt ein besonderer Schwerpunkt der Arbeit auf der Datenreduktion und der effizienten Umsetzung der Simulation. Aufgrund der großen Datenmengen einer Mikrostruktur ist Datenreduktion unabdingbar für den produktiven und realitätsnahen Einsatz von Simulationen. Ebenso wird eine Methode zur Bestimmung des repräsentativen Volumenelements (RVE) im Material vor der Generierung der dreidimensionalen Mikrostrukturinformation entwickelt und validiert. Das Hauptziel der Arbeit ist die Schaffung eines Werkzeugs, welches auf Basis der Parameter der Phasenstruktur die Fließkurve voraussagt. Hierzu wird in der Arbeit neben der Prozesskette der Simulation auf Basis der realen Mikrostruktur des Stahls auch ein Prozess zur Erzeugung virtueller Mikrostrukturen entwickelt. Dies ermöglicht es, nicht nur bekannte Dualpha-

senstähle in der Simulation zu untersuchen, sondern auch vielversprechende neue Mikrostrukturen schon vor ihrer Produktion zu evaluieren.

Die Arbeit gliedert sich in 10 Kapitel. In *Kapitel 2* wird der Stand der Forschung im Bereich der mikrostrukturbasierten Simulation, mit Schwerpunkt Dualphasenstahl, dargelegt. Die Ausführungen betreffen sowohl die Unterteilung in die Simulation auf Basis realer Mikrostrukturen und die Simulation auf Basis virtueller Mikrostrukturen, als auch die verschiedenen angewandten Verfahren in beiden Untergruppen.

Daran schließt sich in *Kapitel 3* eine Zusammenfassung der für die Arbeit relevanten Bereiche der kontinuumsmechanischen Theorie an. Das Kapitel ist unterteilt in eine Betrachtung der Kinematik, der Bilanzgleichungen und insbesondere der Theorie elastischer und plastischer Materialien.

Nach diesen eher theorieorientierten Kapiteln befasst sich *Kapitel 4* mit der Numerik der Arbeit. Es beschreibt die verwendeten numerischen Verfahren, die Implementierung der Materialtheorie in die quelloffenen C++ Programmbibliothek *deal.II* und die untersuchten Methoden der Datenreduktion.

Kapitel 5 behandelt die experimentellen Grundlagen der Arbeit. Angefangen mit einer Erläuterung des werkstofftechnischen Hintergrunds zu Dualphasenstahl werden der uniaxiale Zugversuch, die 3D-Tomographie und Verfahren zur Härteprüfung beschrieben. Zusätzlich wird die Durchführung von Zugversuchen mit optischer, feldlicher Auswertung der Dehnungsinformation als weiteres Validierungsexperiment erläutert.

Die Untersuchung der mechanischen Eigenschaften der einzelnen Phasen des Dualphasenstahls und ihrer Grenzschicht, insbesondere durch Nanoindentierung, ist Thema von *Kapitel 6*.

In *Kapitel 7* wird die Bestimmung des RVE beschrieben. Dabei wird sowohl die experimentelle Methode zur Bestimmung der Größe des RVE auf Basis von Härtemessungen erläutert, als auch das entwickelte Verfahren numerisch validiert.

In den vorstehenden Kapiteln werden alle Grundlagen zur Simulation von Dualphasenstahl auf Basis seiner Mikrostruktur gelegt. *Kapitel 8* stellt die zugehörigen Ergebnisse vor. Die implementierten Methoden der Datenreduktion werden zuerst verglichen und validiert. Danach wird der entwickelte Simulati-

onsprozess durch Vergleich mit Experimenten, alternativen Materialmodellen und einem weiteren Simulationsprogramm validiert und verifiziert.

Der Ablauf der Erzeugung virtueller Strukturen wird in *Kapitel 9* ausführlich beschrieben. Zur Validierung dient hier der Vergleich virtueller Mikrostrukturen mit bekannten realen Mikrostrukturen und die Untersuchung neuer Dualphasenstähle, deren mechanische Eigenschaften auf Basis virtueller Strukturen vorhergesagt werden.

Den Abschluss der Arbeit bildet *Kapitel 10*. Die gesamten verwendeten Methoden und die erhaltenen Ergebnisse werden im Gesamtkontext zusammengefasst und nochmals diskutiert. Zusätzlich wird ein Ausblick auf mögliche Folgearbeiten im weiten Feld der mikrostrukturbasierten Simulation von Dualphasenstahl gegeben.

2

Stand der Forschung mikrostrukturbasierter Simulationen

Im Rahmen dieser Arbeit wird das mechanische Verhalten von Dualphasenstahl im uniaxialen Zugversuch auf Basis seiner Mikrostruktur simuliert. Die mikrostrukturbasierte Simulation hat bei der Beschreibung des mechanischen Verhaltens große Vorteile gegenüber der Betrachtung von Stahl als einphasiges Kontinuum und stellt ein sehr breites Forschungsfeld dar. Die verschiedenen Arbeiten lassen sich anhand diverser Kriterien unterteilen, insbesondere anhand der Verwendung realer, experimentell bestimmter Mikrostrukturen oder virtueller, numerisch erzeugter Mikrostrukturen. Zweiter ausschlaggebender Unterscheidungspunkt ist, ob die Mikrostruktur des Dualphasenstahls als reine Phasenstruktur zweier homogener Komponenten betrachtet wird oder ob zusätzlich die Kornstruktur der einzelnen Phasen mitbetrachtet wird¹. Die Unterscheidung zwischen zwei- und dreidimensionaler Rechnung stellt den dritten Unterscheidungspunkt dar. In Abbildung 2.1 sind eine reale Phasenstruktur und eine virtuelle Phasenstruktur, wie sie in der vorliegenden Arbeit verwendet werden, beispielhaft dargestellt.

Im Folgenden werden jeweils die Vor- und Nachteile von Simulationen an realen und virtuellen Mikrostrukturen erläutert. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der

¹ Details zum inneren Aufbau von Dualphasenstahl finden sich in Kapitel 5.1.

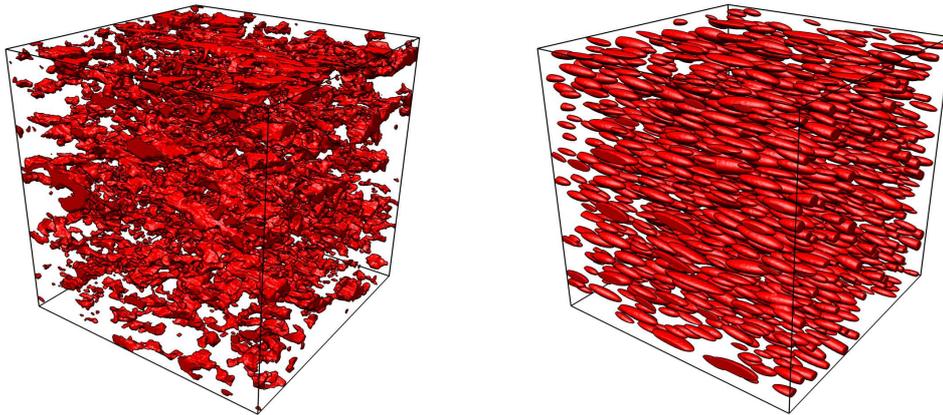


Abbildung 2.1: Ausschnitt einer verwendeten Tomographie eines Dualphasenstahls (links) und der zugehörigen virtuellen Mikrostruktur (rechts). Ferrit ist jeweils transparent dargestellt, Martensit in rot.

Betrachtung der Mikrostruktur von Dualphasenstahl als Phasenstruktur. Die Besonderheiten bei der Betrachtung des Materials als Kornstruktur werden danach gesondert behandelt. Aufgrund der Breite des betrachteten Forschungsgebiets und der Vielzahl möglicher Lösungsansätze, kann die Darstellung jedoch nur einen Überblick über den Themenkomplex geben. Für weitere Informationen sei auf die jeweils angegebene Literatur verwiesen.

2.1 Simulation auf Basis realer Mikrostrukturen

Eine elegante Methode der mikrostrukturbasierten Simulation von Werkstoffen ist die Simulation auf Basis der real im Werkstoff vorliegenden Mikrostruktur. Die Gewinnung der realen Mikrostrukturen ist, insbesondere im dreidimensionalen Fall, ein komplexer und zeitaufwändiger Prozess [26, 43]. Häufig genutzte Verfahren sind die Röntgen-Mikro-Computertomographie (μ CT) [39, 181, 185] und die Serienschmitttomographie [3, 27, 87, 98, 105, 146]. Bei der μ CT wird eine Probe aus vielen verschiedenen Richtungen mit Röntgenstrahlung durchstrahlt. Eine dreidimensionale Abbildung der inneren Struktur der Probe wird dann durch gefilterte Rückprojektion der aufgenommenen Absorptionsprofile berechnet [30]. Die Serienschmitttomographie basiert auf der seriellen Anfertigung einer Vielzahl zweidimensionaler Aufnahmen der Probe. Zwischen den einzelnen Aufnahmen wird jeweils eine dünne Schicht der Probe abgetragen.

Die zweidimensionalen Aufnahmen werden digital zur dreidimensionalen Struktur des untersuchten Probenvolumens zusammengefügt. Eine Schnittpräparation durch mechanische Politur mit Bildaufnahme im Lichtmikroskop kennzeichnet die Lichtmikroskop-Serienschnitttomographie [3, 27, 105] (siehe Kapitel 5.3). Eine Serienschnitttomographie basierend auf einer Schnittpräparation durch einen fokussierten Ionenstrahl (FIB, engl. focused ion beam) mit Bildaufnahme im Rasterelektronenmikroskop (REM) wird hingegen als FIB/REM-Serienschnitttomographie [87, 98, 146] bezeichnet.

Simulationen auf Basis der Realstruktur haben allgemein den Vorteil, dass sie die gesamte Mikrostruktur in die Betrachtung einbeziehen. Es werden somit bei richtiger Probenpräparation keine für die Materialeigenschaften relevanten Struktureigenschaften unbewusst vernachlässigt. Deshalb zeigen Simulationen auf Basis der Realstruktur in der Regel eine gute Übereinstimmung mit den zugehörigen Experimenten [44, 86, 110, 131, 137, 138] und stellen ein bedeutendes Instrument zur Validierung virtueller Mikrostrukturen dar.

Die Bestimmung der Größe des repräsentativen Volumenelements (RVE) stellt eine besondere Herausforderung bei der Simulation auf Basis realer Mikrostrukturen dar. Das RVE beschreibt den Bereich der Mikrostruktur, der gerade so groß ist, dass er alle relevanten Informationen über die Mikrostruktur enthält [66, 82, 167]. Ein Ausschnitt in Größe des RVE zeigt somit an jeder beliebigen Stelle des statistisch homogenen Materials die gleichen mikrostrukturellen Eigenschaften. Diese Eigenschaften ändern sich für größere Strukturausschnitte nicht mehr relevant. Simulationen an Mikrostrukturausschnitten kleiner als das RVE können durch die Streuung der Mikrostrukturgeometrie je nach Ort der Probenentnahme nicht die realen makroskopischen Eigenschaften abbilden. Simulationen an Mikrostrukturausschnitten größer als das RVE hingegen brauchen aufgrund der unnötig großen Geometrie deutlich mehr Rechenzeit und höhere Arbeitsspeicherlasten als für die Simulation an einem RVE nötig. Die Bestimmung der RVE-Größe ist daher ein wichtiger Punkt der Simulation. Trotzdem wird die RVE-Größe oft nicht [86, 131] oder nur durch aufwändige Versuch-und-Irrtum-Methoden [26] durchgeführt.

Die Komplexität der betrachteten Geometrie und die reine Größe des zu untersuchenden Volumens sind ein weiteres häufiges Problem bei der Simulation auf Basis von Realstrukturen [26, 31]. Tomographien im Größenbereich des RVE bestehen oft aus mehreren Millionen bis mehreren hundert Millionen Voxeln.

Durch geschickte, geometrienahere Vernetzung lässt sich die Größe für das FE-Netz zwar noch reduzieren, aufgrund der Komplexität der Strukturen ist aber auch hier die mögliche Datenreduktion begrenzt. Viele Arbeiten betrachten deshalb lediglich zweidimensionale Mikrostrukturen [79, 89, 131, 167, 168]. Neben dem stark reduzierten numerischen Aufwand der zweidimensionalen Rechnung sinkt hier auch der experimentelle Aufwand, da nur ein einzelnes REM-Bild bzw. Schliffbild zur Bestimmung der Mikrostruktur ausreichend ist. Das reale Materialverhalten wird jedoch bei Verwendung zweidimensionaler Mikrostrukturen nicht korrekt abgebildet, siehe [43, 45, 138, 168, 183]. Hauptgrund hierfür ist die fehlende Information über die mechanisch relevanten Materialbereiche in direkter Nachbarschaft über bzw. unter dem gewählten zweidimensionalen Ausschnitt. Dies gilt sowohl für reale Mikrostrukturen als auch für die im folgenden Unterkapitel beschriebenen virtuellen Mikrostrukturen.

2.2 Simulation auf Basis virtueller Mikrostrukturen

Simulationen auf Basis virtueller Mikrostrukturen wurden schon früh durchgeführt, um die oben beschriebenen experimentellen und numerischen Schwierigkeiten realer Mikrostrukturen zu umgehen. Die Arbeiten von Karlsson et al. [83, 84, 85] sind hier besonders hervorzuheben. Ziel ist die Erzeugung kleinerer, leichter vernetzbarer Mikrostrukturen und der Verzicht auf die komplexe, experimentelle Bestimmung der realen Mikrostruktur. Aufgrund der großen Bandbreite möglicher Methoden zur Erzeugung virtueller Mikrostrukturen können hier nur die wichtigsten Verfahren erläutert werden. Für einen detaillierten Überblick verschiedener weiterer Methoden, auch für andere Materialklassen, sei auf einen umfassenden Übersichtsartikel von Bargmann et al. [17] verwiesen. Grundsätzlich muss zwischen zwei Arten virtueller Mikrostrukturen differenziert werden, Modellstrukturen und realitätsnahe virtuelle Strukturen.

Der Begriff *Modellstrukturen* bezeichnet in diesem Kontext Strukturen, die aus einfachen Geometrien ohne systematischen Abgleich mit der Realstruktur erzeugt werden. In der Regel wird im Fall von Dualphasenstahl lediglich der Martensitvolumenanteil bestimmt und für die virtuelle Struktur vorgegeben. Die Arbeiten reichen von der Betrachtung einzelner Martensitbereiche als Viertelkreis in einer zweidimensionalen Ferritmatrix [2, 53, 80, 107, 111] bis hin zur

zufälligen Verteilung einer Vielzahl würfelförmiger oder kugelförmiger Martensitbereiche in einer dreidimensionalen Ferritmatrix [81, 131, 132, 169]. Solche Modelle bieten den Vorteil einer sehr einfachen Geometrieerzeugung und stellen ein unkompliziertes Modell zur Abschätzung des Einflusses des Martensitvolumenanteils der Mikrostruktur dar. Die mechanischen Eigenschaften werden aber nicht allein durch den Martensitvolumenanteil bestimmt [12, 26, 121, 167]. Der Einfluss komplexerer Geometriemaße kann mit Hilfe von Modellstrukturen nicht abgebildet werden.

Realitätsnahe virtuelle Mikrostrukturen werden im Gegensatz zu Modellstrukturen an mehrere verschiedene Geometrieparameter angepasst. Dadurch wird für Dualphasenstahl neben dem Volumenanteil an Martensit auch die Form und Orientierung der Martensitbereiche betrachtet. Genauere Erläuterungen zu möglichen Parametern zur Beschreibung der Mikrostrukturgeometrie finden sich in Kapitel 5.3. Ein Teil der Modelle basiert für realitätsnahe virtuelle Mikrostrukturen auf geometriebasierten Ansätzen [12, 24, 47, 121, 126, 151, 153, 171, 172]. Diese Ansätze nutzen, im Gegensatz zu den würfelförmigen oder kugelförmigen Martensitbereichen der Modellstrukturen, Martensitbereiche in Form von Quadern oder Ellipsoiden. Solche Formen bieten verschiedene Möglichkeiten, die Geometrie der Realstruktur anzunähern, z. B. durch ihre Orientierung im Raum, ihr Achsenverhältnis oder eine variable Größenverteilung. Sie stellen dabei einen Kompromiss dar, der die vergleichsweise unkomplizierte Beschreibung auf Basis diskreter geometrischer Elemente mit einer hinreichenden Komplexität zur realitätsnahen Nachbildung der Realstruktur verbindet. In der Literatur werden solche virtuellen Mikrostrukturen auch als statistisch ähnliche repräsentative Volumenelemente (SSRVE, engl. statistically similar representative volume element) bezeichnet [26, 139, 140, 153]. Ein anderer Teil der Modelle zur Erzeugung realitätsnaher virtueller Mikrostrukturen basiert auf methodisch komplexeren Ansätzen. Hier sind insbesondere Tessellationen [52, 78, 86, 142, 175, 178] und physikalisch motivierte Simulationen der Strukturentstehung [32, 159, 184] zu erwähnen. In Abbildung 2.2 sind beispielhaft eine zweidimensionale Voronoi-Tessellation als einfache Art der Tessellation und die zugehörige Phasenstruktur dargestellt. Eine solche Struktur entsteht in mehreren Schritten, beginnend mit einer zufälligen Platzierung von Startpunkten im Raum. Die einzelnen Zellen der Tessellation werden dann durch Zuordnung aller Raumbereiche zum nächstgelegenen Startpunkt gebildet [175]. Werden den einzelnen Zellen dann zufällige Grauwerte zuge-

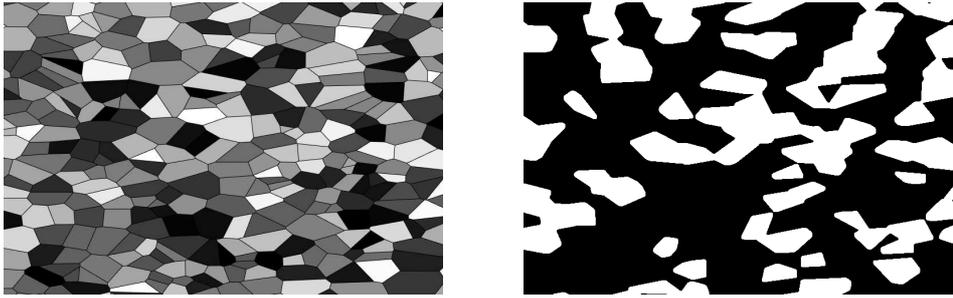


Abbildung 2.2: Zweidimensionale Voronoi-Tessellation mit zufälliger Einfärbung der Zellen (links) und zugehörige zweiphasige Struktur (rechts).

ordnet, entsteht durch Binärisierung der Tessellation eine zweikomponentige Phasenstruktur. Häufig genutzte komplexere Tessellationen sind die Laguerre-Tessellation [67, 99] und die Johnson-Mehl-Tessellation [78, 142]. Physikalisch motivierte Simulationen der Strukturentstehung basieren meist auf Diffusions-Modellen oder Diffusions-Reaktions-Modellen wie der Cahn-Hillard-Gleichung [32, 159, 184] zur Erzeugung der Phasenstruktur. Beide Arten der methodisch komplexeren Strukturierung bieten die Möglichkeit, die Realstruktur nochmals detaillierter nachzubilden, beispielsweise durch eine definierte Oberflächenmorphologie der einzelnen Martensitbereiche.

Durch die Generierung virtueller Mikrostrukturen, die in ihren geometrischen Parametern mit der Realstruktur übereinstimmen, ist es nun möglich, virtuelle RVEs zu erzeugen. Ein großer Vorteil virtueller Mikrostrukturen ist, dass sie zur prospektiven Untersuchung der Eigenschaften neuer Mikrostrukturen nutzbar sind. Es können also neben kleineren, weniger rechenintensiven RVEs auch neue, real noch nicht vorhandene Mikrostrukturen erzeugt werden (siehe Kapitel 9).

2.3 Unterscheidung nach Kornstruktur und Phasenstruktur

Dualphasenstahl und andere Metalle können nicht nur auf Basis homogener Phasen, sondern auch auf Basis der zugrunde liegenden Kornstruktur betrachtet werden [16, 57, 147]. In Kapitel 2.2 wurden Methoden zur Erzeugung virtueller Mikrostrukturen im Kontext der Erzeugung von Phasenstrukturen erläutert. Insbesondere die dort erläuterten Tessellationen stellen zusätzlich eine

Möglichkeit zur Erzeugung von Kornstrukturen dar [43, 49, 52, 86, 173, 178]. In diesem Fall werden den Zellen neben der reinen Einordnung in eine Phase auch Kornorientierungen zugeordnet. Andere zur Generierung von Kornstrukturen geeignete Verfahren sind beispielsweise Phasenfeldmodelle [91, 158, 176] oder zelluläre Automaten [93, 134, 182]. Phasenfeldmodelle beschreiben die Bildung und das Wachstum einzelner Körner mit Hilfe eines kontinuierlichen Ordnungsparameters. Der Ordnungsparameter hängt je nach gewähltem Modell von Faktoren wie Temperatur, Konzentration verschiedener Elemente oder Kornorientierung ab. Die Entwicklung der Faktoren wird dabei über zusätzliche Differentialgleichungen global beschrieben. Zelluläre Automaten hingegen basieren auf einer rein lokalen Beschreibung. Die einzelnen Hexaeder eines kartesischen Gitters stellen Bereiche eines simulierten Materials dar, ihre Zuordnung zu einzelnen Körnern erfolgt mittels diskreter Zustandsvariablen und Verhaltensanweisungen. Nachvollziehen lässt sich das Vorgehen leicht am Beispiel von Fickscher Diffusion. Hier wird nicht die Diffusionsgleichung global gelöst, sondern lediglich lokale Anweisungen für Bewegung und Kollision einzelner Partikel in ihrer direkten Nachbarschaft im Sinne Brownscher Bewegung [120] hinterlegt. Bei globaler Betrachtung entsteht so ein Diffusionsprozess.

Simulationen auf Basis der Kornstruktur können, durch Einbeziehen von beispielsweise Kornmorphologie und kristallographischer Orientierung der einzelnen Körner in die Betrachtung, eine genauere Abbildung des realen Materialverhaltens darstellen. In besonderem Maße gilt das für die zum Teil vorliegende Anisotropie der mechanischen Eigenschaften [42, 126, 166]. Die Einbeziehung der Kornstruktur in die Betrachtung bringt auch Nachteile mit sich. Durch den höheren Detaillierungsgrad der Mikrostruktur steigt die Datenmenge eines RVE stark an, was die in der Regel ohnehin schon hohe Arbeitsspeicherauslastung und Rechendauer der mikrostrukturbasierten Simulationen weiter steigen lässt. Infolgedessen werden viele Simulationen lediglich auf Basis einer zweidimensionalen Kornstruktur durchgeführt [1, 79, 167, 168], was aber zu Ungenauigkeit im Vergleich zu dreidimensionalen Simulationen führt [43, 138, 168, 183]. Mit der Betrachtung der Orientierungsinformation der Körner werden oft auch Kristallplastizitätsmodelle an Stelle kontinuumsmechanischer Materialmodelle genutzt [42, 43, 50, 148]. Dadurch steigen die Komplexität des zu implementierenden Materialmodells und der numerische Aufwand zur Berechnung des Systems weiter an. Von experimenteller Seite bringt die Betrachtung der Kornstruktur und Kornorientierung die Notwendigkeit, zur Gewinnung der orientie-

rungsabhängigen Mikrostrukturinformation z. B. Elektronenrückstreubeugung (EBSD, engl. electron backscatter diffraction) zu nutzen. Im Vergleich zu lichtmikroskopischen Methoden ist dies mit einer deutlichen Erhöhung des Aufwands für Präparation, Messung und Datenaufbereitung verbunden.

2.4 Konsequenz für die Arbeit

Der dargestellte Überblick zur mikrostrukturbasierten Simulation bei Dualphasenstahl hat diverse Folgen für die Umsetzung der Simulation in der vorliegenden Arbeit. Zur Wahrung einer realitätsnahen Simulation werden dreidimensionale Mikrostrukturen verwendet. Effektive Datenreduktion durch Materialdefinition am Integrationspunkt für voxelbasierte Hexaedernetze löst deren Nachteile großer Datenmengen und komplexer Vernetzung auf (Kapitel 4.4). Als Folge der Vorteile der Simulation auf Basis reiner Phasenstrukturen (vgl. Kapitel 8), wird auf die Betrachtung der Kornstruktur verzichtet. Dementsprechend wird die Mikrostruktur des Stahls als Phasenstruktur mittels Lichtmikroskop-Serienschnitttomographie gewonnen (Kapitel 5.3). Aufgrund der Notwendigkeit der Bestimmung der RVE-Größe wird eine einfache, valide Methode zur Ermittlung der Größe des RVE entwickelt (Kapitel 7). Zuletzt werden virtuelle Mikrostrukturen im Sinne eines SSRVE aufgrund ihrer guten Genauigkeit in Kapitel 9 zur prospektiven Untersuchung der Eigenschaften neuer Mikrostrukturen genutzt. Die realen Mikrostrukturen dienen dabei zur Validierung.

3

Kontinuumsmechanische Grundlagen

Im folgenden Kapitel werden die für die vorliegende Arbeit relevanten Grundlagen der Kontinuumsmechanik erläutert. Die Kontinuumsmechanik beschreibt allgemein das Verhalten von Körpern unter Belastung. Sie wird unterteilt in Kinematik, Bilanzgleichungen und Konstitutivgleichungen bzw. Materialtheorie. Umfassende Erläuterungen zur Kontinuumsmechanik in seiner Gesamtheit finden sich in der Fachliteratur. Für die hier verwendete Kinematik kleiner Deformationen sei auf [11, 95, 147, 152, 157, 162] verwiesen, für den allgemeinen Fall finiter Deformationen auf [4, 59, 65, 69, 129, 170].

3.1 Kinematik

Die Kinematik befasst sich mit der Bewegung und Deformation materieller Körper ohne deren Ursache zu berücksichtigen. Der Begriff *materieller Körper* beschreibt einen kontinuierlichen Körper, bestehend aus unendlich vielen materiellen Punkten als Träger der physikalischen Eigenschaften. Die atomare Struktur des Körpers kann aufgrund hinreichender Größenunterschiede vernachlässigt werden. Beispielhaft ist der materielle Körper Ω mit Rand Γ in Abbildung 3.1 in der Referenz- und Momentankonfiguration dargestellt. Referenzkonfiguration beschreibt dabei den Referenzzustand zum Zeitpunkt t_0 .

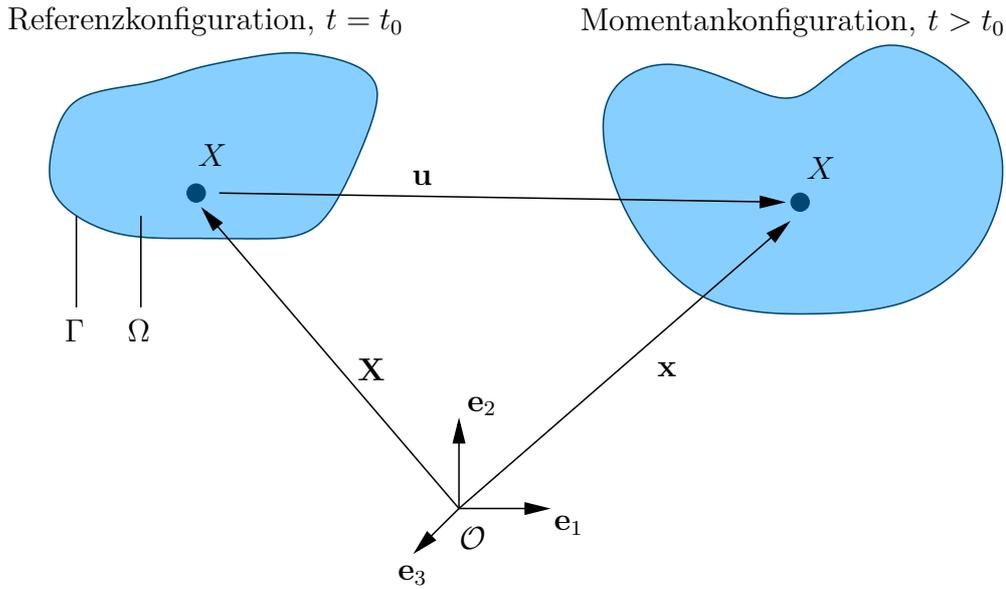


Abbildung 3.1: Zustand eines materiellen Körpers Ω in der Referenzkonfiguration $\mathcal{R}\mathcal{K}$ (links) und Momentankonfiguration $\mathcal{M}\mathcal{K}$ (rechts)

Dieser Zustand wird zum Zeitpunkt $t > t_0$ durch angreifende Kräfte zur Momentankonfiguration verschoben bzw. deformiert. Für die Ortsvektoren des Punktes X in der Referenzkonfiguration bzw. der Momentankonfiguration, \mathbf{X} und \mathbf{x} , gilt dabei der Zusammenhang

$$\mathbf{x}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{X} + \mathbf{u}(\mathbf{X}, t). \quad (3.1)$$

Die Betrachtung kann erweitert werden, indem anstelle des Punktes X ein Ausschnitt von Ω betrachtet wird. Der Einfachheit halber wird im Folgenden ein zweidimensionales Flächenelement betrachtet. Alle Überlegungen sind jedoch ebenfalls im Dreidimensionalen gültig. In Abbildung 3.2 ist ein solches Flächenelement dargestellt. Es wird in der Referenzkonfiguration rechteckig durch die Punkte X , Q und R parallel zu den Koordinatenachsen aufgespannt. Da das Flächenelement als klein angenommen wird, behalten seine Kanten auch in der Momentankonfiguration ihre gerade Form. Die Punkte X , Q und R haben in der Referenzkonfiguration die Ortsvektoren \mathbf{X} , \mathbf{Q} sowie \mathbf{R} und in der Momentankonfiguration die Ortsvektoren \mathbf{x} , \mathbf{q} sowie \mathbf{r} . In der Referenzkonfiguration ist X gegeben durch die Koordinaten (X_1, X_2) . Die Länge der Kante zwischen X und Q beträgt in der Referenzkonfiguration dX_1 und die Länge der Kante zwischen X und R beträgt dX_2 . Für die horizontale Längenänderung der

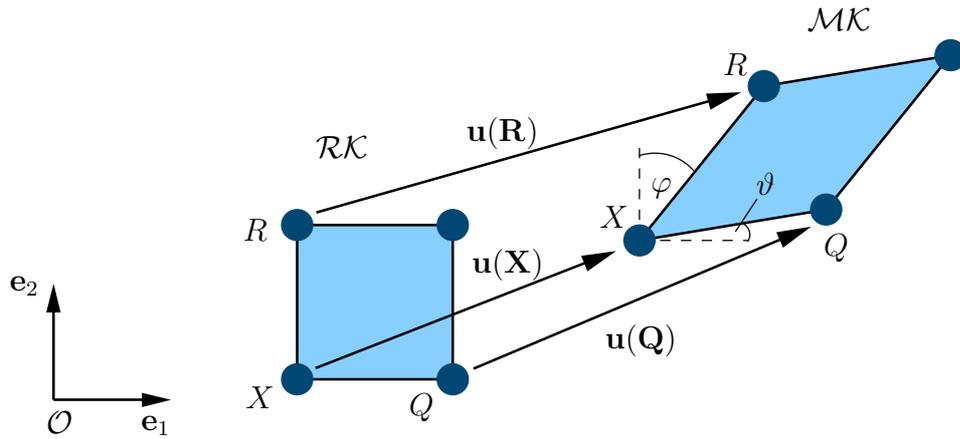


Abbildung 3.2: Zustand eines Flächenelements in der Referenzkonfiguration \mathcal{RK} (links) und Momentankonfiguration \mathcal{MK} (rechts)

Kante zwischen X und Q gilt dann

$$\begin{aligned} \Delta l &= (q_1 - x_1) - (Q_1 - X_1) \\ &= ((X_1 + dX_1 + u_1(\mathbf{Q})) - (X_1 + u_1(\mathbf{X}))) - ((X_1 + dX_1) - (X_1)) . \end{aligned} \quad (3.2)$$

In Gleichung (3.2) bezeichnet X_1 die horizontale Komponente des zugehörigen Vektors \mathbf{X} , die Schreibkonvention gilt analog für beliebige vektorielle Größen und Raumrichtungen. Unter Annahme kleiner Verschiebungen ergibt eine Taylor-Reihenentwicklung von $u_1(\mathbf{Q})$ um \mathbf{X}

$$\begin{aligned} u_1(\mathbf{Q}) &= u_1(X_1 + dX_1, X_2) \\ &= u_1(\mathbf{X}) + \frac{\partial u_1}{\partial X_1} dX_1 . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Durch Einsetzen von Gleichung (3.3) in Gleichung (3.2) und Beziehen des Terms auf dX_1 ergibt sich

$$\varepsilon_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial X_1} , \quad (3.4)$$

wobei die Dehnung ε_{11} als Längenänderung bezogen auf die Ausgangslänge in horizontaler Richtung eingeführt wird. Der Index $(\bullet)_{11}$ bezieht sich dabei auf die Indizes der rechten Seite von Gleichung (3.4). Analog lässt sich

$$\varepsilon_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial X_2} \quad (3.5)$$

in vertikaler Richtung herleiten.

Für den Rotationswinkel ϑ der Kante zwischen X und Q gilt

$$\begin{aligned} \tan(\vartheta) &= \frac{q_2 - x_2}{q_1 - x_1} \\ &= \frac{\left(X_2 + u_2(\mathbf{X}) + \frac{\partial u_2}{\partial X_1} dX_1 \right) - (X_2 + u_2(\mathbf{X}))}{\left(X_1 + dX_1 + u_1(\mathbf{X}) + \frac{\partial u_1}{\partial X_1} dX_1 \right) - (X_1 + u_1(\mathbf{X}))} \\ &= \frac{\frac{\partial u_2}{\partial X_1} dX_1}{dX_1 + \frac{\partial u_1}{\partial X_1} dX_1}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Für kleine Deformationen lässt sich dieser Zusammenhang vereinfachen zu

$$\vartheta = \frac{\partial u_2}{\partial X_1}. \quad (3.7)$$

Ebenso gilt mit den gleichen Annahmen für φ

$$\varphi = \frac{\partial u_1}{\partial X_2}. \quad (3.8)$$

Durch Mittelung der beiden Winkel ϑ und φ erhält man die Schubverzerrungen

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial X_2} + \frac{\partial u_2}{\partial X_1} \right). \quad (3.9)$$

Das Zusammenfassen der Gleichungen (3.4), (3.5) sowie (3.9) und die Erweiterung der obigen Betrachtung ins Dreidimensionale liefert die Komponenten des Dehnungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \right) \quad \text{mit } i, j = 1, 2, 3. \quad (3.10)$$

Mit der Definition des Gradienten $\text{Grad}(\bullet)$ als Ableitung einer Größe nach dem Ortsvektor in der Referenzkonfiguration

$$\text{Grad}(\bullet) = \frac{\partial(\bullet)}{\partial \mathbf{X}}, \quad (3.11)$$

lässt sich der Dehnungstensor umformen zu

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} \left(\text{Grad } \mathbf{u} + (\text{Grad } \mathbf{u})^T \right). \quad (3.12)$$

Bei der hier erläuterten, sogenannten geometrisch linearen Kinematik, wird mehrfach die Annahme kleiner Deformationen getroffen. Wie zu Beginn des Kapitels erwähnt, ist es im Gegensatz dazu auch möglich, die Kinematik allgemein für finite Deformationen herzuleiten. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde neben dem Simulationsmodell für kleine Deformationen auch ein Modell für finite Deformationen implementiert und untersucht. Da es jedoch bei den durchgeführten Simulationen keinen relevanten Unterschied zum Modell für kleine Deformationen erzeugt (Kapitel 8.2.2), wird hier und im Folgenden nicht genauer auf finite Deformationen und ihre theoretische Beschreibung eingegangen.

3.2 Bilanzgleichungen

Der Begriff *Bilanzgleichungen* bezeichnet eine Reihe axiomatisch eingeführter Erhaltungssätze für physikalische Größen. Sie beschreiben allgemein die zeitliche Änderung einer Größe in Abhängigkeit der Ursachen der Änderung, d. h. in Abhängigkeit der Terme für Fluss, Zufuhr und Produktion der entsprechenden Größe im Körper. Im Rahmen der Kontinuumsmechanik werden die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Drall, Energie und Entropie betrachtet. Das folgende Kapitel befasst sich lediglich mit der Impulsbilanz, da in dieser Arbeit auf ihrer Grundlage die relevante Spannungs-Dehnungs-Beziehung berechnet wird. Für Details zu den anderen Bilanzgleichungen sei wiederum auf die Fachliteratur verwiesen (z. B. [4, 59, 65, 69, 129, 170]).

Allgemein wird die zeitliche Änderung des Impulses \mathbf{p} eines materiellen Körpers Ω durch die an ihn angreifenden Kräfte \mathbf{f} ausgelöst,

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p} = \mathbf{f}. \quad (3.13)$$

In Gleichung (3.13) wird der Impuls mit seiner Definition als Produkt aus Masse und Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{x}}$ eingesetzt. Zusätzlich kann der allgemeine Kraftvektor durch die Summe aus Fernwirkungs- und Nahwirkungskräften ersetzt

werden. Die Nahwirkungskräfte \mathbf{t} bezeichnen dabei als Flussterm Kräfte, die über die Oberfläche Γ auf Ω wirken. Beispielhaft ist hier eine auf der Körperoberfläche angreifende Oberflächenspannung zu nennen. Die Fernwirkungskräfte \mathbf{b} wirken im Gegensatz dazu als Zufuhrterm im Inneren von Ω , wie z. B. die Gravitationskraft. Die globale Form der Impulsbilanz ergibt sich damit bei integraler Betrachtung zu

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \varrho_0 \dot{\mathbf{x}} dV = \int_{\Gamma} \mathbf{t} dA + \int_{\Omega} \varrho_0 \mathbf{b} dV, \quad (3.14)$$

wobei ρ_0 die Massendichte und dA bzw. dV ein Oberflächen- bzw. Volumenelement von Ω jeweils in der Referenzkonfiguration beschreiben. Werden das Reynoldssche Transporttheorem [65] auf die linke Seite von Gleichung (3.14) und das Cauchy-Theorem sowie der Gaußsche Integralsatz [4] auf den Flussterm der rechten Seite von Gleichung (3.14) angewendet, folgt

$$\int_{\Omega} \varrho_0 \ddot{\mathbf{x}} dV = \int_{\Omega} \text{Div } \boldsymbol{\sigma} dV + \int_{\Omega} \varrho_0 \mathbf{b} dV. \quad (3.15)$$

Der in Gleichung (3.15) verwendete Divergenzoperator $\text{Div}(\bullet)$ ergibt sich aus der doppelten Überschiebung von $\text{Grad}(\bullet)$ mit dem Identitätstensor, insbesondere gilt für den Tensor zweiter Stufe $\boldsymbol{\sigma}$

$$\text{Div } \boldsymbol{\sigma} \hat{=} \begin{pmatrix} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial X_1} + \frac{\partial \sigma_{21}}{\partial X_2} + \frac{\partial \sigma_{31}}{\partial X_3} \\ \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial X_1} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial X_2} + \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial X_3} \\ \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial X_1} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial X_2} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial X_3} \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Gleichung (3.15) gilt ebenso für beliebige, beliebig kleine Teilkörper von Ω . Daher muss der Integrand zu Null werden, damit Gleichung (3.15) allgemein erfüllt ist. Dies führt zur lokalen Form der Impulsbilanz

$$\varrho_0 \ddot{\mathbf{x}} = \text{Div } \boldsymbol{\sigma} + \varrho_0 \mathbf{b}. \quad (3.17)$$

Da in der vorliegenden Arbeit quasistatisches Verhalten angenommen wird, verschwindet in Gleichung (3.17) die Abhängigkeit von der Beschleunigung $\ddot{\mathbf{x}}$. Zusätzlich sind die Fernwirkungskräfte für das untersuchte Material im Vergleich zu den auftretenden Nahwirkungskräften vernachlässigbar. Somit redu-

ziert sich Gleichung (3.17) zur stationären Impulsbilanz

$$0 = \text{Div } \boldsymbol{\sigma} . \quad (3.18)$$

3.3 Materialtheorie

Der dritte wichtige Punkt der Kontinuumsmechanik wird durch die Konstitutivgleichungen bzw. die Materialtheorie gebildet. Mit ihrer Hilfe kann ein Zusammenhang zwischen Kinematik und Bilanzgleichungen, insbesondere zwischen Dehnung und Spannung, hergestellt werden. Allgemein kann Materialverhalten anhand der Ratenabhängigkeit bzw. Ratenunabhängigkeit der Deformation sowie dem möglichen Vorhandensein einer Gleichgewichtshysterese kategorisiert werden. Durch die verschiedenen Kombinationen dieser zwei Kriterien entstehen die vier in Tabelle 3.1 gezeigten Klassen von Materialverhalten [65].

Tabelle 3.1: Einteilung der Materialklassen nach Deformationsverhalten.

	ratenunabhängig	ratenabhängig
ohne Gleichgewichtshysterese	Elastizität	Viskoelastizität
mit Gleichgewichtshysterese	Plastizität	Viskoplastizität

Da Stahl für moderate Deformationsgeschwindigkeiten keine Ratenabhängigkeit zeigt, werden die Ausführungen auf Elastizität und Plastizität beschränkt. Auf atomarer Ebene entspricht elastische Deformation von Metallen der reversiblen Umordnung von Atomen durch Stauchung bzw. Streckung der Bindungen in der Atomgitterstruktur des Metalls. Plastizität hingegen beruht bei Metallen auf der bleibenden Umordnung von Atomen. Diese Umordnung geschieht durch Bildung und Bewegung von Versetzungen genannter Fehler im Aufbau des Atomgitters. Im Folgenden werden die relevanten Gleichungen zur Beschreibung des elastisch-plastischen Materialverhaltens vorgestellt und erläutert. Weitere Informationen zur Materialtheorie, v. a. im Falle finiter Deformationen, finden sich in der eingangs zitierten Fachliteratur, genauere werkstofftechnische Hintergründe von Elastizität und Plastizität in [16, 38, 57, 92, 147].

3.3.1 Elastizität

Im Bereich kleiner Dehnungen gilt die Annahme linear-elastischen Verhaltens. Zur Beschreibung dieses Verhaltens wird auf das Hookesche Gesetz zurückgegriffen [70], das ursprünglich den linearen Zusammenhang zwischen der Verlängerung einer Feder und der an ihr angreifenden Kraft beschreibt. Eine Verallgemeinerung dieses Zusammenhangs für dreidimensionale materielle Körper und die Übertragung auf den Spannungs-Dehnungs-Zusammenhang liefert

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\epsilon}, \quad (3.19)$$

wobei \mathbb{C} als vierstufiger Elastizitätstensor die Materialeigenschaften beschreibt. Da $\boldsymbol{\sigma}$ und $\boldsymbol{\epsilon}$ symmetrisch sind, kann das verallgemeinerte Hookesche Gesetz unter Annahme isotropen Materialverhaltens vereinfacht werden zu

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\boldsymbol{\epsilon} + \lambda\text{tr}(\boldsymbol{\epsilon})\mathbf{I}. \quad (3.20)$$

Die 81 Koeffizienten des vierstufigen Elastizitätstensors reduzieren sich somit zu zwei skalaren Materialparametern, den sogenannten Lamé-Parametern μ und λ . Alternativ kann das Materialverhalten durch den Elastizitätsmodul bzw. E -Modul E und die Querdehnzahl ν beschrieben werden. Sie werden durch den einachsigen Zugversuch eingeführt. Für Details zum einachsigen Zugversuch sei auf Kapitel 5.2 verwiesen. Für Zug in X_1 -Richtung gilt beispielsweise

$$\sigma_{11} = E \varepsilon_{11} \quad \text{und} \quad \nu = -\frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{11}} = -\frac{\varepsilon_{33}}{\varepsilon_{11}}. \quad (3.21)$$

Komponentenweise Betrachtung von Gleichung (3.20) für den einachsigen Zugversuch und Abgleich mit Gleichung (3.21) liefert

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad \lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (3.22)$$

und somit

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{E}{(1+\nu)}\boldsymbol{\epsilon} + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}\text{tr}(\boldsymbol{\epsilon})\mathbf{I}. \quad (3.23)$$

Gleichung (3.23) koppelt die Verschiebungen über Gleichung (3.12) mit der Impulsbilanz (Gleichung (3.18)). Die erhaltene partielle Differentialgleichung

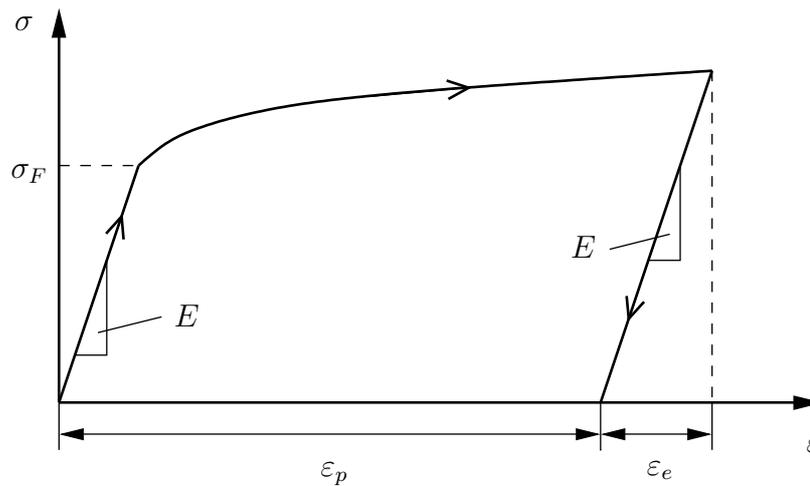


Abbildung 3.3: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für elastisch-plastisches Materialverhalten mit Belastungspfad und Entlastungspfad.

kann dann wiederum numerisch gelöst werden (siehe Kapitel 4.2) und so die Deformation eines materiellen Körpers für eine äußere Belastung bestimmt werden.

3.3.2 Plastizität

Stahl zeigt neben der reversiblen, elastischen Deformation wie viele andere Materialien auch irreversible, plastische Deformation, die sich in einer Gleichgewichtshysterese äußert. Ein typisches, idealisiertes Spannungs-Dehnungs-Diagramm für elastisch-plastische Deformation ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Das Material verhält sich dabei bis zu einer bestimmten Fließbedingung wie oben beschrieben elastisch. In Abbildung 3.3 ist die Fließbedingung durch die Fließspannung σ_F markiert. Ab der Fließbedingung verformt sich das Material mit deutlich gesenkter Steigung irreversibel. Im Falle idealer Plastizität fällt die Steigung im plastischen Bereich auf Null. Eine Steigung größer Null kennzeichnet dagegen Plastizität mit Verfestigung. Bei der Entlastung folgt die Spannungs-Dehnungs-Kurve wieder dem elastischen Verlauf. Diesem Verhalten entsprechend wird auch in der kontinuumsmechanischen Beschreibung die Dehnung in einen elastischen Anteil ϵ_e und einen plastischen Anteil ϵ_p aufgeteilt. Für kleine Dehnungen gilt die additive Aufteilung

$$\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon}_e + \boldsymbol{\epsilon}_p. \quad (3.24)$$

Weiterhin wird angenommen, dass die Spannung nach Gleichung (3.20) lediglich vom elastischen Anteil der Dehnung bestimmt wird

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \boldsymbol{\epsilon}_e + \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon}_e) \mathbf{I}. \quad (3.25)$$

Mit Gleichung (3.24) gilt

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_p) + \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_p) \mathbf{I}. \quad (3.26)$$

Der Beginn der plastischen Deformation wird durch die Fließbedingung f beschrieben, mit

$$f \begin{cases} < 0 \rightarrow \text{elastisches Verhalten,} \\ = 0 \rightarrow \text{plastisches Verhalten,} \end{cases} \quad (3.27)$$

wobei der Zustand $f > 0$ ausgeschlossen ist. Wenn die Fließbedingung erfüllt ist, $f = 0$, muss zusätzlich zwischen einer neutralen Belastung ohne Ansteigen der plastischen Deformation und einer plastisches Fließen auslösenden Belastung unterschieden werden. Anhand der Fließrate $\gamma = \gamma(\dot{\boldsymbol{\epsilon}})$ können diese zwei Zustände klassifiziert werden als

$$\gamma \begin{cases} = 0 \rightarrow \text{neutrale Belastung,} \\ > 0 \rightarrow \text{plastisches Fließen.} \end{cases} \quad (3.28)$$

Die genaue Wahl der Fließbedingung hängt vom Verhalten des betrachteten Materials bei plastischer Deformation ab. Aufgrund des oben beschriebenen Mechanismus der plastischen Deformation, kann bei Stahl von plastischer Inkompressibilität ausgegangen werden, da eine hydrostatische Belastung keine Versetzungsbewegung auslöst. Dadurch hängt die Fließbedingung lediglich vom deviatorischen Anteil der Spannung

$$\boldsymbol{\sigma}_D = \text{dev}(\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{I} \quad (3.29)$$

ab. Der Spannungsdeviator $\boldsymbol{\sigma}_D$ enthält den Anteil der Spannung, der durch eine reine Gestaltänderung ohne Volumenänderung hervorgerufen wird. Zur Beschreibung dieses Verhaltens wird für Stahl im Allgemeinen die Fließbedin-

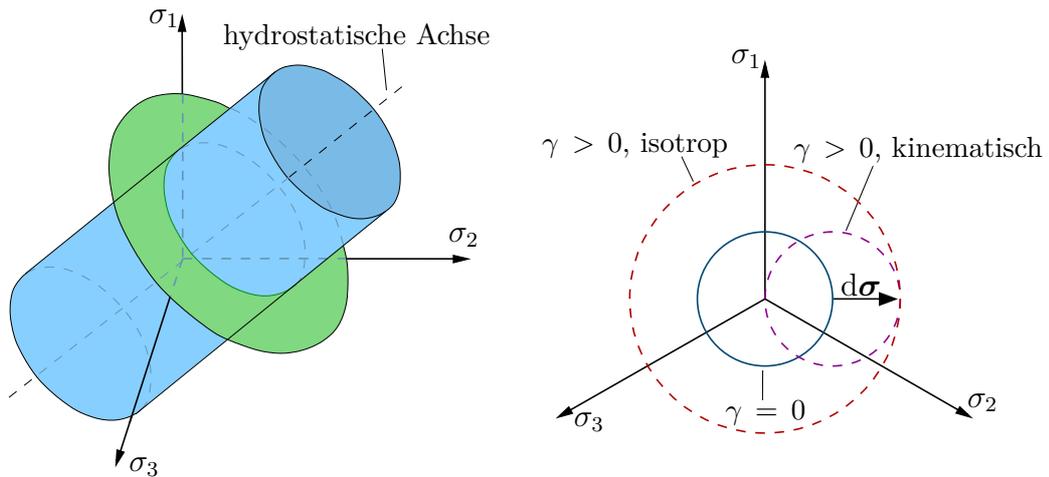


Abbildung 3.4: Fließfläche nach von Mises dargestellt mit Deviatorebene im Hauptspannungsraum (links) und dargestellt mit schematischer Verfestigung in der Deviatorebene (rechts).

gung nach von Mises gewählt [113]

$$f = \|\boldsymbol{\sigma}_D\| - \sqrt{\frac{2}{3}}(\sigma_{F0} + h(\alpha)), \quad (3.30)$$

wobei σ_{F0} den initialen Fließbeginn kennzeichnet und $h(\alpha)$ die Verfestigung beschreibt. In Abbildung 3.4 ist die Fließfläche der von Mises Fließbedingung im Hauptspannungsraum dargestellt. Die Fließfläche wird durch alle Spannungszustände mit $f = 0$ gebildet und der Hauptspannungsraum durch die drei Eigenwerte σ_1 , σ_2 und σ_3 des Spannungstensors aufgespannt. Die blau dargestellte Fließfläche bildet einen offenen Zylinder entlang der hydrostatischen Achse. Die hydrostatische Achse umfasst alle Spannungszustände, die durch eine reine Volumendehnung hervorgerufen werden, es gilt $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$. Für plastisches Fließen nach von Mises ist nur die grün dargestellte Ebene senkrecht zur hydrostatischen Achse, die Deviatorebene, relevant. Ein Beispiel einer anderen Fließbedingung ist die Fließbedingung nach Green [58], die als Ellipsoid im Hauptspannungsraum darstellbar ist. Das ermöglicht es, plastisches Fließen auch in Abhängigkeit der volumetrischen Spannung zu beschreiben, wie es beispielsweise für poröse Materialien üblich ist.

Neben der Fließbedingung, als Indikator für den Fließbeginn, ist die Fließregel für das plastische Materialverhalten entscheidend. Die Fließregel bezeichnet die Evolutionsgleichung der plastischen Dehnung bei plastischer Deformation. In

der Regel wird eine Formulierung in Abhängigkeit eines plastischen Potentials $F(\boldsymbol{\sigma})$ und der Fließrate γ gewählt

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p = \gamma \frac{\partial F(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \boldsymbol{\sigma}}. \quad (3.31)$$

Für Metalle entspricht die Fließbedingung $f(\boldsymbol{\sigma}, h)$ dem plastischen Potential $F(\boldsymbol{\sigma})$. Dieses Verhalten wird assoziiertes Fließen genannt [23, 156]. Das Ableiten der von Mises Fließbedingung nach der Spannung liefert dann

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p = \gamma \frac{\boldsymbol{\sigma}_D}{\|\boldsymbol{\sigma}_D\|} = \gamma \mathbf{N}, \quad (3.32)$$

mit der Richtung des plastischen Fließens \mathbf{N} . \mathbf{N} kann dabei als Normale bezüglich des Zylinders im Hauptspannungsraum interpretiert werden. Ebenso kann für den Verfestigungsparameter α eine Evolutionsgleichung gleichen Charakters als

$$\dot{\alpha} = \gamma \frac{\partial f}{\partial h} = \sqrt{\frac{2}{3}} \gamma \quad (3.33)$$

hergeleitet werden.

Zwei bedeutende Oberklassen des mechanischen Verhaltens des Materials nach Fließbeginn sind isotrope und kinematische Verfestigung. Abbildung 3.4 zeigt zusätzlich zur Fließfläche im Hauptspannungsraum für beide Klassen das schematische Verfestigungsverhalten. Von der ursprünglichen Fließfläche ausgehend weitet sich die Fließfläche bei isotroper Verfestigung für ein Lastinkrement $d\boldsymbol{\sigma}$ gleichmäßig auf, wobei sich ihr Ursprung nicht verschiebt. Bei kinematischer Verfestigung hingegen bleibt für das gleiche Lastinkrement der Radius der Fließfläche unverändert, jedoch verschiebt sie sich im Raum. Bei erstmaliger Belastung ist der Fließbeginn bei kinematischer Verfestigung wie bei isotroper Verfestigung richtungsunabhängig. Bei einer erneuten Belastung wird das Materialverhalten aber aufgrund der Verschiebung der Fließfläche anisotrop. Das bedeutet, dass Fließen je nach Lastrichtung bei deutlich unterschiedlichen Belastungen auftritt. Zusätzlich können auch Mischformen dieser beiden Verfestigungsklassen sowie gänzlich anisotrope Verfestigung auftreten. Der Term $h(\alpha)$ in Gleichung (3.30) beschreibt das Verfestigungsverhalten in Abhängigkeit eines skalaren Verfestigungsparameters. Der skalare Parameter α beschreibt dabei die Aufweitung der Fließfläche entsprechend der isotropen Verfestigung. Durch Erweiterung von Gleichung (3.30) um einen tensoriellen

Verfestigungsparameter \mathbf{Q} kann die Verschiebung des Ursprungs der Fließfläche im Raum entsprechend der kinematischen Verfestigung beschrieben werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden sowohl isotrope als auch kinematische Verfestigung und Mischformen der Verfestigung implementiert. Für den in der Arbeit betrachteten Lastfall mit lediglich einmaliger Belastung des Materials zeigen die Modelle jedoch keinen relevanten Unterschied, weshalb die Betrachtung aus Gründen der Einfachheit auf isotrope Verfestigung beschränkt ist. Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass kinematische Verfestigung bei der zyklischen Belastung von Stahl notwendig ist, um den Bauschinger Effekt abzubilden. Der Bauschinger Effekt beschreibt die herabgesetzte Fließgrenze bei z. B. Lastumkehr unter uniaxialer Belastung [18, 68, 156].

Neben dieser allgemeinen Unterteilung kann auch die isotrope Verfestigung unterteilt werden entsprechend des Zusammenhangs zwischen dem Ansteigen des Verfestigungsparameters und der Aufweitung der Fließfläche. Zwei häufig genutzte Zusammenhänge sind die lineare Verfestigung [156] und die exponentielle Verfestigung nach Voce [174], sowie Kombinationen der beiden [12, 90]. Für die Verfestigungsfunktion $h(\alpha)$ gilt jeweils

$$h_{\text{linear}}(\alpha) = K \alpha, \quad (3.34)$$

$$h_{\text{Voce}}(\alpha) = \sigma_{F\infty} \left(1 - e^{(-k\alpha)}\right), \quad (3.35)$$

$$h_{\text{kombi}}(\alpha) = K \alpha + \sigma_{F\infty} \left(1 - e^{(-k\alpha)}\right), \quad (3.36)$$

wobei $\sigma_{F\infty}$, K und k Materialparameter sind. Der schematische Spannungs-Dehnungs-Verlauf der drei Verfestigungsarten ist in Abbildung 3.5 dargestellt. Lineare Verfestigung ist durch einen linearen Anstieg der Spannung nach Fließbeginn gekennzeichnet. Voce-Verfestigung hingegen beschreibt einen zu Beginn sehr starken Anstieg der Spannung mit Sättigungswert für größere Dehnungen. In Kapitel 8.2.2 wird der Unterschied zwischen linearer Verfestigung und einer Kombination aus linearer und exponentieller Verfestigung dargelegt. Beide Verfestigungsarten wurden implementiert, da die kombinierte Verfestigung jedoch keine erhöhte Genauigkeit bei der Nachbildung der Realität in der Simulation bringt, wurden die Simulationen mit linearer Verfestigung durchgeführt.

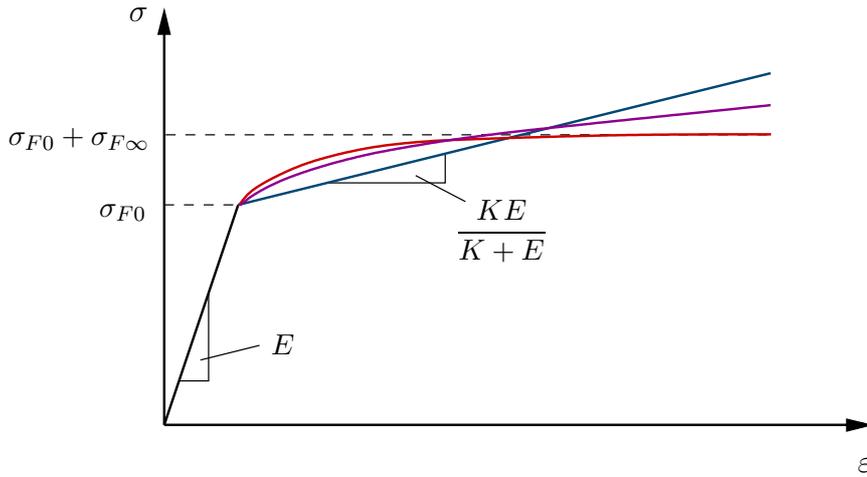


Abbildung 3.5: Schematisches Spannungs-Dehnungs-Diagramm für lineare (blau), exponentielle (rot) und kombinierte (magenta) Verfestigung.

Die Auswertung der Fließbedingung bzw. der Fließregel erfolgt mit Hilfe der Kuhn-Tucker-Bedingungen [23, 156]

$$\gamma \geq 0, \quad f \leq 0, \quad \gamma f = 0. \quad (3.37)$$

Der erste und zweite Teil von Gleichung (3.37) entspricht Gleichung (3.27) und Gleichung (3.28). Der dritte Teil von Gleichung (3.37) folgt daraus, dass während elastischen Verhaltens $\gamma = 0$ und während plastischen Verhaltens $f = 0$ gilt. Die Zeitableitung dieses Zusammenhangs

$$(\gamma f) \dot{} = \dot{\gamma} f + \gamma \dot{f} \quad (3.38)$$

ergibt im Falle plastischen Fließens die Konsistenzbedingung

$$\dot{f} = 0. \quad (3.39)$$

Durch Einsetzen von Gleichung (3.20), Gleichung (3.32) und Gleichung (3.33) in Gleichung (3.39) kann die Fließrate γ berechnet werden. Für lineare Verfestigung ergibt sich beispielhaft

$$\gamma = \frac{2\mu}{2\mu + \frac{2}{3}K} \mathbf{N} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (3.40)$$

Basierend auf dieser theoretischen Beschreibung wird in Kapitel 4.2 die numerische Implementierung von Plastizität mit Hilfe des Radial-Return-Mapping-

Verfahrens [156] beschrieben. Zusammen mit der Implementierung des elastischen Materialverhaltens in Kapitel 4.2 bildet dies die Grundlage zur Beschreibung des realen elastisch-plastischen Materialverhaltens des betrachteten Stahls (Kapitel 8).

4

Numerische Umsetzung

Im folgenden Kapitel werden die in dieser Arbeit genutzten numerischen Verfahren erläutert. Dabei werden sowohl in Kapitel 4.1 und Kapitel 4.2 die numerischen Grundlagen und ihre Implementierung beschrieben, als auch in Kapitel 4.4 die entwickelte Methode zur Datenreduktion erläutert. Zur Umsetzung der Simulationen mittels Finite Elemente Methode (FEM) wurde die quelloffene C++ Programmibliothek *deal.II* [5, 14] genutzt. Genereller Aufbau und Nutzung der Bibliothek sind in Kapitel 4.3 zusammengefasst.

4.1 Grundlagen der FEM

In Kapitel 3.2 wurde die lokale Form der Impulsbilanz (Gleichung (3.18)) hergeleitet

$$\operatorname{Div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})) = 0. \quad (4.1)$$

Obwohl die Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ nach (3.26) eine Funktion der Dehnung ist, wird die Spannung hier und im Folgenden als Funktion der Verschiebung \mathbf{u} betrachtet, da die Dehnung nach Gleichung (3.12) durch Grad \mathbf{u} bestimmt ist. Bei Gleichung (4.1) handelt es sich um eine partielle Differentialgleichung (PDE, engl.

partial differential equation) in ihrer starken Form. Der Begriff *stark* bedeutet, dass die PDE für \mathbf{u} an jedem Punkt eines materiellen Körpers Ω erfüllt sein muss. Im Gegensatz dazu kann auch die schwache Form einer PDE formuliert werden. Hierdurch kann die Bestimmung der analytischen Lösung der PDE vereinfacht werden auf die Bestimmung einer Näherungslösung, die die PDE im integralen Sinne erfüllt. Die schwache Form von Gleichung (4.1) ergibt sich durch Multiplikation mit einer Testfunktion $\delta\mathbf{u}$ für die Feldgröße \mathbf{u} und Integration über den Körper Ω mit dem Rand Γ

$$\int_{\Omega} \delta\mathbf{u} \cdot \text{Div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})) \, dV = 0. \quad (4.2)$$

Mit Hilfe der Greenschen Identität [74] für einen Tensor \mathbf{A} , einen Vektor \mathbf{b} und den Normalenvektor \mathbf{n}

$$\int_{\Omega} (\text{Div}(\mathbf{A}) \cdot \mathbf{b} + \mathbf{A} : \text{Grad}(\mathbf{b})) \, dV = \int_{\Gamma} ((\mathbf{A} \cdot \mathbf{b}) \cdot \mathbf{n}) \, dA \quad (4.3)$$

und des Chauchy-Theorems lässt sich Gleichung (4.2) umformen zur schwachen Form der Impulsbilanz

$$\int_{\Omega} (\text{Grad}(\delta\mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})) \, dV - \int_{\Gamma} (\mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u}) \, dA = 0. \quad (4.4)$$

Wenn Gleichung (4.4) für beliebige $\delta\mathbf{u}$ erfüllt ist, nennt man \mathbf{u} schwache Lösung der PDE. Im Kontext der Mechanik kann $\delta\mathbf{u}$ als virtuelle Verschiebung interpretiert werden. Die Testfunktion $\delta\mathbf{u}$ muss mindestens die gleichen Anforderungen bezüglich Differenzierbarkeit erfüllen wie die Feldgröße \mathbf{u} . Ebenso muss die Testfunktion am Dirichlet-Rand Γ_D von Ω den Wert Null annehmen. Der Begriff *Dirichlet-Rand* bezeichnet dabei den Teil des Randes Γ des Gebiets Ω , an dem der Wert der Feldgröße \mathbf{u} als Randbedingung vorgegeben ist. In diesem Fall verschwindet das Integral über Γ_D in Gleichung (4.4). Demgegenüber steht der Neumann-Rand Γ_N , an dem die Normalenableitung der Feldgröße vorgegeben ist. In Gleichung (4.4) entspricht das der Vorgabe des Oberflächenspannungsvektors \mathbf{t} . Zur Markierung eines freien Rands wird \mathbf{t} als Null gewählt. Für den Rand Γ gilt weiterhin

$$\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N, \quad \Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset. \quad (4.5)$$

Eines der am weitesten verbreiteten numerischen Verfahren zur Bestimmung der Näherungslösung solcher PDEs ist die FEM [20, 21, 186, 187], die auch in dieser Arbeit genutzt wird. Hierzu wird das betrachtete Gebiet bei der Vernetzung in einzelne Elemente zerteilt. In der Regel werden im Dreidimensionalen Tetraeder oder Hexaeder genutzt. Die einzelnen Volumenelemente werden wiederum durch die Lage von Knotenpunkten definiert, an denen die Näherungslösung bestimmt wird. Die Werte der Feldgröße an den Knoten, hier die Verschiebung in die drei Raumrichtungen, werden in diesem Kontext auch als Freiheitsgrade bezeichnet. Die Lage der Knoten und die Interpolation der Lösung zwischen den Knoten werden durch die unten beschriebenen Ansatzfunktionen bestimmt. Das Integral über Ω in Gleichung (4.4) wird entsprechend der Vernetzung in die Summe der Integrale über alle Elemente $\omega \subset \Omega$ mit Rand γ zerlegt

$$\sum_{\omega \subset \Omega} \left(\int_{\omega} (\text{Grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})) \, dV - \int_{\gamma} (\mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u}) \, dA \right) = 0. \quad (4.6)$$

Die Anteile der Integrale über γ im Inneren des Körpers heben sich dabei gegenseitig auf, sodass in Summe nur das Integral über den Rand Γ verbleibt. Innerhalb eines Elements werden die Integrale dann durch numerische Integrationsverfahren als gewichtete Summe dargestellt

$$\sum_q \left(\text{Grad}(\delta \mathbf{u}(\mathbf{X}_q^\omega)) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}(\mathbf{X}_q^\omega)) \right) w_q^\omega - \sum_p \left(\mathbf{t}(\mathbf{X}_p^\gamma) \cdot \delta \mathbf{u}(\mathbf{X}_p^\gamma) \right) w_p^\gamma = 0, \quad (4.7)$$

wobei \mathbf{X}_q^ω den q -ten Integrationspunkt¹ im Element ω beschreibt und w_q^ω den entsprechenden Wichtungsfaktor. Analog beschreibt \mathbf{X}_p^γ den p -ten Integrationspunkt auf dem Rand γ des Elements ω und w_p^γ den zugehörigen Wichtungsfaktor. Zusätzlich zur Annäherung der Integrale durch numerische Integration wird die Feldgröße \mathbf{u} an der Stelle \mathbf{X} als Linearkombination von Ansatzfunktionen bzw. Formfunktionen φ_i mit Wichtungsfaktoren \mathbf{u}_i angenähert

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}) \approx \mathbf{u}_h(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{u}_i \varphi_i(\mathbf{X}). \quad (4.8)$$

¹ Stützstelle des Integrationsverfahrens, nach der häufig genutzten Gauß-Quadratur auch Gaußpunkt genannt.

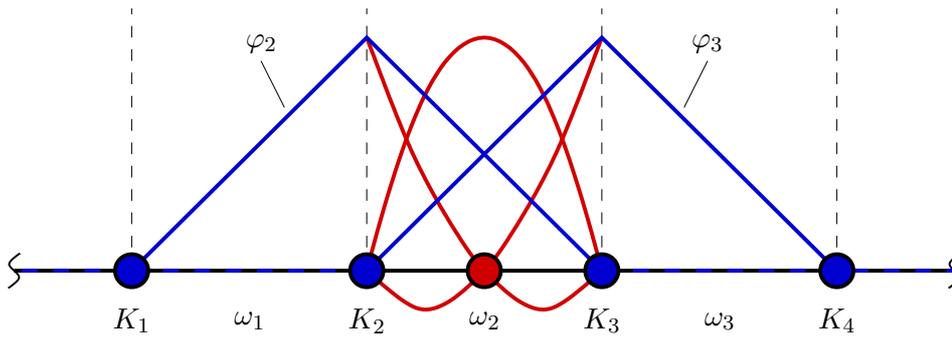


Abbildung 4.1: Ausschnitt eines eindimensionalen FE-Netzes mit den Elementen ω_1 bis ω_3 . Dargestellt sind in blau die Knoten K_1 bis K_4 und die für Element ω_2 relevanten linearen Ansatzfunktionen φ_2 und φ_3 . Zugleich sind im Bereich von ω_2 in rot die für ω_2 relevanten quadratischen Ansatzfunktionen mit zusätzlichem Knoten dargestellt.

Ebenso wird die Testfunktion nach Galerkin als Linearkombination der selben Ansatzfunktionen φ_j gewählt. Dadurch lässt sich Gleichung (4.6) umformen zu

$$\sum_{i,j,q,\omega} \left(\text{Grad} \left(\delta \mathbf{u}_j \varphi_j(\mathbf{X}_q^\omega) \right) : \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{u}_i \varphi_i(\mathbf{X}_q^\omega) \right) \right) w_q^\omega = 0. \quad (4.9)$$

Zur besseren Übersichtlichkeit wurde hier auf die Betrachtung des Oberflächenterms verzichtet, seine Berechnung erfolgt jedoch analog. Die Ansatzfunktionen sind dabei nur in einem kleinen Raumbereich ungleich Null definiert. Für die Ansatzfunktion φ_i gilt an den Knoten i $\varphi_i = 1$. An allen anderen Knoten und in allen Elementen, die nicht an Knoten i grenzen, gilt $\varphi_i = 0$. Innerhalb der Elemente, die an Knoten i grenzen, wird der Wert von φ_i entsprechend der gewählten Ordnung der Ansatzfunktion berechnet. Anschaulich ist dies für eindimensionale Elemente in Abbildung 4.1 dargestellt. Im Falle linearer Ansatzfunktionen befinden sich lediglich Knoten in den Elementecken, im Falle höherer Ordnung kommen zusätzliche Ansatzfunktionen und damit zusätzliche Knoten hinzu. Die Koeffizienten \mathbf{u}_i in Gleichung (4.8) entsprechen dem Wert der Feldgröße genau am Knoten i .

Hierauf basierend können Gleichung (4.9) in ein Gleichungssystem für die Koeffizienten \mathbf{u}_i umgeformt und die Näherungslösung \mathbf{u}_h für die Verschiebung mittels numerischer Verfahren berechnet werden. Im folgenden Kapitel wird dies für die gewählte Materialtheorie genauer erläutert.

4.2 Umsetzung der Materialtheorie

Basierend auf der oben hergeleiteten schwachen Form der Impulsbilanz kann nun die in Kapitel 3.3 erläuterte Materialtheorie implementiert werden. Dabei wird zuerst das Verfahren zur Lösung der elastischen Spannungs-Dehnungs-Beziehung beschrieben. Danach wird eine Routine zur Bestimmung der plastischen Dehnung erläutert. Wie bereits erwähnt, wird hier lediglich die Implementierung der überwiegend genutzten Theorie für kleine Dehnungen mit linearer, isotroper Verfestigung genauer beschrieben. Für die Implementierung für finite Deformationen sei auf die Fachliteratur verwiesen, insbesondere auf die Arbeit von Bonet und Wood [23] und von Simo und Hughes [156].

In dieser Arbeit wird eine lineare Spannungs-Dehnungs-Beziehung entsprechend dem Hookeschen Gesetz,

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_p) + \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_p) \mathbf{I}, \quad (4.10)$$

genutzt. Da das betrachtete Material ebenfalls plastisches Verhalten zeigt, ist das Materialverhalten insgesamt als nichtlinear zu betrachten. Daher wird die Impulsbilanz nicht, wie im Falle rein linearer Elastizität, explizit mit dieser Gleichung implementiert. Stattdessen wird die Impulsbilanz mit Hilfe eines Newton-Verfahrens bzw. Newton-Raphson-Verfahrens umgesetzt. Allgemein dient das Newton-Verfahren zur Bestimmung der Nullstelle einer Funktion durch Linearisierung. In Abbildung 4.2 ist es für den Fall einer beliebigen skalaren Funktion f mit skalarwertigem Argument x dargestellt. Ausgehend von einem Startwert x_0 wird die Tangente $t_1(x)$ an $f(x)$ im Punkt $f(x_0)$ gebildet,

$$t_1(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \quad \text{mit} \quad f'(x) = \frac{\partial f(x)}{\partial x}, \quad (4.11)$$

und deren Nullstelle x_1 bestimmt,

$$t_1(x_1) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}. \quad (4.12)$$

Diese Prozedur wird nun mit x_1 als Startwert wiederholt, sodass x_2 als Nullstelle der neuen Tangente folgt. Mehrfache Anwendung dieser Rechnung ergibt

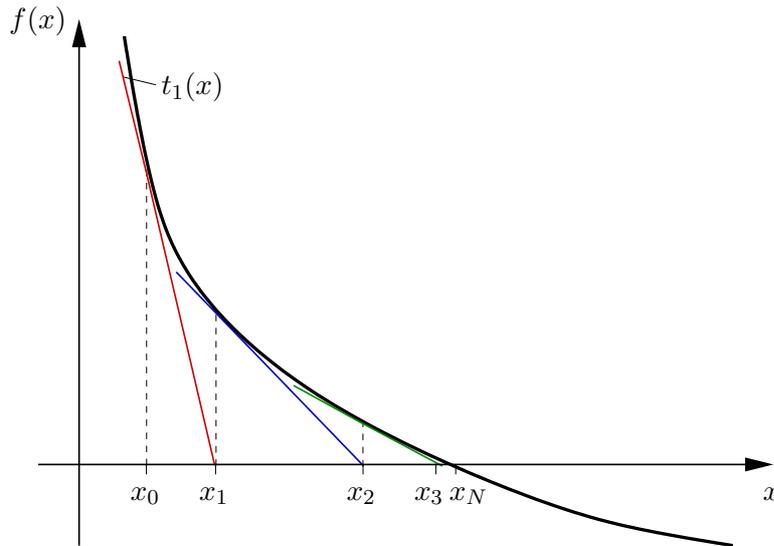


Abbildung 4.2: Veranschaulichung des Newton-Verfahrens für eine Funktion $f(x)$ (in schwarz) mit zugehörigen Tangenten (in rot, blau und grün).

die Iterationsvorschrift

$$x^{n+1} = x^n - \frac{f(x^n)}{f'(x^n)}. \quad (4.13)$$

Werden hinreichend viele Iterationen durchgeführt, nähert sich x^{n+1} beliebig nah der Nullstelle x_N von $f(x)$ an². Grundgedanke des Newton-Verfahrens ist demnach die Annahme, dass eine Tangente an eine Funktion ihre Nullstelle in der Nähe der Nullstelle der Funktion hat. Dieses Prinzip kann auch auf die schwache Form der Impulsbilanz erweitert werden. Dazu wird Gleichung (4.9) als Funktion mit vektorwertigem Argument betrachtet. Für jeden einzelnen Freiheitsgrad j gilt somit, zur besseren Übersichtlichkeit in verkürzter integraler Schreibweise,

$$\mathbf{f}^j(\mathbf{u}_h) = \int_{\Omega} (\text{Grad}(\delta \mathbf{u}_h^j(\mathbf{X})) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h(\mathbf{X}))) \, dV = 0. \quad (4.14)$$

Analog zu Gleichung (4.13) führt dies zu

$$\mathbf{u}_h^{n+1} = \mathbf{u}_h^n - \mathbf{f}^j(\mathbf{u}_h^n) \left(\frac{\partial \mathbf{f}^j(\mathbf{u}_h^n)}{\partial \mathbf{u}_h^n} \right)^{-1}. \quad (4.15)$$

² Es gibt auch Fälle, in denen das Newton-Verfahren nicht konvergiert. Sie sind jedoch im betrachteten Kontext nicht relevant.

Dieser Zusammenhang kann ebenso aus einer Taylor-Reihenentwicklung von \mathbf{f}^j und Abbruch nach dem linearen Glied bestimmt werden [56]. Werden nun die einzelnen Freiheitsgrade zum Lösungsvektor $\bar{\mathbf{u}}$ zusammengefasst und die Gleichung umgestellt, ergibt sich

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\bar{\mathbf{u}}^n)}{\partial \bar{\mathbf{u}}^n} \cdot (\bar{\mathbf{u}}^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}^n) = -\mathbf{f}(\bar{\mathbf{u}}^n). \quad (4.16)$$

Hierbei ist $\Delta \bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}^n$ das Lösungsinkrement des Newton-Verfahrens und

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \mathbf{f}(\bar{\mathbf{u}}^n)}{\partial \bar{\mathbf{u}}^n} \quad \text{mit} \quad K_{ij} = \frac{\partial f_i(\bar{\mathbf{u}}^n)}{\partial \bar{u}_j^n} \quad (4.17)$$

die tangentielle Systemsteifigkeitsmatrix. Gleichung (4.16) lässt sich damit vereinfachen zu

$$\mathbf{K} \cdot \Delta \bar{\mathbf{u}} = -\mathbf{f}(\bar{\mathbf{u}})^n. \quad (4.18)$$

Dieses lineare Gleichungssystem ist numerisch lösbar und ermöglicht so die Bestimmung des Lösungsvektors mit der Iterationsvorschrift $\bar{\mathbf{u}}^{n+1} = \bar{\mathbf{u}}^n + \Delta \bar{\mathbf{u}}$. Bei Konvergenz des Newton-Verfahrens geht der Betrag des Lösungsupdates $\Delta \bar{\mathbf{u}}$ nach hinreichend vielen Iterationen gegen Null.

Zur Lösung des Gleichungssystems muss \mathbf{K} noch bestimmt werden. Im Rahmen einer konsistenten Linearisierung [64, 156] kann dies nach Einsetzen der Konstitutivgleichung in Gleichung (4.9) durch analytische Bestimmung der Ableitung geschehen. Damit einher geht die Ableitung von $\boldsymbol{\sigma}$ nach $\boldsymbol{\epsilon}$ bzw. \mathbf{u} . Da aber im Falle der Plastizität $\boldsymbol{\sigma}$ nicht nur von $\boldsymbol{\epsilon}$, sondern auch von $\boldsymbol{\epsilon}_p$ abhängt, muss damit auch $\boldsymbol{\epsilon}_p$ nach $\boldsymbol{\epsilon}$ abgeleitet werden. Durch die im folgenden Teil dieses Kapitels beschriebene Berechnung der Plastizität mittels Prädiktor-Korrektor-Verfahren, gehen komplexe analytische Ableitungsberechnungen mit dieser Linearisierung einher [64]. Um jedoch ein hohes Maß an Variabilität mit Blick auf alternative Konstitutivbeziehungen für zukünftige Simulationen zu ermöglichen, wird an Stelle der analytischen Ableitung die Ableitung automatisiert als numerische Tangente bestimmt [56, 180]. Dies ist für die Komponenten von \mathbf{K} durch einen Differenzenquotienten implementiert

$$K_{ij} = \frac{\partial f_i(\bar{\mathbf{u}}^n)}{\partial \bar{u}_j^n} = \frac{f_i(\bar{\mathbf{u}}^n + \epsilon \mathbf{e}_j) - f_i(\bar{\mathbf{u}}^n)}{\epsilon}, \quad (4.19)$$

wobei $\epsilon \mathbf{e}_j$, mit dem Einheitsvektors in j -Richtung \mathbf{e}_j , eine Störung des j -ten Freiheitsgrads darstellt. Für die Störung ϵ sollte ein möglichst kleiner Wert gewählt werden, um die Tangente hinreichend gut zu approximieren. Ein zu kleiner Wert nah an der Toleranz des genutzten Datentyps verursacht aber aufgrund ungenauer Rundung fehlerhafte Ergebnisse. Daher gilt hier

$$\epsilon = \sqrt{\text{eps}} (1 + \|\bar{u}_j\|). \quad (4.20)$$

Dabei ist eps die Maschinengenauigkeit des genutzten Gleitkommazahlformats. Durch diese Definition ist ϵ immer hinreichend klein für eine genaue Näherung der Tangente, gleichzeitig aber auch groß genug, um stets darstellbar zu sein [127].

Durch die Zusammenhänge in den Gleichungen (4.9), (4.14) und (4.19) ist Gleichung (4.18) vollständig definiert. Das entstandene lineare Gleichungssystem kann nun, eingebettet in den in Kapitel 4.3 beschriebenen Ablauf, numerisch gelöst werden, und somit kann die Verschiebung im betrachteten Lösungsgebiet bestimmt werden.

In Kapitel 3.3.2 wurden die theoretischen Grundlagen der Plastizität dargelegt. Im Folgenden soll die numerische Umsetzung dieser Grundlagen mittels Radial Return Method bzw. Radial Return Mapping (RRM) [19, 64, 155, 156, 179] beschrieben werden. Allgemein gehört dieses Verfahren zu den Prädiktor-Korrektor-Verfahren. Ausgangspunkt ist, dass bei der inkrementellen Berechnung der Spannungs-Dehnungs-Beziehung jeder Lastschritt entweder rein elastisch oder elastisch-plastisch verlaufen kann. Zur Bestimmung, welcher Fall eintritt, wird zuerst ein Prädiktor-Schritt ausgeführt. Hierbei wird ein rein elastisches Verhalten zur Berechnung der Spannungs-Dehnungs-Beziehung angenommen. Falls der entstandene Spannungszustand innerhalb der Fließfläche liegt, liegt zutreffend ein rein elastischer Lastschritt vor, und die Berechnung kann zum nächsten Schritt übergehen. Falls der Spannungszustand jedoch physikalisch unzulässig außerhalb der Fließfläche liegt, muss der Korrektor-Schritt durchgeführt werden. Hierbei wird die beim aktuellen Lastschritt entstehende plastische Dehnung berechnet, sodass der neu berechnete Spannungszustand wieder innerhalb bzw. auf der Fließfläche liegt.

Das Prinzip des in der Arbeit verwendeten RRM ist demnach ein iteratives Zweischrittverfahren, wie in Abbildung 4.3 dargestellt. Die in Kapitel 3.3.2

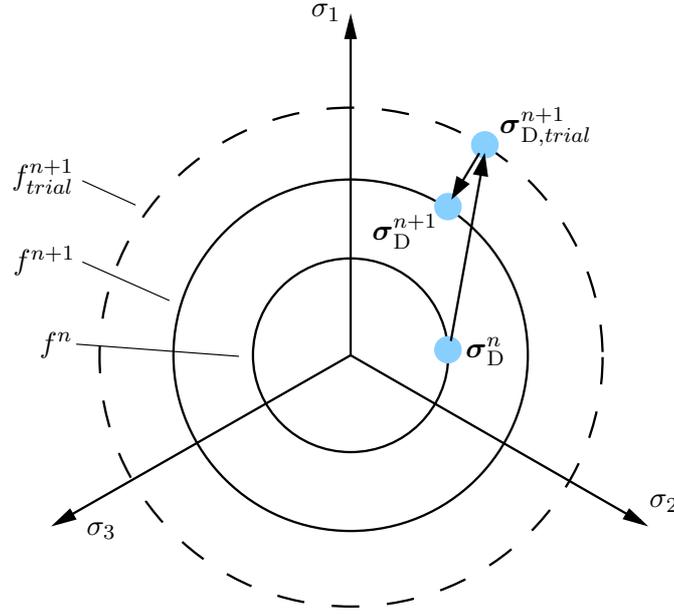


Abbildung 4.3: Darstellung des RRM-Prozesses in der Deviatorebene für die Lastschritte $(\bullet)^n$ und $(\bullet)^{n+1}$ mit dem Testzustand $(\bullet)_{trial}^{n+1}$ als Zwischenschritt.

eingeführten Größen werden dazu in Abhängigkeit des aktuellen Lastschritt $n + 1$ formuliert. Somit ergeben die Gleichungen (3.30), (3.32) und (3.33) mit dem Fließinkrement $\Delta\gamma$

$$f^{n+1} = \|\sigma_D^{n+1}\| - \sqrt{\frac{2}{3}}(\sigma_{F0} + K \alpha_{n+1}), \quad (4.21)$$

$$\epsilon_p^{n+1} = \epsilon_p^n + \Delta\gamma \mathbf{N}^{n+1}, \quad (4.22)$$

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n + \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta\gamma. \quad (4.23)$$

Im ersten Schritt, dem Prädiktor-Schritt, wird der Trial State bzw. Testzustand berechnet. Hier werden alle deformationsrelevanten Größen des aktuellen Lastschritts ausgehend vom vorherigen Lastschritt n in einem imaginären, rein elastischen Lastschritt berechnet, die plastische Deformation ändert sich nicht. Das weitere Vorgehen hängt vom aktuellen Wert der Fließbedingung im Testzustand f_{trial}^{n+1} ab. Für $f_{trial}^{n+1} \leq 0$ tritt kein plastisches Fließen auf. Die Größen des Testzustands sind somit gleich der Größen des neuen Lastschritts. Es gilt

$$f_{trial}^{n+1} = f^{n+1}; \quad \alpha_{n+1} = \alpha_n; \quad \Delta\gamma = 0; \quad \epsilon_p^{n+1} = \epsilon_p^n; \quad \sigma^{n+1} = \sigma_{trial}^{n+1}. \quad (4.24)$$

Für den Fall $f_{trial}^{n+1} > 0$ hingegen muss plastisches Fließen auftreten, da dieser Zustand physikalisch nicht zulässig wäre. Der Testzustand außerhalb der Fließfläche wird also im Korrektor-Schritt auf das Niveau $f = 0$ zurückgezogen, wobei zwei Effekte auftreten. Zum einen wächst die plastische Dehnung bei konstanter Gesamtdehnung, wodurch die Spannung sinkt. Zum anderen steigt gleichzeitig die Fließgrenze durch Verfestigung während des plastischen Fließens an. Beide Effekte führen zusammen zu einem physikalisch zulässigen Zustand $f^{n+1} \leq 0$. Hierzu muss das Fließinkrement $\Delta\gamma$ berechnet werden. Die Betrachtung des Spannungsdeviators liefert

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_D^{n+1} &= \text{dev} \left(2\mu \left(\boldsymbol{\epsilon}^{n+1} - \boldsymbol{\epsilon}_p^{n+1} \right) + \lambda \text{tr} \left(\boldsymbol{\epsilon}^{n+1} - \boldsymbol{\epsilon}_p^{n+1} \right) \mathbf{I} \right) \\ &= 2\mu \left(\boldsymbol{\epsilon}_D^{n+1} - \boldsymbol{\epsilon}_p^{n+1} \right) \\ &= 2\mu \left(\boldsymbol{\epsilon}_D^{n+1} - \boldsymbol{\epsilon}_p^n - \Delta\gamma \mathbf{N}^{n+1} \right) \\ &= \boldsymbol{\sigma}_{D,trial}^{n+1} - 2\mu \Delta\gamma \mathbf{N}^{n+1},\end{aligned}\tag{4.25}$$

wobei die Fließrichtung \mathbf{N}^{n+1} mit der Fließrichtung des Testzustands übereinstimmt. Dieser Zusammenhang liefert dann zusammen mit Gleichung (4.22) durch Einsetzen in Gleichung (4.21)

$$\begin{aligned}f^{n+1} &= \|\boldsymbol{\sigma}_{D,trial}^{n+1} - 2\mu \Delta\gamma \mathbf{N}^{n+1}\| - \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\sigma_{F0} + K \left(\alpha_n + \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta\gamma \right) \right), \\ &= f_{trial}^{n+1} - 2\mu \Delta\gamma - \frac{2}{3} K \Delta\gamma.\end{aligned}\tag{4.26}$$

Mit der Forderung $f^{n+1} = 0$ für plastische Deformation ergibt dies für das plastische Inkrement

$$\Delta\gamma = \frac{f_{trial}^{n+1}}{2\mu + \frac{2}{3}K}.\tag{4.27}$$

Hiermit kann die plastische Dehnung, und somit auch die Spannung, aus den bekannten Größen des letzten Lastschritts berechnet werden.

Neben der direkten Formulierung aus Gleichung (4.27) wurde in der Arbeit ebenfalls eine Berechnungsmethode für $\Delta\gamma$ mittels Newton-Verfahrens implementiert. Das ermöglicht die einfache Implementierung auch nichtlinearer Verfestigung, was neben der Implementierung der numerischen Tangente im letzten Unterkapitel ein weiterer Punkt zur Schaffung großer Variabilität des Modells ist. Dieses lokale Newton-Verfahren kann auch zur Berechnung der plas-

tischen Deformation im Falle linearer Verfestigung genutzt werden, da das Newton-Verfahren den linearen Zusammenhang zwischen f und $\Delta\gamma$ in einer Iteration löst und somit nicht relevant langsamer als das direkte Verfahren ist. Die Herleitung entspricht der von Gleichung (4.27), jedoch wird statt der linearen Verfestigung $K\alpha$ eine beliebige Verfestigung $h(\alpha)$ angenommen. Es gilt analog zu Gleichung (4.26)

$$\begin{aligned} f^{n+1} &= \|\boldsymbol{\sigma}_{D,trial}^{n+1} - 2\mu \Delta\gamma \mathbf{N}^{n+1}\| - \sqrt{\frac{2}{3}} (\sigma_{F0} + h(\alpha_{n+1})), \\ &= \|\boldsymbol{\sigma}_{D,trial}^{n+1}\| - 2\mu \Delta\gamma - \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\sigma_{F0} + h \left(\alpha_n + \sqrt{\frac{2}{3}} K \Delta\gamma \right) \right). \end{aligned} \quad (4.28)$$

Die Gleichung kann wiederum durch die Forderung $f^{n+1} = 0$ gelöst werden. Aufgrund der nichtlinearen Verfestigung erfolgt dies jedoch unter Anwendung eines Newton Verfahrens iterativ als

$$\Delta\gamma_{i+1} = \Delta\gamma_i \frac{f^{n+1}(\Delta\gamma_i)}{\frac{\partial f^{n+1}(\Delta\gamma_i)}{\partial \Delta\gamma_i}}. \quad (4.29)$$

Die Ableitung der Fließbedingung nach $\Delta\gamma$ wird dabei mit Hilfe eines Differenzenquotienten berechnet

$$\frac{\partial f^{n+1}(\Delta\gamma_i)}{\partial \Delta\gamma_i} = \frac{f^{n+1}(\Delta\gamma_i + \epsilon) - f^{n+1}(\Delta\gamma_i)}{\epsilon}, \quad (4.30)$$

was einen Sonderfall der vorher beschriebenen numerischen Tangente für eine skalare Funktion mit skalarem Argument darstellt. Für die Störung ϵ gilt analog zu Gleichung (4.20) $\epsilon = \sqrt{\epsilon p s} (1 + \Delta\gamma_i)$. Mit Hilfe dieser Tangente kann dann Gleichung (4.29) iterativ gelöst werden und somit $\Delta\gamma$ für Gleichung (4.28) bestimmt werden.

Mit der Implementierung der Impulsbilanz durch ein Newton-Verfahren mit numerischer Tangente und Behandlung der Plastizität durch Radial Return Method und lokales Newton-Verfahren ist an dieser Stelle die Grundlage zur Berechnung der Spannungs-Dehnungs-Beziehung gelegt. Im folgenden Kapitel wird das allgemeine Rahmenwerk, in dem die numerischen Verfahren im Gesamtkontext der Simulation umgesetzt sind, erläutert.

4.3 Allgemeiner Programmablauf

Zur Umsetzung der beschriebenen Materialtheorie im Rahmen der FEM wurde auf *deal.II* zurückgegriffen [5, 14]. *deal.II* ist eine C++-Programmbibliothek, die konsequent nach den Prinzipien der objektorientierten Programmierung (OOP) umgesetzt ist. Das bedeutet insbesondere, dass das betrachtete Problem, also die Spannungs-Dehnungs-Beziehung, als Klasse umgesetzt wird, wobei einzelne Teilaspekte wiederum als eigene Klassen implementiert sind. Innerhalb der Klassen sind für alle relevanten Aufgaben einzelne Funktionen definiert, wodurch das Gesamtprogramm sehr modular und übersichtlich aufgebaut ist. In diesem Kontext kann für viele grundlegende Aufgaben, wie z. B. die Implementierung der Datenstruktur aus Netz und Freiheitsgraden oder der Ansatzfunktionen, auf durch *deal.II* vorgegebene Klassen und Strukturen zurückgegriffen werden. Zu der Struktur passend werden auch die für die Arbeit spezifischen Aspekte der Simulation, beispielsweise die Konstitutivgleichung, die Datenreduktion oder die Behandlung der Plastizität, im Rahmen der OOP strukturiert implementiert. Beispielsweise ist unter anderem die Plastizität als eigene Klasse implementiert, mit einzelnen Funktionen zur Berechnung der relevanten Größen wie Fließbedingung im Testzustand oder der numerischen Ableitung der Fließbedingung nach dem Fließinkrement. Ein Überblick über den Aufbau und die entscheidenden Funktionen des in dieser Arbeit entstandenen Simulationsprogramms, genannt *LPMPP*³, ist in Abbildung 4.4 gegeben. Grundfunktion des Programms ist, wie bei C++ üblich, die `main()`-Funktion. In ihr wird ein Objekt der Problemklasse definiert und dessen `run()`-Funktion aufgerufen. Zusätzlich werden zur Steuerung des Programms relevante Parameter, z. B. die zu nutzenden Materialparameter oder Parameter zur Steuerung der Netzfeinheit, eingelesen sowie die Objekte der Unterklassen des Programms angelegt. Der eigentliche Ablauf des Programms findet in der `run()`-Funktion statt. Hier wird zu Beginn das Simulationsmodell erstellt. Die relevanten Funktionen sind

- `make_grid()`: Erstellung und Vernetzung der betrachteten Geometrie sowie Markierung der Ränder, an denen im Folgenden Randbedingungen aufgebracht werden sollen.

³ LTM parallel Multiphysics Program, teilweise basierend auf den Vorarbeiten von Goldschmidt [56].

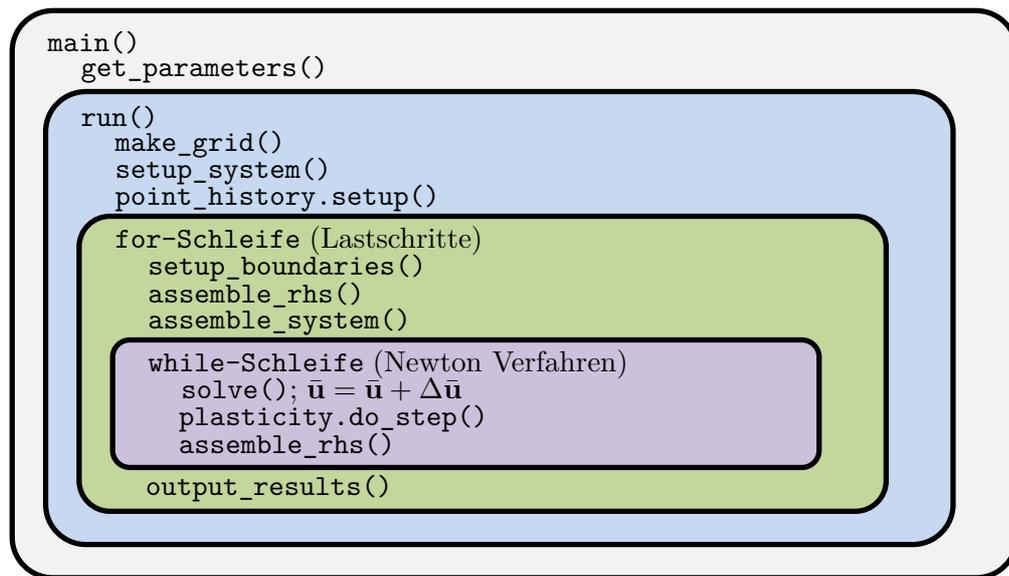


Abbildung 4.4: Vereinfachter Aufbau der Implementierung von *LPMPP* in *deal.II*.

- `setup_system()`: Bestimmung der Anzahl an Freiheitsgraden für das definierte Netz sowie Anlegen der benötigten Vektoren und Matrizen in der entsprechenden Größe, insbesondere Systemsteifigkeitsmatrix, Lösungsvektor und rechte Seite.
- `point_history.setup()`: Einrichtung eines Elements der Unterklasse `point_history` und Import der Information zum Aufbau der Phasenstruktur. Die Point History ist eine Struktur zur Speicherung von Daten, v. a. der Materialinformation und der Fließparameter, am Integrationspunkt. Die in Kapitel 4.4 beschriebenen Verfahren der Datenreduktion sind als Funktionen der Point History implementiert.

Nachdem damit das Modell erstellt ist, beginnt die Belastung der Geometrie in einer `for`-Schleife mit Lösung der Systemgleichung mit Hilfe eines Newton-Verfahrens in jedem Lastschritt in einer `while`-Schleife. Als Funktionen besonders hervorzuheben sind

- `setup_boundaries()`: Aufbringen der Randbedingungen auf die vorher markierten Randflächen des Netzes. Zur Simulation des uniaxialen Zugversuchs werden klassisch die entsprechenden Randbedingungen genutzt, d. h. drei Ränder der Geometrie werden in ihrer Bewegung in jeweils einer Raumrichtung gesperrt und die gewünschte Verschiebung am vierten Rand vorgegeben.

- `assemble_rhs()`: Assemblierung der rechten Seite. Dies entspricht dem Berechnen der Beiträge der einzelnen Elemente des Netzes zu $\mathbf{f}(\bar{\mathbf{u}})$ in Gleichung (4.18) in einer gestaffelten Schleife über alle Elemente, alle Verschiebungsfreiheitsgrade pro Element und alle Integrationspunkte pro Element sowie dem Einordnen der Elementbeiträge in den globalen Vektor.
- `assemble_system()`: Assemblierung der Systemsteifigkeitsmatrix. Dies entspricht dem Berechnen der Beiträge der einzelnen Elemente des Netzes zu \mathbf{K} in Gleichung (4.18) in einer gestaffelten Schleife über alle Elemente, alle Verschiebungsfreiheitsgrade pro Element, alle Testfunktions-Freiheitsgrade pro Element und alle Integrationspunkte pro Element sowie dem Einordnen der Elementbeiträge in die globale Matrix.
- `solve()`: Lösen der Systemgleichung (4.18) mit numerischen Verfahren. In dieser Arbeit wurde das GMRES-Verfahren mit einer Jacobi-Präkonditionierung des Systems genutzt.
- `plasticity.do_step()`: Durchführung der beschriebenen Radial Return Method für jeden Integrationspunkt des Netzes in einer Schleife.
- `output_results()`: Ausgabe der Simulationsergebnisse in jedem Zeitschritt. Dies kann sowohl als Mittelwert über die Geometrie zur Erstellung einer Fließkurve geschehen, als auch als dreidimensionale Visualisierung der Feldgrößen.

Hiermit sind die wichtigsten Kernfunktionen des Programms beschrieben, zum Programmaufbau sind aber noch einige weitere Details zu erwähnen. Da in dieser Arbeit ein elastisch-plastisches Materialverhalten mit linearem elastischen Teilmodell gewählt wurde, reicht im Programmablauf eine einzelne `while`-Schleife, weil der elastische Testzustand des Systems in einer Newton-Iteration berechnet wird. Im Falle eines nichtlinearen elastischen Teilmodells muss dieser Testzustand vor Durchführung der RRM in einer eigenen Schleife bestimmt werden. Durch die Bestimmung der Systemmatrix in `assemble_system()` nur zu Beginn und nicht in jeder Iteration, handelt es sich hier um ein vereinfachtes Newton-Verfahren. Wie anhand von Abbildung 4.2 leicht vorstellbar ist, steigt die Anzahl der nötigen Iteration zur Bestimmung der Lösung leicht an. Da jedoch die Assemblierung der Matrix bei einer hohen Anzahl an Freiheitsgraden sehr zeitaufwändig ist, entsteht durch den Verzicht auf die Neu-Assemblierung

insgesamt ein Geschwindigkeitsgewinn. Ebenfalls zur Steigerung der Geschwindigkeit wurde das Programm mit Hilfe der Bibliotheken *PETSC* [10] und *p4est* [29] sowohl für shared memory als auch für distributed memory Mehrkern-Systeme parallelisiert.

4.4 Datenreduktion

Das in den vorigen Unterkapiteln beschriebene Simulationsprogramm ist prinzipiell ausreichend zur Berechnung der Spannungs-Dehnungs-Beziehung für eine Dualphasenstahl-Mikrostruktur unter Last. Weil die betrachteten Mikrostrukturen in der Tomographie jedoch aus einer sehr großen Anzahl an Voxeln bestehen, ist die Art der Vernetzung der Struktur von großer Bedeutung. Für die Vernetzung von tomographiebasierten Strukturen bietet sich aufgrund der hexaederförmigen Voxel eine Vernetzung mit Hexaederelementen an. Somit ist es möglich, jedes einzelne Voxel der Tomographie in ein Hexaederelement des FE-Netzes zu überführen. Dabei werden jedem Element die Materialeigenschaften des jeweiligen Voxels zugewiesen, entweder ein Ferrit-Parametersatz oder ein Martensit-Parametersatz. Prinzipiell kann die Struktur auch durch Tetraederelemente vernetzt werden. Da hier jedoch zusätzliche Programme zur Umsetzung der Tomographie in eine dreidimensionale Geometrie sowie zur Vernetzung dieser Geometrie nötig sind, und da *deal.II* auf Hexaederelemente ausgelegt ist, wird diese Methode hier nicht weiter betrachtet. Die Umsetzung der Tomographie in ein Hexaedernetz konnte hingegen ohne weitere Programme direkt in *deal.II* implementiert werden. Wegen der hohen Anzahl an Voxeln der betrachteten Tomographien, entstehen bei der klassischen Hexaeder-Vernetzung durch Zuweisung eines einzelnen Voxels an ein einzelnes Hexaederelement viele Millionen von Freiheitsgraden. Als Folge dessen steigt die Rechenzeit zur Lösung des Systems und der benötigte Arbeitsspeicher zur Zwischenspeicherung immens an. Aufgrund der Tatsache, dass im Rahmen des Projekts, in das diese Arbeit eingebettet ist, gleichzeitig die Verwendung von Workstations⁴ als Simulationsrechner vorgegeben ist, wurde zusätzlich ein besonderer Schwerpunkt auf Datenreduktion gelegt. Ziel dabei ist es, die benötigte Anzahl an Elementen zur Vernetzung der Mikrostruktur, und somit die Rechenzeit und die Arbeitsspeicherlast, möglichst weit zu senken, bei gleichzei-

⁴ Arbeitsplatzrechner mit gehobener CPU- und Arbeitsspeicherausstattung, im Gegensatz zu Hochleistungs-Rechenclustern.

tigem Erhalt aller relevanten Strukturinformationen. Zu dem Zweck wurden mehrere Methoden der Datenreduktion implementiert. Neben einem einfachen Boxfilter sind dies die Hanging-Node-Vernetzung und die Materialdefinition am Integrationspunkt.

Boxfilter

Ein Boxfilter ist ein Verfahren zur Vergrößerung der Tomographie, und damit des FE-Netzes, durch Zusammenfassen mehrerer Voxel zu einem neuen Voxel. Das neue Voxel erhält dabei die Materialinformation der Mehrheit der ursprünglichen Voxel. Ein Voxel der Tomographie wird weiterhin einem Element des FE-Netzes zugeordnet. Aufgrund des Funktionsprinzips haben Boxfilter den Nachteil, zwangsläufig mit einer Reduktion der Strukturinformation, insbesondere für hohe Reduktionsordnungen, einherzugehen.

Hanging-Node-Vernetzung

Die Hanging-Node-Vernetzung ist klassischerweise ein Verfahren zur adaptiven Verfeinerung von FE-Netzen [15, 63]. Ausgehend von einer relativ groben Vernetzung der betrachteten Geometrie werden Teile des Gebiets, v. a. Bereiche mit hohem Gradienten des Lösungsvektors, mit einer erhöhten Anzahl an Elementen aufgelöst (siehe Abbildung 4.5).

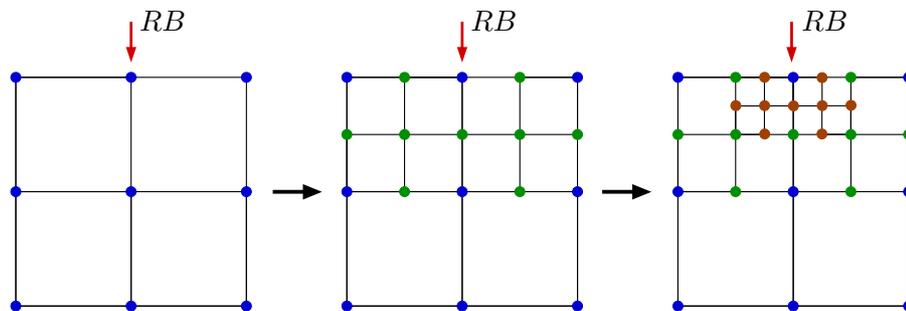


Abbildung 4.5: Adaptive Verfeinerung eines FE-Netzes durch Hanging-Node-Vernetzung in zwei Schritten, für eine beispielhaft in einem Punkt aufgebrachte beliebige Randbedingung RB .

Diese zusätzlichen Elemente haben zum Teil Knoten, die nicht Teil des benachbarten Elements sind. Diese sogenannten hängenden Knoten geben dem Verfahren seinen Namen. Die ursprünglichen, groben Elemente werden dabei als Eltern-Elemente der neuen, verfeinerten Kinder-Elemente bezeichnet. Alle Kinder-Elemente, die aus dem gleichen Eltern-Element hervorgehen, werden als Geschwister-Elemente bezeichnet. Die hängenden Knoten bedingen im

Rahmen der FEM einen zusätzlichen Satz an Übergangsbedingungen. Um die Konformität der Kanten der neuen, verfeinerten Elemente zu ihren größeren Nachbarn zu wahren, werden die Lösungswerte an den hängenden Knoten nicht frei bestimmt, sondern die Interpolation zwischen ihren Nachbarknoten ähnlich einer Randbedingung vorgegeben. Dadurch liegen die hängenden Knoten auf den Kanten der jeweiligen größeren Nachbarelemente. Das Verfeinerungsprinzip wird in der vorliegenden Arbeit aufgegriffen und zur adaptiven Vergrößerung der Struktur benutzt. Das bietet die Möglichkeit, die Bereiche innerhalb der einzelnen Phasen der Mikrostruktur relativ grob zu vernetzen, während die Phasengrenzen weiterhin mit der maximalen Auflösung der Tomographie aufgelöst werden. Zu diesem Zweck wird die Geometrie im ersten Schritt in Vollauflösung vernetzt und die Voxel der Tomographie werden einzelnen Elementen zugeordnet. Hiervon ausgehend werden dann alle Kinder-Elemente, die das gleiche Material wie ihre Geschwister-Elemente haben, wieder in ihr Eltern-Element transformiert. Dieser Prozess wird mehrfach wiederholt, wodurch Teile der Geometrie mit homogener Materialverteilung deutlich vergrößert werden können. Weitere Details zur Anwendung der Hanging-Node-Vernetzung sind in Kapitel 8.1 gegeben.

Materialdefinition am Integrationspunkt

Die bedeutendste Methode der Datenreduktion in dieser Arbeit ist die Materialdefinition am Integrationspunkt, kurz MatIp. MatIp ist angelehnt an das Gauss Point Oversampling [188, 189] und insbesondere an die Finite Cell Method (FCM) [46, 130]. Grundgedanke der FCM ist es, die betrachtete Geometrie stark vergrößert zu vernetzen, sodass viele Voxel einem Element zugeordnet sind. Die Zuweisung der realen Materialeigenschaften der Struktur innerhalb des Netzes erfolgt mittels Indikatorfunktion. Zur Integration der Systemgleichung über diese Elemente werden dann Unterelemente eingeführt, die es ermöglichen, die Integration über Bereiche mit homogenem Material durchzuführen⁵. Inspiriert durch dieses Verfahren wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit MatIp umgesetzt. Auch hier werden mehrere Voxel der Struktur zu einem Element zusammengefasst, wobei ein Voxel genau einem Integrationspunkt zugeordnet wird. Bei der Berechnung der Spannung und der Behandlung der Plastizität werden dementsprechend an jedem Integrationspunkt eigene Materialparameter genutzt, je nachdem, ob es sich um einen

⁵ Die Unterelemente werden lediglich bei der Integration genutzt, sie besitzen keine im Rest der Simulation relevanten Knoten.

Ferrit- oder einen Martensit-Integrationspunkt handelt. Dieses Vorgehen ersetzt bei MatIp die Indikatorfunktion der FCM. Hierbei muss im Gegensatz zur FCM nicht auf die Nutzung von Unterelementen zur Integration der Elemente mit gemischtem Material zurückgegriffen werden. Während bei der FCM häufig komplexe Geometrien vergrößert werden, und somit auf einem Teil des Gebiets die Festigkeit Null beträgt, werden aufgrund der vergleichsweise geringen Festigkeitsunterschiede zwischen Ferrit und Martensit bei MatIp auch bei klassischer Integration sehr gute Ergebnisse im Vergleich zur Rechnung in Vollauflösung erzielt. Hierbei können die Ordnung der Integrationspolynome und die Ordnung der Ansatzfunktionen je nach gewähltem Verfahren variieren. Zur Kennzeichnung werden die Anzahl der Integrationspunkte und die Ordnung der Ansatzfunktionen angegeben. Somit bedeutet beispielsweise die Materialdefinition am Integrationspunkt `q2fe1-MatIp` eine lineare Ansatzordnung pro Raumrichtung für das jeweilige finite Element und zwei Integrationspunkte pro Raumrichtung im Element. In diesem Fall entspricht ein Element acht Voxeln der Tomographie. Um den Volumenanteil an Martensit bei der numerischen Integration nicht durch ungleiche Integrationsgewichte zu beeinflussen, wurden äquidistante Integrationspunkte mit konstanten Gewichten implementiert. In Abbildung 4.6 ist der Unterschied zwischen normaler Vernetzung, FCM und MatIp schematisch für eine zweidimensionale Geometrie dargestellt.

Damit die Vergrößerung durch MatIp die dreidimensionale Visualisierung der Simulationsergebnisse im Nachgang nicht beeinflusst, wurde zusätzlich eine Methode zur nachträglichen Verfeinerung der Simulation auf die Vollauflösung der Tomographie implementiert. Zur weiteren Datenreduktion kann im entwickelten Simulationsprogramm MatIp mit Hanging-Node-Vernetzung gekoppelt werden. Genauere Informationen zum Geschwindigkeitsgewinn durch MatIp und zur Genauigkeit werden in Kapitel 8.1 gegeben.

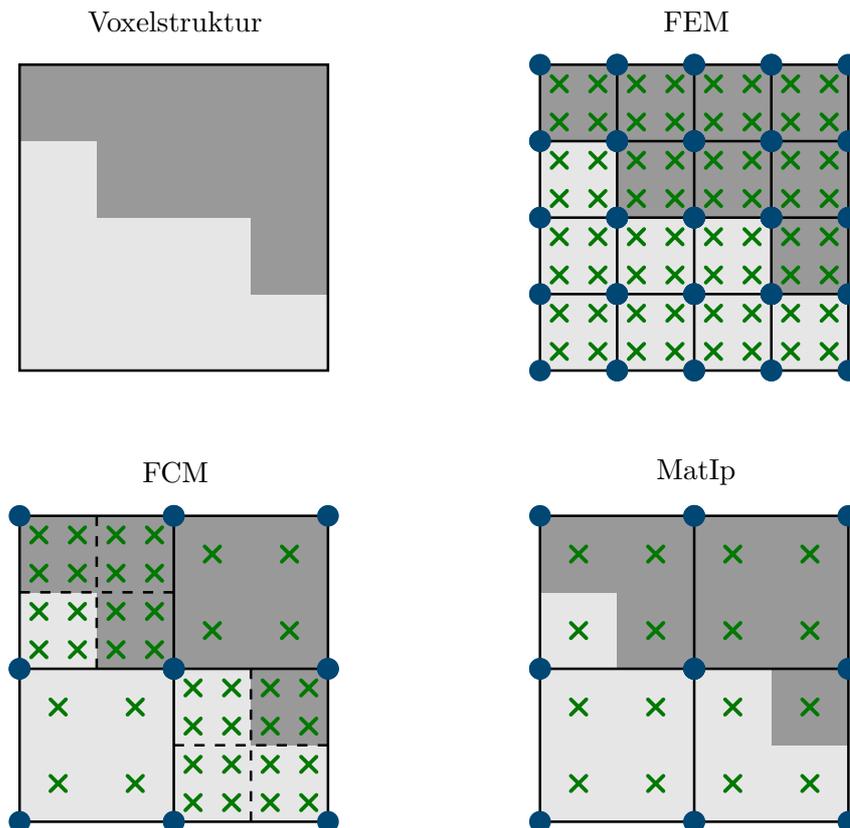


Abbildung 4.6: Vernetzung einer zweikomponentigen Voxelstruktur durch klassische FEM, FCM und MatIp (q2fe1). Elementknoten sind dargestellt durch blaue Punkte, Integrationspunkte durch grüne Kreuze, Elementkanten durch schwarze Linien und Unterelementkanten der FCM durch gestrichelte schwarze Linien. Der Hauptunterschied zwischen FCM und MatIp ist durch die zusätzlichen Integrationspunkte der FCM-Unterelemente zur Integration über homogene Materialbereiche gegeben.

5

Experimentelle Charakterisierung von Dualphasenstahl

In diesem Kapitel werden die Grundlagen des betrachteten Materials Dualphasenstahl beschrieben und die für die vorliegende Arbeit relevanten experimentellen Verfahren erläutert. Der uniaxiale Zugversuch und die 3D-Tomographie werden dabei als experimentelle Grundlagen der Arbeit umfangreich beschrieben und ihre Ergebnisse dargestellt. Die genutzten Verfahren der Härtemessung werden hingegen nur kurz erläutert, um die Basis der in Kapitel 6 und Kapitel 7 beschriebenen Methoden zu liefern.

5.1 Dualphasenstahl

Im Folgenden werden die Besonderheiten von Dualphasenstahl nochmals erläutert. Zur Klärung der Nomenklatur wird zu Beginn kurz auf die allgemeinen mikrostrukturellen Grundlagen von Stahl eingegangen. Stahl ist eine Eisen-Kohlenstoff-Legierung mit weniger als 2,06% Kohlenstoff und wie alle Metalle im festen Zustand auf atomarer Ebene regelmäßig und periodisch als Kristallgitter aufgebaut. Der innere Aufbau wird als Mikrostruktur bzw. Gefüge bezeichnet. Abhängig von der genauen Zusammensetzung und der Temperatur

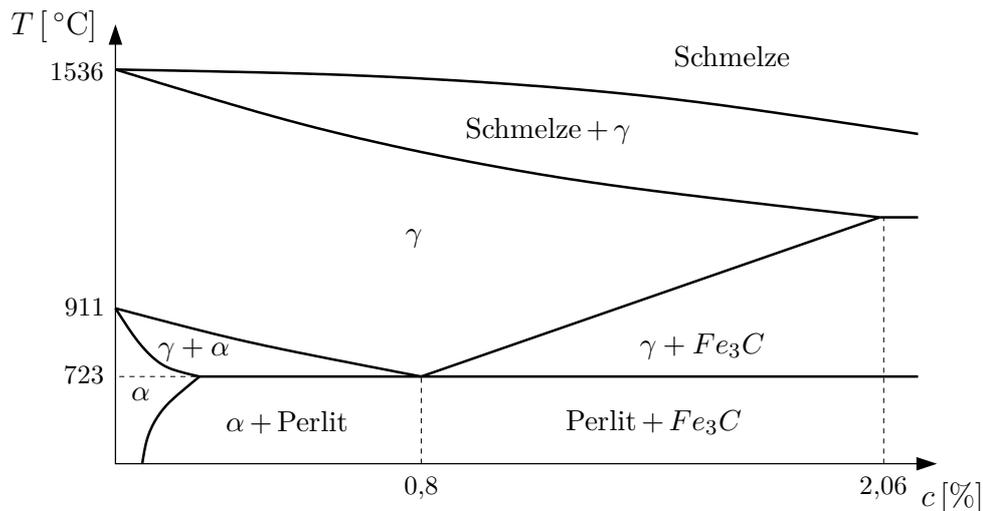


Abbildung 5.1: Ausschnitt aus dem Eisen-Kohlenstoff-Diagramm für Kohlenstoffkonzentrationen im Bereich von Stahl, vereinfacht nach Bargel und Schulze [16].

können sich verschiedene Phasen¹ im Stahl ausbilden. Zur Veranschaulichung dieser Phasen ist in Abbildung 5.1 ein vereinfachter Ausschnitt des Eisen-Kohlenstoff-Phasendiagramms dargestellt. Bei Abkühlung der Stahlschmelze beginnt bei Erstarrung zuerst die Bildung von γ -Eisen (Austenit), einer Eisenmodifikation mit kubisch-flächenzentrierter (kfz) Anordnung des Kristallgitters, die bis zu 2,06% Kohlenstoff im Gitter einlagern kann. Durch weitere Abkühlung wandelt sich Austenit in eine andere Phase um. Bei Kohlenstoffgehalten unter 0,8% beginnt die Bildung von α -Eisen (Ferrit), einer relativ weichen und kohlenstoffarmen kubisch-raumzentrierten (krz) Eisenmodifikation. Bei Kohlenstoffgehalten über 0,8% beginnt hingegen die Ausscheidung von Fe_3C (Zementit), einer harten und spröden Eisen-Kohlenstoff-Verbindung. Bei sehr niedrigen Kohlenstoffgehalten kann sich bei weiterer Abkühlung auf Raumtemperatur das gesamte Austenit in Ferrit umwandeln. Ansonsten wandelt sich der restliche Austenit bei Temperaturen unter 723 °C in Perlit um. Perlit ist eine Mischphase mit lamellenförmiger Substruktur aus Ferrit und Zementit. Die Perlitumwandlung findet aufgrund ihrer Bildungskinetik jedoch nur bei niedrigen Abkühlgeschwindigkeiten statt. Bei schneller Kühlung wandelt sich Austenit in Martensit um. Martensit ist eine sehr harte tetragonalraumzentrierte (trz) Modifikation des Eisens. Aufgrund der Umwandlung der Struktur von kfz zu trz findet in Abhängigkeit der genauen Legierungszusam-

¹ Bereiche gleicher mikrostruktureller Eigenschaften, insbesondere chemische Zusammensetzung und Kristallstruktur.

mensetzung eine Volumendehnung von 3% – 4% statt [9, 25, 33, 145]. Bei mittleren Abkühlgeschwindigkeiten kann sich Austenit auch in Bainit umwandeln, eine Mischphase aus Ferrit und kohlenstoffreicher Phase ähnlich dem Perlit, aber mit sehr feiner Substruktur. Je nach Produktionsprozess ist die Umwandlung nicht genau abgegrenzt und im Gefüge treten Mischungen aus Perlit, Bainit und Martensit auf. Die im Text sowie in Abbildung 5.1 genannten Kohlenstoffkonzentrationen und Temperaturen gelten für eine reine Eisen-Kohlenstoff-Legierung. Weitere Legierungselemente können die beschriebenen Phasenübergänge zu anderen Konzentrationen und Temperaturen verschieben. Die hier beschriebenen Phasen als Bereiche gleicher Kristallstruktur lassen sich auf mikrostruktureller Ebene nochmals unterscheiden in einzelne Körner oder Kristalle, Bereiche gleicher Orientierung des Kristallgitters. Für weitere Details zu den hier beschriebenen Grundlagen sei auf die Fachliteratur [16, 38, 57, 72, 73] verwiesen.

Dualphasenstahl ist eine spezielle Form des Stahls. Mechanisch wird er durch eine hohe Zugfestigkeit, eine im Verhältnis geringe Streckgrenze und hohe Dehnbarkeit gekennzeichnet. Ursache des Verhaltens ist die Mikrostruktur aus weicher Ferritmatrix und harter zweiter Phase. Die zweite Phase ist in der Regel Martensit. In dieser Arbeit wird durchgehend als Material ein niedrigkohlenstoffhaltiger, niedriglegierter Stahl verwendet. Er enthält 0,05 Gew.-% Kohlenstoff, die Legierungselemente Silizium, Mangan, Nickel und Kupfer sowie die Mikrolegierungselemente Niob und Titan. Der Stahl wurde im Produktionsprozess thermomechanisch gewalzt, nach dem Walzen an Luft in das Austenit-Ferrit-Zweiphasengebiet abgekühlt und danach wassergekühlt (vgl. Abbildung 5.2). Durch die Luftkühlung im Zweiphasengebiet wandelt sich ein Teil des Austenits in kohlenstoffarmen Ferrit um. Die verbliebenen kohlenstoffreichen Austenitbereiche wandeln dann beim Abschrecken in Martensit um. Die Dauer der Luftkühlung im Zweiphasengebiet bestimmt den Anteil von Martensit im fertigen Dualphasenstahl. Je länger die Luftkühlung bzw. je niedriger die Startkühltemperatur² ist, desto weniger Martensit befindet sich im Endprodukt. Für die vorliegende Arbeit wurden vier verschiedene Martensitanteile über unterschiedliche Abkühlverläufe generiert (siehe Tabelle 5.1). Der angegebene Martensitvolumenanteil wurde jeweils an mehreren zweidimensionalen Schlifffildern bestimmt. Die gefertigten Bleche haben eine Dicke von 20 mm.

² Temperatur, bei der von langsamer Luftkühlung zu beschleunigter Wasserkühlung gewechselt wird.

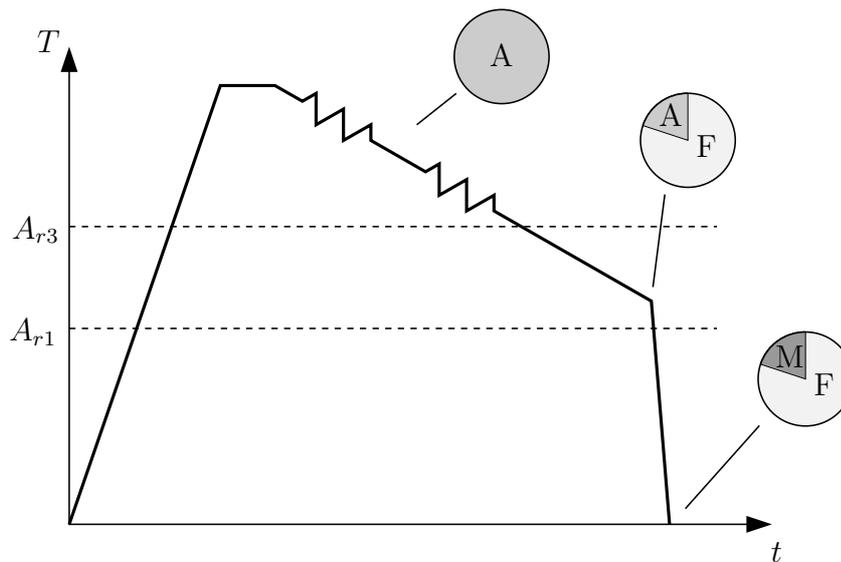


Abbildung 5.2: Schematischer Temperatur-Zeit-Verlauf während der Herstellung eines Dualphasenstahls mit anteiliger Zusammensetzung aus Austenit (A), Ferrit (F) und Martensit (M). Walzprozesse sind durch gezackte Linien gekennzeichnet, das Austenit-Ferrit-Zweiphasengebiet wird durch zwei Strichlinien eingegrenzt.

Tabelle 5.1: Martensitvolumenanteil der verwendeten Stähle mit den genutzten Kurzbezeichnungen.

	Martensitvolumenanteil [%]
DP1	9,42
DP2	9,75
DP3	15,33
DP4	16,46

Der Stahl DP1 kann dabei als Referenz betrachtet werden, da Untersuchungen an diesem Material zur Entwicklung des Simulationsmodells verwendet werden. DP2, DP3 und DP4 werden darauf basierend zur Validierung des Modells an geänderten Mikrostrukturen genutzt. Wenn im Folgenden in einer Beschreibung nicht explizit etwas anderes erwähnt ist, kann somit immer DP1 als untersuchtes Material angenommen werden.

Neben den guten mechanischen Eigenschaften weist Dualphasenstahl eine weitere Besonderheit auf. Da seine Mikrostruktur lediglich aus Ferrit und Martensit besteht, hat Dualphasenstahl eine sehr klar definierte Mikrostruktur.

Im Gegensatz zu mehrphasigen Stählen mit komplexerem Aufbau ist dadurch die Mikrostruktur sehr gut erkennbar und segmentierbar (vgl. Kapitel 5.3). Dies qualifiziert Dualphasenstahl in besonderem Maße zur Betrachtung in mikrostrukturbasierten Simulationen.

5.2 Uniaxialer Zugversuch

Eines der bedeutendsten Werkzeuge zur Beschreibung der mechanischen Eigenschaften eines Werkstoffs ist die Spannungs-Dehnungs-Kurve bzw. die Fließkurve [16, 57]. Beispielfhaft ist in Abbildung 5.3 eine Spannungs-Dehnungs-Kurve für einen typischen Stahlwerkstoff dargestellt.

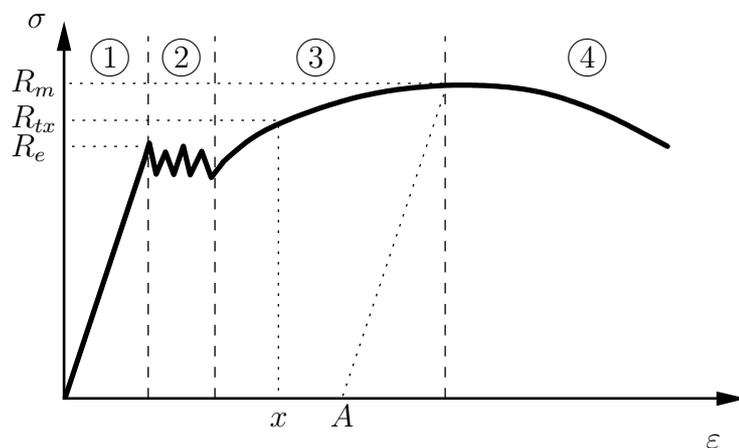


Abbildung 5.3: Schematisches Spannungs-Dehnungs-Diagramm bis zum Bruch für einen typischen Stahlwerkstoff. Markiert sind die Bereiche der elastischen Deformation (1), der Lüdersdehnung (2), der homogenen plastischen Deformation (3) und der heterogenen plastischen Deformation bzw. Einschnürung (4) sowie die im Text erwähnten Maße R_e , R_{tx} und R_m .

Die Spannungs-Dehnungs-Kurve kann in vier Bereiche unterteilt werden. Im ersten Bereich verhält sich der Stahl bis zur Streckgrenze R_e linear-elastisch mit dem E -Modul als Steigung. Danach beginnt das Material, sich plastisch zu verformen. Neben der Streckgrenze R_e als exaktem Übergang vom elastischen zum plastischen Bereich wird häufig zur Definition der Streckgrenze auch ein bestimmtes Maß an Gesamtdehnung erlaubt. Dadurch erhält man die Streckgrenze R_{tx} , wobei x hier den zur Definition genutzten Dehnungswert in Prozent beschreibt. Die plastische Deformation umfasst die folgenden drei Bereiche der

Spannungs-Dehnungs-Kurve. Je nach Stahlsorte, insbesondere bei unlegierten oder niedriglegierten niedrigkohlenstoffhaltigen Stählen, beginnt sie mit dem Bereich der Lüdersdehnung. Die Lüdersdehnung beschreibt einen Dehnungsbereich mit in kurzen Abständen leicht ansteigender und wieder abfallender Spannung. Der Effekt wird hervorgerufen durch das periodische Festhalten und Losreißen von Versetzungen an Fremdatomen im Metall. Bei weiterer Belastung beginnt die eigentliche plastische Deformation, wie in Kapitel 3.3.2 von kontinuumsmechanischer Seite aus erläutert. Dieser Bereich endet mit der Zugfestigkeit R_m und der zugehörigen plastischen Gleichmaßdehnung A . Der Endpunkt markiert die maximale Spannung und Dehnung, bis zu der sich das Material homogen verformt. Im Anschluss daran beginnt der Bereich der Probeneinschnürung, hervorgerufen durch Inhomogenitäten im Material und sich entwickelnde Schädigung. Durch die lokale Querschnittsverringering sinkt die zur weiteren Verformung nötige Kraft und somit fällt die Spannungs-Dehnungs-Kurve ab. Der Effekt der abfallenden Kurve tritt jedoch nur bei der üblichen Bestimmung von Spannung und Dehnung mit Bezug auf den Ausgangsquerschnitt der Probe auf. Wird stattdessen der aktuelle Probenquerschnitt bestimmt, steigt die Kurve auch hier, mit geringerer Steigung, weiter an. Ende des Bereichs ist der Bruch der Probe. Für genauere Details zur werkstoffwissenschaftlichen Grundlage des beschriebenen Verhaltens sei wieder auf die in Kapitel 5.1 zitierte Fachliteratur verwiesen.

Zur Bestimmung der beschriebenen Spannungs-Dehnungs-Kurve wird der uniaxiale bzw. einachsige Zugversuch [16, 41] genutzt. Im uniaxialen Zugversuch werden stabförmige Proben mit definierter Querschnittsfläche in eine Prüfmaschine eingespannt und gleichmäßig mit geringer Dehnrage entlang der Probenachse bis zum Probenversagen gedehnt. Standardmäßig werden Kraft und Probenverlängerung während des Versuchs gemessen und daraus zur Auswertung die Ingenieursspannung und die Ingenieursdehnung bestimmt. Die Ingenieursspannung berechnet sich als gemessene Kraft bezogen auf den unverformten Querschnitt der Probe, die Ingenieursdehnung als gemessene Längenänderung bezogen auf die Ausgangslänge der Probe. Im Gegensatz dazu können auch die wahre Spannung bzw. die wahre Dehnung durch Bezug auf den aktuellen Probenquerschnitt und die aktuelle Probenlänge berechnet werden. Sofern nicht anders angegeben, sind mit Spannung und Dehnung im Folgenden immer die Ingenieursgrößen gemeint, die sich auf die Ausgangsabmessungen des unverformten Probenkörpers beziehen. Für diese Arbeit wurden bei dem Projekt-

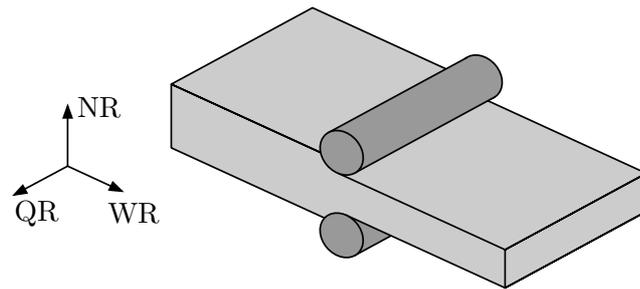


Abbildung 5.4: Walzrichtung (WR), Querrichtung (QR) und Normalenrichtung (NR) in Relation zum gewalzten Blech.

partner, der *AG der Dillinger Hüttenwerke*, Zugproben in Walzrichtung und in Querrichtung des Blechs von allen in Tabelle 5.1 genannten Dualphasenstählen geprüft. Proben in Normalenrichtung konnten aufgrund der geringen Blechdicke nicht gefertigt werden. Die genannten Richtungen im Blech sind in Abbildung 5.4 veranschaulicht. Die Proben wurden jeweils als Rundzugproben mit 5 mm Durchmesser in Vierteldicke des Blechs entnommen. Die Ergebnisse der Zugversuche sind in den Abbildungen 5.5, 5.6, 5.7 und 5.8 dargestellt. Von jeder Variante des Stahls wurden je zwei Proben in Walzrichtung und zwei Proben in Zugrichtung untersucht. Da die Spannungs-Dehnungs-Kurven eines Probentyps bei allen betrachteten Stählen nur um wenige Megapascal voneinander abweichen, wird in den folgenden Kapiteln jeweils der Mittelwert der beiden Proben pro Richtung verwendet, sofern nicht explizit anders angegeben. Bis zum Beginn der Einschnürung zeigen alle Proben qualitativ den gleichen Verlauf aus elastischer Dehnung, Lüdersdehnung und homogener plastischer Deformation. Nach Beginn der Einschnürung sind die Zugkurven hingegen nicht mehr klar einzuordnen. Ein Teil der Proben versagt kurz nach Beginn der Einschnürung sehr abrupt, die anderen Proben zeigen eine starke Einschnürung mit langsamem Spannungsabfall bis zum Bruch. Ursache der Variation sind leichte Inhomogenitäten in manchen Proben, die bei hohen Spannungen als Rissinitiator wirken können. Beispiele für solche Inhomogenitäten sind sowohl unerwünschte Einschlüsse im Material als auch lediglich ungünstig orientierte Martensitbereiche am Rand des Probenquerschnitts. Da in der vorliegenden Arbeit Dehnungen über den Einschnürbeginn hinaus jedoch nicht betrachtet werden, sind diese Unterschiede vernachlässigbar. In den Abbildungen 5.5, 5.6 und 5.8 ist jeweils eine Anisotropie des Materials erkennbar, die Kurven in Walzrichtung liegen etwa 20 – 25 MPa unter den Kurven in Querrichtung. Das Material DP3 in Abbildung 5.7 weicht hingegen vom Trend ab,

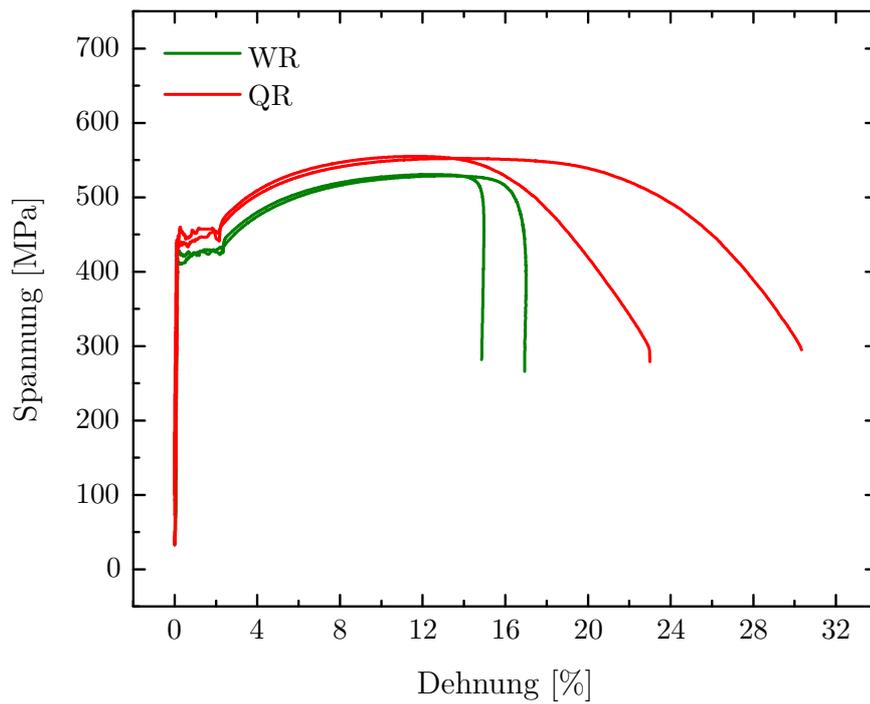


Abbildung 5.5: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für Stahl DP1 in Walzrichtung und Querrichtung für jeweils zwei Proben.

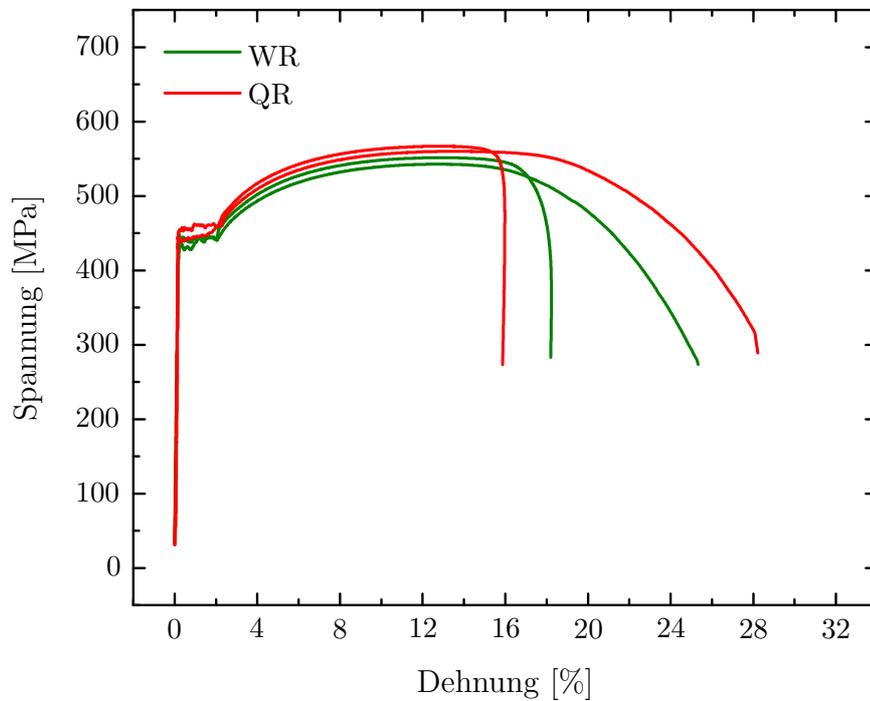


Abbildung 5.6: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für Stahl DP2 in Walzrichtung und Querrichtung für jeweils zwei Proben.

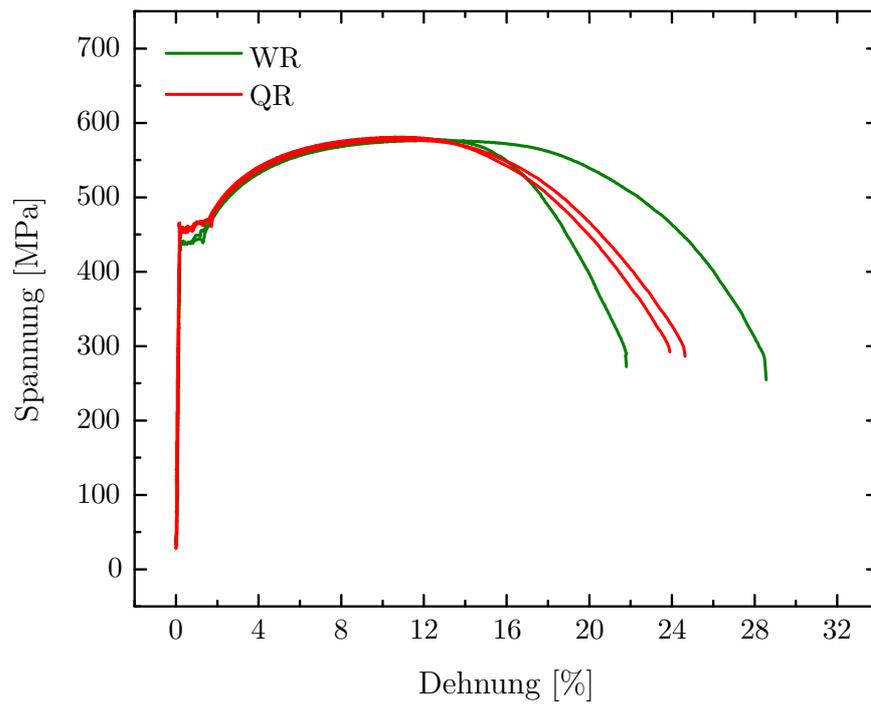


Abbildung 5.7: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für Stahl DP3 in Walzrichtung und Querrichtung für jeweils zwei Proben.

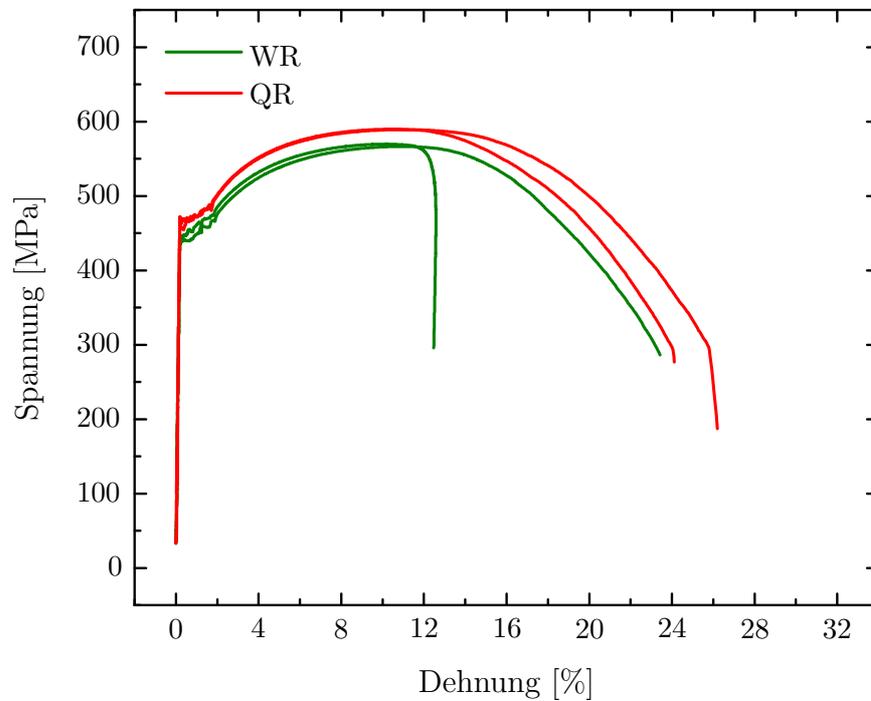


Abbildung 5.8: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für Stahl DP4 in Walzrichtung und Querrichtung für jeweils zwei Proben.

Walzrichtung und Querrichtung liegen auf annähernd gleichem Spannungsniveau. Dieses Verhalten wird in der Literatur bestätigt, je nach Mikrostruktur des Stahls sind sowohl isotropes als auch anisotropes Materialverhalten geläufig [115, 121, 166]. Der Ursprung der Anisotropie liegt in der Kornstruktur des Materials. Die Grenzen der einzelnen Körner dienen als Hindernis der Versetzungsbewegung bei plastischer Deformation. Bei Körnern, die entsprechend der Walzstruktur gestreckt sind, führt die höhere Dichte an Korngrenzen in Querrichtung zu einer stärkeren Versetzungsbehinderung und somit einer höheren Festigkeit als in Walzrichtung. Ebenso führt die aus dem Walzprozess folgende kristallographische Textur, durch Abweichung von einer regellosen Verteilung der Kornorientierungen, zu einer Anisotropie der Eigenschaften. Die hier gezeigten Zugversuche dienen im Folgenden in Kapitel 8 und Kapitel 9 zur makroskopischen Validierung der numerischen Simulation, sowohl basierend auf der Realstruktur als auch auf Basis virtueller Strukturen.

Neben den beschriebenen klassischen Zugversuchen wurden auch Zugversuche mit optischer Dehnungsmessung durchgeführt. Hier wird die Dehnung nicht durch Messung der Probenverlängerung integral bestimmt, sondern mit Hilfe digitaler Bildkorrelation (DIC, engl. digital image correlation) eine feldliche Dehnungsinformation gewonnen. Dazu wird auf die Probe ein Specklemuster³ mit Hilfe eines Sprühlacks aufgebracht, und es werden während des Zugversuchs in definierten zeitlichen Abständen Bilder der Probe aufgenommen. Durch eine Grauwertkorrelation kann dann die Dehnung feldlich bestimmt werden. In Abbildung 5.9 ist das Prinzip der DIC schematisch dargestellt.

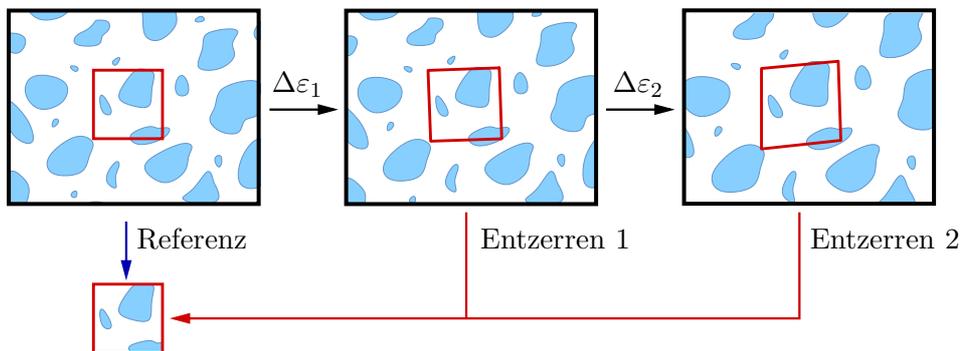


Abbildung 5.9: Funktionsweise der digitalen Bildkorrelation. Dargestellt sind der undeformierte Referenzzustand und zwei Zustände nach den Dehnungsschritten $\Delta\varepsilon_1$ und $\Delta\varepsilon_2$. Angepasst nach Scherff [150].

³ Ein zufälliges Punktmuster.

Ein Bild im undeforinierten Referenzzustand der Probe wird in einzelne, anhand ihrer Grauwertverteilung bestimmten Bereiche zerteilt. Während des Versuchs deformieren sich die Probe und damit auch das Punktmuster auf der Probe. Die Deformation kann durch Transformation der einzelnen Referenzbereiche reproduziert werden, und so kann die Dehnung der Probe lokal aufgelöst in jedem Bereich ermittelt werden. Neben der Anwendung mit einer Kamera für zweidimensionale Dehnungszustände kann DIC mit Hilfe geeigneter Kalibrierung auch mit mehreren Kameras auf komplexe dreidimensionale Zustände erweitert werden. Für die genauen Details der DIC, insbesondere im dreidimensionalen Fall, sei auf die Literatur verwiesen [149, 150, 154, 160, 161]. Zur Validierung der klassischen Zugversuche wurden Zugversuche mit optischer Dehnungsmessung unter Verwendung der kommerziellen Software *Dantec Dynamics Istra 4D*[®] am Stahl DP1 durchgeführt. Es wurden wie vorher Rundzugproben genutzt, hier jedoch mit einem Durchmesser von 10 mm zwecks optimierter Auswertbarkeit. In Abbildung 5.10 ist eine entsprechende Probe im undeforinierten Zustand mit aufgebrachtem Specklemuster sowie im deformierten Zustand nach der Einschnürung kurz vor dem Bruch mit überlagerter Dehnung dargestellt.

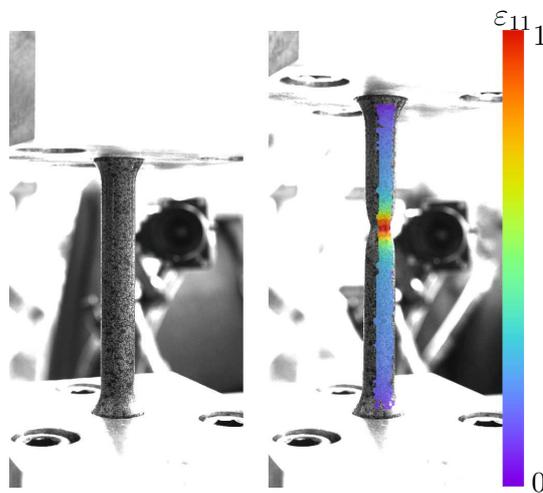


Abbildung 5.10: Zugprobe von DP1 im undeforinierten Zustand mit aufgebrachtem Specklemuster (links) und im deformierten Zustand mit überlagerter Dehnungsverteilung (rechts).

Die Dehnungsverteilung im Bereich der Einschnürung ist stark inhomogen ausgeprägt, im Gegensatz zum annähernd homogenen Dehnungszustand vor Beginn der Einschnürung. Eine homogene Dehnungsverteilung ist Voraussetzung zur anfangs beschriebenen klassischen Auswertung von Zugversuchen. Dies

wird bei Betrachtung von Abbildung 5.11 deutlich. Die Auswertung der Dehnung der DIC-Messung erfolgt hier sowohl global als Mittelwert über die gesamte Probenlänge als auch lokal als Mittelwert über den Einschnürbereich.

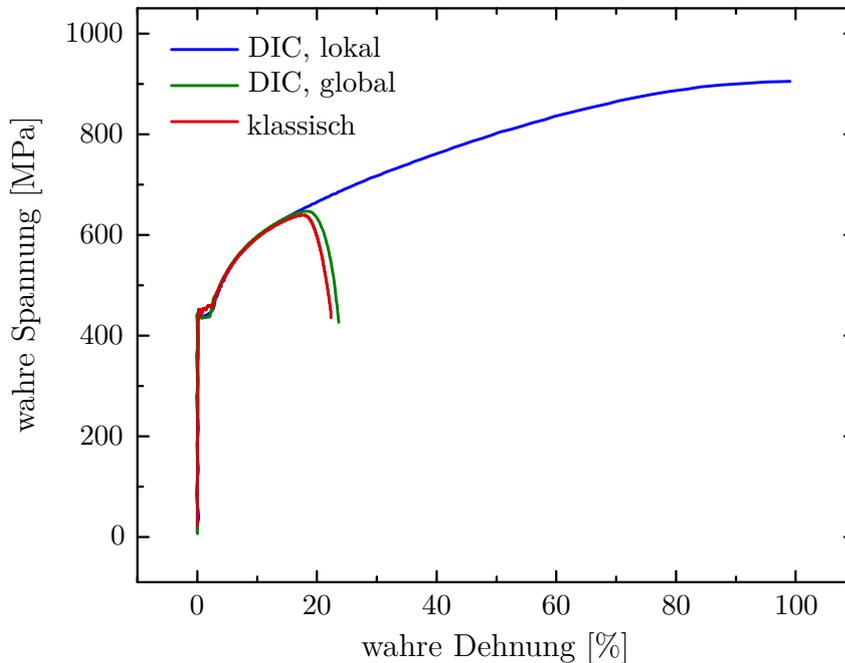


Abbildung 5.11: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für Stahl DP1. Dargestellt sind die Kurven eines klassischen Zugversuchs und eines Zugversuchs mit DIC mit globaler Auswertung über den gesamten Messbereich und lokaler Auswertung im Einschnürbereich.

Zu Beginn des Versuchs stimmen die verschiedenen Methoden der Dehnungsmessung überein. Mit Beginn der Einschnürung zeigt sich jedoch ein stark variierendes Bild. Aufgrund des durch die Einschnürung sinkenden Probenquerschnitts und der damit sinkenden gemessenen Kraft sinkt auch die berechnete Spannung bei integraler Dehnungsmessung. Dieser Effekt tritt auch bei Betrachtung der wahren Spannung auf, da hier in der Regel der aktuelle Querschnitt mit Hilfe der Dehnung in Richtung der Probenachse berechnet wird und somit die starke Querschnittsverringering nicht beachtet wird. Wird jedoch mit Hilfe der DIC ausschließlich der Bereich der größten Dehnung um die Einschnürung herum betrachtet, steigen Dehnung und Spannung aufgrund der Dehnungslokalisierung bis zum Bruch noch stark an. Für mögliche Folgearbeiten kann das den Bereich zum realitätsnahen Abgleich der Simulation mit dem Experiment stark erweitern. Der Vollständigkeit halber sei hier jedoch erwähnt, dass im Bereich der Einschnürung kein einachsiger Spannungszustand mehr vorliegt. Die Fließkurve im Einschnürbereich sollte dann vor Abgleich mit

der Simulation zur Vermeidung von Ungenauigkeiten mit Hilfe von Korrekturverfahren [108, 109] angepasst werden. Da DIC und klassische Auswertung der Dehnung bis zur Einschnürung gut übereinstimmen, konnten die klassischen Zugversuche durch die DIC-Zugversuche validiert werden. Aufgrund des in der vorliegenden Arbeit betrachteten Dehnungsbereichs und des deutlich höheren experimentellen Aufwands, werden DIC-Auswertungen im Folgenden jedoch nicht weiter betrachtet.

5.3 3D-Tomographie

Die in dieser Arbeit verwendeten realen Mikrostrukturen wurden durch Lichtmikroskop-Serienschnitttomographie am *Lehrstuhl für Funktionswerkstoffe* der *Universität des Saarlandes* angefertigt. Der genaue Ablauf des Präparationsprozesses ist bei Mücklich et al. [51, 116, 117, 177] beschrieben. Im Folgenden wird ein Überblick über die Lichtmikroskop-Serienschnitttomographie gegeben. Zur Bestimmung dreidimensionaler Mikrostrukturen werden häufig auch μ CT oder FIB/REM-Serienschnitttomographie genutzt. Im Fall des betrachteten Dualphasenstahls sind beide Verfahren jedoch nicht zur Bildgebung geeignet. Zum einen übersteigt das Volumen des RVE das maximale Probenvolumen gängiger FIB/REM-Geräte [117], zum anderen zeigen die verschiedenen Phasen des Stahls keinen hinreichenden Kontrast unter Röntgenstrahlung im μ CT.

In Abbildung 5.12 ist der zur Tomographie verwendete Aufbau schematisch dargestellt. Eine Probe wird in einen Halter eingespannt und poliert. Die polierte Probe wird zur Gefügekontrastierung angeätzt, und danach wird ein Bild der Probenoberfläche aufgenommen. Nach Anfertigung der Aufnahme wird die Probe wiederum mit definierter Kraft poliert, sodass eine dünne Materialschicht abgetragen wird, worauf sich wieder eine Abfolge aus Gefügekontrastierung und Bildaufnahme anschließt. Der Prozess wird nun so lange wiederholt, bis ein hinreichend großer Ausschnitt der Probe untersucht wurde. Der Materialabtrag zwischen den einzelnen Polierschritten kann mit Hilfe zuvor aufgebrachtener Marker ermittelt werden. Zusammen mit der über das Lichtmikroskop bekannten Größe der Pixel der Aufnahme in der Ebene ist so die Größe der resultierenden Voxel genau definiert. Eine Besonderheit des verwendeten Tomographieaufbaus ist die schwenkbare Probenhalterung. Dadurch ist es möglich, die Probe in einer Maschine zu polieren, anzuätzen und Schliffbil-

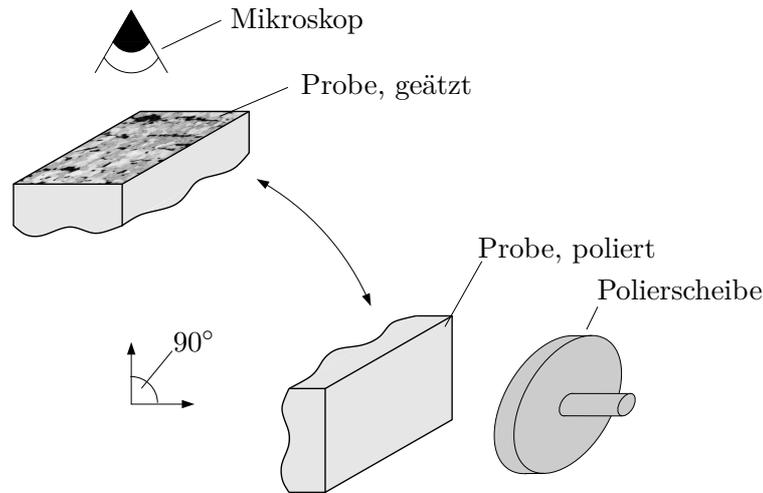


Abbildung 5.12: Schematische Darstellung des Aufbaus zur Lichtmikroskop-Serienschnitttomographie mit Polierscheibe zum Materialabtrag und Mikroskop zur Bildaufnahme, angepasst nach Webel [177]. Die Probe ist in beiden Arbeitspositionen dargestellt.

der aufzunehmen. Bei konventionellen Aufbauten wären hierzu mehrere Maschinen nötig, was durch den Ein- und Ausbau der Probe zu Ungenauigkeiten bei der Positionierung führen kann und die Dauer zur Erstellung der Tomographie erhöht. Ergebnis des Serienschnittprozesses ist ein Stapel kontrastierter Gefügebildungen bekannter Größe. In Abbildung 5.13 ist eine solche Gefügebildung dargestellt. Diese Aufnahmen werden in einem zweiten Schritt segmentiert. Ziel des Segmentierungsprozesses ist es, die Schliffbilder mit allen Details des Gefüges zu reduzieren, sodass lediglich Binärbilder der beiden Phasen des Dualphasenstahls übrig bleiben (vgl. Abbildung 5.13). Die Segmentierung kann automatisiert durch Methoden der Bildbearbeitung, händisch oder teilautomatisiert erfolgen. Als dritter Schritt des Tomographieprozesses wird der segmentierte Bilderstapel dann zur dreidimensionalen Mikrostruktur zusammengesetzt und gegebenenfalls durch Methoden der dreidimensionalen Bildbearbeitung angepasst. Häufige Optimierungen sind hier je nach Präparation das Säubern der Tomographie⁴, die moderate Glättung der Struktur und die Einstellung eines exakt gleichen Ebenenabstands durch Interpolation des Bilderstapels. Die dreidimensionale Mikrostruktur kann dann bezüglich ihrer Geometrieparameter analysiert werden oder zur weiteren Verwendung in Simulationen umgewandelt oder vernetzt werden (siehe Kapitel 4.4). Im Rahmen

⁴ Entfernung kleinster, wenige Voxel großer Partikel als Artefakte der Probenpräparation.

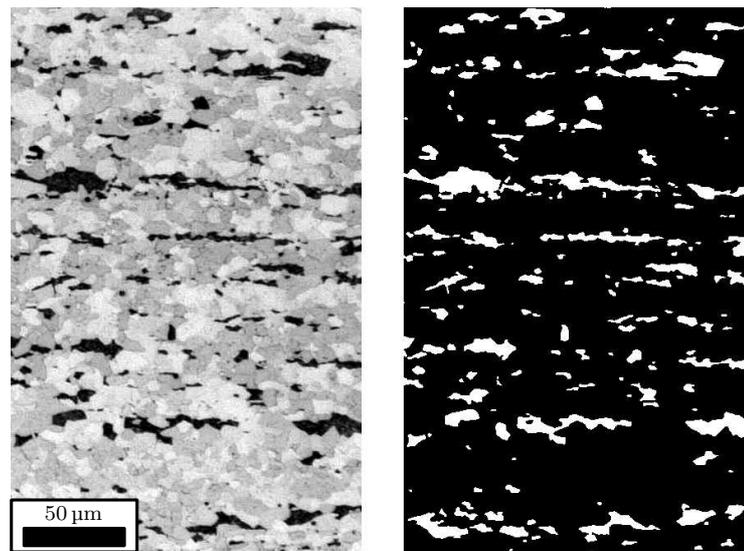


Abbildung 5.13: Darstellung eines Schlifffbilds von DP1 (links) sowie des zugehörigen, segmentierten Bilds der Phasenstruktur (rechts). Im segmentierten Bild ist Martensit weiß dargestellt, Ferrit schwarz.

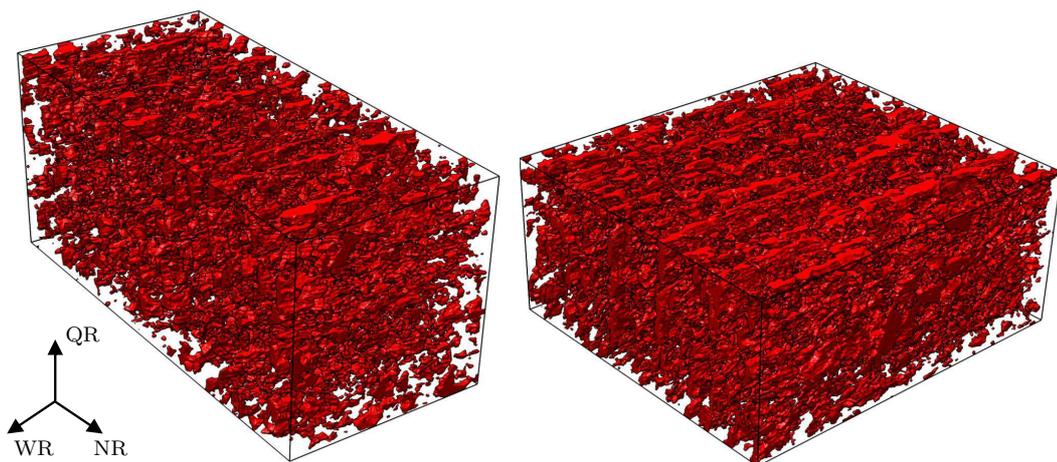


Abbildung 5.14: Darstellung der Tomographien von DP1 (links) und DP3 (rechts). Die Tomographien haben eine Größe von etwa $174\ \mu\text{m} \times 380\ \mu\text{m} \times 175\ \mu\text{m}$ bzw. $289\ \mu\text{m} \times 259\ \mu\text{m} \times 126\ \mu\text{m}$. Martensit ist jeweils rot dargestellt, Ferrit transparent.

der vorliegenden Arbeit wurden Tomographien von DP1 und DP3 angefertigt (Abbildung 5.14).

Die Geometrie der dreidimensionalen Mikrostruktur kann mit einer Vielzahl verschiedener Geometrieparameter beschrieben werden. Vier häufig verwendete Parameter sind Volumenanteil, Oberflächendichte, Krümmungsintegraldichte und Teilchendichte [102, 122, 123], jeweils bezogen auf die zweite Phase.

Diese Parameter werden hier jeweils mit Bezug auf Martensit genutzt. Der Martensitvolumenanteil V_r entspricht dem Volumen des im Gefüge vorliegenden Martensits V_M bezogen auf das Gesamtvolumen der Tomographie V_T mit

$$V_r = \frac{V_M}{V_T}. \quad (5.1)$$

Bei Betrachtung des Bilderstapels vereinfacht sich dies zur Anzahl der Martensitvoxel bezogen auf die Gesamtanzahl an Voxeln des Stapels. Entsprechend beschreibt die Oberflächendichte S_r die Gesamtoberfläche aller Martensitbereiche S_M bezogen auf das Gesamtvolumen der Tomographie

$$S_r = \frac{S_M}{V_T}. \quad (5.2)$$

Die Krümmungsintegraldichte C_r wird berechnet als Integral der mittleren Krümmung κ_m der Oberfläche aller Martensitbereiche bezogen auf das Gesamtvolumen

$$C_r = \frac{1}{V_T} \int_{S_M} \kappa_m \, dA. \quad (5.3)$$

Zuletzt kann die Teilchendichte P_r als Anzahl der Martensitbereiche N_M bezogen auf das Gesamtvolumen berechnet werden mit

$$P_r = \frac{N_M}{V_T}. \quad (5.4)$$

Die automatisierte Auswertung der Parameter wurde im Rahmen dieser Arbeit in *MathWorks MATLAB*[®] implementiert. Die Implementierung der Berechnung von Volumenanteil, Oberflächendichte und Krümmungsintegraldichte basiert dabei weitgehend auf der Arbeit von Legland [101, 102]. In Tabelle 5.2 sind die Geometrieparameter von DP1 und DP3, berechnet anhand der Tomographien, dargestellt. Die Werte für den Martensitvolumenanteil zeigen eine leichte Abweichung zu Tabelle 5.1, liegen aber im Bereich der natürlichen Streuung. Die Daten sind im Anschluss insbesondere für die Erzeugung virtueller Mikrostrukturen in Kapitel 9 von großer Bedeutung.

Tabelle 5.2: Geometrieparameter der Tomographien von DP1 und DP3.

	DP1	DP3
Voxelgröße [nm ³]	0,41 × 0,41 × 0,41	0,41 × 0,41 × 0,41
Tomographiegröße [Voxel]	424 × 928 × 427	705 × 631 × 307
V_r [%]	8,34	17,13
S_r [10 ⁵ m ⁻¹]	0,898	1,65
C_r [10 ⁹ m ⁻²]	3,44	4,90
P_r [10 ¹⁴ m ⁻³]	3,50	5,68

5.4 Härtemessung

Allgemein beschreibt Härte den Widerstand eines Materials gegen das Eindringen eines anderen Körpers [16]. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde die Härteprüfung nach Vickers [16, 40] zur Bestimmung der RVE-Größe genutzt (siehe Kapitel 7). Bei der Vickers Härtemessung werden eine gleichseitige quadratische Diamantpyramide mit Öffnungswinkel 136° mit einer definierten Kraft F in die Probe eingedrückt und die Maximalkraft etwa 10 – 15 s gehalten. Nach der Entlastung werden die Diagonalen d_1 und d_2 des verbleibenden Eindrucks vermessen und die Härte HV bestimmt zu

$$HV = 2F \sin\left(\frac{136^\circ}{2}\right) \left(\frac{2}{d_1 + d_2}\right)^2, \quad (5.5)$$

wobei F in Kilopond angegeben wird und d_1 bzw. d_2 in Millimeter. Für das Verhältnis zwischen Kilopond und Newton gilt $1 \text{ kp} = 9,80665 \text{ N}$. In Abbildung 5.15 ist die Vickers Härtemessung schematisch dargestellt. Bei Angabe des Härtewertes wird die Prüfkraft standardmäßig mit angegeben, z. B. $160 HV_{0,5}$ für einen Härtewert von 160, der mit einer Kraft von 0,5 kp bestimmt wurde. Messungen mit Kräften kleiner 0,2 kp werden als Mikrohärteprüfung bezeichnet, Messungen mit Kräften zwischen 0,2 und 5 kp als Kleinsthärteprüfung und Messungen bei höherer Kraft als Makrohärteprüfung. Die in Kapitel 7 genutzten Härtemessungen liegen dabei im Kraftbereich von 0,05 kp bis 30 kp, vom Mikrohärtebereich bis hin zur Makrohärte, und wurden an Stahl DP1 für die vorliegende Arbeit bei der *AG der Dillinger Hüttenwerke* durchgeführt.

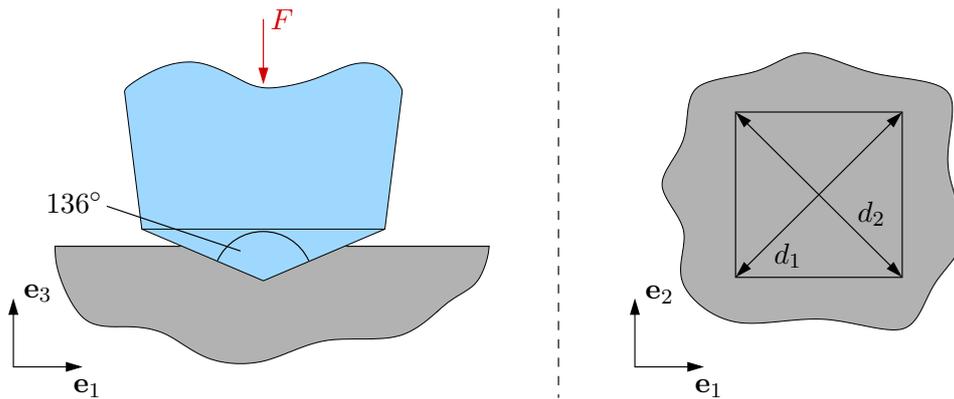


Abbildung 5.15: Schema der Härteprüfung nach Vickers im Schnitt (links) mit entsprechendem Eindruck (rechts).

Eine Variante der Härteprüfung für sehr geringe Kräfte und Eindringtiefen ist die Nanoindentierung [35, 48]. Die aufgebrachten Kräfte liegen im Bereich einiger Mikronewton bis Millinewton, die Eindringtiefen liegen im Bereich von einigen Nanometern bis Mikrometern. Im Gegensatz zur Vickers Härtemessung wird bei der Nanoindentierung jedoch nicht der verbleibende Eindruck zur Bestimmung der Härte vermessen, sondern während des Versuchs werden Kraft und Verschiebung bzw. Eindringtiefe des Indenters aufgezeichnet. Aus der Geometrie der Indenterspitze und der Eindringtiefe kann die Fläche des Eindrucks berechnet werden. Die Nanohärte wird dann als Kraft pro Fläche berechnet. Es können verschiedene Arten von Geometrien der Indenterspitze genutzt werden, z. B. sphärische Spitzen, konische Spitzen oder Cube-Corner Spitzen (Abbildung 5.16).

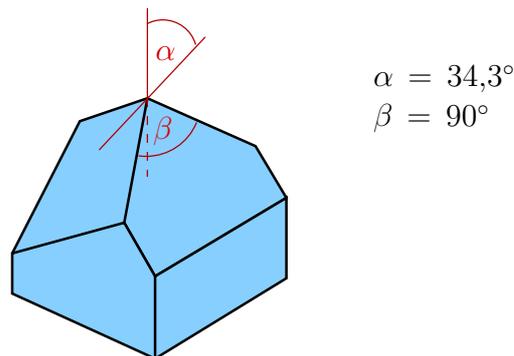


Abbildung 5.16: Darstellung einer Cube-Corner Spitze für Nanoindenter, ein tetraederförmiger Abschnitt einer Würfecke.

Aufgrund der geringen Dimensionen müssen bei der Nanoindentierung deutlich mehr Störgrößen beachtet werden als bei normaler Härtemessung. So wird

beispielsweise die Abweichung der genutzten Spitze von der idealen Form mit Hilfe einer Referenzprobe bekannter Härte bestimmt. Ebenso wird der thermische Drift⁵ vor und nach der Belastung gemessen und aus der Messung herausgerechnet. Neben der Nanohärte wird häufig der E -Modul eines Materials durch Nanoindentierung bestimmt. Mit Hilfe der Methode von Oliver und Pharr [124] kann er aus der Steigung der Kraft-Verschiebungs-Kurve mit Hilfe der Spitzengeometrie und der Maximalkraft berechnet werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Nanoindentierungen an einzelnen Körnern von Stahl DP1 durchgeführt. Sie dienen der Bestimmung der Materialeigenschaften der einzelnen Phasen. Zusätzlich wurden Nanoindentierungen im Bereich des Übergangs von Martensit zu Ferrit zur Untersuchung der Eigenschaften des Grenzbereichs durchgeführt. Beide Messreihen wurden mit einer Cube-Corner Spitze in Kooperation mit dem *Lehrstuhl für Experimentelle Methodik der Werkstoffwissenschaften* der *Universität des Saarlandes* durchgeführt. Genauere Informationen hierzu finden sich in Kapitel 6.

⁵ Der Einfluss der Wärmedehnung der Probe und des Versuchsaufbaus auf die Messung der Verschiebung.

6

Auswertung der Nanoindentierung

In Kapitel 5.4 wurden die experimentellen Grundlagen der Nanoindentierung beschrieben. Im Folgenden werden die im Rahmen dieser Arbeit durch Nanoindentierung gewonnenen Ergebnisse dargestellt, ausgewertet und diskutiert. Dabei werden die Betrachtungen in eine Untersuchung gezielter Indents der einzelnen Phasenbereiche sowie eine Untersuchung des Grenzbereichs zwischen Ferrit und Martensit unterteilt.

6.1 Untersuchung der Einzelphasen

Die zur Simulation genutzten Materialparameter sind entscheidend für eine realitätsnahe Abbildung der Materialeigenschaften. Klassische makroskopische Werkstoffprüfung zur Bestimmung der Materialparameter ist an den einzelnen Phasen der betrachteten Mikrostrukturen aufgrund ihrer geringen Größe jedoch nicht möglich. Eine Möglichkeit der Ermittlung der Materialparameter ist die Erzeugung von zu den Einzelphasen analogen Proben [26]. Hierzu werden in einem aufwändigen Prozess durch veränderte Legierungszusammensetzung und veränderte Prozesskette zwei neue Stähle produziert. Ziel dabei ist die Erzeugung einer homogenen Mikrostruktur, welche bezüglich chemischer Zusammensetzung und strukturellem Aufbau jeweils einer der Phasen des Dual-

phasenstahls entspricht. Diese Analogproben können dann mittels klassischer Werkstoffprüfung untersucht werden und so die Eigenschaften der einzelnen Phasen bestimmt werden. Aufgrund des hohen Aufwands bei solch komplexen Produktionsbedingungen wie bei thermomechanisch gewalzten Blechen, wurde in dieser Arbeit auf eine Methode basierend auf Nanoindentierung nach Chen [34] zurückgegriffen.

Zu diesem Zweck wurden Nanoindentierungen der beiden Phasen des Dualphasenstahls, Ferrit und Martensit, in Kooperation mit dem *Lehrstuhl für Experimentelle Methodik der Werkstoffwissenschaften* durchgeführt. Die erhaltenen Messkurven sind in Abbildung 6.1 und Abbildung 6.2 dargestellt. Es wurden jeweils vier verschiedene Martensitkörner und Ferritkörner mit einem Cube-Corner-Indenter kraftgesteuert bis 3000 μN indentiert. Ferrit zeigt dabei seiner homogenen Struktur entsprechend eine vergleichsweise geringe Streuung der resultierenden Eindringtiefe. Das steht im Gegensatz zum harten Martensit, der aufgrund seines heterogenen Aufbaus bei niedrigerer Eindringtiefe eine höhere Streuung zeigt als Ferrit. Zur weiteren Verwendung wird für beide Phasen jeweils der Mittelwert aller Indents betrachtet. Aufgrund der Mittelung über mehrere Körner wird die Anisotropie der Materialeigenschaften einzelner Körner in Abhängigkeit der Kornorientierung nicht weiter betrachtet. Der Mittelwert der Kraft-Verschiebungs-Kurven stellt somit die quasiisotropen Eigenschaften der Phasen dar.

Zur Bestimmung der Materialparameter der Einzelphasen wird auf eine Parameteridentifikation mittels inverser Methoden zurückgegriffen [22, 163]. Dabei wird kein analytischer Zusammenhang zwischen gesuchten Materialparametern und Messdaten hergeleitet und angepasst, sondern die Parameter werden mit Hilfe von FEM Simulationen bestimmt. Der Prozess der Nanoindentierung wird als Modell im kommerziellen FEM Programm *SIMULIA ABAQUS FEA*[®] nachgebildet, weil das im Rest der Arbeit genutzte Programm *deal.II* nicht auf Mehrkörper-Kontaktprobleme ausgelegt ist. Da im Rahmen der Parameteridentifikation eine Vielzahl an Simulationen durchgeführt werden, ist das *ABAQUS*-Modell zweidimensional erstellt. Die dreidimensionale Cube-Corner Spitze wird dabei als flächengleicher rotationssymmetrischer Kegelschnitt betrachtet. Der Öffnungswinkel des Kegels wird so gewählt, dass das Verhältnis von Kontaktfläche zu Eindringtiefe des Kegels dem der Cube-Corner Spitze entspricht. Durch diese Vereinfachung sinkt die Simulationsdauer von über 30

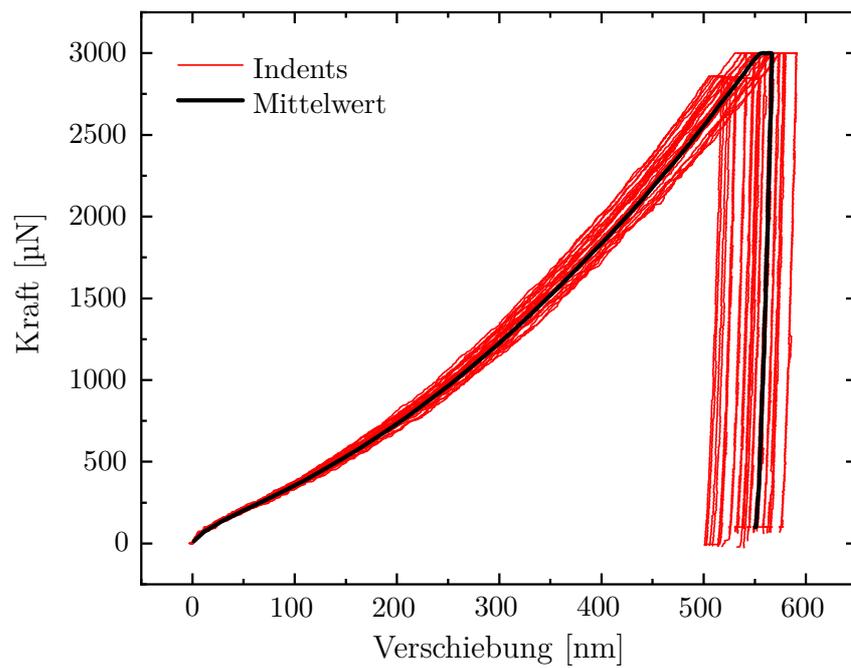


Abbildung 6.1: Kraft-Verschiebungs-Kurven der Ferritphase von DP1 bei Nanoindentierung.

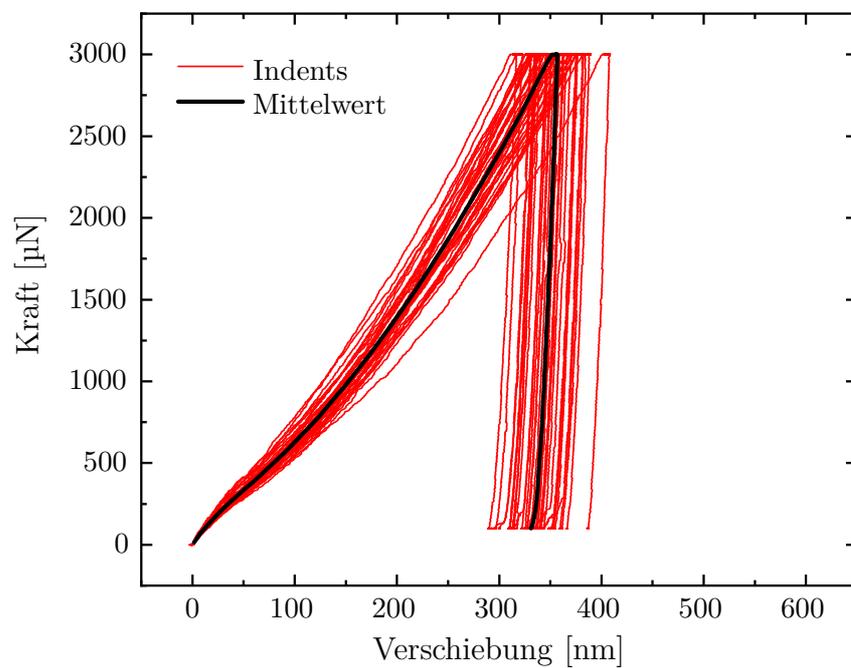


Abbildung 6.2: Kraft-Verschiebungs-Kurven der Martensitphase von DP1 bei Nanoindentierung.

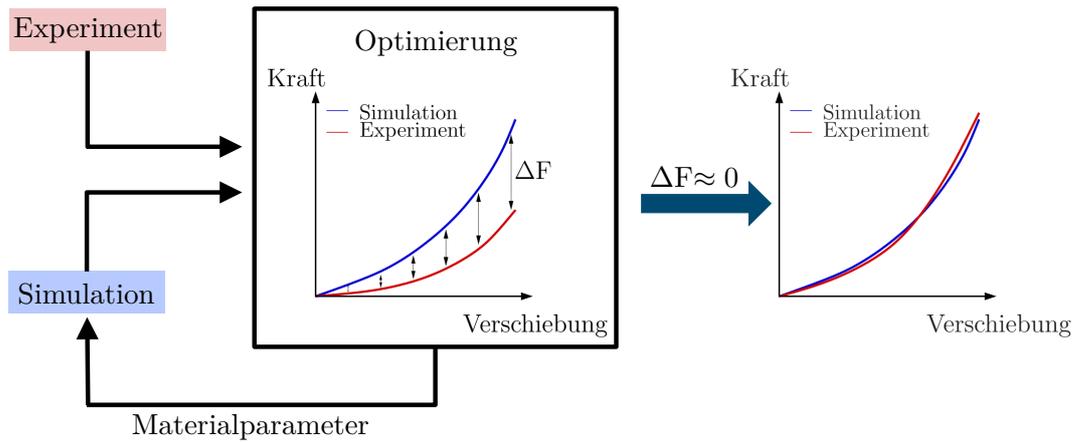


Abbildung 6.3: Ablauf der Parameteridentifikation mittels inverser Methoden.

Minuten auf unter eine Minute¹. In der Simulation wird die Verschiebung des Indenters als Randbedingung aufgebracht und die resultierende Kraft berechnet. Des Weiteren wird die Annahme getroffen, dass die Deformationszone der Nanoindentierungen im Mittel ausschließlich in der jeweils betrachteten Phase liegt. Dadurch können im Simulationsmodell Ferrit und Martensit jeweils als ein homogenes, einphasiges Material betrachtet werden.

Mit Hilfe dieses Simulationsmodells kann dann eine inverse Rechnung zur Parameteridentifikation durchgeführt werden (Abbildung 6.3). Ausgehend von einem Start-Parametersatz wird eine Simulation durchgeführt und die resultierende Zielgröße, hier die Kraft-Verschiebungs-Kurve, mit der Zielgröße aus dem Experiment abgeglichen. Prinzipiell kann ein beliebiger Startwert genutzt werden, zur Beschleunigung der Parameteridentifikation sollte jedoch möglichst ein sinnvoller Startwert im Bereich des erwarteten Endwerts gewählt werden. Bei dem Vergleich wird zur Quantifizierung der Abweichung zwischen Experiment und Simulation ein Fitmaß ΔF definiert. In der Arbeit wird der normierte mittlere absolute Fehler als Fitmaß genutzt

$$\Delta F = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\|F_i^{sim} - F_i^{exp}\|}{\|F_i^m\|}, \quad (6.1)$$

wobei n die Anzahl an Messpunkten ist, F^{sim} der Kraftwert aus der Simulation, F^{exp} der Kraftwert aus dem Experiment und F^m ihr Mittelwert. Basierend auf der Höhe des Fitwerts und den aktuell gewählten Parametern wird dann mit Hilfe eines Optimierungsalgorithmus ein neuer, angepasster Parame-

¹ Rechnung mit einem CPU-Kern auf einer Workstation mit *Intel Xeon E5-2630v3* CPU.

tersatz bestimmt. Hierzu wird ein in *MATLAB* implementierter Nelder-Mead-Simplex Algorithmus [88, 97, 119] verwendet. Dieser Prozess wird iterativ so lange durchgeführt, bis ein Parametersatz gefunden ist, für den der Fitwert hinreichend nah bei Null liegt. Für die Experimente an DP1 ergeben sich die Materialparameter in Tabelle 6.1.

Tabelle 6.1: Materialparameter der Phasen von DP1.

	Ferrit	Martensit
μ [GPa]	89,5	91,7
λ [GPa]	173,7	141,0
K [GPa]	1,70	2,96
σ_{F0} [MPa]	401	1081

Die entsprechenden Kraft-Verschiebungs-Kurven der Nanoindentierung sind in Abbildung 6.4 für die Belastungsphase dargestellt. Beide Simulationen treffen den Mittelwert der jeweiligen experimentell ermittelten Kurven sehr gut. Der so bestimmte Satz an Materialparametern für die Einzelphasen kann dann in der mikrostrukturbasierten Simulation des Zugversuchs als Materialparameter

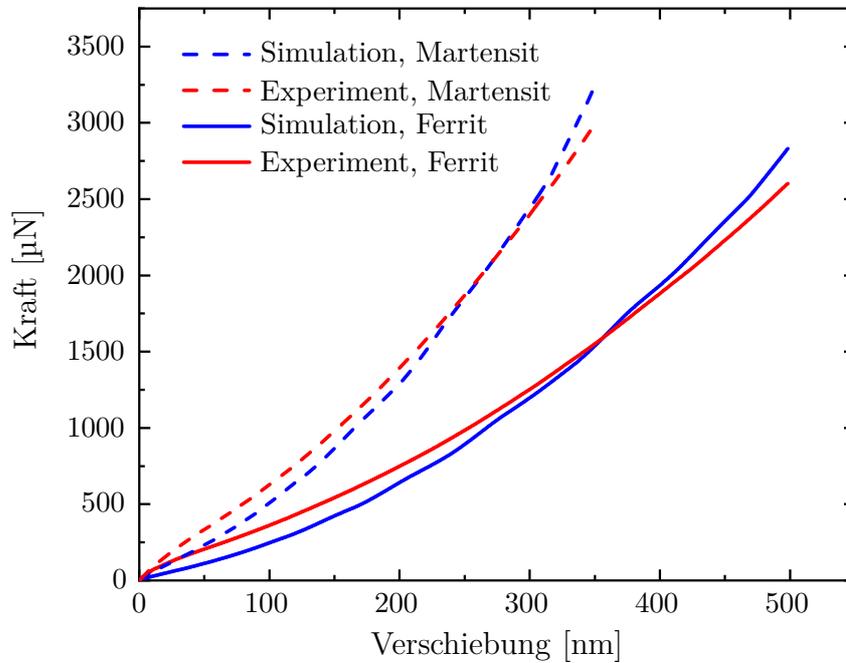


Abbildung 6.4: Vergleich des Mittelwerts der experimentellen Nanoindentierungen mit dem optimierten Simulationsergebnis für Ferrit und Martensit.

der beiden Phasen des Dualphasenstahls verwendet werden. Die mikrostrukturbasierte Simulation kann unter Verwendung dieser Materialparameter den Zugversuch realitätsnah abbilden (siehe Kapitel 8.2).

Der Vollständigkeit halber sei angemerkt, dass der hier verwendete Ablauf der Parameteridentifikation nicht allgemeingültig ist. Ein Cube-Corner-Indenter ist aufgrund seiner Tetraederform selbstähnlich. Daraus resultiert, dass das Deformationsfeld um die Indenterspitze, von Variationen durch Kantenverrundung abgesehen, während der Indentierung lediglich größer wird. Die Dehnungsverteilung selbst bleibt gleich. Dadurch sind selbstähnliche Indenterspitzen für die hier beschriebene Art der Parameteridentifikation weniger gut geeignet als nicht-selbstähnliche Formen wie sphärische Indenter, da das konstante Deformationsfeld zu wenige Informationen für eine eindeutige Bestimmung der Parameter liefert [34, 36, 37]. Somit können mehrere unterschiedliche Parametersätze die Kraft-Verschiebungs-Kurve nachbilden. Durch die Auswertung weiterer Maße, wie beispielsweise die Geometrie des pile-up/sink-in nach Vermessung des Indents, können zusätzliche Informationen zur Parameteridentifikation gewonnen werden. Dies ist jedoch mit einem hohen zusätzlichen Messaufwand verbunden. Der beschriebene Effekt kann hier aber vernachlässigt werden, da zum einen der Parameterraum schon auf für Stahl physikalisch sinnvolle Parameter eingegrenzt wurde und zum anderen die hier bestimmten Materialparameter auch in der völlig anderen Deformationssituation des Zugversuchs ein realitätsnahes Ergebnis liefern.

6.2 Untersuchung der Grenzschicht

Martensit-Ferrit

Die in Kapitel 5.1 beschriebene Volumendehnung bei der Umwandlung von Austenit zu Martensit während der Herstellung impliziert eine Schicht hoher plastischer Deformation im Ferrit unmittelbar um die Martensitphase herum. Zur Untersuchung dieser Grenzschicht wurde neben der Untersuchung der Materialeigenschaften der einzelnen Phasen des Dualphasenstahls auch die Grenzschicht zwischen Martensit und Ferrit mit Hilfe von Nanoindentierung untersucht. Zu diesem Zweck wurde der Übergang von Martensit zu Ferrit beispielhaft an einer Probe von DP1 abgerastert. Das Raster besteht aus 10 Reihen mit je 18 Indentierungen auf einer Fläche von etwa $20 \times 20 \mu\text{m}^2$. Es wurde

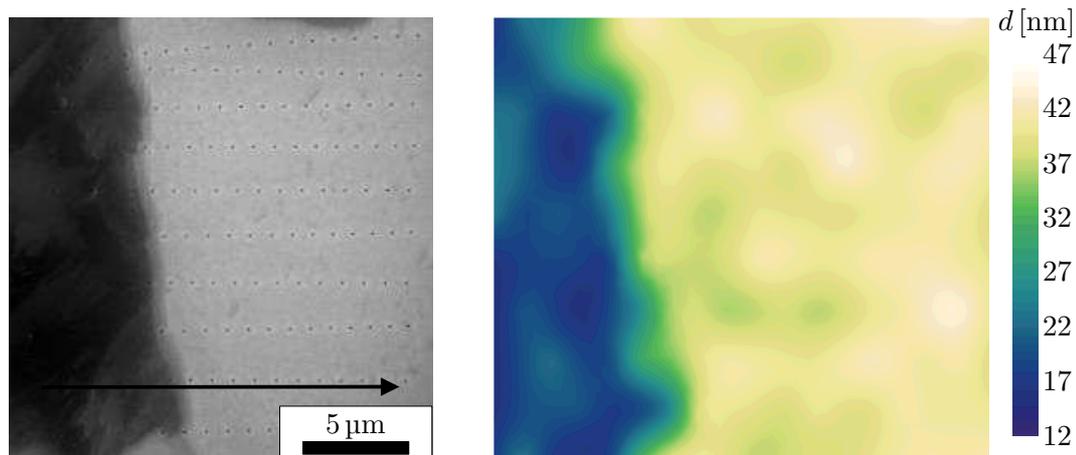


Abbildung 6.5: Topographie des Grenzbereichs zwischen Martensit und Ferrit (links) und zugehörige Verteilung der Indenttiefe (rechts). Ferrit ist links hellgrau dargestellt, Martensit dunkelgrau. Die Richtung der Auswertung der Linien des Rasters ist als Pfeil eingezeichnet.

wiederum ein Cube-Corner-Indenter genutzt. Zur Erzeugung eines engmaschigen Rasters mit entsprechend kleinen Eindrücken wurde nur bis zu einer Kraft von $180 \mu\text{N}$ kraftgesteuert indentiert. Abbildung 6.5 zeigt das Indentraster im Ferrit-Martensit-Grenzbereich sowie die Auswertung des Rasters bezüglich Indenttiefe. Im Bereich des harten Martensit liegt eine niedrige Indenttiefe vor, im Bereich des weichen Ferrits eine deutlich höhere Indenttiefe. Der Übergang zwischen beiden Phasen wird in der Verteilung der Indenttiefe nicht durch eine klare Kante markiert, sondern durch einen Bereich eines kontinuierlichen Übergangs. Bei Auswertung der einzelnen Reihen des Rasters in horizontaler Richtung (Abbildung 6.6) kann der Verlauf in der Grenzschicht als gleichmäßiger sigmoidaler Übergang über etwa $3,5 \mu\text{m}$ von der niedrigen Indenttiefe von etwa $19 \mu\text{m}$ im Martensit zur hohen Tiefe von etwa $41 \mu\text{m}$ im Ferrit angenähert werden. Der hier bestimmte Härteverlauf kann anhand der Indentierungen noch nicht eindeutig plastischer Deformation aufgrund der Austenit-Martensit-Transformation zugeordnet werden. Theoretisch könnten auch andere Effekte, wie beispielsweise Kohlenstoff-Diffusion vom Martensit in den Ferrit hinein, einen solchen Härteverlauf erklären. Um dies zu untersuchen wurden in Kooperation mit der *AG der Dillinger Hüttenwerke* im Rastertransmissionselektronenmikroskop (STEM, engl. scanning transmission electron microscope) Bilder des Übergangs von Martensit zu Ferrit in DP1 angefertigt (Abbildung 6.7). In den Aufnahmen finden sich im Ferrit um den Martensit herum eine Vielzahl feiner Linien. Diese Linien stellen Versetzungen dar [103]. Die hohe Anzahl an

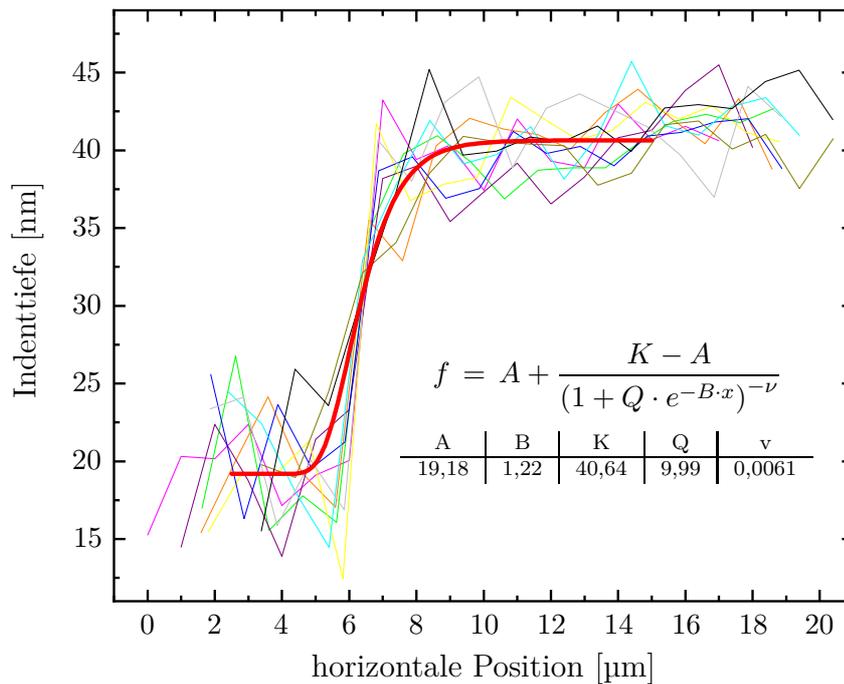


Abbildung 6.6: Verlauf der Indenttiefe für die Reihen des Rasters mit Sigmoid-Fit in rot und der zugehörigen Fitfunktion. Aufgrund des schrägen Verlaufs der Grenzfläche sind die Kurven horizontal ausgerichtet.

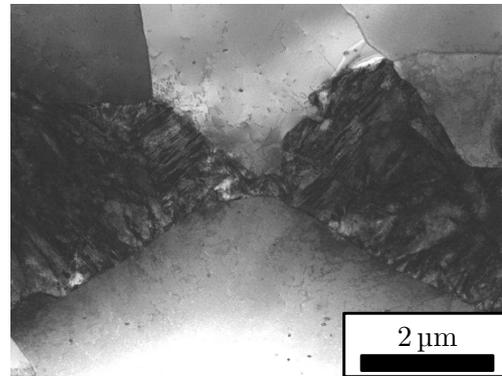
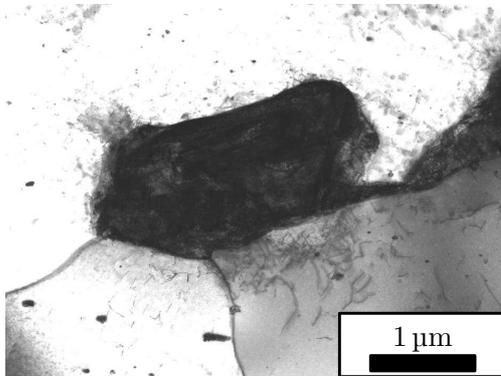


Abbildung 6.7: Aufnahme des Grenzbereichs zwischen Martensit und Ferrit im STEM. Martensit ist dunkelgrau dargestellt, Ferrit hellgrau. Versetzungen sind als feine graue Linien im Ferrit um den Martensit herum zu erkennen.

Versetzungen im Ferrit nahe am Martensit im Vergleich zu anderen Bereichen der Ferritphase entspricht einer hohen Versetzungsdichte in der Grenzschicht. Da Versetzungen ein Zeichen plastischer Deformation sind, ist dies ein Beleg für die plastische Deformation der Ferrit-Martensit-Grenzschicht bei Dualphasenstahl im makroskopisch unbelasteten Produktionszustand. Die mit Plastizität

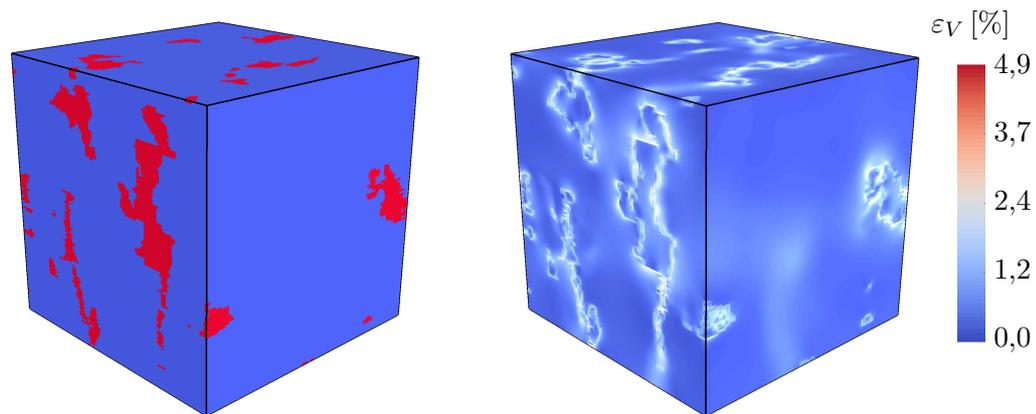


Abbildung 6.8: Verteilung von Martensit (rot) und Ferrit (blau) (links) mit zugehöriger Dehnungsverteilung nach Aufbringen der Transformationsdehnung (rechts).

einhergehende Verfestigung erklärt den im Härteraster erkennbaren Härteverlauf in der Grenzschicht. Somit belegen die beiden Untersuchungen gemeinsam, dass die Austenit-Martensit-Transformation im Dualphasenstahl die um Martensit herum liegenden Ferritbereiche verfestigt.

Dieses Verhalten wird in der Simulation durch Aufbringen der Transformationsdehnung nachgebildet. In einem der makroskopischen Belastung vorgeschalteten Schritt wird hierzu auf die Martensitbereiche der Mikrostruktur eine Volumendehnung von 3,5% als

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{3,5\%}{3} \mathbf{I} \quad (6.2)$$

aufgebracht. Der sich einstellende Spannungs-Dehnungs-Zustand wird berechnet und die resultierende Verfestigung wird zwischengespeichert. Ein solcher Dehnungszustand, ausgedrückt in der Vergleichsdehnung nach von Mises ε_V , ist in Abbildung 6.8 dargestellt. Diese Verfestigung sorgt in der anschließenden Simulation des Zugversuchs für einen leichten Anstieg der Fließspannung im Material und bildet somit den oben beschriebenen Härteverlauf ab.

7

Bestimmung des repräsentativen Volumenelements

Die Bestimmung der Größe des repräsentativen Volumenelements ist ein entscheidender Punkt bei der Simulation auf Basis realer Mikrostrukturdaten¹. Das RVE ist im Kontext dieser Arbeit der Bereich der Mikrostruktur, der gerade so groß ist, dass er alle relevanten Informationen der Mikrostruktur enthält [66, 82, 167] (siehe Kapitel 2.1). Bei Simulationen auf Basis kleinerer Ausschnitte der Mikrostruktur kann das makroskopische, reale Verhalten des Materials aufgrund fehlender Strukturinformation nicht abgebildet werden. Theoretisch können zwar auch kleinere Ausschnitte als das RVE die mechanischen Eigenschaften des Materials abbilden, dies basiert jedoch lediglich auf zufälliger Streuung der Struktureigenschaften. Bei Entnahme des zu kleinen Ausschnitts an einer anderen Stelle des Materials können die mechanischen Eigenschaften ebenso auch deutlich über- oder unterschätzt werden. Erst ab der Größe des RVE liefern Strukturausschnitte in der Simulation gleich bleibende mechanische Eigenschaften. Die Bestimmung von dreidimensionalen Mikrostrukturen ist jedoch komplex und zeitaufwändig und die Rechendauer der Simulation steigt mit wachsender Strukturgröße stark an. Daher ist die Simu-

¹ Die Größe des RVE ist ebenso bei der experimentellen Charakterisierung von Materialien von Bedeutung. Dieser Effekt wird bei der experimentellen Bestimmung der RVE-Größe in dieser Arbeit genutzt.

lation an Strukturausschnitten, die deutlich größer als das RVE sind, ebenso nicht wünschenswert². Aus diesem Grund wird in der vorliegenden Arbeit eine experimentelle Methode zur Bestimmung der RVE-Größe vor der Gewinnung der Mikrostrukturdaten entwickelt. Sie wird im Folgenden beschrieben und bezüglich der mechanischen Eigenschaften und der Geometrieparameter validiert.

7.1 Experimentelle Bestimmung der RVE-Größe

Die einfachste Methode zur Bestimmung der Größe des RVE ist Versuch-und-Irrtum. Mehrere Tomographien gleicher Größe werden angefertigt und ihre mechanischen Eigenschaften in der Simulation bestimmt. Alternativ können auch die Geometrieparameter der Struktur als Vergleichsmaß genutzt werden, unter der Annahme, dass die RVE-Größen bezüglich der Geometrie und bezüglich der mechanischen Eigenschaften gleich sind. Liegen die Eigenschaften auf annähernd gleichem Niveau, kann von einer RVE-Größe unterhalb der Größe der Tomographie ausgegangen werden. Zeigen sich jedoch deutlich unterschiedliche Eigenschaften, liegt die Größe des RVE oberhalb der Tomographiegröße. In diesem Fall müssen weitere, größere Tomographien angefertigt werden, um eine gesichert repräsentative Mikrostruktur als Simulationsgrundlage zu erhalten. Neben dem Vergleich mehrerer Tomographien untereinander, kann eine Tomographie alternativ auch an Geometrieparametern eines hinreichend großen zweidimensionalen Geometrieausschnitts abgeglichen werden [26], wobei hier jedoch keine dreidimensionalen Geometrieparameter wie die Krümmungsdichte zum Vergleich genutzt werden können. Allen Versuch-und-Irrtum-Methoden gemein ist das Problem, dass vor der Anfertigung der Tomographie keine Informationen zur RVE-Größe vorliegen. Dadurch werden leicht entweder zu große oder zu kleine Tomographien angefertigt. Beides führt zu einem unerwünscht hohen experimentellen Aufwand, da entweder deutlich mehr Material als für das RVE nötig untersucht wird oder zusätzliche Tomographien angefertigt werden müssen.

In dieser Arbeit wurde eine andere Methode der Bestimmung der RVE-Größe entwickelt, um die Nachteile von Versuch-und-Irrtum-Methoden zu vermei-

² Bei Betrachtung sehr großer Bereiche können die Eigenschaften durch makroskopische Inhomogenitäten, z. B. zwischen Oberfläche und Kern eines Grobblechs, wieder zu variieren beginnen [7]. Solche Inhomogenitäten sind in dieser Arbeit jedoch nicht relevant.

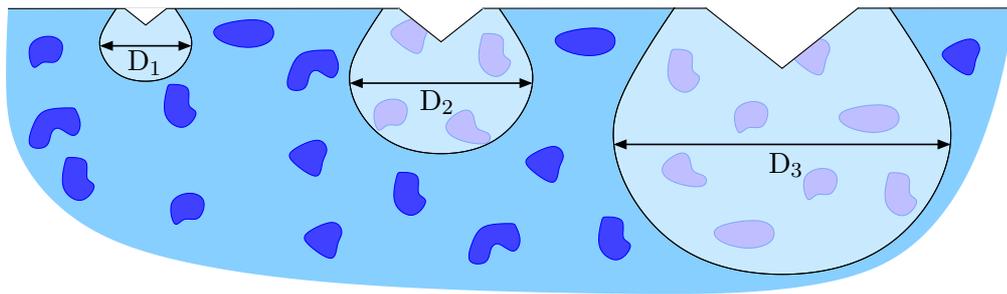


Abbildung 7.1: Schematische Darstellung dreier Härteeindrücke und ihrer Einflusszonen. Die Größe der Einflusszone D liegt links deutlich unter der RVE-Größe, mittig im Bereich der RVE-Größe und rechts deutlich darüber.

den. Die Basis der Größenbestimmung sind Härtemessungen nach Vickers. Das Funktionsprinzip ist in Abbildung 7.1 dargestellt. Jeder Härteeindruck hat eine bestimmte Einflusszone, die durch den Eindruck deformiert wird. Ein sehr kleiner Härteeindruck hat entsprechend eine sehr kleine Einflusszone. Dadurch ist es möglich, dass die Einflusszone gänzlich in einem rein ferritischen Bereich oder in einem überwiegend martensitischen Bereich der Mikrostruktur liegt. Aufgrund dessen zeigen sehr kleine Härteeindrücke eine hohe Streuung. Ab einer bestimmten Eindruckgröße ist die Einflusszone gerade so groß, dass sie die Größe eines RVE einnimmt. Ab dieser Eindruckgröße sinkt die Streuung der Härtewerte stark ab, da jederzeit ein repräsentatives Strukturvolumen untersucht wird. Insbesondere sinkt die Streuung für noch größere Eindrücke nicht mehr weiter, da eine größere Einflusszone keine neuen Mikrostrukturinformationen enthält. Basierend auf dieser Hypothese wurden bei der *AG der Dillinger Hüttenwerke* insgesamt 121 Härtemessungen in zehn Härteklassen von $HV0,05$ bis $HV30$ am Querschleif³ von DP1 durchgeführt. Tabelle 7.1 zeigt die Anzahl der Messungen in jeder Härteklasse. Die Anzahl wurde dabei so gewählt, dass in jeder Klasse eine vergleichbare Fläche der Probe untersucht wurde.

Tabelle 7.1: Anzahl der Härtemessungen jeder Härteklasse.

Härteklasse	0,05	0,1	0,2	0,5	1	3	5	10	20	30
Anzahl	36	25	16	9	16	9	4	4	1	1

In Abbildung 7.2 sind der mittlere Härtewert und die Streuung der verschiedenen Härteklassen dargestellt. Wie erwartet, zeigen die niedrigen Härteklassen

³ Schliffebene aufgespannt durch die Querrichtung und die Normalenrichtung.

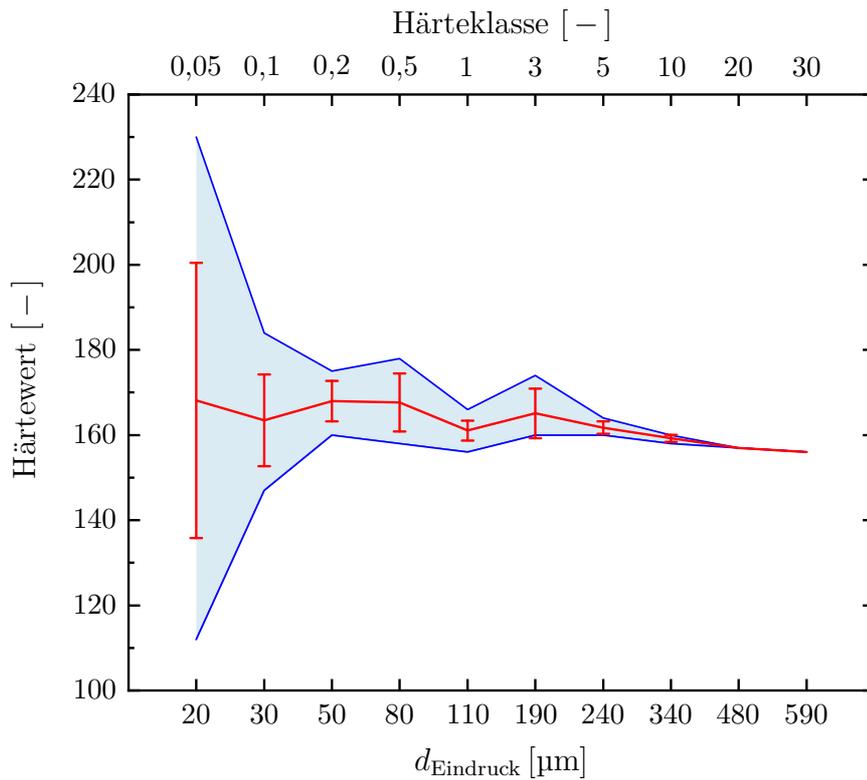


Abbildung 7.2: Härteverteilung der verschiedenen Härteklassen. In rot sind der Mittelwert und die Standardabweichung dargestellt, in blau die Streubreite vom minimalen zum maximalen Härteverlauf.

$HV0,05$ und $HV0,1$ mit entsprechend kleinen Härteeindrücken eine sehr hohe Streuung der Härteverläufe. Ab $HV0,2$ fällt die Streubreite stark ab. Für höhere Härteklassen bleibt die Streuung auf dem gleichen Niveau. Folglich liegt die RVE-Größe für die untersuchten Dualphasenstähle im Bereich der Einflusszone eines $HV0,2$ -Eindrucks. Das weitere Absinken der Streuung ab $HV5$ ist lediglich auf eine verminderte Eindruckanzahl aufgrund der hohen Größe der Eindrücke zurückzuführen. Ein $HV0,2$ -Eindruck entspricht bei der vorliegenden mittleren Härte einem Eindruckdurchmesser von etwa $d_{\text{Eindruck}} = 50 \mu\text{m}$. Die Größe der Einflusszone ist jedoch nicht klar definiert. Einen Anhaltspunkt bietet der minimale Abstand zweier Härteeindrücke nach Norm DIN EN ISO 6507 [40]. Damit sich die Einflusszonen der beiden Eindrücke gesichert nicht mehr überschneiden, beträgt dieser Abstand den dreifachen Eindruckdurchmesser, $d_{\text{Norm}} = 3 d_{\text{Eindruck}}$. Die Größe der Einflusszone liegt somit bei einer Kantenlänge von minimal dem einfachen Eindruckdurchmesser und maximal dem dreifachen Eindruckdurchmesser.

Im Rahmen der Arbeit wurde das Verfahren zusätzlich analog am Längsschliff⁴ durchgeführt. Hier zeigt sich schon bei der kleinsten Härteklasse ein Plateau. Grund hierfür ist das stark anisotrope Achsenverhältnis der gewalzten Martensitbereiche. Um eine sichere RVE-Größenbestimmung zu gewährleisten, wird im Folgenden mit der höheren RVE-Größe entsprechend der Messung am Querschliff gearbeitet. Das RVE wird dabei als würfelförmig vorausgesetzt, um in der Simulation vergleichbare Zugversuche in allen drei Raumrichtungen zu ermöglichen, auch wenn die Härtemessungen am Längsschliff eine Quaderform andeuten.

7.2 Validierung

Zur Validierung der experimentellen RVE-Größenbestimmung wurde die in Kapitel 5.3 dargestellte Tomographie von DP1 angefertigt. Ihre Größe liegt in jeder Raumrichtung über der bestimmten maximalen RVE-Größe von 150 μm Kantenlänge. Die Tomographie wird in Blöcke gleicher Größe zerteilt, und es werden Zugversuche an den einzelnen Blöcken simuliert⁵. Das Verfahren wird für Blöcke mit einer Kantenlänge etwa im Bereich des einfachen, zweifachen und dreifachen $HV_{0,2}$ -Eindruckdurchmessers durchgeführt. Die Größenklassen decken somit den vorher bestimmten RVE-Größenbereich ab. Ihre Ausdehnung ist in Abbildung 7.3 in Relation zu einem zweidimensionalen Schnitt der Tomographie dargestellt. Die Kantenlängen liegen aus Gründen einer effizienten Vernetzbarkeit⁶ bei 52 μm , 105 μm und 157 μm statt bei 50 μm , 100 μm und 150 μm . Die Tomographie kann so in 63 kleine Blöcke, 16 mittlere Blöcke und 3 große Blöcke zerteilt werden. Basierend auf den simulierten Zugversuchen wird für jeden Block der mittlere Spannungswert bei 5% Gesamtdehnung $R_{t5,0}$ bestimmt. Die Streubreite von $R_{t5,0}$ innerhalb einer Größenklasse wird dann in Abhängigkeit der Blockgröße betrachtet. Abbildung 7.4 zeigt für $R_{t5,0}$ einen ähnlichen Verlauf wie Abbildung 7.2 für die Härte. Die Streubreite der Härte sinkt zwar zu Beginn deutlich schneller ab, jedoch streut die Härte insgesamt auch stärker als $R_{t5,0}$. Die Streubreite sinkt von etwa 50 MPa für 52 μm Kantenlänge auf unter 10 MPa für 157 μm Kantenlänge, was im Bereich der Streuung

⁴ Schliffebene aufgespannt durch die Walzrichtung und die Normalenrichtung.

⁵ Hier wird lediglich der Einfluss der Mikrostrukturgeometrie auf die Simulation betrachtet, die eigentliche Validierung und Verifizierung des Simulationsmodells folgt in Kapitel 8.

⁶ Aufgrund der zugrunde liegenden Datenstruktur sind Netze mit Kantenlängen von $(x \cdot 2^y)$ Elementen, mit möglichst niedrigem x , besser parallelisierbar.

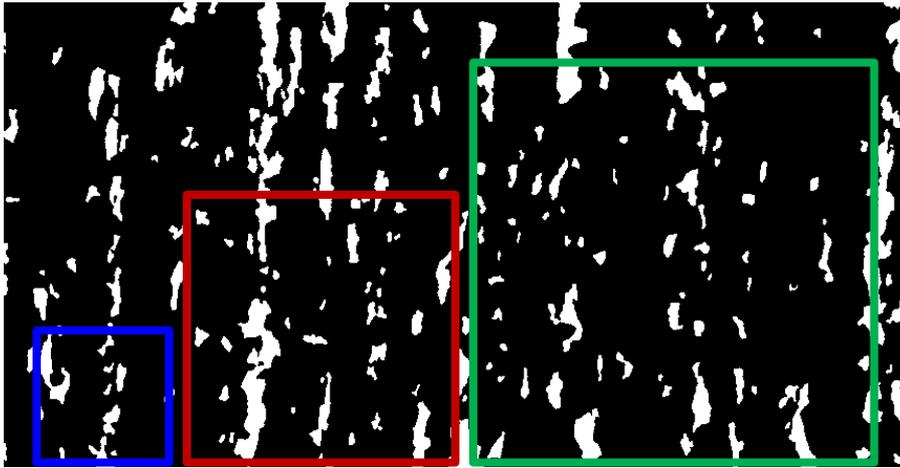


Abbildung 7.3: Zweidimensionale Darstellung der drei betrachteten Blockgrößen im Vergleich zur Tomographie.

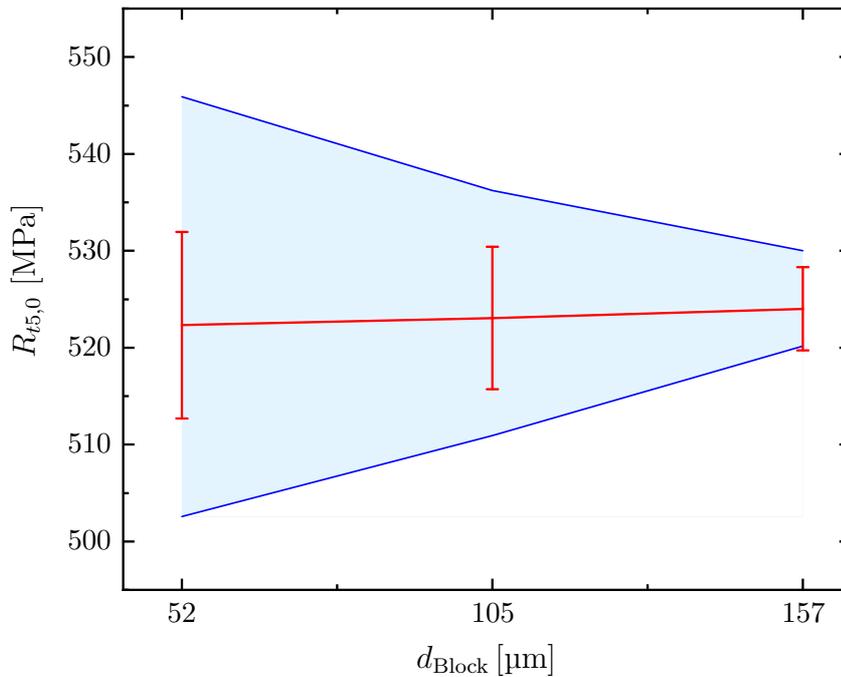


Abbildung 7.4: Verteilung von $R_{t5,0}$ der verschiedenen Blockgrößen. In rot sind der Mittelwert und die Standardabweichung dargestellt, in blau die Streubreite.

realer Zugversuche liegt. Abbildung 7.4 belegt somit die Annahme, dass die RVE-Größe in etwa dem dreifachen Durchmesser des Härteeindrucks, für den die Streuung hinreichend niedrig wird, entspricht. Der Stahl DP1 besitzt folglich eine RVE-Kantenlänge von etwa $150 \mu\text{m}$. Dieser Wert ist unabhängig von der Zugrichtung.

Zur weiteren Validierung wurde nach der Erstellung der Tomographie am *Lehrstuhl für Funktionswerkstoffe* das RVE auch bezüglich der geometrischen Parameter der Mikrostruktur bestimmt [51, 117]. Hierzu wurden die Volumendichte, die Oberflächendichte und die Teilchendichte (Kapitel 5.3) sowie die Eulerzahl-dichte [122] bestimmt. Analog zu obigem Vorgehen wurde die Tomographie in Blöcke mit Kantenlängen zwischen 50 μm und 150 μm zerteilt, und es wurden der Mittelwert sowie die Streuung der Parameter für die einzelnen Größenklassen betrachtet. Dies lieferte eine RVE-Kantenlänge von etwa 130 μm . Somit liegt das RVE bezüglich der mechanischen Eigenschaften und das RVE bezüglich der geometrischen Eigenschaften im gleichen Größenbereich und im Bereich des experimentell durch die Härtemessung bestimmten Werts.

Abbildung 7.4 zeigt neben der Validierung der RVE-Größenbestimmung eine weitere Eigenschaft der Mikrostruktur. Der Ensemblemittelwert⁷ der drei Größenklassen bleibt auf annähernd gleichem Niveau. Demzufolge ist die untersuchte Struktur ergodisch. Im hier betrachteten Kontext bedeutet Ergodizität die Gleichheit des Ensemblemittelwerts einer Eigenschaft über eine hinreichend große Anzahl nicht repräsentativ kleiner Ausschnitte mit dem räumlichen Mittelwert⁸ [125]. Dies führt zu relevanten Vorteilen für die Simulation und auch für die zukünftige Erstellung von Tomographien. Zum einen sinkt der benötigte Arbeitsspeicher deutlich bei sequentieller Simulation mehrerer kleiner Strukturen statt einer großen Struktur, zum anderen sinkt auch der experimentelle Aufwand. Aufgrund der Ergodizität muss nicht zwangsläufig ein zusammenhängender Block in RVE-Größe tomographiert werden. Ein Volumen, das hinreichend viele kleinere Blöcke enthält, ist ausreichend. Beispielsweise bietet sich hier eine plattenförmige Tomographie an, die in der Ebene größer als das RVE ist, in Dickenrichtung aber kleiner, da eine niedrigere Anzahl an Schlibfbildern den Aufwand zur Erstellung der Tomographie senkt. Um dies zu untersuchen, wird die Tomographie von DP1 in sechs Gruppen zerteilt, je drei plattenförmige Quader mit einer Kantenlänge von etwa 175 $\mu\text{m} \times 380 \mu\text{m} \times 58 \mu\text{m}$ in Walzrichtung und Normalenrichtung (Abbildung 7.5). Die Platten werden wiederum in Blöcke von 52 μm Kantenlänge zerteilt und die Blöcke wie zuvor in der Simulation untersucht. Werden die Ensemblemittelwerte der 52 μm -Blöcke jeder Platte gebildet, ergeben sich die in Tabelle 7.2 dargestellten Werte für $R_{t5,0}$.

⁷ Der Mittelwert eines Parameters über alle Elemente einer definierten Gruppe.

⁸ Der Mittelwert eines Parameters über ein repräsentativ großes Volumen.

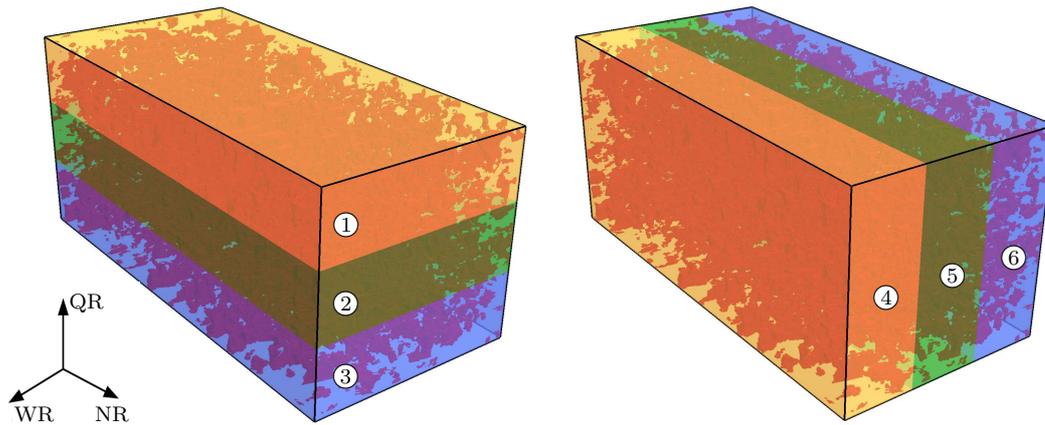


Abbildung 7.5: Darstellung sechs plattenförmiger Unterteilungen von DP1.

Tabelle 7.2: Mittlerer $R_{t5,0}$ der 157 μm -Blöcke im Vergleich zu den Mittelwerten verschiedener 52 μm -Ensembles. Als 52 μm -Ensemble betrachtet werden die Platten aus Abbildung 7.5 sowie die gesamte Tomographie.

	$R_{t5,0}$ [MPa]
157 μm -Blöcke	524
52 μm -Blöcke, gesamt	522
52 μm -Blöcke, Platte 1	528
52 μm -Blöcke, Platte 2	521
52 μm -Blöcke, Platte 3	518
52 μm -Blöcke, Platte 4	522
52 μm -Blöcke, Platte 5	523
52 μm -Blöcke, Platte 6	521

Die einzelnen Platten enthalten jeweils kein vollständiges RVE, ihr Volumen entspricht jedoch etwa dem eines RVE. Die Ensembledittelwerte der aus den Platten gebildeten kleineren Ausschnitte liegen mit einer Standardabweichung von 2,98 MPa um den RVE-Wert verteilt. Das zeigt, dass zur repräsentativen Bestimmung der mechanischen Eigenschaften der tomographierte Mikrostrukturbereich nicht zwangsläufig in alle Raumrichtungen der RVE-Größe entsprechen muss. Für weitere Tomographien bietet dies die Möglichkeit einer starken Verringerung des experimentellen Aufwands. Der Aufwand zur Erstellung einer Tomographie ist maßgeblich von der Anzahl der anzufertigenden Schliffbilder abhängig. Den dargelegten Ergebnissen folgend ist es hier somit möglich, eine geringere Anzahl an Schliffbildern durch eine hinreichend große Fläche in der

Bildebene auszugleichen und so die Präparationszeit der Tomographie entsprechend zu senken.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die beschriebene experimentelle Methode der prospektiven RVE-Größenbestimmung in vollem Umfang funktioniert. Die bestimmte RVE-Größe konnte sowohl anhand der mechanischen Eigenschaften als auch mit Hilfe der Geometrieparameter validiert werden. Aufgrund der ermittelten Ergodizität der Mikrostruktur kann jedoch für die betrachteten Stähle bei weiteren Tomographien die Präparationszeit gesenkt werden, indem eine Größe gewählt wird, die in einer Raumrichtung unter der RVE-Größe liegt.

8

Ergebnisse der mechanischen Simulation

Im folgenden Kapitel wird das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Simulationsmodell analysiert sowie die erhaltenen Ergebnisse vorgestellt, validiert und verifiziert. Das Kapitel teilt sich in zwei Schwerpunkte auf. Zum einen werden die Ergebnisse der in Kapitel 4.4 eingeführten Datenreduktion beschrieben und diskutiert. Zum anderen werden die Eigenschaften des Simulationsmodells aufgezeigt, insbesondere das Modell an Experimenten validiert, der Einfluss des verwendeten Materialmodells erläutert und das Modell an einem alternativen FEM Programm verifiziert. In allen Fällen wird der Verlauf des Spannungs-Dehnungs-Diagramms als allgemeines Vergleichsmaß genutzt. Daneben dient der Spannungswert bei 5% Gesamtdehnung $R_{t5,0}$ gegebenenfalls zum Vergleich konkreter Werte und zur Bestimmung der relativen Abweichung. Zusätzlich werden teilweise auch lokale Spannungsverteilungen der Mikrostruktur untersucht.

8.1 Datenreduktion

Die Datenreduktion wird in drei Abschnitten untersucht. Zuerst wird ein Vergleich von Simulationen auf Basis der Mikrostruktur in Vollaufösung mit linearen und mit quadratischen Ansatzfunktionen durchgeführt. Ziel ist es, einen

validen Referenzwert für die folgende Verifikation zu bestimmen. Danach wird der Nutzen der implementierten Datenreduktionsmethoden bei der Reduktion von Rechendauer und Arbeitsspeicherauslastung bestimmt, und es wird die Qualität der Simulationen mit der Referenzsimulation abgeglichen. Zuletzt werden die Simulation mit Datenreduktion und die Simulation in Vollauflösung auf lokaler Ebene miteinander verglichen. Auch wenn in dieser Arbeit die mittlere Spannungs-Dehnungs-Kurve als primäres Vergleichsmaß vorgegeben ist, ist die lokale Betrachtung doch von Bedeutung, insbesondere bei der zukünftigen Übertragung der gewonnenen Erkenntnisse auf andere Simulationen.

8.1.1 Bestimmung der Referenzsimulation

Das Ziel dieser Arbeit ist nicht nur die realitätsnahe mikrostrukturbasierte Simulation von Dualphasenstählen, sondern auch eine möglichst effiziente Simulation. Eine FE-Simulation mit linearen Ansatzfunktionen zur Senkung der Anzahl an Freiheitsgraden ist somit naheliegend. Lineare Ansatzfunktionen neigen jedoch allgemein dazu, das Materialverhalten zu steif abzubilden, insbesondere neigen sie zu Locking-Effekten unter Schub. Daher wird ein Zugversuch an einer Mikrostruktur in Vollauflösung sowohl mit linearen als auch, im Sinne von p-refinement [6], mit quadratischen Ansatzfunktionen berechnet, um zu bestimmen, ob die Simulation mit linearen Ansatzfunktionen im Folgenden als Referenzsimulation dienen kann. Die Simulationen werden an einem beispielhaften Strukturausschnitt mit $52\ \mu\text{m}$ bzw. 128 Voxel Kantenlänge durchgeführt. Da eine solch große Struktur mit quadratischen Ansatzfunktionen nicht mehr mit der in der Arbeit genutzten Workstation mit $128\ \text{GB}$ Arbeitsspeicher simuliert werden kann, wurde für diese Simulation ein Großrechner am *Lehrstuhl für Sprach- und Signalverarbeitung der Universität des Saarlandes* (Prof. Dr. Dietrich Klakow) genutzt. Dabei ergab sich eine Arbeitsspeicherauslastung von etwa $320\ \text{GB}$. Die Simulationsdauer ist aufgrund der höheren Anzahl an Prozessorkernen des Großrechners nicht vergleichbar. Das resultierende Spannungs-Dehnungs-Diagramm der Simulation mit quadratischen Ansatzfunktionen ist in Abbildung 8.1 im Vergleich zur Simulation mit linearen Ansatzfunktionen dargestellt. Bei Betrachtung der Spannungs-Dehnungs-Diagramme zeigen die beiden Simulationen keinen relevanten Unterschied, die Abweichung bezüglich $R_{t5,0}$ beträgt lediglich $0,7\%$. Erst bei höheren Dehnungen beginnen die Kurven sehr leicht auseinanderzudriften, aber auch zum Ende des untersuchten

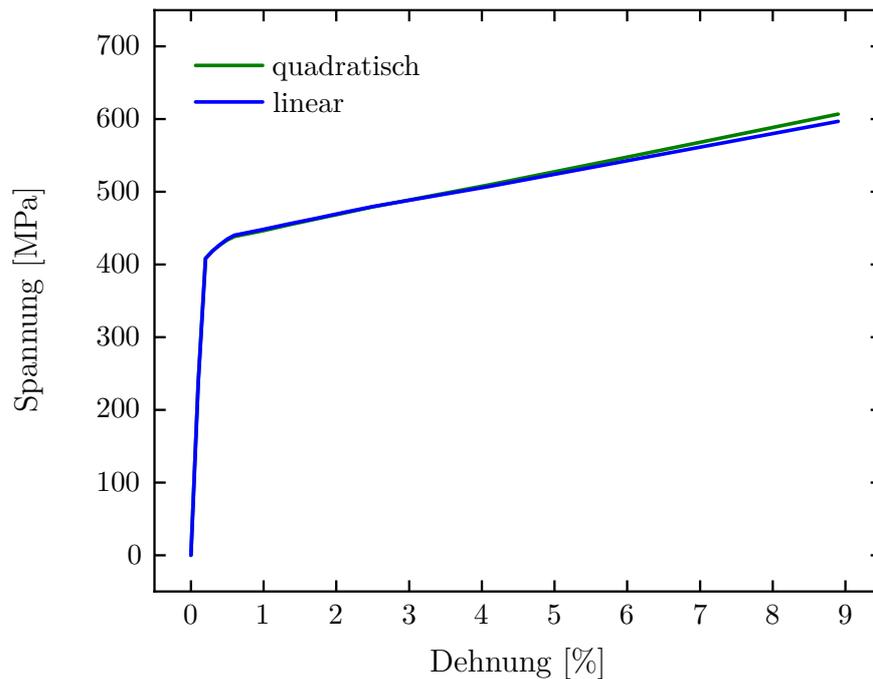


Abbildung 8.1: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für eine Simulation mit linearen und mit quadratischen Ansatzfunktionen.

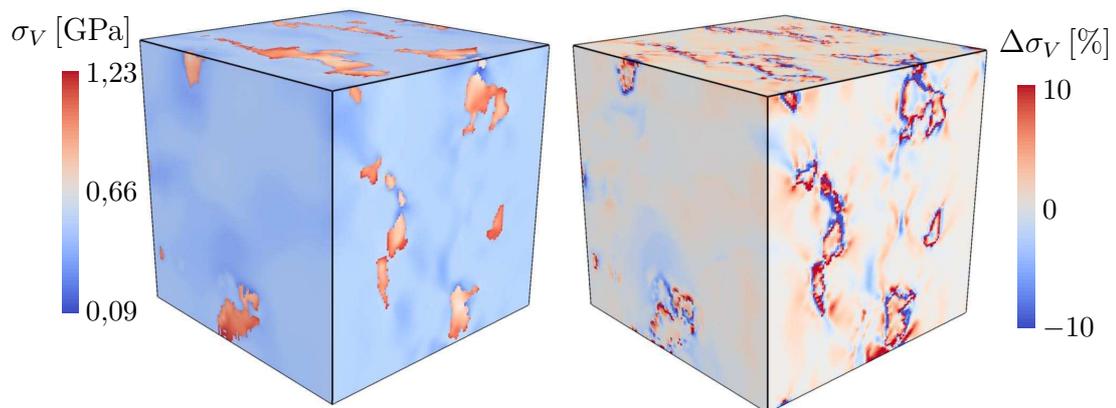


Abbildung 8.2: Darstellung der lokalen Verteilung der Vergleichsspannung nach von Mises für eine Simulation mit linearen Ansatzfunktionen (links) sowie der relativen Abweichung zur Spannungsverteilung einer Simulation mit quadratischen Ansatzfunktionen (rechts). Der Übersichtlichkeit wegen ist die Darstellung der relativen Abweichung auf den Bereich bis $\pm 10\%$ beschränkt.

Dehnungsbereichs liegt die Differenz bei nur etwa 1,7%. Wird jedoch an Stelle der Spannungs-Dehnungs-Diagramme das Spannungsfeld im Detail betrachtet, zeigt sich ein abweichendes Bild (Abbildung 8.2). Für den Großteil der Struktur ist der Unterschied zwischen linearen und quadratischen Ansatzfunktionen auch hier vernachlässigbar gering. Für 98% der Struktur liegt die Abweichung

bei unter 10%, für 95% der Struktur bei unter 5% und für 72% der Struktur sogar bei unter 1%. Ein kleiner Bereich, genau an der Grenze zwischen Ferrit und Martensit, zeigt jedoch relevante Abweichungen. Für wenige Elemente beträgt die Differenz bis zu 24%. Insgesamt haben diese Ausreißer aber keinen Einfluss auf das Endergebnis im Spannungs-Dehnungs-Diagramm, insbesondere da sich positive und negative Abweichungen bei der Mittelwertbildung ausgleichen.

In dem in der Arbeit betrachteten Kontext, mit dem makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Diagramm als Zielgröße der Simulation und mit einem elastisch-plastischen Materialmodell, kann die Simulation der Mikrostruktur in Vollauflösung mit linearen Ansatzfunktionen daher problemlos als Referenzsimulation betrachtet werden. Für künftige Simulationen auf Basis des hier entwickelten Modells muss die Aussage jedoch eingeschränkt werden. Die beobachteten Unterschiede im Spannungsniveau an manchen Stellen der Mikrostruktur können dann durchaus von Bedeutung sein. Vor allem bei der Betrachtung von Schädigung können sie zu Abweichungen im Zeitpunkt und Ort der Rissinitiierung führen. Der Einfluss der lokalen Unterschiede kann aber noch nicht abgeschätzt werden, da die allgemeine Verteilung der Spannungsmaxima bei beiden Simulationen identisch ist und nur ihre Höhe variiert. Hierzu werden bei zukünftigen Simulationen nach Implementierung eines Schädigungsmodells weitere Untersuchungen durchgeführt werden müssen.

8.1.2 Nutzen und Verifikation

In der Arbeit wurden die drei Verfahren der Datenreduktion Boxfilter, Hanging-Node-Vernetzung und Materialdefinition am Integrationspunkt untersucht. Zur Evaluierung des Reduktionseffekts wird ein Zugversuch an einem beispielhaften Strukturausschnitt simuliert. Dabei werden die Rechendauer und die Arbeitsspeicherauslastung aufgezeichnet und die Werte miteinander verglichen. Ziel ist jeweils, die Rechendauer und die Arbeitsspeicherauslastung möglichst weit zu senken, ohne das Ergebnis durch die Reduktion im Vergleich zur Simulation in Vollauflösung zu verfälschen. Die Evaluation wird zuerst für die verschiedenen Formen von MatIp in Abhängigkeit der Anzahl an Integrationspunkten pro Raumrichtung und der Ansatzordnung gesondert dargestellt. Danach wird die Hanging-Node-Vernetzung mit der präferierten Methode von MatIp und mit der Simulation in Vollauflösung verglichen. Aufgrund des bei Boxfiltern inhärenten Auslöschens von Strukturinformationen, wurde diese Methode nicht

weiter betrachtet. Der verwendete Strukturausschnitt hat eine Kantenlänge von $52\ \mu\text{m}$ bzw. 128 Voxeln und enthält insgesamt 2097152 Voxel.

Zum Vergleich der Varianten von MatIp werden Elemente mit zwei, vier, acht und sechzehn Integrationspunkten bzw. Voxeln pro Raumrichtung mit der Rechnung in Vollauffösung verglichen. Die Anzahl an Integrationspunkten bzw. Voxeln pro Raumrichtung pro Element wird im Folgenden als Reduktionsordnung bezeichnet. Alle Simulationen werden mit linearen Ansatzfunktionen durchgeführt. Die Reduktionsordnungen 4 und 8 werden zusätzlich mit quadratischen und kubischen Ansatzfunktionen berechnet. Tabelle 8.1 zeigt die Rechendauer t_{sim} , die Arbeitsspeicherauslastung D_A , die Gesamtanzahl an Freiheitsgraden N_F und die Anzahl an Voxeln pro Element N_{VE} der verschiedenen Simulationen. Die Benennung erfolgt entsprechend Kapitel 4.4.

Tabelle 8.1: Vergleich von Rechendauer, Arbeitsspeicherauslastung, Anzahl an Freiheitsgraden und Anzahl an Voxeln pro Element für MatIp mit der Simulation in Vollauffösung.

	t_{sim} [min]	D_A [GB]	N_F [-]	N_{VE} [-]
voll	286,7	34,3	6440067	1
q2fe1	32,3	4,9	823875	8
q4fe1	8,4	2,8	107811	64
q4fe2	74,4	6,9	823875	64
q4fe3	648,8	28,2	2738019	64
q8fe1	5,9	3,4	14739	512
q8fe2	27,6	3,9	107811	512
q8fe3	127,0	6,6	352947	512
q16fe1	5,9	5,5	2187	4096

Es sind zwei klare Trends zu erkennen. Zum einen steigen Rechendauer und Arbeitsspeicherauslastung mit steigender Ansatzordnung bei gleich bleibender Reduktionsordnung, zum anderen sinkt die Rechendauer bei gleich bleibender Ansatzordnung mit steigender Reduktionsordnung. Der erste Trend ist darin begründet, dass bei steigender Ansatzordnung die Anzahl der Freiheitsgrade steigt. Als Folge dessen enthält das zu lösende Gleichungssystem (4.18) deutlich mehr Variablen, wodurch Speicherauslastung und Rechendauer ansteigen. Durch die erhöhte Anzahl an Freiheitsgraden kann jedoch die Deformation der von einem Element dargestellten Voxel besser abgebildet werden, wodurch die

Qualität der Lösung mit der Ansatzordnung steigt (Abbildung 8.3 und Abbildung 8.4). Der zweite Trend ist der direkte Effekt der Datenreduktion. Mit steigender Reduktionsordnung sinkt die Anzahl der Elemente des Netzes und damit die Anzahl der Freiheitsgrade, wodurch die Rechendauer sinkt. Dieser Effekt tritt aber hauptsächlich bis zur Reduktionsordnung 4 auf. Bei höheren Reduktionsordnungen sinkt die Qualität der Annäherung des Verschiebungsfeldes durch die Integrationsfunktion aufgrund der hohen Zahl unterschiedlicher Integrationspunkte zu stark ab, weil die betrachteten Ansatzordnungen die Lösung nicht mehr hinreichend genau abbilden können. Gleichzeitig sinkt auch die Rechendauer nicht mehr weiter, da hier der Großteil der Rechendauer durch den Aufbau des Gleichungssystems bestimmt ist, der wegen der gleichbleibenden Anzahl an Integrationspunkten durch höhere Reduktionsordnungen nicht mehr weiter gesenkt wird. Tendenziell sinkt auch die Arbeitsspeicherauslastung mit steigender Reduktionsordnung. Für hohe Reduktionsordnungen bleibt die Menge der am Integrationspunkt in der Point History gespeicherten Daten konstant, weil die Anzahl der Integrationspunkte insgesamt von MatIp unbeeinflusst ist. Daher ist bei steigender Reduktionsordnung ein Plateau in der Arbeitsspeicherauslastung zu erwarten. Ab Reduktionsordnung 8 beginnt die Auslastung jedoch sogar wieder zu steigen. Der Grund hierfür liegt in der Parallelisierung der Simulation. Jeder Prozessor speichert nicht nur die Daten der zu seinem Gebiet gehörenden Elemente, sondern auch die Daten aller an sein Gebiet direkt angrenzenden Elemente. Bei der eher geringen Anzahl datenreicher Elemente höherer Reduktionsordnungen fallen diese zusätzlichen Daten sehr stark ins Gewicht, wodurch die Arbeitsspeicherauslastung ab Reduktionsordnung 8 wieder steigt. Abbildung 8.3 zeigt die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Diagramme der Simulationen mit verschiedenen Reduktionsordnungen im Vergleich zur Simulation in Vollauflösung. Abbildung 8.4 zeigt zusätzlich die zugehörigen $R_{t5,0}$ -Werte. Insbesondere bei einer hohen Reduktionsordnung von 8 oder 16 führt MatIp zu einer gewissen virtuellen Versteifung des Materials. Hier beeinflussen die Martensit-Integrationspunkte die Elementsteifigkeit stärker als erwünscht, da die gewählten Ansatzordnungen das Deformationsfeld der abgebildeten Voxel im Element nicht ausreichend genau auflösen. Dieser Effekt wird durch die zusätzlichen Freiheitsgrade bei höherer Ansatzordnung teilweise wieder ausgeglichen, wie am Verlauf von $R_{t5,0}$ für die Reduktionsordnung 4 bzw. 8 deutlich wird (Abbildung 8.4).

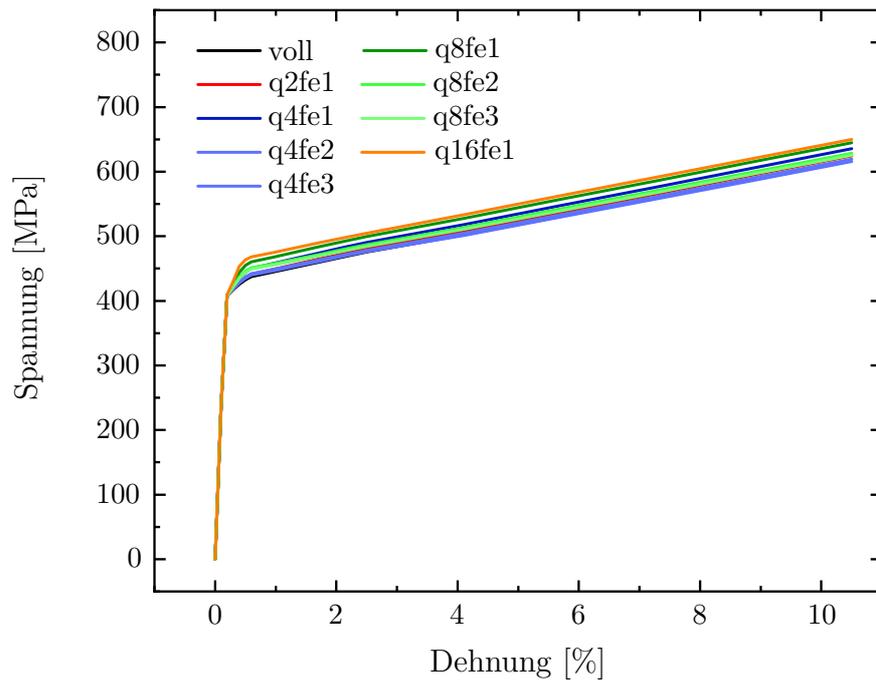


Abbildung 8.3: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für verschiedene MatIp-Reduktionsordnungen und Simulation in Vollauflösung.

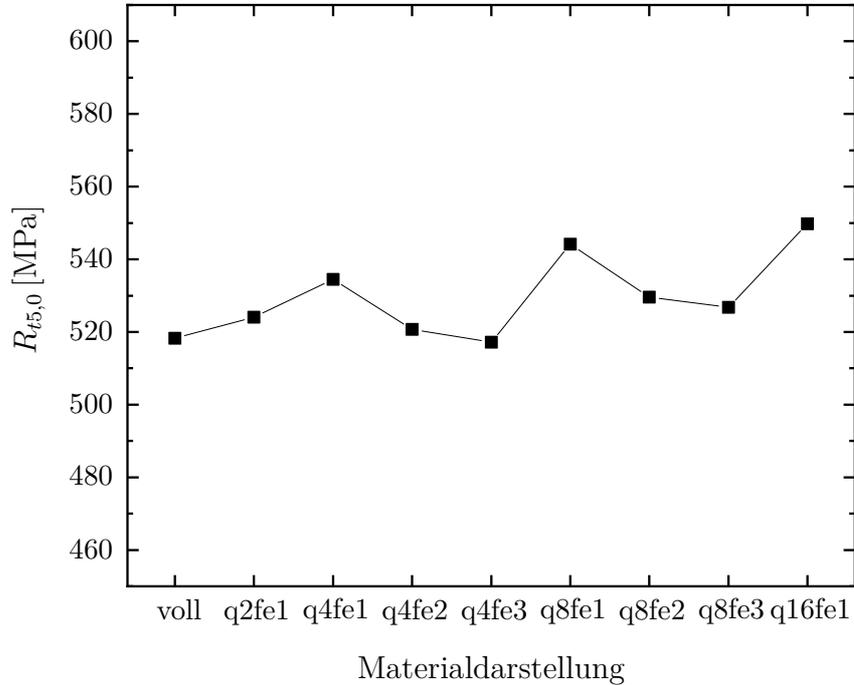


Abbildung 8.4: $R_{t5,0}$ für verschiedene MatIp-Reduktionsordnungen und Simulation in Vollauflösung.

Die bevorzugte Variante von MatIp ergibt sich durch kombinierte Betrachtung des mechanischen Verhaltens und der Rechendauer. Aufgrund des relativ hohen Unterschieds im Spannungsniveau scheidet die Reduktionsordnung 8 und 16 aus der Betrachtung aus. Die Varianten mit höherer Ansatzordnung werden hingegen aufgrund ihrer stark erhöhten Rechendauer nicht mehr weiter betrachtet. Damit bleiben q2fe1 und q4fe1 als Reduktionsmethoden übrig. Die Variante q2fe1 liegt im Spannungswert näher bei der Simulation in Vollauffö- sung, benötigt dabei aber etwa die vierfache Rechendauer als q4fe1. Da q4fe1 ebenfalls nur eine geringe Abweichung von etwa 3% erzeugt, wird diese Variante im Folgenden als Datenreduktionsmethode genutzt. An dieser Stelle wurden ausschließlich Maße der mittleren Spannungs-Dehnungs-Kurve als Vergleichswert genutzt. Für eine Betrachtung auf lokaler Ebene sei auf Kapitel 8.1.3 verwiesen.

Als weitere Methode der Datenreduktion wird die Hanging-Node-Vernetzung betrachtet. Abbildung 8.5 zeigt die Materialverteilung im gewählten Strukturausschnitt mit entsprechender Vernetzung. Neben der dargestellten klassischen Hanging-Node-Vernetzung wird zusätzlich eine Kombination mit q2fe1- bzw. q4fe-MatIp betrachtet. Dazu wird die Struktur zuerst mit MatIp vernetzt und im Anschluss werden die Bereiche des Netzes mit homogener Materialverteilung mit Hilfe hängender Knoten vergrößert. Die Ergebnisse dieser Simu-

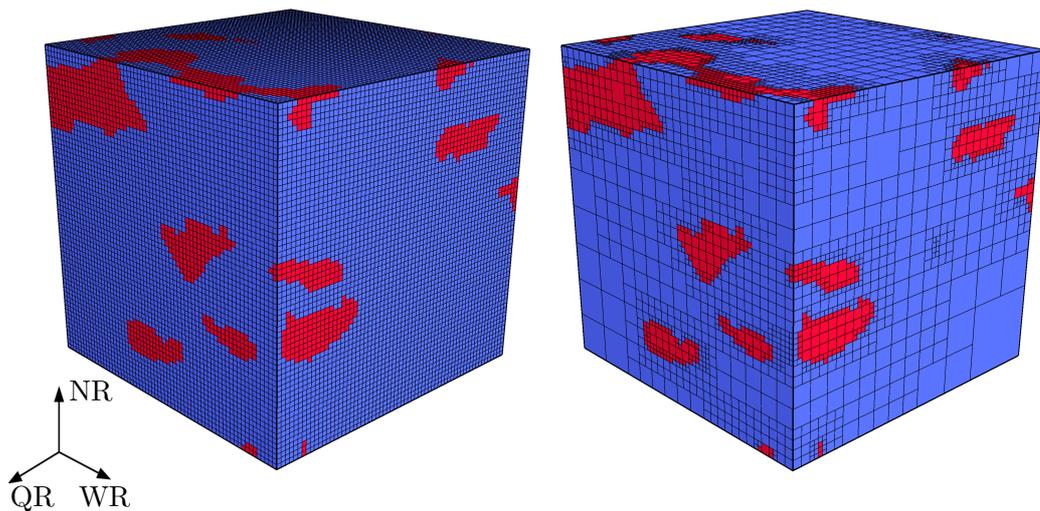


Abbildung 8.5: Vergleich der Vernetzung in Vollauffö- sung (links) mit Hanging-Node-Vernetzung (rechts). Martensit ist rot dargestellt, Ferrit blau. Zur besseren Darstellung der feinen Elemente ist nur ein Achtel der simulierten Struktur gezeigt.

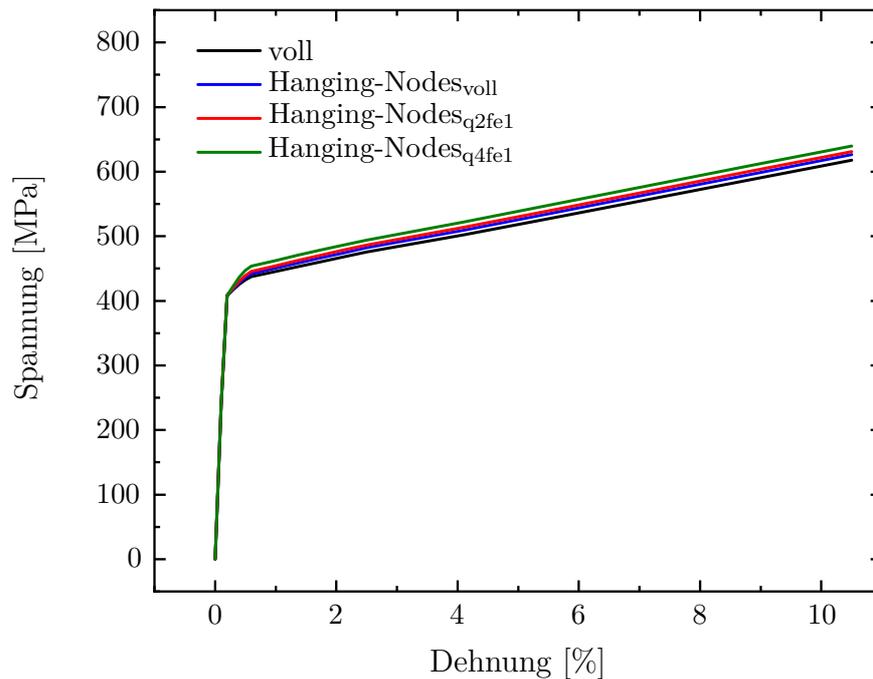


Abbildung 8.6: Spannungs-Dehnungs-Diagramme für reine Hanging-Node-Vernetzung sowie der Kombination mit MatIp im Vergleich zur Simulation in Vollauffösung.

lationen werden dann mit den Ergebnissen der Simulation in Vollauffösung verglichen (Abbildung 8.6). Die Hanging-Node-Vernetzung zeigt allgemein eine gute Übereinstimmung mit der Simulation in Vollauffösung. Die beiden Kombinationen von MatIp mit Hanging-Node-Vernetzung zeigen aber jeweils eine höhere Abweichung zur Vollauffösung als die reine Form von MatIp. Hier addiert sich die Abweichung der reinen Hanging-Node-Vernetzung zur Simulation in Vollauffösung annähernd zur jeweiligen Abweichung durch MatIp hinzu. Tabelle 8.2 zeigt die Rechendauer, Arbeitsspeicherauslastung und Anzahl an Freiheitsgraden der Rechnungen mit Hanging-Node-Vernetzung.

Tabelle 8.2: Rechendauer, Arbeitsspeicherauslastung und Anzahl an Freiheitsgraden für reine Hanging-Node-Vernetzung sowie der Kombination mit MatIp im Vergleich zur Simulation in Vollauffösung.

	t_{sim} [min]	D_A [GB]	N_F [-]
Hanging-Nodes _{voll}	97,8	19,4	1295280
Hanging-Nodes _{q2fe1}	21,3	3,4	330663
Hanging-Nodes _{q4fe1}	6,5	2,7	70838

Alle drei Parameter werden durch Hanging-Nodes gesenkt. Vor allem bei den Rechnungen in Kombination mit MatIp wird die Rechendauer aber im Vergleich zur Anzahl an Freiheitsgraden nur unbedeutend reduziert. Dies ist eine Folge der Parallelisierung der Simulation. Prinzipbedingt wird das Netz schon bei der erstmaligen Erzeugung in Vollauffösung auf die einzelnen Prozessorkerne verteilt. Im Verlauf der Vergrößerung durch Hanging-Nodes werden einige Teile des Netzes im Bereich homogener Materialverteilung deutlich reduziert, eine Umverteilung der Netzabschnitte zwischen den Prozessoren ist aber nicht mehr möglich. Als Folge dessen rechnet ein Teil der Prozessorkerne mit kaum reduzierten Netzabschnitten. Diese Prozessorkerne bestimmen die Dauer der Simulation, da alle Rechenschritte parallel ausgeführt werden.

MatIp wird bei den sich anschließenden Simulationen als alleinige Datenreduktionsmethode genutzt. Die Datenreduktion mittels reiner Hanging-Node-Vernetzung zeigt zwar Potential im Vergleich zur Simulation in Vollauffösung, ist jedoch MatIp in den betrachteten Kriterien insgesamt unterlegen. Die Kombination aus Hanging-Node-Vernetzung und MatIp wird ebenfalls nicht weiter betrachtet, da der geringe Zeitgewinn bei der Simulation eine höhere Abweichung vom Simulationsergebnis in Vollauffösung nicht rechtfertigt. Für zukünftige Simulationen könnte diese Methode der Datenreduktion dennoch interessant sein. So kann zwar keine Umverteilung der Netzabschnitte zwischen den Prozessoren nach der Vergrößerung durchgeführt werden, dieser Nachteil kann aber potentiell gelöst werden. Das kann mit Hilfe einer Gewichtungsfunktion erreicht werden. Bei der initialen Verteilung des Netzes in Vollauffösung auf die einzelnen Prozessoren werden damit die Netzabschnitte so gewichtet, dass sie nicht entsprechend ihrer aktuellen Elementanzahl, sondern entsprechend ihrer voraussichtlichen Elementanzahl nach der Vergrößerung durch Hanging-Nodes verteilt werden. Dadurch könnte eine gleichmäßige Prozessorauslastung und optimale Reduktion der Rechendauer ermöglicht werden. Aufgrund des hohen Aufwands dieser Umsetzung und der sehr guten Ergebnisse von MatIp für die hier betrachteten Simulationen, wurde diese Methode in der vorliegenden Arbeit jedoch nicht umgesetzt.

Eine zusätzliche Verifikation des implementierten Simulationsmodells durch Vergleich mit einer Simulation im kommerziellen FEM Programm *SIMULIA ABAQUS FEA*[®] folgt in Kapitel 8.2.3.

8.1.3 Lokale Betrachtung der Datenreduktion

Im vorigen Kapitel konnte gezeigt werden, dass MatIp bei Betrachtung der mittleren Spannungs-Dehnungs-Kurve als primärem Vergleichsmaß dieser Arbeit sehr gute Ergebnisse liefert im Vergleich zur Simulation in Vollauflösung. Da das Simulationsmodell aber auch mit Blick auf die Anwendbarkeit bei zukünftigen Simulationen entwickelt wurde, wird MatIp zusätzlich bezüglich der lokalen Spannungsverteilung in der Mikrostruktur mit der Simulation in Vollauflösung verglichen. Selbst wenn lokale Unterschiede keinen Einfluss auf die mittlere Spannungs-Dehnungs-Kurve haben, so können sie beispielsweise bei der Erweiterung des Modells auf Schädigung große Bedeutung bei der Rissinitiierung haben, wie schon in Kapitel 8.1.1 erläutert. Zum Vergleich der lokalen Spannungsverteilung einer Simulation mit MatIp mit einer Simulation in Vollauflösung wurde eine Routine implementiert, die es ermöglicht, das FE-Netz aus MatIp zu einem beliebigen Zeitpunkt der Rechnung komplett oder gezielt in bestimmten Bereichen feiner aufzulösen. Dadurch ist es möglich, eine Simulation mit MatIp durchzuführen und die berechneten Werte während der Simulation auf ein Netz in Vollauflösung der Mikrostruktur zu transferieren. Die Verschiebungswerte der neuen Knoten werden entsprechend ihrer Position aus den Verschiebungswerten des unverfeinerten Netzes interpoliert. Innerhalb eines Elements werden die am Integrationspunkt gespeicherten Daten entsprechend Abbildung 8.7 auf die Integrationspunkte des verfeinerten Netzes verteilt.

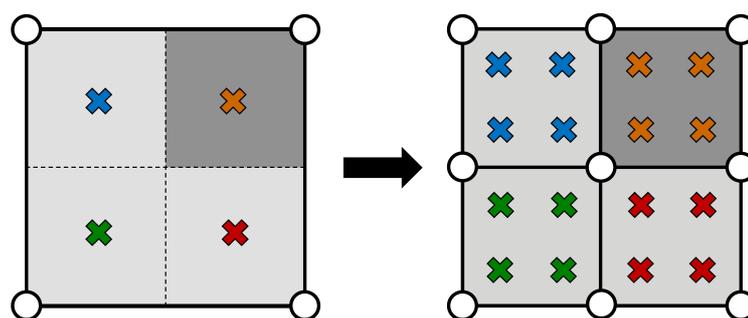


Abbildung 8.7: Schema der Verteilung der am Integrationspunkt gespeicherten Daten in einem zweidimensionalen finiten Element bei Verfeinerung nach MatIp. Elementkanten sind als durchgezogene Linien gekennzeichnet, Elementknoten als Kreise, Voxelkanten als gestrichelte Linien, unterschiedliche Voxelmaterialien durch unterschiedliche Grautöne und Integrationspunkte als Kreuze. Die Farbe der Integrationspunkte im verfeinerten Zustand (rechts) entspricht der Farbe der zugehörigen Integrationspunkte im ursprünglichen Zustand (links).

Jedem neuen Integrationspunkt werden dabei die Daten des ihm am nächsten liegenden alten Integrationspunkt zugewiesen. Aufgrund der diskontinuierlichen Materialverteilung an den Integrationspunkten ist eine kontinuierliche Interpolation wie bei den Verschiebungswerten nicht möglich. Der aktuelle Lastschritt wird dann für das verfeinerte Netz erneut berechnet. Die bis zum Ende der Simulation folgenden Lastschritte werden ebenfalls auf dem verfeinerten Netz berechnet.

Im Folgenden wird eine Simulation mit q4fe1-MatIp nach etwa der Hälfte der Simulation bei 4,1% Dehnung verfeinert und die Rechnung in Vollauflösung zu Ende geführt. Bei Betrachtung des Spannungs-Dehnungs-Diagramms (Abbildung 8.8) zeigt sich, dass die in Kapitel 8.1.2 festgestellte geringe Abweichung von etwa 3% zwischen der q4fe1-MatIp und der Vollauflösung nach der Verfeinerung fast vollständig verschwindet.

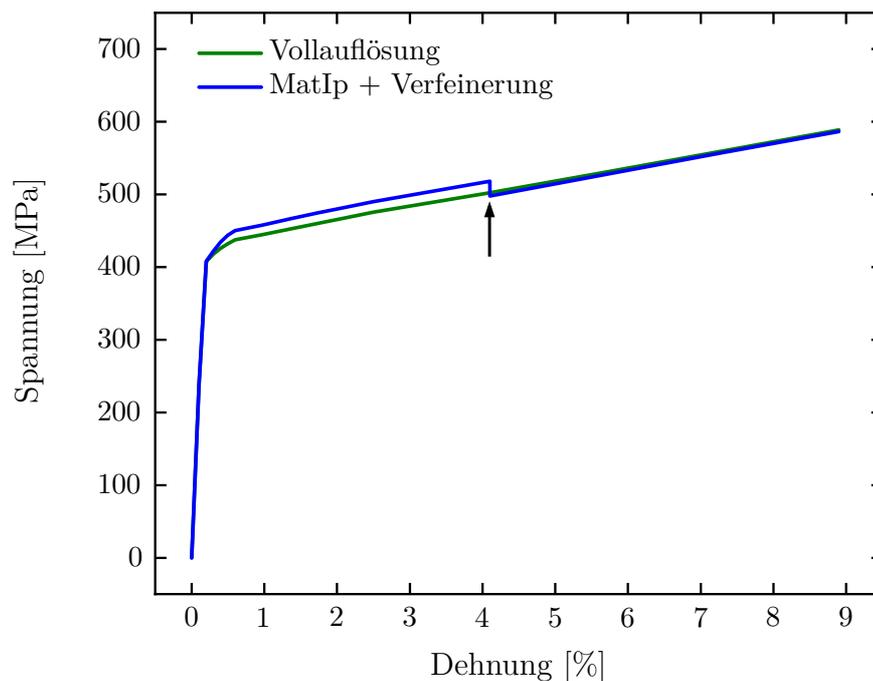


Abbildung 8.8: Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines simulierten Zugversuchs in Vollauflösung sowie mit MatIp und Verfeinerung während der Simulation. Der Verfeinerungsschritt ist mit einem Pfeil markiert.

Die Abweichung bezüglich $R_{t5,0}$ beträgt nach dem Verfeinern lediglich noch 0,16%. Dies stellt eine weitere Verifizierung von MatIp dar, da hiermit gezeigt werden kann, dass bezüglich des Spannungs-Dehnungs-Diagramms durch MatIp keine Informationen verloren gehen. Die bei MatIp entstehenden geringen Abweichungen können durch einen einzelnen Rechenschritt nach Verfeine-

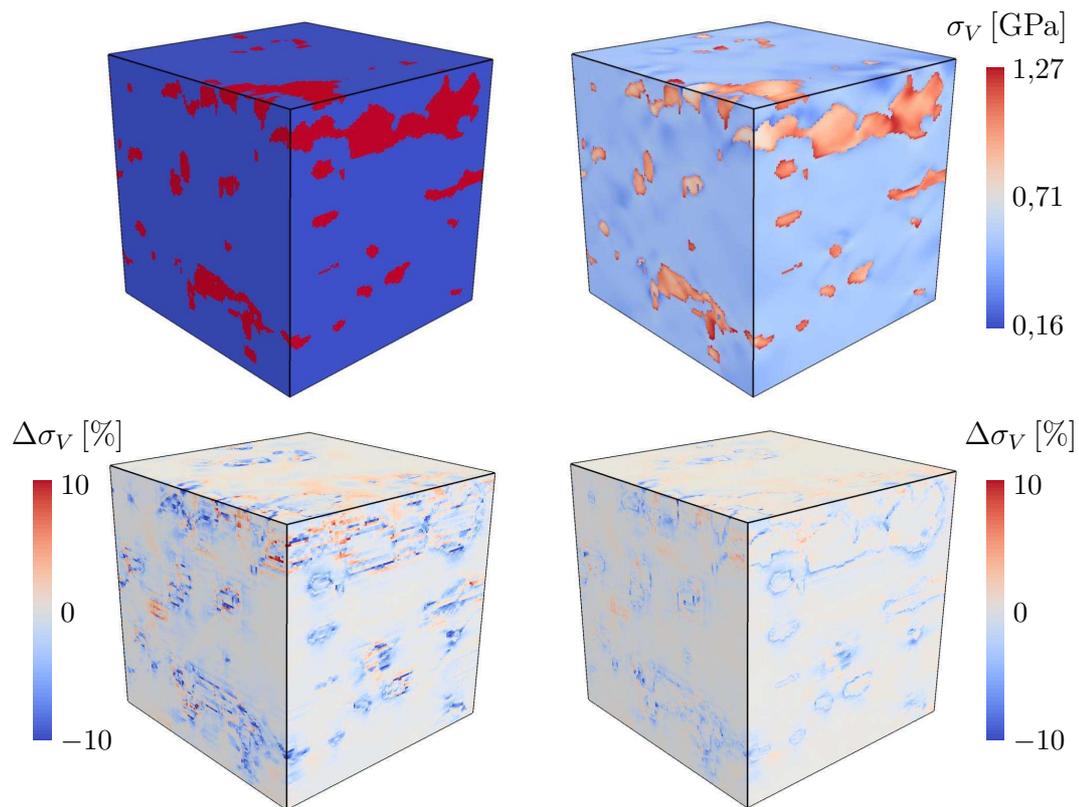


Abbildung 8.9: Verteilung von Martensit (rot) und Ferrit (blau) einer Dualphasenstahl-Mikrostruktur (oben links) mit zugehöriger Verteilung der Vergleichsspannung nach von Mises bei Simulation mit q4fe1-MatIp direkt nach dem Verfeinerungsschritt (oben rechts). Die relativen Abweichungen zwischen der Simulation mit q4fe1-MatIp und einer Simulation in Vollauflösung sind direkt nach dem Verfeinerungsschritt (unten links) sowie zum Ende der Simulation (unten rechts) dargestellt. Der Übersichtlichkeit wegen ist die Darstellung der relativen Abweichung auf den Bereich bis $\pm 10\%$ beschränkt.

nung des Netzes wieder ausgeglichen werden. Bei Betrachtung der lokalen Spannungsverteilung zeigen sich hingegen größere Abweichungen (Abbildung 8.9). Direkt nach der Verfeinerung zeigt die MatIp-Simulation für einzelne Elemente eine relative Differenz zur Simulation in Vollauflösung von bis zu 118%. Die Abweichungen liegen im Großteil der Struktur weit darunter, so haben 98% der Struktur eine relative Abweichung von unter 5% und sogar 99,8% der Struktur eine relative Abweichung von unter 10%. Die Differenz zwischen beiden Simulationen nimmt kontinuierlich im Verlauf der weiteren Simulation ab. Zum Ende der Simulation bei 8,9% Dehnung beträgt sie für 99,8% der Struktur weniger als 5%. Lediglich 39 Elemente, weniger als 0,002% der Struktur, zeigen eine

Abweichung von über 10%, wobei das Maximum hier bei 105% Abweichung liegt.

Diese Untersuchung zeigt, dass auch bei lokaler Betrachtung die durch MatIp entstehenden Abweichungen insgesamt gering sind und nach dem Verfeinern abnehmen. Auch bei zukünftigen Simulationen mit besonderem Interesse an der lokalen Spannungsverteilung, beispielsweise nach Implementierung von Schädigung, kann folglich das im Rahmen dieser Arbeit implementierte Simulationsmodell mit MatIp eingesetzt werden. Hierzu sollte eine Routine in das Simulationsmodell eingebaut werden, die die Mikrostruktur nach jedem Lastschritt auf Spannungsspitzen untersucht. Sobald die Spannungsspitzen einen festgelegten Wert, hinreichend nahe am zur Schädigungsinitiierung notwendigen Wert, erreichen, können diese Bereiche verfeinert werden und in Vollauflösung der Mikrostruktur oder noch feiner betrachtet werden. Somit können während eines Großteils der Simulation die Vorteile von MatIp genutzt werden und auch bei beginnender Schädigung müssen nur wenige Bereiche der Struktur in verfeinerter Auflösung betrachtet werden. Die Aussagekraft der festgestellten hohen Abweichung weniger Elemente muss zusätzlich stark eingeschränkt werden. Die für die Schädigung maßgebliche Höhe der Spannungsmaxima liegt innerhalb der Ferrit- bzw. Martensitbereiche für beide Rechnungen auf dem gleichen Niveau. Die Unterschiede entstehen nur durch eine leicht abweichende örtliche Verteilung der Spannungen.

Zusammenfassend konnte also in Kapitel 8.1 gezeigt werden, dass die implementierte Datenreduktionsmethode MatIp im Vergleich zur Rechnung in Vollauflösung eine sehr gute Qualität der Ergebnisse zeigt, insbesondere bei Betrachtung des Spannungs-Dehnungs-Diagramms. Aufgrund der gleichzeitigen hohen Einsparung an Rechenzeit und Arbeitsspeicherlast, kann sie daher wie angedacht in der Arbeit genutzt werden.

8.2 Validierung und Verifikation des Simulationsprozesses

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist die realitätsnahe Simulation von Dualphasenstahl auf Basis seiner Phasenstruktur. Im Folgenden wird daher das entwickelte Simulationsmodell an zwei realen Mikrostrukturen validiert. Zusätzlich

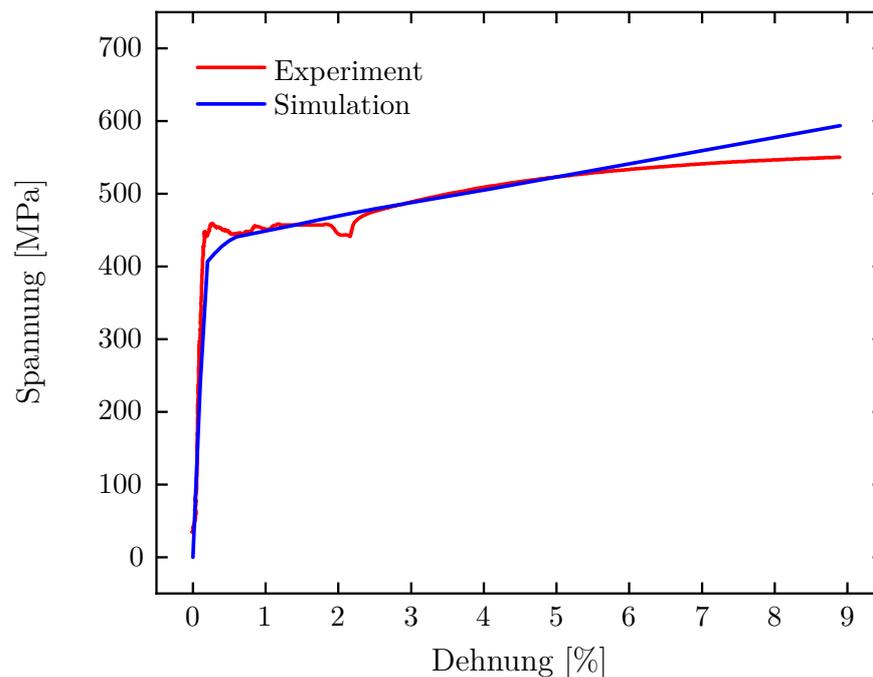


Abbildung 8.10: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für einen Zugversuch und die zugehörige Simulation an DP1.

wird das Modell mit Hilfe weiterer Materialmodelle sowie eines alternativen Simulationsprogramms verifiziert.

8.2.1 Validierung der Simulation des Stahls DP1

Der Abgleich des simulierten Zugversuchs mit dem realen Experiment ist der wichtigste Punkt der Validierung des Simulationsmodells. Abbildung 8.10 zeigt das Spannungs-Dehnungs-Diagramm des simulierten und des realen Zugversuchs jeweils bei Zug in Querrichtung. Die beiden Kurven stimmen insgesamt betrachtet sehr gut überein. Die Unterschiede beschränken sich hauptsächlich auf den Bereich der Lüdersdehnung im Übergang zwischen elastischem und plastischem Materialverhalten. Die Lüdersdehnung kann mit Hilfe der hier implementierten phasenstrukturbasierten Simulation prinzipiell nicht abgebildet werden. Hierzu müsste das Simulationsmodell den zugrunde liegenden kleinskaligen Effekt des Festhaltens und Losreißen von Versetzungen an Fremdatomen über die direkte Betrachtung von Versetzungen einschließen. Alternativ könnte die Lüdersdehnung rein phänomenologisch als Bereich ideal plastischer Deformation zu Beginn des Fließens fest definiert werden. Beide Varianten wur-

den für dieses Projekt zugunsten einer realistischen und effizienten Simulation des restlichen Verlaufs des Spannungs-Dehnungs-Diagramms nicht betrachtet. Das simulierte Spannungs-Dehnungs-Diagramm liegt in der Mitte des Lüdersdehnungsbereichs und folgt der experimentellen Zugkurve danach sehr genau. Lediglich für höhere Dehnungen ab etwa 7% beginnen die Kurven langsam auseinander zu laufen. In diesem Bereich erreicht die experimentelle Zugkurve ihr Spannungsplateau. Ab hier beginnen Effekte wie Probeneinschnürung und Schädigung zu wirken, die in dieser Arbeit nicht betrachtet werden. Insgesamt wird die experimentelle Zugkurve im relevanten Deformationsbereich unter 10% Dehnung sehr gut getroffen.

8.2.2 Untersuchung alternativer Materialmodelle

In der vorliegenden Arbeit wird ein Materialmodell für kleine elastische Deformationen mit linearer Verfestigung im plastischen Bereich genutzt. Das stellt eine Vereinfachung des realen Materialverhaltens dar (siehe Kapitel 3). Zur Verifizierung des Modells wurden zusätzliche Materialmodelle implementiert. Zum einen wird hierzu ein Materialmodell basierend auf einer Kinematik für finite Deformationen genutzt. Zum anderen wurde ein Plastizitätsmodell mit nichtlinearer Verfestigung untersucht. Beide Modelle werden in diesem Unterkapitel kurz vorgestellt und mit dem in den anderen Kapiteln genutzten Materialmodell verglichen.

Ein kompressibles Neo-Hooke Modell wurde zur Untersuchung finiter Deformationen implementiert. Für den Cauchy-Spannungstensor \mathbf{T} als wahrem Spannungsmaß gilt der Zusammenhang

$$\mathbf{T} = \frac{\mu}{J} (\mathbf{B}_e - \mathbf{I}) + \frac{\lambda}{J} \ln J \mathbf{I}, \quad (8.1)$$

mit dem elastischen Anteil des linken Cauchy-Green-Deformationstensor \mathbf{B}_e und der Jacobi-Determinanten J als Deformationsmaße. Genauere Informationen zur Herleitung und Bedeutung dieser Größen findet sich in der Fachliteratur [23, 65, 69]. Der plastische Anteil der Deformation wird wiederum mit linearer, isotroper Verfestigung durch Radial Return Mapping implementiert. Die Bestimmung des plastischen Inkrements $\Delta\gamma$ erfolgt analog zur Vorgehensweise in Kapitel 4.2. Die darauf aufbauende Berechnung des elastischen Anteils der Deformation erfolgt im finiten Fall nicht mehr über die additive Aufspal-

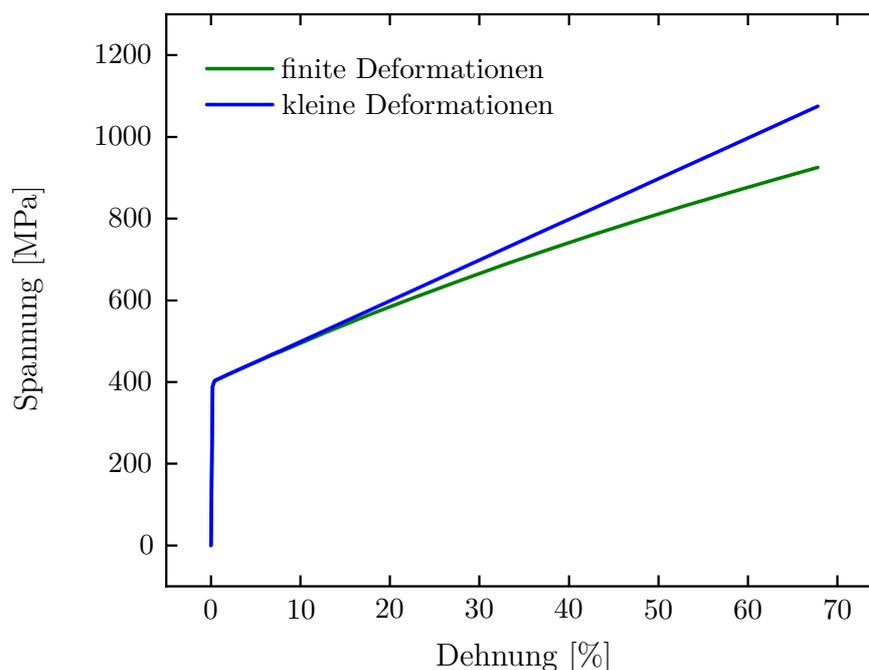


Abbildung 8.11: Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines simulierten Zugversuchs für kleine und finite Deformationen im Bereich großer Deformation.

tung (Gleichung (3.24)), sondern durch multiplikativen Split der Deformation nach Kröner und Lee [96, 100, 156]. Neben diesen Änderungen des Materialmodells muss auch der allgemeine Programmablauf aufgrund der Nichtlinearität von Materialmodellen für finite Deformationen wie in Kapitel 4.3 beschrieben leicht angepasst werden. Hierdurch wird das Modell für finite Deformationen deutlich rechenintensiver. Abbildung 8.11 zeigt das Spannungs-Dehnungs-Diagramm des Modells für finite Deformationen und des Modells für kleine Deformationen. Zur Vergleichbarkeit der beiden Modelle wurde der Cauchy-Spannungstensor des Modells für finite Deformationen zur Darstellung in den ersten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor transformiert [23]. Er bezieht die wirkenden Kräfte auf ein undeformiertes Flächenelement und ist mit der Ingenieursspannung des Modells für kleine Dehnungen vergleichbar. Als Dehnungsmaß wurde jeweils die Ingenieursdehnung, also die Längenänderung bezogen auf die Ausgangslänge der Probe, genutzt. Für hohe Dehnungen zeigen sich hier deutliche Unterschiede zwischen beiden Modellen. Hauptgrund der Unterschiede ist die Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung bei der Herleitung der Kinematik für kleine Deformationen, beispielsweise in Gleichung (3.3). Bei Betrachtung makroskopischer Dehnungen kleiner 10% (Abbildung 8.12) zeigt sich jedoch, dass diese Vereinfachung im in der Arbeit relevanten De-

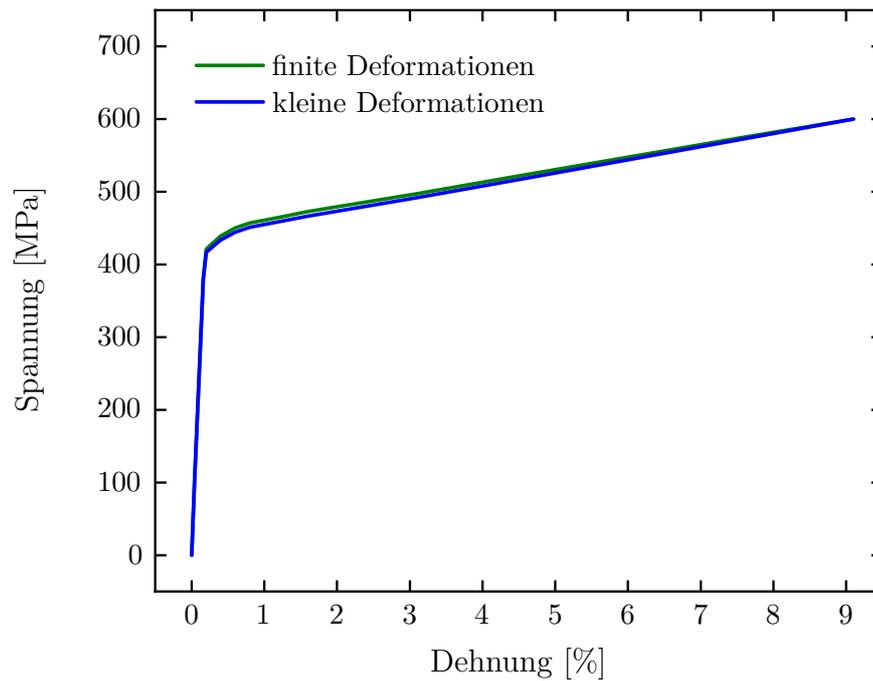


Abbildung 8.12: Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines simulierten Zugversuchs für kleine und finite Deformationen im Bereich moderater Deformation.

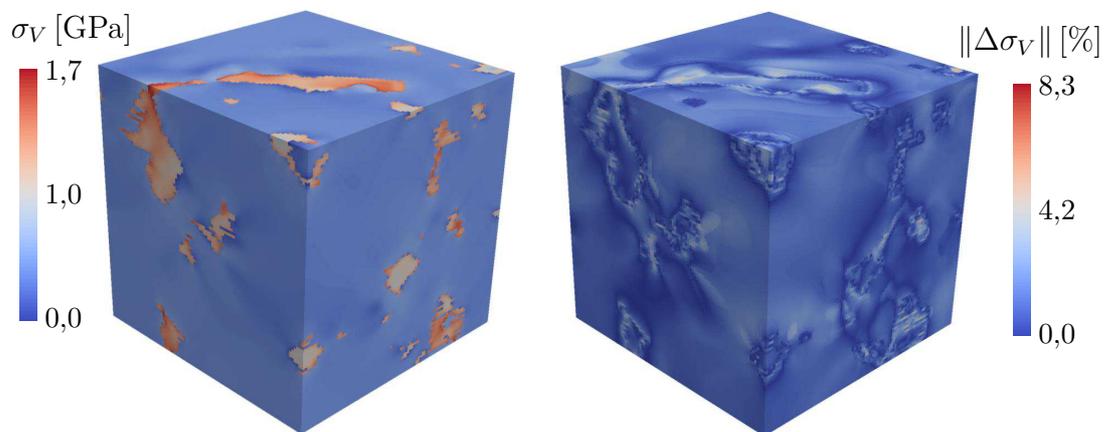


Abbildung 8.13: Darstellung der Verteilung der Vergleichsspannung nach von Mises in der Mikrostruktur für das Modell für kleine Deformationen (links) und der relativen Abweichung zur Spannungsverteilung für finite Deformationen (rechts).

formationsbereich zu vernachlässigbar kleinen Unterschieden im Spannungs-Dehnungs-Diagramm führt. Auch die Betrachtung der Spannungsverteilung in der Mikrostruktur (Abbildung 8.13) stimmt hiermit überein. Im Bereich weni-

ger, sehr kleiner Spannungsspitzen im Übergang zwischen Martensit zu Ferrit sind Abweichungen von etwa 8% erkennbar. Im Großteil der Struktur liegt die relative Abweichung aber unter 2%, was für das mittlere Spannungs-Dehnungs-Diagramm entscheidend ist. Diese geringen Abweichungen mitteln sich zusätzlich bei der Berechnung des Spannungs-Dehnungs-Diagramms zum großen Teil heraus, da sowohl positive als auch negative Abweichungen vorkommen. Diese Betrachtungen zeigen, dass für die vorliegende Arbeit ein Modell für finite Deformationen keinen Vorteil gegenüber dem genutzten Modell für kleine Deformationen bringt. In möglichen zukünftigen Arbeiten mit Betrachtung von Schädigung können die Abweichungen im Bereich der Spannungsspitzen aber die Nutzung der hier implementierten finiten Deformationen für eine korrekte Schädigungsentwicklung notwendig machen.

Zur Bestimmung des Einflusses nichtlinearer Verfestigung wurde eine Kombination von linearer Verfestigung und exponentieller Verfestigung entsprechend Gleichung (3.34) betrachtet. Da der Einfluss nichtlinearer Verfestigung isoliert betrachtet werden soll, wird hier wieder das in den restlichen Bereichen der Arbeit verwendete Materialmodell für kleine Dehnungen genutzt. Die genutzte Fließbedingung ist

$$f_{\text{kombiniert}} = \|\sigma_{\text{D}}\| - \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\sigma_{F0} + K \alpha + \sigma_{F\infty} \left(1 - e^{(-k\alpha)} \right) \right). \quad (8.2)$$

Das Modell kann durch das implementierte Rahmenwerk zur Behandlung von Plastizität (Kapitel 4.2) ohne weitere Änderungen berechnet werden. Tabelle 8.3 zeigt die genutzten Verfestigungsparameter. Sie werden analog zur linearen Verfestigung mit der in Kapitel 6.1 beschriebenen Parameteridentifikation bestimmt.

Tabelle 8.3: Darstellung der Parameter der nichtlinearen Verfestigung.

	σ_{F0} [MPa]	$\sigma_{F\infty}$ [MPa]	K [GPa]	k [—]
Ferrit	363,4	154,5	2,02	0,27
Martensit	860,4	3584,5	3,97	0,16

Bei Betrachtung des zugehörigen Spannungs-Dehnungs-Diagramms zeigt sich, dass nichtlineare Verfestigung zu keiner Verbesserung der Genauigkeit der Anpassung führt (Abbildung 8.14). Im Vergleich zur Simulation mit linearer Ver-

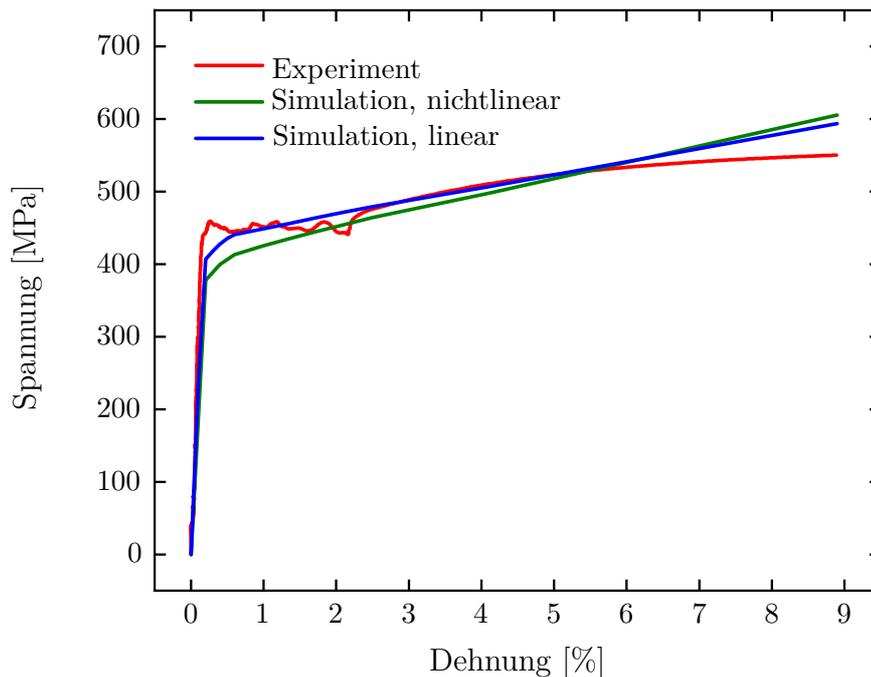


Abbildung 8.14: Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines simulierten Zugversuchs mit linearer und nichtlinearer Verfestigung im Vergleich zum Experiment an Stahl DP1.

festigung beginnt das plastische Fließen bei einer etwas niedrigeren Spannung, zum Ausgleich verfestigt das Material danach bei plastischer Deformation etwas stärker. Entsprechend der niedrigen Werte für k zeigt das Material nur einen sehr schwach ausgeprägten Anteil an exponentieller Verfestigung, lineare Verfestigung dominiert. Insgesamt betrachtet bildet die Simulation mit nichtlinearer Verfestigung das Experiment etwas schlechter ab als die Simulation mit linearer Verfestigung. Vermutlich ist die Ursache für diese stärkere Abweichung eine Überanpassung der Nanoindentierung. Überanpassung beschreibt den Effekt, dass ein Simulationsmodell mit steigender Parameterzahl bzw. Komplexität den Fit-Datensatz zwar besser anpassen kann als weniger komplexe Modelle, dafür jedoch weniger allgemeingültig funktioniert [8]. Zusammenfassend betrachtet zeigt die Implementierung des Modells nichtlinearer Verfestigung, insbesondere im betrachteten Dehnungsbereich, keine Vorteile gegenüber der linearen Verfestigung, weswegen in der vorliegenden Arbeit im Allgemeinen lineare Verfestigung genutzt wird.

8.2.3 Verifikation der numerischen Umsetzung

In den vorigen beiden Unterkapiteln wurde gezeigt, dass das in der Arbeit implementierte mikrostrukturbasierte Simulationsmodell die entsprechenden realen Experimente abbildet und dass das genutzte Materialmodell im hier betrachteten Kontext keine Nachteile gegenüber komplexeren Materialmodellen besitzt. In einem weiteren Schritt wird nachfolgend die numerische Umsetzung des Materialmodells selbst durch Abgleich mit einem alternativen Simulationsprogramm verifiziert. Das kommerzielle FEM Programm *SIMULIA ABAQUS FEA*[®], eine in der Industrie und Forschung verbreitete Simulationssoftware, wird zum Vergleich herangezogen. Analog zu den anderen Simulationen in dieser Arbeit werden das Material mit einem Modell für kleine Deformationen mit linearer Verfestigung beschrieben und die Materialparameter aus Tabelle 6.1 genutzt. Auf die Betrachtung der Transformationsdehnung wird für diesen Vergleich zum Zweck der Anwendbarkeit der in *ABAQUS* implementierten Materialmodelle verzichtet. Beide Simulationen werden an einem beispielhaften Ausschnitt der Mikrostruktur mit 96 Voxeln Kantenlänge durchgeführt. Für die Simulation in *LPMPP* wird die Struktur wie bisher mit Hexaedern und MatIp vernetzt. Das zur Simulation in *ABAQUS* verwendete Netz besteht aus Tetraedern mit quadratischer Ansatzfunktion. Der Vorteil der Verwendung von Tetraedern ist die Möglichkeit, die Mikrostruktur geometrienah zu vernetzen. Die Vernetzung erfolgt mit Hilfe von *Simpleware ScanIP*[®], einem Softwarepaket zur dreidimensionalen Bildbearbeitung und Segmentierung von Tomographien. Es ergeben sich hier bei grober, geometrieerhaltender Vernetzung etwa 320000 Tetraederelemente. Abbildung 8.15 zeigt den vernetzten Strukturausschnitt und Abbildung 8.16 das resultierende Spannungs-Dehnungs-Diagramm. Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm aus *ABAQUS* stimmt sehr gut mit der Simulation in *LPMPP* überein. Bis auf sehr geringe Abweichungen bei Fließbeginn sind beide Kurven annähernd deckungsgleich. Aufgrund des unterschiedlichen Aufbaus der FE-Netze aus Tetraedern bzw. Hexaedern kann an dieser Stelle die lokale relative Abweichung zwischen *ABAQUS* und *LPMPP* nicht direkt dargestellt werden. Abbildung 8.17 zeigt aber vergleichend die lokale Spannungsverteilung für eine Simulation mit *ABAQUS* und eine Simulation mit *LPMPP*. Auch hier zeigen sich nur geringe Unterschiede zwischen beiden Simulationen. Die Verteilung und das Niveau der Spannungen sind annähernd gleich, die Simulation mit *ABAQUS* zeigt lediglich geringfügig erhöhte Spannungsmaxima. Bei der Rechnung mit einem CPU-Kern benötigen beide Simu-

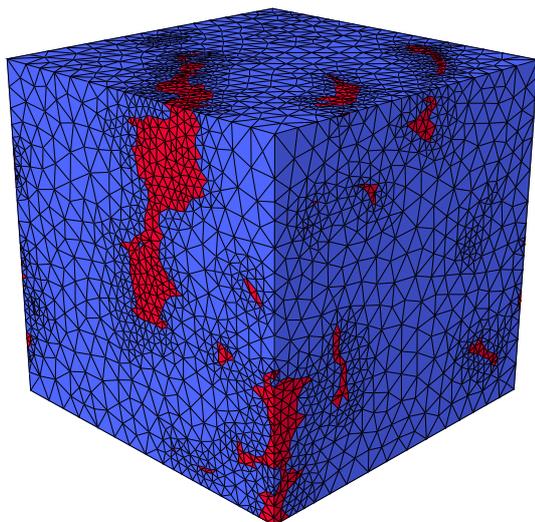


Abbildung 8.15: Darstellung des Tetraedernetzes zur Simulation in *ABAQUS*. Martensit ist rot dargestellt, Ferrit blau.

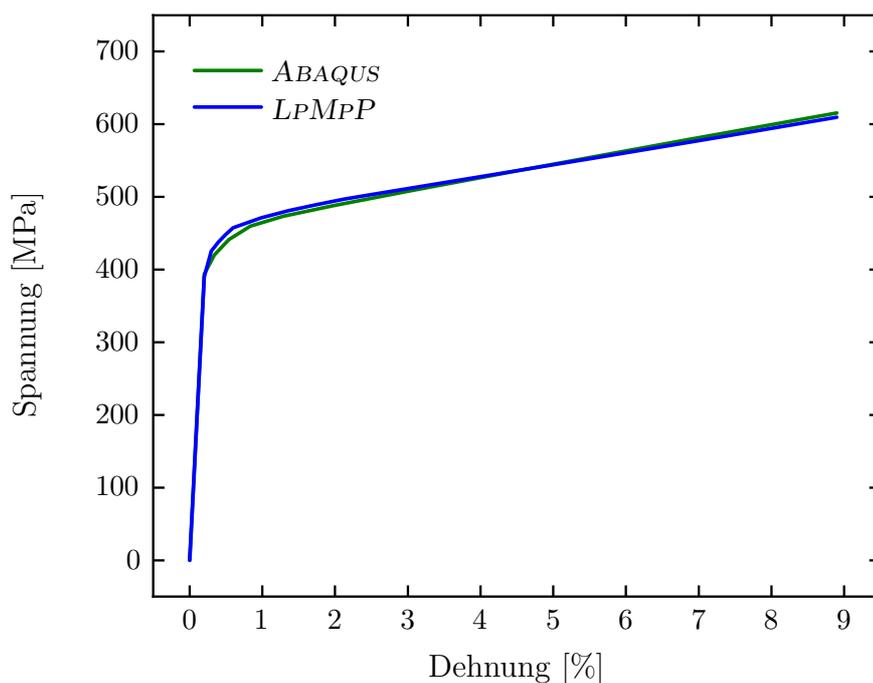


Abbildung 8.16: Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines mit *ABAQUS* und eines mit *LPMPP* simulierten Zugversuchs.

lationen etwa die gleiche Rechendauer. Hier zeigt sich ein bedeutender Vorteil von *LPMPP* gegenüber *ABAQUS*. Die Quelloffenheit von *deal.II* ermöglicht neben der Freiheit zur Implementierung beliebiger numerischer Modelle auch die freie Parallelisierung der Rechnung auf eine große Anzahl an Prozessorkernen.



Abbildung 8.17: Darstellung der lokalen Verteilung der Vergleichsspannung nach von Mises für eine Simulation mit *ABAQUS* (links) und eine Simulation mit *LPMPP* (rechts).

Für *deal.II* ist dabei eine lineare Skalierung der Beschleunigung durch Parallelisierung für Rechnungen mit mehr als 16000 Prozessorkernen nachgewiesen [13]. *ABAQUS* ermöglicht zwar auch die Parallelisierung der Rechnung auf viele Prozessorkerne, jedoch wird dies durch einen starken Anstieg der Lizenzkosten mit steigender Prozessorzahl beschränkt. Insgesamt betrachtet kann hier also sowohl das Ergebnis der implementierten Simulationsroutine verifiziert werden als auch ihr Vorteil gegenüber kommerzieller FEM Software gezeigt werden.

8.2.4 Validierung der Simulation des Stahls DP3

Alle bisher gezeigten Simulationen wurden an einer Tomographie von DP1 durchgeführt. Ebenso wurde die Bestimmung der Eigenschaften der einzelnen Phasen und der RVE-Größe an DP1 durchgeführt. Das Simulationsmodell ist jedoch nicht nur darauf ausgelegt, Simulationen auf Basis der Mikrostruktur dieses einen Stahls zu berechnen. Es soll auch die Möglichkeit bieten, das Spannungs-Dehnungs-Diagramm anderer Dualphasenstähle durch mikrostrukturbasierte Simulationen zu bestimmen, auch für die in Kapitel 9 beschriebenen virtuellen Dualphasenstahl-Mikrostrukturen. Daher dient die Simulation mit Hilfe der Tomographie eines weiteren Stahls (DP3) als finale Validierung des Simulationsmodells. Von der geänderten Mikrostruktur abgesehen wird die Simulation vollständig analog zur Simulation an DP1 durchgeführt, insbesondere wird das gleiche Materialmodell mit den gleichen Materialparametern genutzt. Beim Vergleich der Spannungs-Dehnungs-Diagramme (Abbildung 8.18) zeigt

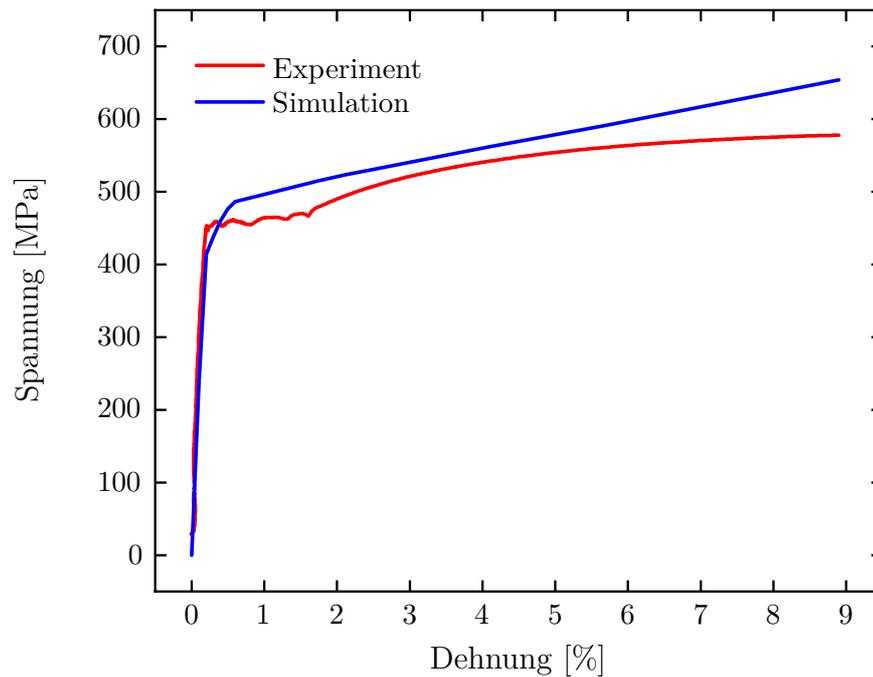


Abbildung 8.18: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für einen Zugversuch und die zugehörige Simulation an DP3.

sich bei DP3 eine weniger gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment als bei DP1. Jedoch ist die Abweichung der Kurven bei DP3 immer noch relativ gering. $R_{t5,0}$ hat z. B. eine Abweichung von etwa 4%. Nur für höhere Dehnungen ab etwa 7% beginnt die Abweichung stärker anzusteigen. In diesem Bereich ist aber auch bei DP1 der Unterschied zwischen Simulation und Experiment am größten. Die leicht gesteigerte Abweichung bei DP3 im Vergleich zu DP1 lässt sich durch zwei mögliche Ursachen begründen. Zum einen könnten die Eigenschaften der einzelnen Phasen zwischen DP1 und DP3 leicht variieren. Beide Stähle unterscheiden sich durch ihren Herstellungsprozess, nicht durch ihre chemische Zusammensetzung. Trotzdem enthält DP3 etwa doppelt so viel kohlenstoffreiche Zweitphase wie DP1. Da Kohlenstoff für die Festigkeit von Stahl von entscheidender Bedeutung ist, kann diese geänderte Verteilung des Kohlenstoffs eine Änderung der Eigenschaften der einzelnen Phasen verursachen. Zum anderen könnte die Abweichung auf einer Überbestimmung des Martensits bei der Segmentierung der Tomographie beruhen. Neben der Tomographie von DP3 wurden bei der AG der Dillinger Hüttenwerke mehrere Schlibbilder angefertigt und der Martensitanteil des Stahls bestimmt. Der so bestimmte Martensitanteil beträgt etwa 15,3%. Er liegt somit knapp zwei Prozentpunkte unter dem Wert der Tomographie, was ein leicht

gesenktes Spannungsniveau und somit eine bessere Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ergeben würde. Insgesamt kann jedoch der Verlauf des Spannungs-Dehnungs-Diagramms von DP3 sowie der Trend des ansteigenden Spannungsniveaus von DP1 zu DP3 auch mit der hier durchgeführten Simulation gut abgebildet werden. Aus diesem Grund wird die beschriebene Simulationsroutine auch im Folgenden unverändert genutzt.

8.3 Zusammenfassung - mechanische Simulation

Das vorliegende Kapitel beschreibt die Ergebnisse der Datenreduktion und der verschiedenen Verfahren der Validierung und Verifikation des in der Arbeit entwickelten Simulationsmodells.

Die Methode der Materialdefinition am Integrationspunkt wurde zur Datenreduktion entwickelt und mit einer ebenfalls implementierten Vergrößerung basierend auf Hanging-Node-Vernetzung verglichen. Beide Verfahren zeigen einzeln und auch in Kombination ein gutes Potential der Datenreduktion. MatIp der Reduktionsordnung 4 mit linearen Elementen wird in Folge der Kombination aus großer Reduktion von Rechendauer und Arbeitsspeicherauslastung sowie des geringen Unterschieds zur Simulation in Vollauflösung bei den weiteren Simulationen genutzt.

Zur Validierung des Simulationsprozesses diente in erster Linie der Vergleich mit dem realen Experiment. Der Stahl DP1, an dem auch die RVE-Größe und die Parameter der Einzelphasen bestimmt wurden, kann sehr exakt abgebildet werden. Lediglich der Bereich der Lüdersdehnung kann prinzipbedingt nicht dargestellt werden. Der Vergleich mit dem Stahl DP3 zeigt, dass auch ähnliche, dem Simulationsmodell unbekanntes Stähle gut nachgebildet werden.

Im Allgemeinen wird ein linear elastisch-plastisches Materialmodell mit linearer Verfestigung genutzt. Da dies eine Vereinfachung der Realität ist, wurden zusätzlich nichtlineare Materialmodelle untersucht. Als Ergebnis zeigte sich, dass weder geometrisch nichtlineare finite Elastizität noch nichtlineare Verfestigung bei plastischer Deformation das reale Materialverhalten im in der Arbeit relevanten Deformationsbereich genauer abbilden kann. Aus diesem Grund wird die Nutzung des linear elastisch-plastischen Modells mit linearer Verfestigung beibehalten.

Zur Verifikation wurde das in der C++ Programmbibliothek *deal.II* implementierte *LPMPP* mit der kommerziellen Software *ABAQUS* verglichen. Die Simulationen in beiden Programmen kamen zu sehr ähnlichen Ergebnissen. Folglich liefert *LPMPP* Simulationen in verlässlicher Qualität. Aufgrund der Quelloffenheit und der fehlenden Lizenzbeschränkungen ist es *ABAQUS* gegenüber für die in der Arbeit betrachteten Simulationen zu bevorzugen.

Insgesamt konnte das Simulationsmodell in vollem Umfang validiert und verifiziert werden. Es eignet sich somit wie beabsichtigt zur realitätsnahen Simulation von Dualphasenstahl auf Basis seiner Mikrostruktur.

9

Virtuelle Mikrostrukturen

In den vorigen Kapiteln wurden die mechanischen Eigenschaften von Dualphasenstahl auf Basis seiner experimentell bestimmten Mikrostruktur simuliert und das dafür notwendige Rahmenwerk aus z. B. der Bestimmung der Einzelphaseneigenschaften oder der RVE-Größe geschaffen. Ein weiteres Ziel der vorliegenden Arbeit ist jedoch, die prospektive Untersuchung neuer Dualphasenstahl-Mikrostrukturen schon vor ihrer Produktion zu ermöglichen. Grundlage hierfür ist die Erzeugung virtueller, realitätsnaher Mikrostrukturen. In den folgenden Unterkapiteln wird der Prozess der Erzeugung dieser Strukturen erläutert und die Methode der Bestimmung der Materialeigenschaften eines Dualphasenstahls auf Basis virtueller Strukturen anhand mehrerer Stähle validiert.

9.1 Strukturerzeugung

In Kapitel 2 wurden mehrere Verfahren zur Erzeugung virtueller Mikrostrukturen im Kontext von Dualphasenstahl beschrieben. Aufgrund ihrer günstigen Kombination aus realitätsnaher Abbildung der realen Mikrostruktur bei verhältnismäßig unkomplizierter Handhabung werden geometriebasierte Ansätze zur Erzeugung virtueller Mikrostrukturen im Sinne eines SSRVE [26, 140] ge-

nutzt. Für die prinzipielle Funktionsweise der Strukturierung ist hier nicht relevant, ob die virtuellen Strukturen an die Geometrieparameter real existierender Mikrostrukturen (Realstrukturen) oder an gewünschte Geometrieparameter zukünftiger Mikrostrukturen angepasst wird.

Die Geometrieparameter Volumenanteil, Oberflächendichte, Krümmungsintegralsdichte und Teilchendichte werden entsprechend ihrer Definition in Kapitel 5.3 als Parameter zur Beschreibung einer realen oder virtuellen Mikrostruktur verwendet. Der Volumenanteil an Martensit spielt für die mechanischen Eigenschaften einer Mikrostruktur eine entscheidende Rolle. Zur Bestimmung des relativen Einflusses der anderen drei Parameter werden Modellstrukturen mit klar definierter Geometrie genutzt. Bei Untersuchung mehrerer Strukturen mit gleichem Volumenanteil an Martensit, aber variierender Oberflächendichte, Krümmungsintegralsdichte und Teilchendichte (Abbildung 9.1) zeigt sich, dass eine Variation beispielsweise der Oberflächendichte um einen Faktor 5 zwischen vier beispielhaften Strukturen zu einer Änderung von $R_{t5,0}$ um etwa 8% führt. Wird bei der Untersuchung weiterer Modellstrukturen zusätzlich die Oberflächendichte (Abbildung 9.2) konstant gehalten, sinkt die Streuung von $R_{t5,0}$ auf etwa 2% ab. Die Modellstrukturen zeigen somit zum einen, dass der Simulationsprozess prinzipiell für alle betrachteten Geometrieparameter sensitiv ist, zum anderen wird jedoch deutlich, dass die Oberflächendichte entscheidender für die mechanischen Eigenschaften einer Struktur ist als die reinen Formparameter Krümmungsintegralsdichte und Teilchendichte. Aus diesem Grund werden die Geometrieparameter für die Berechnung der Abweichung einer virtuellen Struktur von der gewünschten Geometrie mit phänomenologischen Gewichtungsfaktoren versehen. Die mittlere relative Abweichung ΔG der Geometrieparameter G_{ist} einer Struktur vom Sollwert G_{soll} berechnet sich demnach als gewichteter Mittelwert der relativen Abweichungen der einzelnen Geometrieparameter zu

$$\Delta G = 0,64 \|\Delta V_r\| + 0,22 \|\Delta S_r\| + 0,07 \|\Delta C_r\| + 0,07 \|\Delta P_r\|. \quad (9.1)$$

Die Gewichtungsfaktoren wurden gewählt entsprechend ihres an den Modellstrukturen ermittelten Einflusses auf das Verhalten der Mikrostruktur in der Simulation.

Zur Erzeugung der Strukturen wird das quelloffene Programm *DREAM.3D* [60, 61, 62] genutzt. Das Programm besteht aus einer Vielzahl von Daten-

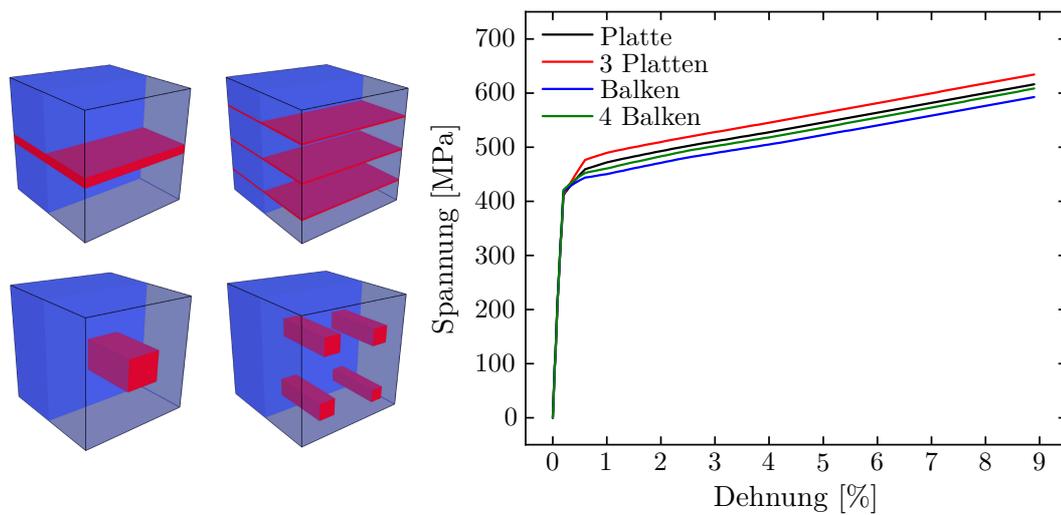


Abbildung 9.1: Vier beispielhafte Modellstrukturen mit gleichem Volumenanteil an Martensit, aber variierenden restlichen Geometrieparametern (links) mit den zugehörigen Spannungs-Dehnungs-Diagrammen (rechts).

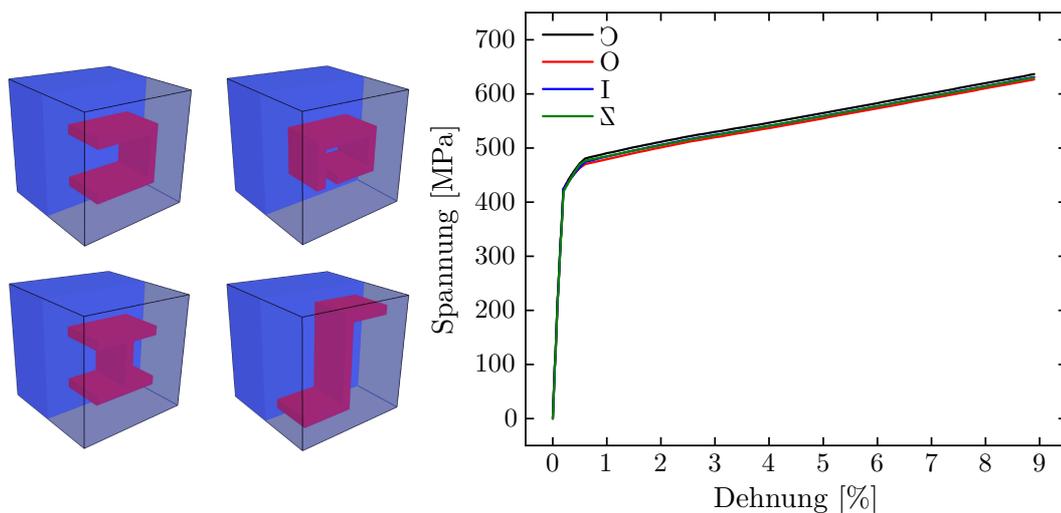


Abbildung 9.2: Vier beispielhafte Modellstrukturen mit gleichem Volumenanteil an Martensit und gleicher Oberflächendichte, aber variierenden restlichen Geometrieparametern (links) mit den zugehörigen Spannungs-Dehnungs-Diagrammen (rechts).

bearbeitungsroutinen, genannt *Filter*, die variabel zu einem problemspezifischen Prozess in einer *Pipeline* zusammengeschaltet werden. Aufgrund der Quelloffenheit besteht die Möglichkeit, eigene Filter zu implementieren. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit kann jedoch auf existierende Filter zurückgegriffen werden. Der Ursprung des Programms liegt in der Rekonstruktion dreidimensionaler Kornstrukturen aus EBSD-Daten. *DREAM.3D* bietet aber

zusätzlich Filter zur Erzeugung virtueller Korn- oder Phasenstrukturen auf Basis verschiedener geometrischer Maße. In der vorliegenden Arbeit wurde dies zur Erzeugung virtueller zweiphasiger Mikrostrukturen auf Basis ellipsoidaler Martensitbereiche genutzt. Die Strukturen werden durch die geometrischen Eigenschaften der Martensitbereiche bestimmt. Die relevanten Parameter sind hier der Volumenanteil an Martensit, die Parameter der Beta-Verteilung der Ellipsoid-Achsenverhältnisse¹ und die Parameter der logarithmischen Normalverteilung des äquivalenten Kugeldurchmessers der Ellipsoide². Die Ausrichtung der Hauptachse der Ellipsoide wird entsprechend der Walzstruktur des realen Stahls festgelegt. Somit ergibt sich ein Satz von neun Parametern par_{in} der Phasenstruktur als variable Eingabewerte für *DREAM.3D*. Die Parameter par_{in} dienen lediglich zur Steuerung von *DREAM.3D*, die Bewertung der Geometrie im Vergleich zur realen Mikrostruktur oder im Bezug zu einer gewünschten Sollstruktur erfolgt weiterhin über den oben beschriebenen Wert ΔG . Da die Platzierung der Ellipsoide der virtuellen Struktur im Raum vom Zufall beeinflusst ist, sind leichte Schwankungen der resultierenden Struktur bei mehreren Durchläufen von *DREAM.3D* mit gleichen Eingabeparametern par_{in} möglich. Zum Ausgleich dieser Streuung im Rahmen der folgenden Optimierung werden jeweils vier Strukturen mit gleichen Eingabewerten par_{in} erzeugt und ihre Geometrieparameter G_{ist} gemittelt. Im Gegensatz zu *LPMPP* ist *DREAM.3D* selbst nicht parallelisiert, jedoch ist die beschriebene Mittelung durch zeitgleiche Bestimmung der einzelnen Strukturen parallel implementiert.

Der Prozess der Strukturierung in *DREAM.3D* ist zur vollautomatischen Bestimmung virtueller Strukturen eingebettet in eine in *MATLAB* implementierte Optimierungsroutine (Abbildung 9.3). Ausgangspunkt der Strukturierung ist ein Referenzparametersatz G_{soll} . Diese Parameter können entweder im Programm selbst anhand eines Bilderstapels der Tomographie einer Realstruktur bestimmt werden oder schlicht als Sollwerte vorgegeben werden. Dementsprechend wird entweder eine virtuelle Struktur an die Realstruktur angepasst oder eine gänzlich neue Struktur erzeugt. Zu Beginn nutzt das Programm einen beliebigen Startparametersatz $par_{in,0}$ als Eingabewert für *DREAM.3D*³. Mit Hilfe dieser Eingabewerte wird in der Fitfunktion ein Steuer-

¹ Pro Achsenverhältnis zwei Parameter α und β .

² Mittelwert μ , Standardabweichung σ sowie minimaler und maximaler Schwellwert der Verteilung x_{min} und x_{max} .

³ Prinzipiell kann ein beliebiger Startwert genutzt werden, insbesondere die Wahl des Volumenanteils an Martensit nahe bei $V_{r,soll}$ ist jedoch sinnvoll.

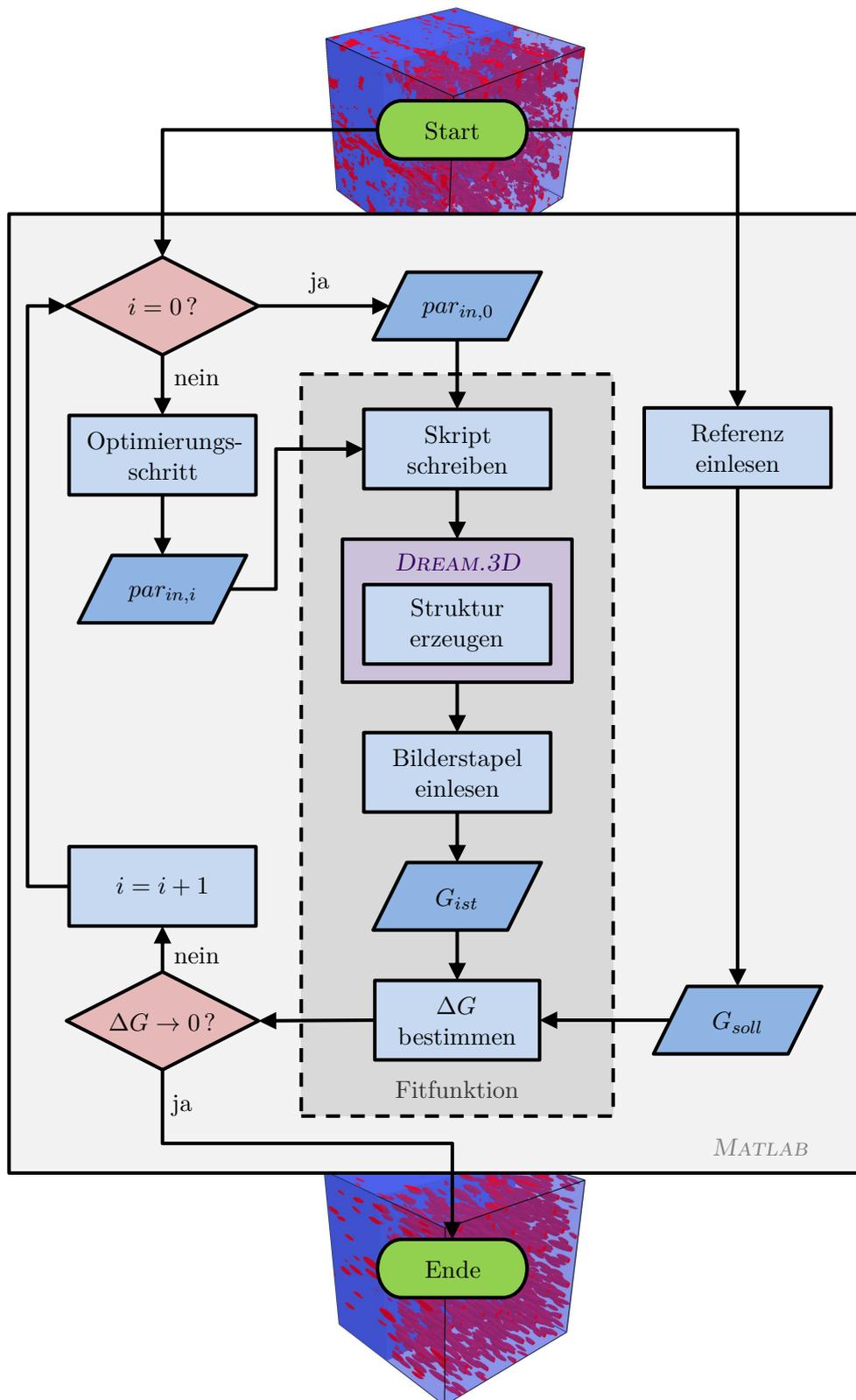


Abbildung 9.3: Ablaufplan der implementierten Routine zur Erzeugung virtueller Strukturen. Oben ist ein Ausschnitt der realen Mikrostruktur von DP1 als Eingangsgröße dargestellt, unten die entsprechende virtuelle Mikrostruktur als Ausgangsgröße.

skript für *DREAM.3D* erstellt. Alle festen Parameter, wie z. B. die Ausrichtung der Ellipsoide, sind in einem Default-Skript hinterlegt, welches entsprechend der Eingabewerte angepasst wird. In *DREAM.3D* wird durch dieses Skript die Statistik der Phasengeometrie erstellt, die einzelnen Phasenbereiche entsprechend erzeugt und die so gewonnene Phasenstruktur als Bilderstapel im gleichen Format wie die originalen Tomographien gespeichert. Der Bilderstapel wird dann in der Fitfunktion in *MATLAB* eingelesen, und die Geometrieparameter G_{ist} sowie ihre Abweichung zum Sollwert ΔG als Fitwert werden bestimmt. Falls ΔG eine gegebene Toleranz nahe Null überschreitet, werden in einem Optimierungsschritt ein neuer Parametersatz $par_{in,i}$ bestimmt und die Fitfunktion abermals durchlaufen. Die Parameteroptimierung erfolgt durch einen in *MATLAB* implementierten Nelder-Mead-Simplex Algorithmus [88, 97, 119], jedoch können dank modularer Implementierung des gesamten Optimierungsprozesses auch andere Routinen, wie beispielsweise genetische Algorithmen [141], genutzt werden. Der Prozess wird iterativ so lange durchlaufen, bis ΔG hinreichend klein ist. Die entstandene virtuelle Struktur wird dann als endgültige Struktur akzeptiert. Dank der Ausgabe der virtuellen Struktur als segmentierter Bilderstapel wird sie in den anschließenden Simulationen in *LPMPP* analog zur Realstruktur behandelt.

9.2 Validierung

Die Validierung des Prozesses zur Erzeugung virtueller Strukturen erfolgt zweistufig. Dabei wird zum einen die Güte der Anpassung virtueller Strukturen an vorhandene Tomographien bezüglich der Geometrieparameter und der Fließkurven bestimmt, zum anderen wird die Fähigkeit des Modells, auf Basis virtueller Strukturen die mechanischen Eigenschaften neuer Mikrostrukturen vorherzusagen, untersucht.

Im ersten Teil der Validierung werden dem Strukturerzeugungsprozess die Bilderstapel der Tomographien von DP1 und DP3 (Abbildung 5.14) als Sollwert vorgegeben. Tabelle 9.1 zeigt die geometrischen Parameter der realen und virtuellen Mikrostrukturen mit ihrer jeweiligen Abweichung ΔG . Die ermittelten virtuellen Strukturen treffen die zugehörigen Realstrukturen bis auf eine Abweichung von unter 2%. Die stärker gewichteten Parameter Volumenanteil und Oberflächendichte werden entsprechend ihrer Gewichtung mit sehr guter Ge-

Tabelle 9.1: Geometrieparameter der Realstrukturen (Index R) von DP1 und DP3 sowie der zugehörigen virtuellen Mikrostrukturen (Index V) mit ihren jeweiligen relativen Abweichungen.

	DP1 $_R$	DP1 $_V$	DP3 $_R$	DP3 $_V$
V_r [%]	8,34	8,34	17,13	17,17
ΔV_r [%]	0,04		0,24	
S_r [10^9 m^{-1}]	8,98	8,80	16,54	16,67
ΔS_r [%]	2,00		0,81	
C_r [10^9 m^{-2}]	3,44	3,60	4,90	5,29
ΔC_r [%]	4,46		7,42	
P_r [10^{14} m^{-3}]	3,50	4,16	5,68	5,59
ΔP_r [%]	15,82		1,65	
ΔG [%]	1,88		0,97	

nauigkeit abgebildet, lediglich bei der weniger bedeutenden Krümmungsdichte und der Teilchendichte besteht teilweise eine moderate Abweichung. Basierend auf den virtuellen Strukturen werden Zugversuche simuliert. Beide virtuelle Strukturen zeigen eine bedeutende Übereinstimmung mit den zugehörigen Realstrukturen in ihrem Spannungs-Dehnungs-Diagramm (Abbildung 9.4 und 9.5). Bei DP3 liegt beispielsweise die Abweichung von $R_{t5,0}$ zwischen der Simulation an der realen Mikrostruktur und der virtuellen Mikrostruktur knapp über 1%. Bei DP1 liegt die Abweichung von $R_{t5,0}$ hier sogar bei unter 0,5%. Insgesamt betrachtet bilden die erzeugten virtuellen Mikrostrukturen die realen Mikrostrukturen sowohl bezüglich der Geometrie als auch bezüglich der mechanischen Eigenschaften sehr genau ab. Die Untersuchungen zeigen somit, dass das entwickelte Verfahren zur Erzeugung virtueller Mikrostrukturen in hohem Maße geeignet ist, virtuelle Strukturen entsprechend einer real bekannten Mikrostruktur nachzubilden.

Die Erstellung virtueller Mikrostrukturen entsprechend einer real bekannten Mikrostruktur stellt nur einen Zwischenschritt der Strukturierung zum Zweck der Validierung dar. Das Hauptziel der Strukturierung im Kontext der vorliegenden Arbeit ist die Erstellung neuer, noch nicht durch Tomographien bekannter virtueller Mikrostrukturen. Hierzu dient die Untersuchung der Stähle DP2 und DP4. Das mechanische Verhalten beider Stähle ist aus uniaxialen Zugversuchen bekannt, es liegt jedoch im Gegensatz zu DP1 und

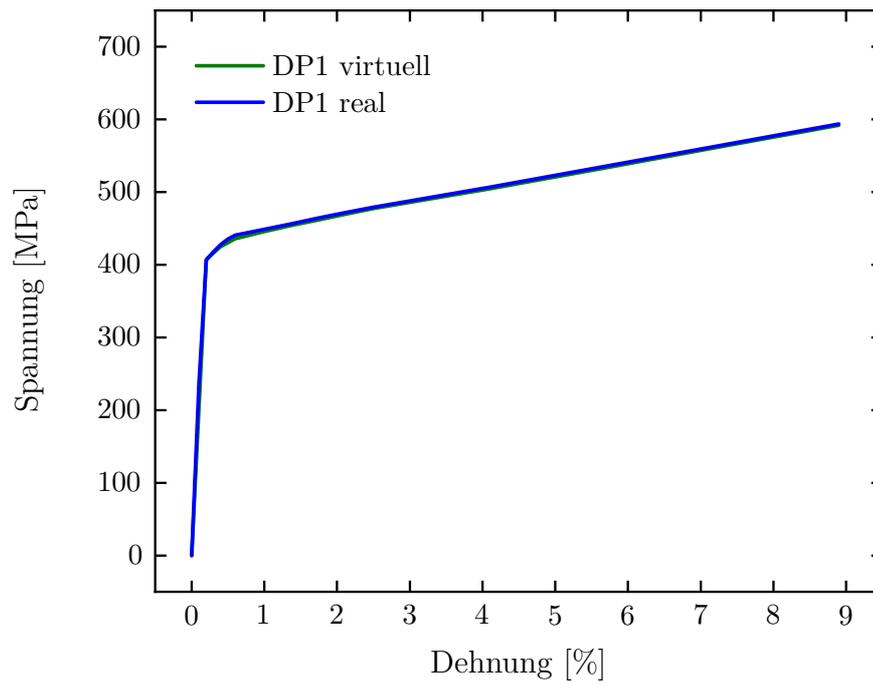


Abbildung 9.4: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für einen simulierten Zugversuch der Realstruktur von DP1 und der zugehörigen virtuellen Mikrostruktur.

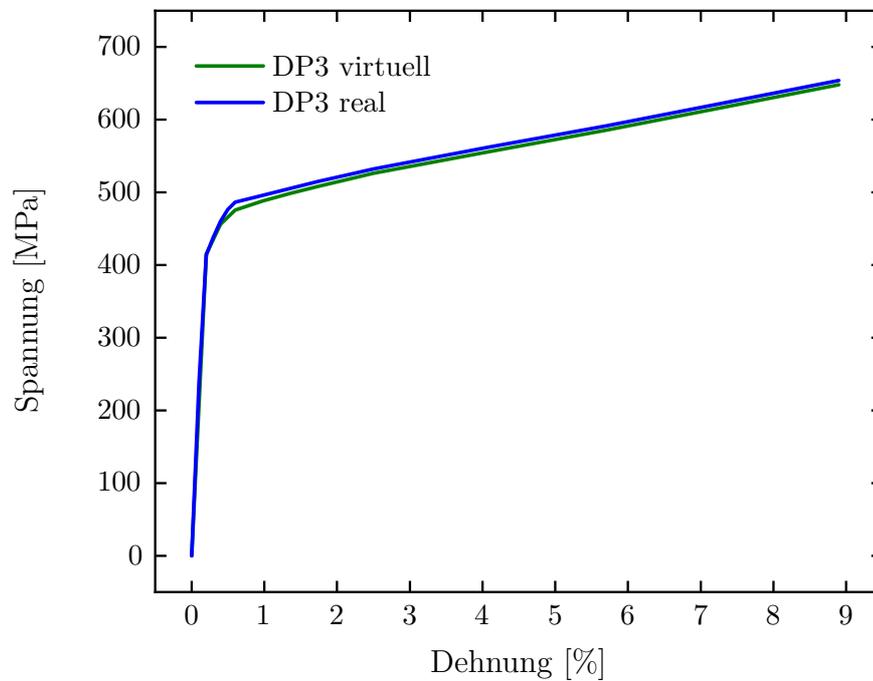


Abbildung 9.5: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für einen simulierten Zugversuch der Realstruktur von DP3 und der zugehörigen virtuellen Mikrostruktur.

DP3 keine dreidimensionale Mikrostrukturinformation durch Tomographien vor. Lediglich der Volumenanteil an Martensit wurde bei der *AG der Dillinger Hüttenwerke* aus zweidimensionalen Schlifffbildern bestimmt. Zur Erzeugung der zugehörigen virtuellen Strukturen werden noch Oberflächendichte, Krümmungsintegraldichte und Teilchendichte benötigt. Die Werte werden entsprechend ihres Martensitvolumenanteils aus den Werten von DP1 und DP3 inter- bzw. extrapoliert. Für DP1 und DP3 entspricht V_r hier nicht allein der Tomographie, sondern zwecks statistischer Absicherung dem Mittelwert aus Tomographie und Schlifffbildern. Die so bestimmten vier Parametersätze werden als Sollwert der Strukturierung vorgegeben und entsprechende virtuelle Mikrostrukturen erstellt (Tabelle 9.2).

Tabelle 9.2: Geometrieparameter der Realstrukturen von DP1, DP2, DP3 und DP4 sowie der zugehörigen virtuellen Mikrostrukturen mit ihren jeweiligen relativen Abweichungen.

	DP1 _R	DP1 _V	DP2 _R	DP2 _V	DP3 _R	DP3 _V	DP4 _R	DP4 _V
V_r [%]	9,24	9,19	9,75	9,69	15,63	15,56	16,46	16,37
ΔV_r [%]	0,61		0,67		0,43		0,51	
S_r [10^9 m^{-1}]	8,98	8,87	9,57	9,32	16,54	16,35	17,51	16,83
ΔS_r [%]	1,25		2,76		1,11		4,07	
C_r [10^9 m^{-2}]	3,44	3,45	3,55	3,80	4,90	5,74	5,09	5,22
ΔC_r [%]	0,25		6,45		14,54		2,45	
P_r [10^{14} m^{-3}]	3,50	4,33	3,67	4,61	5,68	5,33	5,96	5,46
ΔP_r [%]	19,19		20,36		6,61		9,22	
ΔG [%]	2,03		2,91		2,00		2,04	

Die virtuellen Strukturen zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Sollwerten. Die Abweichung liegt zwischen 2,00% bei DP3 und 2,91% bei DP2. Wie bei den vorigen virtuellen Mikrostrukturen zeigen die Parameter Krümmungsintegraldichte und Teilchendichte entsprechend ihrer niedrigeren Gewichtung eine höhere Abweichung zum Sollwert als die Parameter Volumenanteil und Oberflächendichte, insgesamt betrachtet sind die Abweichungen jedoch gering. An den virtuellen Mikrostrukturen werden wiederum Zugversuche simuliert und ihre Ergebnisse mit den jeweiligen Experimenten verglichen (Abbildung 9.6). Der Wert $R_{t5,0}$ wird zum Vergleich herangezogen. Die Simulationen zeigen eine überaus gute Übereinstimmung zum Experiment. Die maximale Abweichung beträgt für DP3 2%, alle anderen Simulationen liegen bei einer Abweichung

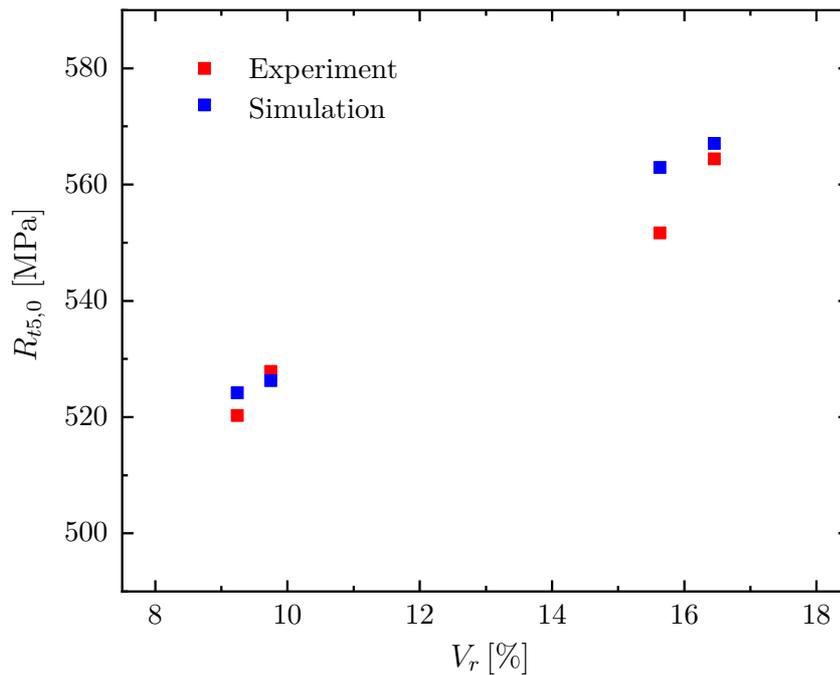


Abbildung 9.6: Vergleich der experimentell bestimmten $R_{t5,0}$ -Werte mit den an virtuellen Mikrostrukturen simulierten Werten für DP1, DP2, DP3 und DP4 in Abhängigkeit des vorgegebenen Martensitvolumenanteils.

zum Experiment von deutlich unter 1%. Das Simulationsmodell und die Routine zur Erzeugung virtueller Strukturen sind dementsprechend in der Lage, auch die mechanischen Eigenschaften neuer, aus der Tomographie unbekannter, Dualphasenstähle mit hoher Genauigkeit vorherzusagen, sofern die Materialparameter der Einzelphasen hinreichend genau bekannt sind.

Die in der Arbeit entwickelten Modelle bieten hiervon ausgehend nun mehrere Vorgehensweisen. Zum einen können Dualphasenstähle, deren Mikrostruktur nur aus zweidimensionalen Schliiffbildern bekannt sind, modelliert werden. Die Erzeugung passender virtueller Strukturen ermöglicht hier die umfassende mechanische Untersuchung in der Simulation. Zum anderen können die mechanischen Eigenschaften noch unbekannter Stähle ermittelt werden. So können virtuelle Strukturen direkt anhand der für den neuen Stahl erwarteten Geometrieparameter durch den Optimierungsprozess erstellt werden. Sie können aber auch unter Umgehung der Optimierung durch manuelle Wahl der Parameter im implementierten *DREAM.3D*-Prozess und optische Beurteilung der entstandenen Strukturen erzeugt werden. Beides ermöglicht die Erstellung neuer Dualphasenstahl-Mikrostrukturen und die Untersuchung ihrer mechanischen Eigenschaften im simulierten Zugversuch.

10

Fazit und Ausblick

10.1 Zusammenfassung und Bewertung der erzielten Ergebnisse

An dieser Stelle sei wieder an einen Abschnitt aus Kapitel 1 erinnert:

Das Hauptziel der Arbeit ist die Schaffung eines Werkzeugs, welches auf Basis der Parameter der Phasenstruktur die Fließkurve voraussagt. Hierzu wird in der Arbeit neben der Prozesskette der Simulation auf Basis der realen Mikrostruktur des Stahls auch ein Prozess zur Erzeugung virtueller Mikrostrukturen entwickelt. Dies ermöglicht es, nicht nur bekannte Dualphasenstähle in der Simulation zu untersuchen, sondern auch vielversprechende neue Mikrostrukturen schon vor ihrer Produktion zu evaluieren.

Gemessen an dieser Aussage hat die Arbeit bei Betrachtung der erhaltenen Ergebnisse ihr Ziel vollumfänglich erreicht.

Nach der Darlegung des Stands der Forschung sowie der theoretischen Grundlagen der Arbeit in den Kapiteln 2 und 3 wurde in den Kapiteln 4 bis 8 erstmalig die gesamte Prozesskette zur mikrostrukturbasierten Simulation von Dualpha-

senstahl in einem Werk zusammenfassend beschrieben. Das Material wurde als zweiphasiges Kontinuum mit linear elastisch-plastischem und linear verfestigendem Verhalten modelliert. Die genutzten Materialparameter konnten dabei durch Nanoindentierung der einzelnen Phasen des Stahls und numerische Parameteridentifikation mittels inverser Methoden bestimmt werden. Zur Absicherung dieser Annahme wurden zusätzlich ein Modell für finite Deformationen und eine Form der nichtlinearen Verfestigung implementiert. Sie zeigen jedoch in dem in der Arbeit betrachteten Dehnungsbereich keine Vorteile gegenüber dem gewählten Materialmodell. Die sehr modulare Implementierung in der quelloffenen C++ Programmbibliothek *deal.II*, mittels Verwendung eines Newton-Verfahrens zur Lösung der globalen Systemgleichung und der lokalen Fließbedingung sowie numerischer Ableitungsbildung, ermöglicht die Verwendung aller implementierten Modelle und auch die einfache Implementierung neuer Materialmodelle in zukünftigen Arbeiten.

Mit MatIp wurde ein praktikabler Ansatz zur Reduktion der großen Datenmengen aus der Tomographie für hexaederelementbasierte FE-Netze entwickelt. Im Vergleich mit Hanging-Node-Vernetzung und einer geometrienahen Vernetzung durch Tetraederelemente zeigt MatIp sowohl bei der Rechendauer und der Arbeitsspeicherauslastung als auch bei der Qualität der Berechnung sehr gute Ergebnisse. Des Weiteren verursacht MatIp nur einen sehr geringen Vernetzungsaufwand. Der gesamte Vernetzungsprozess der Mikrostruktur ist in der Simulationsroutine implementiert, es ist kein zusätzlicher Arbeitsschritt mit zusätzlichen Programmen zur Vernetzung der Strukturen notwendig.

In der Arbeit wurde zudem eine unkomplizierte Methode zur Bestimmung der für mikrostrukturbasierte Simulationen entscheidenden Größe des RVE geschaffen. Mit Hilfe einer Reihe einfacher Härtemessungen am Stahl kann durch Bestimmung der Streuung der Messwerte die Größe des RVE berechnet werden. Das Verfahren ermöglicht die Bestimmung der RVE-Größe schon vor der Anfertigung der dreidimensionalen Mikrostruktur, die dann im Sinne von Effizienzsteigerung an die RVE-Größe angepasst durchgeführt werden kann. Bei der numerischen Validierung der Methode an verschiedenen großen Ausschnitten einer Tomographie wurde als weiterer Aspekt die Ergodizität der Mikrostruktur entdeckt. Bei geschickter Anwendung ermöglicht dieser Aspekt bei zukünftigen Tomographien gegebenenfalls weitere Effizienzsteigerungen.

Der Abgleich der entwickelten Simulationsroutine auf Basis einer Dualphasenstahl-Mikrostruktur, anhand derer der Prozess entwickelt wurde, mit dem Experiment zeigt sehr gute Übereinstimmungen. Auch die Simulation einer neuen Mikrostruktur eines anderen Dualphasenstahls, die dem Simulationsprozess bis zu diesem Zeitpunkt unbekannt war, zeigt nur eine geringe Abweichung zum Experiment. Somit konnte die Fähigkeit der implementierten Simulation, die makroskopischen mechanischen Eigenschaften von Dualphasenstahl realitätsnah auf Basis seiner Mikrostruktur abzubilden, bestätigt werden. Zusätzlich konnte durch numerische Untersuchungen gezeigt werden, dass das Simulationsmodell auch bei der lokalen Betrachtung des Deformationsfeldes eine hohe Genauigkeit erreicht.

Der letzte in der Arbeit behandelte Punkt ist die Erzeugung virtueller Mikrostrukturen. Auf Basis von Ellipsoiden werden in einem Optimierungsprozess mit Hilfe des quelloffenen Programms *DREAM.3D* virtuelle Strukturen erzeugt, die in ihren geometrischen Eigenschaften an reale Mikrostrukturen angepasst sind. Es konnte gezeigt werden, dass die so generierten virtuellen Strukturen, bis auf äußerst geringe Abweichungen, sowohl geometrisch als auch in ihrem mechanischen Verhalten in der Simulation zweier für die Arbeit erzeugten Tomographien entsprechen. Danach wurden auch virtuelle Strukturen für zwei neue Dualphasenstähle, ausgehend von ihrem Martensitvolumenanteil und den beiden bekannten Mikrostrukturen, erzeugt. Hier zeigte sich eine beachtliche Übereinstimmung mit den Experimenten an den beiden Stählen. In der Konsequenz besitzen der entwickelte Simulationsprozess und die Routine zur Strukturierung wie vorgesehen die Eignung, auf Basis der Parameter der Phasenstruktur die Fließkurve eines Dualphasenstahls vorherzusagen.

Eine Kombination der mechanischen Simulation und der Strukturierung in einem Optimierungsprozess bietet noch ein weiteres großes Potential. Als Zielgröße der Strukturierung dient dabei die Anpassung der mechanischen Eigenschaften in der Simulation an ein gewünschtes Verhalten. Hierdurch wird gezielt die optimale Mikrostruktur für die angestrebten mechanischen Eigenschaften bestimmt. Im Sinne von Reverse Engineering kann diese Struktur dann bei der Produktion des Materials eingestellt werden.

10.2 Ausblick auf Folgearbeiten

Die mikrostrukturbasierte Simulation der Gefüge-Eigenschafts-Korrelation von Dualphasenstahl ist ein sehr weites Forschungsfeld. Trotz der umfassenden Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit ist das Spektrum möglicher Arbeiten bei weitem noch nicht erschöpft. Im Folgenden sollen zwei besonders interessante Themen erläutert werden.

Die Erweiterung der Betrachtung auf andere Bereiche des Spannungs-Dehnungs-Diagramm bietet sich als Anknüpfungspunkt an. Bisher wurde ein Bereich mit Dehnungen kleiner als 10% betrachtet, indem sich das Material elastisch-plastisch verhält. Durch Miteinbeziehen von Schädigung in die Untersuchung kann der Dehnungsbereich bis zum Probenversagen ausgeweitet werden. Der Grundstein hierzu wurde in der Arbeit bereits gelegt. Bei den dann auftretenden hohen Dehnungen des Materials kann auf das implementierte Modell für finite Deformationen zurückgegriffen werden. Ebenso können Zugversuche entsprechend der durchgeführten Zugversuche mit optischer, feldlicher Dehnungsmessung im Bereich der Einschnürung als Validierung von Modellen für hohe Deformationen und Schädigung dienen. Bezüglich der lokalen Spannungsverteilung besteht dann jedoch noch weiterer Untersuchungsbedarf, wie in Kapitel 8.1.1 und Kapitel 8.1.3 dargelegt. Zur Implementierung von Schädigung stehen verschiedene Modelle zur Verfügung [77, 104, 118]. Insbesondere bietet sich ein Modell ähnlich der Arbeit von Geringer und Diebels [54, 55] an, das am *Lehrstuhl für Technische Mechanik* schon in *deal.II* implementiert wurde. Aufgrund der variablen Gestaltung von *LPMPP* kann es für zukünftige Untersuchungen unkompliziert in den hier beschriebenen Simulationsablauf eingebunden werden. Ebenso kann die Betrachtung auf die Lüdersdehnung erweitert werden. Hierzu ist es jedoch erforderlich, das Material kleinskaliger als auf Basis der Phasenstruktur zu betrachten. Die Kornstruktur und gegebenenfalls ein Modell zur Darstellung der Versetzungen müssen dann zusätzlich umgesetzt werden [94, 112, 128].

In naher Verbindung dazu steht die Erweiterung der Betrachtung auf weitere Stähle. Mit der hauptsächlichen Abhängigkeit der mechanischen Eigenschaften von der Phasenstruktur nimmt Dualphasenstahl eine Sonderstellung ein. Andere Stähle werden stärker von der darunterliegenden Kornstruktur bestimmt. Zur Bestimmung der Kornstruktur werden weitere experimentelle Untersuchungen, insbesondere mittels EBSD zur Ermittlung der Kornorien-

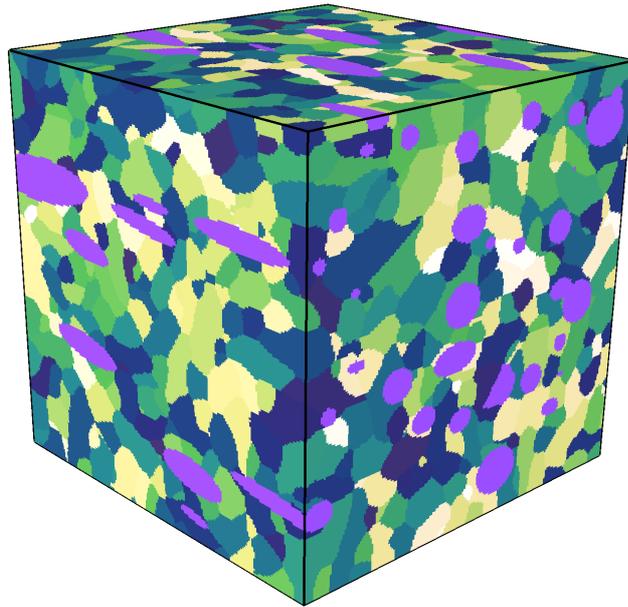


Abbildung 10.1: Darstellung einer beispielhaften zweiphasigen Kornstruktur. Martensit ist in violett als homogene Phase gezeigt, die einzelnen Körner der Ferritphase sind von gelb bis blau individuell eingefärbt.

tierungen, benötigt. Von kontinuumsmechanischer Sicht aus muss das Modell dann auf Anisotropie erweitert werden, um das anisotrope Verhalten einzelner Körner abbilden zu können. Dies kann sowohl phänomenologisch mit Hilfe klassischer anisotroper Materialmodelle oder auch stärker physikalisch orientiert durch Kristallplastizität erfolgen. Die Betrachtung der Kornstruktur stellt die Numerik vor besondere Herausforderungen. Aufgrund der deutlich gestiegenen Menge an Mikrostrukturinformationen steigen Rechenzeit und Arbeitsspeicherauslastung stark an. Abhilfe könnte hier ebenfalls die Verwendung virtueller Mikrostrukturen schaffen (Abbildung 10.1). Das in der Arbeit verwendete Programm *DREAM.3D* bietet nicht nur die Möglichkeit zur Erzeugung homogener Phasen, sondern auch zur Erzeugung von Kornstrukturen [60, 61]. Hierdurch können die umfassenden Informationen aus dreidimensionalen Tomographien und EBSD-Bildern in deutlich kleinere, besser handhabbare Mikrostrukturen umgesetzt werden.

Abschließend lässt sich sagen, dass es im Bereich der Simulation von Dualphasenstahl, oder auch von Stahl im Allgemeinen, noch viele weitere interessante Projekte gibt, beispielsweise im Bereich von Schädigung und Anisotropie. Wie an den oben beschriebenen möglichen Folgearbeiten erkennbar, bieten die

in der vorliegenden Arbeit entwickelten und beschriebenen Modelle zur mikrostrukturbasierten Simulation und zur Erzeugung virtueller Strukturen eine bedeutende Grundlage für weitere Betrachtungen. Dies ermöglicht es, das Verständnis der Gefüge-Eigenschafts-Korrelation von Stahl immer weiter zu präzisieren und so den vor mehr als 3000 Jahren begonnenen Siegeszug von Stahl als bedeutenden und vielseitigen Werkstoff auch in Zukunft weiterzuführen.

Literaturverzeichnis

- [1] ABID, N. H., R. K. A. AL-RUB & A. N. PALAZOTTO [2015]. ‘Computational modeling of the effect of equiaxed heterogeneous microstructures on strength and ductility of dual phase steels.’ *Computational Materials Science*, **103**, S. 20–37.
- [2] AL-ABBASI, F. & J. A. NEMES [2007]. ‘Characterizing DP-steels using micromechanical modeling of cells.’ *Computational Materials Science*, **39**(2), S. 402–415.
- [3] ALKEMPER, J. & P. W. VOORHEES [2001]. ‘Quantitative serial sectioning analysis.’ *Journal of Microscopy*, **201**(3), S. 388–394.
- [4] ALTENBACH, J. & H. ALTENBACH [1994]. *Einführung in die Kontinuums-Mechanik*. Teubner.
- [5] ARNDT, D., W. BANGERTH, D. DAVYDOV, T. HEISTER, L. HELTAI, M. KRONBICHLER, M. MAIER, J.-P. PELTERET, B. TURCK SIN & D. WELLS [2016]. ‘The deal.II library, version 8.5.’ *Journal of Numerical Mathematics*, **24**, S. 135–141.
- [6] BABUSKA, I., B. SZABO & I. KATZ [1981]. ‘The p-Version of the Finite Element Method.’ *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **18**(3), S. 515–545.
- [7] BACHMAT, Y. & J. BEAR [1986]. ‘Macroscopic modelling of transport phenomena in porous media. 1: The continuum approach.’ *Transport in Porous Media*, **1**(3), S. 213–240.
- [8] BACKHAUS, K., B. ERICHSON, W. PLINKE & R. WEIBER [2018]. *Multivariate Analysemethoden: Eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer-Verlag, 15. Ausgabe.
- [9] BAIN, E. C. [1924]. ‘The Nature of Martensite.’ *Transactions of the AIME*, **70**, S. 25–35.
- [10] BALAY, S., W. D. GROPP, L. C. MCINNES & B. F. SMITH [1997]. ‘Efficient Management of Parallelism in Object Oriented Numerical Software Libraries.’ In *Modern Software Tools in Scientific Computing*, editiert

- von E. Arge, A. M. Bruaset & H. P. Langtangen, S. 163–202. Birkhäuser Press.
- [11] BALKE, H. [2008]. *Einführung in die technische Mechanik: Festigkeitslehre*. Springer-Verlag.
- [12] BALZANI, D., L. SCHEUNEMANN, D. BRANDS & J. SCHRÖDER [2014]. ‘Construction of two- and three-dimensional statistically similar RVEs for coupled micro-macro simulations.’ *Computational Mechanics*, **54**(5), S. 1269–1284.
- [13] BANGERTH, W., C. BURSTEDDE, T. HEISTER & M. KRONBICHLER [2012]. ‘Algorithms and Data Structures for Massively Parallel Generic Adaptive Finite Element Codes.’ *ACM Transactions on Mathematical Software*, **38**(2), S. 14:1–14:28.
- [14] BANGERTH, W., R. HARTMANN & G. KANSCHAT [2007]. ‘deal.II – a General Purpose Object Oriented Finite Element Library.’ *ACM Transactions on Mathematical Software*, **33**(4), S. 24/1–24/27.
- [15] BANK, R. E., A. H. SHERMAN & A. WEISER [1983]. ‘Some refinement algorithms and data structures for regular local mesh refinement.’ *Scientific Computing, Applications of Mathematics and Computing to the Physical Sciences*, **1**, S. 3–17.
- [16] BARGEL, H., P. CARDINAL, H. HILBRANS, G. SCHULZE & G. WURZEL [2009]. *Werkstoffkunde*. Springer-Lehrbuch. Springer.
- [17] BARGMANN, S., B. KLUSEMANN, J. MARKMANN, J. E. SCHNABEL, K. SCHNEIDER, C. SOYARSLAN & J. WILMERS [2018]. ‘Generation of 3D representative volume elements for heterogeneous materials: A review.’ *Progress in Materials Science*, **96**, S. 322–384.
- [18] BAUSCHINGER, J. [1886]. ‘Über die Veränderung der Elastizitätsgrenze und die Festigkeit des Eisens und Stahls durch Strecken und Quetschen, durch Erwärmen und Abkühlen und durch oftmals wiederholte Beanspruchungen.’ *Mitteilungen aus dem Mechanisch-Technischen Laboratorium der Königlichen Technischen Hochschule in München*, **13**, S. 1–116.
- [19] BEDNARCYK, B. A., J. ABOUDI & S. M. ARNOLD [2008]. ‘The equivalence of the radial return and Mendelson methods for integrating the classical plasticity equations.’ *Computational Mechanics*, **41**(5), S. 733–737.
- [20] BETTEN, J. [2003]. *Finite Elemente für Ingenieure 1: Grundlagen, Matrixmethoden, elastisches Kontinuum*. Engineering online library. Springer.

- [21] BETTEN, J. [2013]. *Finite Elemente für Ingenieure 2: Variationsrechnung, Energiemethoden, Näherungsverfahren, Nichtlinearitäten*. Springer-Lehrbuch. Springer Berlin Heidelberg.
- [22] BJORCK, A. [1996]. *Numerical methods for least squares problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [23] BONET, J. & R. D. WOOD [1997]. *Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis*. Cambridge University Press.
- [24] BONIFAZ, E., J. BAUS & A. CZEKANSKI [2016]. ‘Finite element modelling of dual-phase polycrystalline Nickel-base alloys.’ *Mechanics of Materials*, **98**, S. 134–141.
- [25] BOWLES, J. S. & C. M. WAYMAN [1972]. ‘The bain strain, lattice correspondences, and deformations related to martensitic transformations.’ *Metallurgical Transactions*, **3**(5), S. 1113–1121.
- [26] BRANDS, D., D. BALZANI, L. SCHEUNEMANN, J. SCHRÖDER, H. RICHTER & D. RAABE [2016]. ‘Computational modeling of dual-phase steels based on representative three-dimensional microstructures obtained from EBSD data.’ *Archive of Applied Mechanics*, **86**(3), S. 575–598.
- [27] BRITZ, D., J. WEBEL, J. GOLA & F. MÜCKLICH [2017]. ‘A Correlative Approach to Capture and Quantify Substructures by Means of Image Registration.’ *Practical Metallography*, **54**, S. 685–696.
- [28] BUREAU OF INTERNATIONAL RECYCLING. ‘Stahlproduktion und Schrottverbrauch weltweit in den Jahren 2005 bis 2017 (in Millionen Tonnen).’ <https://de.statista.com/statistik/daten/studie/169315/umfrage/stahlproduktion-und-schrottverbrauch-weltweit/>. (05.11.2018).
- [29] BURSTEDDE, C., L. C. WILCOX & O. GHATTAS [2011]. ‘p4est: Scalable Algorithms for Parallel Adaptive Mesh Refinement on Forests of Octrees.’ *SIAM Journal on Scientific Computing*, **33**(3), S. 1103–1133.
- [30] BUZUG, T. M. [2008]. *Computed Tomography: From Photon Statistics to Modern Cone-Beam CT*. Springer Berlin Heidelberg.
- [31] CALCAGNOTTO, M., D. PONGE, E. DEMIR & D. RAABE [2010]. ‘Orientation gradients and geometrically necessary dislocations in ultrafine grained dual-phase steels studied by 2D and 3D EBSD.’ *Materials Science and Engineering: A*, **527**(10), S. 2738–2746.
- [32] CAROLAN, D., H. CHONG, A. IVANKOVIC, A. KINLOCH & A. TAYLOR [2015]. ‘Co-continuous polymer systems: A numerical investigation.’ *Computational Materials Science*, **98**, S. 24–33.

- [33] CAYRON, C. [2013]. ‘One-step model of the face-centred-cubic to body-centred-cubic martensitic transformation.’ *Acta Crystallographica Section A*, **69**(5), S. 498–509.
- [34] CHEN, Z. [2013]. *Nanoindentation testing of soft polymers: Computation, experiments and parameters identification*. Dissertation, Universität des Saarlandes.
- [35] CHEN, Z., T. SCHEFFER, H. SEIBERT & S. DIEBELS [2013]. ‘Macroindentation of a soft polymer: Identification of hyperelasticity and validation by uni/biaxial tensile tests.’ *Mechanics of Materials*, **64**, S. 111–127.
- [36] CHENG, Y.-T. & C.-M. CHENG [1999]. ‘Can stress–strain relationships be obtained from indentation curves using conical and pyramidal indenters?’ *Journal of Materials Research*, **14**(9), S. 3493–3496.
- [37] CLAUSNER, A. [2013]. *Bewertung von Verfahren zur Fließspannungsbestimmung in der Nanoindentation*. Dissertation, Technische Universität Chemnitz.
- [38] CZICHOS, H. & M. HENNECKE [2004]. *Hütte: Das Ingenieurwissen*. Springer.
- [39] DESPLENTERE, F., S. LOMOV, D. WOERDEMAN, I. VERPOEST, M. WEVERS & A. BOGDANOVICH [2005]. ‘Micro-CT characterization of variability in 3D textile architecture.’ *Composites Science and Technology*, **65**(13), S. 1920–1930.
- [40] DEUTSCHES INSTITUT FÜR NORMUNG [2006]. ‘Metallische Werkstoffe - Härteprüfung nach Vickers.’ DIN EN ISO 6507, Berlin.
- [41] DEUTSCHES INSTITUT FÜR NORMUNG [2017]. ‘Metallische Werkstoffe - Zugversuch.’ DIN EN ISO 6892, Berlin.
- [42] DIEHL, M., D. AN, P. SHANTHRAJ, S. ZAEFFERER, F. ROTERS & D. RAABE [2017]. ‘Crystal plasticity study on stress and strain partitioning in a measured 3D dual phase steel microstructure.’ *Physical Mesomechanics*, **20**(3), S. 311–323.
- [43] DIEHL, M., P. SHANTHRAJ, P. EISENLOHR & F. ROTERS [2016]. ‘Neighborhood influences on stress and strain partitioning in dual-phase microstructures.’ *Meccanica*, **51**(2), S. 429–441.
- [44] DONG, H.-F., J. LI, Y. ZHANG, J. PARK & Q.-X. YANG [2010]. ‘Numerical simulation on the microstress and microstrain of low Si-Mn-Nb dual-phase steel.’ *International Journal of Minerals, Metallurgy, and Materials*, **17**(2), S. 173–178.

- [45] DUAN, C. [2018]. *Vergleich zweidimensionaler und dreidimensionaler mikrostrukturbasierter Simulationen des Deformationsverhaltens von Dualphasenstahl*. Masterarbeit, Universität des Saarlandes, Lehrstuhl für Technische Mechanik.
- [46] DÜSTER, A., J. PARVIZIAN, Z. YANG & E. RANK [2008]. ‘The finite cell method for three-dimensional problems of solid mechanics.’ *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **197**(45-48), S. 3768–3782.
- [47] FILLAFER, A., C. KREMPASZKY & E. WERNER [2014]. ‘On strain partitioning and micro-damage behavior of dual-phase steels.’ *Materials Science and Engineering: A*, **614**, S. 180–192.
- [48] FISCHER-CRIPPS, A. C. [2004]. *Nanoindentation*. Springer, zweite Ausgabe.
- [49] FLIPON, B., C. KELLER, R. QUEY & F. BARBE [2019]. ‘A full-field crystal-plasticity analysis of bimodal polycrystals.’ *International Journal of Solids and Structures*.
- [50] FOREST, S., F. BARBE & G. CAILLETAUD [2000]. ‘Cosserat modelling of size effects in the mechanical behaviour of polycrystals and multi-phase materials.’ *International Journal of Solids and Structures*, **37**(46), S. 7105–7126.
- [51] FRIESS, T. [2017]. *Entwicklung einer Methode zur Tiefenabtragsmessung für Serienschnitttomographien und Ermittlung des repräsentativen Volumenelements eines Dualphasenstahls*. Bachelorarbeit, Universität des Saarlandes, Lehrstuhl für Funktionswerkstoffe.
- [52] FRITZEN, F., T. BÖHLKE & E. SCHNACK [2008]. ‘Periodic three-dimensional mesh generation for crystalline aggregates based on Voronoi tessellations.’ *Computational Mechanics*, **43**(5), S. 701–713.
- [53] GERBIG, D., A. SRIVASTAVA, S. OSOVSKI, L. G. HECTOR & A. BOWER [2018]. ‘Analysis and design of dual-phase steel microstructure for enhanced ductile fracture resistance.’ *International Journal of Fracture*, **209**(1), S. 3–26.
- [54] GERINGER, A. [2014]. *Macroscopic modeling of open-cell foams: an order parameter approach*. Dissertation, Universität des Saarlandes.
- [55] GERINGER, A. & S. DIEBELS [2014]. ‘A phase-field approach to damage modelling in open-cell foams.’ *Technische Mechanik*, **34**, S. 3–11.
- [56] GOLDSCHMIDT, F. [2015]. *Modellierung und Simulation von Klebeverbindungen mit gradierten mechanischen Eigenschaften*. Dissertation, Universität des Saarlandes.

- [57] GOTTSTEIN, G. [2013]. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik: Physikalische Grundlagen*. Springer-Verlag.
- [58] GREEN, R. [1972]. ‘A plasticity theory for porous solids.’ *International Journal of Mechanical Sciences*, **14**(4), S. 215–224.
- [59] GREVE, R. [2003]. *Kontinuumsmechanik*. Springer-Verlag.
- [60] GROEBER, M., S. GHOSH, M. D. UCHIC & D. M. DIMIDUK [2008]. ‘A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures.: Part 1: Statistical characterization.’ *Acta Materialia*, **56**(6), S. 1257–1273.
- [61] GROEBER, M., S. GHOSH, M. D. UCHIC & D. M. DIMIDUK [2008]. ‘A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 2: Synthetic structure generation.’ *Acta Materialia*, **56**(6), S. 1274–1287.
- [62] GROEBER, M. A. & M. A. JACKSON [2014]. ‘DREAM.3D: A Digital Representation Environment for the Analysis of Microstructure in 3D.’ *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, **3**(1), S. 5–21.
- [63] GU, X. [2008]. *Development and implementation of adaptive mesh refinement methods for numerical simulations of metal forming and machining*. Dissertation, Technischen Universität Dortmund.
- [64] HARTMANN, S. [1993]. *Lösung von Randwertaufgaben der Elastoplastizität: ein Finite-Elemente-Konzept für nichtlineare kinematische Verfestigung bei kleinen und finiten Verzerrungen*. Dissertation, Universität Gesamthochschule Kassel.
- [65] HAUPT, P. [2001]. *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Springer-Verlag, zweite Ausgabe.
- [66] HILL, R. [1963]. ‘Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles.’ *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **11**(5), S. 357–372.
- [67] HITTI, K., P. LAURE, T. COUPEZ, L. SILVA & M. BERNACKI [2012]. ‘Precise generation of complex statistical Representative Volume Elements (RVEs) in a finite element context.’ *Computational Materials Science*, **61**, S. 224–238.
- [68] HOFF, H. & G. FISCHER [1958]. *Beobachtungen über den Bauschinger-Effekt an weichen und mittelhartem Stählen*. Bericht des Werkstoffausschusses des Vereins Deutscher Eisenhüttenleute. Verlag Stahleisen.
- [69] HOLZAPFEL, G. A. [1999]. *Nonlinear Solid Mechanics*. John Wiley & sons Ltd.

- [70] HOOKE, R. [1678]. ‘De Potentia Restitutiva, or of Spring, Explaining the Power of Springing Bodies.’ *London*.
- [71] ISHIKAWA, N., K. YASUDA, H. SUEYOSHI, S. ENDO, H. IKEDA, T. MORIKAWA & K. HIGASHIDA [2015]. ‘Microscopic deformation and strain hardening analysis of ferrite–bainite dual-phase steels using micro-grid method.’ *Acta Materialia*, **97**, S. 257–268.
- [72] JÄNICHE, W., W. DAHL, H. KLÄRNER, W. PITSCH, D. SCHAUWINHOLD, W. SCHLÜTER & H. SCHMITZ [1984]. *Werkstoffkunde Stahl: Band 1: Grundlagen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [73] JÄNICHE, W., W. DAHL, H. KLÄRNER, W. PITSCH, D. SCHAUWINHOLD, W. SCHLÜTER & H. SCHMITZ [1985]. *Werkstoffkunde Stahl: Band 2: Anwendung*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [74] JEFFREY, A. & D. ZWILLINGER [2007]. *Table of Integrals, Series, and Products*. Elsevier Science.
- [75] JI, L. K., H. L. LI, H. T. WANG, J. M. ZHANG, W. Z. ZHAO, H. Y. CHEN, Y. LI & Q. CHI [2014]. ‘Influence of Dual-Phase Microstructures on the Properties of High Strength Grade Line Pipes.’ *Journal of Materials Engineering and Performance*, **23**(11), S. 3867–3874.
- [76] JOHANNSEN, O. [1953]. *Geschichte des Eisens*, Band 3. Verlag Stahleisen.
- [77] JOHNSON, G. R. & W. H. COOK [1985]. ‘Fracture characteristics of three metals subjected to various strains, strain rates, temperatures and pressures.’ *Engineering Fracture Mechanics*, **21**(1), S. 31–48.
- [78] JOHNSON, W. & R. MEHL [1939]. ‘Reaction kinetics in processes of nucleation and growth.’ *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, **135**, S. 416–442.
- [79] KADKHODAPOUR, J., A. BUTZ, S. ZIAEI-RAD & S. SCHMAUDER [2011]. ‘A micro mechanical study on failure initiation of dual phase steels under tension using single crystal plasticity model.’ *International Journal of Plasticity*, **27**(7), S. 1103–1125.
- [80] KADKHODAPOUR, J., S. SCHMAUDER, D. RAABE, S. ZIAEI-RAD, U. WEBER & M. CALCAGNOTTO [2011]. ‘Experimental and numerical study on geometrically necessary dislocations and non-homogeneous mechanical properties of the ferrite phase in dual phase steels.’ *Acta Materialia*, **59**(11), S. 4387–4394.
- [81] KALUZA, W. M. [2003]. *Modellierung der mechanischen Eigenschaften und der lokalen Dehnungen von Dualphasen-Stählen*. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen.

- [82] KANIT, T., S. FOREST, I. GALLIET, V. MOUNOURY & D. JEULIN [2003]. ‘Determination of the size of the representative volume element for random composites: Statistical and numerical approach.’ *International Journal of Solids and Structures*, **40**(13-14), S. 3647–3679.
- [83] KARLSSON, B. & G. LINDEN [1975]. ‘Plastic deformation of eutectoid steel with different cementite morphologies.’ *Materials Science and Engineering*, **17**, S. 153–164.
- [84] KARLSSON, B. & G. LINDEN [1975]. ‘Plastic deformation of ferrite-pearlite structures in steel.’ *Materials Science and Engineering*, **17**(2), S. 209–219.
- [85] KARLSSON, B. & B. SUNDSTRÖM [1974]. ‘Inhomogeneity in plastic deformation of two-phase steels.’ *Materials Science and Engineering*, **16**(1), S. 161–168.
- [86] KATANI, S., S. ZIAEI-RAD, N. NOURI, N. SAEIDI, J. KADKHODAPOUR, N. TORABIAN & S. SCHMAUDER [2013]. ‘Microstructure Modelling of Dual-Phase Steel Using SEM Micrographs and Voronoi Polycrystal Models.’ *Metallography, Microstructure, and Analysis*, **2**(3), S. 156–169.
- [87] KEEHAN, E., L. KARLSSON, H. K. D. H. BHADSHIA & M. THUVANDER [2008]. ‘Three-dimensional analysis of coalesced bainite using FIB tomography.’ *Materials Characterisation*, **59**, S. 877–822.
- [88] KELLEY, C. [1999]. *Iterative Methods for Optimization*. Frontiers in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [89] KHAN, D. & B. P. GAUTHAM [2018]. ‘Microstructure-Based Deformation Modeling of Dual-Phase Steels.’ In *Advanced High Strength Steel: Processing and Applications*, editiert von T. K. Roy, B. Bhattacharya, C. Ghosh & S. K. Ajmani, S. 95–101. Springer Singapore.
- [90] KIM, J.-H., A. SERPANTIÉ, F. BARLAT, F. PIERRON & M.-G. LEE [2013]. ‘Characterization of the post-necking strain hardening behavior using the virtual fields method.’ *International Journal of Solids and Structures*, **50**(24), S. 3829–3842.
- [91] KIM, S. G., D. I. KIM, W. T. KIM & Y. B. PARK [2006]. ‘Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth.’ *Physical Review E*, **74**, S. 061605–1 – 061605–14.
- [92] KITTEL, C., J. M. GRESS & A. LESSARD [1969]. *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenbourg München, 14. Ausgabe.
- [93] KOEPF, J., D. SOLDNER, M. RAMSPERGER, J. MERGHEIM, M. MARKL & C. KÖRNER [2019]. ‘Numerical microstructure prediction by a coupled finite element cellular automaton model for selective

- electron beam melting.’ *Computational Materials Science*, **162**, S. 148–155.
- [94] KOK, S., M. BHARATHI, A. BEAUDOIN, C. FRESSENGEAS, G. ANANTHAKRISHNA, L. KUBIN & M. LEBYODKIN [2003]. ‘Spatial coupling in jerky flow using polycrystal plasticity.’ *Acta Materialia*, **51**(13), S. 3651–3662.
- [95] KREISSIG, R. & U. BENEDIX [2013]. *Höhere technische Mechanik*. Springer-Verlag.
- [96] KRÖNER, E. [1959]. ‘Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen.’ *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **4**(1), S. 273–334.
- [97] LAGARIAS, J. C., J. A. REEDS, M. H. WRIGHT & P. E. WRIGHT [1998]. ‘Convergence Properties of the Nelder–Mead Simplex Method in Low Dimensions.’ *SIAM Journal on Optimization*, **9**(1), S. 112–147.
- [98] LASAGNI, F., A. LASAGNI, E. MARKS, C. HOLZAPFEL, F. MÜCKLICH & H. DEGISCHER [2007]. ‘Three-dimensional characterization of ‘as-cast’ and solution-treated AlSi12(Sr) alloys by high-resolution FIB tomography.’ *Acta Materialia*, **55**(11), S. 3875–3882.
- [99] LAUTENSACK, C. [2007]. *Random Laguerre Tessellations*. Dissertation, Universität Karlsruhe.
- [100] LEE, E. H. [1969]. ‘Elastic-Plastic Deformation at Finite Strains.’ *Journal of Applied Mechanics*, **36**(1), S. 1–6.
- [101] LEGLAND, D. ‘Geometric measures in 2D/3D images, v1.5.0.0.’ <https://de.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/33690-geometric-measures-in-2d-3d-images>, archiviert als <http://www.webcitation.org/72Wwqiqv4>. (21.08.2018).
- [102] LEGLAND, D., K. KIËU & M.-F. DEVAUX [2007]. ‘Computation of Minkowski measures on 2D and 3D binary images.’ *Image Analysis & Stereology*, **26**(2), S. 83–92.
- [103] LEIPNER, H. S. [2001]. *Wechselwirkungen zwischen Versetzungen und Punktdefekten in Halbleitern*. Habilitation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- [104] LEMAITRE, J. [2012]. *A course on damage mechanics*. Springer Science & Business Media.
- [105] LI, M., S. GHOSH, T. N. ROUNS, H. WEILAND, O. RICHMOND & W. HUNT [1998]. ‘Serial Sectioning Method in the Construction of 3-D Microstructures for Particle-Reinforced MMCs.’ *Materials Characterization*, **41**(2), S. 81–95.

- [106] LI, R., X. ZUO, Y. HU, Z. WANG & D. HU [2011]. ‘Microstructure and properties of pipeline steel with a ferrite/martensite dual-phase microstructure.’ *Materials Characterization*, **62**(8), S. 801–806.
- [107] LIEDL, U., S. TRAIANT & E. WERNER [2002]. ‘An unexpected feature of the stress–strain diagram of dual-phase steel.’ *Computational Materials Science*, **25**(1), S. 122–128.
- [108] LING, Y. [1996]. ‘Uniaxial True Stress-Strain after Necking.’ *AMP Journal of Technology*, **5**, S. 37–48.
- [109] MAJZOBI, G., F. FARIBA, M. PIPELZADEH & S. HARDY [2014]. ‘A new approach for the correction of stress-strain curves after necking in metals.’ *The Journal of Strain Analysis for Engineering Design*, **50**, S. 125–137.
- [110] MARVI-MASHHADI, M., M. MAZINANI & A. REZAEE-BAZZAZ [2012]. ‘FEM modeling of the flow curves and failure modes of dual phase steels with different martensite volume fractions using actual microstructure as the representative volume.’ *Computational Materials Science*, **65**, S. 197–202.
- [111] MARVI-MASHHADI, M., A. REZAEE-BAZZAZ & M. MAZINANI [2012]. ‘Modelling the Flow Behaviour of Dual-Phase Steels with Different Martensite Volume Fractions by Finite Element Method.’ In *THERMEC 2011*, Band 706 von *Materials Science Forum*, S. 1503–1508. Trans Tech Publications.
- [112] MAZIÈRE, M. & S. FOREST [2015]. ‘Strain gradient plasticity modeling and finite element simulation of Lüders band formation and propagation.’ *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, **27**(1), S. 83–104.
- [113] MISES, R. v. [1913]. ‘Mechanik der festen Körper im plastisch-deformablen Zustand.’ *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*, S. 582–592.
- [114] MORGAN STANLEY. ‘Worldwide base metal production from 2007 to 2017, by commodity type (in million metric tons).’ <https://www.statista.com/statistics/241004/base-metal-production-by-type/>. (05.11.2018).
- [115] MOVAHED, P., S. KOLAHGAR, S. MARASHI, M. POURANVARI & N. PARVIN [2009]. ‘The effect of intercritical heat treatment temperature on the tensile properties and work hardening behavior of ferrite–martensite dual phase steel sheets.’ *Materials Science and Engineering: A*, **518**(1), S. 1–6.

- [116] MÜCKLICH, F., M. ENGSTLER, D. BRITZ, J. BARRIRERO & P. ROSSI [2015]. ‘Why we need all dimensions to solve both very old and very new questions in materials at the micro-, nano- and atomic scales.’ *Practical Metallography*, **52**(9), S. 507–524.
- [117] MÜCKLICH, F., M. ENGSTLER, D. BRITZ & J. GOLA [2018]. ‘Serial Sectioning Techniques – a Versatile Method for Three-Dimensional Microstructural Imaging.’ *Practical Metallography*, **55**(8), S. 569–578.
- [118] MURAKAMI, S. [2012]. *Continuum damage mechanics: a continuum mechanics approach to the analysis of damage and fracture*. Springer Science & Business Media.
- [119] NELDER, J. A. & R. MEAD [1965]. ‘A Simplex Method for Function Minimization.’ *Computer Journal*, **7**, S. 308–313.
- [120] NELSON, E. [1967]. *Dynamical Theories of Brownian Motion*. Mathematical Notes. Princeton University Press.
- [121] NONN, A., A. CERRONE, C. STALLYBRASS & H. MEUSER [2013]. ‘Microstructure- Based Modeling of High-Strength Line Pipe Steels.’ In *Sixth International Pipeline Technology Conference, Ostend, Belgium*, S. 6–9.
- [122] OHSER, J. & F. MÜCKLICH [2000]. *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*. John Wiley & Sons.
- [123] OHSER, J. & K. SCHLADITZ [2009]. *3D images of materials structures: processing and analysis*. John Wiley & Sons.
- [124] OLIVER, W. & G. PHARR [1992]. ‘An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments.’ *Journal of Materials Research*, **7**(6), S. 1564–1583.
- [125] OSTOJA-STARZEWSKI, M. [2007]. *Microstructural randomness and scaling in mechanics of materials*. Chapman and Hall.
- [126] PAGENKOPF, J., A. BUTZ, M. WENK & D. HELM [2016]. ‘Virtual testing of dual-phase steels: Effect of martensite morphology on plastic flow behavior.’ *Materials Science and Engineering: A*, **674**, S. 672–686.
- [127] PANG, T. [2006]. *An Introduction to Computational Physics*. Cambridge University Press.
- [128] PAPANIKOLAOU, S., Y. CUI & N. GHONIEM [2018]. ‘Avalanches and plastic flow in crystal plasticity: an overview.’ *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **26**(1), S. 013001–013060.
- [129] PARISCH, H. [2003]. ‘Festkörper-Kontinuumsmechanik.’ *BG Teubner*.

- [130] PARVIZIAN, J., A. DÜSTER & E. RANK [2007]. ‘Finite cell method : h- and p-extension for embedded domain problems in solid mechanics.’ *Computational Mechanics*, **41**(1), S. 121–133.
- [131] PAUL, S. K. [2013]. ‘Real microstructure based micromechanical model to simulate microstructural level deformation behavior and failure initiation in DP 590 steel.’ *Materials & Design*, **44**, S. 397–406.
- [132] PAUL, S. K. & A. KUMAR [2012]. ‘Micromechanics based modeling to predict flow behavior and plastic strain localization of dual phase steels.’ *Computational Materials Science*, **63**, S. 66–74.
- [133] PLASTICSEUROPE. ‘Weltweite und europäische Produktionsmenge von Kunststoff in den Jahren von 1950 bis 2016 (in Millionen Tonnen).’ <https://de.statista.com/statistik/daten/studie/167099/umfrage/weltproduktion-von-kunststoff-seit-1950/>. (05.11.2018).
- [134] POPOVA, E., Y. STARASELSKI, A. BRAHME, R. MISHRA & K. INAL [2015]. ‘Coupled crystal plasticity – Probabilistic cellular automata approach to model dynamic recrystallization in magnesium alloys.’ *International Journal of Plasticity*, **66**, S. 85–102.
- [135] QIN, J., R. CHEN, X. WEN, Y. LIN, M. LIANG & F. LU [2013]. ‘Mechanical behaviour of dual-phase high-strength steel under high strain rate tensile loading.’ *Materials Science and Engineering: A*, **586**, S. 62–70.
- [136] RAABE, D., D. PONGE, O. DMITRIEVA & B. SANDER [2009]. ‘Designing Ultrahigh Strength Steels with Good Ductility by Combining Transformation Induced Plasticity and Martensite Aging.’ *Advanced Engineering Materials*, **11**(7), S. 547–555.
- [137] RAMAZANI, A., Z. EBRAHIMI & U. PRAHL [2014]. ‘Study the effect of martensite banding on the failure initiation in dual-phase steel.’ *Computational Materials Science*, **87**, S. 241–247.
- [138] RAMAZANI, A., K. MUKHERJEE, H. QUADE, U. PRAHL & W. BLECK [2013]. ‘Correlation between 2D and 3D flow curve modelling of DP steels using a microstructure-based RVE approach.’ *Materials Science and Engineering: A*, **560**, S. 129–139.
- [139] RAUCH, L., K. BZOWSKI, D. BACHNIAK & M. PIETRZYK [2015]. ‘Robust Multiscale Modelling Of Two-Phase Steels On Heterogeneous Hardware Infrastructures By Using Statistically Similar Representative Volume Element.’ *Archives of Metallurgy and Materials*, **60**(3), S. 1973–1980.
- [140] RAUCH, L., D. SZELIGA, D. BACHNIAK, K. BZOWSKI, R. SŁOTA, M. PIETRZYK & J. KITOWSKI [2015]. ‘Identification of Multi-inclusion Statistically Similar Representative Volume Element for Advanced High

- Strength Steels by Using Data Farming Approach.’ *Procedia Computer Science*, **51**, S. 924–933. International Conference On Computational Science, ICCS 2015.
- [141] RECHENBERG, I. [1994]. *Evolutionsstrategie ’94*. Werkstatt Bionik und Evolutionstechnik. Frommann-Holzboog, Stuttgart.
- [142] REGENER, B., C. KREMPASZKY, E. WERNER & M. STOCKINGER [2012]. ‘Modelling the micromorphology of heat treated Ti6Al4V forgings by means of spatial tessellations feasible for FEM analyses of microscale residual stresses.’ *Computational Materials Science*, **52**(1), S. 77–81. Proceedings of the 20th International Workshop on Computational Mechanics of Materials - IWCMM 20.
- [143] RIEGER, F. [2015]. *Work-hardening of dual-phase steel*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie.
- [144] RIEGER, F., M. WENK, S. SCHUSTER & T. BÖHLKE [2017]. ‘Mechanism based mean-field modeling of the work-hardening behavior of dual-phase steels.’ *Materials Science and Engineering: A*, **682**, S. 126–138.
- [145] ROBERTS, C. [1953]. ‘Effect of carbon on the volume fractions and lattice parameters of retained austenite and martensite.’ *Transactions of the AIME*, **197**(2), S. 203–204.
- [146] ROLAND, M., A. KRUGLOVA, G. GAISELMANN, T. BRERETON, V. SCHMIDT, F. MÜCKLICH & S. DIEBELS [2015]. ‘Numerical simulation and comparison of a real Al–Si alloy with virtually generated alloys.’ *Archive of Applied Mechanics*, **85**(8), S. 1161–1171.
- [147] RÖSLER, J., H. HARDERS & M. BÄKER [2003]. *Mechanisches Verhalten der Werkstoffe*. Springer.
- [148] ROTERS, F., P. EISENLOHR, L. HANTCHERLI, D. TJAHJANTO, T. BIELER & D. RAABE [2010]. ‘Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications.’ *Acta Materialia*, **58**(4), S. 1152–1211.
- [149] SCHEFFER, T. [2016]. *Charakterisierung des nichtlinear-viskoelastischen Materialverhaltens gefüllter Elastomere*. Dissertation, Universität des Saarlandes.
- [150] SCHERFF, F. [2015]. *Automatisierung der Parameteridentifikation für den biaxialen Zugversuch*. Masterarbeit, Universität des Saarlandes, Lehrstuhl für Technische Mechanik.

- [151] SCHEUNEMANN, L., J. SCHRÖDER, D. BALZANI & D. BRANDS [2014]. ‘Construction of Statistically Similar Representative Volume Elements – Comparative Study Regarding Different Statistical Descriptors.’ *Procedia Engineering*, **81**, S. 1360–1365.
- [152] SCHNELL, W., D. GROSS & W. HAUGER [1984]. *Technische Mechanik: Band 2: Elastostatik*. Springer-Verlag.
- [153] SCHRÖDER, J., D. BALZANI & D. BRANDS [2011]. ‘Approximation of random microstructures by periodic statistically similar representative volume elements based on lineal-path functions.’ *Archive of Applied Mechanics*, **81**(7), S. 975–997.
- [154] SEIBERT, H. [2017]. *Multiaxiale, thermomechanische Charakterisierung und Modellierung poröser Elastomere*. Dissertation, Universität des Saarlandes.
- [155] SIMO, J. & R. TAYLOR [1985]. ‘Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity.’ *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **48**(1), S. 101–118.
- [156] SIMO, J. C. & T. J. HUGHES [2000]. *Computational Inelasticity*, Band 7 von *Interdisciplinary applied mathematics*. Springer Science & Business Media.
- [157] SLAUGHTER, W. [2002]. *The Linearized Theory of Elasticity*. Birkhäuser Boston.
- [158] STEINBACH, I., X. SONG & A. HARTMAIER [2010]. ‘Phase-field model with plastic flow for grain growth in nanocrystalline material.’ *Philosophical Magazine*, **90**(1-4), S. 485–499.
- [159] SUN, X.-Y., G.-K. XU, X. LI, X.-Q. FENG & H. GAO [2013]. ‘Mechanical properties and scaling laws of nanoporous gold.’ *Journal of Applied Physics*, **113**(2), S. 023505.
- [160] SUTTON, M., J. YAN, V. TIWARI, H. SCHREIER & J. ORTEU [2008]. ‘The effect of out-of-plane motion on 2D and 3D digital image correlation measurements.’ *Optics and Lasers in Engineering*, **46**(10), S. 746–757.
- [161] SUTTON, M. A., J.-J. ORTEU & H. SCHREIER [2009]. *Image Correlation for Shape, Motion and Deformation Measurements: Basic Concepts, Theory and Applications*. Springer-Verlag, erste Ausgabe.
- [162] SZABÓ, I. [2003]. *Einführung in die technische Mechanik*. Springer-Verlag.
- [163] TARANTOLA, A. [2005]. *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. Society for Industrial and Applied Mathematics.

- [164] TARIGOPULA, V., O. HOPPERSTAD, M. LANGSETH & A. CLAUSEN [2008]. ‘Elastic-plastic behaviour of dual-phase, high-strength steel under strain-path changes.’ *European Journal of Mechanics - A/Solids*, **27**(5), S. 764–782.
- [165] TARIGOPULA, V., O. HOPPERSTAD, M. LANGSETH, A. CLAUSEN & F. HILD [2008]. ‘A study of localisation in dual-phase high-strength steels under dynamic loading using digital image correlation and FE analysis.’ *International Journal of Solids and Structures*, **45**(2), S. 601–619.
- [166] TASAN, C., M. DIEHL, D. YAN, M. BECHTOLD, F. ROTERS, L. SCHEMMANN, C. ZHENG, N. PERANIO, D. PONGE, M. KOYAMA, K. TSUZAKI & D. RAABE [2015]. ‘An Overview of Dual-Phase Steels: Advances in Microstructure-Oriented Processing and Micromechanically Guided Design.’ *Annual Review of Materials Research*, **45**(1), S. 391–431.
- [167] TASAN, C., J. HOEFNAGELS, M. DIEHL, D. YAN, F. ROTERS & D. RAABE [2014]. ‘Strain localization and damage in dual phase steels investigated by coupled in-situ deformation experiments and crystal plasticity simulations.’ *International Journal of Plasticity*, **63**, S. 198–210.
- [168] TASAN, C. C., M. DIEHL, D. YAN, C. ZAMBALDI, P. SHANTHRAJ, F. ROTERS & D. RAABE [2014]. ‘Integrated experimental–simulation analysis of stress and strain partitioning in multiphase alloys.’ *Acta Materialia*, **81**, S. 386–400.
- [169] THOMSER, C. [2009]. *Modelling of the mechanical properties of Dual Phase steels based on microstructure*. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen.
- [170] TRUESDELL, C. & R. TOUPIN [1960]. ‘The Classical Field Theories.’ In *Principles of Classical Mechanics and Field Theory*, editiert von S. Flügge, S. 226–793. Springer Berlin Heidelberg.
- [171] TSCHOPP, M. A. [2016]. ‘3-D Synthetic Microstructure Generation with Ellipsoid Particles.’ Forschungsbericht, Weapons and Materials Research Directorate, US Army Research Laboratory Aberdeen Proving Ground, United States.
- [172] UTHAISANGSUK, V., U. PRAHL & W. BLECK [2009]. ‘Stretch-flangeability characterisation of multiphase steel using a microstructure based failure modelling.’ *Computational Materials Science*, **45**(3), S. 617–623. Proceedings of the 17th International Workshop on Computational Mechanics of Materials.
- [173] VAJRAGUPTA, N., P. WECHSUWANMANEE, J. LIAN, M. SHARAF, S. MÜNSTERMANN, A. MA, A. HARTMAIER & W. BLECK [2014]. ‘The

- modeling scheme to evaluate the influence of microstructure features on microcrack formation of DP-steel: The artificial microstructure model and its application to predict the strain hardening behavior.’ *Computational Materials Science*, **94**, S. 198–213. IWCM23 Special Issue.
- [174] VOCE, E. [1955]. ‘A practical strain-hardening function.’ *Metallurgica*, **51**, S. 219–226.
- [175] VORONOI, G. [1908]. ‘Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. Premier mémoire. Sur quelques propriétés des formes quadratiques positives parfaites.’ *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, **133**, S. 97–102.
- [176] WARREN, J. A., R. KOBAYASHI, A. E. LOBKOVSKY & W. C. CARTER [2003]. ‘Extending phase field models of solidification to polycrystalline materials.’ *Acta Materialia*, **51**(20), S. 6035–6058.
- [177] WEBEL, J. [2013]. *Methodische Entwicklung eines Verfahrens zur seriellen Schnitttechnik für lichtmikroskopische Materialtomographien*. Bachelorarbeit, Universität des Saarlandes, Lehrstuhl für Funktionswerkstoffe.
- [178] WERNER, E., R. WESENJAK, A. FILLAFER, F. MEIER & C. KREMPASZKY [2016]. ‘Microstructure-based modelling of multiphase materials and complex structures.’ *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, **28**(5), S. 1325–1346.
- [179] WILKINS, M. L. [1963]. ‘Calculation of elastic-plastic flow.’ Forschungsbericht, California University Livermore Radiation Lab.
- [180] WRIGGERS, P. [2001]. *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*. Springer-Verlag.
- [181] YAN, C., L. HAO, A. HUSSEIN, P. YOUNG & D. RAYMONT [2014]. ‘Advanced lightweight 316L stainless steel cellular lattice structures fabricated via selective laser melting.’ *Materials & Design*, **55**, S. 533–541.
- [182] YAZDIPOUR, N., C. DAVIES & P. HODGSON [2008]. ‘Microstructural modeling of dynamic recrystallization using irregular cellular automata.’ *Computational Materials Science*, **44**(2), S. 566–576.
- [183] ZEGHADI, A., F. N’GUYEN, S. FOREST, A.-F. GOURGUES & O. BOUAZIZ [2007]. ‘Ensemble averaging stress–strain fields in polycrystalline aggregates with a constrained surface microstructure – Part 1: anisotropic elastic behaviour.’ *Philosophical Magazine*, **87**(8-9), S. 1401–1424.
- [184] ZHANG, J., C. ZHOU, Y. WANG, L. JU, Q. DU, X. CHI, D. XU, D. CHEN, Y. LIU & Z. LIU [2016]. ‘Extreme-scale Phase Field Simulations of Coarsening Dynamics on the Sunway Taihulight Supercomputer.’ In *Proceedings of the International Conference for High Performance*

-
- Computing, Networking, Storage and Analysis*, SC '16, S. 4:1–4:12. IEEE Press.
- [185] ZHOU, H., C. LI, L. ZHANG, B. CRAWFORD, A. S. MILANI & F. K. KO [2018]. ‘Micro-XCT analysis of damage mechanisms in 3D circular braided composite tubes under transverse impact.’ *Composites Science and Technology*, **155**, S. 91–99.
- [186] ZIENKIEWICZ, O. C. [1971]. *The finite element method in engineering science*. McGraw-Hill.
- [187] ZIENKIEWICZ, O. C. & R. L. TAYLOR [1977]. *The finite element method*. McGraw-Hill.
- [188] ZOHDİ, T. & P. WRIGGERS [2001]. ‘Aspects of the computational testing of the mechanical properties of microheterogeneous material samples.’ *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **50**(11), S. 2573–2599.
- [189] ZOHDİ, T. & P. WRIGGERS [2004]. *Introduction to Computational Micromechanics (Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics)*. Springer-Verlag.

Veröffentlichungen, Vorträge und Poster

A Veröffentlichungen

- Scherff, F., Goldschmidt, F., Scholl, S. & Diebels, S. [2016]. 'High-resolution simulation of microstructures in dual-phase steel', PAMM, 16(1), S. 391-392.
- Diebels, S., Goldschmidt, F. & Scherff, F. [2018]. 'Continuum Modelling of Ageing Adhesive Joints', in *Adhesive Joints: Ageing and Durability of Epoxies and Polyurethanes*, Possart, W. & Brede, M. (Hrsg.), S. 205-228.
- Goldschmidt, F., Diebels, S., Scherff, F., Depollier, L., Huacuja-Sanchez, J. E. & Possart, W. [2018]. 'Viscoelasticity in Ageing Joints – Experiments and Simulation', in *Adhesive Joints: Ageing and Durability of Epoxies and Polyurethanes*, Possart, W. & Brede, M. (Hrsg.), S. 355-374.
- Scherff, F., Gola, J., Scholl, S., Srivastava, K., Staudt, T., Mücklich, F. & Diebels, S. [2019]. 'Numerical Simulation of Dual Phase Steel based on real and virtual three dimensional Microstructures', in Vorbereitung
- Scherff, F., Gola, J., Neuhaus, S., Scholl, S., Srivastava, K., Staudt, T., Mücklich, F. & Diebels, S. [2019]. 'RVE-size Determination and efficient microstructure-based Simulation of Dual-Phase Steel', in Vorbereitung

B Vorträge

- Scherff, F., Goldschmidt, F., Scholl, S. & Diebels, S., 'High-resolution simulation of microstructures in dual-phase steel', Jahrestreffen der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM), 07.-11. März 2016, Braunschweig.

- Diebels, S., Goldschmidt, F. & Scherff, F., 'Moisture transport in polyurethan bonds and its influence on the mechanical properties', 10th International Conference on Advanced Computational Engineering and Experimenting, 03.-06. Juli 2016, Split (Kroatien).
- Scherff, F. & Diebels, S., 'Bestimmung der mechanischen Eigenschaften von Dualphasenstahl ausgehend von 3D-Mikrostrukturen', LTM² Workshop, 29. August 2016, Saarbrücken.
- Scherff, F., Scholl, S. & Diebels, S., 'Material modeling of dual-phase steel based on 3D microstructures', GAMM AG Data Kick-Off Workshop, 26.-27. September 2016, Stuttgart.
- Scherff, F., Scholl, S. & Diebels, S., 'Simulation der effektiven mechanischen Eigenschaften von Dualphasenstählen auf Basis von Gefügedaten', DGM-Regionalforum, 10. Mai 2016, Saarbrücken.
- Scherff, F., Scholl, S. & Diebels, S., 'Mechanical Simulation of 3D-Microstructures in Dual-Phase Steel', Clausthal-Göttingen International Workshop on Simulation Science, 27.-28. April 2017, Göttingen.
- Scherff, F., Scholl, S. & Diebels, S., 'Simulation of the deformation behavior of 3D microstructures in dual-phase steel', GAMM AG Data Workshop Challenges and Perspectives in Data-driven Modeling, 18.-19. Mai 2017, Karlsruhe.
- Scherff, F., Scholl, S. & Diebels, S., 'Microstructure-Based Mechanical Simulation of Dual-Phase Steel', ECCOMAS Thematic Conference on Computational modeling of Complex Materials across the Scale, 7.-9. November 2017, Paris (Frankreich).
- Scherff, F., Scholl, S., Srivastava, K. & Diebels, S., 'Simulation of dual-phase steel based on real and virtual 3D microstructures', GAMM AG Data Workshop Challenges and Perspectives in Data-driven Modeling, 03.-04. Mai 2018, Lüneburg.
- Diebels, S., Scherff, F., Scholl, S. & Srivastava, K., 'High-resolution modeling of dual-phase steel based on three-dimensional microstructures', Kolloquium über Werkstoffmodellierung des IMWF, 12. Juli 2018, Stuttgart.

- zusätzlich zehn lehrstuhlinterne Vorträge und sechs Vorträge im Rahmen von Projekttreffen mit der *AG der Dillinger Hüttenwerke*

C Poster

- Scherff, F., Scholl, S. & Diebels, S., 'Computerbasiertes Stahl design – Modellierung der Gefüge-Eigenschafts-Korrelation bei Dualphasenstählen', Dillinger Innovationstag, 9. Juni 2016, Dillingen.
- Scherff, F., Scholl, S. & Diebels, S., 'Simulation der Materialeigenschaften von Dualphasenstahl auf Basis von 3D-Mikrostrukturen', Doktorandentag der Naturwissenschaftlich Technischen Fakultät III der Universität des Saarlandes, 9. November 2016, Saarbrücken.
- Scherff, F., Scholl, S., Srivastava, K. & Diebels, S., 'Computerbasiertes Stahl design – Gefüge-Eigenschafts-Korrelation bei Dualphasenstählen', Dillinger Innovationstage, 11.-12. September 2018, Dillingen.