

**Mehrphasige phänomenologische sowie mehrskalige
mikroskopische Modellierung
von Phasenumwandlungen in einem Hybridumformprozess**

zur Erlangung des akademischen Grades eines
DOKTORS DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)
der Fakultät für Maschinenbau
der Universität Paderborn

genehmigte
DISSERTATION

von
Andreas Schneidt, M.Sc.
geboren am 08.03.78 in Karaganda, Kasachstan

Tag der Kolloquiums: 25. Mai 2016

Referenten: Prof. Dr.-Ing. habil. Rolf Mahnken
Korreferent: Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. mont. Thomas Antretter
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Böhlke

Abstract

The main objective of this thesis is the numerical simulation of hybrid-forming processes in steel production with particular focus on phase transformation. In order to display the specific processes two methods of material modeling, a macroscopic-phenomenological and micromechanical multiscale approach are formulated. The thermodynamically consistent phenomenological multiphase model combines a variety of features such as time- and temperature-dependent phase transformation, austenitisation, transformation plasticity, volume change, temperature- and microstructure-dependent elastoplasticity and viscoplasticity. The FEM simulation of the hybrid-forming process is based on numerical implementation and exhibits good agreement with the structure distribution in the real shaft. Furthermore, it illustrates the possibilities for prediction of the phase distribution by varying the process parameters. A physically motivated, thermodynamic-consistent multiscale model for N-grains and n-bainite variants is developed in the second step, which combines the elasto-viscoplastic behavior with a phase transformation in a polycrystalline structure. This model is capable of capturing both TRIP effects, the contribution due to load-based orientation of bainite-variants ("Magee effect") and plastic accommodation of the new phase ("Greenwood-Johnson effect"). Finally, these phenomena are evaluated quantitatively for different loads.

Zusammenfassung

Die zentrale Zielsetzung der hier vorliegenden Dissertation ist die numerische Simulation von Hybridumformungsprozessen unter besonderer Berücksichtigung der Phasenumwandlung. Zur Abbildung der spezifischen Vorgänge in diesem Prozess werden zwei Modellierungsstrategien, ein makroskopisch-phänomenologischer und ein mikromechanischer Mehrskalenansatz verfolgt. Das entwickelte thermodynamisch konsistente, phänomenologische Mehrphasenmodell vereint in sich vielfältige Eigenschaften wie zeit- und temperaturabhängige Phasenumwandlung, Austenitisierung, Umwandlungsplastizität, Volumenveränderung, temperatur- und mikrostrukturabhängige Elasto- bzw. Visko- plastizität. Die auf der numerischen Implementierung basierende FEM-Simulation des Hybridumformprozesses zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit der Gefügeverteilung in der realen Welle und veranschaulicht die Möglichkeiten der Vorhersagbarkeit der Phasenverteilung durch Variation der Prozessparameter.

Ferner wird ein physikalisch motiviertes und thermodynamisch konsistentes Mehrskalenmodell für N-Körner und n-Bainitvarianten entwickelt, welches das elasto-viskoplastische Verhalten mit der Phasenumwandlung in einer polykristallinen Struktur kombiniert. Das implementierte Mehrskalenmodell bildet die Volumenänderung infolge der Phasenumwandlung, die Umwandlungsplastizität, die Rückverformung der umwandlungsplastischen Verzerrung sowie den Magee- und den Greenwood-Johnson-Effekt ab. Diese Phänomene werden für verschiedene Belastungen quantitativ evaluiert.

Liste der Veröffentlichungen

- MAHNKEN, R., SCHNEIDT, A., ANTRETTER, T., EHLENBRÖKER, U. , WOLFF, M.: Multi-scale modeling of bainitic phase transformation in multi-variant polycrystalline low alloy steels. *International Journal of Solids and Structures*, **54** (2015), S. 156–171
- MAHNKEN, R., WOLFF, M., SCHNEIDT, A. , BÖHM, M.: Multi-phase transformations at large strains Thermodynamic framework and simulation. *International Journal of Plasticity*, **39** (2012), S. 1–26
- MAHNKEN, R., SCHNEIDT, A., TSCHUMAK, S. , MAIER, H.: On the simulation of austenite to bainite phase transformation. *Computational Materials Science*, **50** (2011), Nr. 6, S. 1823–1829
- PARVIZIAN, F., SCHNEIDT, A., SVENDSEN, B. , MAHNKEN, R.: Thermo-mechanically coupled modeling and simulation of hot metal-forming processes using adaptive remeshing method. *GAMM-Mitteilungen*, **33** (2010), Nr. 1, S. 95–115
- MAHNKEN, R., SCHNEIDT, A., ANTRETTER, T.: Macro modelling and homogenization for transformation induced plasticity of a low-alloy steel. *International Journal of Plasticity*, **25** (2009), Nr. 2, S. 183–204
- MAHNKEN, R., SCHNEIDT, A.: Simulation of a hybrid-forming process considering phase transformations in the workpiece. Steinhoff, K.; Maier, H.J.; Biermann, D. (Eds.): *Functionally graded materials in industrial mass production*. (2009), Verlag Wissenschaftliche Skripten, S. 175–184
- SCHNEIDT, A., MAHNKEN, R.: Macromodelling of Transformation Induced Plasticity combined with Viscoplasticity for Low-Alloy Steels. *Steel Research International*, **79** (2008), Nr. 2, S. 116
- SCHNEIDT, A., MAHNKEN, R.: Modeling of bainitic phase transformation. *PAMM 10* (2010), Nr. 1, S. 323–324
- MAHNKEN, R., SCHNEIDT, A.: A thermodynamic framework and numerical aspects for transformation-induced plasticity at large strains. *Archive of Applied Mechanics*, **80** (2010), Nr. 3, S. 229–253
- MAHNKEN, R., SAUERLAND, K.-H., SCHNEIDT, A., GOCKEL, F.-B.: Deformation and Damage Analysis of a Hybrid-Forming Tool under Thermal Shock Conditions. *PAMM 8* (2008), Nr. 1, S. 10237–10238
- SCHNEIDT, A., MAHNKEN, R.: Modellierung der Umwandlungsplastizität und Viskoplastizität niedrig legierter Stähle. *PAMM 8* (2008), Nr. 1, S. 10461–10462
- MAHNKEN, R., SCHNEIDT, A., ANTRETTER, T.: Macro Modeling and Homogenization for Iden-

tification of Material Parameters to Simulate Phase Transformations. Proc. 9th Int. Conf. on Computational Structures Technology, Civil-Comp Press (2008), S. 1–13

SAUERLAND, K., MAHNKEN, R., SCHNEIDT, A.: Influences of a hybrid-forming process on the forming tool and the work piece under thermal shock conditions. Proceedings of the 1st International Conference on Process Machine Interactions, 2008

SCHNEIDT, A., MAHNKEN, R.: Experimentelle Untersuchungen zum Thermoschock beim Hybridumformprozess. PAMM 7 (2007), Nr. 1, S. 4030013–4030014

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Fertigung im Rahmen eines Hybridumformprozesses	1
1.2	Stand der Forschung	3
1.3	Ziele der Arbeit	5
1.4	Aufbau der Arbeit	6
2	Grundlagen der Phasenumwandlungen	7
2.1	Theoretische Grundlagen	7
2.1.1	Austenit	10
2.1.2	Martensit	11
2.1.3	Bainit	13
2.1.4	Das kristallographische Modell	15
2.1.5	Umwandlungsplastizität	17
2.2	Experimente zu Phasenumwandlungen	18
2.2.1	Versuchsstand	18
2.2.2	Experimentelle Ergebnisse der martensitischen Umwandlung	20
2.2.3	Experimentelle Ergebnisse der bainitischen Umwandlung	21
2.2.4	Mechanische Eigenschaften des unterkühlten Austenits	23
3	Phänomenologische Modellierung für kleine Deformationen	25
3.1	Konstitutive Gleichungen	25
3.1.1	Kinematik	25
3.1.2	Massen- und Volumenanteile der Phasen	26
3.1.3	Thermodynamisch konsistente Formulierung	28
3.2	Ein Prototypmodell für den Hybridumformprozess	30
3.2.1	Freie Helmholtz-Energie	30
3.2.2	Thermodynamische Kräfte	32
3.2.3	Verzerrungstensoren	33
3.2.4	Evolutionsgleichungen der Phasenumwandlungen	38
3.2.5	Thermodynamische Konsistenz	41
3.3	Numerische Implementierung	42
3.3.1	Implizites Integrationsschema	42
3.3.2	Lokale Iteration	43
3.3.3	Tangentenmodul	44
3.4	Parameteridentifikation	45
3.4.1	Phasenumwandlungen	46
3.4.2	Elasto-Viskoplastizität des unterkühlten Austenits	49

4	Phänomenologische Modellierung für große Deformationen	51
4.1	Thermodynamisch konsistente Formulierung	51
4.1.1	Kinematik	51
4.1.2	Volumenänderung infolge von Druck, Temperatur und Phasenanteilen	54
4.1.3	Thermodynamisches Konzept	56
4.1.4	Wärmeleitungsgleichung	57
4.2	Prototypmodell für den Hybridumformprozess	58
4.2.1	Freie Helmholtz-Energie	58
4.2.2	Thermodynamische Kräfte	59
4.2.3	Evolutionsgleichungen der Viskoplastizität und umwandlungsinduzierter Plastizität	59
4.2.4	Thermodynamische Konsistenz	61
4.2.5	Spezielle Form der Wärmeleitungsgleichung	61
4.2.6	Zusammenfassung der konstitutiven Gleichungen	62
4.3	Numerische Implementierung	63
4.3.1	Integrationsschema	65
4.3.2	Spektralzerlegung	67
4.3.3	Lokale Iteration	67
4.3.4	Spektralzerlegung des Tangentenmoduls	68
4.4	Simulation des Hybridumformprozesses	69
4.4.1	Prozessbeschreibung	69
4.4.2	Simulation des Standardprozesses	70
4.4.3	Variation der Ausgangstemperatur	73
4.4.4	Variation der Prozessführung	75
5	Mehrskalenmodellierung	79
5.1	Konstitutive Gleichungen - Verallgemeinertes Modell	79
5.1.1	Thermodynamische Formulierung der Makroebene	79
5.1.2	Meso-Mikro-Ebene	80
5.1.3	Makro-Meso-Beziehung	81
5.1.4	Clausius-Duhem-Ungleichung	82
5.2	Konstitutive Gleichungen - Prototypmodell	83
5.2.1	Freie Helmholtz-Energie	83
5.2.2	Thermodynamische Kräfte	85
5.2.3	Evolutionsgleichungen der Phasentransformationen	86
5.2.4	Evolutionsgleichungen der Viskoplastizität	87
5.2.5	Thermodynamische Konsistenz	88
5.3	Numerische Implementierung	90
5.3.1	Formulierung der diskreten Zustandsgleichungen	90
5.3.2	Projizierte Newton-Iteration, Algorithmus I	92
5.3.3	Viskoplastizität, Algorithmus II	94
5.3.4	Der Tangentenmodul	96
5.4	Numerische Beispiele	96
5.4.1	Variantenselektion in einem Einzelkorn	98
5.4.2	Modellierung eines Polykristalls (RVE)	100
6	Zusammenfassung und Ausblick	105
	Literaturverzeichnis	109

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Fertigung im Rahmen eines Hybridumformprozesses

Der Werkstoff Stahl bietet die Möglichkeit mechanische Eigenschaften in einem weiten Duktilitäts- und Festigkeitsbereich durch einfache Variation des Temperatur-Zeit-Pfades im Herstellungsprozess gezielt einzustellen und ist daher für viele Anwendungen in der Maschinenbau- bzw. der Automobilbranche das bevorzugte Material. Die stetig wachsende Nachfrage nach Leichtbaukomponenten erfordert eine Anpassung der verbesserten mechanischen Eigenschaften und komplexen Geometrien an das effektive Belastungsprofil. Aus diesem Grund gewann bei der Entwicklung innovativer Fertigungsverfahren in den letzten Jahren insbesondere die Erforschung von Prozessen zur Herstellung funktional gradierter Bauteile an Bedeutung. Die funktionale Gradierung des Bauelements, d.h. die zielgerichtete Einstellung der lokalen Eigenschaften an das im Einsatz auftretende Belastungsprofil, kann durch unterschiedliche Verfahren erreicht werden. Dies ist unter anderem durch die Kombination von Materialien mit vollständig unterschiedlichen Festigkeits-, Steifigkeits- und Duktilitätseigenschaften, wie beispielsweise Metall und Keramik [106] möglich. Ferner können mehrere verschiedene Stahlgüten in maßgeschneiderten Platinen, die sogenannten „tailored blanks“ eingesetzt werden. Dabei kann die funktionale Gradierung durch eine Variation des lokalen Querschnitts weiter gesteigert werden [102]. Des Weiteren kann eine funktionale Gradierung durch die Anpassung der lokalen Temperatur-Zeit-Deformations-Pfade und der damit einhergehenden Variation der lokalen Mikrostruktur erzielt werden [119]. Diese Verfahrensweise wird bereits im industriellen Maßstab bei der Herstellung von Automobil-B-Säulen verwendet [101]. Deren Einsatz ist allerdings nicht nur auf Anwendungen in der Blechbauteilfertigung begrenzt.

Für die Herstellung von massiven Bauteilen mit gradierten Eigenschaften werden aktuell hingegen überwiegend Verfahren der Pulver- oder der Schmelzmetallurgie mit einfachen Eigenschaftsverteilungen angewendet [63]. Jedoch gewinnt die umformtechnische Herstellung von komplexen, funktional gradierten Bauteilen merklich an Bedeutung [122, 109]. Die bislang geringe Verbreitung von funktional gradierten Bauteilen in der Massenproduktion lässt sich zum einen darauf zurückführen, dass diese zweistufige Herangehensweise aufgrund des zum Teil sehr unterschiedlichen Formänderungsverhaltens der zuvor durch Pulvermetallurgie hergestellten gradierten Halbzeuge nicht zum gewünschten Erfolg geführt hat. Zum anderen ist eine derartige Herstellung vergleichsweise aufwändig und kostenintensiv. Eine erhebliche Verbesserung der Flexibilität und Effizienz lässt sich bei bestehenden Massivumformverfahren durch eine neue differenzielle thermomechanische Prozessführung erzielen. So zeigt auch der im Sonderforschungsbereich Transregio 30 (SFB/TR TRR 30) untersuchte *Hybridumformprozess* das Potential, maßgeschneiderte Eigenschaften bereits im Herstellungsprozess einzustellen, so dass insgesamt weniger Nacharbeit und keine zusätzlichen, kostenintensiven Wärmebehandlungen mehr notwendig sind. Hierbei wird ein vordefiniertes Temperaturprofil während der Formgebung in eine vorher festgelegte Materialeigenschaftsverteilung und/oder Geometrie überführt. Diese neuartige Strategie hängt mit einem Übergang von einer freien zu einer zunehmend werkzeuggebundenen Formgebung sowie von einem durch freie Konvektion hin zu einem durch zunehmende Wärmeleitung bestimmten Wärmetransportmechanismus zusammen [119].

Grundsätzlich setzt sich die konventionelle integrale thermomechanische Prozessführung aus einer simultanen Formgebung und Wärmebehandlung des gesamten Werkstücks zusammen. Hierbei bestimmt die Wahl der Prozesstemperatur, ob ein umwandlungsgehärtetes, ein Mehrphasen-, ein rekristallisiertes oder ein kaltverfestigtes Gefüge entsteht. Bei der differenziellen Prozessführung steuert das Temperaturprofil sowohl den Werkstofffluss bei der Formgebung als auch die dabei auftretenden mikrostrukturellen Phänomene. Eine vielfältige Zusammensetzung an nebeneinander auftretenden Mikrostrukturen charakterisiert je nach lokaler Dehnungs- und Temperaturverteilung Werkstücke, die unter diesen Bedingungen gefertigt werden. Bereiche, deren maximale Temperatur die Umwandlungstemperatur A_{c3} überschreiten, entwickeln bei ausreichend hohen Abkühlgeschwindigkeiten ein partiell gehärtetes Gefüge aus Bainit und Martensit. Niedrigere Temperaturmaxima bringen ein Mehrphasengefüge aus Ferrit und Perlit sowie Bainit und Martensit mit einer den Phasenanteilen entsprechenden Härteverteilung hervor.

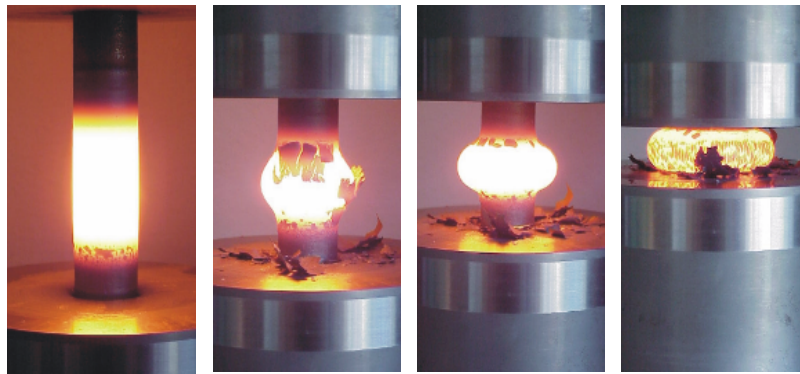


Abb. 1.1 Hybridumformprozess [119]

Abbildung 1.1 veranschaulicht die einzelnen Schritte des betrachteten Hybridumformprozesses, der aus einer Kombination aus Schmiede- und Härtingsprozess besteht [119, 118, 143]. Die spezifische Besonderheit des Prozesses liegt darin, dass erwärmte und nicht erwärmte Bereiche gleichzeitig umgeformt werden. Durch die Einstellung eines vordefinierten Temperaturprofils erhält man ein festgelegtes Werkstoffeigenschaftsprofil und/oder eine maßhaltige geometrische Form. Dem induktiven Aufheizen und dem Transfer in die Presse folgt zunächst eine Freiform- und dann eine gesenkkontrollierte Verformungssequenz. Die Variationen des Aufheizvorgangs, des verwendeten Gesenks und der Abkühlgeschwindigkeit lassen am Ende des Prozesses zahlreiche Bauteilgeometrien zu. So können neben der hier dargestellten symmetrischen auch asymmetrische Flanschwellen und Doppelflanschwellen gefertigt werden [119, 141]. Im Ergebnis entstehen Werkstücke mit gradierten und somit flexiblen, nach speziellen Bedürfnissen angepassten Werkstoffeigenschaften.

Es kann festgehalten werden, dass während des Hybridumformprozesses beide Prozesskomponenten das Werkzeug im kalten und das Werkstück im heißen Zustand mit extrem unterschiedlichen Temperaturen aufeinander treffen, was örtlich zu Temperaturschockbeanspruchungen in der Kontaktzone führt. Aufgrund der komplexen Temperaturverteilungen sowie der zusätzlichen Umformbeanspruchungen stellen derartige Hybridumformprozesse thermomechanisch gekoppelte Problemstellungen dar. Wegen der simultan auftretenden kalten und erwärmten Bereiche herrschen im Bauteil verschiedenartig auftretende Gefügestände vor. In den Zonen, in denen die Temperatur örtlich die Austenitisierungstemperatur überschreitet, entsteht bei ausreichend hohen Abkühlraten ein lokal gehärtetes Gefüge mit bainitisch-martensitischer Struktur, die in Abbildung 1.2 als dunkler Bereich dargestellt wird.

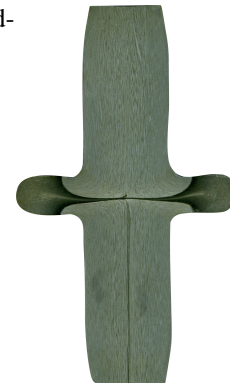


Abb. 1.2 Gefügeverteilung im Querschnitt einer thermomechanisch gefertigten Flanschelle (Teilprojekt A1 des SFB/TR TRR 30)

Erfolgt eine Abkühlung ausgehend von niedrigen Temperaturen aus einem Zweiphasengebiet, bildet sich ein mehrphasiger Übergangsbereich aus perlitischen, bainitischen und martensitischen Anteilen mit einem Härteprofil, der vom Austenitphasenanteil abhängig ist.

1.2 Stand der Forschung

In diesem Abschnitt wird ein Überblick über die Entwicklung in der Modellierung der Festkörperphasenumwandlungen im Stahl mit der schwerpunktmäßigen Betrachtung der für den Hybridumformprozess relevanten Umwandlung vom Austenit zum Bainit und/oder Martensit gegeben. Beim niedriglegierten Stahl spielt neben der Modellierung der Kinetik der Phasentransformation die Modellierung der Umwandlungsplastizität (transformation-induced plasticity (TRIP)) eine fundamentale Rolle. Die Anzahl der Arbeiten, die sich mit dieser Problematik befasst, ist sehr umfangreich. Aufgrund der Vielzahl der Beiträge werden nur einige ausgewählte Arbeiten explizit genannt, die sich mit der phänomenologischen Modellierung der Kinetik, Umwandlungsplastizität sowie Mikro- und Mehrskalenmodellierung von Martensit und/oder Bainit befassen.

Das martensitische Gefüge entsteht durch ein diffusionsloses Umklappen des austenitischen kfz-Gitters in ein tetragonal verzerktes, raumzentriertes Gitter und findet bei Temperaturen unterhalb der Martensitstarttemperatur statt. Die martensitische Umwandlung setzt sich bei einer weiteren Temperaturabsenkung bis zum vollständigen Abbau des austenitischen Gefüges fort. Dieser Vorgang kann jederzeit durch einen Abbruch der Abkühlung eingestellt werden. Der im Schrifttum am häufigsten verwendete Ansatz zur Abbildung der Kinetik des martensitischen Gefüges von KOISTINEN und MARBURGER [65] widmet sich ausschließlich der martensitischen Umwandlung aus einem vollständig austenitisierten Gefüge.

Bainitbildung spielt industriell insbesondere in der Warmumformung bzw. Wärmebehandlung von relativ großen Komponenten eine wichtige Rolle. Bei diesen Prozessen sind die Abkühlraten der großen Teile der Komponenten zu klein, um Martensit zu produzieren, reichen aber für die Bildung eines erheblichen Anteils der bainitischen Phase aus. Da die Bainitbildung ein diffusionskontrollierter Prozess ist, ist die genaue Menge von der Verweildauer und damit auch von der Abkühlrate innerhalb des entsprechenden Temperaturbereichs abhängig. Ferner weist die kristallografische Struktur der Produktphase mehrere verschiedene anisotrope Varianten auf, die der Struktur des Martensits sehr ähnlich sind. So kann für Bainit der gleiche kristallografische Rahmen wie für Martensit verwendet werden. Die Umwandlung des Austenits in alle Phasen außer Martensit läuft diffusionsgesteuert ab. Für diese Transformationsart wird als Gegenpart zur Koistinen-Marburger-Gleichung häufig die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung [62, 5] verwendet. Diese Gleichung beschreibt die diffusionsgesteuerte Phasenumwandlung bei gleich bleibender Temperatur anhand der Keimwachstumsgeschwindigkeit und unter der Annahme sphärischer Keime. Der Ansatz der Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung wird u.a. in den Arbeiten von DENG und MURAKAWA [26], BABU und KUMAR [7] zur einfacheren Beschreibung der isothermen Umwandlung verwendet. Die Forschung auf dem Gebiet der bainitischen Transformation hat sich insbesondere in den letzten zwei Jahrzehnten entwickelt. Es sind unter anderem die Arbeiten von HUNKEL *et al.* [60], BHADESHIA *et al.* [17], LUZGINOVA [82, 81], BURTHEN *et al.* [20], LAMBERS *et al.* [69], HASAN *et al.* [53] und USLU *et al.* [132] zu nennen. GARRET *et al.* [42] und AZUMA *et al.* [6] modellierten die Umwandlung vom Austenit zum Bainit unter besonderer Berücksichtigung der Evolution der bainitischen Phase infolge der Keimbildung. Dieses Modell wurde von MAHNKEN *et al.* [89] um die Betrachtung der Abhängigkeit der plastischen Verfestigung von der chemischen Energie erweitert. Bainit entsteht, wenn die Keimbildung der bainitischen Phase dem Grenzwert der Inkubationszeit entspricht. Die Entwicklung des Modells stellt den Gegenstand der Kapitel 3 und 4 dar. Es ermöglicht die Abbildung der Evolutionen des unteren sowie des oberen Bainits.

Die irreversiblen Phasenumwandlungen vom Austenit zum Bainit und Martensit sind durch kristallografische Umgruppierungen auf atomarer Ebene gekennzeichnet (siehe TIAHJANTO *et al.* [128]). Hieraus resultieren inelastische, überwiegend plastische Deformationen der weichen Phase des

Rest austenitischen. Auf der makroskopischen Ebene stimmt dieser Effekt mit denen der irreversiblen Verzerrungen selbst dann überein, wenn die makroskopische Spannung die Fließspannung der weichen Phase des Materials übersteigt. Dieses Phänomen ist als Umwandlungsplastizität bekannt und wurde bisher von einer Vielzahl von Autoren untersucht. Exemplarisch wird hier auf LEBLOND [72], FISCHER *et al.* [37, 35, 36], ANTRETTER *et al.* [3], WOLFF *et al.* [149] sowie die Referenzen darin verwiesen. Die am häufigsten verwendeten makroskopischen Modelle gehen auf LEBLOND [72] und LEBLOND *et al.* [74] zurück. Ferner befassen sich mehrere makroskopische konstitutive Modelle mit der Simulation des komplexen interaktiven Mechanismus der Phasentransformation und Plastizität. Als Referenz sind u.a. die Arbeiten von HALBERG *et al.* [51] und WOLFF *et al.* [147, 148] zu nennen. Dieser Literaturstrang beschäftigt sich mit der Modellierung von Phasenumwandlung, Umwandlungsplastizität und Plastizität für kleine Deformationen. Da die betrachteten makroskopischen Modelle überwiegend nur zwei Phasen berücksichtigen, sind sie zur Analyse des Hybridumformprozesses für große Deformationen und mehrphasige Gefügeverteilung nicht geeignet.

HALBERG *et al.* [52] entwickelte ein thermomechanisch gekoppeltes Modell für ein Zwei-Phasen-System (Austenit und Martensit) unter Berücksichtigung der großen Deformationen. MAHNKEN *et al.* [92] integrierten die Mehrphasentransformation und TRIP in das von MAHNKEN und SCHNEIDT [87] vorgeschlagene thermomechanische Konzept und ermöglichten hiermit eine Simulation von großen Deformationen. Dieser Entwicklung widmet sich Kapitel 4. Bezüglich der Modellierung von nicht lokalen Effekten in der Plastizität in einem thermodynamischen Rahmenkonzept wird auf VOYIADJIS UND DELIKTAS [134], VOYIADJIS *et al.* [135], POLIZZOTTO [105], MAROTTI DE SCIARRA [115] verwiesen. Modellierung von Schädigung im Hinblick auf Plastizität bildet den Gegenstand der Arbeiten von VOYIADJIS *et al.* [136, 137] und BAMMANN und SOLANKI [9]. VLADIMIROV *et al.* [133] befassten sich mit der anisotropischen Elastoplastizität einschließlich der numerischen Implementierung. Im Modell von LEBLOND *et al.* [74] werden die Wechselwirkungen zwischen der klassischen Plastizität und TRIP nicht berücksichtigt (siehe z.B. TALEB UND PETIT [123]). Um diesen Nachteil zu überwinden, wurden makroskopische Ansätze entwickelt, die die Rückverformung der umwandlungsplastischen Verzerrung in die Analyse einbeziehen (siehe dazu die Diskussion in WOLFF *et al.* [149]).

Es existieren bereits thermodynamisch konsistente TRIP-Modelle für kleine Deformationen, die die Wechselwirkungen zwischen der Plastizität, TRIP und der Kopplung der Rückverformung (backstress) erfassen (siehe ANTRETTER *et al.* [4], WOLFF *et al.* [146, 147] und FISCHLSCHWEIGER *et al.* [38]). Eine Experimentenreihe von NAGAYAMA *et al.* [98, 97] und TANAKA *et al.* [125] belegt den Zusammenhang zwischen der Transformation und der Rückverformung (backstress).

Die ersten Mikromodellierungen der martensitischen Umwandlung gehen auf die Arbeiten von BAIN und DUNKIRK [8] zurück. Diese Modelle gehen explizit vom Vorhandensein einer krz-Struktur zwischen zwei kfz-Strukturen aus. Um ein krz-Gitter mit den richtigen Gitterparametern zu erhalten, muss demnach die im kfz-Gitter vorhandene krz-Struktur in zwei Richtungen gestreckt und in eine Richtung gestaucht werden. Damit lassen sich drei möglichen Varianten des Martensits bzw. des Bainits beschreiben. Ferner wurde bei Röntgenbeugungsmessungen an Eisen-Nickel-Legierungen festgestellt, dass die Phasenumwandlung neben Strecken und Stauchen zusätzlich noch eine Scherkomponente aufweisen kann. Auf dieser Grundlage wurden die theoretischen Modelle von KURDJUMOW und SACHS [67], NISHIYAMA [99] und WASSERMANN [138] entwickelt.

Die Analyse der Mikrostruktur sowie der Kristallographie des bainitischen Gefüges erfolgt in Arbeiten von ZHANG und KELLY [151], LUO und LIU [80] FURUHARA *et al.* [41], PANCHOLI *et al.* [103]. Im bainitischen Gefüge bilden sich analog zum martensitischen Gefüge einzelne Varianten, die samt ihrer anisotropen Formänderungen erst auf der Mikroebene in Erscheinung treten.

Die Herleitung und die Argumentation von makroskopischen Ansätzen für Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität beinhaltet in der Regel die Berücksichtigung von Effekten der Meso- bzw. Mikro-Ebene. Dazu gehört unter anderem die Herleitung der Umwandlungsplastizität von GREENWOOD und JOHNSON [46] sowie eine große Anzahl der Weiterentwicklungen bzw. Modifizierungen dieses Ansatzes, wie z.B. LEBLOND [72], LEBLOND *et al.* [74], FISCHER [33, 34] STRINGFELLOW *et al.* [121], BHATTACHARYYA und WENG [19], GOVINDJEE und MIEHE [44], PAPATRIANTAFILLOU *et al.* [104]. Bei stark anisotropen Produktphasen wie Martensit und Bainit kann

eine unelastische Verformung auch durch eine gezielte Auswahl von energetisch günstigen Produktphasevarianten in Abhängigkeit vom angebrachten Spannungszustand erreicht werden. Dieser sogenannte Orientierungseffekt wurde erstmals von MAGEE [83] beschrieben und findet insbesondere im Rahmen der Modellierung des mikrostrukturellen Verhaltens unter Erfassung der einzelnen Varianten der Formgedächtnislegierungen Anwendung (vgl. z.B. HACKL *et al.* [49], HACKL und HEINEN [47], GOVINDJEE und MIEHE [44], THAMBURAJA und ANAND [127]).

Die mikromechanische Modellierung wurde in den letzten Jahren insbesondere in Hinblick auf eine stärkere Berücksichtigung der sowohl auf der Meso- als auch der Mikro-Ebene auftretenden Effekte weiter verfolgt und erweitert. Ferner wurden die makroskopischen Ansätze durch Mehr-Skalen-Modellierungen vervollständigt bzw. vollständig abgelöst. Diese Entwicklung zeichnet sich insbesondere in den Arbeiten von CHERKAOUI *et al.* [23], FISCHER *et al.* [36] CHERKAOUI [22], IWAMOTO [61], TURTELTAUB und SUKER [130, 131], BARBE *et al.* [10], TJAHJANTO *et al.* [128] und LEVITAS und OZSOY [77, 78] ab. Im Beitrag von KOUZNETSOVA und GEERS [66] wurde ein Drei-Skalen-Ansatz der martensitischen Umwandlung infolge der mechanischen Belastung im TRIP-Stahl entwickelt. Das Modell vereinigt in sich unterschiedliche Ebenen, die jeweilige Effekte abbilden und miteinander verknüpfen.

Die erwähnten Publikationen zeigen verschiedene Methoden zur Modellierung der Festkörperphasenumwandlungen in den Stählen. Trotz der Vielzahl der genannten Beiträge zu diesem Themenkomplex fehlen Arbeiten, die einen allgemein gültigen Ansatz zur lückenlosen Beschreibung der Hybridumformprozesse formulieren.

1.3 Ziele der Arbeit

Die zentrale Zielsetzung der hier vorliegenden Dissertation, die im Rahmen des Teilprojektes B2 des SFB/TR TRR 30 „Prozessintegrierte Herstellung funktional gradierter Strukturen auf der Grundlage thermo-mechanisch gekoppelter Phänomene“ (detaillierte Informationen z.B. unter www.transregio-30.com) entstanden ist, ist den oben beschriebenen Hybridumformprozess mit Hilfe der FEM-Simulation zu verstehen, vorherzusagen und zu optimieren.

Die Analyse der beschriebenen Problemstellung gliedert sich in folgende Etappen:

- Entwicklung eines makroskopischen phänomenologischen Mehrphasenmodells. Zur Erstellung gehört die Formulierung und die Implementierung von konstitutiven Gleichungen. Das Materialmodell soll das komplexe Materialverhalten wie die temperatur- und zeitabhängige Phasenumwandlung, die Umwandlungsplastizität, die Viskoplastizität sowie große Deformation abbilden.
- Bestimmung der Materialparameter auf Grundlage von Experimenten mit Hilfe der numerischen Optimierungsverfahren.
- Vorstellung repräsentativer Beispiele, in denen das modellierte phänomenologische Materialverhalten getestet wird.
- FEM-Simulation des Hybridumformprozesses mit der Darstellung der Gefügeverteilung im Technologieträger „Antriebswelle“ unter Berücksichtigung der Kopplung thermischer und mechanischer Prozessschritte.
- Aufbau eines mikromechanisch basierenden Modells, welches die makroskopischen Effekte infolge der Phasenumwandlung vom Austenit zum Bainit mit Hilfe von Effekten sowohl auf der Mikro- als auch auf der Meso-Ebene abbildet.
- Vorstellung repräsentativer Beispiele, in denen das aus dem mikromechanischen Modell resultierende makroskopische Materialverhalten getestet wird.

1.4 Aufbau der Arbeit

Die mehrphasige phänomenologische und mehrskalige mikroskopisch basierende Modellierung von Phasenumwandlungen im Hybridumformprozess gliedert sich in insgesamt sechs Kapitel:

In **Kapitel 2** werden die für das Verständnis dieser Arbeit wichtigen, theoretischen Grundlagen zur Festkörperphasenumwandlungen gelegt. Des Weiteren erfolgt die Darstellung des Versuchsaufbaus bzw. des Ablaufs der experimentellen Untersuchungen der Phasenumwandlungen.

Kapitel 3 befasst sich mit der phänomenologischen Modellierung der Phasenumwandlung in Kombination mit inelastischem Materialverhalten. Hierbei werden zunächst die konstitutiven Gleichungen für kleine Deformationen hergeleitet. Anschließend werden diese in eine Materialschnittstelle des FEM Programms Abaqus, die UMAT Subroutine numerisch implementiert. Der Implementierung folgt die Parameteridentifikation des makroskopischen Materialmodells auf der Grundlage von ein-axialen Versuchen.

In **Kapitel 4** wird das Modell um die Theorie der Großdeformationen erweitert. Das entwickelte Modell wird auf die thermodynamische Konsistenz geprüft. Hierbei wird die numerische Implementierung entsprechend auf die Großdeformationen ausgedehnt. Im Anschluss daran erfolgt die Simulation des Hybridumformprozesses unter Einsatz der Standardprozessführung. Um unterschiedliche Gefügeverteilungen im Werkstück nachbilden zu können, werden im nächsten Schritt Prozessparameter variiert.

Der Gegenstand des **Kapitel 5** bildet die Entwicklung eines physikalisch motivierten und thermodynamisch konsistenten Mehrskalenmodells für das Materialverhalten eines niedrig legierten Stahls bei der Umwandlung vom Austeint zum Bainit. Mit Hilfe des Modells werden die makroskopischen Effekte der Phasenumwandlung auf der Grundlage der Vorgänge sowohl auf der Mikro- als auch der Mesoebene nachgebildet. Zur Erfassung des makroskopischen Verhaltens infolge der Phasenumwandlung erfolgt die Abbildung des Polykristalls auf der mesoskopischen Ebene mit Hilfe des repräsentativen Volumenelements (RVE) mit 512 Elementen.

Abgeschlossen wird die Arbeit durch ein Fazit inklusive eines Ausblicks (**Kapitel 6**).

Kapitel 2

Grundlagen der Phasenumwandlungen

2.1 Theoretische Grundlagen

Dieser Abschnitt stellt die für das Verständnis dieser Arbeit wichtigen, theoretischen Grundlagen zur Festkörperphasenumwandlungen dar. Die Vielfalt der Eigenschaften der Stahlwerkstoffe wird durch das verschiedenartige Mikrogefüge bewirkt. Die Einstellung des Mikrogefüges erfolgt durch eine Änderung der chemischen Zusammensetzung bzw. durch eine geeignete thermische und mechanische Behandlung unter Verwendung der Phasenumwandlung. Als eine Phasenumwandlung wird der Übergang von einer oder mehreren Ausgangsphase(n) in eine oder mehrere andere Phase(n) bezeichnet [30]. Diese Phasenänderungen lassen sich in *Umwandlungs-* und *Ausscheidungsprozesse* unterteilen, wobei Umwandlungsprozesse einen Übergang einer instabilen Gitterstruktur in eine metastabile bzw. stabile Gitterstruktur darstellen. Ausscheidungsprozesse kennzeichnen hingegen die diffusionsbedingte Ausscheidung einer oder mehrerer Phasen aus dem übersättigten Mischkristall [57], [30].

Unterschiedliche Phasen sind je nach Druck, Temperatur und Zusammensetzung der Legierungselemente stabil. Diese Bereiche können in Zustandsdiagrammen anhand der sogenannten Phasengrenzlinien separiert werden. Wird eine Phasenlinie beispielsweise durch eine Senkung der Temperatur überschritten, zeigt sich dies durch einen entstehenden Knick- oder Haltepunkt in der Abkühlkurve (Abb. 2.1.b). Die anhand der Abkühlkurven ermittelten Knick- und Haltepunkte dienen als Grundlage für die Erstellung der Phasendiagramme.

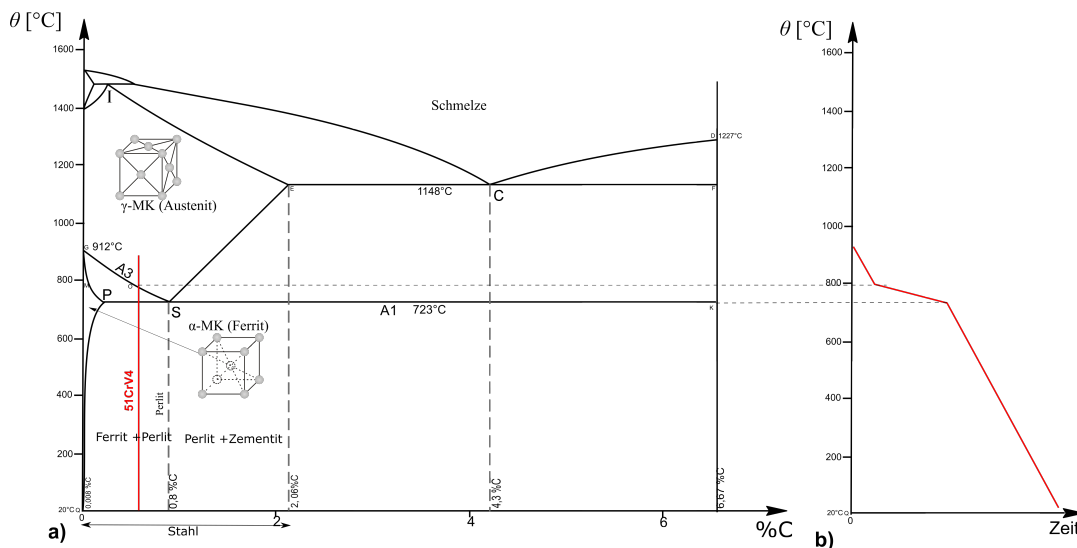


Abb. 2.1 a) Eisen-Kohlenstoff-Diagramm (EKD), b) Schematische Abkühlkurve

Das prominenteste Beispiel für ein Phasendiagramm ist das *Eisen-Kohlenstoff-Diagramm* (EKD) (Abb. 2.1.a). Das EKD zeigt die Phasenänderungen einer Zweikomponentenlegierung aus Eisen und Kohlenstoff unter der Bedingung, dass die Abkühlrate so langsam ist, dass eine vollständige Diffusion aller Atome gewährleistet wird. Die Abbildung des Zustandsdiagramms erfolgt dabei entweder in einer gefüge- oder einer phasenmäßigen Betrachtung. Des Weiteren lässt sich das EKD in das stabile Eisen-Graphit- (Fe-C) und das metastabile Eisen-Zementit-Diagramm ($\text{Fe-Fe}_3\text{C}$) differenzieren. Der maximale Kohlenstoffanteil im Eisen im EKD liegt bei 6,67 % des Massenanteils und entspricht genau 100 % Zementit. Die charakteristischen Haltepunkte im EKD sind der peritektische (I), der eutektische (C) und der eutektoiden (S) Punkt in Abbildung 2.1.a, bei denen jeweils drei Phasen gleichzeitig vorliegen. Ferner ist am peritektischen und eutektischen Punkt jeweils eine schmelzflüssige Phase beteiligt. Am eutektoiden Punkt (S) findet eine Umwandlung von einem festen zu einem anderen festen Aggregatzustand statt. Dabei wandelt das kubisch-flächenzentrierte (kfz) γ -Eisen in kubisch-raumzentriertes (krz) α -Eisen und Fe_3C um (Abb. 2.2). Bei der gefügemäßigen Betrachtung transformiert der Austenit (γ) in dem für Schmiedestähle relevanten Kohlenstoffbereich von 0,2 Ma.-%, der zum Härten mindestens notwendig ist, bis 2,06 Ma.-% Kohlenstoff entweder zu Ferrit (α), Perlit (α und Fe_3C) oder Perlit mit Sekundärzementit (Fe_3C) um. Am eutektoiden Punkt S (0,8 Ma.-% Kohlenstoff und 723 °C) wandelt γ -Eisen bei langsamer Abkühlung in 100 % Perlit um, bei α -Eisen entsteht streifenförmig angeordneter Fe_3C . Bei niedrigeren Kohlenstoffgehalten ist der Anteil des Ferrits höher, bei größeren Kohlenstoffanteilen sammelt sich Sekundärzementit (Ausscheidung von Fe_3C im Austenit) bevorzugt an den Korngrenzen.

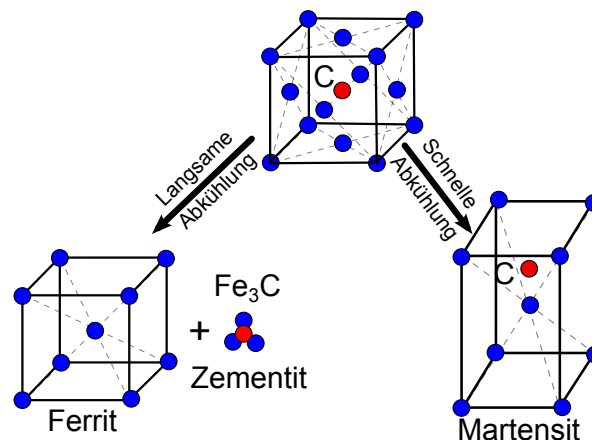


Abb. 2.2 Schematische Darstellung der Umwandlung des kubisch-flächenzentrierten Gitters in ein kubisch-raumzentriertes Gitter mit Kohlenstoffatom

Da das EKD nur für das Zweikomponentensystem Eisen und Kohlenstoff und darüber hinaus nur bei sehr langsamer Abkühlung gilt, ist dessen Anwendbarkeit auf thermo-mechanisch gekoppelte Produktionsprozesse zur Einstellung funktional gradiert Strukturen im Stahl sehr begrenzt. Für solche Vorgänge eignet sich vielmehr der Einsatz von *Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubildern* (ZTU), die das zeitabhängige Festkörperphasenumwandlungsverhalten von jeweils einer chemischen Zusammensetzung eines Stahls gefügemäßig abbilden [144]. Das in ZTU-Diagrammen beschriebene Umwandlungsverhalten wird generell in einem *Dilatometerversuch* bestimmt, wobei die Umwandlungen durch Längenänderungen von Proben mit sehr geringer Masse gemessen werden, wodurch alle Temperaturbewegungen nahezu trägheitslos erfolgen. ZTU-Diagramme lassen sich in zwei Kategorien unterteilen, in *kontinuierliche* und *isotherme*. Kontinuierliche ZTU-Diagramme geben das Umwandlungsverhalten für stetige Abkühlung von der Austenitisierungstemperatur an. Isotherme ZTU-Diagramme bilden das Umwandlungsverhalten bei konstanten Halte Temperaturen nach schnellem Abschrecken von der Austenitisierungstemperatur ab.

Es gilt anzumerken, dass jedes ZTU-Diagramm streng genommen nur für die verwendete Schmelze und die vorliegenden Abkühlbedingungen gilt. Vor allem kann eine Änderung der im Stahl

gelösten Legierungselemente sowohl die Umwandlungsstart- als auch die -endpunkte (isothermes ZTU-Diagramm) oder die Umwandlungsstart- und -endtemperaturen (kontinuierliches ZTU-Diagramm (Abb. 2.3) stark beeinflussen [144]. Abbildung 2.4 stellt ein isothermes ZTU-Diagramm des untereutektoiden 51CrV4 Stahls dar.

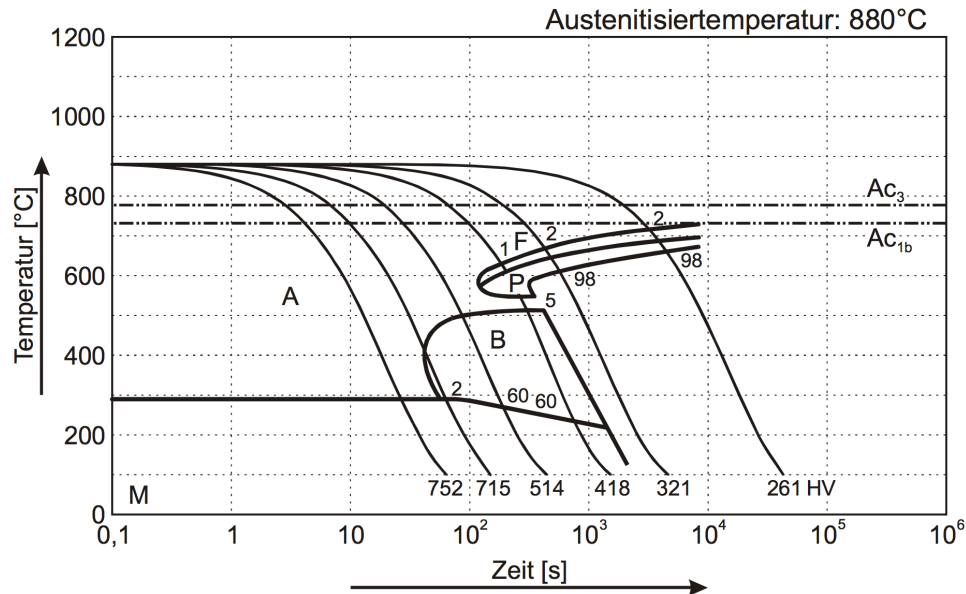


Abb. 2.3 Kontinuierliches Zeit-Temperatur-Umwandlungs-Schaubild (ZTU-Schaubild) [29]

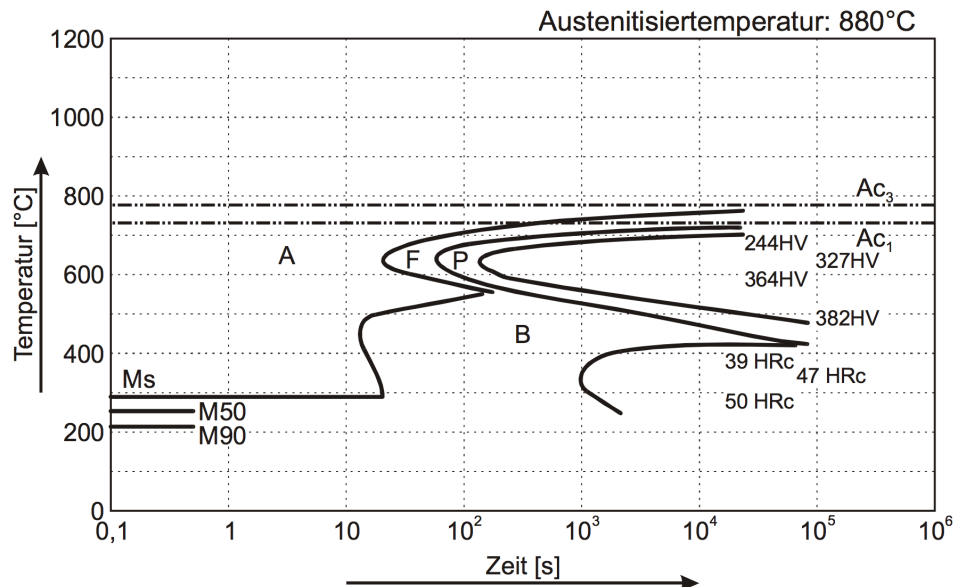


Abb. 2.4 Isothermes Zeit-Temperatur-Umwandlungs-Schaubild (ZTU-Schaubild) [29]

Bei diesem Stahl können abhängig von den Abkühlbedingungen zusätzlich zu den bereits aus dem EKD bekannten Gefügen Ferrit und Perlit auch Bainit oder Martensit aus dem Austenit entstehen. Da die Abkühlraten im betrachteten Hybridumformprozess so hoch sind [142, 141], dass kaum eine

Umwandlung vom Austenit zum Ferrit oder Perlit möglich ist, wird dieser Vorgang im Rahmen dieser Arbeit nicht näher betrachtet. Vielmehr sind für den betrachteten Prozess Umwandlungen in die Martensit-, Bainitstufe oder in ein Bainit-Martensitgefüge relevant. Da das vor dem Abkühlvorgang vorliegende austenitische Gefüge durch eine Variation der Aufheizbedingungen determiniert werden kann [113, 112] und somit ein großer Einfluss auf das Umwandlungsverhalten und die daraus resultierenden mechanischen Eigenschaften zu erwarten ist [144], sollen im Folgenden die für den betrachteten Hybridumformprozess relevanten Gefüge kurz erläutert werden.

2.1.1 Austenit

Das austenitische Gefüge (kfz), das auch Hochtemperaturphase genannt wird, entsteht bei untereutektoiden Stählen aus ferritisch-perlitischem Gefüge (krz) durch Aufheizen auf eine Temperatur über A_3 im γ -Bereich (Abb. 2.1) [30]. Hierbei sind die Bereichsgrenzen von der Zusammensetzung, der Aufheizrate sowie der Haltezeit abhängig. Die im EKD angegebenen Phasengrenzlinien gelten allerdings nur für moderate Aufheizraten und extrem lange Haltezeiten. Da dies den im betrachteten technischen Prozess vorliegenden Bedingungen nicht entspricht, wurden für diverse Stahlgüten sogenannte *Zeit-Temperatur-Austenitisierungs-Schaubilder* (ZTA-Diagramme (Abb. 2.5)) entwickelt [144]. Bei den ZTA-Diagrammen kann man analog zum Vorgehen bei den ZTU-Diagrammen eine Differenzierung in isotherme (Abb. 2.5) und kontinuierliche (Abb. 2.6) Diagramme vornehmen. So lässt sich auf der Grundlage des kontinuierlichen ZTA-Diagramms beispielsweise die für eine bestimmte Aufheizrate benötigte Temperatur zur Einstellung eines homogenen Austenits ermitteln. Ein isothermes ZTA-Diagramm liefert bei vorgegebener Austenitisierungstemperatur und Aufheizrate die benötigte Haltezeit zur Einstellung des gewünschten austenitischen Zustandes. Des Weiteren können sowohl die gewählte Austenitisierungstemperaturen als auch die Haltezeiten Einfluss auf die sich einstellenden Austenitkorngrößen nehmen. Die Austenitisierungstemperaturen A_{c1} und A_{c3} werden wiederum von der Zusammensetzung der Legierungselemente beeinflusst. Deren Schätzwerte lassen sich nach HOLLOMON und JAFFE wie folgt ermitteln [30]:

$$\begin{aligned}
 A_{c1}[\text{°C}] &= 739 - 22 \cdot (\%C) + 2 \cdot (\%Si) - 7 \cdot (\%Mn) + 14 \cdot (\%Cr) \\
 &\quad + 13 \cdot (\%Mo) - 13 \cdot (\%Ni) + 20 \cdot (\%V), \\
 A_{c3}[\text{°C}] &= 902 - 255 \cdot (\%C) + 19 \cdot (\%Si) - 11 \cdot (\%Mn) - 14 \cdot (\%Cr) \\
 &\quad + 13 \cdot (\%Mo) - 20 \cdot (\%Ni) + 55 \cdot (\%V).
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

Viele technische Anwendungen setzen ein gleichmäßiges austenitisches Gefüge voraus, um während der anschließenden Abkühlung nach Möglichkeit homogene Gefüge zu erhalten. Im betrachteten thermomechanischen Hybridumformprozess werden hingegen verschiedenartige Austenitisierungsbedingungen eingestellt. Dies führt außer zu lokal verschiedenartigen Austenitisierungsgraden und Austenitkorngrößen auch zu Unterschieden im lokalen Fließverhalten. Die Erkenntnisse zum Warmfließverhalten des stabilen Austenits (Temperaturen oberhalb der A_{c3} -Linie) lassen sich aus der Literatur entnehmen (vgl. dazu beispielsweise [50]). Daten zum Fließverhalten des unterkühlten Austenits (Temperaturen unterhalb der A_{c1} -Linie) liegen hingegen zumeist nicht vor. Ahrens [1] hat gezeigt, dass eine Abschätzung des Fließverhaltens des unterkühlten Austenits aus dem experimentell ermittelten Spannungs-Dehnungs-Verhalten der stabilen austenitischen Stählen zu großen Ungenauigkeiten führen kann. Da aber diese metastabile Phase während der Verformungssequenz des relevanten Prozesses vorliegt, erweist sich eine exakte Prozesssimulation des Spannungs-Dehnungs-Verhaltens des unterkühlten Austenits als zwingend notwendig.

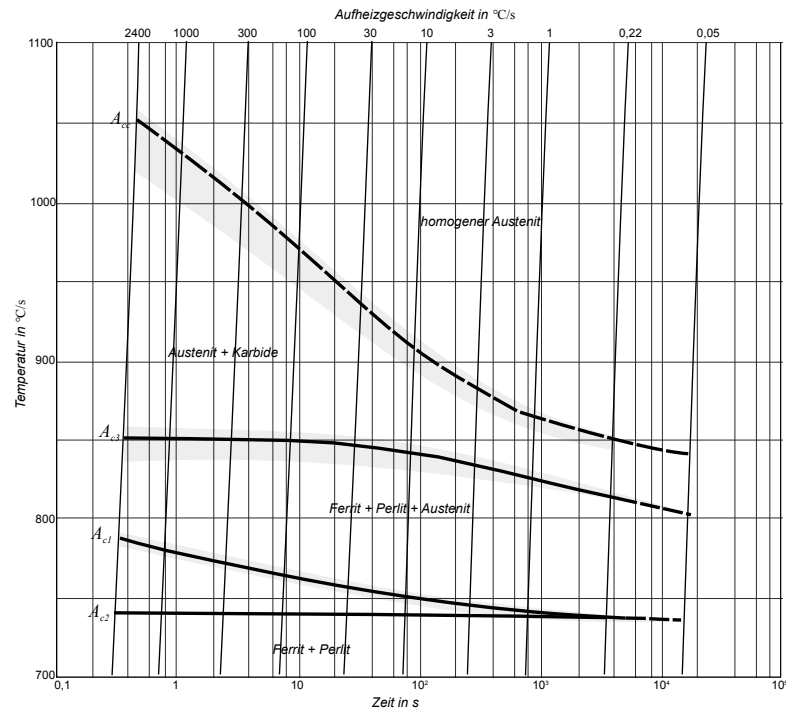


Abb. 2.5 Kontinuierliches Zeit-Temperatur-Austenitisierungsschaubild (ZTA) [144]

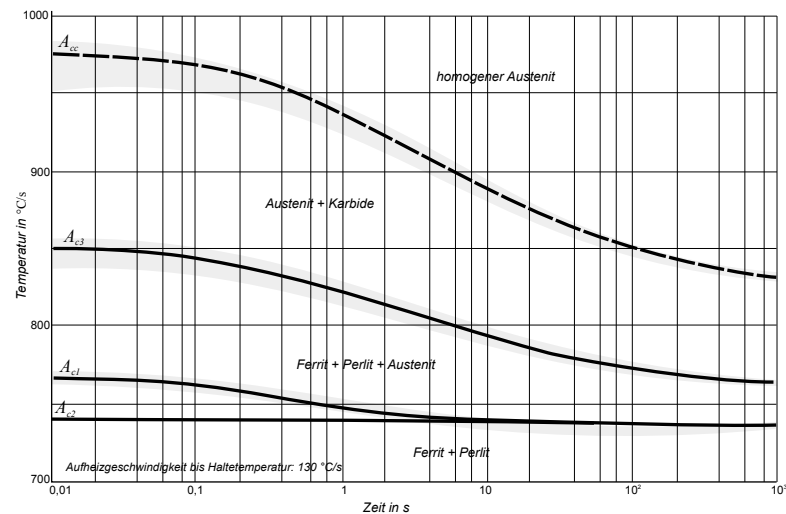


Abb. 2.6 Isothermes Zeit-Temperatur-Austenitisierungsschaubild (ZTA) [144]

2.1.2 Martensit

Das martensitische Gefüge entsteht durch ein diffusionsloses, spontanes, schlagartiges Umklappen des austenitischen kfz-Gitters in ein tetragonal verzerrtes, raumzentriertes Gitter (Abb. 2.2) für tiefe Temperaturen. Die Umwandlung beginnt bei Unterschreiten der *Martensitstarttemperatur* M_s und läuft bei einer weiteren Abkühlung kaskadenartig in Bruchteilen von Sekunden ab. Die martensitische Umwandlung stoppt, wenn der Abkühlvorgang unterbrochen wird und setzt sich bei einer weiteren Temperaturabsenkung fort [8, 15, 67, 99, 138]. Wegen der während der martensitischen Umwandlung herrschenden relativ tiefen Temperaturen ist die Diffusion der Atome ausgeschlossen.

Die martensitische Transformation ist durch eine kooperative Scherbewegung der Atome gekennzeichnet, wobei sich jedes einzelne Atom nur minimal bewegt [100]. Dementsprechend bleibt die Verteilungskonzentration der Legierungsatome unverändert. Es gilt allerdings auf eine ausreichend hohe Abkühlrate während der Temperatursenkung bis zur Martensitstarttemperatur zu achten, um die diffusionsgesteuerte Phasenumwandlung, d.h. die Transformation von Austenit zu Ferrit/Perlit oder Bainit, zu vermeiden. Die M_s -Temperatur, die Struktur des Martensits sowie die sich einstellende Gitterverzerrung hängen maßgeblich vom Kohlenstoffgehalt des jeweiligen Stahlwerkstoffs ab. Während es bei sehr hohen Kohlenstoffgehalten und niedrigeren Umwandlungstemperaturen zumeist zur Bildung von so genanntem *Plattenmartensit* (engl. plate martensite) kommt, wird bei niedrigen Kohlenstoffgehalten und Temperaturen knapp unterhalb von M_s vornehmlich *Lanzettmartensit* (engl. lath martensite) gebildet. Die Martensitstarttemperatur in °C kann nach HOLLOMON und JAFFE [30] anhand der Zusammensetzung der Legierungselemente abgeschätzt werden:

$$M_s[^\circ\text{C}] = 550 - 350 \cdot (\%C) - 40 \cdot (\%Mn) - 35 \cdot (\%V) - 20 \cdot (\%Cr) - 17 \cdot (\%Ni) - 10 \cdot (\%Cu) - 10 \cdot (\%Mo) - 8 \cdot (\%W) + 15 \cdot (\%Co) + 30 \cdot (\%Al). \quad (2.2)$$

Die Phasenumwandlung ist mit Eintreten der Martensit-Finish-Temperatur (M_f), einem Temperaturniveau unterhalb von M_s vollendet. Oft wird wie beispielsweise bei KOISTINEN und MARBURGER [65] angenommen, dass zwischen dem martensitischen Phasenanteil und der Unterkühlung ein linearer Zusammenhang besteht. Um gerade noch 100 % Martensit zu erhalten, werden sowohl M_s und M_f als auch die kritische Abkühlrate durch die Legierungszusammensetzung des jeweiligen Stahls beeinflusst. Dementsprechend sinken M_s und M_f mit wachsendem gelösten Kohlenstoffgehalt, so dass ab Kohlenstoffgehalten von über 0,6 Ma.-% bei Raumtemperatur Restaustenit im Gefüge verbleiben kann [114, 21, 100, 58, 107]. Bei mittleren Kohlenstoffgehalten von ca. 0,5 bis 1,0 Ma.-% können beide Arten (Platten-, Lanzettmartensit) gleichzeitig entstehen [114, 152]. Ferner stabilisieren unter anderem die Legierungselemente Chrom (Cr), Vanadium (V) und Molybdän (Mo) die ferritische Phase und die Legierungselemente Nickel (Ni) und Mangan (Mn) die austenitische Phase. Die resultierende Morphologie des Martensits ist vor allem vom gelösten Kohlenstoffgehalt im Austenitgefüge abhängig, da dieser die Stapelfehlerenergie und die Streckgrenze des unterkühlten Austenits bestimmt. Martensit beginnt in der Regel an den Austenitkorgrenzen bzw. anderen gestörten Bereichen zu wachsen und verläuft mit der Schallgeschwindigkeit des Stahls bis zu einem Hindernis wie beispielsweise einer weiteren Korgrenze oder schon entstandenem Martensit. Dabei bildet sich bei Kohlenstoffgehalten von über 0,6 Ma.-% bei Raumtemperatur überwiegend Plattenmartensit, meist unter Zurückbleiben von Restaustenit (Abb. 2.7 a). Dieser ist deutlich weicher als das martensitische Gefüge, so dass die erreichbaren Härten mit wachsendem Kohlenstoffgehalt ohne zusätzliche Maßnahmen nicht weiter steigen [11]. Bei Kohlenstoffgehalten von unter 0,6 Ma.-% entwickelt sich überwiegend Lanzettmartensit (Abb. 2.7 b).

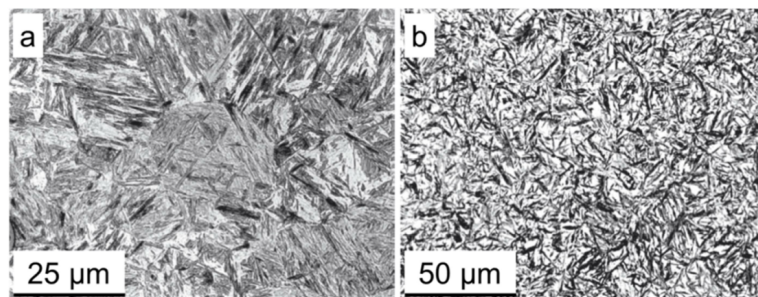


Abb. 2.7 Verschiedene Ausprägungen von (a) Plattenmartensit und (b) Lanzettmartensit nach Bargel [114]

Für den Beginn der Umwandlung vom Austenit zum Martensit ist neben einer ausreichend hohen Abkühlrate auch ein bestimmtes Maß an Unterkühlung erforderlich (Abb. 2.8). Ein spontanes Umklappen des austenitischen Gitters ist erst dann möglich, wenn nach Unterschreiten der Gleichgewichtstemperatur θ_0 die benötigte Energie ΔG_{erf} zur Bildung neuer Grenzflächen und Behebung von Gitterstörungen zur Verfügung steht. Der Einsatz der martensitischen Phasenumwandlung bei Vorliegen einer höheren Temperatur erfordert zusätzlich zur temperaturabhängigen Gibbs-Energie $\Delta G[\theta]$ die Anwendung einer angemessenen mechanischen Triebkraft $U_{\text{krit}}(\theta)$ [124].

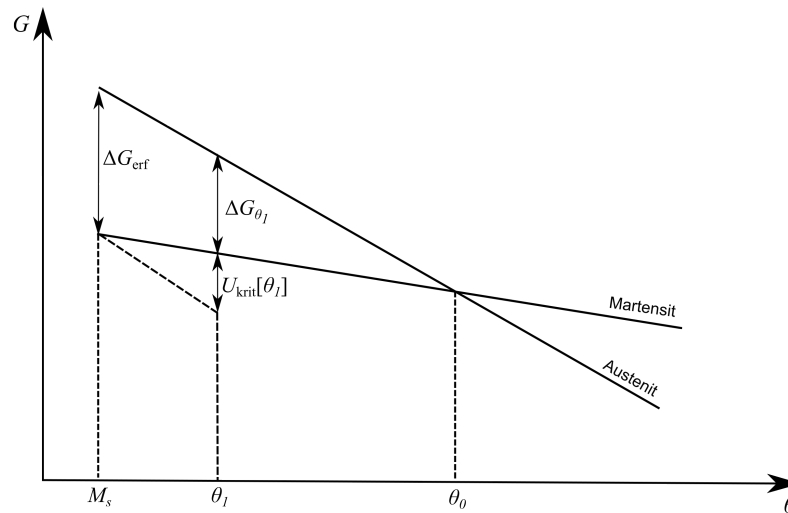


Abb. 2.8 Schematische Darstellung der Gibbs-Energie G in Abhängigkeit von der Temperatur θ [124]

Die mechanischen Eigenschaften des eingestellten martensitischen Gefüges sind entscheidend vom Kohlenstoffgehalt abhängig. So nehmen aufgrund der ansteigenden tetragonalen Gitterverzerrung im Martensit sowohl die Härte und die Festigkeit als auch die Sprödigkeit mit steigendem Kohlenstoffgehalt zu. Dies gilt allerdings nur dann, wenn bei Raumtemperatur kein Restaustenit vorhanden ist (bis 0,6 Ma-% C) [100, 107, 21]. Zur Verbesserung der mechanischen Eigenschaften und in erster Linie der Duktilität des Martensits kann dieser angelassen werden. Dadurch entspannt das verzerrte Gitter, und es bilden sich Karbide aus. Eine steigende Anlasstemperatur verursacht eine Zunahme der Duktilität und eine Abnahme der Festigkeit bzw. der Härte [11, 21].

2.1.3 Bainit

Das bainitische Gefüge bildet sich bei der Abkühlung in einem Temperaturbereich, der sich zwischen den für die Perlit- bzw. die Martensitbildung relevanten Bereichen befindet. Aus diesem Grund wird es auch als *Zwischenstufengefüge* bezeichnet [17]. Hierbei erfolgt der Umklappprozess vom austenitischen kfz-Gitter in das tetragonal verzerrte krz-Gitter analog zu der martensitischen Phasenumwandlung nach dem Prinzip der scherungsdominierten Phasenumwandlung [8, 17, 67, 99, 138]. Im Gegensatz zum Prozess der Martensitbildung ist die Bainitbildung nicht ausschließlich von der Unterkühlung abhängig. Sie folgt ebenso einer zeitabhängigen Komponente, was durch die Tatsache, dass sich 100 % Bainit nur in einem isothermen Prozess einstellen lässt, verdeutlicht wird.

Die Temperatur, bei der die Bainitbildung einsetzt, wird als *Bainitstarttemperatur* B_s bezeichnet. In der Literatur existiert für die Ermittlung von B_s in Abhängigkeit von der Legierungselementenzusammensetzung eine Reihe von empirischen Gleichungen [75, 120]. LEE [75] geht beispielsweise vom folgenden Zusammenhang der B_s Temperatur in Abhängigkeit vom Massenanteil der Legierungselementen aus:

$$B_s[^\circ\text{C}] = 745 - 110 \cdot (\%C) - 59 \cdot (\%Mn) - 39 \cdot (\%Ni) - 68 \cdot (\%Cr) - 106 \cdot (\%Mo) + 17 \cdot (\%MnNi) + 6 \cdot (\%Cr)^2 + 29 \cdot (\%Mo)^2. \quad (2.3)$$

Die Umwandlung setzt ausgehend von Austenitkorngrenzen mit Keimbildung nach dem Unterschreiten der B_s -Temperatur ein. Im Gegensatz zum Perlit, wo die Keimbildung aus dem Zementit erfolgt, prägen sich beim Bainit zuerst das α -Mischkristall aus. Wenn die Keimgröße den kritischen Wert erreicht, kommt es zum Wachstum einer Untereinheit (engl. sub-unit). Eine schematische Darstellung des Wachstums bainitischer Nadeln (engl. sheaf) ist in Abbildung 2.9 gegeben.

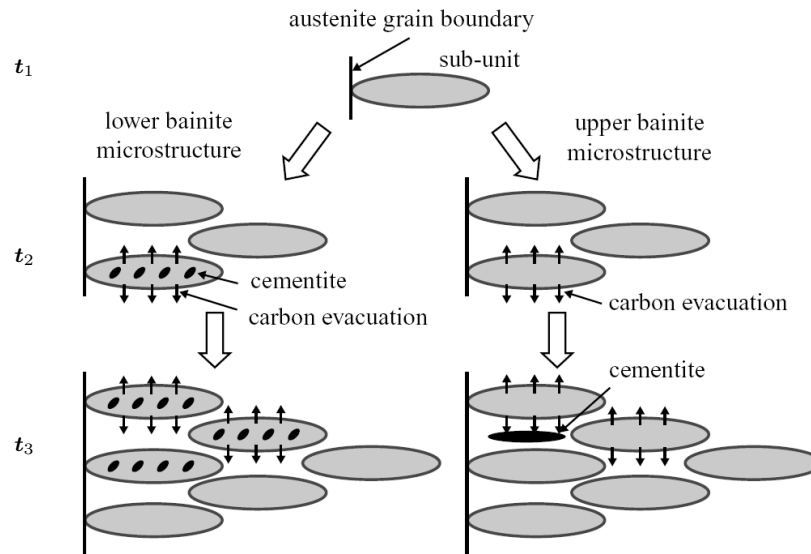


Abb. 2.9 Schematische Darstellung des Wachstums von bainitischen Nadeln und Karbidbildung bei oberem und unterem Bainit [6]

Der Kohlenstoff bleibt im Laufe dieses Umklappprozesses zunächst im tetragonal verzerrten ferritischen Gitter (Abb. 2.2) zwangsgelöst (Zeitpunkt t_1 in Abbildung 2.9). Ist die Umwandlungstemperatur und somit auch die Diffusionsfähigkeit ausreichend groß, diffundiert dieser vollständig in den noch nicht umgewandelten angrenzenden Austenit (Zeitpunkt t_2 in Abbildung 2.9). Bei Vorliegen niedriger Umwandlungstemperaturen verbleibt jedoch ein Teil des Kohlenstoffs im bainitischen Ferrit und bildet dort Karbide. In diesem Fall handelt es sich um den unteren Bainit. Zum nächsten Zeitpunkt (t_3 in Abbildung 2.9) kann es an der Spitze einer Bainituntereinheit zunächst zu einer autokatalytischen Keimbildung und einem darauf folgenden Wachstum einer neuen Untereinheit kommen. Hierbei begrenzen Austenitkorngrenzen und bereits bestehende bainitische Nadeln das Wachstum [14, 17, 55, 56, 110, 111].

Da bei beiden Bainitarten die Diffusion des Eisens vollständig gehemmt ist, ergeben sich die für die Differenzierung des unteren und oberen Bainit verwendeten Erscheinungsformen allein aus der unterschiedlichen Diffusionsfähigkeit des Kohlenstoffs. Als charakteristisches Merkmal des unteren Bainit sind die fein verteilten Karbide innerhalb der bainitischen Ferrit-Matrix zu nennen, die sich zumeist in einem Winkel von 50-60 °C zur Hauptachse der Ferritnadeln anordnen. Ferner können zwischen den einzelnen Ferritnadeln vereinzelt größere Karbide entstehen, die sich lokal aus kohlenstoffübersättigtem Austenit bilden können. Die typischen Vorgänge für die Entstehung von oberem und unterem Bainit werden in Abbildung 2.9 veranschaulicht [6].

Der untere Bainit zeichnet sich aufgrund der fein verteilten Karbide im bainitischen Ferritgitter durch ausgezeichnete mechanische Eigenschaften, wie hohe Festigkeit bei gleichzeitiger guter Duktilität aus. Beim oberen Bainit fehlen hingegen die fein verteilten Karbide in der Ferrit-Matrix. Es bilden

sich hier aus dem übersättigten Austenit zwischen den einzelnen Ferritnadeln sehr grobe Karbide. Im Ergebnis entsteht eine Mikrostruktur, die dem perlitischen Gefüge ähnlich ist und im Vergleich zum unteren Bainit schlechtere mechanische Eigenschaften aufweist [11]. Ferner kann bei Temperaturen knapp unterhalb der B_s Temperatur das Phänomen der sogenannten „unvollständigen Bainitbildung“ (engl.: incomplete reaction phenomenon) auftreten, das dadurch gekennzeichnet ist, dass auch bei sehr langen isothermen Haltezeiten keine 100%-ige Bainitbildung erreicht wird [55]. Das Auftreten dieses Phänomens wird u.a. mit der zunehmend gehemmten Karbidbildung bei einer steigenden Temperatur und der damit einhergehenden Erhöhung des Kohlenstoffgehalts im Austenit erklärt. Erreicht die Kohlenstoffkonzentration einen kritischen Wert, ist eine diffusionslose Bildung des bainitischen Ferrits nicht mehr möglich. Es kommt hierbei vielmehr zu einer Stabilisierung des austenitischen Gefüges [16, 110].

2.1.4 Das kristallographische Modell

Scherungsdominierte Festkörperphasenumwandlungen sind mehrfach durch verschiedene Modelle beschrieben worden. Ein Großteil davon wurde ursprünglich für die Austenit-zu-Martensit-Phasenumwandlung entwickelt. Allerdings lassen sich diese auch für die Austenit-zu-Bainit-Phasenumwandlung übertragen. Das erste Modell, dass die martensitische Phasenumwandlung beschreibt, wurde von BAIN und DUNKIRK [8] entwickelt. Hierbei gingen beide Verfasser davon aus, dass die Umwandlung vom kfz-Gitter ins krz-Gitter mit einer minimalen Verformung einhergeht. Die minimale Verformung liegt vor, wenn angenommen wird, dass eine krz-Struktur bereits an der Grenzfläche zwischen zwei kfz-Strukturen existiert (siehe Abb. 2.10).

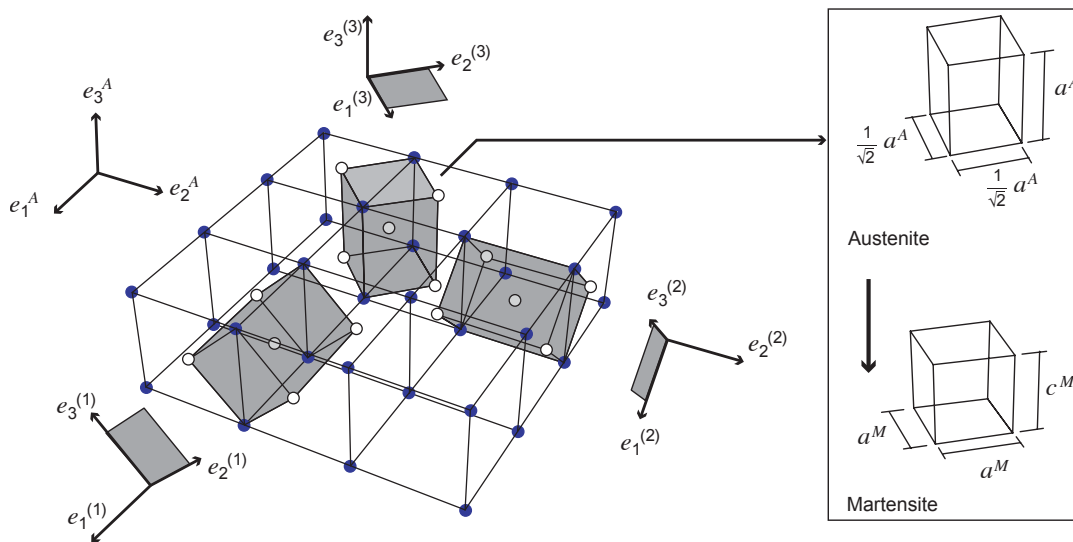


Abb. 2.10 Modellvorstellung der Phasenumwandlung vom Austenit zum Martensit nach BAIN und DUNKIRK [8, 131]

Um jedoch ein krz-Gitter mit den erwünschten Gitterparametern zu erhalten, muss die im kfz-Gitter vorhandene krz-Struktur in eine Raumrichtung gestaucht und in zwei Raumrichtungen gestreckt werden. Demnach kann sich eine resultierende Martensit- oder Bainit-Orientierung aus drei verschiedenen Austenit-Orientierungen entwickeln. Im Bain-Modell wird angenommen, dass die kristallographische Richtungsannahme $[1\bar{1}0]_\gamma // [100]_\alpha$ bezüglich der Kristallebenen $(1\bar{1}0)_\gamma // (100)_\alpha$ maßgeblich ist. Für die Bain-Verformungsmatrix gilt entsprechend

$$U_1 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}a^M}{a^A} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}a^M}{a^A} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{c^M}{a^A} \end{pmatrix} \quad U_2 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}a^M}{a^A} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{c^M}{a^A} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}a^M}{a^A} \end{pmatrix} \quad U_3 = \begin{pmatrix} \frac{c^M}{a^A} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}a^M}{a^A} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}a^M}{a^A} \end{pmatrix}.$$

Hierbei repräsentiert a^A die Gitterkonstante des Austenits, a^M und c^M beschreiben jeweils die Gitterkonstanten des Martensits und des Bainits. An dieser Stelle sind für die Komponente, die die Stauchung beschreibt $\left(\frac{c^M}{a^A}\right)$, drei Konstellationen möglich: sie kann sich auf jedem der drei Plätze der Matrixdiagonalen befinden. Die zwei anderen Komponenten, die die Streckung beschreiben $\left(\frac{\sqrt{2}a^M}{a^A}\right)$, füllen dann die übrigen Plätze der Matrixdiagonalen aus [18, 8].

Spätere Röntgenbeugungsmessungen haben aber gezeigt, dass die Phasenumwandlung neben der Deviationskomponente auch eine Scherkomponente aufweisen kann. Auf diesen Erkenntnissen aufbauend entwickelten NISHIYAMA und WASSERMANN (N-W) [99] sowie KURDJUMOV und SACHS (K-S) [67] weitere Modelle (vgl. Abb. 2.11).

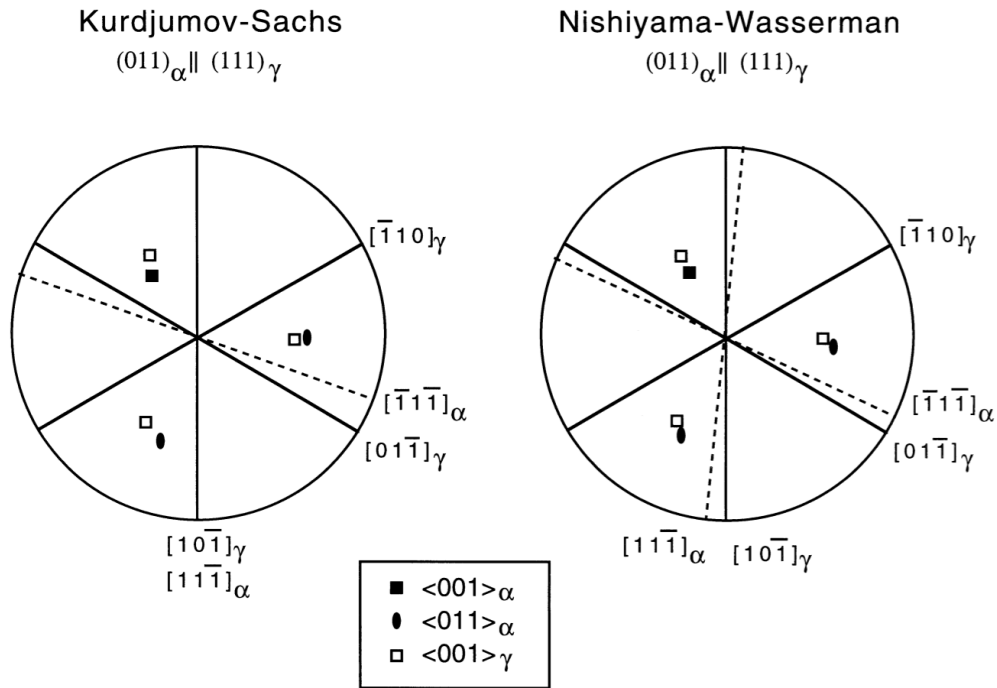


Abb. 2.11 Darstellung der α/γ -Orientierungszusammenhänge in einer stereographischen Projektion nach (a) KURDJUMOV und SACHS [67] und (b) NISHIYAMA-WASSERMANN [99].

Bei der N-W Orientierungsbeziehung geht man davon aus, dass vor und nach der Phasenumwandlung für die Kristallebenen $(111)_\gamma // (011)_\alpha$ z.B. die Kristallrichtungen $[\bar{1}01]_\gamma // [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]_\alpha$ maßgeblich sind, so dass es zu einer Scherung kommt. Dies entspricht einer Drehung von $9^\circ 44'$ um die $[100]_\alpha$ -Achse. Diese Scherung kann für jede parallele Ebenen-Beziehungen in vier verschiedenen Richtungen erfolgen. Demnach kann bei drei möglichen parallelen Ebenen-Beziehungen eine Martensit- oder Bainit-Orientierung aus zwölf verschiedenen Austenitorientierungen resultieren. Dies entspricht einer, im Vergleich zum Modell von Bain und Dunkirk, Vervierfachung der Variantenvielfalt [8].

Die K-S Orientierungsbeziehung erweitert die N-W Orientierungsbeziehung um eine weitere Drehung von $5^\circ 16'$ um die $[011]_\alpha$ -Achse, so dass bei $(111)_\gamma // (011)_\alpha$ beispielsweise $[\bar{1}10]_\gamma // [11\bar{1}]_\alpha$ gilt. Die zusätzliche in zwei Richtungen erfolgte Drehung ermöglicht eine Beschreibung der Gittersstruktur des Martensit bzw. des Bainit mit 24 möglichen Varianten.

An dieser Stelle gilt anzumerken, dass die Orientierungsbeziehungen nach N-W und K-S lediglich Näherungslösungen darstellen, da die tatsächlich in der Röntgenbeugung beobachteten Orientierungsbeziehungen sich nicht durch reelle Zahlen beschreiben lassen [17, 21, 100, 64, 107]. Ferner gilt zu berücksichtigen, dass für die Phasenumwandlung vom Austenit zum Martensit bzw. zum Bainit theoretisch eine gemeinsame Grenzlinie notwendig ist, damit die Rotation um diese Achse (RB) möglich wird. Für die Realisierbarkeit der Phasenumwandlung muss diese Grenzlinie während der Transformation unverzerrt bleiben und wird daher als *invariante Habituslinie* bezeichnet. Um die Irrationalität der Orientierungsbeziehungen sowie das Auftreten einer Habitussebene anstatt einer –linie zu erklären, werden im Rahmen dieser Analyse phänomenologische Theorien für die Austenit-zu-Bainit- sowie die Austenit-zu-Martensit-Umwandlung herangezogen. Als Beispiel dafür, wird in Abbildung 2.12 die Theorie von BHADSHIA [17] veranschaulicht.

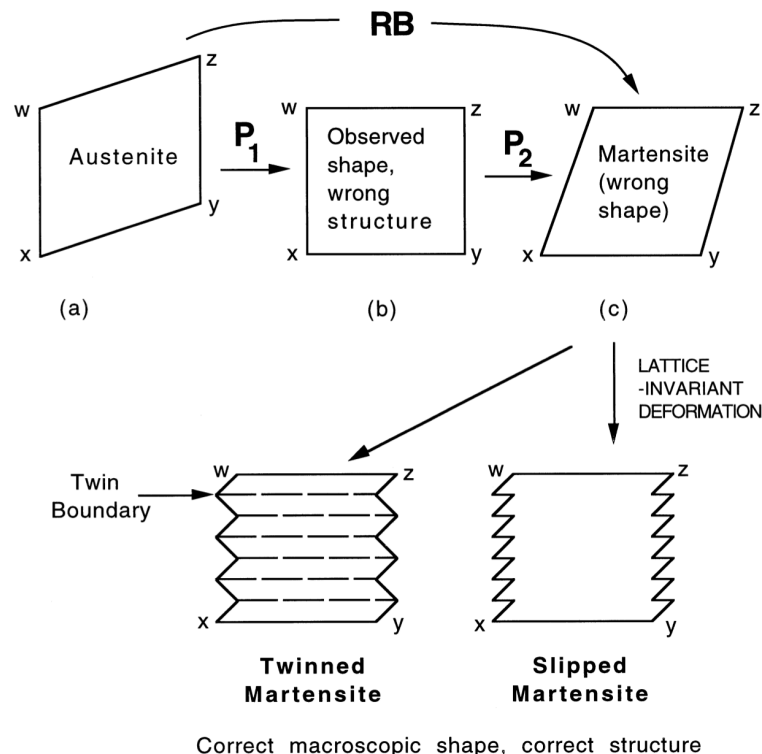


Abb. 2.12 Schematische Darstellung der phänomenologischen Theorie der Martensitbildung nach BHADSHIA [17]

Der Kerngedanke ist, dass eine gitterinvariante Verformung durch Bildung von Substrukturen im Martensit oder Bainit durch Zwillingsbildung bzw. Abgleiten infolge der Reduzierung der Verformungsenergie auftritt. Als Folge zeigt sich keine einfache Rotation (RB) um eine Habituslinie, sondern eine Scherung entlang einer Habitussebene. Die irrationalen Orientierungsbeziehungen resultieren aus den sich bildenden verzwilligten oder abgeglittenen Strukturen, die keine glatte Oberfläche aufweisen und folglich eine irrationale Ebene darstellen [17, 64, 100, 57].

2.1.5 Umwandlungsplastizität

Eine martensitische bzw. bainitische Umwandlung führt bei vielen Stählen zu einer so genannten *Umwandlungsplastizität*. Die Umwandlungsplastizität (TRIP) beschreibt die inelastischen Verformungen während der Phasenumwandlung für den Fall, dass die thermisch und/oder mechanisch induzierte

Spannung die Fließspannung der weicheren Phase unterschreitet. Die Ursachen der umwandlungsplastischen Dehnungen liegen in der Volumen- und Formänderung eines Kristalls (Abschnitt 2.1.4) während der Phasenumwandlung, bei der sich die weichere der an der Umwandlung beteiligten Phasen an die Umgebung der härteren Phase anpassen muss. Dadurch entstehen in der Umgebung der Umwandlungsfront komplizierte Eigenspannungszustände, die auch ohne Wirkung äußerer Spannungen lokal zu plastischen Dehnungen und somit zur Umwandlungplastizität führen. Dieses Verhalten wird als *Greenwood-Johnson-Effekt* [46] bezeichnet. Ferner tritt bei martensitischen und bainitischen Umwandlungen eine Formänderung infolge einer Scherung der umgewandelten Region auf. Aufgrund der aufgebrachten Belastung wird die Bildung von Martensit- oder Bainitvarianten in einigen, energetisch günstig orientierten Richtungen bevorzugt, so dass eine inelastische Verformung eintritt. Diese Art der Umwandlungsplastizität ist als *Magee-Effekt* bekannt ([83]).

2.2 Experimente zu Phasenumwandlungen

2.2.1 Versuchsstand

Zur Untersuchung des Umwandlungsverhaltens und zur Bestimmung des Einflusses von einachsigen Zugspannungen auf das Umwandlungsverhalten des niedriglegierten Stahl 51CrV4 wurde am Lehrstuhl für Werkstoffkunde der Universität Paderborn ein speziell entwickeltes Belastungsdilatometer (Abb. 2.13) errichtet. Die Legierungselemente von diesem Stahl sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst.

Element	C	Cr	Mn	S	Pb	Si	Cu	Al	Ni	Mo	Nb	Ti	P	Fe
min	0,5	0,99	0,84	0,005	0,003	0,23	0,22	0,01	0,07	0,03	0,006	0	0,002	Rest
max	0,5	1,07	0,91	0,014	0,005	0,28	0,23	0,026	0,07	0,03	0,008	0	0,015	Rest

Tabelle 2.1 Chemische Zusammensetzung des Versuchswerkstoffs mit den jeweils minimalen und maximalen Werten der gemessenen Massenanteile in Prozent von den Legierungskomponenten des niedriglegierten Stahls 51CrV4

Im Verlauf der Experimente werden die Hohlproben mit 10 mm Außendurchmesser und 1 mm Wandstärke (Abb. 2.14) zunächst konduktiv auf die Austenitisierungstemperatur gebracht und gehalten (z.B. 880 °C/5 Min.). Dem folgt eine rasche Abkühlung im Gasdüsenfeld auf die, für die Transformation in eine Bainitphase notwendige, vorgegebene Umwandlungstemperatur. Nach Erreichen der Umwandlungstemperatur wird die vordefinierte äußere Spannung aufgebracht und während der fortlaufenden Umwandlung konstant gehalten. Martensitische Umwandlung findet bei einer kontinuierlichen Abkühlung auf die Raumtemperatur statt. Analog zur bainitischen Umwandlung wird bei der Untersuchung der martensitischen Phasentransformation die vordefinierte äußere Spannung kurz vor Erreichen der Martensitstarttemperatur aufgebracht und konstant gehalten.

Abbildung 2.14 zeigt schematisch das Funktionsprinzip der verwendeten belastungsdilatometrischen Versuchseinrichtung. Die Probenerwärmung erfolgt hierbei konduktiv mittels einer regelbaren Gleichstromquelle. Die Steuerung der Temperatur geschieht über einen Regler, der die mit einem Pyrometer gemessene Oberflächentemperatur auf der Probenmitte zur Regelung nutzt.

Zur Messungskorrektur und Überprüfung der Austenitisierungs- und der Bainitumwandlungstemperatur während des isothermen stationären Zustandes wird ein Thermoelement im Inneren der Probe eingesetzt. Die Ermittlung des Verlaufs der Phasenumwandlung erfolgt durch simultane Messung der Längs- und Querdehnung (ε_l , ε_q). Dazu wird aus der relativen Volumenänderung

$$\frac{\Delta V}{V} = (1 + \varepsilon_l)(1 + \varepsilon_q)^2 - 1 \quad (2.4)$$

der volumetrische Phasenanteil mithilfe der Normierung für die isotherme und kontinuierliche Umwandlung bestimmt:

$$\begin{aligned} 1. \text{ Zeitabhängig} \quad z(t) &= \frac{\Delta V(t)}{V} \bigg/ \frac{\Delta V(t \rightarrow \infty)}{V}, \\ 2. \text{ Temperaturabhängig} \quad z(\theta) &= \frac{\Delta V(\theta)}{V} \bigg/ \frac{\Delta V(\theta \rightarrow \theta_R)}{V}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

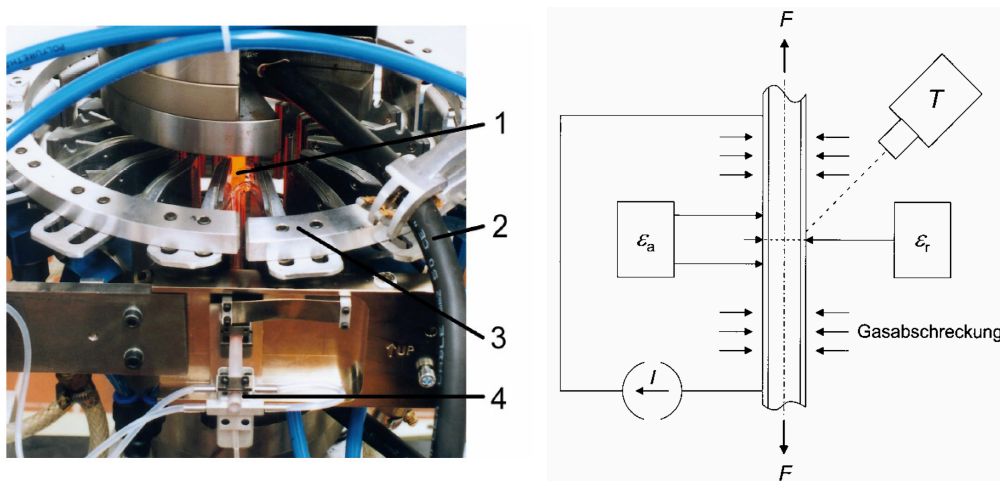


Abb. 2.13 Belastungsdilatometer: a) Photographie (erkennbar sind die Probe (1), die Stromzuführung (2), das Gasdüsenfeld (3) sowie der Extensometer für die Messung der Querdehnung (4)), b) Schematischer Versuchsaufbau [1]

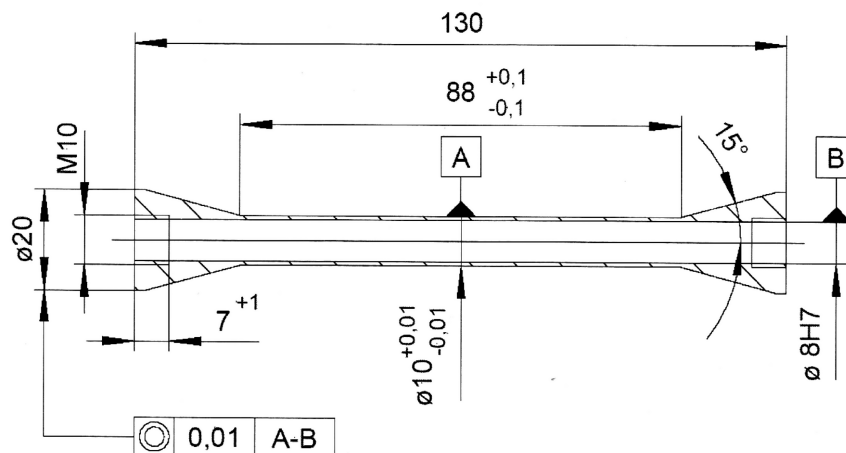


Abb. 2.14 Hohlprobengeometrie für Phasenumwandlungen unter Zugspannungen [1]

2.2.2 Experimentelle Ergebnisse der martensitischen Umwandlung

Im Laufe der experimentellen Untersuchungen des Phasenumwandlungsverhaltens des betrachteten Werkstoffs in der Martensitstufe wurden Proben kontinuierlich bis auf die Raumtemperatur abgeschreckt (Abb. 2.15). Die Abkühlrate wurde mit 70 K s^{-1} zunächst so gewählt, dass bis zur Martenitstarttemperatur (M_s) keine Umwandlung einsetzen kann. Erst nach Erreichen von M_s , bei der nur martensitische zeitunabhängige Umwandlung möglichst ist, wurde die Abkühlrate auf 15 K s^{-1} reduziert, um Temperaturgradienten während der Umwandlung minimal zu halten.

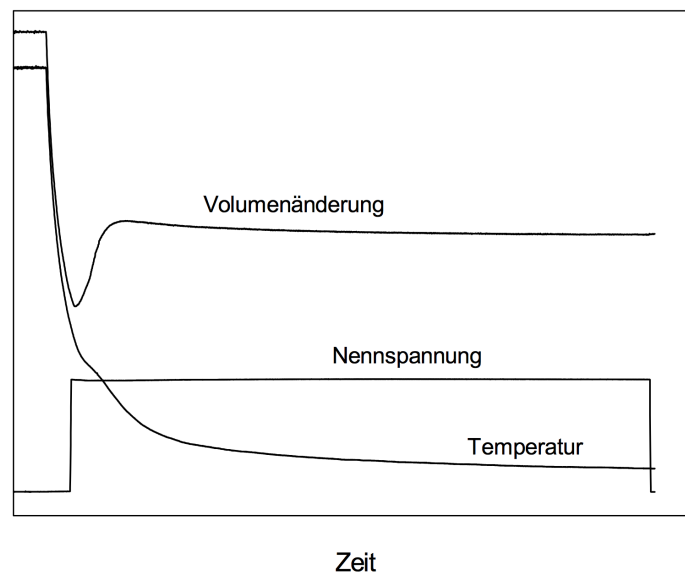


Abb. 2.15 Versuchsablauf zur Ermittlung des spannungsabhängigen Umwandlungsverhaltens, kontinuierliche Umwandlung [1]

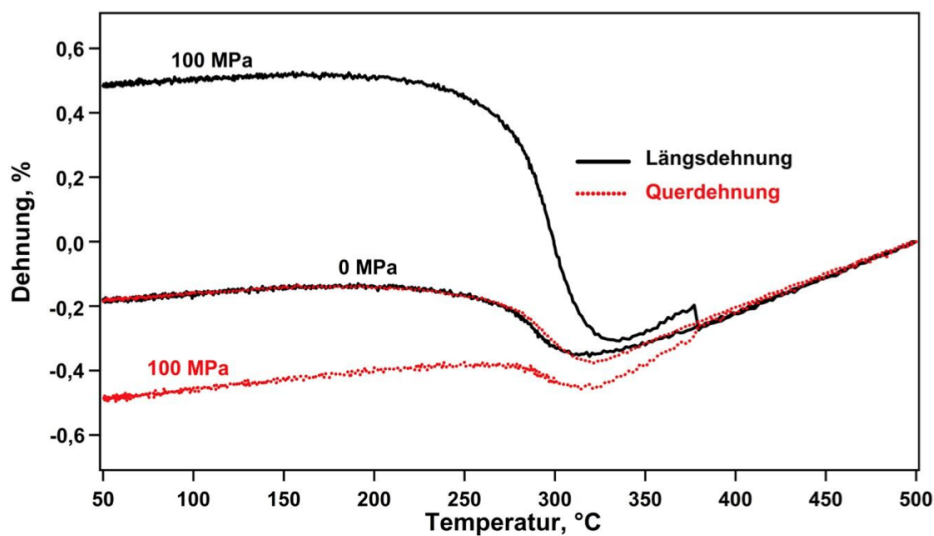


Abb. 2.16 Entwicklung der Längs- und Querdehnungen mit der Temperatur bei kontinuierlicher martensitischer Umwandlung unter 0 und 100 MPa überlagerter Spannung [70]

Während der kontinuierlichen martensitischen Umwandlung treten neben den umwandlungsbedingten Dehnungen auch thermische Dehnungen auf. Sollte während des Versuches ein Temperaturgradient in der Messlänge vorkommen, würde dies bei der Abkühlung von der Austenitisierungs- zur Raumtemperatur zu Abweichungen zwischen dem Verlauf von Längs- und Querdehnungen mit der Temperatur führen. Aus Abbildung 2.16 wird ersichtlich, dass bei den Untersuchungen in der Martensitstufe nach einer Austenitisierung bei 880 °C für 5 min kein signifikanter Temperaturgradient in der Messlänge auftrat. Es wurde hierbei vielmehr der für eine spannungslose Umwandlung erwartete, isotrope Verlauf der Längs- und Querdehnungen ermittelt. Ferner war die Volumenzunahme während einer spannungslosen martensitischen Umwandlung nach Austenitisierungen bei 1050 °C für 10 s und 1200 °C für 10 s ungerichtet. Bei einer Aufbringung der Spannung von 100 MPa vor Erreichen der M_s -Temperatur und einem Konstanthalten der ersten während der anschließenden Umwandlung unterschied sich der Verlauf der Querdehnungen deutlich von dem der Längsdehnungen. Diese Differenz ist auf die Entwicklung umwandlungsplastischer Dehnungen zurückzuführen [68].

2.2.3 Experimentelle Ergebnisse der bainitischen Umwandlung

Um das Umwandlungsverhalten in der Bainitstufe zu untersuchen, wurden die Proben im Anschluss an die Austenitisierungsbehandlung auf eine isotherme Umwandlungstemperatur oberhalb der Martensitstarttemperatur M_s abgeschreckt. Diese Temperatur wurde für eine bestimmte Zeit konstant gehalten, so dass über die Variation der Haltezeit unterschiedliche Bainitanteile eingestellt werden konnten (Abbildung 2.17). Für Phasenumwandlungsversuche in der Bainitstufe wurde eine isotherme Haltezeit von 30 Minuten gewählt. Diese lange Haltezeit stellte sicher, dass der unterkühlte Austenit vollständig zu Bainit umgewandelt wurde, bevor die Proben auf die Raumtemperatur abkühlten.

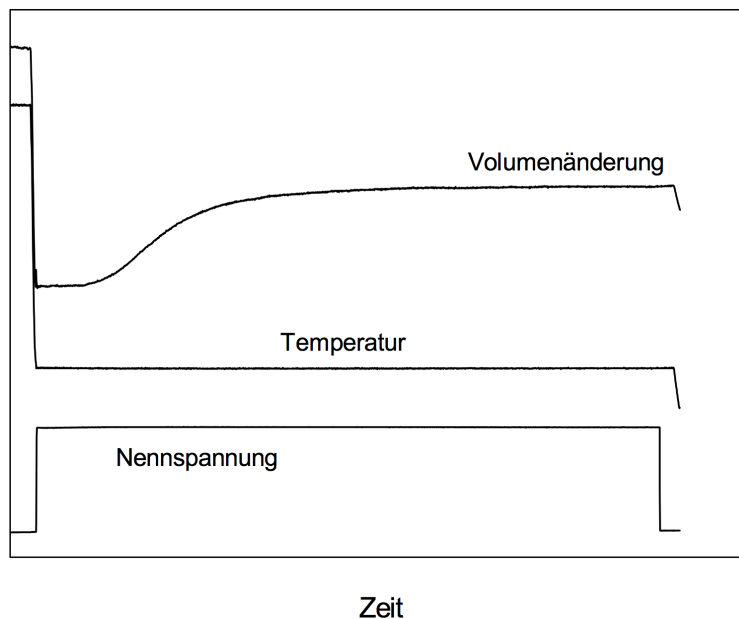


Abb. 2.17 Versuchsablauf zur Ermittlung des spannungsabhängigen Umwandlungsverhaltens, isotherme Umwandlung [1]

Bei einer Phasenumwandlung, die ohne Einwirkung äußerer Spannungen erfolgte, war die zeitliche Entwicklung von Quer- und Längsdehnung während der isothermen bainitischen Umwandlung fast identisch (Abb. 2.18). Die Volumenzunahme erfolgte demzufolge isotrop, ohne maßgebliche Entwicklung umwandlungsplastischer Dehnungen. Eine im Anschluss an die zehnsekündige Austenitisierung

bei 1200 °C erfolgte Abkühlung auf eine Temperatur von 340 °C und eine anschließende Aufbringung der Spannung von 140 MPa führte bei der isothermen Bildung des Bainits zu deutlich unterschiedlichen Verläufen der Quer- und Längsdehnung. Dies wird durch umwandlungsplastische Dehnungen verursacht [68].

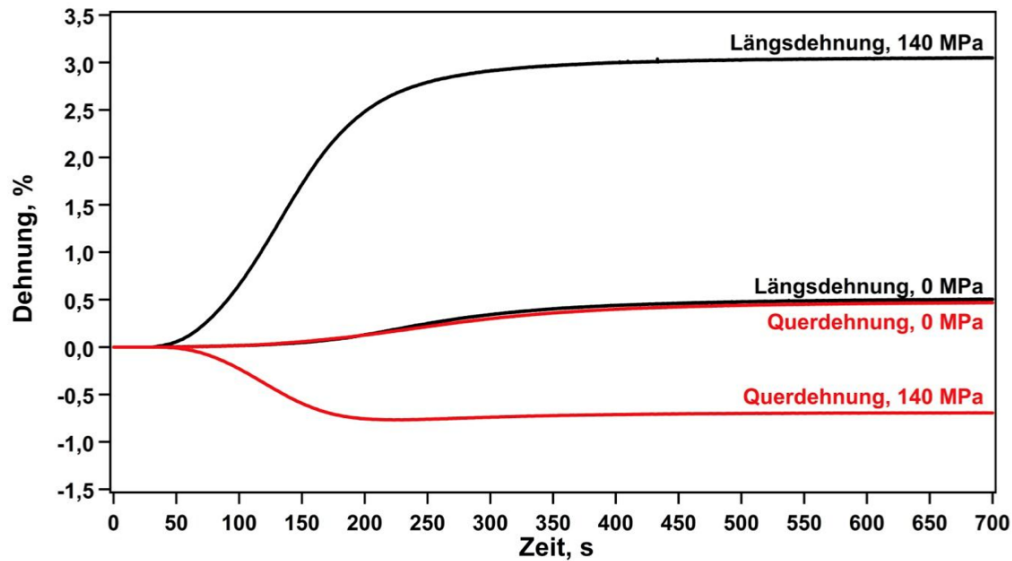


Abb. 2.18 Einfluss des überlagerten Spannungszustandes während der Umwandlung auf den Verlauf der Längs- und Querdehnungen über die Zeit während einer isothermen bainitischen Phasenumwandlung bei 340 °C [68]

Mit steigendem Spannungsniveau nehmen die am Ende der isothermen bainitischen Phasenumwandlung vorliegenden Längsdehnungen zu. Dies wird aus der Abbildung 2.19 aus der Entwicklung der Längsdehnungen im Verlauf der Zeit, während einer isothermen bainitischen Transformation bei 340°C unter der Wirkung unterschiedlicher Spannungen ersichtlich.

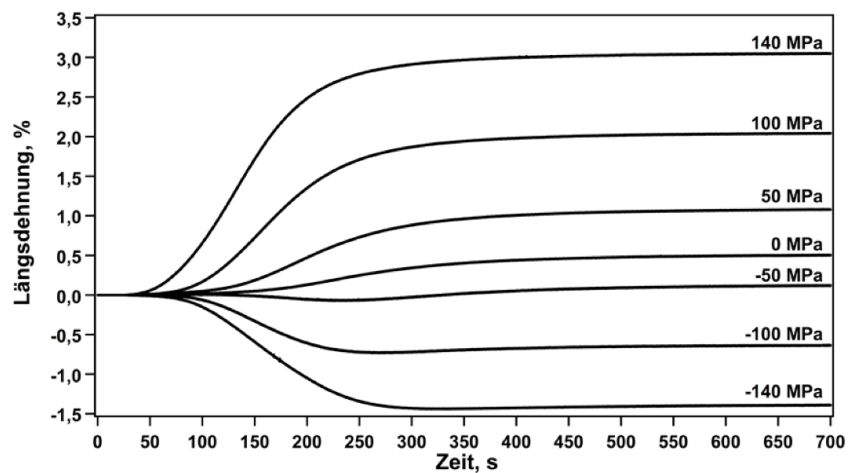


Abb. 2.19 Einfluss des Spannungszustandes auf den Verlauf der Längsdehnungen mit der Zeit während der isothermen bainitischen Phasenumwandlung bei 340 °C [68]

2.2.4 Mechanische Eigenschaften des unterkühlten Austenits

Die im betrachteten Hybridumformprozess verwendeten Erwärmungsstrategien resultieren nicht nur in örtlich unterschiedlichen Austenitisierungsbedingungen, sondern beeinflussen auch die während der anschließenden Abkühlung örtlich vorliegenden Temperaturen. Die Umformung des mittleren Bereichs der Probe, wobei aufgrund der vorhergehenden Erwärmung überwiegend Austenit vorliegt, erfolgt in einem weiten Temperaturbereich von ca. 400-1200 °C [141]. Somit ist es für die Abbildung des Prozesses notwendig, die mechanischen Eigenschaften des austenitischen Gefüges in diesem Temperaturfenster zu kennen. Neben dem temperaturabhängigen Spannung-Dehnung-Verhalten des stabilen Austenits (Temperatur $> A_{c3}$ Linie), auf das in den experimentellen Untersuchungen des Lehrstuhls für Werkstoffkunde der Universität Paderborn nicht näher eingegangen wurde (siehe dazu [68, 57, 129, 50, 118]), ist insbesondere das temperaturabhängige mechanische Verhalten des metastabilen unterkühlten Austenits (Temperatur $< A_{c1}$ Linie) von Interesse.

Abbildung 2.20 stellt das Spannung-Dehnung-Verhalten des unterkühlten Austenits im Temperaturbereich von 340 bis 700 °C dar. Alle Proben sind zuvor bei 1200 °C für 10 Sekunden austenitiert worden. Erwartungsgemäß nimmt die 0,2%-Dehngrenze des unterkühlten Austenits mit fallender Temperatur zu. Während bei 340 °C ein Wert von 195 MPa ermittelt wurde, lag die 0,2%-Dehngrenze bei 700 °C nur noch bei 130 MPa. Ferner ist jeweils lediglich ein leichtes Verfestigungsverhalten des betrachteten Werkstoffs zu verzeichnen.

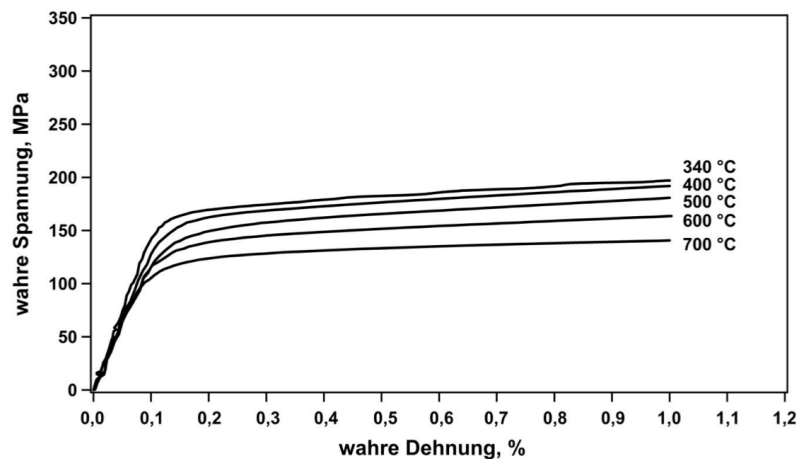


Abb. 2.20 Spannung-Dehnung-Verhalten des unterkühlten Austenits bei verschiedenen Temperaturen [71]

Kapitel 3

Phänomenologische Modellierung für kleine Deformationen

Den Gegenstand dieses Kapitels bildet die phänomenologische Formulierung eines thermodynamisch konsistenten Modells unter der Annahme kleiner Deformationen. Im ersten Schritt erfolgt auf der Grundlage der Kontinuumsmechanik die Ableitung der konstitutiven Gleichungen unter Berücksichtigung der unterschiedlichen n_z Phasen und des viskoplastischen Materialverhaltens. Im darauf folgenden Abschnitt wird das Modell auf den Hybridumformprozess angepasst. Die im Rahmen dieser Adaptation entwickelten Gleichungen des Prototypmodells werden numerisch implementiert. Die auf der Grundlage der experimentellen Daten durchgeführte Parameteridentifikation schließt das Kapitel ab.

3.1 Konstitutive Gleichungen

3.1.1 Kinematik

Es werden ein Körper \mathbf{B} in dem Euklidischen Raum \mathbb{R}^3 mit der Konfiguration $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^3$ sowie dem Verschiebungsfeld \mathbf{u} betrachtet. Der Verzerrungssensor lässt sich basierend auf der geometrisch linearen Theorie

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym} \{ \mathbf{u} \otimes \nabla \} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (3.1)$$

an der Stelle $P \in \mathcal{B} \times]0, T[$ bestimmen. Die Definition des Nabla-Operators erfolgt innerhalb eines kartesischen Koordinatensystems als $\nabla = \partial/\partial x_i \mathbf{e}_i$ mit den Basisvektoren $\mathbf{e}_i, i = 1, 2, 3$ und den Koordinaten $x_i, i = 1, 2, 3$. Für die Gesamtverzerrung gilt unter Einsatz der additiven Dekompensation folgender Ausdruck:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{el} + \boldsymbol{\varepsilon}^{tp} + \boldsymbol{\varepsilon}^{vp} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon}^{tv}. \quad (3.2)$$

Die einzelnen Terme repräsentieren entsprechend:

- $\boldsymbol{\varepsilon}^{el}$ den elastischen Verzerrungstensor,
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{\theta}$ den thermischen Verzerrungstensor,
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{tv}$ den umwandlungsbedingten Verzerrungstensor,
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$ den viskoplastischen Verzerrungstensor und
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{tp}$ den umwandlungsplastischen (TRIP) Verzerrungstensor.

Die ausführlichen Formulierungen der einzelnen Verzerrungstensoren werden im späteren Verlauf der Arbeit bei der Entwicklung des Prototypmodells in Abschnitt 3.2 vorgenommen.

3.1.2 Massen- und Volumenanteile der Phasen

Dieser Abschnitt geht auf den in Zusammenarbeit mit Herrn Michael Wolff entwickelten Beitrag zurück, deren Gegenstand die Analyse und Darstellung der Massen- und Volumenanteile der Phasen sowie die Ermittlung von absoluten und relativen Fehler zwischen den Massen- und Volumenanteilen bildet [92].

Generell wird bei niedrig legierten Stählen während der Phasenumwandlung eine Mischung von mindestens zwei Phasen ($n_z \geq 2$) betrachtet. Diese Mischung wird als homogen angenommen, d.h. alle Phasenverhältnisse sind gleich verteilt. Für die Dichte der Mischung ρ gilt

$$\rho = \frac{dm}{dV}. \quad (3.3)$$

Innerhalb des Volumeninkrements dV weist die i^{te} Phase das Volumen dV_i und die Masse dm_i auf. Der Volumenphasenanteil $z_i^{(v)}$, der Massenphasenanteil $z_i^{(m)}$ und die Dichte der i^{ten} Phase ρ_i sind definiert als

$$z_i^{(v)} = \frac{dV_i}{dV}, \quad z_i^{(m)} = \frac{dm_i}{dm}, \quad \rho_i = \frac{dm_i}{dV_i}. \quad (3.4)$$

Generell ist das Gefüge räumlich nicht homogen. Die Größen ρ , $z_i^{(v)}$, $z_i^{(m)}$ und ρ_i werden basierend auf Gleichungen (3.3) und (3.4) in einem Materialpunkt $P \in \mathcal{B}$ mit dem Volumenbereich dV auf diesen Punkt definiert. Auf diese Weise stellen diese Größen sowohl Funktionen des Raums als auch Funktionen der Zeit dar. In jedem Materialpunkt und zu jedem Zeitpunkt $\mathcal{B} \times]0, T[$ gelten folgende Bedingungen:

$$\sum_{i=1}^{n_z} z_i^{(v)} = 1, \quad \sum_{i=1}^{n_z} z_i^{(m)} = 1, \quad z_i^{(v)} \geq 0, \quad z_i^{(m)} \geq 0 \quad \forall i = 1, \dots, n_z. \quad (3.5)$$

Die Phasenanteile werden zum Zwecke einer kompakten Darstellung in einem Vektor

$$\underline{z} = [z_1, z_2, \dots, z_{n_z}]^T \quad (3.6)$$

zusammengefasst.

Die in ein fixes Volumen eingefügte Masse ist unabhängig von den möglichen Volumenänderungen, die als Folge von Temperatur- oder Dehnungsänderungen auftreten. Dadurch hat der Massenphasenanteil $z_i^{(m)}$ den Vorteil temperatur- und deformationsunabhängig zu sein. Des Weiteren folgt aus (3.3) und (3.4) der Zusammenhang zwischen den Massen- und Volumenphasenanteilen

$$z_i^{(m)} = \frac{\rho_i[\theta]}{\rho[\theta]} z_i^{(v)}[\theta] \quad \forall i = 1, \dots, n_z. \quad (3.7)$$

Dies gilt bei allen zulässigen Temperaturen θ sowohl für die folgende Mischungsregel für die Dichte ρ als auch für ihre Inverse

$$1. \quad \rho = \sum_{i=1}^{n_z} \rho_i z_i^{(v)}, \quad 2. \quad \frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^{n_z} \frac{1}{\rho_i} z_i^{(m)}. \quad (3.8)$$

An dieser Stelle wird darauf verwiesen, dass einige der oben aufgeführten Formeln ebenfalls in RANIECKI und BRUHNS [108] zu finden sind.

Grundsätzlich sind Massen- und Volumenphasenanteile in der gleichen Phase nicht identisch. Betrachtet man in dieser Hinsicht speziell den Werkstoff Stahl, sind diese Differenzen jedoch so gering, dass sie vernachlässigbar sind. Diese Aussage wird anhand der Analyse des absoluten bzw. relativen Fehlers begründet. Definiert man den absoluten Fehler $\Delta_i[\theta]$ als Differenz zwischen dem Massen- und Volumenanteil, erhält man durch die Formulierung der Dichte ρ über die Mischungsregel in (3.8)

$$\Delta_i[\theta] = |z_i^{(m)} - z_i^{(v)}[\theta]| = \left| \frac{\rho_i[\theta]}{\rho[\theta]} - 1 \right| z_i^{(v)}[\theta] = \left| \sum_{j=1, j \neq i}^{n_z} \left(\frac{\rho_i[\theta] - \rho_j[\theta]}{\rho_j[\theta]} \right) z_j^{(m)} \right| z_i^{(v)}[\theta]. \quad (3.9)$$

Für eine Zweiphasenmischung ($n_z = 2$) ergibt sich

$$1. \Delta_1[\theta] = \left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_2[\theta]} \right| z_2^{(m)} z_1^{(v)}[\theta], \quad 2. \Delta_2[\theta] = \left| \frac{\rho_2[\theta] - \rho_1[\theta]}{\rho_1[\theta]} \right| z_1^{(m)} z_2^{(v)}[\theta]. \quad (3.10)$$

Durch den Einsatz der Schätzungen

$$\begin{aligned} z_1^{(v)} &\leq z_1^{(m)} + \Delta_1[\theta], \\ z_2^{(m)} z_1^{(m)} &= (1 - z_1^{(m)}) z_1^{(m)} \leq \frac{1}{4} \end{aligned}$$

kann Gleichung (3.10.1) wie folgt umgeformt werden:

$$\begin{aligned} \Delta_1[\theta] &\leq \left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_2[\theta]} \right| z_2^{(m)} z_1^{(m)} + \left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_2[\theta]} \right| z_2^{(m)} \Delta_1[\theta] \\ &\leq \frac{1}{4} \left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_2[\theta]} \right| + \left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_2[\theta]} \right| \Delta_1[\theta]. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Unter Annahme des Zusammenhangs

$$\left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_2[\theta]} \right| < 1 \quad (3.12)$$

folgt aus (3.11)

$$\Delta_1[\theta] \leq \frac{1}{4} \frac{\left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_2[\theta]} \right|}{1 - \left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_2[\theta]} \right|} \quad (3.13)$$

bzw.

$$\Delta_2[\theta] \leq \frac{1}{4} \frac{\left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_1[\theta]} \right|}{1 - \left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_1[\theta]} \right|}. \quad (3.14)$$

Eine analoge Vorgehensweise bietet sich für die Ermittlung des relativen Fehlers $\delta_i[\theta]$ zwischen den Massen- und Volumenanteilen an. Für einen nicht verschwindenden Massenanteil $z_i^{(m)}$ gilt für den relativen Fehler zwischen dem Massen- und Volumenanteil der i^{ten} Phase in Abhängigkeit von der Temperatur θ

$$\delta_i[\theta] = \left| \frac{z_i^{(m)} - z_i^{(v)}[\theta]}{z_i^{(m)}} \right| \leq \left| \frac{\rho_i[\theta] - \rho[\theta]}{\rho_i[\theta]} \right|. \quad (3.15)$$

Wird ρ über die Mischungsregel in (3.8) ausgedrückt, folgt:

$$\delta_i[\theta] \leq \left| \sum_{j=1, j \neq i}^{n_z} z_j^{(v)}[\theta] \frac{\rho_i[\theta] - \rho_j[\theta]}{\rho_i[\theta]} \right|. \quad (3.16)$$

Für eine Zweiphasenmischung ($n_z = 2$) ergibt sich

$$\delta_1[\theta] \leq z_2^{(v)}[\theta] \left| \frac{\rho_1[\theta] - \rho_2[\theta]}{\rho_1[\theta]} \right|, \quad \delta_2[\theta] \leq z_1^{(v)}[\theta] \left| \frac{\rho_2[\theta] - \rho_1[\theta]}{\rho_2[\theta]} \right|. \quad (3.17)$$

Im Folgenden soll ein numerisches Beispiel für den niedriglegierten Stahl 51CrV4, der eine Austenit-zu-Martensit Transformation durchläuft, betrachtet werden. Die temperaturabhängigen Dichten des Austenit („a“) bzw. des Martensit („m“) werden mit Hilfe des Programms „JMatPro 5“ unter Verwendung der chemischen Zusammensetzung aus Tabelle 1.1 errechnet und betragen abhängig von der Temperatur in Grad Celsius:

$$\begin{aligned} \rho_a[\theta] &= 8069,4 - 0,5881\theta + 3,61 \cdot 10^{-5} \theta^2, \\ \rho_m[\theta] &= 7788,7 - 0,28554\theta - 7,0750 \cdot 10^{-5} \theta^2. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Aus der Berücksichtigung des Intervalls zwischen 25 °C und 290 °C (Starttemperatur des Martensit) sowie der Ermittlung des korrespondierenden maximalen Volumens in (3.13), (3.14) und (3.17) erhält man für alle $\theta \in [25, 290]$ die maximalen Schätzwerte

$$\begin{aligned} \Delta_a[\theta] &\leq 0.0091, & \Delta_m[\theta] &\leq 0.0088, \\ \delta_a[\theta] &\leq 0.033 z_m^{(v)}, & \delta_m[\theta] &\leq 0.035 z_a^{(v)}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Ähnliche Ergebnisse können für andere Phasentransformationen im Stahl erwartet werden. Demnach beträgt der absolute Fehler zwischen den Massen- und Volumenanteilen der Phasen im Stahl bei Vorliegen der gleichen Temperatur weniger als 1%. Des Weiteren liegt der relative Fehler zwischen den Massen- und Volumenanteilen der Phasen im Stahl im ungünstigen Fall unter 3.5%. Aufgrund der nur sehr geringen absoluten und relativen Fehler zwischen den Massen- und Volumenanteilen der Phasen im betrachteten Werkstoff, werden im weiteren Verlauf der Arbeit die Volumen- und Massenphasenanteile gleich gesetzt.

3.1.3 Thermodynamisch konsistente Formulierung

Bilanzgleichungen bilden die physikalische Grundlage der Kontinuumsmechanik und beschreiben allgemeingültige Prinzipien bzw. universelle Naturgesetze unabhängig von den speziellen Kontinuumsseigenschaften. Sie gelten für alle Materialmodelle der Kontinuumsmechanik und werden in der Integralform als globale Aussagen für den Gesamtkörper angegeben. Bei hinreichend glatten Körperpändern können die zu bilanzierenden Größen auch lokal in Form von Differentialgleichungen [2] formuliert werden. Des Weiteren müssen die Bilanzen für Impuls, Energie und Entropie im Orts-Zeit-Gebiet $\mathcal{B} \times]0, T[$ erfüllt sein. Im Rahmen dieser Untersuchung werden folgende Bilanzgleichungen verwendet (siehe z.B. HAUPT [54]):

$$\begin{aligned} 1. \quad & \rho_0 \ddot{\mathbf{u}} - \text{Div} [\boldsymbol{\sigma}] = \rho_0 \mathbf{f}, & \text{Impuls- oder Bewegungsgleichung,} \\ 2. \quad & \rho_0 \dot{e} + \text{Div} \mathbf{q}_0 = \mathcal{P} + \rho_0 r_\theta, & \text{Energiegleichung,} \\ 3. \quad & \frac{1}{\rho_0} \mathcal{P} - \dot{\Psi} - \dot{\theta} \eta - \frac{1}{\rho_0 \theta} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla \theta \geq 0 & \text{Clausius-Duhem-Ungleichung,} \end{aligned} \quad (3.20)$$

mit

- \mathbf{u} - Verschiebungsvektor,
- $\boldsymbol{\varepsilon}$ - Verzerrungstensor,
- $\boldsymbol{\sigma}$ - Spannungstensor,
- \mathbf{f} - Massendichte der äußeren Kräfte,
- Ψ - freie Helmholtz-Energiefunktion,
- η - Entropie,
- \mathbf{q}_0 - Wärmestromdichtevektor,
- r_θ - Massendichte der Wärmezufuhr.

Die Spannungsleistung \mathcal{P} wird durch das doppelte Skalarprodukt des Spannungstensors und des Verzerrungsgeschwindigkeitstensors $\dot{\epsilon}$ ausgedrückt:

$$\mathcal{P} = \sigma : \dot{\epsilon}. \quad (3.21)$$

Der Punkt über dem Argument kennzeichnet dessen Zeitableitung.

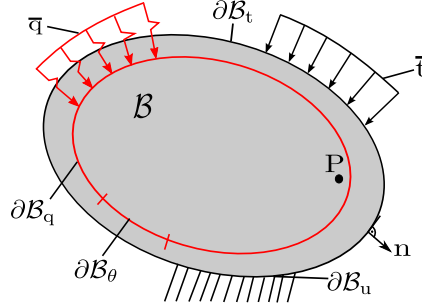


Abb. 3.1 Konfiguration \mathcal{B} und Randbedingungen eines Körpers \mathbf{B}

Die als Clausius-Duhem-Ungleichung bekannte Ungleichung (3.20.3) wird zunächst um Nebenbedingungen, d.h. unter anderem auch die Randbedingungen sowie die Anfangswerte für den Verschiebungsvektor \mathbf{u} und die Temperatur θ vervollständigt

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \theta(\mathbf{x}, 0) = \theta_0 = \text{konst.} \quad & \text{für } \mathbf{x} \in \mathcal{B}, \\ \mathbf{u} = 0 \quad & \text{in } \partial\mathcal{B}_u \times]0, T[, \quad \sigma \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad & \text{in } \partial\mathcal{B}_t \times]0, T[, \\ \theta = \bar{\theta} \quad & \text{in } \partial\mathcal{B}_\theta \times]0, T[, \quad \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n} = \bar{q} \quad & \text{in } \partial\mathcal{B}_q \times]0, T[. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Zur Vereinfachung werden die Startwerte von \mathbf{u} und $\dot{\mathbf{u}}$ auf Null gesetzt. Des Weiteren wird das Anfangstemperaturfeld θ als homogen angenommen. Ohne die Allgemeingültigkeit des Modells zu verletzen, können Nullwerte für \mathbf{u} in $\partial\mathcal{B}_u \times]0, T[$ angenommen werden. \mathbf{n} ist der Normalvektor an den Rändern $\partial\mathcal{B}_u \subset \partial\mathcal{B}$ und $\partial\mathcal{B}_q \subset \partial\mathcal{B}$. $\bar{\mathbf{t}}$ steht für die äußere Belastung an $\partial\mathcal{B}_t \subset \partial\mathcal{B}$, $\partial\mathcal{B}_u$ und $\partial\mathcal{B}_t$ stellen die getrennten Teile des Körperandes $\partial\mathcal{B}$ dar. $\bar{\theta}$ ist die vorgegebene Temperatur am $\partial\mathcal{B}_\theta$ und \bar{q} ein vorgegebener Wärmestrom, der durch den übrig gebliebenen Rand $\partial\mathcal{B}_q$ fließt.

Für die freie Helmholtz-Energie Ψ wird folgender funktionaler Zusammenhang angenommen:

$$\Psi = \Psi[\epsilon^{el}, \underline{q}, \underline{z}, \theta], \quad (3.23)$$

mit ϵ^{el} als elastischen Verzerrungstensor und $\underline{q} = [q_1, \dots, q_{n_q}]^T$ als den Vektor der verzerrungsähnlichen internen Verfestigungsvariablen. Der in Gleichung (3.6) eingeführte Vektor \underline{z} berücksichtigt die unterschiedlichen Phasen n_z und spielt gleichzeitig die Rolle der internen Variablen.

Im nächsten Schritt erfolgt die Definition des Spannungstensors σ , der Entropie η sowie der thermodynamischen Kräfte für die Verfestigungsspannungen $\underline{Q} = [Q_1, Q_2, \dots, Q_{n_q}]^T$ sowie die chemischen Kräfte der Phasentransformation $\underline{Z} = [Z_1, Z_2, \dots, Z_{n_z}]^T$

$$1. \sigma = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon^{el}}, \quad 2. \eta = -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta}, \quad 3. \underline{Q} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{q}}, \quad 4. \underline{Z} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{z}}. \quad (3.24)$$

Die notwendigen Bedingungen der Clausius-Duhem-Ungleichung (3.20.3) werden eingehalten, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind:

$$1. \mathcal{D}^i = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{in} - \underline{Q} \dot{\underline{q}} - \underline{Z} \dot{\underline{z}} \geq 0, \quad 2. \mathcal{D}^\theta = -\frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \nabla \theta \geq 0. \quad (3.25)$$

Den gängigen Ansatz für den Wärmestromvektor in Gleichung (3.25.2) liefert das Fourier-Gesetz:

$$\mathbf{q}_0 = -\lambda_\theta \cdot \nabla \theta, \quad (3.26)$$

mit λ_θ als nicht-negativem Wärmeleitungskoeffizient.

Demzufolge ist die Wärmeleitungsdissipation stets positiv. Um die thermodynamische Konsistenz des Modells nachzuweisen, ist es daher hinreichend, wenn die Ungleichung der reduzierten Dissipation (3.25.1) erfüllt ist. Zur Formulierung der reduzierten Dissipationsbeziehung ist die Aufstellung folgender Evolutionsgleichungen notwendig:

$$1. \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{in} = \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{in} [\boldsymbol{\sigma}, Q, \underline{Z}, \underline{q}, \underline{z}, \theta], \quad 2. \dot{\underline{q}} = \dot{\underline{q}} [\boldsymbol{\sigma}, Q, \underline{Z}, \underline{q}, \underline{z}, \theta], \quad 3. \dot{\underline{z}} = \dot{\underline{z}} [\boldsymbol{\sigma}, Q, \underline{Z}, \underline{q}, \underline{z}, \theta]. \quad (3.27)$$

Die an den betrachteten Hybridumformprozess angepasste Formulierung dieser Evolutionsgleichungen sowie der anschließende Nachweis der thermodynamischen Konsistenz des Modells erfolgt in den nachfolgenden Abschnitten.

3.2 Ein Prototypmodell für den Hybridumformprozess

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Adaptation des in Abschnitt 3.1 formulierten allgemeinen Modells auf den in Abschnitt 1.1 vorgestellten Hybridumformprozess. Dazu werden im ersten Schritt konkrete Vorschläge sowohl für die freie Helmholtz-Energie als auch für die Evolution der internen Variablen herausgearbeitet. Im Anschluss daran wird die thermodynamische Konsistenz des entwickelten Modells diskutiert.

Im betrachteten Hybridumformprozess treten hauptsächlich vier Phasen auf. Zu einer einfacheren Handhabung werden diese wie folgt nummeriert:

- 1 Ferrit/Perlit (Ausgangsgefüge),
 - 2 Austenit,
 - 3 Bainit,
 - 4 Martensit.
- (3.28)

Infolgedessen liegt die Gesamtzahl der in den Beziehungen (3.5) eingeführten Phasen bei $n_z = 4$.

3.2.1 Freie Helmholtz-Energie

Die freie Helmholtz-Energie eignet sich insbesondere zur Beschreibung der verschiedenen Speichermechanismen, wie z.B. der Energieveränderungen, die aufgrund von Grenzflächeneffekten oder Versetzungen auftreten. Im Rahmen dieser Analyse wird die freie Helmholtz-Energiefunktion für das Prototypmodell in Anlehnung an WOLFF *et al.* [147] wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
1. \quad \Psi &= \Psi^{iso}[\boldsymbol{\varepsilon}^{el}, \underline{z}, \theta] + \Psi^{vol}[\boldsymbol{\varepsilon}^{el}, \underline{z}, \theta] + \Psi^\theta[\theta] + \Psi^p[\underline{q}, \underline{z}, \theta] + \Psi_{ch}[\underline{z}, \theta], \quad \text{mit} \\
2. \quad \Psi^{iso} &= \frac{G[\theta]}{\rho_0} (\text{dev}[\boldsymbol{\varepsilon}^{el}])^2, \\
3. \quad \Psi^{vol} &= \frac{1}{2\rho_0} K[\theta] (\text{tr}[\boldsymbol{\varepsilon}^{el}])^2, \\
4. \quad \Psi^\theta &= \int_{\theta_0}^{\theta} c_d[\bar{\theta}] d\bar{\theta} - \theta \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{c_d[\bar{\theta}]}{\bar{\theta}} d\bar{\theta}, \\
5. \quad \Psi^p &= \frac{1}{2\rho_0} Q_0 b q_1^2 + \frac{1}{2\rho_0} H q_2^2, \\
6. \quad \Psi_{ch} &= \sum_{i=1}^4 (z_i - z_{0i}) \phi_{ch,i}[\theta].
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Hierbei berücksichtigt der Term $\Psi^{el} = \Psi^{iso} + \Psi^{vol}$ Speichermengen, die sich auf elastische Verzerrungen beziehen. Der Teil Ψ^{iso} in Gleichung (3.29.2) befasst sich mit isochoren Verzerrungen, die auf isochore elastische Verzerrungen zurückzuführen sind. Gleichung (3.29.3) beschreibt die volumetrischen Verzerrungen. Des Weiteren repräsentieren $G[\theta]$ und $K[\theta] = \kappa[\theta]^{-1}$ den Schub- bzw. Kompressionsmodul. Beide sind von der Temperatur θ abhängig und beziehen sich auf den Elastizitätsmodul E , die Querkontraktion ν und den Kompressibilitätskoeffizienten κ in folgender Weise:

$$1. \quad 2G[\theta] = \frac{E[\theta]}{1 + \nu}, \quad 2. \quad K[\theta] = \frac{E[\theta]}{3(1 - 2\nu)} = \kappa[\theta]^{-1}. \tag{3.30}$$

Die in Abbildung 3.2 dargestellten experimentellen Ergebnisse vom unterkühlten Austenit zeigen eine lineare Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls E von der Temperatur θ [129]. Dies wird durch folgende Relation berücksichtigt:

$$E = E_0 + c_E (\theta - \theta_0), \tag{3.31}$$

mit θ_0 als Referenztemperatur und c_E als einer Konstante. Aus der Berücksichtigung der additiven Zerlegung der Gesamtverzerrung in Gleichung (3.2) ergibt sich für den volumetrischen Anteil der freien Helmholtz-Energie

$$\Psi^{vol} = \frac{1}{2\rho_0} K[\theta] (\text{tr}[\boldsymbol{\varepsilon}^{el}])^2 = \frac{1}{2\rho_0} K[\theta] (\text{tr}[\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^\theta[\theta] - \boldsymbol{\varepsilon}^{tv}[\underline{z}]]^2). \tag{3.32}$$

Analog zu HALLBERG *et al.* [51] wird in Gleichung (3.29.2) das gleiche elastische isotrope Verhalten für alle Phasen angenommen. Infolgedessen ist es ausreichend, die Temperaturabhängigkeit, wie sie in Gleichung (3.31) eingeführt wurde, zu berücksichtigen. Eine Betrachtung der Abhängigkeit der Schub- bzw. Kompressionsmodule G und K vom Vektor der Phasenanteile \underline{z} ist somit nicht notwendig.

Der Term Ψ^θ in Gleichung (3.29.4) repräsentiert die thermische gespeicherte Energie. An dieser Stelle wird die Abhängigkeit der Phase von der spezifischen Wärmekapazität c_d vernachlässigt. Der inelastische Teil Ψ^p der freien Helmholtz-Energie in Gleichung (3.29.5) beschreibt die Energiespeicherung, die durch inelastische Verzerrungen entsteht. Das Verhalten der plastischen Verzerrungen wird mit einer kombinierten linearen und nichtlinearen isotropen Verfestigung unter Einsatz der positiven Konstanten Q_0 , b sowie H definiert. q_1 und q_2 stellen hierbei skalare verzerrungsähnliche interne Variablen dar, deren Anzahl $n_q = 2$ beträgt. Ψ_{ch} in Gleichung (3.29.6) repräsentiert die chemische Energiespeicherung in Folge von Phasentransformationen. Dieser Term verschwindet, wenn keine Phasenumwandlungen stattfinden (z.B. für $\underline{z} = \underline{z}_0$).

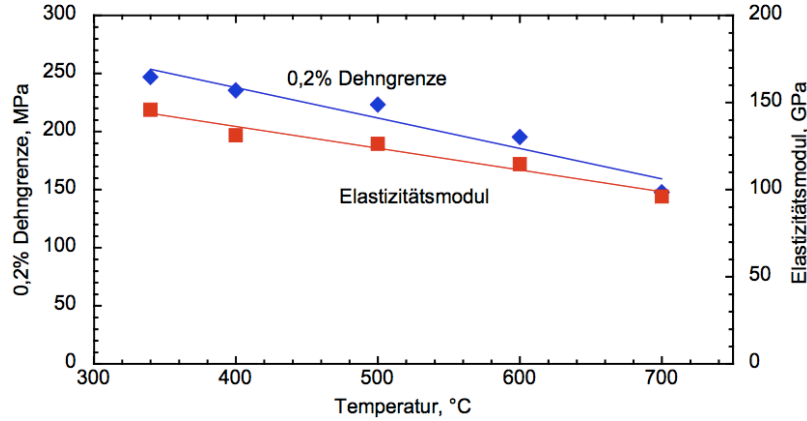


Abb. 3.2 Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls und $R_{p0.2}$ (gemessen mit einem Hochtemperaturrextensometer) des unterkühlten Austenits von der Temperatur. Isotherme Austenitisierung für 5 Minuten bei 880 °C [129]

3.2.2 Thermodynamische Kräfte

Die thermodynamischen Kräfte lassen sich aus den Gleichungen (3.24) ableiten. Die Entwicklung des Spannungstensors erfolgt auf der Grundlage der Gleichungen (3.24.1) und (3.2)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma} &= \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{el}}, \\ &= 2G(\theta) \mathbf{I}^{dev} : \boldsymbol{\varepsilon}^{el} + K(\theta) \mathbf{1} : \boldsymbol{\varepsilon}^{el} \mathbf{1}.\end{aligned}\quad (3.33)$$

Gleichung (3.33) erlaubt die deviatorisch-volumetrische Aufspaltung des Spannungstensors

$$\begin{aligned}1. \quad \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}^{dev} + \boldsymbol{\sigma}^{vol}, \quad \text{mit} \\ 2. \quad \boldsymbol{\sigma}^{dev} &= 2G(\theta) \mathbf{I}^{dev} : \boldsymbol{\varepsilon}^{el}, \\ 3. \quad \boldsymbol{\sigma}^{vol} &= K(\theta) \mathbf{1} : \boldsymbol{\varepsilon}^{el} \mathbf{1}.\end{aligned}\quad (3.34)$$

$\mathbf{I}^{dev} = \mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ steht hier für einen Projektionstensor mit den Einheitstensoren zweiter ($\mathbf{1}$) bzw. vierter Ordnung (\mathbf{I}). Der Zusammenhang zwischen dem elastischen Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}^{el}$ und dem Spannungsvektor $\boldsymbol{\sigma}$ in den Gleichungen (3.34) lässt sich folgendermaßen formulieren

$$1. \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}(\theta) : \boldsymbol{\varepsilon}^{el}, \quad \text{mit} \quad 2. \quad \mathbb{C} = 2G(\theta) \mathbf{I}^{dev} + K(\theta) \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \quad (3.35)$$

wobei \mathbb{C} als ein elastischer Tensor vierter Stufe bekannt ist.

Die Verfestigungsspannungen sowie die chemischen Kräfte lassen sich auf Grundlage der Gleichungen (3.24.3-4), (3.32) und (3.29.5-6) definieren

$$\begin{aligned}1. \quad Q_1 &= \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial q_1} = Q_0 b q_1, \quad Q_2 = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial q_2} = H_p q_2, \\ 2. \quad Z_i &= \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial z_i} = \frac{\partial \Psi^{vol}}{\partial z_i} + \rho_0 \phi_{ch,i}[\theta] \approx \rho_0 \phi_{ch,i}[\theta], \quad i = 1, 2, \dots, 4.\end{aligned}\quad (3.36)$$

Die Ergebnisse der Gleichungen (3.36.1) repräsentieren die nichtlineare bzw. die lineare isotrope Verfestigung. Stahlwerkstoffe zeigen eine nur sehr geringe Volumenänderung im elastischen Bereich, sodass der erste Term in Gleichung (3.36.2) vernachlässigbar ist. Demzufolge kann die chemische Kraft Z_i als die freie Enthalpie der Phase z_i betrachtet werden.

Im betrachteten Prozess mit niedrig legiertem Stahl findet die Phasenumwandlung von einer beliebigen Phase zum Austenit während des Aufheizprozesses bei Überschreiten der Gleichgewichtstemperatur A_{c1} und umgekehrt vom Austenit zum Bainit bzw. zum Martensit bei der Abkühlung ($\theta < A_{c1}$) statt. Weitere Umwandlungspaare sind für den betrachteten Werkstoff ausgeschlossen. Damit ist Austenit in allen zulässigen Phasentransformationen vertreten. Demnach kann die Austenitrate unter Verwendung der Nebenbedingung (3.5) sowie der Rate der verbleibenden Phasen ausgedrückt werden als:

$$\dot{z}_2 = - \sum_{i=1, i \neq 2}^4 \dot{z}_i. \quad (3.37)$$

Dieses erlaubt die Formulierung der Beziehung

$$- \sum_{i=1}^4 Z_i \dot{z}_i = - \sum_{i=1, i \neq 2}^4 Z_i \dot{z}_i - Z_2 \dot{z}_2 = - \sum_{i=1}^4 (Z_i - Z_2) \dot{z}_i. \quad (3.38)$$

Auf diese Weise kann der Dissipationsterm bezogen auf die Phasentransformationen in Gleichung (3.25) unter Einsatz der Approximation (3.36.2) für die chemischen Kräfte Z_i umformuliert werden

$$- \sum_{i=1}^4 Z_i \dot{z}_i = - \sum_{i=1}^4 (Z_i - Z_2) \dot{z}_i \approx - \rho_0 \sum_{i=1}^4 (\phi_{ch,i} - \phi_{ch,2}) \dot{z}_i. \quad (3.39)$$

Eine mögliche Beziehung für die Differenz der chemischen Potentiale $\phi_{ch,i} - \phi_{ch,2}$ kann aus folgendem Zusammenhang abgeleitet werden:

$$Z_i - Z_2 = \rho_0 (\phi_{ch,i} - \phi_{ch,2}) = \rho_0 (\theta - \theta_0^{(i,2)}) \frac{Q_{i,2}^*}{\theta_0^{(i,2)}}, \quad i = 1, \dots, 4. \quad (3.40)$$

Hiebei wird $\theta_0^{(i,2)}$ als Gleichgewichtstemperatur definiert, bei der die i -te Phase die gleiche Energie wie der Austenit aufweist. Somit repräsentiert die Temperaturdifferenz $(\theta - \theta_0^{(i,2)})$ die Unterkühlung bzw. Überhitzung im Vergleich zum Gleichgewichtszustand. Darüber hinaus repräsentiert in Gleichung (3.40) $Q_{i,2}^*$ die Aktivierungsenergie für die Umwandlung von $1 \rightarrow 2$ bzw. von $2 \rightarrow 3, 4$. Sie ist annahmegemäß für $i \neq 2$ positiv und Null für $i = 2$. Diese Annahme ist plausibel, weil eine Phasenumwandlung nur dann stattfindet, wenn die gespeicherte chemische Energie (Enthalpie) der Ausgangsphase die Enthalpie der generierten Phase übersteigt (vgl. Abb. 2.8).

3.2.3 Verzerrungstensoren

Die Gesamtverzerrung ϵ wird durch die Summe der einzelnen Verzerrungstensoren in Gleichung (3.2) beschrieben. Die Formulierung der Verzerrungen infolge der Spannung, der Temperatur sowie der Phasenumwandlung erfolgt im weiteren Verlauf der Arbeit auf der Grundlage der beobachteten Phänomene.

3.2.3.1 Umwandlungsplastischer Verzerrungstensor

Die Umwandlungsplastizität (TRIP) beschreibt den Effekt der plastischen Deformationen während der Phasenumwandlung, wenn die thermisch und/oder mechanisch induzierte Spannung die Fließspannung der weichen Phase unterschreitet. Der phänomenologische Ansatz von LEBLOND [72] für die umwandlungsplastische Deformationsgeschwindigkeit in einer allgemein formulierten, zwei-

phasigen Beziehung lautet:

$$\dot{\epsilon}^{tp} = \frac{3}{2} K_{tp} \sigma^{\text{dev}} \frac{df[z]}{dz} \dot{z}, \quad (3.41)$$

wobei σ^{dev} den deviatorischen Spannungstensor aus Gleichung (3.34.2) darstellt. Der Wert der Materialumwandlungskonstanten K_{tp} , die auch als Greenwood-Johnson-Parameter bezeichnet wird, ist abhängig vom betrachteten Werkstoff. Der Greenwood-Johnson-Parameter kann nach LEBLOND [72] für niedriglegierte Stähle unter Verwendung der Gleichung

$$K_{tp} = \frac{5}{6} \frac{1}{\sigma_y} \frac{\Delta V}{V} \quad (3.42)$$

mit Hilfe der Streckgrenze der umgewandelten Phase (des Austenits) σ_y und der Volumenveränderung näherungsweise bestimmt werden.

Darüber hinaus hängt die umwandlungsplastische Deformationsgeschwindigkeit von der Änderung der Sättigungsfunktion $f(z)$, die eine heuristische Funktion von z mit den Bedingungen $f(z=0)=0$ und $f(z=1)=1$ ist, ab. Als Beispiel für die Funktion $f(z)$ wird von LEBLOND [72] der Ausdruck

$$f[z] = z(1 - \ln[z])$$

vorgeschlagen. Im Rahmen dieser Analyse findet die von DENIS [27] entwickelte Formulierung Anwendung

$$f[z] = (2 - z)z \quad \Rightarrow \quad \frac{df[z]}{dz} = 2(1 - z). \quad (3.43)$$

Der Term $(1 - z)$ entspricht dem Rest der austenitischen Phase. Damit lautet die Formulierung von DENIS für eine Mehrphasenbetrachtung:

$$f[z_i] = (2 - z_i)z_i \quad \Rightarrow \quad \frac{df[z_i]}{dz_i} = 2(1 - z_i) = 2z_2 \quad \text{für } i \in [3, 4]. \quad (3.44)$$

Die Evolutionsgleichung des umwandlungsplastischen Verzerrungstensors (3.41) wird sowohl für die martensitische als auch für die bainitische Umwandlung in gleicher Weise eingesetzt. Aus der Addition dieser Gleichungen erhält man die Evolutionsgleichung für die gesamte umwandlungsplastische Verzerrung während der martensitischen und der bainitischen Phasentransformation

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}^{tp} &= \frac{3}{2} K_{tpB} [\sigma_v] \sigma^{\text{dev}} \frac{df[z_3]}{dz_3} \dot{z}_3 + \frac{3}{2} K_{tpM} [\sigma_v] \sigma^{\text{dev}} \frac{df[z_4]}{dz_4} \dot{z}_4 \\ &= 3K_{tpB} [\sigma_v] \sigma^{\text{dev}} \dot{z}_3 z_2 + 3K_{tpM} [\sigma_v] \sigma^{\text{dev}} \dot{z}_4 z_2. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Die Konstanten K_{tpB} und K_{tpM} stellen jeweils den Greenwood-Johnson-Parameter für Bainit und Martensit dar.

Die in Abbildung 3.3 dargestellten, experimentell ermittelte Maximalwerte der umwandlungsplastischen Verzerrung in Abhängigkeit von der Haltespannung zeigen ein nichtlineares Verhalten. Dieses Phänomen kann nicht durch einen einzelnen Skalar K_{tp} für den umwandlungsplastischen Verzerrungstensor in Gleichung (3.45) abgebildet werden. Demzufolge wird eine lineare Abhängigkeit der Parameter K_{tpB} und K_{tpM} von der Vergleichsspannung nach von Mises angenommen

$$\begin{aligned} K_{tpB} &= K_{tpB1} + K_{tpB2} \sigma_v, \\ K_{tpM} &= K_{tpM1} + K_{tpM2} \sigma_v. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Sämtliche Materialparameter, die sich auf ϵ^{tp} in Gleichung (3.2) beziehen, lassen sich zusammenfassen

$$\kappa_{tp} = [K_{tpB1}, K_{tpB2}, K_{tpM1}, K_{tpM2}]. \quad (3.47)$$

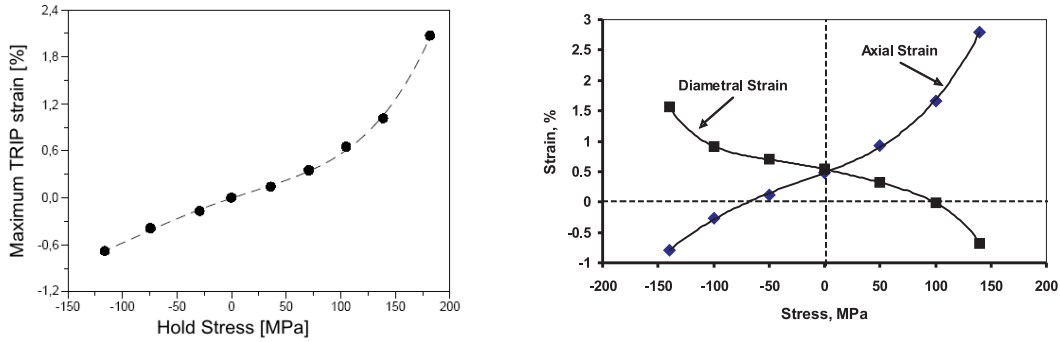


Abb. 3.3 Maximalwerte der umwandlungsplastischen Verzerrung als Funktion der Spannung infolge der martensitischen (a) und bainitischen (b) Umwandlung extrahiert aus den experimentellen Ergebnissen [1, 89]

3.2.3.2 Viskoplastischer Verzerrungstensor

Zur Simulation des zeitabhängigen Verhaltens wird ein viskoplastischer Ansatz in Kombination mit einer nichtlinearen isotropen Verfestigung gewählt. Bezüglich einer weitgehenden Beschreibung des Ansatzes wird auf LEMAITRE und CHABOCHE [76] verwiesen. Eine Zusammenfassung der konstitutiven Gleichungen lautet:

1. Fließregel $\dot{\epsilon}^{vp} = \sqrt{\frac{3}{2}} \dot{\lambda} \mathbf{n}$, mit
2. Fließfaktor $\dot{\lambda} = \left\langle \frac{\Phi_Y}{K_\lambda} \right\rangle^m$,
3. Normalenvektor $\mathbf{n} = \frac{\boldsymbol{\sigma}^{\text{dev}}}{\|\boldsymbol{\sigma}^{\text{dev}}\|}$, (3.48)
4. Überspannungsfunktion $\Phi_Y = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\boldsymbol{\sigma}^{\text{dev}}\| - (Y(\theta) + Q_1[q_1] + Q_2[q_2])$,
5. inelastische Vergleichsverzerrung $\dot{e}_v = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\epsilon}^{vp}\| = \dot{\lambda}$.

Hierbei stellt $\boldsymbol{\sigma}^{\text{dev}}$ den deviatorischen Spannungstensor aus Gleichung (3.34.2) dar. Die Notation $\|\bullet\| = (\bullet : \bullet)^{1/2}$ in den Gleichungen (3.48.3) und (3.48.5) repräsentiert den Betrag des Tensors zweiter Stufe und \mathbf{n} den Normalvektor, der die Bedingung $\|\mathbf{n}\| = 1$ erfüllt. Mit Hilfe dieser Definitionen kann aus Gleichung (3.48.1) zwischen dem Fließfaktor $\dot{\lambda}$ und der inelastischen Vergleichsverzerrung e_v die Beziehung $\dot{\lambda} = \dot{e}_v$ verifiziert werden.

Für die internen Variablen q_1 und q_2 werden folgende Evolutionsgleichungen angenommen:

1. $\dot{q}_1 = \left(1 - \frac{Q_1}{Q_0}\right) \dot{e}_v$,
 2. $\dot{q}_2 = \dot{e}_v$.
- (3.49)

Aus Gleichung (3.36.1) erhält man den Zusammenhang: $Q_1/Q_0 = bq_1$. Einsetzen in Gleichung (3.49) resultiert in

$$\dot{q}_1 = (1 - bq_1) \dot{e}_v \implies q_1 = \frac{1}{b} (1 - \exp[-be_v]). \quad (3.50)$$

Für die Summe der beiden Verfestigungsspannungen aus Gleichungen (3.36.1) ergibt sich

$$Q = Q_1 + Q_2 = Q_0(1 - \exp[-be_v]) + He_v. \quad (3.51)$$

Damit entspricht Q der aus der Literatur bekannten, isotropen Verfestigungsspannung R (vgl. dazu z.B. LEMAITRE und CHABOCHE [76]).

Die in Abbildung 3.2 dargestellten experimentellen Ergebnisse bringen ferner eine lineare Abhängigkeit der Fließspannung $R_{p0,2}$ von der Temperatur θ zum Vorschein. Konsequenterweise wird für den in Gleichung (3.48.4) erscheinenden und einen Grenzbereich für inelastisches Verhalten repräsentierenden Skalar Y eine lineare Beziehung verwendet

$$Y(\theta) = Y_0 + c_Y (\theta - \theta_0). \quad (3.52)$$

Folglich können alle Materialparameter, die sich auf den viskoplastischen Verzerrungstensor ε^{vp} in Gleichung (3.2) beziehen, zusammengefasst werden

$$\kappa_{vp} = [Y_0, c_Y, H, Q, b, K_\lambda, m]. \quad (3.53)$$

3.2.3.3 Thermischer Verzerrungstensor

Bei steigender Temperatur nehmen die Abstände zwischen den Atomen im Kristallgitter ab. Als Folge dehnen sich Feststoffe aus. Dieser Effekt ist als Wärmeausdehnung bekannt und kann anhand des thermischen Längenausdehnungskoeffizienten bzw. Wärmeausdehnungskoeffizienten α^θ sowie des Volumenausdehnungskoeffizienten γ^θ beschrieben werden. Für einen isotropen Festkörper verhalten sich diese Koeffizienten proportional zueinander $\gamma^\theta = 3\alpha^\theta$. Damit stellt der Wärmeausdehnungskoeffizient eine Proportionalitätskonstante zwischen der Temperaturänderung und der relativen Längenänderung bzw. Volumenänderung dar. Um die verschiedenen Koeffizienten für die thermische Ausdehnung in den unterschiedlichen Phasen z_i zu berücksichtigen, wird der wärmebedingte Verzerrungstensor mit Hilfe der linearen Mischungsregel berechnet

$$\varepsilon^\theta = \sum_{i=1}^4 \alpha_i^\theta \Delta\theta z_i \mathbf{1}. \quad (3.54)$$

$\alpha_1^\theta, \alpha_2^\theta, \alpha_3^\theta, \alpha_4^\theta$ repräsentieren hierbei jeweils den thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Ferrit/Perlit, Austenit, Bainit und Martensit. $\Delta\theta = \theta - \theta_0$ ist die Temperaturdifferenz zwischen der aktuellen Temperatur θ und der Starttemperatur θ_0 . $\mathbf{1}$ stellt einen Einheitstensor zweiter Stufe dar. Die schematische Darstellung der linearen Mischungsregel vom wärmebedingten Verzerrungstensor erfolgt in Abbildung 3.4.b.

Die thermischen Ausdehnungskoeffizienten werden zum Zwecke einer kompakteren Darstellung in einem Vektor $\underline{\alpha}^\theta = [\alpha_1^\theta, \alpha_2^\theta, \alpha_3^\theta, \alpha_4^\theta]^T$ zusammengefasst. Damit kann Gleichung (3.54) in einer Matrixschreibweise formuliert werden

$$\varepsilon^\theta = \underline{z}^T \underline{\alpha}^\theta \Delta\theta \mathbf{1}. \quad (3.55)$$

Die Materialparameter, die sich auf den wärmebedingten Verzerrungstensor ε^θ in Gleichung (3.2) beziehen, werden zusammengefasst zu

$$\kappa_{th} = \underline{\alpha}^\theta = [\alpha_1^\theta, \alpha_2^\theta, \alpha_3^\theta, \alpha_4^\theta]^T. \quad (3.56)$$

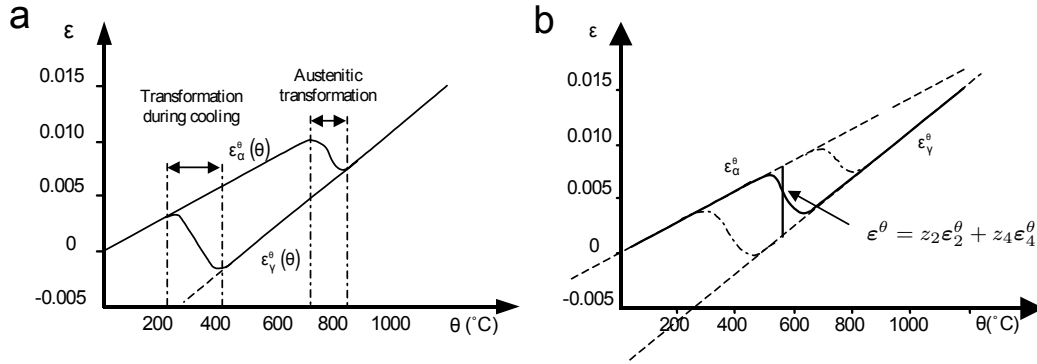


Abb. 3.4 a) Ergebnis eines Dilatometerversuchs, b) schematische Darstellung der linearen Mischungsregel von Wärmeausdehnungstensoren [32]

3.2.3.4 Umwandlungsbedingter Verzerrungstensor

Da der α -Mischkristall mit der dazugehörigen martensitischen (α'_m), bainitischen (α'_b) und perlitische Phase ein im Vergleich zum γ -Mischkristall (Austenit) größeres Volumen aufweist, wächst das Körpervolumen während der Phasenumwandlung vom Austenit zum Martensit, Bainit oder Ferrit. Ferner kommt es zur Volumenverkleinerung des Mischgefüges bei der Austenitbildung. Dieses Phänomen ist anhand der in Abbildung 3.4.a dargestellten Ergebnissen aus den Dilatometeruntersuchungen zu beobachten. Für den Verzerrungstensor infolge der Phasentransformation wird in Anlehnung an den Ansatz von BESSERDICH [13] für die Austenit-Martensit-Umwandlung folgender Ausdruck angenommen:

$$\epsilon^{tv} = \frac{1}{3} K^{tv} z_1, \quad (3.57)$$

wobei die Konstante K^{tv} die Volumenänderung $\Delta V/V$ nach vollständiger Umwandlung darstellt. Diese allgemeine Beziehung gilt für eine einphasige Umwandlung, wie z.B. für eine Transformation vom vollständig austenitisierten Gefüge zum Martensit bzw. zum Bainit oder Perlit. Für den Fall einer mehrphasigen Umwandlung wird für das Prototypmodell die Beziehung (3.57) angepasst

$$\epsilon^{tv} = \frac{1}{3} (\underline{K}^{tv})^T \underline{z} \mathbf{1}, \quad \text{bzw.} \quad \epsilon^{tv} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^4 K_i^{tv} z_i \mathbf{1}. \quad (3.58)$$

Der Vektor $\underline{K}^{tv} = [K_1^{tv}, K_2^{tv}, K_3^{tv}, K_4^{tv}]^T$ vereinigt die Konstanten, die den Volumenunterschied zwischen der Ausgangsphase z_1 und der jeweiligen resultierenden Phase z_i charakterisieren. Damit ist die Konstante K_1^{tv} gleich Null und K_2^{tv} negativ.

Es gilt zu beachten, dass sowohl der Wärmeausdehnungstensor ϵ^θ als auch der Ausdehnungstensor infolge der Phasenumwandlung ϵ^{tv} lediglich volumetrische Teile aufweisen. Konsequenterweise sind die deviatorische Teile gleich Null. Des Weiteren ist der Ausdehnungstensor ϵ^{tv} weder von der Spannung noch von der Temperatur abhängig. Die für Gleichung (3.58) relevanten Materialparameter lassen sich in einem Vektor zusammenfassen

$$\kappa_{tv} = [K_2^{tv}, K_3^{tv}, K_4^{tv}]. \quad (3.59)$$

3.2.4 Evolutionsgleichungen der Phasenumwandlungen

3.2.4.1 Evolution der austenitischen Phase

Im betrachteten Prozess ist eine Austenitbildung nur aus ferritisch-perlitischem Ausgangsgefüge während der Induktionsaufheizung des zentralen Teils des Werkstücks möglich. Anschließend kann der Austenit in Bainit bzw. in Martensit ohne eine Rücktransformation umgewandelt werden. Das Aufheizen erfolgt vergleichsweise schnell und führt zu hohen Temperaturen. Demzufolge wird für die Evolution des Anteils der austenitischen Phase z_2 ein Ansatz nach LEBLOND und DEVAUX [73] verfolgt

$$\dot{z}_2 = \mu_{12} [\theta] (1 - z_2) H [\theta - A_{c1}] - \dot{z}_3 - \dot{z}_4. \quad (3.60)$$

Hierbei ist $\mu_{12} > 0$ eine temperaturabhängige Konstante und A_{c1} die austenitische Starttemperatur, deren Schätzung auf Basis der Gleichung (2.1) erfolgt. Die Heaviside-Funktion H nimmt für jede beliebige negative Zahl den Wert Null an ($H[s] = 0$), andernfalls liegt der Wert bei Eins ($H[s] = 1$ für $s > 0$). Somit erfüllt die Heaviside-Funktion die Rolle eines Schalters, der die Austenitbildung erst nach dem Überschreiten der Austenit-Starttemperatur A_{c1} aktiviert.

3.2.4.2 Keimbildung in der bainitischen Phase

Im Gegensatz zu der martensitischen Umwandlung, die durch einen schnellen diffusionslosen Umklappvorgang des Atomgitters gekennzeichnet ist, findet bei der bainitischen Phasenumwandlung eine Kopplung von Umklappvorgängen im Kristallgitter und Diffusionsvorgängen, die zeit- und temperaturabhängig sind, statt. Damit sind bei der bainitischen Phasenumwandlung verschiedene Umwandlungsmechanismen möglich. Es wird hierbei zwischen dem oberen und dem unteren Bainit differenziert. Die ausführliche Beschreibung der bei der Bildung dieser Phasen ablaufenden Vorgänge erfolgte in Abschnitt 2.1.3. Das bainische Gefüge wird auch als Zwischengefüge bezeichnet und befindet sich im ZTU-Diagramm (Abb. 2.4) zwischen Perlit und Martensit. In Abbildung 3.5 wird dieses Diagramm um die detailliertere Darstellung der bainitischen Bereiche erweitert. Es ist ersichtlich, dass die Umwandlung nicht sofort nach Erreichen der Bainitstarttemperatur (Gleichung 2.3) beginnt, sondern erst nach einer temperaturabhängigen Verweildauer einsetzt. Diese Verzögerungszeit wird auch als *Inkubationszeit* bezeichnet [17, 30, 42]. In Abbildung 3.5 kennzeichnet θ^* die mit der kürzesten Inkubationszeit t^* korrespondierende Temperatur. Nach GARRETT *et al.* [42] kann diese von der inelastischen Verzerrung e_v abhängig sein, so dass $\theta^* = \theta^*[e_v]$ gilt.

In Anlehnung an [42] bezieht sich die Inkubationszeit in dieser Arbeit auf das Keimwachstum. Im Folgenden werden zwei verschiedene Fälle, nämlich für den oberen und unteren Bainit getrennt voneinander betrachtet.

Fall 1: Oberer Bainit:

Als erstes wird die Bildung des oberen Bainits unter der Einwirkung der Temperatur von $\theta > \theta^*$ in Abbildung 3.5 betrachtet. r stellt hier den Keimradius dar. Für dessen Wachstum wird eine Formulierung der Evolutionsgleichung in Bezug auf die chemische Kraft Z in Gleichung (3.40) und die isotrope Verfestigungsspannung Q in Gleichung (3.36) mit den Materialparametern Q_0 , H_p und b vorgenommen

$$\theta > \theta^* : \quad \dot{r} = \exp [-K_{1u}Z + K_{2u}\theta^*[e_v] + K_{3u} - K_{4u}Q]. \quad (3.61)$$

Gleichungen (3.36), (3.40) und (3.61) können kombiniert werden zu

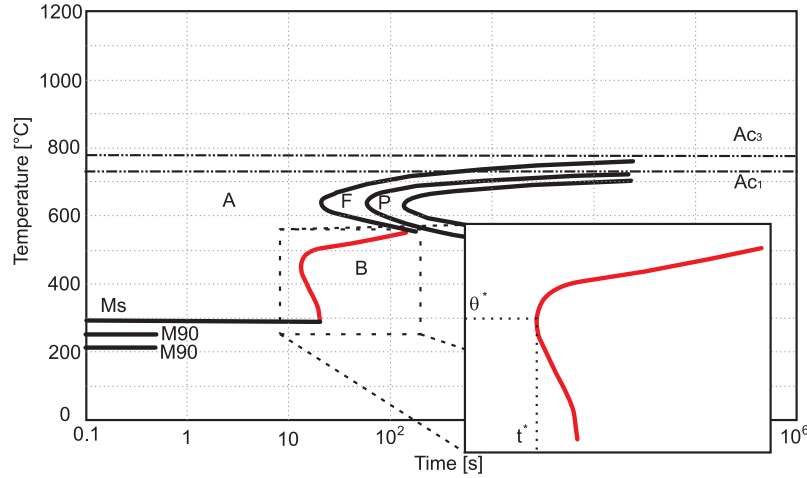


Abb. 3.5 ZTU-Diagramm [51CrV4] mit der Temperatur θ^* entsprechend der kürzesten Inkubationszeit t^* für die bainitische Phase [29]

$$\theta > \theta^* : \dot{r}_u = \exp \left[K_{1u} \rho_0 (\theta - \theta_0) \frac{Q^*}{\theta_0} + K_{2u} \theta^* [e_v] + K_{3u} - K_{4u} ([Q_0 (1 - \exp[-be_v]) + H_p e_v]) \right] \quad (3.62)$$

Q^* repräsentiert hierbei die Aktivierungsenergie, θ_0 die Gleichgewichtstemperatur und θ^* die mit der kürzesten Inkubationszeit t^* korrespondierende Temperatur. Ferner stellen $K_{1u}, K_{2u}, K_{3u}, K_{4u}$ Konstanten dar. Mehrere Umformungen liefern

$$\theta > \theta^* : \dot{r}_u = \alpha_{2u} \exp \left[-\frac{\theta - \theta^* [e_v]}{B_u} \right] \exp [-\beta_{2u} e_v], \quad (3.63)$$

wobei gilt

$$\begin{aligned} 1. \quad \frac{1}{B_u} &= K_{2u} = K_{1u} \rho_0 Q^* \frac{1}{\theta_0}, \\ 2. \quad \alpha_{2u} &= \exp [K_{1u} \rho_0 Q^* + K_{3u} - K_{4u} Q_0], \\ 3. \quad \beta_{2u} &= K_{4u} H_p, \\ 4. \quad Q_0 \exp [-be_v] &\rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.64)$$

In Gleichung (3.64.4) wird die Abhängigkeit des nichtlinearen Verfestigungsterms von der Keimbildung vernachlässigt. Diese Annahme wird mit großen auftretenden plastischen Verzerrungen e_v im Hybridumformprozess begründet, d.h. je größer e_v ist, desto kleiner fällt $\exp [-be_v]$ aus.

Fall 2: Unterer Bainit:

In diesem Abschnitt wird die Bildung des unteren Bainits unter Einwirken der Temperatur $\theta < \theta^*$ anhand der Abbildung 3.5 betrachtet. Für die Illustration des Wachstums des oberen Bainits wird folgende Evolutionsgleichung verwendet:

$$\theta < \theta^* : \dot{r}_l = \exp [K_{1l} Z - K_{2l} \theta^* [e_v] + K_{3l} - K_{4l} Q], \quad (3.65)$$

mit $K_{1l}, K_{2l}, K_{3l}, K_{4l}$ als Konstanten. Analog zum Vorgehen bei der Analyse des oberen Bainits, wird Gleichung (3.65) umformuliert

$$\theta < \theta^* : \quad \dot{r}_l = \alpha_{2l} \exp \left[\frac{\theta - \theta^*[e_v]}{B_l} \right] \exp [-\beta_{2l} e_v], \quad (3.66)$$

mit

$$\begin{aligned} 1. \quad \frac{1}{B_l} &= K_{2l} = K_{1l} \rho_0 Q^* \frac{1}{\theta_0}, \\ 2. \quad \alpha_{2l} &= \exp [-K_{1l} \rho_0 Q^* + K_{3l} - K_{4l} Q_0], \\ 3. \quad \beta_{2l} &= K_{4l} H_p, \\ 4. \quad Q_0 \exp [-b e_v] &\rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Aus dem ZTU-Diagramm (Abb. 3.5) ist ersichtlich, dass die für die Keimbildung in der bainitischen Phase sowie für die Erstellung einer asymmetrischen C -Kurve relevanten Evolutionsgleichungen (3.63) und (3.66) unter Verwendung der Bedingung $\dot{r}_l[\theta = \theta^*] = \dot{r}_r[\theta = \theta^*]$ kombiniert werden können

$$\dot{r} = \alpha_2 \exp \left[-\frac{|\theta - \theta^*[e_v]|}{B_u \langle \theta - \theta^* \rangle + B_l \langle \theta^* - \theta \rangle} \right] \exp [-\beta_2 e_v], \quad (3.68)$$

wobei B_u für $\theta > \theta^*$, B_l für $\theta < \theta^*$, $\alpha_2 = \alpha_{2u} = \alpha_{2l}$, $\beta_2 = \beta_{2u} = \beta_{2l}$ Materialparameter darstellen. Somit erweitert die Evolutionsgleichung (3.68) den empirischen Ansatz von GARRETT *et al.* [42] um die Anwendung der treibenden Kräfte sowohl für den oberen als auch den unteren Bainit.

3.2.4.3 Evolution der bainitischen Phase

Übersteigt der Radius eines bainitischen Partikels r den Grenzwert r^* , hat sich nach GARRETT *et al.* [42] der Volumenanteil des Bainits z gebildet. Bei diesem Ansatz bezieht sich dieser sowohl auf die chemische treibende Kraft Z als auch auf die Aktivierungsenergie G^* . Die Werte des kritischen Keimradius r^* und der freien Energie G^* erhält man aus den in [42] vorgeschlagenen Beziehungen

$$r^* = \frac{A_1 \theta_0 \Delta \theta^{0.5}}{\theta \Delta \theta Q^* + A_2 \theta_0 e_v \sigma_v}, \quad G^* = \frac{A_3 \theta_0^2 \Delta \theta^{1.5}}{(\Delta \theta Q^* + A_4 \theta_0 e_v \sigma_v)^2}. \quad (3.69)$$

Hierbei kennzeichnen A_1, A_2, A_3 Materialkonstanten, $\Delta \theta = \theta_0 - \theta$ die Unterkühlung gegenüber der Gleichgewichtstemperatur und σ_v die Vergleichsspannung nach von Mises. Demnach wird für den Bainit folgende Evolutionsgleichung verwendet:

$$\dot{z}_3 = \exp \left[-K_5 Z + K_6 \theta^*[e_v] - \frac{G^*}{R\theta} \right] \left\langle \frac{r - r^*}{r} \right\rangle^n (z_2)^\gamma, \quad (3.70)$$

wobei K_5, K_6, n, γ Konstanten sind und R die universelle Gaskonstante darstellt. Die Notation $\langle x \rangle = x$ für $x > 0$, $\langle x \rangle = 0$ für $x \leq 0$ sichert, dass sich der Volumenanteil nur dann entwickelt, wenn der Bainitradius r den kritischen Wert r^* erreicht. Das Minuszeichen vor K_5 berücksichtigt, dass Z negativ ist. Die Verwendung der chemischen treibenden Kraft aus Gleichung (3.40) erlaubt folgende Formulierung der Gleichung (3.70)

$$\dot{z}_3 = \exp \left[K_5 \rho_0 (\theta_0 - \theta) \frac{Q^*}{\theta_0} + K_6 \theta^*[e_v] - \frac{G^*}{R\theta} \right] \left\langle \frac{r - r^*}{r} \right\rangle^n (z_2)^\gamma. \quad (3.71)$$

Wie schon erwähnt, entspricht die Zeit bei $r = r^*$ der Inkubationszeit. Der Wachstum der bainitischen Phase hängt vom vorhandenen Austenitphasenanteil z_2 ab. Je weniger Austenit vorhanden ist, desto langsamer verläuft die Umwandlung. Dieses Verhalten ist in den experimentellen Untersuchungen zur Kinetik des bainitischen Gefüges (Abb. 2.18) als eine Sättigung der Bainitumwandlung zu beobach-

ten. Ferner soll dieser Term sicherstellen, dass kein Bainit gebildet wird, wenn kein Austenit mehr vorhanden ist.

Einige Umformungen der Gleichung (3.71) liefern den Ausdruck

$$\dot{z}_3 = A_5 \exp \left[\frac{\theta^*[e_v] - \theta}{B_1} \right] \exp \left[-\frac{G^*}{R\theta} \right] \left\langle \frac{r - r^*}{r} \right\rangle^n (z_2)^\gamma, \quad (3.72)$$

mit

$$\begin{aligned} 1. \quad \frac{1}{B_1} &= \frac{1}{K_6} = K_5 \rho_0 Q^*, \\ 2. \quad A_5 &= \exp [K_5 \rho_0 Q^*]. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Somit ist hier die Ableitung einer auf der Grundlage der treibenden Kräfte und auf der empirisch formulierten Evolutionsgleichung von GARRETT *et al.* [42] erfolgt.

3.2.4.4 Evolution der martensitischen Phase

Martensit kann aus Austenit während der schnellen Abkühlung unterhalb der Martensit-Starttemperatur entstehen. Im Hybridumformprozess wird diese schnelle Abkühlung durch den Oberflächenkontakt zwischen dem Werkstück und Werkzeug realisiert. Bezüglich der Grundlagen zur martensitischen Umwandlung wird auf Abschnitt 2.1.2 verwiesen. Für die Formulierung der Evolutionsgleichung der martensitischen Phasenumwandlung wird der Koistinen-Marburger-Ansatz verwendet

$$\dot{z}_4 = \left\langle \frac{-\dot{\theta}}{k_\theta} \right\rangle (z_2 - z_4) H [M_s - \theta]. \quad (3.74)$$

Hier stellt $k_\theta > 0$ für den Koistinen-Marburger-Parameter und M_s die martensitische Starttemperatur dar. Der Wert der martensitischen Starttemperatur wird auf Grundlage der Gleichung (2.2) geschätzt. Die Heaviside-Funktion H erfüllt die Rolle eines Schalters, der die Martensitbildung erst nach Erreichen der Martensit-Starttemperatur M_s aktiviert. Der $(z_2 - z_4)$ Term dient als Obergrenzenfunktion und stellt sicher, dass Martensit nur bei Vorhandensein des Austeints gebildet wird.

3.2.5 Thermodynamische Konsistenz

Die thermodynamische Konsistenz des betrachteten Modells ist gewährleistet, wenn die Clausius-Planck-Ungleichung (3.25.1) erfüllt ist. Es wird an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass das viskoplastische Verhalten aktiviert ist, wenn die Überspannungsfunktion ϕ in Gleichung (3.48.4) positiv ist

$$\begin{aligned} 1. \quad \phi &= \sigma_v - (Y[\theta] + Q_1 + Q_2) > 0 \implies \dot{\lambda} > 0, \quad \sigma_v - Q_1 - Q_2 > Y[\theta], \\ 2. \quad \phi &= \sigma_v - (Y[\theta] + Q_1 + Q_2) \leq 0 \implies \dot{\lambda} = 0. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Mit der additiven Zerlegung des Verzerrungstensors in Gleichung (3.2), der Fließregel (3.48.1), der Evolutionsgleichungen (3.45) für TRIP und die internen Variablen q_1 und q_2 sowie der Gleichungen (3.48.4) und (3.48.5) kann die Clausius-Planck-Ungleichung (3.25.1) wie folgt umformuliert werden:

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}^i &= \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in} - Q_1 \dot{q}_1 - Q_2 \dot{q}_2 - \sum_{i=1}^4 Z_i \dot{z}_i \\
&= \underbrace{\dot{\lambda}}_{\geq 0} \underbrace{(\sigma_v - Q_1 - Q_2)}_{> Y[\theta]} + \frac{\dot{\lambda}}{Q_0} Q_1^2 \\
&\quad + \left(\dot{z}_3 \frac{3}{2} f'_1 K_{tpB}[\sigma_v] + \dot{z}_4 \frac{3}{2} f'_1 K_{tpM}[\sigma_v] \right) \|\boldsymbol{\sigma}^{\text{dev}}\|^2 - \sum_{i=1}^4 Z_i \dot{z}_i \geq 0.
\end{aligned} \tag{3.76}$$

Wegen $K_{tp1} > 0$ und $K_{tp2} > 0$ sind die ersten drei Terme in (3.76) nichtnegativ. Daher muss für den Beweis der thermodynamischen Konsistenz des Modells lediglich der letzte Term untersucht werden. Unter Berücksichtigung der Beziehung (3.40) bleibt zu prüfen, ob der Zusammenhang

$$- \sum_{i=1}^4 Z_i \dot{z}_i = -\rho_0 \sum_{i=1}^4 (\theta - \theta_0^{(i,2)}) \frac{Q_{i,2}^*}{\theta_0^{(i,2)}} \dot{z}_i \geq 0 \tag{3.77}$$

erfüllt ist. Übersteigt die Temperatur θ die Gleichgewichtstemperatur $\theta_0^{(i,2)}$, setzt die Umwandlung des Ausgangsgefüges zum Austenit ein. Damit sinkt der Phasenanteil des Ausgangsgefüges z_1 ($\dot{z}_1 \leq 0$) entsprechend. Daraus folgt, dass der Summand $(\theta - \theta_0^{(1,2)}) \frac{Q_{1,2}^*}{\theta_0^{(1,2)}} \dot{z}_1$ negativ ist. Während der Umwandlung von 2 \rightarrow 3, 4 (Austenit zu Bainit oder Martensit) gilt hingegen $\theta_0^{(i,2)} > \theta$ und $\dot{z}_3, \dot{z}_4 \geq 0$. Auch bei dieser Transformation sind die Summanden $(\theta - \theta_0^{(3,2)}) \frac{Q_{3,2}^*}{\theta_0^{(3,2)}} \dot{z}_3$ und $(\theta - \theta_0^{(4,2)}) \frac{Q_{4,2}^*}{\theta_0^{(4,2)}} \dot{z}_4$ negativ. Durch Multiplikation mit der negativen Dichte ($-\rho_0$) wird Gleichung (3.77) positiv bzw. gleich Null. Somit kann festgestellt werden, dass das betrachtete Modell thermodynamisch konsistent ist. Darüber hinaus ist dieser Beweis unabhängig von den Spezialansätzen der Evolutionsgleichungen für die Phasenumwandlung, wie z.B. Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogoroff oder Koistinen-Marburger.

3.3 Numerische Implementierung

3.3.1 Implizites Integrationsschema

Um die konstitutiven Gleichungen aus Abschnitt 3.1 numerisch zu implementieren, wird nach der Standardintegrationsmethode der Finite-Elemente-Methode ein verzerrungsgesteuerter Algorithmus verwendet, wobei der Gesamtverzerrungstensor ${}^{n+1}\boldsymbol{\varepsilon}$, die Anfangswerte von ${}^n\boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$, ${}^n\boldsymbol{\varepsilon}^{tp}$, ${}^n e_v$ und die Temperatur ${}^n\theta$, ${}^{n+1}\theta$ vorgegeben sind (vgl. dazu SIMO und HUGHES [117] sowie die Referenzen darin). Hierbei beziehen sich die Indizes n und $n+1$ auf die Zeit ${}^n t$ bzw. ${}^{n+1} t$, $\Delta^{n+1} t = {}^{n+1} t - {}^n t$ kennzeichnen den Zeitschritt. Diese Größen lassen sich als Inputvariablen zusammenfassen

$${}^{n+1}\mathbf{q} = [{}^{n+1}\boldsymbol{\varepsilon}, {}^n\boldsymbol{\varepsilon}^{vp}, {}^n\boldsymbol{\varepsilon}^{tp}, {}^n e_v, {}^n\theta, {}^{n+1}\theta, {}^n t, {}^{n+1} t]. \tag{3.78}$$

Zur Vereinfachung der Darstellung wird der auf die aktuelle Zeitstufe verweisende Index $n+1$ im Folgenden vernachlässigt.

Die primäre Zielsetzung dieses Abschnitts ist die Bestimmung der korrespondierenden Outputvariablen

$$\mathbf{Q} = [\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}, \boldsymbol{\varepsilon}^{tp}, e_v], \tag{3.79}$$

die mit den Evolutionsgleichungen aus Abschnitt 3.1 konsistent sind. Es wird darauf hingewiesen, dass die Verzerrungstensoren $\boldsymbol{\varepsilon}^\theta$ und $\boldsymbol{\varepsilon}^{tv}$ vom Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ in Gleichung (3.2) unabhängig sind. Unter Verwendung des impliziten Euler-Algorithmus in Bezug auf Evolutionsgleichungen (3.48) ergeben sich die Ausdrücke für die Verzerrungstensoren $\boldsymbol{\varepsilon}^{tp}$, $\boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$ bzw. die inelastische äquivalente Vergleichsdehnung e_v

$$\begin{aligned}
1. \quad \epsilon^{tp} &= {}^n\epsilon^{tp} + \Delta\epsilon^{tp}, \quad \text{mit} \quad \Delta\epsilon^{tp} = 3K_{tpB}[\sigma_v]\sigma^{\text{dev}}\Delta z_3 z_2 + 3K_{tpM}[\sigma_v]\sigma^{\text{dev}}\Delta z_4 z_2, \\
2. \quad \epsilon^{vp} &= {}^n\epsilon^{vp} + \Delta\epsilon^{vp}, \quad \text{mit} \quad \Delta\epsilon^{vp} = \sqrt{\frac{3}{2}}\Delta\lambda \mathbf{n}, \\
3. \quad e_v &= {}^n e_v + \Delta e_v, \quad \text{mit} \quad \Delta e_v = \Delta\lambda = \left\langle \frac{\Phi_Y}{K_\lambda} \right\rangle^m \Delta t.
\end{aligned} \tag{3.80}$$

Im nächsten Schritt erfolgt die Ermittlung des elastischen Verzerrungstensors aus Gleichung (3.2) für den Zeitpunkt ${}^{n+1}t$

$$\epsilon^{el} = \epsilon - \epsilon^{tp} - \epsilon^{vp} - \epsilon^\theta - \epsilon^{tv}. \tag{3.81}$$

Die Multiplikation von Gleichung (3.81) mit dem Elastizitätstensor vierter Stufe aus Gleichung (3.35) unter Berücksichtigung der Gleichungen (3.80) liefert nach einigen Umstellungen folgende Diskretisierung der Gleichungen (3.48) und (3.45):

$$\begin{aligned}
1. \text{ Spannungen} \quad \sigma &= \sigma^{\text{vol}} + \sigma^{\text{dev}}, \quad \text{mit} \\
\sigma^{\text{dev}} &= \sigma^{\text{dev, tr}} - 2G\Delta\epsilon^{vp} - 2G\Delta\epsilon^{tp}, \\
\sigma^{\text{dev, tr}} &= 2G\mathbf{I}^{\text{dev}} : (\epsilon - {}^n\epsilon^{vp} - {}^n\epsilon^{tp}), \\
\sigma^{\text{vol}} &= K(\text{tr}(\epsilon - \epsilon^\theta - \epsilon^{tv})) \mathbf{1}, \\
2. \text{ Fließregel} \quad \Delta\epsilon^{vp} &= \sqrt{\frac{3}{2}}\Delta\lambda \mathbf{n}, \\
3. \text{ Fließrichtung} \quad \mathbf{n} &= \frac{\sigma^{\text{dev}}}{\|\sigma^{\text{dev}}\|}, \\
4. \text{ Fließfaktor} \quad \Delta\lambda &= \left\langle \frac{\Phi_Y}{K_\lambda} \right\rangle^m \Delta t, \\
5. \text{ Umwandlungsplastische Verzerrung} \quad \Delta\epsilon^{tp} &= 3\sigma^{\text{dev}} z_2 (K_{tpB}[\sigma_v]\Delta z_3 + K_{tpM}[\sigma_v]\Delta z_4), \\
6. \text{ Fließfunktion} \quad \Phi_Y &= \sqrt{\frac{3}{2}}\|\sigma^{\text{dev}}\| - R - Y_0, \\
7. \text{ Äquivalente plastische Verzerrung} \quad e_v &= {}^n e_v + \Delta\lambda, \\
8. \text{ Isotrope Verfestigung} \quad R &= H e_v + Q(1 - \exp(-b e_v)).
\end{aligned} \tag{3.82}$$

Die Verzerrungstensoren ϵ^θ und ϵ^{tv} werden an dieser Stelle auf der Grundlage der Gleichungen (3.54) und (3.57) ermittelt. Die Beziehungen (3.82) können als Zustandsgleichungen für die Outputvariablen \mathbf{Q} , die in Gleichung (3.79) definiert sind, betrachtet werden. Im folgenden Abschnitt wird gezeigt, wie Gleichungen (3.82) auf eine eindimensionale skalare Gleichung reduziert werden können.

3.3.2 Lokale Iteration

Die folgenden Ableitungen machen von der Tatsache Gebrauch, dass die Ausdrücke für σ^{dev} in Gleichung (3.82.1) umformuliert werden können

$$\sigma^{\text{dev}} = \sigma^{\text{dev, tr}} - 2G\sqrt{\frac{3}{2}}\Delta\lambda \frac{\sigma^{\text{dev}}}{\|\sigma^{\text{dev}}\|} - 2G3\sigma^{\text{dev}} z_2 (K_{tpB}[\sigma_v]\Delta z_3 + K_{tpM}[\sigma_v]\Delta z_4), \tag{3.83}$$

wobei Gleichungen (3.82.2), (3.82.3) sowie (3.82.5) verwendet wurden. Die Anwendung der Radial-Return-Methode [117] auf Gleichung (3.83) liefert folgende Anpassung der Gleichungen (3.82): Als erstes wird beobachtet, dass σ^{dev} und $\sigma^{\text{dev,tr}}$ koaxial sind, so dass die Fließrichtung in Gleichung (3.82.3) wie folgt ausgedrückt wird:

$$\mathbf{n} = \frac{\sigma^{\text{dev}}}{\|\sigma^{\text{dev}}\|} = \frac{\sigma^{\text{dev,tr}}}{\|\sigma^{\text{dev,tr}}\|}. \quad (3.84)$$

Im zweiten Schritt wird die skalare Beziehung erzeugt

$$\begin{aligned} \|\sigma^{\text{dev}}\| &= \frac{\|\sigma^{\text{dev,tr}}\| - 2G\sqrt{\frac{3}{2}}\Delta\lambda}{C_p}, \quad \text{mit} \\ C_p &= 1 + 3Gf'_1 (\Delta z_3 K_{tpB}[\sigma_v] + \Delta z_4 K_{tpM}[\sigma_v]). \end{aligned} \quad (3.85)$$

Als nächstes erfolgt die Bestimmung des Residuums aus Gleichung (3.82.4)

$$r(\Delta\lambda) = \Phi_Y - \left(\frac{\Delta\lambda}{\Delta t}\right)^{\frac{1}{m}} K_\lambda = 0, \quad (3.86)$$

das sich durch Verwendung der Fließbedingung (3.82.6) und des Ergebnisses aus (3.85) umformulieren lässt

$$r(\Delta\lambda) = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\|\sigma^{\text{dev,tr}}\| - 2G\sqrt{\frac{3}{2}}\Delta\lambda}{C_p} - \left(\frac{\Delta\lambda}{\Delta t}\right)^{\frac{1}{m}} K_\lambda - R(\Delta\lambda) - Y_0 = 0. \quad (3.87)$$

In dieser Weise werden die diskreten Gleichungen (3.82) auf ein eindimensionales Problem reduziert, das lediglich vom Fließfaktor $\Delta\lambda$ abhängig ist. Für dessen Lösung wird die Newton-Methode eingesetzt

$$\begin{aligned} \Delta\lambda_{(k+1)} &= \Delta\lambda_k - \frac{r(\Delta\lambda_k)}{J(\Delta\lambda_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \\ J(\Delta\lambda) &= \frac{\partial r(\Delta\lambda)}{\partial \Delta\lambda} = \frac{\partial \Phi_Y}{\partial \Delta\lambda} - \frac{K_\lambda}{m} \frac{1}{\Delta t}, \\ \frac{\partial \Phi_Y}{\partial \Delta\lambda} &= - \left(\frac{3G}{C_p} + H + bQ \exp(-b(n_{e_v} + \Delta\lambda)) \right), \end{aligned} \quad (3.88)$$

wobei sich der Index k auf die Iterationsnummer bezieht.

3.3.3 Tangentenmodul

Die meisten impliziten Finite-Element-Implementierungen, wie beispielsweise das FEM-Programm ABAQUS/Standard verwenden zur Lösung der Differentialgleichungen des globalen Gleichgewichtsproblems die iterative Newton-Methode. Bei dieser Methode ist die Bestimmung des Tangentenmoduls, das durch die Ableitung der Spannung σ in Bezug auf die Totalverzerrung ε formuliert wird, notwendig. Da die Spannung σ außerdem vom plastischen Multiplikator $\Delta\lambda$ abhängig ist, gilt

$$\sigma = \sigma(\varepsilon, \Delta\lambda(\varepsilon)) \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial \sigma}{\partial \Delta\lambda} \otimes \frac{\partial \Delta\lambda}{\partial \varepsilon}. \quad (3.89)$$

Hiebei erhält man $\partial \Delta\lambda / \partial \varepsilon$ aus der Residuungleichung (3.86)

$$r(\epsilon, \Delta\lambda(\epsilon)) = 0 \Rightarrow \frac{dr}{d\epsilon} = \frac{\partial r}{\partial \epsilon} + \frac{\partial r}{\partial \Delta\lambda} \otimes \frac{\partial \Delta\lambda}{\partial \epsilon} \Rightarrow \frac{\partial \Delta\lambda}{\partial \epsilon} = - \left(\frac{\partial r}{\partial \Delta\lambda} \right)^{-1} \frac{\partial r}{\partial \epsilon}. \quad (3.90)$$

Im nächsten Schritt erfolgt die Auswertung des Ergebnisses $\partial r / \partial \Delta\lambda = J$ in Gleichung (3.88) und die Bestimmung der partiellen Ableitungen

$$\begin{aligned} 1. \quad \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon} &= K \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \frac{2G}{C_p} \left(\mathbf{I}^{\text{dev}} - \sqrt{\frac{3}{2}} \Delta\lambda \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \epsilon} \right), \text{ mit} \\ 2. \quad \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \epsilon} &= \frac{2G}{\|\sigma^{\text{dev, tr}}\|} (\mathbf{I}^{\text{dev}} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}), \\ 3. \quad \frac{\partial \sigma}{\partial \Delta\lambda} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{2G}{C_p} \mathbf{n}, \\ 4. \quad \frac{\partial r}{\partial \epsilon} &= \frac{2G}{C_p} \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Daraus ergibt sich das Endergebnis für den symmetrische Tangentenmodul

$$\begin{aligned} \mathbb{C} = \frac{d\sigma}{d\epsilon} &= K \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \frac{2G}{C_p} \mathbf{I}^{\text{dev}} - \sqrt{\frac{3}{2}} \Delta\lambda \frac{(2G)^2}{C_p} \frac{1}{\|\sigma^{\text{dev, tr}}\|} (\mathbf{I}^{\text{dev}} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \\ &\quad - \sqrt{\frac{3}{2}} \left(\frac{2G}{C_p} \right)^2 \frac{1}{J} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (3.92)$$

Bezüglich der Definitionen von C_p und J wird auf die Gleichungen (3.85.2) und (3.88) verwiesen.

3.4 Parameteridentifikation

Um bei einer Simulation des Hybridumformprozesses möglichst gute Vorhersagen treffen zu können, wurde in Abschnitt 3.2 auf der Grundlage von experimentellen Daten ein Materialmodell entwickelt, das die beobachteten Phänomene qualitativ beschreiben kann. Die Parameteridentifikation beschäftigt sich zusätzlich mit der Bestimmung der im Modell ermittelten Materialparameter auf der Grundlage eines Vergleichs zwischen den experimentellen und den simulierten Daten. Für die Parameteridentifikation wird das im Rahmen der Habilitation von MAHNKEN [48] entwickelte Optimierungsprogramm „PARA“ verwendet. Es basiert auf dem „Simplex Algorithmus von Nelder und Mead“, der auch unter dem Begriff „Downhill Simplex“ bekannt ist und ermöglicht ausgehend von einem aktuellen Parametervektor die Generierung eines neuen Parametervektors, der die Zielfunktion minimiert. Als Zielfunktion wird ein Fehlerquadratfunktional verwendet

$$f[\kappa] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_{\text{daten}}} (d_i[\kappa] - \bar{d}_i)^2. \quad (3.93)$$

Die Differenz zwischen den experimentell gemessenen Größen \bar{d} und den errechneten Größen $d[\kappa]$ in Abhängigkeit von den Parametern κ in einem identischen Zeitpunkt wird quadriert und über die Anzahl der vorhandenen Versuchsdaten aufsummiert. Die simulierten Größen werden im Unterprogramm „UMA“, das das direkte Problem an einem Materialpunkt löst, ermittelt.

Ein schematischer Ablaufplan zur Parameteridentifikation ist in Abbildung 3.6 dargestellt. Die Parameteridentifikation erfolgt in mehreren Etappen. Als erstes werden vorhandene Versuchsdaten in die Input-Dateien (*.dat) eingetragen. Die Startwerte sind ausschlaggebend für die Qualität der Pa-

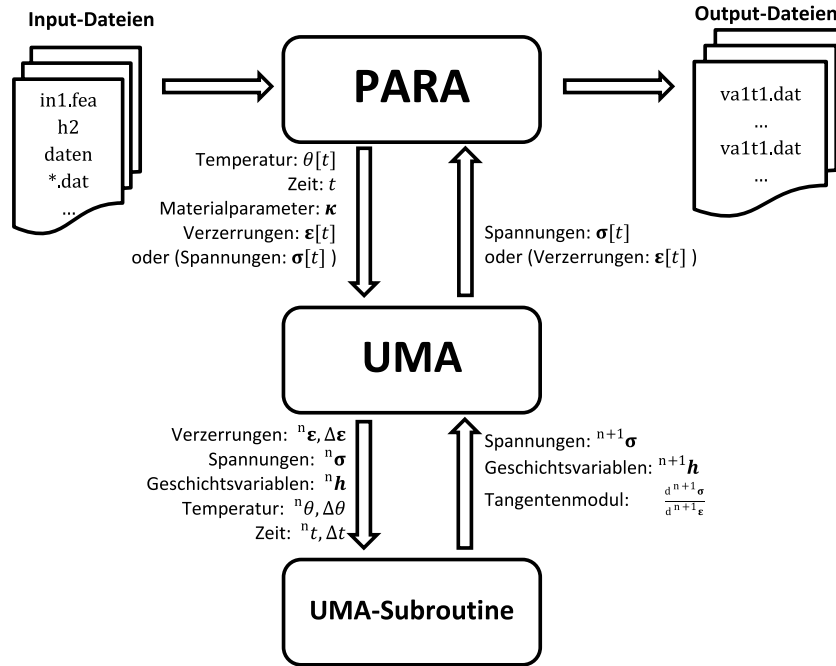


Abb. 3.6 Ablaufdiagramm der Parameteridentifikation

parameteridentifikation. Es gilt hier zu berücksichtigen, dass zwecks Einsparung der Rechenzeit die Parameteridentifikation zur Anpassung der gemessenen und simulierten Kurve nur lokale Minima ermittelt werden. Es ist daher möglich, dass bei der Wahl eines ungünstigen Startwerts das lokale Minimum nicht gleichzeitig das globale Minimum ist. Diese Problematik wird durch Variierung der Startwerte behoben. Während der Parameteridentifikation werden, wie in Abbildung 3.6 dargestellt, Werte an die „UMA“ Subroutine übergeben, die die Funktion eines FEM-Programms simuliert und eindimensionale Berechnungen durchführt. Hier werden Verzerrungen, Spannungen und innere Variablen ermittelt und an die Materialroutine „kbtrip.f“, welche die konstitutiven Gleichungen des Modells beinhaltet, übergeben. Diese Materialroutine berechnet die neuen Spannungen, die Geschichtsvariablen sowie den konsistenten Tangentenoperator und gibt diese an die „UMA“ Subroutine zurück. Diese wiederum liefert die Spannungen an die „PARA“ Subroutine, die die Parameteridentifikation mittels eines Fehlerquadratfunktional durchführt. Diese Schritte werden so oft durchlaufen, bis die „PARA“ Subroutine Minima des Fehlerquadrats und somit Parameter gefunden hat oder eine Toleranzgrenze erreicht ist, bei deren Erreichen das Programm abgebrochen wird. Das Einbinden der konstitutiven Gleichungen des Modells in Abaqus geschieht durch den Austausch der „UMA“ Subroutine mit der in Abaqus zur Verfügung gestellten Schnittstelle „UMAT“. Mit den ermittelten Parametern kann nun das experimentell ermittelte Materialverhalten in Abaqus angewendet werden. Die Parameteridentifikation des oben beschriebenen Materialmodells wird im folgenden Abschnitt beispielhaft dargestellt.

3.4.1 Phasenumwandlungen

3.4.1.1 Inkubationszeit und Kinetik der bainitischen Phase

Als erstes werden die Parameter, die für die Keimbildung des bainitischen Gefüges zuständig sind, auf Basis des isothermen ZTU-Diagramms (Abb. 3.5) ermittelt. Dabei entspricht die im ZTU-Diagramm

abgebildete Inkubationszeit dem Zeitpunkt t^* , bei dem der Keimradius r mit dem kritischen Keimradius r^* übereinstimmt. Die temperaturabhängige Inkubationszeit kann beim isothermen Verlauf durch Lösung der Differenzialgleichung (3.68) und anschließender Gleichsetzung mit Gleichung (3.69.1) mit Hilfe der Randbedingung

$$\theta = \text{Konst.}, \quad e_v = 0, \quad t \in [0, t^{in}] \quad (3.94)$$

definiert werden

$$t^{in}[\theta] = \frac{A_1 \theta_0 \Delta \theta^{0.5}}{\theta \Delta \theta Q^* \alpha_2 \exp \left[-\frac{|\theta - \theta^*|}{B_u \langle \theta - \theta^* \rangle + B_l \langle \theta^* - \theta \rangle} \right]}. \quad (3.95)$$

Damit lässt sich die Inkubationszeit anhand der Materialparameter $\kappa_{it} = [Q^*, B_u, B_l, \alpha_2, A_1]$ errechnen.

Als Zielfunktion der Parameteridentifikation wird folgendes Fehlerquadratfunktional verwendet:

$$f(\kappa) = \frac{1}{2} \left\| \underline{t}^{in}(\kappa) - \bar{\underline{t}}^{in} \right\|^2 \rightarrow \min, \quad (3.96)$$

mit $\underline{t}^{in} = [t_1^{in}(\kappa), \dots, t_{ndt}^{in}(\kappa)]^T$, $\bar{\underline{t}}^{in} = [\bar{t}_1^{in}, \dots, \bar{t}_{ndt}^{in}]^T$.

Die Lösung dieses indirekten Optimierungsproblems erfolgt mit Hilfe des nichtlinearen Optimierungstools GRG2 (Generalized Reduced Gradient) von Microsoft Excel Solver. $\underline{t}^{in}(\kappa)$ und $\bar{\underline{t}}^{in}$ stellen entsprechend die errechnete und die experimentelle Inkubationszeit dar. ndt repräsentiert die Anzahl der experimentellen Daten der Inkubationszeitkurve $[t(r = r^*)]$.

Die Endergebnisse des Parametervektors κ_{it} sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst. In Abbildung 3.7 wird der Vergleich zwischen der Inkubationszeitkurve aus dem ZTU-Diagramm (Abb. 3.5) und der errechneten Inkubationszeit veranschaulicht. Es zeichnet sich hierbei eine sehr gute Übereinstimmung ab.

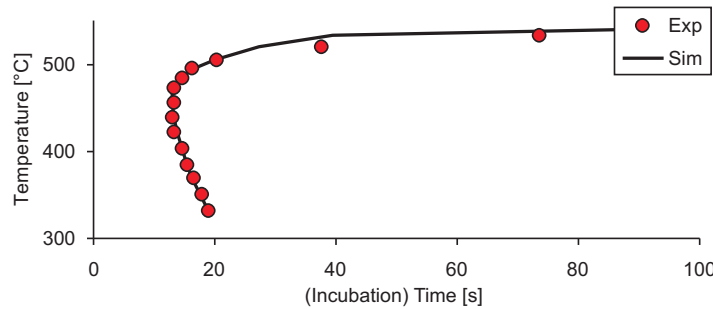


Abb. 3.7 Inkubationszeitkurve der bainitischen Phase (Punkte: experimentelle Ergebnisse, Linien: Simulationsergebnisse)

Den nächsten Schritt der Parameteridentifikation stellt die Ermittlung des Parametersvektors κ_{z3} dar. Als Zielfunktion im Optimierungsverfahren wird ein Fehlerquadratfunktional verwendet

$$f(\kappa) = \frac{1}{2} \left\| \underline{z}(\kappa) - \bar{\underline{z}} \right\|^2 \rightarrow \min, \quad \text{mit } \underline{z} = [z_1(\kappa), \dots, z_{ndz}(\kappa)]^T, \quad \bar{\underline{z}} = [\bar{z}_1, \dots, \bar{z}_{ndz}]^T. \quad (3.97)$$

Das Optimierungsproblem wird mit Hilfe des Programms PARA unter Einsatz des Simplex Nelder Algorithmus gelöst. Die Ergebnisse der Optimierung werden in Abbildung 3.8 wiedergegeben. Es zeichnet sich eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen Daten und Ergebnissen der Simulation ab. Die hier ermittelten Parameter κ_{z3} sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

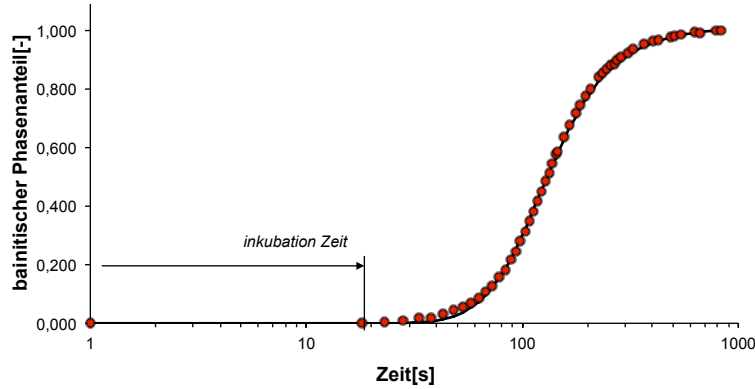


Abb. 3.8 Evolution des Volumenanteils der bainitischen Phase, isotherm bei 340 °C (Punkte: experimentelle Ergebnisse, Linien: Simulationsergebnisse)

3.4.1.2 Umwandlungsplastizität

Im nächsten Schritt der Identifikation erfolgt eine Konzentration auf die in Abbildung 2.18 dargestellten experimentellen Ergebnisse für die isothermen spannungsgesteuerten Tests, die die Umwandlungsplastizität repräsentieren. Die Formulierung eines Fehlerquadrat-Minimierungsproblems, das die Differenz zwischen den simulierten und den experimentellen Daten berücksichtigt (siehe dazu beispielsweise MAHNKEN [85]), erfolgt hierbei auf Basis der Längsdehnungen

$$f(\kappa) = \frac{1}{2} \|\underline{\varepsilon}(\kappa) - \underline{\bar{\varepsilon}}\| \rightarrow \min, \quad \text{mit } \underline{\varepsilon} = [\varepsilon_1(\kappa), \dots, \varepsilon_{nde}(\kappa)]^T, \quad \underline{\bar{\varepsilon}} = [\bar{\varepsilon}_1, \dots, \bar{\varepsilon}_{nde}]^T. \quad (3.98)$$

Hierbei kennzeichnet nde die Anzahl der experimentellen Daten für verschiedene Dehnungen. Um ein lokales Minimum zu bestimmen, sind zahlreiche Iterationsschritte im Optimierungsvorgang notwendig. Das Ergebnis der Parameteridentifikation liefert die Approximation für die Parameter K_{tp1} und K_{tp2} in Gleichung (3.46). Abbildung 3.9 zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen und simulierten Daten.

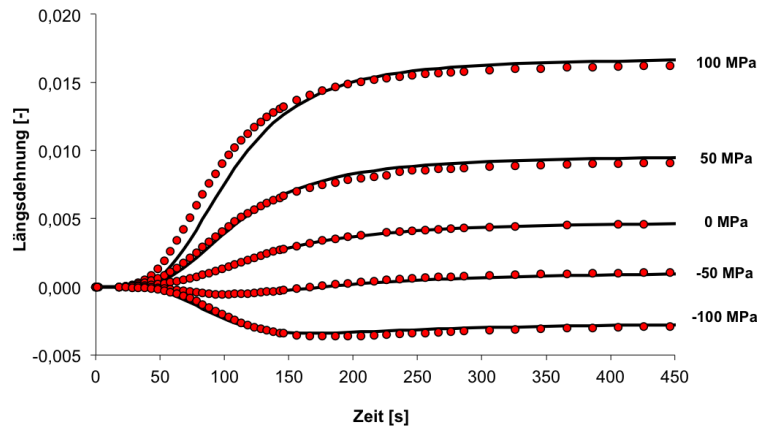


Abb. 3.9 Dehnungs-Zeit-Diagramm für verschiedene Spannungen und Umwandlungsplastizitäten (Punkte: experimentelle Ergebnisse, Linien: Simulationsergebnisse)

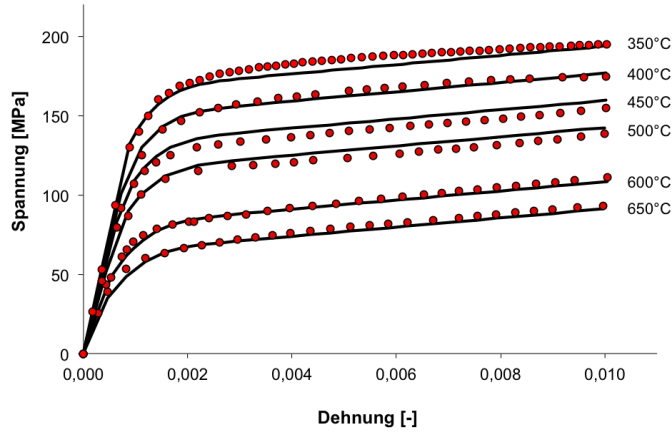


Abb. 3.10 Spannungs-Dehnungsdiagramm (Punkte: experimentelle Ergebnisse, Linien: Simulationsergebnisse)

3.4.2 Elasto-Viskoplastizität des unterkühlten Austenits

Die Verifizierung der mechanischen Eigenschaften des Modells erfolgt in zwei Schritten. Im ersten Schritt werden die Parameter bestimmt, die direkt aus den Versuchsergebnissen abgeleitet werden können. Dazu gehören Parameter, die das elastische Verhalten des Materials beschreiben $\kappa_{el} = [E_0, c_E, \rho, \nu[-]]$. Der Elastizitätsmodul E_0 und dessen Temperaturkoeffizient c_E lassen sich direkt aus Diagramm 3.2 bestimmen. Die Querkontraktion ν und die Dichte ρ werden dem Werkstoffdatenblatt (1.8159 Dörrenberg Edelstahl GmbH) entnommen. Die Parameter $\kappa_{vp} = [Y_0, c_Y, H, Q, b, K_\lambda, m]$ aus Gleichung (3.53) lassen sich nicht direkt aus den experimentellen Daten ablesen und müssen daher im zweiten Schritt erst mit Hilfe des Parameteridentifikationsprogramms „PARA“ ermittelt werden. Zu diesem Zweck werden die experimentellen Spannungs-Dehnungs-Kurven verwendet (Abb. 3.10). Aus der Verbindung von experimentellen Ergebnissen mit den Resultaten der Simulation ergibt sich das Fehlerquadrat-Minimierungsproblem mit der Zielfunktion:

$$f(\kappa) = \frac{1}{2} \|\underline{\sigma}(\kappa) - \underline{\bar{\sigma}}\| \rightarrow \min, \text{ mit } \underline{\sigma} = [\sigma_1(\kappa), \dots, \sigma_{nde}(\kappa)]^T, \underline{\bar{\sigma}} = [\bar{\sigma}_1, \dots, \bar{\sigma}_{nde}]^T. \quad (3.99)$$

Die Resultate der Parameteridentifikation, die auf der Grundlage des Vergleichs zwischen Versuchs- und Simulationsergebnissen ermittelt wurden, zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die daraus resultierenden Parameter κ_{el} und κ_{vp} sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

Fazit

In diesem Kapitel wird ein makroskopisch-phänomenologisches Mehrphasenmodell auf der Grundlage der geometrisch linearen Theorie entwickelt. Im Rahmen dieses Modells werden die zeit- und temperaturabhängige Phasenumwandlung, Austenitisierung des Ausgangsgefüges und die aus der Phasenumwandlung resultierenden Effekte, wie Umwandlungsplastizität, Volumenveränderung sowie temperatur- und mikrostrukturabhängige Elasto- bzw. Viskoplastizität abgebildet und analysiert. Die Verwendung dieses Ansatzes in der makroskopischen Modellierung der bainitischen Umwandlung unter Betrachtung der Evolution der Keimradien sowohl für den oberen als auch für den unteren Bainit gestattet die Abbildung des unsymmetrischen Inkubationszeitverlaufs sowie eine Entwicklung der Evolutionsgleichungen der bainitischen Phase unter Verwendung der treibenden Kräfte.

κ_{el} :	E_0 [MPa]	c_E [$\frac{\text{MPa}}{\text{K}}$]	θ_{E_0} [K]	ν [-]	ρ [$\frac{\text{kg}}{\text{mm}^3}$]	
	2.2581E+05	2.1292E+02	293	0.23	7.83E-06	
κ_{vp} :	Y_0 [MPa]	c_Y [-]	θ_{Y_0} [K]	m [-]	D [MPa]	
	2.52001E+04	0.344	293	1.0	1.0E-09	
	H_p [GPa]	Q_0 [MPa]	b [-]			
	5.27	2.8085E+03	3.62E+01			
κ_θ :	α_1 [$\frac{1}{\text{K}}$]					
	0.12776E-04					
κ_r :	A_1 [-]	θ_0 [K]	θ^* [K]	α_i^θ [s^{-1}]	B_u [K]	B_l [K]
	3.8568E+04	850	826	3.3931E-03	0.11294E+03	0.20539E+03
κ_{z2} :	A_{c1} [K]	μ [$\frac{1}{\text{K}}$]				
	850	1.2106E-02				
κ_{z3} :	A_5 [-]	B_1 [K]	n [-]	γ [-]	A_3 [-]	Q^* [-]
	3.3245E-04	26.44	22.65	1.66	0.1E-03	3.0843E+05
κ_{z4} :	M_s [K]	k_θ [K]				
	5.647E+02	8.264E+01				
κ_{tp} :	K_{tp1B} [$\frac{1}{\text{MPa}}$]	K_{tp2B} [$(\frac{1}{\text{MPa}})^2$]	K_{tp1M} [$\frac{1}{\text{MPa}}$]	K_{tp2M} [$(\frac{1}{\text{MPa}})^2$]		
	0.76243E-04	0.47E-06	6.1469E-05	5.8669E-07		
κ_{tc} :	λ_θ [$\frac{\text{W}}{\text{mmK}}$]	c_d [$\frac{\text{J}}{\text{kgK}}$]				
	4.6E-02	4.52E+02				

Tabelle 3.1 Materialparameter für den niedriglegierten Stahl 51CrV4

Kapitel 4

Phänomenologische Modellierung für große Deformationen

Im betrachteten Hybridumformprozesses tritt eine massive Umformung im Flanschbereich auf. Um diesen Vorgang simulieren zu können, bedarf es der Entwicklung eines makroskopischen Modells, das große Deformationen berücksichtigt. Dessen Formulierung erfolgt hierbei auf der Grundlage des im vorigen Kapitel entwickelten Modells. Im ersten Schritt werden basierend auf der Theorie der Kontinuumsthermodynamik unter besonderer Berücksichtigung der unterschiedlichen Phasen n_z und des viskoplastischen Materialverhaltens konstitutive Gleichungen abgeleitet. Im Anschluss daran wird das Modell auf den Hybridumformprozess angepasst. Die im Rahmen dieser Adaptation entwickelten Gleichungen des Prototypmodells werden numerisch implementiert und anschließend zur Simulation des Hybridumformprozesses verwendet.

4.1 Thermodynamisch konsistente Formulierung

4.1.1 Kinematik

Analog zum Abschnitt 3.1.1 wird ein Körper \mathbf{B} betrachtet, der aus einer Menge von materiellen Punkten in einem dreidimensionalen Euklidischen Raum \mathbb{R}^3 besteht. Jeder Materialpunkt $X \in \mathbf{B}$ wird durch seinen Ortsvektor $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_0 \subset \mathbb{R}^3$ identifiziert (Abb. 4.1). \mathcal{B}_0 stellt die Referenzkonfiguration dar, die der unbelastete Körper bei vorgegebener Referenztemperatur einnimmt. Die eindeutige Abbildung $\varphi : \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{R}^3$ zur Beschreibung der Konfiguration des Körpers bei variierender Zeit $t \in \mathbb{R}_+$ platziert die Materialpunkte des Körpers \mathbf{B} in \mathbb{R}^3 . Die Funktion $\varphi_t = \varphi[\bullet, t]$ bildet die Partikelposition $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$ in ihrer aktuellen Position $\mathbf{x} = \varphi_t[\mathbf{X}]$ der deformierten Konfiguration \mathcal{B} zum Zeitpunkt t ab und beschreibt somit die Bewegung des Körpers in Bezug auf die festgelegte Referenzkonfiguration.

Der Deformationsgradient \mathbf{F} wird für den Zeitpunkt t definiert als

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \varphi_t[\mathbf{X}]}{\partial \mathbf{X}}. \quad (4.1)$$

Die für die Transformation der Volumenelemente der Ausgangskonfiguration \mathcal{B}_0 in die Momentankonfiguration \mathcal{B} geltende Jacobi-Determinante des Deformationsgradienten wird wie folgt festgelegt:

$$1. \ J = \det \mathbf{F}, \quad 2. \ dv = JdV. \quad (4.2)$$

Durch die Bedingung $J > 0$ werden Materialdurchdringungen ausgeschlossen. Der Deformationsgradient $\mathbf{F} : T\mathcal{B}_0 \rightarrow T\mathcal{B}$ definiert eine Abbildung von Inkrementen $d\mathbf{X} \in T\mathcal{B}_0$ des lokalen Tangentenraumes $T\mathcal{B}_0$ (Referenzkonfiguration) nach Inkrementen $d\mathbf{x} \in T\mathcal{B}$ des lokalen Tangentenraumes $T\mathcal{B}$ (Momentankonfiguration). Zur Parametrisierung der Referenz- und Momentankonfiguration

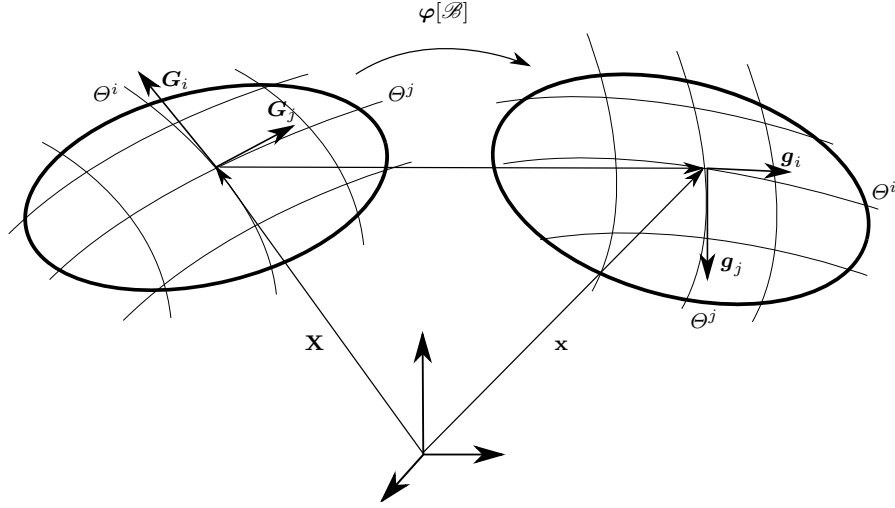


Abb. 4.1 Konvektive Koordination der Konfigurationen \mathcal{B}_0 und \mathcal{B} [150]

werden konvektive Koordinaten Θ mit den Tangentenräumen $T\mathcal{B}_0$ und $T\mathcal{B}$ und den entsprechenden kovarianten Metriktensoren $\mathbf{G}^b, \mathbf{g}^b$ verwendet.

Im Rahmen dieser Analyse wird in Bezug auf das elastoplastische Verhalten unter Berücksichtigung der Phasenumwandlung in Anlehnung an das Multi-Mechanismen-Plastizitätsmodell von MAHNKEN *et al.* [91] von einer multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten in einen volumetrischen Teil \mathbf{F}^{vol} und einen isochoren Teil \mathbf{F}^{iso} ausgegangen

$$\begin{aligned} 1. \quad \mathbf{F} &= \mathbf{F}^{vol} \cdot \mathbf{F}^{iso}, \quad \text{mit} \\ 2. \quad \mathbf{F}^{vol} &= J^{\frac{1}{3}} \mathbf{1}, \\ 3. \quad \mathbf{F}^{iso} &= \mathbf{F}_e^{iso} \cdot \mathbf{F}_i, \\ 4. \quad J &= J_e \cdot J_\theta \cdot J_z. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Dabei repräsentieren \mathbf{F}_e^{iso} und J_e den isochoren bzw. den volumetrischen Teil der elastischen Deformation bzw. Rotation und \mathbf{F}_i den inelastischen (plastischen und umwandlungsplastischen [TRIP]) Teil des Deformationsgradienten. Es wird davon ausgegangen, dass sowohl der thermische J_θ als auch der umwandlungsbedingte Deformationsgradient J_z nur volumetrische Anteile aufweist. Im Rahmen der multiplikativen Zerlegung wird neben der Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 und der momentanen Konfiguration \mathcal{B} die Zwischenkonfiguration $\bar{\mathcal{B}}$ eingeführt. Die dreifach verbundenen Tangentenräume $T\mathcal{B}_0$, $T\mathcal{B}$ und $T\bar{\mathcal{B}}$ sind mit kovarianten Metriktensoren $\mathbf{G}^b, \mathbf{g}^b, \bar{\mathbf{G}}^b$ ausgestattet und korrespondieren mit den zweifach verbundenen Tangentenräumen $T\mathcal{B}^*, T\bar{\mathcal{B}}^*$. $T\bar{\mathcal{B}}^*$ stimmt mit kontravarianten Metriktensoren $\mathbf{G}^\sharp = (\mathbf{G}^b)^{-1}$, $\mathbf{g}^\sharp = (\mathbf{g}^b)^{-1}$, $\bar{\mathbf{G}}^\sharp = (\bar{\mathbf{G}}^b)^{-1}$ überein (siehe dazu beispielsweise MAHNKEN [86], MARSDEN & HUGHES [93] und GIESSEN & KOLLMANN [43]).

Die Tensorenobjekte können zur Definition von Invarianten der Tensoren zweiter Stufe verwendet werden. Hier erfolgt die Definition eines gemischtvarianten Tensors zweiter Stufe $\bar{\mathbf{A}}' = \bar{\mathbf{A}}_i^j \bar{\mathbf{G}}^i \otimes \bar{\mathbf{G}}_j$ bezogen auf die Zwischenkonfiguration

$$\bar{A}'_{I_i} := \frac{1}{i} \bar{\mathbf{I}}^\lambda : (\bar{\mathbf{A}}')^i = \frac{1}{i} \bar{\mathbf{I}}' : (\bar{\mathbf{A}}')^i = \frac{1}{i} \bar{\mathbf{G}}^\sharp : \left(\bar{\mathbf{A}}' \cdot \bar{\mathbf{G}}^b \right)^i, \quad i = 1, 2, 3. \tag{4.4}$$

$\bar{\mathbf{A}}^\lambda = \mathbf{G}^\sharp \cdot \bar{\mathbf{A}}' \cdot \mathbf{G}^b$ und $\bar{\mathbf{I}}^\lambda = \bar{\mathbf{G}}_i \otimes \bar{\mathbf{G}}^i = (\bar{\mathbf{I}}')^t$ stellen gemischtvariante Einheitstensoren zweiter Stufe mit den Basisvektoren $\bar{\mathbf{G}}_i$ and $\bar{\mathbf{G}}^i$ dar. Insofern repräsentiert Gleichung (4.4) Invarianten, die unter Verwendung des Zusammenhangs $\bar{\mathbf{I}}^\lambda = \bar{\mathbf{G}}^b \cdot \bar{\mathbf{G}}^\sharp$ als zweifache Paarung von ko- und kontravarianten

Tensoren ausgedrückt werden kann. Es gilt anzumerken, dass die Invarianten in Analogie mit (4.4) relativ zu der Referenzkonfiguration bzw. der räumlichen Konfiguration definiert werden können. Anschließend werden die gemischtvarianten Einheitstensoren zweiter Stufe $\mathbf{1}^i = \mathbf{G}_i \otimes \mathbf{G}^i = (\mathbf{1}')^i$ und $\mathbf{1}^i = \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}^i = (\mathbf{1}')^i$ eingeführt.

Die Ermittlung der Verzerrungstensoren kann mithilfe des Grundgerüsts der multiplikativen Plastizität erfolgen (siehe dazu z.B. HAUPT [54]). In dieser Arbeit sind für weitere Modellierung insbesondere folgende Größen von Interesse:

$$\begin{aligned} 1. \mathbf{C}_i^{-1} &:= {}^*\Phi_i^\sharp[\bar{\mathbf{G}}^\sharp] = \mathbf{F}_i^{-1} \cdot \bar{\mathbf{G}}^\sharp \cdot \mathbf{F}_i^{-t} = \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{b}_e \cdot \mathbf{F}^{-t} = {}^*\Phi^\sharp[\mathbf{b}_e], \\ 2. \mathbf{b}_e &:= {}^*\Phi_e^\sharp[\bar{\mathbf{G}}^\sharp] = \mathbf{F}_e \cdot \bar{\mathbf{G}}^\sharp \cdot \mathbf{F}_e^t = \mathbf{F} \cdot \mathbf{C}_i^{-1} \cdot \mathbf{F}^t = {}^*\Phi^\sharp[\mathbf{C}_i^{-1}]. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Hierbei stellen die Operatoren ${}^*\Phi_i^\sharp$, ${}^*\Phi^\sharp$, ${}^*\Phi_e^\sharp$, ${}^*\Phi^\sharp$ jeweils den inelastischen „pull-back“, den gesamten „pull-back“, den elastischen „push-forward“ und den gesamten „push-forward“ Operator der kontravarianten Tensoren dar. Diese Operatoren können als Erweiterungen der standardisierten „pull-back“ und „push-forward“ Operatoren, wie beispielsweise in MARSDEN UND HUGHES [93] oder SIMO UND HUGHES [117] beschrieben, betrachtet werden. Ein erweiterter Überblick über die Methoden ist in MAHNKEN [86] gegeben. Ferner repräsentieren \mathbf{C}_i^{-1} den inversen inelastischen rechten Cauchy-Green Tensor und \mathbf{b}_e den elastischen linken Cauchy-Green Tensor in Gleichung (4.5). Setzt man statt des kontravarianten Metrikensors $\bar{\mathbf{G}}^\sharp$ den kovarianten rechten elastischen Cauchy-Green Tensor

$$\bar{\mathbf{C}}_e = \mathbf{F}_e^t \cdot \mathbf{g}^b \cdot \mathbf{F}_e, \quad (4.6)$$

ein, lassen sich Relationen (4.5) wie folgt umformulieren:

$$\begin{aligned} 1. \mathbf{C} &:= {}^*\Phi_i^b[\bar{\mathbf{C}}_e] = \mathbf{F}_i^t \cdot \bar{\mathbf{C}}_e \cdot \mathbf{F}_i = \mathbf{F}^t \cdot \mathbf{g}^b \cdot \mathbf{F} = {}^*\Phi^b[\mathbf{g}^b], \\ 2. \mathbf{g}^b &:= {}^*\Phi_e^b[\bar{\mathbf{C}}_e] = \mathbf{F}_e^{-t} \cdot \bar{\mathbf{C}}_e \cdot \mathbf{F}_e^{-1} = \mathbf{F}^{-t} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{F}^{-1} = {}^*\Phi^b[\mathbf{C}]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Hierbei stellen die Operatoren ${}^*\Phi_i^b$, ${}^*\Phi^b$, ${}^*\Phi_e^b$, ${}^*\Phi^b$ jeweils den plastischen „pull-back“, den gesamten „pull-back“, den elastischen „push-forward“ und den gesamten „push-forward“ Operator des kovarianten Tensors dar. Des Weiteren bezieht sich \mathbf{C}_i^{-1} auf die Referenzkonfiguration und $\bar{\mathbf{C}}_e$ auf die Zwischenkonfiguration. Mit Hilfe des rechten Cauchy-Green Tensors \mathbf{C} lässt sich der Green'sche Verzerrungstensor

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{G}^b) \quad (4.8)$$

mit der Eigenschaft $\mathbf{F} = \mathbf{1} \implies \mathbf{E} = \mathbf{0}$ errechnen. Als Nächstes werden die multiplikative Zerlegungen des $\bar{\mathbf{C}}_e$ und \mathbf{b}_e vorgestellt

$$1.) \mathbf{b}_e = J_e^{2/3} \hat{\mathbf{b}}_e, \quad 2.) \bar{\mathbf{C}}_e = J_e^{2/3} \hat{\mathbf{C}}_e, \quad \text{mit} \quad 3.) J_e = \left(\det[\bar{\mathbf{C}}_e \cdot \bar{\mathbf{G}}^\sharp] \right)^{1/2} = \left(\det[\mathbf{g}^b \cdot \mathbf{b}_e] \right)^{1/2}. \quad (4.9)$$

Somit repräsentieren $\hat{\mathbf{C}}_e$, $\hat{\mathbf{b}}_e$ und J_e den isochoren bzw. den volumetrischen Anteil der elastischen Deformationen. Ferner geben die Metrikensoren $\bar{\mathbf{G}}^\sharp$ und \mathbf{g}^b den eindeutigen Zusammenhang zwischen unterschiedlichen Konfigurationen wieder.

Geschwindigkeitsgradienten lassen sich in Hinblick auf bestimmte Konfigurationen unterscheiden (siehe dazu beispielsweise MIEHE [96]). Als Ausgangspunkt dienen die bekannten Größen

$$1.) \mathbf{l} = \text{grad } \mathbf{v} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} \implies 2.) \mathbf{d} = \text{sym}[\mathbf{g}^b \cdot \mathbf{l}], \quad (4.10)$$

wobei die Zeitableitung der Verschiebung \mathbf{u} die Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{u}}$ definiert. $\mathbf{l} = l^i_j \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}^j$ stellt an dieser Stelle einen gemischtvarianten Tensor aus Ko- und Kontravarianz dar. Aus der multiplikativen Dekomposition (4.3) folgt für \mathbf{l} :

$$\mathbf{l} = \frac{1}{3} \frac{d}{dt} (\ln J) \mathbf{1} + \dot{\mathbf{F}}_e^{iso} \cdot (\mathbf{F}_e^{iso})^{-1} + \mathbf{F}_e^{iso} \cdot \dot{\mathbf{F}}_i \cdot \mathbf{F}_i \cdot (\mathbf{F}_e^{iso})^{-1} \quad (4.11)$$

(siehe dazu MAHNKEN *et al.* [91]). Ein elastischer „pull-back“ liefert den Zusammenhang

$$\bar{\mathbf{L}} = {}^*\Phi_e^\lambda[\mathbf{l}] = \mathbf{F}_e^{-1} \cdot \mathbf{l} \cdot \mathbf{F}_e = \frac{1}{3} \frac{d}{dt} (\ln J) \mathbf{1} + (\mathbf{F}_e^{iso})^{-1} \cdot \dot{\mathbf{F}}_e^{iso} + \dot{\mathbf{F}}_i \cdot \mathbf{F}_i. \quad (4.12)$$

Für $\bar{\mathbf{L}}$ resultiert aus der additiven Zerlegung der Jacobi-Determinante $\ln J = \ln J_i + \ln J_e + \ln J_\theta + \ln J_z$ und der Beziehung $\mathbf{F}_e = J_e^{\frac{1}{3}} \mathbf{F}_e^{iso}$

$$\begin{aligned} 1. \quad \bar{\mathbf{L}} &:= \bar{\mathbf{L}}_e + \bar{\mathbf{L}}_i + \bar{\mathbf{L}}_\theta + \bar{\mathbf{L}}_z, \quad \text{mit} \\ 2. \quad \bar{\mathbf{L}}_i &:= \dot{\mathbf{F}}_i \cdot \mathbf{F}_i^{-1} = -\mathbf{F}_i \cdot \dot{\mathbf{F}}_i^{-1}, \quad 3. \quad \bar{\mathbf{L}}_e := \mathbf{F}_e^{-1} \cdot \dot{\mathbf{F}}_e, \\ 4. \quad \bar{\mathbf{L}}_\theta &:= \frac{1}{3} \frac{d}{dt} (\ln J_\theta) \mathbf{1}, \quad 5. \quad \bar{\mathbf{L}}_z := \frac{1}{3} \frac{d}{dt} (\ln J_z) \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Demzufolge repräsentieren $\bar{\mathbf{L}}_e, \bar{\mathbf{L}}_i, \bar{\mathbf{L}}_\theta, \bar{\mathbf{L}}_z$ jeweils den elastischen, inelastischen, thermischen sowie den Umwandlungsteil. Es gilt anzumerken, dass im Gegensatz zu \mathbf{l} in Gleichung (4.10) die Tensoren $\bar{\mathbf{L}}, \bar{\mathbf{L}}_e, \bar{\mathbf{L}}_i$ in Gleichungen (4.12) und (4.13) nicht als Gradienten eines räumlichen Feldes abgeleitet sind, so dass hier der Fachbegriff Geschwindigkeitsgradient nicht im strengeren Sinn gebraucht werden kann.

4.1.2 Volumenänderung infolge von Druck, Temperatur und Phasenanteilen

In diesem Abschnitt soll eine Mischung von $n_z \geq 2$ Phasen berücksichtigt werden, die einzeln die Volumendifferenz dV mit einer Massendifferenz dm in der Referenzkonfiguration füllen. Diese Mischung wird als homogen angenommen, d.h. alle Phasenverhältnisse sind gleich verteilt. In Bezug auf die Referenz- bzw. die aktuelle Konfiguration werden die Dichten ρ_0 und ρ der Mischung wie folgt definiert:

$$1. \quad \rho_0 = \frac{dm}{dV}, \quad 2. \quad \rho = \frac{dm}{dv}. \quad (4.14)$$

Bei einem Volumen dv soll die i^{te} Phase die Masse dm_i besitzen. Die Massenphasenfraction z_i und die Dichte der i^{ten} Phase werden an einem Körperpunkt $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_0$ durch

$$1. \quad z_i = \frac{dm_i}{dm}, \quad 2. \quad \rho_i = \frac{dm_i}{dv_i} \quad (4.15)$$

festgesetzt. Darüber hinaus gelten in jedem Körperpunkt und für alle Zeitpunkte die Bedingungen:

$$1. \quad \sum_{i=1}^{n_z} z_i = 1, \quad 2. \quad z_i \geq 0 \quad \forall i = 1, \dots, n_z. \quad (4.16)$$

Zwecks kompakter Darstellung wird dafür die Notation festgelegt $\underline{z} = [z_1, z_2, \dots, z_{n_z}]^T$. Des Weiteren folgt aus (4.14) und (4.15) der Zusammenhang zwischen den Massen- und Volumenphasenanteilen für alle zulässigen Temperaturen θ

$$z_i^{(m)} = \frac{\rho_i[\theta]}{\rho[\theta]} z_i^{(v)}[\theta] \quad \forall i = 1, \dots, n_z. \quad (4.17)$$

Unter Verwendung der Gleichung (4.14.2) ergibt sich sowohl aus der Relation $dv = \sum_{i=1}^3 dv_i$ als auch aus den Gleichungen (4.15.2) und (4.15.1) die Mischungsregel für die Inverse der Massendichte ρ

$$\frac{1}{\rho} = \frac{dv}{dm} = \frac{\sum_{i=1}^3 dv_i}{dm} = \sum_{i=1}^3 \frac{dm_i}{\rho_i dm} = \sum_{i=1}^{n_z} \frac{z_i}{\rho_i}. \quad (4.18)$$

Setzt man die Relationen (4.14) in Gleichung (4.2) ein und berücksichtigt zusätzlich die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten in Gleichung (4.3) erhält man

$$J = \frac{dv}{dV} = \frac{\rho_0}{\rho} = J_i \cdot J_e \cdot J_\theta \cdot J_z = J_e \cdot J_\theta \cdot J_z, \quad (4.19)$$

wobei J_i , J_e , J_θ , J_z jeweils die inelastische, elastische, thermische und Umwandlungsteile sind. Wegen der plastischen Inkompressibilität wird für den inelastischen Teil die Beziehung $J_i = 1$ verwendet. Ferner wird angenommen, dass sich das ändernde Volumen dV mit dem Dichtewechsel infolge der Änderung des Drucks $(p - p_0)$, der Temperatur $(\theta - \theta_0)$ und der Phasenanteile $(z - z_0)$ zu einem neuen Volumen dv mit einer neuen Dichte ρ führt. Somit kann die Dichte ρ als Funktion des Drucks p , der Temperatur θ und der Massenanteile der Phasen z mit einem Referenzvolumen $\rho_0 = \rho[p_0, \theta_0, z_0]$ dargestellt werden.

Definiert man den Zustandsvektor als $\underline{s} = [p, \theta, z]$, liefert die Taylor-Reihe bis zum Term erster Ordnung

$$J = \frac{\rho_0}{\rho} \approx 1 - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_{\underline{s}_0} (p - p_0) - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial \theta} \Big|_{\underline{s}_0} (\theta - \theta_0) - \frac{1}{\rho_0} \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\partial \rho}{\partial z_i} \Big|_{\underline{s}_0} (z_i - z_{0i}). \quad (4.20)$$

Mehrere Umformungen der Relation (4.20) unter Anwendung der Mischungsregel für die inverse Dichte aus (4.18) resultieren in:

$$\begin{aligned} J = \frac{\rho_0}{\rho} \approx 1 &- \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0 z_{0i}}{\rho_i[p_0, \theta_0]} \left(\frac{1}{\rho_i[p_0, \theta_0]} \frac{\partial \rho_i}{\partial p} [p_0, \theta_0] \right) (p - p_0) \\ &+ \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0 z_{0i}}{\rho_i[p_0, \theta_0]} \left(-\frac{1}{\rho_i[p_0, \theta_0]} \frac{\partial \rho_i}{\partial \theta} [p_0, \theta_0] \right) (\theta - \theta_0) \\ &+ \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0}{\rho_i[p_0, \theta_0]} (z_i - z_{0i}). \end{aligned} \quad (4.21)$$

Der letzte Summand in Gleichung (4.21) kann durch Einsatz der Gleichungen (4.16) und (4.17) modifiziert werden

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0}{\rho_i[p_0, \theta]} (z_i - z_{0i}) &= \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0}{\rho_i[p_0, \theta]} z_i - \sum_{i=1}^{n_z} z_i^{(v)} [p_0, \theta_0] = \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0}{\rho_i[p_0, \theta]} z_i - 1 \\ &= \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0}{\rho_i[p_0, \theta]} z_i - \sum_{i=1}^{n_z} z_i = \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0}{\rho_i[p_0, \theta]} (z_i - 1). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Folgende Definitionen des Kompressibilitätskoeffizienten $\kappa[\underline{s}_0]$, des isothermischen Kompressibilitätskoeffizienten der i^{ten} Phase $\kappa_i[p_0, \theta_0]$, des Wärmeausdehnungskoeffizienten der i^{ten} Phase $\alpha_i[p_0, \theta_0]$, des Wärmeausdehnungskoeffizienten α und des Phasenausdehnungskoeffizienten β_i der i^{ten} Phase (alle bezogen auf den Referenzdruck p_0 , -temperatur θ_0 und die -phasenmischung \underline{z}_0):

$$\begin{aligned} \kappa[\underline{s}_0] &:= \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0 z_{0i}}{\rho_i[p_0, \theta_0]} \kappa_i[p_0, \theta_0], & \kappa_i[p_0, \theta_0] &:= \frac{1}{\rho_i[p_0, \theta_0]} \frac{\partial \rho_i}{\partial p} [p_0, \theta_0], \\ \alpha[\underline{s}_0] &:= \sum_{i=1}^{n_z} \frac{\rho_0 z_{0i}}{\rho_i[p_0, \theta_0]} \alpha_i[p_0, \theta_0], & \alpha_i[p_0, \theta_0] &:= -\frac{1}{3\rho_i[p_0, \theta_0]} \frac{\partial \rho_i}{\partial \theta} [p_0, \theta_0], \\ \underline{\beta}[p_0, \theta_0] &:= [\beta_1, \dots, \beta_{n_z}]^T, & \beta_i[p_0, \theta_0] &:= \frac{1}{3} \left(\frac{\rho_0}{\rho_i[p_0, \theta_0]} - 1 \right), \end{aligned} \quad (4.23)$$

erlauben die Darstellung der Gleichung (4.21) in kompakter Form

$$J \approx 1 - \kappa[\underline{s}_0](p - p_0) + 3\alpha[\underline{s}_0](\theta - \theta_0) + 3\underline{\beta}^T[p_0, \theta_0]\underline{z}. \quad (4.24)$$

Nimmt man im nächsten Schritt für kleine elastische, thermische und Umwandlungsdehnungen die Näherung $J - 1 \approx \ln J$ an, kann die multiplikative Form der Gleichung (4.19) unter Verwendung der Gleichung (4.24) in eine additive Form transformiert werden

$$\ln J \approx -\kappa[\underline{s}_0](p - p_0) + 3\alpha[\underline{s}_0](\theta - \theta_0) + 3\underline{\beta}^T[p_0, \theta_0]\underline{z}. \quad (4.25)$$

4.1.3 Thermodynamisches Konzept

Analog zu HAUPT [54] werden folgende Bilanzgleichungen verwendet:

$$\begin{aligned} 1. \quad & \rho_0 \ddot{\mathbf{u}} - \text{Div} [\mathbf{F} \cdot \mathbf{S}] = \rho_0 \mathbf{f} && \text{Impuls- oder Bewegungsgleichung,} \\ 2. \quad & \rho_0 \dot{e} + \text{Div} \mathbf{q}_0 = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} + \rho_0 r_\theta && \text{Energiegleichung,} \\ 3. \quad & \frac{1}{\rho_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} - \dot{\psi} - \dot{\theta} \eta - \frac{1}{\rho_0 \theta} \mathbf{q}_0 \cdot \text{Grad } \theta \geq 0 && \text{Clausius-Duhem-Ungleichung,} \end{aligned} \quad (4.26)$$

mit \mathbf{E} als Green'schen Verzerrungstensor und \mathbf{S} als (symmetrischen) 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor. Die Spannungsleistung \mathcal{P} ist als duale Paarung zwischen dem Kirchhoff-Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ und dem räumlichen Deformationsgeschwindigkeitstensor \mathbf{d} in Gleichung (4.10.2) relativ zur Momentankonfiguration \mathcal{B} definiert $\mathcal{P} = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}$. Sie lässt sich in Bezug auf die Zwischenkonfiguration unter Anwendung des elastischen „pull-back“ Operators festlegen

$$\mathcal{P} = \overline{\mathbf{M}} : \overline{\mathbf{L}}, \quad (4.27)$$

mit $\overline{\mathbf{M}} = {}^* \Phi'_e[\mathbf{m}] = \mathbf{F}_e^t \cdot \mathbf{m} \cdot \mathbf{F}_e^{-t}$ als gemischtvariananten (kontra-kovarianten) Mandel'schen Spannungstensor. Hierbei gilt

$$\mathcal{P} = \overline{\mathbf{M}} : \overline{\mathbf{L}} = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}. \quad (4.28)$$

Für die freie Helmholtz-Energiefunktion Ψ wird der funktionale Zusammenhang

$$\Psi = \Psi[\overline{\mathbf{C}}_e, \underline{q}, \underline{z}, \theta] \quad (4.29)$$

angenommen, wobei $\overline{\mathbf{C}}_e = \mathbf{F}_e^T \cdot \mathbf{F}_e$ den elastischen rechten Cauchy-Green-Tensor (4.6) und $\underline{q} = [q_1, \dots, q_{n_q}]$ einen Vektor der verzerrungsähnlichen internen Verfestigungsvariablen darstellt. Der in Abschnitt 4.1.2 eingeführte Vektor $\underline{z} = [z_1, z_2, \dots, z_{n_z}]$ berücksichtigt die unterschiedlichen Phasen n_z und spielt gleichzeitig die Rolle interner Variablen.

Unter Verwendung der additiven Zerlegung des Geschwindigkeitsgradienten (4.13.1) für die Spannungsleistung in Gleichung (4.27) und der Beziehung $\partial \Psi / \partial \overline{\mathbf{C}}_e : \dot{\overline{\mathbf{C}}}_e = 2(\overline{\mathbf{C}}_e \cdot \partial \Psi / \partial \overline{\mathbf{C}}_e) : \overline{\mathbf{L}}_e$ (MIEHE [96]) folgt für die Clausius-Duhem-Ungleichung (4.26)

$$\begin{aligned} \theta \gamma = & \left(\frac{1}{\rho_0} \overline{\mathbf{M}} - 2 \overline{\mathbf{C}}_e \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \overline{\mathbf{C}}_e} \right) : \overline{\mathbf{L}} + 2 \overline{\mathbf{C}}_e \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \overline{\mathbf{C}}_e} : \overline{\mathbf{L}}_i - \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{q}} \dot{\underline{q}} - \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{z}} \dot{\underline{z}} \\ & - \left(\eta + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \frac{1}{\rho_0 \theta} \mathbf{q}_0 \cdot \text{Grad } \theta \geq 0. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Die Klammernausdrücke $\left(\frac{1}{\rho_0} \bar{\mathbf{M}} - 2\bar{\mathbf{C}}_e \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\mathbf{C}}_e}\right)$ und $\left(\eta + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}\right)$ werden nach der Standardargumentation der klassischen rationalen Thermodynamik [25] gleich Null gesetzt. Daraus folgen die Relationen

$$1. \bar{\mathbf{M}} = \rho_0 2\bar{\mathbf{C}}_e \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\mathbf{C}}_e}, \quad 2. \eta = -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta}, \quad (4.31)$$

Damit können $\bar{\mathbf{M}}$ und η als thermodynamische Kräfte betrachtet werden. Darüber hinaus werden die thermodynamischen Kräfte für Verfestigungsspannungen $\underline{Q} = [Q_1, Q_2, \dots, Q_{n_q}]^T$ sowie die chemischen Kräfte für die Phasentransformationen $\underline{Z} = [Z_1, Z_2, \dots, Z_{n_z}]^T$ definiert

$$1. \underline{Q} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{q}}, \quad 2. \underline{Z} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{z}}. \quad (4.32)$$

Die Bedingungen der Clausius-Duhem-Ungleichung (4.26) werden eingehalten, wenn folgende Dissipationsgleichungen erfüllt sind:

$$1. \mathcal{D}^i = \bar{\mathbf{M}} : \bar{\mathbf{L}}_i - \underline{Q} \dot{\underline{q}} - \underline{Z} \dot{\underline{z}} \geq 0, \quad 2. \mathcal{D}^\theta = -\frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \text{Grad } \theta \geq 0. \quad (4.33)$$

Der gängige Ansatz für den Wärmestromvektor in Gleichung (4.33.2) in Bezug auf die Referenzkonfiguration ist das Fourier-Gesetz

$$\mathbf{q}_0 = -\lambda_\theta (\det \mathbf{F}) \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{Grad } \theta,$$

mit λ_θ als nichtnegativen Wärmeleitungskoeffizienten.

Darüber hinaus ist es notwendig, Evolutionsgleichungen zu formulieren:

$$1. \bar{\mathbf{L}}_i = \bar{\mathbf{L}}_i [\bar{\mathbf{M}}, Q, \underline{Z}, \underline{q}, \underline{z}, \theta], \quad 2. \dot{\underline{q}} = \dot{\underline{q}} [\bar{\mathbf{M}}, Q, \underline{Z}, \underline{q}, \underline{z}, \theta], \quad 3. \dot{\underline{z}} = \dot{\underline{z}} [\bar{\mathbf{M}}, Q, \underline{Z}, \underline{q}, \underline{z}, \theta]. \quad (4.34)$$

Die Evolutionsgleichungen sind vom Mandel'schen Spannungstensor $\bar{\mathbf{M}}$, den Verfestigungsspannungen \underline{Q} sowie den chemischen Kräften \underline{Z} , die als konjugierte duale Variablen $\bar{\mathbf{L}}_i$, $\dot{\underline{q}}$ und $\dot{\underline{z}}$ in der Gleichung (4.33.1) erscheinen, abhängig. Die an den betrachteten Hybridumformprozess angepasste Formulierung dieser Evolutionsgleichungen sowie der anschließende Nachweis der thermodynamischen Konsistenz des Modells erfolgt in den nachfolgenden Abschnitten.

4.1.4 Wärmeleitungsgleichung

Die Wärmeleitungsgleichung kann aus der Energiegleichung (4.26.2) abgeleitet werden (vgl. dazu z.B. HAUPT [54]). Durch die Berücksichtigung der Gleichungen (4.31) und Umformung der Spannungsleistung $\mathcal{P} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} = \bar{\mathbf{M}} : \bar{\mathbf{L}}$, ergibt sich

$$\rho_0 c_d \dot{\theta} + \text{Div } \mathbf{q}_0 = \bar{\mathbf{M}} : \bar{\mathbf{L}}_i - \underline{Q} \dot{\underline{q}} - \underline{Z} \dot{\underline{z}} + \theta \frac{\partial \bar{\mathbf{M}}}{\partial \theta} : \bar{\mathbf{L}}_e + \theta \frac{\partial Q}{\partial \theta} \dot{\underline{q}} + \theta \frac{\partial Z}{\partial \theta} \dot{\underline{z}} + \rho_0 r_\theta, \quad (4.35)$$

mit der Wärmekapazität

$$c_d := -\theta \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} \left(= \frac{\partial e}{\partial \theta} \right). \quad (4.36)$$

Die weiterführende Analyse der Gleichung (4.35) erfolgt in Abschnitt 4.2.5.

4.2 Prototypmodell für den Hybridumformprozess

In diesem Abschnitt wird das in Abschnitt 4.1 entwickelte allgemeine Modell für den betrachteten Hybridumformungsprozess spezifiziert. Das Ziel hierbei ist, konkrete Vorschläge sowohl für die freie Helmholtz-Energie als auch für die Evolution der internen Variablen herauszuarbeiten. Des Weiteren erfolgt eine Diskussion der thermodynamischen Konsistenz des entwickelten Modells.

4.2.1 Freie Helmholtz-Energie

Im Rahmen dieser Analyse wird die freie Helmholtz-Energiefunktion in Anlehnung an RANIECKI and BRUHNS [108] für das Prototypmodell wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
 1. \quad \Psi &= \Psi^{iso}[\bar{\mathbf{C}}_e, \underline{z}, \theta] + \Psi^{vol}[\bar{\mathbf{C}}_e, \underline{z}, \theta] + \Psi^\theta[\theta] + \Psi^p[\underline{q}, \underline{z}, \theta] + \Psi_{ch}[\underline{z}, \theta], \quad \text{mit} \\
 2. \quad \Psi^{iso} &= \frac{G[\theta]}{4\rho_0} \left(\text{tr} \left[\ln \hat{\mathbf{C}}_e \right]^2 \right), \\
 3. \quad \Psi^{vol} &= \frac{1}{2\rho_0} K[\theta] (\ln J_e)^2, \\
 4. \quad \Psi^\theta &= \int_{\theta_0}^{\theta} c_d[\bar{\theta}] d\bar{\theta} - \theta \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{c_d[\bar{\theta}]}{\bar{\theta}} d\bar{\theta}, \\
 5. \quad \Psi^p &= \frac{1}{2\rho_0} Q_0 b q_1^2 + \frac{1}{2\rho_0} H q_2^2, \\
 6. \quad \Psi_{ch} &= \sum_{i=1}^4 (z_i - z_{0i}) \phi_{ch,i}[\theta].
 \end{aligned} \tag{4.37}$$

Hierbei beschreibt der Term $\Psi^{el} = \Psi^{iso} + \Psi^{vol}$ Speichermengen, die sich auf elastische Verzerrungen beziehen. Der Teil Ψ^{iso} in Gleichung (4.37.2) handelt von isochoren Verzerrungen, die auf isochore elastische Verzerrungen zurückzuführen sind, wobei $\hat{\mathbf{C}}_e = J_e^{-2/3} \bar{\mathbf{C}}_e$ gilt. Gleichung (4.37.3) betrifft die volumetrischen Verzerrungen, die durch den in Gleichung (4.2.2) definierten elastischen Teil der Jacobi-Determinante J_e dargestellt werden. Die bereits in den Gleichungen (3.30) festgelegten Schub- bzw. Kompressionsmodule $G[\theta]$ und $K[\theta]$ repräsentieren deren Beziehung zum Elastizitätsmodul E , der Querkontraktion ν und dem Kompressibilitätskoeffizienten κ . Ferner wird eine lineare Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls von der Temperatur in Gleichung (3.31) eingeführt. Des Weiteren wird die Erweiterung des Kompressionsmoduls (3.30.2) in Definition (4.23) eingefügt. Die Annahme, dass die Volumenänderungen, die aus der Elastizität, der Temperaturänderung und der Phasenumwandlung resultieren, gering sind, erlaubt die Anwendung der Näherung $\ln J \approx J - 1$. Aus der Berücksichtigung dieser Annahme sowie der additiven Zerlegung der Jacobi-Determinante in (4.25) ergibt sich für den volumetrischen Anteil der freien Helmholtz-Energie

$$\begin{aligned}
 \Psi^{vol} &= \frac{1}{2\rho_0} K[\theta] (\ln J_e)^2 = \frac{1}{2\rho_0} K[\theta] (\ln J - \ln[J_\theta J_z])^2 \\
 &\approx \frac{1}{2\rho_0} K[\theta] \left(\ln J - 3 \left(\alpha[\underline{s}_0](\theta - \theta_0) + \underline{\beta}^T[p_0, \theta_0] \underline{z} \right) \right)^2.
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

Aufgrund der Annahme des gleichen elastischen isotropen Verhaltens für alle Phasen ist die Betrachtung der Abhängigkeit der Schub- bzw. Kompressionsmodule G und K vom Vektor der Phasenanteile \underline{z} nicht notwendig. Bezüglich der Definitionen der Variablen wird auf Abschnitt 3.2.1 verwiesen.

4.2.2 Thermodynamische Kräfte

Die thermodynamischen Kräfte lassen sich aus den Gleichungen (4.31) ableiten. Die Bestimmung des Mandel'schen Spannungstensors basiert auf den Gleichungen (4.31.1) und (4.38)

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{M}} &= \rho_0 2 \bar{\mathbf{C}}_e \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\mathbf{C}}_e} \\ &= K[\theta] \ln J \bar{\mathbf{I}}' + G[\theta] \text{dev} \ln \left[\bar{\mathbf{C}}_e \cdot \bar{\mathbf{G}}^\sharp \right] - 3K[\theta] \left(\alpha[\underline{s}_0](\theta - \theta_0) + \underline{\beta}^T[p_0, \theta_0] \underline{z} \right) \bar{\mathbf{I}}'.\end{aligned}\quad (4.39)$$

Die ersten zwei Terme in Gleichung (4.39) repräsentieren die aus Deformationen resultierenden volumetrische und deviatorische Spannungstensen. Der dritte Term berücksichtigt die thermo- bzw. die chemomechanische Abhängigkeit des Spannungstensors.

Auf Grundlage der Gleichungen (4.32), (4.38) und (4.37.5-6) werden sowohl die Verfestigungsspannungen als auch die chemischen Kräfte definiert

$$\begin{aligned}1. \quad Q_1 &= \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial q_1} = Q_0 b q_1, \quad Q_2 = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial q_2} = H_p q_2, \\ 2. \quad Z_i &= \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial z_i} = -K[\theta] \left(\frac{\rho_0}{\rho_i[\theta_0]} - 1 \right) \ln J_e + \rho_0 \phi_{ch,i}[\theta], \quad i = 1, 2, \dots, 4.\end{aligned}\quad (4.40)$$

Die Ergebnisse der Gleichungen (4.40.1) repräsentieren die nichtlineare bzw. die lineare isotrope Verfestigung. Stahlwerkstoffe zeigen eine nur sehr geringe Volumenänderung im elastischen Bereich, so dass gilt:

$$\frac{\rho_0}{\rho_i[\theta_0]} - 1 \approx 0, \quad J_e \approx 1. \quad (4.41)$$

Damit ist der erste Term in Gleichung (4.40.2) vernachlässigbar

$$K[\theta] \left(\frac{\rho_0}{\rho_i[\theta_0]} - 1 \right) \ln J_e \approx 0 \implies Z_i \approx \rho_0 \phi_{ch,i}[\theta]. \quad (4.42)$$

Als Folge kann die chemische Kraft Z_i als die freie Enthalpie der Phase z_i betrachtet werden. Die Anwendung des Spur-Operators (eng. trace-operator) $\text{tr}[\bullet] = \mathbf{1} : [\bullet]$ auf die Gleichung (4.39) erlaubt die Umformulierung der hydrostatischen Druckspannung

$$-3p = \text{tr} \bar{\mathbf{M}} = 3K[\theta] \left(\ln J - 3 \left(\alpha[\underline{s}_0](\theta - \theta_0) + \underline{\beta}^T[p_0, \theta_0] \underline{z} \right) \right). \quad (4.43)$$

Diese entspricht für den Fall $p_0 = 0$ und $\theta = \theta_0$ der Gleichung (4.25).

4.2.3 Evolutionsgleichungen der Viskoplastizität und umwandlungsinduzierter Plastizität

Der inelastische Teil $\bar{\mathbf{L}}_i$ des Geschwindigkeitsgradientes $\bar{\mathbf{L}}$ in Gleichung (4.13.4) wird wie folgt aufgespalten:

$$\bar{\mathbf{L}}_i = \bar{\mathbf{L}}_p + \bar{\mathbf{L}}_t, \quad (4.44)$$

wobei $\bar{\mathbf{L}}_p$ und $\bar{\mathbf{L}}_t$ den viskoplastischen Teil bzw. den umwandlungsplastischen Teil repräsentieren (vgl. dazu z.B. HALLBERG *et al.* [51]).

Für $\bar{\mathbf{L}}_p$ wird für das viskoplastische Verhalten die üblich verwendete Fließregel (vgl. dazu z.B. [76]) angenommen

$$\begin{aligned}
1. \quad \bar{\mathbf{L}}_p &= \dot{\lambda} \sqrt{\frac{3}{2}} \bar{\mathbf{N}}^t, \quad \text{mit} \\
2. \quad \dot{\lambda} &= \left(\frac{\langle \phi \rangle}{D} \right)^m, \\
3. \quad \phi &= \sigma_v - (Y[\theta] + Q_1 + Q_2), \\
4. \quad \sigma_v &= \sqrt{\frac{3}{2}} \|\bar{\mathbf{M}}\|, \\
5. \quad \bar{\mathbf{N}} &= \frac{\bar{\mathbf{M}}^{dev}}{\|\bar{\mathbf{M}}^{dev}\|}.
\end{aligned} \tag{4.45}$$

$\dot{\lambda}$ stellt hierbei den viskoplastischen Multiplikator, ϕ die Überspannungsfunktion, $D > 0$ den Materialparameter der Viskosität, der in diesem Fall eine Konstante ist, σ_v die von-Mises-Vergleichsspannung und $\bar{\mathbf{N}}$ den normierten Mandel'schen Spannungstensor dar. Der „McCauley-Operator“ im Term $\langle \phi \rangle$ soll sicher stellen, dass das viskoplastische Fließen nur dann auftritt, wenn die von-Mises-Spannung σ_v den Barriereterm $(Y[\theta] + Q_1 + Q_2)$ überschreitet. Der Barriereterm setzt sich wiederum aus der Fließspannung und den Verfestigungsspannungen zusammen. Die Fließspannung $Y[\theta]$ repräsentiert die Anfangsbarriere für das inelastische Verhalten. An dieser Stelle wird eine lineare Abhängigkeit zwischen der Fließspannung und der Temperatur angenommen

$$Y[\theta] = Y_0 + c_Y (\theta - \theta_{Y_0}), \tag{4.46}$$

mit c_Y als einen Materialparameter, der die Senkung der Fließspannung während der Temperaturzunahme beschreibt. θ_{Y_0} ist die Temperatur, bei der $Y[\theta] = Y_0$ gilt. Der Skalar $Q = Q_1 + Q_2$ stellt die Verfestigungsspannung aus Gleichung (3.51) dar. Folglich kann der Skalar $Y[\theta] + Q_0(1 - \exp[-be_v]) + He_v$ physikalisch als eine Barrierekraft gegen das plastische Fließen interpretiert werden.

Umwandlungsplastizität tritt bei bainitischen und martensitischen Umwandlungen auch unter Einfluss der wirkenden Lastspannung, die unter der Fließspannung der weicheren Phase liegt, auf. Demnach wird vorausgesetzt

$$\bar{\mathbf{L}}_t = \dot{z}_3 \frac{3}{2} f'_1 K_{tpB}[\sigma_v] (\bar{\mathbf{M}}^{dev})^t + \dot{z}_4 \frac{3}{2} f'_1 K_{tpM}[\sigma_v] (\bar{\mathbf{M}}^{dev})^t. \tag{4.47}$$

Der Term $\bar{\mathbf{L}}_t$ entspricht dem TRIP-Ansatz von LEBLOND [72]. Die Konstanten K_{tpB} und K_{tpM} stellen die Greenwood-Johnson-Parameter dar und werden wie folgt modifiziert:

$$\begin{aligned}
1. \quad K_{tpB}[\sigma_v] &= K_{tp1B} + K_{tp2B}\sigma_v, \\
2. \quad K_{tpM}[\sigma_v] &= K_{tp1M} + K_{tp2M}\sigma_v.
\end{aligned} \tag{4.48}$$

Um eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen für Martensit und Bainit zu erzielen, werden die Greenwood-Johnson-Parameter als Funktionen der von-Mises-Vergleichsspannung gestaltet. Die Sättigungsfunktion $f_1[z]$ in Gleichung (4.47) ist eine heuristische Funktion, die die Bedingungen erfüllt:

$$1. f_1[0] = 0, \quad 2. f_1[1] = 1, \quad 3. f'_1[z] = \frac{df_1}{dz} \geq 0. \tag{4.49}$$

Hier wird die von DENIS [27] entwickelte Formulierung in Gleichung (3.44) verwendet. Aus Gleichung (4.45.1) folgt der Zusammenhang

$$\dot{\lambda} = \sqrt{\frac{2}{3} \bar{\mathbf{L}}_p : (\bar{\mathbf{L}}_p)^t} =: \dot{e}_v. \tag{4.50}$$

Damit verallgemeinert e_v die Akkumulation der plastischen Verzerrung analog zum Fall der kleinen Deformationen in Gleichung (3.48.5).

4.2.4 Thermodynamische Konsistenz

Um die thermodynamische Konsistenz des betrachteten Modells zu gewährleisten, muss die Clausius-Planck-Ungleichung (4.33.1) erfüllt sein. Das viskoplastische Verhalten ist aktiviert, wenn die Überspannungsfunktion ϕ in Gleichung (4.45.3) positiv ist. Zwecks der mathematischen Formulierung wird auf Gleichungen (3.75) verwiesen. Unter Verwendung der additiven Zerlegung des Geschwindigkeitsgradienten (4.44), der Fließregel (4.45.1), der Evolutionsgleichungen (4.47), (3.49.1), (3.49.2) für TRIP und der internen Variablen q_1 und q_2 sowie der Gleichungen (4.45) und (4.50) kann die Clausius-Planck-Ungleichung (4.33.1) wie folgt formuliert werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^i &= \bar{\mathbf{M}} : \bar{\mathbf{L}}_i - Q_1 \dot{q}_1 - Q_2 \dot{q}_2 - \sum_{i=1}^4 Z_i \dot{z}_i \\ &= \underbrace{\dot{\lambda} (\sigma_v - Q_1 - Q_2)}_{> Y[\theta]} + \frac{\dot{\lambda}}{Q_0} Q_1^2 + \left(\dot{z}_3 \frac{3}{2} f_1' K_{tpB}[\sigma_v] + \dot{z}_4 \frac{3}{2} f_1' K_{tpM}[\sigma_v] \right) \|\bar{\mathbf{M}}^{dev}\|^2 \\ &\quad - \sum_{i=1}^4 Z_i \dot{z}_i \geq 0. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Aus Gleichungen (4.50) und (3.75) geht hervor, dass die ersten zwei Terme in Gleichung (4.51) stets nichtnegativ sind. Wegen $K_{tp1} > 0$ und $K_{tp2} > 0$ ist der dritte Term in Gleichung (4.51) ebenfalls nichtnegativ. Daher muss für den Nachweis der thermodynamischen Konsistenz lediglich der letzte Term auf Nichtnegativität untersucht werden. Dieser wird zunächst unter Einsatz der Beziehung (3.38) und der Annahme (3.40) umgeformt

$$- \sum_{i=1}^4 Z_i \dot{z}_i = -\rho_0 \sum_{i=1}^4 (\theta - \theta_0^{(i,2)}) \frac{Q_{i,2}^*}{\theta_0^{(i,2)}} \dot{z}_i \geq 0. \quad (4.52)$$

Bezüglich des Beweises der Nichtnegativität dieser Beziehung wird auf den Beweis zur Ungleichung (3.77) in Abschnitt 3.2.5 verwiesen. Somit kann festgestellt werden, dass das betrachtete Modell thermodynamisch konsistent ist. Dieser Beweis ist unabhängig von den Spezialansätzen der Evolutionsgleichungen für die Phasenumwandlung, wie z.B. von Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogoroff oder Koistinen-Marburger.

4.2.5 Spezielle Form der Wärmeleitungsgleichung

Sind alle vier Phasen in den Prozess involviert, kann die Wärmeleitungsgleichung (4.35) in Abhängigkeit von der austenitischen Phase wie folgt umformuliert werden:

$$\rho_0 c_d \dot{\theta} + \text{Div } \mathbf{q}_0 = \bar{\mathbf{M}} : \bar{\mathbf{L}}_i - \underline{Q} \underline{\dot{q}} + \theta \frac{\partial \bar{\mathbf{M}}}{\partial \theta} : \bar{\mathbf{L}}_e + \theta \frac{\partial \underline{Q}}{\partial \theta} \underline{\dot{q}} + \sum_{i=1}^4 L_{i2} \dot{z}_i + \rho_0 r_\theta, \quad (4.53)$$

wobei die latente Wärme L_{i2} der Umwandlung $i \rightarrow 2$ oder $2 \rightarrow i$ eingesetzt wird

$$L_{i2} := \left(-Z_i + Z_2 + \theta \frac{\partial Z_i}{\partial \theta} - \theta \frac{\partial Z_2}{\partial \theta} \right). \quad (4.54)$$

Damit gilt weiterhin die Relation $L_{22} = 0$. Unter Verwendung der Approximation (4.41) und der Annahme (3.40) erhält man aus (4.54) für den Fall konstanter $Q_{i,2}^*$

$$L_{i2} = \rho_0 Q_{i,2}^*. \quad (4.55)$$

Folglich stellt die Aktivierungsenergie $\rho_0 Q_{i,2}^*$ der Umwandlungen $1 \rightarrow 2$ oder $2 \rightarrow 3, 4$ die latente Wärme der korrespondierenden Umwandlung dar. Diese Aussage wird durch die experimentelle Beobachtung der exothermen Bildung von Bainit und Martensit untermauert. Im Gegensatz dazu ist die Bildung von Austenit endotherm. Demnach sind die isotropen Verfestigungsspannungen nicht von der Temperatur abhängig. So kann die Wärmeleitungsgleichung in der folgenden Form

$$\rho_0 c_d \dot{\theta} + \text{Div } \mathbf{q}_0 = \bar{\mathbf{M}} : \bar{\mathbf{L}}_i - \underline{Q} \dot{\underline{q}} + \theta \frac{\partial \bar{\mathbf{M}}}{\partial \theta} : \bar{\mathbf{L}}_e + \sum_{i=1}^4 L_{i2} \dot{z}_i + \rho_0 r_\theta \quad (4.56)$$

geschrieben werden.

4.2.6 Zusammenfassung der konstitutiven Gleichungen

Die konstitutiven Gleichungen bezüglich der Zwischenkonfiguration $\bar{\mathcal{B}}$ in Form der kontravarianten Tensoren werden in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Unter Verwendung der elastischen push-forward-Beziehung $\mathbf{b}_e = {}_*\Phi_e^\sharp[\bar{\mathbf{G}}^\sharp]$ in Gleichung (4.5.2) und der Umformung der Gleichung (4.7.2) zu $\mathbf{g}^b = {}_*\Phi_e^b[\bar{\mathbf{C}}_e]$ gilt für den elastischen push-forward-Operator des gemischtvarianten Mandel-Spannungstensors sowie des inelastischen Geschwindigkeitsgradienten bezüglich der Zwischenkonfiguration

$$1. \quad \mathbf{m} = {}_*\Phi_e'[\bar{\mathbf{M}}], \quad 2. \quad \mathbf{l}_i = {}_*\Phi_e^\lambda[\bar{\mathbf{L}}_i]. \quad (4.57)$$

Somit repräsentieren die in Tabelle (4.1) aufgeführten Gleichungen (I) und (II) den gemischtvarianten Kirchhoff-Spannungstensor sowie den gemischtvarianten Geschwindigkeitstensor in der momentanen Konfiguration

$$\begin{aligned} 1. \quad \mathbf{m} &= \rho_0 2 \mathbf{g}^b \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{g}^b} \\ &= K[\theta] \ln J_e \mathbf{1}' + G[\theta] \text{dev} \ln (\mathbf{g}^b \cdot \mathbf{b}_e) - \\ &\quad - K[\theta] \left(3 \Delta \theta \alpha_1[\theta] + \sum_{i=2}^4 \left(\frac{\rho_1[\theta_0]}{\rho_i[\theta_0]} - 1 \right) z_i \right) \mathbf{1}', \\ 2. \quad \mathbf{l}_i &= \dot{\lambda} \sqrt{\frac{3}{2}} \mathbf{n}^t + \left(\dot{z}_3 \frac{3}{2} f_1' K_{tpB}[\sigma_v] + \dot{z}_4 \frac{3}{2} f_1' K_{tpM}[\sigma_v] \right) (\mathbf{m}^{dev})^t, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{m}^{dev}}{\|\mathbf{m}^{dev}\|}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Ferner werden in der Tabelle 4.1 Materialparameter zusammengefasst. Zur Vereinfachung wird der gleiche Wärmeausdehnungskoeffizient $\alpha_1[\theta]$ für alle Phasen angenommen. Es existieren in Bezug auf die Anwendungsmöglichkeiten der Gleichung (4.58) für generelle Belastungs- sowie Entlastungspfade mehrere Beschränkungen. Dennoch wird in dieser Arbeit die Gleichung (4.58) der Einfachheit halber und unter der Annahme, dass für die betrachteten Probleme mehr oder weniger proportionale Belastungspfade erwartet werden können, als Arbeitsthese verwendet.

4.3 Numerische Implementierung

Für die Simulation von Hybridumformprozessen, wie z.B. in STEINHOFF [119] und WEIDIG *et al.* [141] dargestellt, ist eine Lösung von partiellen Differentialgleichungen notwendig, wobei die mechanische Gleichgewichtsgleichung und die thermische Wärmegleichung gekoppelt sind. Bezüglich des Ansatzes zur Lösung des Randwertproblems wird auf weiterführende Literatur verweisen (siehe z.B. ZIENKIEWICZ und TAYLOR [153], SIMO und HUGHES [117]).

Grundsätzlich können gekoppelte Randwertprobleme monolithisch bzw. simultan gelöst werden. Dennoch wird hier ein gestaffelter Algorithmus verwendet, der im Gegensatz zu einem vollgekopp-

I. Mandel'scher Spannungstensor

$$\begin{aligned}
 1. \quad \bar{\mathbf{M}} &= K[\theta] \ln J_e \bar{\mathbf{I}}' + G[\theta] \text{dev} \ln \left(\bar{\mathbf{C}}_e \cdot \bar{\mathbf{G}}^\sharp \right) \\
 &\quad - K[\theta] \left(3\Delta\theta \alpha_1[\theta] + \sum_{i=2}^4 \left(\frac{\rho_1[\theta_0]}{\rho_i[\theta_0]} - 1 \right) z_i \right) \bar{\mathbf{I}}' \\
 2. \quad G(\theta) &= \frac{2E(\theta)}{1+\nu}, \quad K(\theta) = \frac{E(\theta)}{3(1-2\nu)}, \quad E = E_0 + c_E (\theta - \theta_{E_0})
 \end{aligned}$$

II. Inelastisches Fließen

- Additive Zerlegung

$$1. \quad \bar{\mathbf{L}}_i = \bar{\mathbf{L}}_p + \bar{\mathbf{L}}_t$$

- Viskoplastizität

$$2. \quad \bar{\mathbf{L}}_i = \dot{\lambda} \sqrt{\frac{3}{2}} \bar{\mathbf{N}}^t$$

$$3. \quad \bar{\mathbf{N}} = \frac{\bar{\mathbf{M}}^{dev}}{\|\bar{\mathbf{M}}^{dev}\|}$$

$$4. \quad \dot{\lambda} = \left\langle \frac{\phi}{D} \right\rangle^m = \dot{e}_v$$

$$5. \quad \phi[\bar{\mathbf{M}}, Q] = \sigma_v - (Y[\theta] + Q)$$

$$6. \quad \sigma_v = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\bar{\mathbf{M}}^{dev}\|$$

$$7. \quad Y[\theta] = Y_0 + c_Y (\theta - \theta_{Y_0})$$

$$8. \quad Q[e_v] = Q_0 (1 - \exp(-be_v)) + H_p e_v$$

- Umwandlungsplastizität

$$9. \quad \bar{\mathbf{L}}_t = \dot{z}_3 \frac{3}{2} f'_1 K_{tpB}[\sigma_v] (\bar{\mathbf{M}}^{dev})^t + \dot{z}_4 \frac{3}{2} f'_1 K_{tpM}[\sigma_v] (\bar{\mathbf{M}}^{dev})^t$$

$$10. \quad K_{tpB}[\sigma_v] = K_{tp1B} + K_{tp2B} \sigma_v,$$

$$11. \quad K_{tpM}[\sigma_v] = K_{tp1M} + K_{tp2M} \sigma_v$$

$$12. \quad f'_1[z] = 2(1-z),$$

Tabelle 4.1 Konstitutive Gleichungen der Viskoplastizität und der Umwandlungsplastizität für die Zwischenkonfiguration

III. Umwandlungskinetik

- **Ferrit/Perlit \rightarrow Austenit** (1 \rightarrow 2):

$$1. \quad \dot{z}_2 = \mu_{12} (1 - z_2) H(\theta - A_{c1}) - \dot{z}_3 - \dot{z}_4$$

- **Austenit \rightarrow Bainit** (2 \rightarrow 3):

$$2. \quad \dot{r} = \alpha_{2u} \exp \left[-\frac{\theta - \theta^*[e_v]}{B_u} \right] \exp [-\beta_{2u} e_v] H(\theta_b - \theta) H(\theta - \theta^*[e_v])$$

$$+ \alpha_{2l} \exp \left[-\frac{\theta^*[e_v] - \theta}{B_l} \right] \exp [-\beta_{2l} e_v] H(\theta^*[e_v] - \theta) H(\theta - \theta_{MS})$$

$$3. \quad \dot{z}_3 = A_5 \exp \left[\frac{\theta^*[e_v] - \theta}{B_1} \right] \exp \left[-\frac{G^*}{R\theta} \right] \left\langle \frac{r - r^*}{r} \right\rangle^n z_2^\gamma H(\theta_b - \theta) H(\theta - \theta_{MS}),$$

$$4. \quad G^* = \frac{A_3 \theta_0^2 \Delta \theta^{1.5}}{(\Delta \theta Q^* + A_4 \theta_0 e_v \sigma_v)^2}$$

- **Austenit \rightarrow Martensit** (2 \rightarrow 4):

$$5. \quad \dot{z}_4 = \left\langle \frac{-\dot{\theta}}{k_\theta} \right\rangle (z_2 - z_4) H(\theta_{MS} - \theta).$$

IV. Materialparameter

Elastizität	$\kappa_{el} : E_0$	c_E	θ_{E0}	ν	
	ρ_1	ρ_2	ρ_3	ρ_4	θ_0
Wärmeausdehnung:	$\kappa_\theta : \alpha_1$				
Viskoplastizität:	$\kappa_{vp} : Y_0$	c_Y	θ_{Y0}	m	$D \quad H_p \quad Q_0 \quad b$
Ferrit/Perlit \rightarrow Austenit:	$\kappa_{z_2} : \mu_{12}$	A_{c1}			
Keimbildung des Bainit:	$\kappa_r : A_1$	θ_b	θ^*	α_{2u}	$\alpha_{2l} \quad B_u \quad B_l$
Austenit \rightarrow Bainit:	$\kappa_{z_3} : A_5$	B_1	n	γ	$A_3 \quad Q^*$
Austenit \rightarrow Martensit:	$\kappa_{z_4} : M_s$	k_θ			
TRIP flow:	$\kappa_{tp} : K_{tp1B}$	K_{tp2B}	K_{tp1M}	K_{tp2M}	
Parameter für Wärmeleitungsgleichung:	$\kappa_{tc} : \lambda_\theta$	c_d	L_{12}	L_{23}	L_{24}

Tabelle 4.1 Konstitutive Gleichungen der Viskoplastizität und der Umwangsplastizität für die Zwischenkonfiguration

pelten Algorithmus aus der Lösung des thermischen Problems, gefolgt von der Lösung des mechanischen Problems für jeden Zeitschritt besteht. Durch dessen Anwendung wird der Implementierungsaufwand des Prototypmodells verringert, so dass auch eine etwas schlechtere Konvergenz toleriert werden kann.

Ferner wird im Rahmen dieser Analyse angenommen, dass der Einfluss der latenten Wärme, die sich aus der Phasenumwandlung ergibt sowie die Wirkung der aus plastischer Deformation resultierenden Dissipationswärme auf das Temperaturfeld vernachlässigbar sind. Diese Annahme wird dadurch begründet, dass die äußere Wärmequelle (Induktionheizung) sehr viel größere Wärmemengen liefert, als die durch den irreversiblen Prozess erzeugte Wärme. Damit haben die latente Wärme sowie die Dissipationswärme einen marginalen Einfluss auf der Wärmeverteilung. Konsequenterweise folgt daraus, dass sich die Analyse auf die numerische Integration der in Tabelle 4.1 zusammengefassten konstitutiven Gleichungen konzentriert.

4.3.1 Integrationsschema

In Anlehnung an das Integrationsverfahren der Finite-Elemente-Methode wird hier ein dehnungsgesteuerter Algorithmus über einen endlichen Zeitschritt $\Delta t = {}^{n+1}t - {}^n t$ verwendet. Darüber hinaus wird davon ausgegangen, dass die Temperaturen ${}^n\theta$, ${}^{n+1}\theta$ als Ergebnis des thermischen Problems im Rahmen des oben erklärten gestaffelten Algorithmus übermittelt werden.

Als Ausgangspunkt der numerischen Integration dient die Fließregel (vgl. Gleichung (13) und (18) in MAHNKEN und SCHNEIDT [87]) in der Materialkonfiguration

$$\mathcal{B}_0 : \mathbf{L}_i = {}^*\Phi_i'[\bar{\mathbf{L}}_i] = \mathbf{F}_i^{-1} \cdot \bar{\mathbf{L}}_i \cdot \mathbf{F}_i = -\frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}_i^{-1} \cdot \mathbf{C}_i, \quad (4.59)$$

mit ${}^*\Phi_i'[\cdot]$ als inelastischen pull-back Operator. Die Multiplikation mit $2\mathbf{C}_i^{-1}$ ergibt

$$\dot{\mathbf{C}}_i^{-1} = -2 \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{C}_i^{-1}. \quad (4.60)$$

Aus der Anwendung des exponentiellen Integrators auf die Differentialgleichung (4.60) erhält man (vgl. z.B. WEBER und ANAND [139], ETEROVIC und BATHE [31], SIMO [116])

$$\begin{aligned} {}^{n+1}\mathbf{C}_i^{-1} &= \exp \left[-2 {}^{n+1}\mathbf{L}_i \right] \cdot {}^n \mathbf{C}_i^{-1} \\ &= \exp \left[-2 {}^{n+1}\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{L}_i \cdot {}^{n+1}\mathbf{F} \right] \cdot {}^n \mathbf{C}_i^{-1}, \end{aligned} \quad (4.61)$$

wobei von Gleichung (4.12) Gebrauch gemacht wurde.

Für die Integration der Wachstumsgeschwindigkeit der plastischen Dehnung in Gleichung (II) (Tabelle 4.1) wird das implizite Euler-Verfahren verwendet

$${}^{n+1}e_v = {}^n e_v + \Delta e_v, \quad (4.62)$$

wobei gilt

$$\begin{aligned} 1. \quad \Delta e_v &= \Delta \lambda, \\ 2. \quad \Delta \lambda &= \Delta t \left\langle \frac{{}^{n+1}\phi}{D} \right\rangle^m. \end{aligned} \quad (4.63)$$

Die Phasenanteile des Martensits ${}^{n+1}z_4$ (Gleichung (III) in Tabelle 4.1) und dessen Inkrement Δz können für gegebene Temperatur ${}^{n+1}\theta$ und für jeden neuen Zeitschritt ${}^{n+1}t$ direkt mit Hilfe der modifizierten Koistinen-Marburger-Beziehung berechnet werden

$${}^{n+1}z_4 = \begin{cases} (1 - {}^{n+1}z_1 - {}^{n+1}z_3) f({}^{n+1}\theta), & \Delta z_4 = {}^{n+1}z_4 - {}^n z_4 \text{ für } \theta(t) \leq \theta_m \\ {}^n z_4, & \Delta z_4 = 0 \text{ sonst} \end{cases}. \quad (4.64)$$

Die Anteile des Austenits ${}^{n+1}z_2$ lassen sich für den gegebenen Zeitpunkt ${}^{n+1}t$ und Temperatur ${}^{n+1}\theta$ analog ermitteln

$${}^{n+1}z_2 = \begin{cases} f({}^{n+1}t, {}^{n+1}\theta), & \Delta z_2 = {}^{n+1}z_2 - {}^n z_2, \text{ für } \theta(t) \geq A_{c1} \\ {}^n z_2 + \Delta z_2, & \Delta z_2 = -\Delta z_3 - \Delta z_4 \text{ sonst.} \end{cases} \quad (4.65)$$

Für die Integration der Phasenumwandlung vom Austenit zum Bainit (Gleichung (III) in Tabelle 4.1) wird ebenfalls das implizite Euler-Verfahren angewendet

$$\begin{aligned}
1. \quad {}^{n+1}r &= {}^n r + \Delta r & 2. \quad \Delta r &= \begin{cases} \Delta t \dot{r}({}^{n+1}\theta, {}^{n+1}t, \kappa_{vp}(B_u)) & \text{für } A_{c1} > \theta(t) > \theta^* \\ \Delta t \dot{r}({}^{n+1}\theta, {}^{n+1}t, \kappa_{vp}(B_l)) & \text{für } \theta^* > \theta(t) > \theta_m \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\
3. \quad {}^{n+1}z_3 &= {}^n z_3 + \Delta z_3 & 4. \quad \Delta z_3 &= \begin{cases} \Delta t \dot{z}_3({}^{n+1}\theta, {}^{n+1}t), & \text{für } A_{c1} > \theta(t) > \theta_m \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}
\end{aligned} \tag{4.66}$$

Zur besseren Übersicht wird im Folgenden auf den Index $n + 1$, der auf den aktuellen Zeitschritt hinweist, verzichtet. Fügt man Gleichung (4.61) in (4.5.2) ein und verwendet die Beziehung

$$\exp[\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{F}] = \mathbf{F}^{-1} \cdot \exp[\mathbf{A}] \cdot \mathbf{F},$$

gelangt man zu folgendem Ausdruck für den rechten Cauchy-Green-Tensor:

$$\mathbf{b}_e = \mathbf{F} \cdot \mathbf{C}_i^{-1} \cdot \mathbf{F}^t = \exp[-2\mathbf{l}_i] \cdot \mathbf{b}^{tr}, \quad \text{mit } \mathbf{b}^{tr} = \mathbf{F} \cdot {}^n \mathbf{C}_i^{-1} \cdot \mathbf{F}^t. \tag{4.67}$$

Hierbei bezieht sich \mathbf{b}^{tr} auf den Prädiktor (trial) des linken elastischen Cauchy-Green-Tensors.

Im nächsten Schritt wird \mathbf{b}_e entsprechend der Gleichung (4.9) in einen volumetrischen und einen deviatorischen Teil aufgeteilt. Dessen Logarithmierung wandelt die räumlichen logarithmischen Hencky-Dehnungen um

$$\begin{aligned}
1. \quad \ln J_e &= \ln J^{tr}, & \text{mit } J^{tr} &= \det[\mathbf{b}^{tr}]^{1/2}, \\
2. \quad \ln \hat{\mathbf{b}}_e &= \ln \hat{\mathbf{b}}^{tr} - 2\mathbf{g}^\sharp \cdot \mathbf{l}_i^t, & \text{mit } \hat{\mathbf{b}}^{tr} &= J^{tr-2/3} \mathbf{b}^{tr}.
\end{aligned} \tag{4.68}$$

Konsequenterweise kann der Kirchhoff-Spannungstensor $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{g}^\sharp \cdot \mathbf{m}$ unter Einsatz der Gleichungen (4.58.1) und (4.58.2) umformuliert werden

$$\begin{aligned}
1. \quad \boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}^{vol} + \boldsymbol{\tau}^{dev}, \quad \text{mit} \\
2. \quad \boldsymbol{\tau}^{vol} &= K[\theta] \ln J^{tr} \mathbf{g}^\sharp - K[\theta] \left(3\Delta\theta \alpha_1[\theta] + \sum_{i=2}^4 \left(\frac{\rho_1[\theta_0]}{\rho_i[\theta_0]} - 1 \right) z_i \right) \mathbf{g}^\sharp, \\
3. \quad \boldsymbol{\tau}^{dev} &= \boldsymbol{\tau}^{dev,tr} - 2G\Delta\lambda \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\boldsymbol{\tau}^{dev}}{\|\boldsymbol{\tau}^{dev}\|} - 3Gf'_1 (\Delta z_3 K_{tpB}[\sigma_v] + \Delta z_4 K_{tpM}[\sigma_v]) \boldsymbol{\tau}^{dev},
\end{aligned} \tag{4.69}$$

mit

$$\boldsymbol{\tau}^{dev,tr} = G \text{dev} \ln \mathbf{b}^{tr}. \tag{4.70}$$

Aus Gleichung (4.69.3) lässt sich folgern, dass $\boldsymbol{\tau}^{dev,tr}$ and $\boldsymbol{\tau}^{dev}$ koaxial sind, so dass die Gleichungen (4.69) umgeformt werden können

$$\begin{aligned}
1. \quad \boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}^{vol} + \boldsymbol{\tau}^{dev}, \quad \text{mit} \\
2. \quad \boldsymbol{\tau}^{vol} &= \frac{1}{3} \tau I_1 \mathbf{g}^\sharp, \quad \frac{1}{3} \tau I_1 = K[\theta] \ln J^{tr} - K[\theta] \left(3\Delta\theta \alpha_1[\theta] + \sum_{i=2}^4 \left(\frac{\rho_1[\theta_0]}{\rho_i[\theta_0]} - 1 \right) z_i \right), \\
3. \quad \boldsymbol{\tau}^{dev} &= \frac{1}{C_p} \left(\boldsymbol{\tau}^{dev,tr} - 2G\sqrt{\frac{3}{2}} \Delta\lambda \mathbf{n} \right), \quad \mathbf{n} = \frac{\boldsymbol{\tau}^{dev,tr}}{\|\boldsymbol{\tau}^{dev,tr}\|}, \\
4. \quad C_p &= 1 + 3Gf'_1 (\Delta z_3 K_{tpB}[\sigma_v] + \Delta z_4 K_{tpM}[\sigma_v]).
\end{aligned} \tag{4.71}$$

Es wird darauf hingewiesen, dass die Skalare $K_{tpB}[\sigma_v]$ und $K_{tpM}[\sigma_v]$ in den Gleichungen II.10 und II.11 von der Vergleichsspannung nach von Mises abhängig sind. Grundsätzlich kann dies mit Hilfe eines impliziten Ansatzes berücksichtigt werden. An dieser Stelle wird für diese Beziehungen ein expliziter Algorithmus verwendet

$$K_{tpB}[\sigma_v] = K_{tp1B} + K_{tp2B} {}^n \sigma_v, \quad K_{tpM}[\sigma_v] = K_{tp1M} + K_{tp2M} {}^n \sigma_v, \tag{4.72}$$

wobei ${}^n\sigma_v$ aus der vorangegangenen Zeitstufe gewonnen wird. Damit kann, ohne Einschränkungen in der Konvergenz zu tolerieren, eine erhebliche Vereinfachung in der Implementierung und gleichzeitig eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten erreicht werden [88].

4.3.2 Spektralzerlegung

Aufgrund der Annahme des isotropen Materialverhaltens und der isotropen Verfestigung stimmen die Basen der Eigenvektoren des linken elastischen Trial-Cauchy-Green-Tensors \mathbf{b}^{tr} und der Kirchhoff-Spannungen $\boldsymbol{\tau}$ überein. Demnach lässt sich die spektrale Zerlegung dieser Tensoren durchführen

$$1. \mathbf{b}^{tr} = \sum_{A=1}^3 (\lambda_A^{tr})^2 \mathbf{m}_A \implies 2. \boldsymbol{\tau} = \sum_{A=1}^3 \beta_A \mathbf{m}_A. \quad (4.73)$$

Hierbei stellen $(\lambda_A^{tr})^2$ und \mathbf{m}_A mit $A = 1, 2, 3$ die Eigenwerte bzw. die Eigenvektoren von \mathbf{b}^{tr} dar. β_A repräsentieren die Hauptwerte der Kirchhoff-Spannungen, welche unter Verwendung von Vektor- bzw. Matrixnotationen wie folgt zusammengefasst werden können:

$$\underline{\varepsilon}^{tr} := \begin{bmatrix} \ln \lambda_1^{tr} \\ \ln \lambda_2^{tr} \\ \ln \lambda_3^{tr} \end{bmatrix}, \underline{\beta} := \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix}, \underline{1} := \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \underline{I}_3 := \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}, \underline{I}_3^{dev} := \underline{I}_3 - \frac{1}{3} \underline{1} \otimes \underline{1}. \quad (4.74)$$

Die Hauptspannungen werden aus den Relationen

$$\begin{aligned} 1. \underline{\beta} &= \underline{\beta}^{vol} + \underline{\beta}^{dev} \quad \text{mit} \\ 2. \underline{\beta}^{vol} &= \frac{1}{3} {}^\beta I_1 \underline{1}, \quad \frac{1}{3} {}^\beta I_1 = K[\theta] \underline{1} \cdot \underline{\varepsilon}^{tr} - K[\theta] \left(3\Delta\theta \alpha_1[\theta] + \sum_{i=2}^4 \left(\frac{\rho_1[\theta_0]}{\rho_i[\theta_0]} - 1 \right) z_i \right), \\ 3. \underline{\beta}^{dev} &= \frac{1}{C_p} \left(\underline{\beta}^{dev,tr} - 2G\sqrt{\frac{3}{2}}\Delta\lambda\nu \right), \quad \nu = \frac{\underline{\beta}^{dev,tr}}{\|\underline{\beta}^{dev,tr}\|}, \\ 4. C_p &= 1 + 3Gf'_1 (\Delta z_3 K_{tpB}[\sigma_v] + \Delta z_4 K_{tpM}[\sigma_v]) \end{aligned} \quad (4.75)$$

mit ${}^\beta I_1 = \beta_1 + \beta_2 + \beta_3$ ermittelt. Dieses Gleichungsset stellt einen Pendant zu Gleichungen (4.71) in der Hauptachsendarstellung dar. Ferner ist dessen Struktur komplett mit dem in Abschnitt 3.3 vorgestellten Schema (Gleichungen (3.82)) zur Berücksichtigung der geometrisch linearen Theorie identisch (vgl. dazu auch SIMO [116]). Dabei entsprechen $\underline{\beta}$, $\underline{\beta}^{vol}$, $\underline{\beta}^{dev}$ jeweils $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\sigma}^{vol}$ und $\boldsymbol{\sigma}^{dev}$ in Gleichungen (3.3.1) und (3.83). Die in Gleichung II.4 (Tabelle 4.1) definierte Fließfunktion lässt sich in Bezug auf Hauptspannungen beschreiben

$$1. \phi = \sigma_v - (Y_0 + Q) \quad \text{mit} \quad 2. \sigma_v = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\underline{\beta}^{dev}\|. \quad (4.76)$$

4.3.3 Lokale Iteration

Da das Gleichungssystem (4.75) mit der Struktur des geometrischen linearen Fall übereinstimmt, können die Erkenntnisse aus Abschnitt 3.3.2 transferiert werden. Aus Gleichung (4.75.3) wird die skalare Beziehung

$$\|\underline{\beta}^{dev}\| = \frac{\|\underline{\beta}^{dev,tr}\| - 2G\sqrt{\frac{3}{2}}\Delta\lambda}{C_p} \quad (4.77)$$

gewonnen, wobei C_p in der Gleichung (4.75.4) definiert wird.

Als nächstes kann Gleichung (4.63.2) durch die Verwendung des Ergebnisses aus (4.77) für die Fließbedingung (4.76) als Residuum formuliert werden

$$r[\Delta\lambda] = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\|\underline{\beta}^{dev,tr}\| - 2G\sqrt{\frac{3}{2}}\Delta\lambda}{C_p} - R[\Delta\lambda] - Y_0 - \left(\frac{\Delta\lambda}{\Delta t}\right)^{\frac{1}{m}} D = 0. \quad (4.78)$$

Auf diese Weise werden die diskretisierten Evolutionsgleichungen (4.60) und (4.62) auf ein eindimensionales Problem reduziert, das einzig vom plastischen Multiplikator $\Delta\lambda$ abhängig ist. Für dessen Lösung wird das Newton-Verfahren eingesetzt

$$\begin{aligned} 1. \quad \Delta\lambda_{(k+1)} &= \Delta\lambda_k - \frac{r[\Delta\lambda_k]}{J[\Delta\lambda_k]}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \\ 2. \quad J[\Delta\lambda] &= \frac{\partial r[\Delta\lambda]}{\partial \Delta\lambda} = \frac{\partial \Phi_Y}{\partial \Delta\lambda} - \frac{D}{m} \frac{1}{\Delta\lambda} \left(\frac{\Delta\lambda}{\Delta t}\right)^{\frac{1}{m}}, \\ 3. \quad \frac{\partial \Phi_Y}{\partial \Delta\lambda} &= - \left(\frac{3G}{C_p} + H + bQ \exp[-b(n_{ev} + \Delta\lambda)] \right), \end{aligned} \quad (4.79)$$

wobei sich der Index k auf die Iterationsnummer bezieht.

4.3.4 Spektralzerlegung des Tangentenmoduls

Für die iterative Lösung des Randwertproblems im Rahmen der Finite-Elementen-Methode mit Hilfe des Newton-Raphson-Verfahrens ist der Einsatz des Tangentenmoduls, der als $\mathfrak{c} = 2\partial\tau/\partial\mathbf{g}^b$ definiert wird, notwendig. Das Tangentenmodul wird durch die Differenzierung des Kirchhoffschen Spannungstensors ermittelt. Die Berücksichtigung der Abhängigkeit $\beta_A[\underline{\varepsilon}^{tr}, J]$ resultiert in

$$\mathfrak{c} = \sum_{A=1}^3 \sum_{B=1}^3 \frac{d\beta_A}{d\varepsilon_B^{tr}} \mathbf{m}_A \otimes \mathbf{m}_B + \sum_{A=1}^3 2\beta_A \frac{d\mathbf{m}_A}{d\mathbf{g}^b}. \quad (4.80)$$

Die Herleitung und das Ergebnis für $d\mathbf{m}_A/d\mathbf{g}^b$ wird in SIMO [116] präsentiert. Die in Gleichung (4.80) erscheinenden Terme $d\beta_A/d\varepsilon_B^{tr}$ und $d\beta_A/dJ$ werden mit Hilfe der Ableitung von β_A in Gleichung (4.75) ermittelt. Unter Verwendung der Gleichungen (4.75) erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{d\beta}{d\varepsilon^{tr}} &= K\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \frac{2G}{C_{tp}} \underline{I}_3^{dev} - \sqrt{\frac{3}{2}} \Delta\lambda \frac{(2G)^2}{C_p} \frac{1}{\|\underline{\beta}^{dev,tr}\|} \left(\underline{I}_3^{dev} - \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) \\ &\quad - \sqrt{\frac{3}{2}} \left(\frac{2G}{C_p} \right)^2 \frac{1}{J[\Delta\lambda]} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (4.81)$$

wobei bezüglich der Definition von $J[\Delta\lambda]$ auf Gleichung (4.79) verwiesen wird.

4.4 Simulation des Hybridumformprozesses

In diesem Abschnitt wird der Hybridumformprozess auf der Grundlage des in den Kapiteln 3 und 4 entwickelten und implementierten, phänomenologischen, makroskopischen Materialmodells simuliert. Als erstes erfolgt die Abbildung des Hybridumformprozesses mit den Prozessparametern nach WEIDIG *et al.* [143] im FEM-Programm Abaqus/Standard. Um zu veranschaulichen, welche Gefügeverteilungen im Hybridumformprozess möglich sind, werden im nächsten Schritt die Prozessparameter variiert.

4.4.1 Prozessbeschreibung

Die Abläufe des thermomechanisch gekoppelten Hybridumformprozesses werden in der Abbildung 4.2 veranschaulicht. Die Prozesskette kann in drei Schritte unterteilt werden:

1. Erwärmung und Transfer,
2. Umformung,
3. Abkühlung.

Im ersten Prozessschritt wird ein zylindrisches Werkstück aus niedriglegiertem Schmiedestahl 51CrV4 mit einer Länge von 200 mm und einem Durchmesser von 30 mm in die Aufheizstation eingeführt. Dabei wird die Mitte des Zylinders in einem Bereich von 60 mm induktiv erwärmt. Die Erwärmung erfolgt in zwei Stufen. Die Haupterwärmung mit 42 kW (70% der max. Leistung) dauert 12 Sekunden mit einem abschließenden, fünf Sekunden langem Nachwärmen mit einer reduzierten Leistung von 15 kW. Das Nachwärmen dient zur Einstellung eines homogenen Temperaturprofils im Inneren des Werkstücks. Die dafür benötigte Wärmeleistung kompensiert die Wärmeverluste infolge der Wärmestrahlung und des Wärmeübergangs an die Umgebung und liefert die benötigte Wärmemenge zur Erwärmung der tieferen Schichten. Die maximale Oberflächentemperatur beträgt nach der Aufheizphase 1350 °C. Für den Transport in die Umformstation werden ca. 4 Sekunden benötigt.

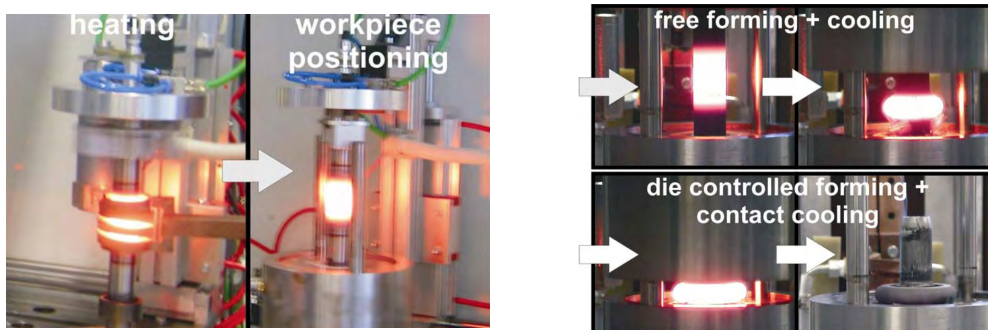


Abb. 4.2 Prozesskette der Hybridumformung [141]

Im nächsten Schritt wird die Freiumformung des Flanschbereichs der Welle mit einer abschließenden Ausformung im Werkzeug kombiniert. Nach der Umformung wird die Welle in einem geschlossenen, relativ kalten Werkzeug abgekühlt. Dabei wird der hohe Wärmeüberganskoeffizient zwischen Festkörpern ausgenutzt, um eine höhere Abkühlrate des Wellenflansches zu erzielen.

4.4.2 Simulation des Standardprozesses

Im Rahmen der Simulation wird die thermomechanisch gekoppelte FEM-Berechnung des Werkstücks, analog zum realen Prozess, in drei Teile, Erwärmung, Umformung und Abkühlung (Abb. 4.3.a) unterteilt. Aufgrund der rotationssymmetrischen Geometrie und Belastung sowie der Randbedingungen sowohl des Werkstücks als auch des Werkzeuges kann eine Simulation des FEM-Modells mit axialsymmetrischem Elemententyp CAX4RT verwendet werden. Die dazu notwendigen Randbedingungen sind in Abbildung 4.3.b veranschaulicht. Die Starttemperatur sowohl vom Werkstück als auch vom Werkzeug beträgt 27 °C (300 K). Die induktive Erwärmung wird aufgrund der geringen Eindringtiefe des elektromagnetischen Feldes (siehe dazu z.B. [94]) mit Wärmestrom Q_1 an der Zylinderoberfläche modelliert. Der zeitliche Verlauf und die Höhe des Wärmestroms ist in Abbildung 4.3.a dargestellt. Des Weiteren bildet dieses Diagramm die Verschiebung u des Werkzeuges ab und beschreibt damit den zweiten Prozessschritt. Dem folgt eine vollständige Abkühlung des Werkstücks, die sich in 279 Sekunden vollzieht. Diese wird im Rahmen der Simulation durch einen thermomechanischen Kontakt zwischen dem Werkstück und dem Werkzeug abgebildet.

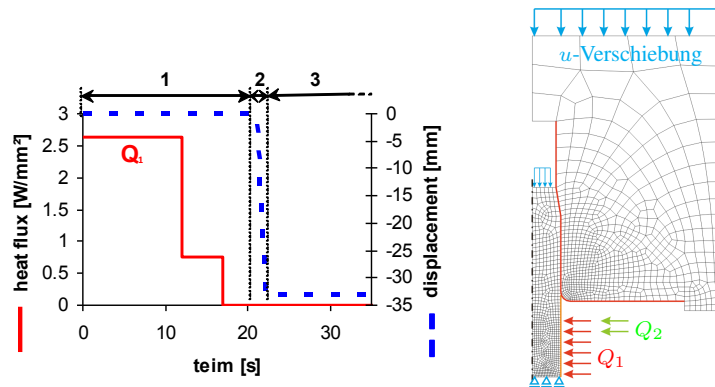


Abb. 4.3 Randbedingungen: a) Zeitlicher Verlauf der Werkzeugverschiebung und des Wärmestroms b) mechanische und thermische Randbedingungen

Die Simulationsergebnisse des Temperaturprofils in der ersten Prozessphase sind in Abbildung 4.4 dargestellt. Abbildungen 4.5 und 4.6 veranschaulichen die Temperaturverteilung während der Umformung und der Abkühlphase. Die Simulationsergebnisse der Phasenverteilung werden in Abbildung 4.8 zusammengeführt. Diese zeichnen sich dadurch aus, dass sich bei der Standardprozessführung [143] kaum eine bainitische Phase gebildet hat. Die Verteilung der martensitischen Phase zeigt deutliche Übereinstimmungen mit der Gefügeverteilung im Schlifffbild der realen Welle (Abb. 4.7).

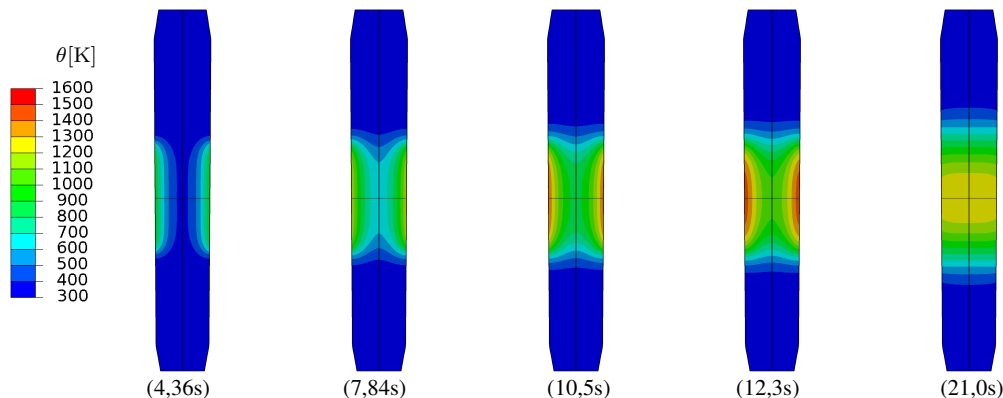


Abb. 4.4 Simulation des Standardprozesses: Temperaturverteilung in der Aufheizphase und nach dem Transport zur Presstation (21s) (Prozessschritt 1 (Abb. 4.3.a))

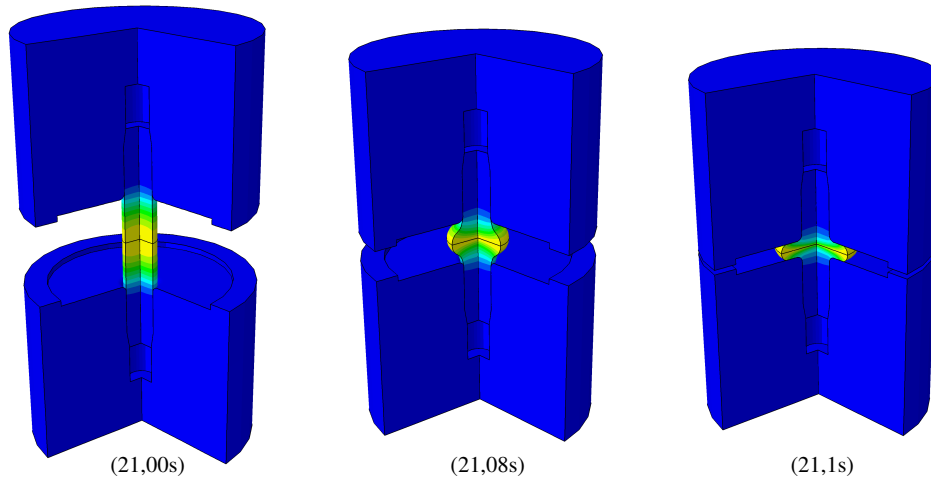


Abb. 4.5 Simulation des Standardprozesses: Temperaturverteilung während der Umformung (Prozessschritt 2)

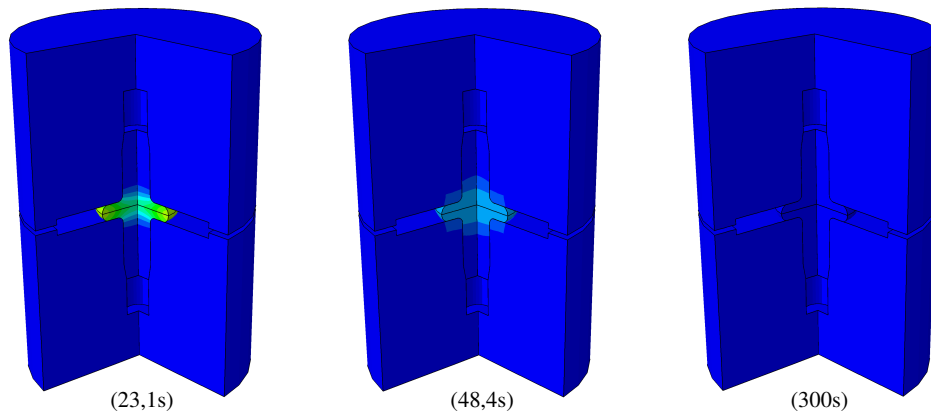


Abb. 4.6 Simulation des Standardprozesses: Temperaturverteilung in der Abkühlphase (Prozessschritt 3)

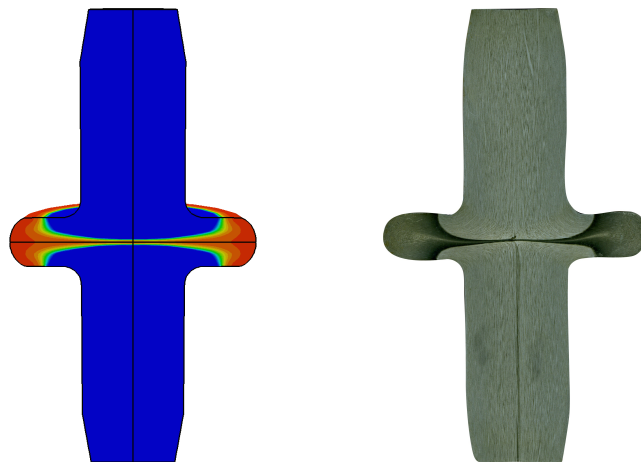


Abb. 4.7 Simulation des Standardprozesses: Vergleich des martensitischen Gefügeferlaufs zwischen der Simulation und der realen Flanschelle (Teilprojekt A1 des SFB/TR TRR 30)

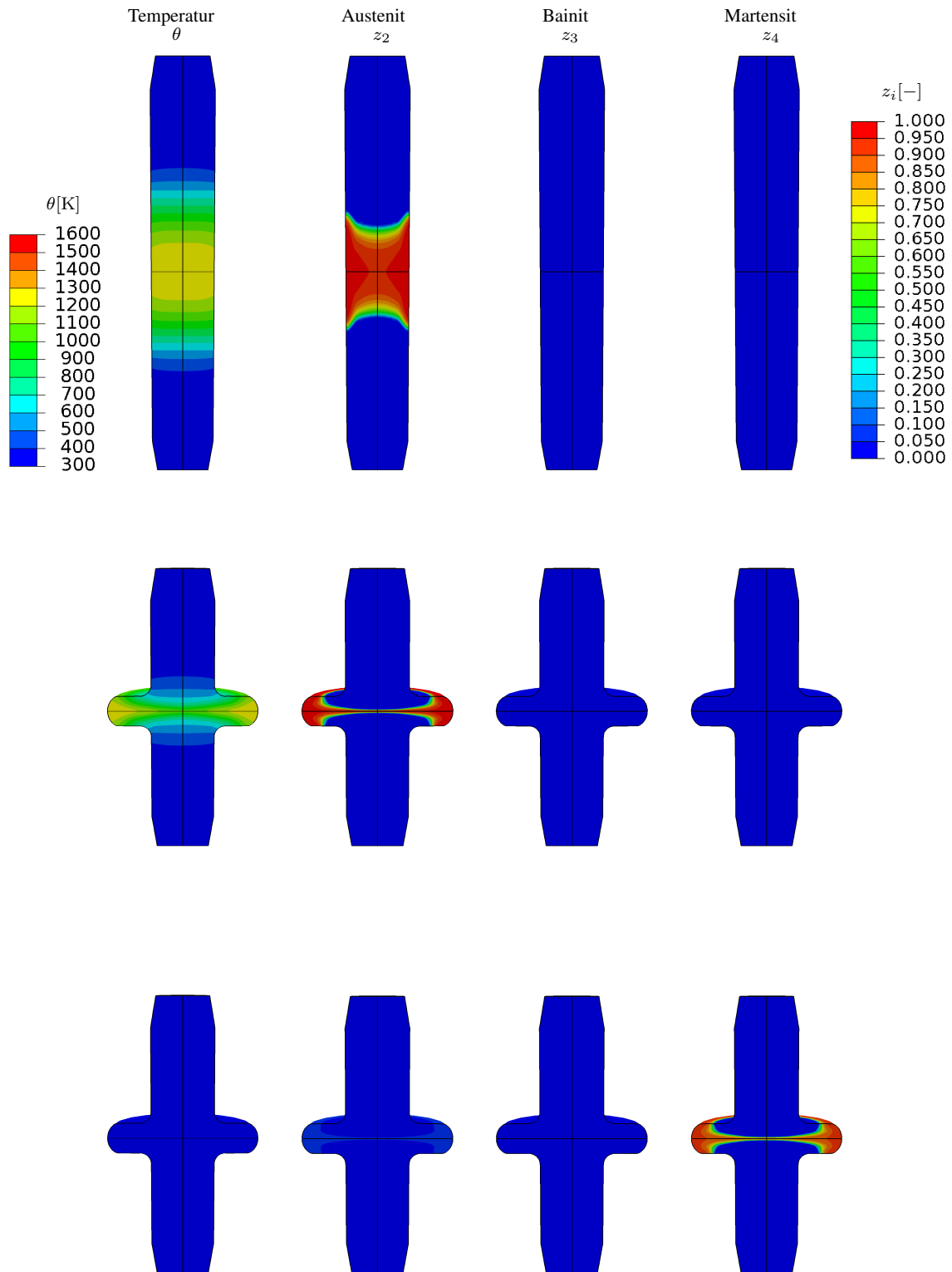


Abb. 4.8 Simulation des Standardprozesses: Temperatur- und Phasenverteilung von Austenit, Bainit und Martensit nach Prozessschritt 1, 2 und 3 (Abb. 4.3.a)

4.4.3 Variation der Ausgangstemperatur

Die Erhöhung der Duktilität des Wellenflanschs mit gleichzeitiger Beibehaltung der Festigkeit kann durch die Steigerung der Anteile der bainitischen Phaseanteile erreicht werden. Als eine der Strategien dafür bietet sich das Vorheizen der zylindrischen Halbzeuges in einem Hochtemperaturofen an. Es werden hierbei unterschiedliche Starttemperaturen [500 K, 774 K, 874 K, 924 K] des Rollings simuliert. Aufgrund der im Vergleich zum Standardprozess höheren Starttemperatur muss die Wärmestrommenge, die die Leistung der Induktionheizung repräsentiert, insoweit angepasst werden, dass die maximale Temperatur dem Höchstwert des Standardprozesses entspricht. Die restlichen Prozessparameter entsprechen denen des Standardprozesses. Die Ergebnisse der Temperatur- und Phasenverteilung für Austenit, Bainit und Martensit in Abhängigkeit von der Starttemperatur werden in den Abbildungen 4.9, 4.11 und 4.10 präsentiert. Die in Abbildung 4.10 dargestellten Simulationsergebnisse veranschaulichen eine Steigerung des Bainitanteils im Wellenflansch bei Vorliegen einer höheren Vorheiztemperatur.

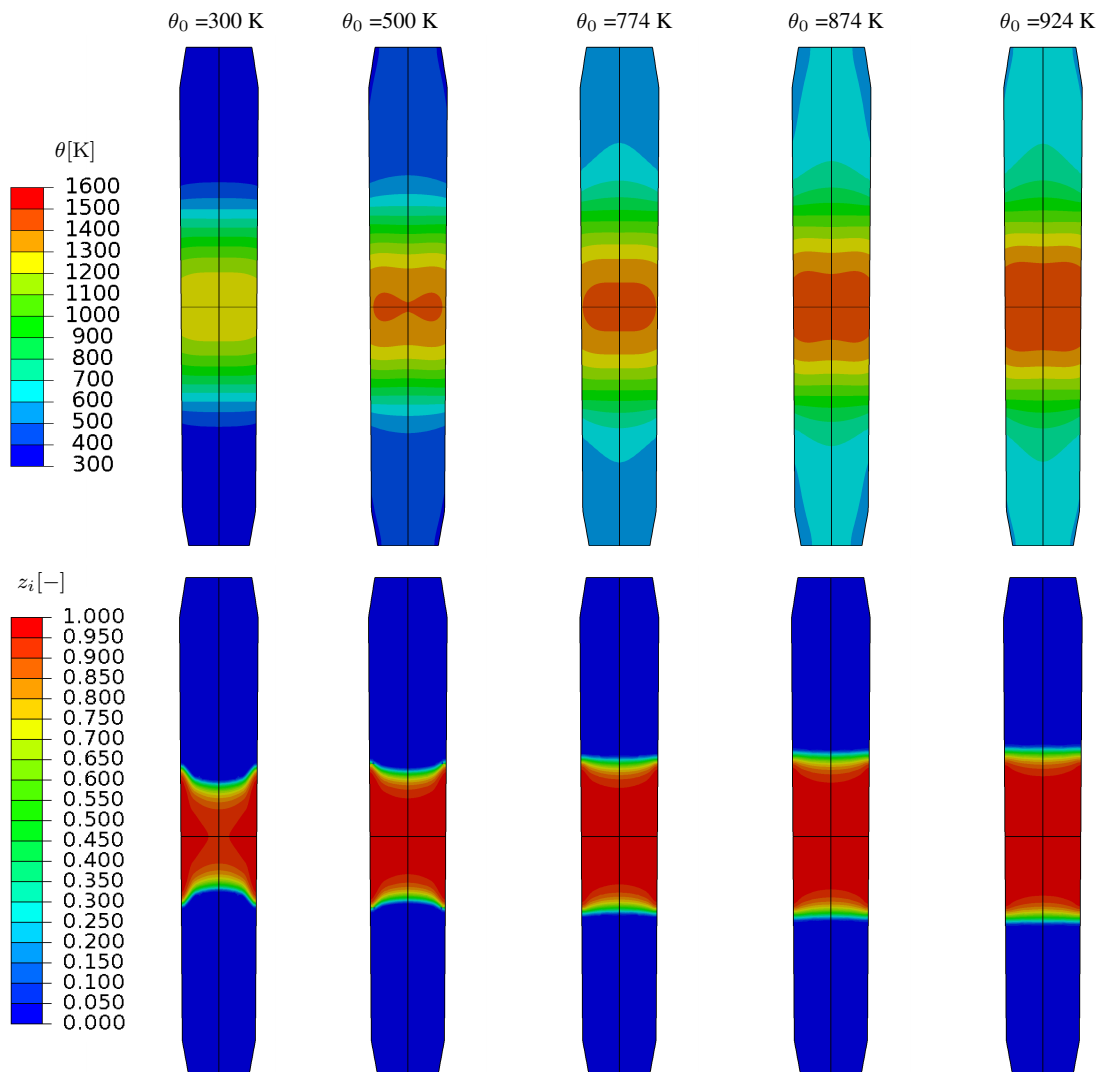


Abb. 4.9 Variation der Ausgangstemperatur: Temperatur- und Phasenverteilung von Austenit nach Prozessschritt 1 (Abb. 4.3.a)

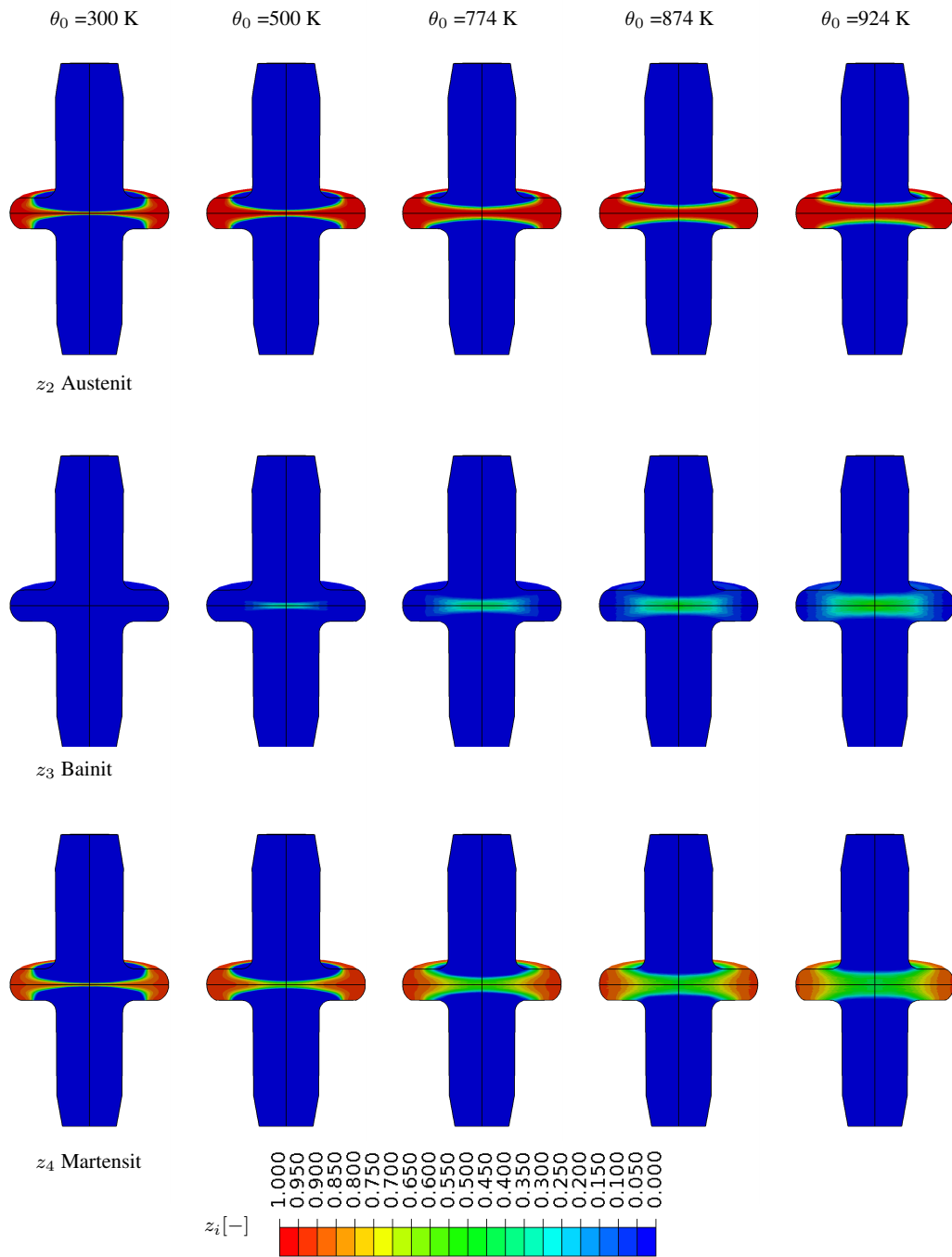


Abb. 4.10 Variation der Ausgangstemperatur: Phasenverteilungen von Austenit nach Prozessschritt 2 (Abb. 4.3.a), Martensit und Bainit nach Prozessschritt 3 (Abb. 4.3.a)

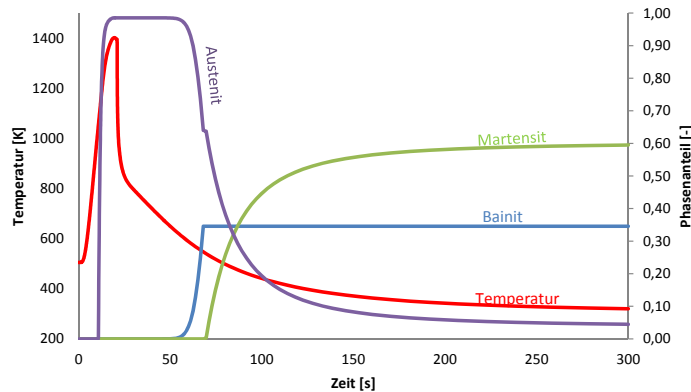


Abb. 4.11 Variation der Ausgangstemperatur: Temperatur- und Phasenverlauf von Austenit, Bainit und Martensit über die Zeit mit Starttemperatur von 500 K in Element 220 (Mitte der Probe)

4.4.4 Variation der Prozessführung

Den Gegenstand der Untersuchung dieses Abschnitts bildet die Analyse der Entwicklung der martensitischen Phase in Abhängigkeit vom Zeitprofil der induktiven Erwärmung. Als Referenz dient der in Abschnitt 4.4.2 beschriebene Standardprozess. Dieser entspricht der Variante 1 in Abbildung 4.12. Im Rahmen der Analyse wird das Profil des Zeitverlaufs in Abhängigkeit von der Wärmestrommenge variiert. Bei diesem Prozess wird die induktive Erwärmung aufgrund der geringen Eindringtiefe des elektromagnetischen Feldes mit dem Wärmestrom Q_1 an der Zylinderoberfläche modelliert. Der zeitliche Verlauf und die Höhe des Wärmestroms wird in Abbildung 4.12 dargestellt. Dieser Verlauf kann in zwei Bereiche, die Haupterwärmung und die Nachwärmung, aufgeteilt werden (siehe Abschnitt 4.4.1). Für die Variante 1 wird die Haupterwärmung mit einer Wärmestrommenge von $2,5 \text{ W/mm}^2$ über 10 s, und die Nachwärmung mit $0,5 \text{ W/mm}^2$ über 4 s, gewählt. Bei diesem Prozess bildet sich Martensit über den ganzen Querschnitt des Flansches aus.

Bei der Variante 2 wird der Haupterwärmung mit einer geringeren Wärmestrommenge von 20 W/mm^2 , aber über einen längeren Zeitraum und die Nachwärmung über einen kürzeren Zeitraum modelliert. Damit wird die Bildung des Martensits nur am Rande des Flansches erreicht.

Variante 3 ist durch eine am Anfang geringere Wärmestrommenge, die zu einer langsamen und homogenen Erwärmung führt und eine abschließende kurze und hohe Wärmeeinbringung gekennzeichnet. Da die Temperatur nach dem ersten Erwärmungsbereich unterhalb der Austenitisierungstemperatur liegt, bildet sich der Martensit nur als dünne Schicht am Rand des Flansches. Austenitbildung erfolgt hierbei durch das abschließende schnelle Aufheizen in der zweiten Phase.

Die gleiche Strategie wird auch für die Variante 4 verwendet mit der Ausnahme, dass die zweite Erwärmungsphase durch eine außermittig liegende Wärmequelle (Q_2 in Abbildung 4.3) realisiert wird. Dieses Verfahren resultiert in einer Verteilung des Martensits an den Flanschflächen und dem relativ weichen Gefüge am Umlaufrand.

Mit Hilfe dieser Untersuchung wird die Vielfältigkeit des Hybridumformprozesses gezeigt. Insbesondere wird veranschaulicht, dass die Erstellung der unterschiedlichen Gradientenverläufe allein durch die Veränderung der Erwärmungsprofils beeinflusst werden kann.

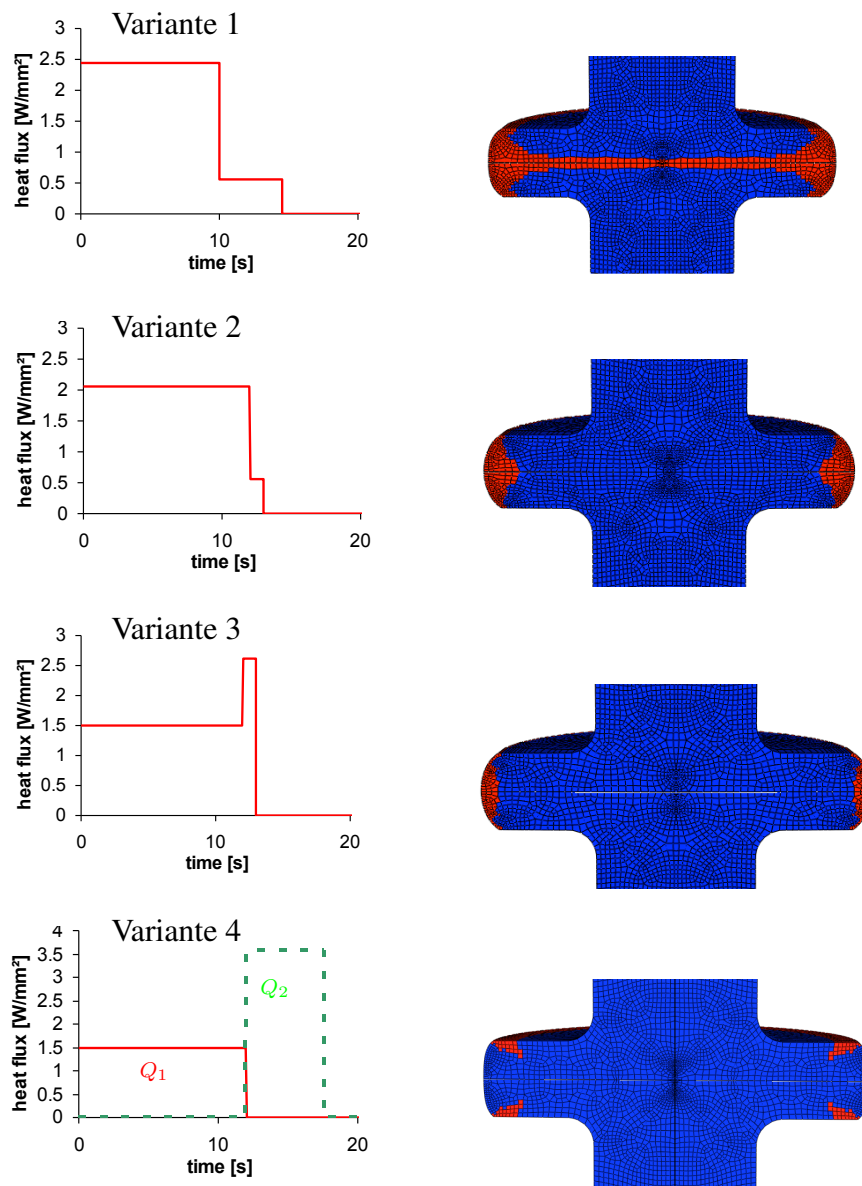


Abb. 4.12 Variation der Prozessführung: Verteilung des martensitischen Gefüges infolge von Variierung des Verlaufs der Wärmestrommenge

Fazit

Den Gegenstand des vierten Kapitels bildet die Entwicklung eines thermodynamisch konsistenten Mehrphasenmodells für große Deformationen. Auf der Grundlage dieses makroskopischen Modells wurde sowohl die Austenitisierung während der Aufheizphase als auch die Bildung von Martensit, Bainit und Mischgefügen während der Umform- und der Abkühlphase untersucht. Die Beschreibung der Umwandlungsplastizität erfolgte hierbei auf der Grundlage des Leblond-Ansatzes. Für die Analyse des allgemeinen plastischen Verhaltens wurde der klassische Ansatz der von-Mises-Plastizität eingesetzt. Ferner wurde die Implementierung des Modells um die spektrale Zerlegung des linken elastischen Cauchy-Green-Tensors sowie die Kirchhoff-Spannung erweitert. Die anschließende FEM-Simulation des Hybridumformprozesses liefert Ergebnisse, die eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der errechneten Verteilung der martensitischen Phase mit der Gefügeverteilung im Schliffbild der realen Welle aufweisen. Des Weiteren wurde die Möglichkeit des Einsatzes der Finite-Elemente-Methode für die Vorhersage der resultierenden Phasenverteilung durch die Variation der Prozessparameter analysiert. Die Untersuchung des Einflusses der Ausgangstemperatur auf die Phasenverteilung in der Welle hat aufgezeigt, dass durch das vorherige Vorheizen des Werkstücks eine signifikante Bildung des bainitischen Gefüges im Flansch ermöglicht wird. Ferner steigt der bainitische Anteil bei höheren Ausgangstemperaturen. Die Veränderung des Leistungsprofils der induktiven Erwärmung stellt eine weitere Möglichkeit sowohl zur Veränderung der Verteilung als auch der Form des harten Bereiches dar. Im Rahmen dieser Analyse erfolgte die Modifikation der Phasengradierung exemplarisch anhand von drei Variationen des Aufheizprofils.

Kapitel 5

Mehrskalenmodellierung

Die makroskopischen Effekte der Phasenumwandlung, Umwandlungsplastizität und Umwandlungskinetik basieren auf Vorgängen sowohl auf der Mikro- als auch auf der Mesoebene des Gefüges. Um diese Effekte anhand der numerischen Simulation nachbilden zu können, bedarf es eines physikalisch motivierten Materialmodells, das die Phänomene auf allen Ebenen der Materialstruktur und die Verbindung zwischen diesen Ebenen abbilden kann.

5.1 Konstitutive Gleichungen - Verallgemeinertes Modell

5.1.1 Thermodynamische Formulierung der Makroebene

Die im Rahmen dieses Kapitels verwendeten konstitutiven Gleichungen basieren auf der geometrischen linearen Theorie. Die Grundlagen sowie die verwendeten Annahmen wurden bereits in Abschnitt 3.1.1 dargestellt und werden an dieser Stelle nicht näher beleuchtet.

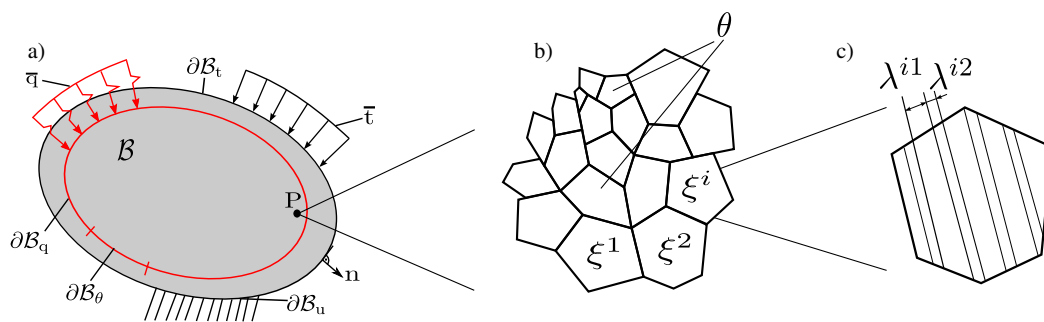


Abb. 5.1 Mehrskalenmodell: a) makroskopische Konfiguration \mathcal{B} , b) mesoskopische Konfiguration eines Polykristalls mit einem Volumenanteil ξ^i , c) Mikroskopische Konfiguration eines Einzelkorns mit den Varianten λ^{ij} ; Temperatur θ ist homogen

In Abbildung 5.1 wird das Material sowohl als eine koexistierende Mischung von Polykristallen als auch in Bainit und Austenit aufgespalten dargestellt. Im allgemeinen Fall ist die makroskopische Konzentration der Legierungselemente im Material konstant und unabhängig von der Zeit. Eine Ausnahme stellt z.B. die nicht homogene makroskopische Kohlenstoffverteilung nach einem Aufkohlprozess dar. Da diese Sonderverfahren beim betrachteten Hybridumformprozesses keine Rolle spielen,

wird die Kohlenstoffkonzentration im Material als homogen angenommen. Ferner wird korrespondierend dazu auch die Temperatur θ als eine makroskopische Größe verstanden, die sich gleichmäßig im Polykristall verteilt. Die Kohlenstoffdiffusion auf dem mesoskopischen Niveau, d.h. innerhalb des Polykristalls während der Phasentransformation (siehe dazu beispielsweise BHADSHIA [17]) wird im Modell nicht berücksichtigt. Bezüglich der Zusammenfassung der Bilanzgleichungen für Mehrskalenmodellierung wird auf Abschnitt 3.1.3 verwiesen.

5.1.2 Meso-Mikro-Ebene

Die in Abbildung 5.1.b dargestellte mesoskopische Ebene beschreibt sowohl die mechanischen als auch die umwandlungsspezifischen Eigenschaften eines Polykristalls, der mit jedem Materialpunkt der makroskopischen Konfiguration verbunden ist. Das Polykristall soll in Anlehnung an HACKL UND HEINEN [48] aus N Kristallen bestehen. Im Allgemeinen kann die Anzahl der Kristalle in einem Polykristall in Abhängigkeit von der Position von \mathbf{x} zum Punkt P in der makroskopischen Konfiguration \mathcal{B} (siehe Abb. 5.1.a) variieren. Da im Rahmen dieser Arbeit die spezifische Anzahl der Körner in einem Polykristall nicht definiert wird, erlaubt die Form $N = N(\mathbf{x})$ zwischen grob- und feingekörnten Arealen innerhalb des Materials zu differenzieren. Der Volumenanteil eines Kristalls mit der Kristallorientierung i wird als ξ^i bezeichnet. Ferner erfüllen alle Polykristalle auf der Mesoskala die normierte Bedingung

$$\sum_{i=1}^N \xi^i = 1. \quad (5.1)$$

Im Folgenden werden für alle Kristalle konstante Volumenanteile $\dot{\xi}^i = 0$ angenommen. Jedes Kristall auf der Mikroskala hat n Varianten, wobei der Index j eine Spannweite von 0 für den Austenit bis zur Anzahl der bainitischen Varianten n aufweist. Hierbei erfüllt der Volumenanteil von austenitischen λ^{i0} und bainitischen Varianten λ^{ij} , $j = 1, \dots, n$, $i = 1, \dots, N$ den Massenerhaltungssatz und jede Variante hat eine Spannweite, die zwischen Null und Eins liegt. Zusammenfassend gilt für alle $i \in \{1, \dots, N\}$ und $j \in \{1, \dots, n\}$:

$$\begin{aligned} 1. \quad & \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} = 1, \\ 2. \quad & \lambda^{ij} \geq 0, \\ 3. \quad & \lambda^{ij} \leq 1. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Prinzipiell kann das Ergebnis mit Hilfe der ersten zwei Bedingungen bestimmt werden. Die Bedingung (5.2.3) wird lediglich zur Kontrolle des projizierten Newton-Algorithmus im späteren Abschnitt 5.3 eingesetzt.

Die Austenitisierung vom niedriglegierten Stahl ist nur oberhalb der Gleichgewichtstemperatur A_{c1} möglich (siehe dazu Abschnitt 2.1.1). Daher kann Austenit bei Temperaturen unter A_{c1} und über M_S (martensitische Starttemperatur) in Ferrit, Perlit und Bainit transformieren. Eine umgekehrte Umwandlung ist bei dieser Temperaturführung nicht zu erwarten. Im betrachteten Hybridumformprozess tritt die Austenit-zu-Ferrit-Umwandlung und die Austenit-zu-Perlit-Transformation verfahrensbedingt nicht auf. Aus diesem Grund wird im Folgenden lediglich die Transformation vom Austenit zum Bainit berücksichtigt. Die Evolution derer Varianten muss folgende Bedingungen erfüllen:

$$\begin{aligned} 1. \quad & \sum_{j=0}^n \dot{\lambda}^{ij} = 0, \\ 2. \quad & \text{Austenit } \dot{\lambda}^{i0} \leq 0, \\ 3. \quad & \text{Bainit } \dot{\lambda}^{ij} \geq 0. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Des Weiteren wird eine additive Zerlegung des gesamten mesoskopischen Verzerrungstensors der j -ten Variante vom i -ten Kristall angenommen

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{ij} = \boldsymbol{\varepsilon}_{te}^{ij} + \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}^{ij} + \boldsymbol{\eta}_t^{ij} = \boldsymbol{\varepsilon}_{el}^{ij} + \boldsymbol{\varepsilon}_{th}^{ij} + \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}^{ij} + \boldsymbol{\eta}_t^{ij}. \quad (5.4)$$

$\boldsymbol{\varepsilon}^{ij}$ besteht aus einem thermoelastischen $\boldsymbol{\varepsilon}_{te}^{ij}$, einem plastischen $\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}^{ij}$ und einem Transformationsteil $\boldsymbol{\eta}_t^{ij}$. Ferner stellt der thermoelastische Teil $\boldsymbol{\varepsilon}_{te}^{ij}$ die Summe aus einem elastischen $\boldsymbol{\varepsilon}_{el}^{ij}$ und einem thermischen Teil $\boldsymbol{\varepsilon}_{th}^{ij}$ dar. Der letzte Teil repräsentiert die thermische Ausdehnung

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{th}^{ij} = (\theta - \theta_0) \mathbf{A}^{ij}, \quad (5.5)$$

mit \mathbf{A}^{ij} als thermischen Ausdehnungstensor des i -ten Kristalls und der j -ten bainitischen Variante für $j > 0$ bzw. vom Austenit für $j = 0$. Bei Vorliegen einer thermalen Isotropie gilt

$$\mathbf{A}^{ij} = \alpha^{ij} \mathbf{I}, \quad (5.6)$$

mit α^{ij} als thermischen Ausdehnungskoeffizienten.

In Gleichung (5.4) stellt $\boldsymbol{\eta}_t^{ij}$ die rotierte Transformationsverzerrung für die Variante j des Kristalls i dar. Diese erhält man aus dem Zusammenhang

$$\boldsymbol{\eta}_t^{ij} = (\mathbf{R}^i)^T \cdot \boldsymbol{\eta}_t^j \cdot \mathbf{R}^i, \quad \text{mit } \boldsymbol{\eta}_t^j = \mathbf{U}_J - \mathbf{I}, \quad (5.7)$$

wobei $\boldsymbol{\eta}_t^j$ die linearisierte Transformationsverzerrung vom Austenit zur bainitischen Variante j , $\mathbf{R}^i \in SO_3$, $i = 1, \dots, N$ den Rotationstensor vom Kristall i , \mathbf{U}_J den symmetrischen Verschiebungstensor und \mathbf{I} den Einheitstensor darstellen. Der Austenit wird als Referenzkonfiguration für die Transformationsverzerrung $\boldsymbol{\eta}^{i0} = \mathbf{0}$ verwendet.

5.1.3 Makro-Meso-Beziehung

Für die weitere Analyse werden unter Verwendung der Reussähnlichen-Mischungsregel zwischen der makroskopischen und mesoskopischen Verzerrung folgende Beziehungen angenommen:

$$\begin{aligned} 1. \quad \boldsymbol{\varepsilon} &:= \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\varepsilon}^{ij}, \quad 2. \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{te} := \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\varepsilon}_{te}^{ij}, \quad 3. \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{el} := \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\varepsilon}_{el}^{ij}, \\ 4. \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{th} &:= \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\varepsilon}_{th}^{ij}, \quad 5. \quad \boldsymbol{\eta} := \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\eta}_t^{ij}, \quad 6. \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{pl} := \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}^{ij}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Hierbei ist $\boldsymbol{\varepsilon}$ der makroskopische Verzerrungstensor aus Gleichung (3.2), $\boldsymbol{\varepsilon}_{te} = \boldsymbol{\varepsilon}_{el} + \boldsymbol{\varepsilon}_{th}$, $\boldsymbol{\eta}$, $\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}$ stellen jeweils den makroskopische thermoelastischen, den makroskopische Transformationstensor bzw. den makroskopische plastischen Verzerrungstensor dar.

Durch Einsetzen des gesamten makroskopischen Verzerrungstensor (5.8.1) in Gleichung (3.21) erhält man die Spannungsleistung

$$\mathcal{P} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\sigma} : \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\varepsilon}^{ij} \right) = \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{ij} + \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \dot{\lambda}^{ij} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}^{ij}. \quad (5.9)$$

5.1.4 Clausius-Duhem-Ungleichung

Die freie Helmholtz-Energie Ψ

$$\Psi = \Psi[\varepsilon_{el}^{ij}, q_k^{ij}, \lambda^{ij}, \theta] \quad (5.10)$$

ist eine Funktion der ε_{el}^{ij} elastischen Tensoren aus Gleichung (5.4), der internen verzerrungsähnlichen Verfestigungsvariablen q_k^{ij} , $k = 1, \dots, n_q$, der Varianten λ^{ij} mit den Nebenbedingungen (5.2) und der Temperatur θ . Hierbei spielen λ^{ij} die Rolle der internen Variablen. Wie schon in Abschnitt 5.1.1 erwähnt, wird die Temperatur θ als eine homogenisierte Größe für den Polykristall in Abbildung 5.1 betrachtet.

Setzt man die additive Zerlegung (5.4) für den totalen mesoskopischen Verzerrungstensor und Gleichung (5.9) für die Spannungsleistung ein, lässt sich die Clausius-Duhem-Ungleichung (3.20.3) umformen zu:

$$\begin{aligned} \theta \gamma = & \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^n \left(\frac{1}{\rho_0} \xi^i \lambda^{ij} \sigma - \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{el}^{ij}} \right) : \dot{\varepsilon}_{el}^{ij} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^n \xi^i \lambda^{ij} \sigma : \dot{\varepsilon}_{pl}^{ij} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^n \sum_{k=1}^{n_q} \frac{\partial \Psi}{\partial q_k^{ij}} \dot{q}_k^{ij} \\ & - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^n \dot{\lambda}^{ij} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \lambda^{ij}} - \frac{1}{\rho_0} \xi^i \sigma : \varepsilon^{ij} \right) - \left(\eta + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \frac{1}{\rho_0 \theta} \mathbf{q}_0 \cdot \text{Grad } \theta \geq 0. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Die Klammernausdrücke $\left(\frac{1}{\rho_0} \xi^i \lambda^{ij} \sigma - \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{el}^{ij}} \right)$ und $\left(\eta + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right)$ werden nach der Standardargumentation der klassischen rationalen Thermodynamik [25] gleich Null gesetzt. Daraus folgen die Relationen

$$1. \sigma^{ij} = \xi^i \lambda^{ij} \sigma = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{el}^{ij}} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{te}^{ij}}, \quad 2. \eta = -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta}, \quad (5.12)$$

wobei σ^{ij} als gewichteter Spannungstensor mit dem Volumenanteil der Variante j im Kristall i interpretiert wird. Es gilt zu beachten, dass diese nicht der realen Spannung der Variante j im Kristall i entsprechen muss. Daher können σ^{ij} und η auch als thermodynamische Kräfte betrachtet werden. Im nächsten Schritt werden weitere thermodynamische Kräfte definiert

$$1. Q_k^{ij} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial q_k^{ij}}, \quad 2. \Lambda^{ij} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda^{ij}} - \xi^i \sigma : \varepsilon^{ij}. \quad (5.13)$$

Hierbei repräsentiert Q_k^{ij} die Verfestigungsspannung und Λ^{ij} die chemisch-mechanischen Treibkräfte der Phasentransformation. Mithilfe der Dissipationstherme

$$\begin{aligned} 1. \mathcal{D}^i &= \sum_{j=0}^n \sum_{k=1}^{n_q} \sigma^{ij} : \dot{\varepsilon}_{pl}^{ij} - \sum_{j=0}^n \sum_{k=1}^{n_q} Q_k^{ij} \dot{q}_k^{ij} - \sum_{j=0}^n \Lambda^{ij} \dot{\lambda}^{ij} \\ 2. \mathcal{D}^\theta &= -\frac{1}{\theta} \mathbf{q}_0 \cdot \text{Grad } \theta \end{aligned} \quad (5.14)$$

kann die Clausius-Duhem-Ungleichung (5.11) umgeformt werden

$$\rho_0 \theta \gamma = \mathcal{D}^i + \mathcal{D}^\theta \geq 0. \quad (5.15)$$

Diese Ungleichung ist auch erfüllt, wenn die einzelnen Summanden positiv sind (hinreichende Bedingung). Damit kann die notwendige Bedingung in Ungleichung (5.15) durch zwei hinreichende Bedingungen ersetzt werden:

1. Clausius-Planck-Ungleichung: $\mathcal{D}^i \geq 0$,
 2. Wärmeleitungsungleichung: $\mathcal{D}^\theta \geq 0$.
- (5.16)

Der gängige Ansatz für den Wärmestromvektor in Gleichung (5.14.2) ist das Fourier-Gesetz

$$\mathbf{q}_0 = -\lambda_\theta \cdot \text{Grad } \theta, \quad (5.17)$$

mit λ_θ als nichtnegativen Wärmeleitungskoeffizienten. Bei diesem Ansatz ist die Wärmeleitungsfunktion (5.14.2) für alle mögliche Temperaturwerte stets positiv und die Bedingung (5.16.2) immer erfüllt. Für eine allgemeine Darstellung der inelastischen Dissipation (5.14.1) erweist es sich als notwendig, die Evolutionsgleichungen

1. $\dot{\epsilon}_{pl}^{ij} = \dot{\epsilon}_{pl}^{ij} [\boldsymbol{\sigma}, Q_k^{ij}, \Lambda^{ij}, q_k^{ij}, \lambda^{ij}, \theta],$
 2. $\dot{\lambda}^{ij} = \dot{\lambda}^{ij} [\boldsymbol{\sigma}, Q_k^{ij}, \Lambda^{ij}, q_k^{ij}, \lambda^{ij}, \theta]$
- (5.18)

so zu formulieren, dass die Clausius-Planck-Ungleichung (5.16.1) erfüllt ist. Damit soll die thermodynamische Konsistenz des entwickelten Modells bewiesen werden. Die Evolutionsgleichungen (5.18) sind in Bezug auf den Cauchy-Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$, die Verfestigungsspannung Q_k^{ij} und die chemischen Kräfte Λ^{ij} , die konjugierte Größen der Variablen ϵ_{pl}^{ij} , q_k^{ij} , und λ^{ij} in Gleichung (5.14.1) sind, erfasst. Die Formulierung dieser Evolutionsgleichungen im Hinblick auf die thermodynamische Konsistenz des Modells bildet den Gegenstand des nächsten Abschnitts.

5.2 Konstitutive Gleichungen - Prototypmodell

5.2.1 Freie Helmholtz-Energie

Die Ermittlung des verallgemeinerten Ausdrucks für die freie Helmholtz-Energie gestaltet sich für den n -Varianten-Fall kompliziert. Um die Evolution für n Varianten zu ermöglichen, wird im Rahmen dieser Analyse die Reussähnliche-Mischungsregel verwendet (vgl. dazu z.B. [45]). Bei dieser Mischungsregel werden die bainitischen Varianten als Schichtaufbau quer zur Belastung betrachtet.

Für die freie Helmholtz-Energie wird ein quadratischer funktionaler Verlauf angenommen, wobei die elastischen Konstanten \mathbb{C}_{tuvw}^j der j -ten Variante des Kristalls i analog zur Gleichung (5.7) transformiert werden

$$\mathbb{C}_{pqrs}^{ij} = R_{tp}^i R_{uq}^i R_{vr}^i R_{ws}^i \mathbb{C}_{tuvw}^j. \quad (5.19)$$

Die Energiedichte der Variante j vom Kristall i lässt sich demnach wie folgt definieren:

1. $\Psi^{ij}[\epsilon_{el}^{ij}, q_k^{ij}, \theta] = \Psi_{el}^{ij} + \psi_{ch}^{ij} + \psi_{pl}^{ij}, \quad \text{mit}$
 2. $\psi_{el}^{ij}[\epsilon_{el}^{ij}] = \frac{1}{2\rho_0} \epsilon_{el}^{ij} : \mathbb{C}^{ij} : \epsilon_{el}^{ij} = \frac{1}{2\rho_0} (\epsilon_{te}^{ij} - \epsilon_{th}^{ij}) : \mathbb{C}^{ij} : (\epsilon_{te}^{ij} - \epsilon_{th}^{ij}),$
 3. $\psi_{pl}^{ij}[q_k^{ij}] = \frac{1}{2\rho_0} Q_{oj} b \left(q_1^{ij}\right)^2 + \frac{1}{2\rho_0} H_j \left(q_2^{ij}\right)^2,$
 4. $\psi_{ch}^{ij}[\theta] = \Delta\phi_{ch}^{ij} + \Delta\phi_{ch,\theta}^{ij} \cdot \theta$
- (5.20)

Für die gesamte freie Energie gilt

$$\begin{aligned}
1. \quad & \Psi[\varepsilon_{el}^{ij}, q_k^{ij}, \lambda^{ij}, \xi^i] := \Psi_{el} + \Psi_{pl}^{eff} + \Psi_{ch}^{eff} + \Psi^\theta, \\
2. \quad & \Psi_{el}[\varepsilon_{el}^{ij}, \lambda^{ij}, \xi^i] := \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \psi_{el}^{ij}[\varepsilon_{el}^{ij}], \\
3. \quad & \Psi_p^{eff}[q_k^{ij}, \lambda^{ij}, \xi^i] := \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \psi_{pl}^{ij}[q_1^{ij}, q_2^{ij}], \\
4. \quad & \Psi_{ch}^{eff}[\lambda^{ij}, \xi^i] := \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \left(\lambda^{ij} - \lambda_0^{ij} \right) (\Delta\phi_{ch}^{ij} + \Delta\phi_{ch,\theta}^{ij} \cdot \theta), \\
5. \quad & \Psi^\theta[\theta] := \int_{\theta_0}^\theta c_d[\bar{\theta}] d\bar{\theta} - \theta \int_{\theta_0}^\theta \frac{c_d[\bar{\theta}]}{\bar{\theta}} d\bar{\theta}.
\end{aligned} \tag{5.21}$$

Der elastische Teil der freien Helmholtz-Energie Ψ^{el} berücksichtigt die gespeicherte Energie in Abhängigkeit von der elastischen Verzerrung. \mathbb{C}^{ij} repräsentiert in Gleichung (5.20.2) den Elastizitätstensor vierter Ordnung mit den Koeffizienten \mathbb{C}_{pqrs}^{ij} . Im weiteren Verlauf der Analyse wird vom effektiven Elastizitätstensor Gebrauch gemacht. Dieser wird definiert als

$$(\mathbb{C}_{eff})^{-1} := \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} (\mathbb{C}^{ij})^{-1}. \tag{5.22}$$

Geht man von einem isotropen Material aus, kann dieser Tensor in einen deviatorischen und einen volumetrischen Teil aufgespalten werden

$$\mathbb{C}_{eff} = G[\theta] \mathbb{I}^{dev} + K[\theta] \mathbb{I}^{vol}, \tag{5.23}$$

wobei $\mathbb{I}^{dev} = \mathbb{I} - \mathbb{I}^{vol}$ und $\mathbb{I}^{vol} = (1/3)\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ die deviatorische und volumetrische Einheitstensoren vierter Stufe mit den Einheitstensoren zweiter 1 bzw. vierter Stufe \mathbb{I} darstellen. Des Weiteren repräsentieren $K[\theta]$ und $G[\theta]$ den temperaturabhängige Kompressions- bzw. den Schubmodul.

Der in Gleichung (5.21.3) definierte inelastische Teil Ψ_p der freien Helmholtz-Energie repräsentiert die Energiespeicherung infolge der inelastischen Deformationen, die unter anderem durch lineare und nichtlineare isotope Verfestigung verursacht werden. q_1^{ij} und q_2^{ij} sind verzerrungsähnliche interne Variablen mit den dazugehörigen Materialparametern H_j , Q_{oj} und b . Dies bedeutet, dass die Anzahl der verfestigungsabhängigen Variablen in Gleichung (5.10) $n_q = 2$ beträgt.

Der Term Ψ_{ch} in Gleichung (5.21.4) stellt die aus den Phasentransformationen resultierende, effektive chemisch gespeicherte Energie dar. Die konstante chemische Energie $\Delta\phi_{ch}^{ij}$ sowie der temperaturabhängige Teil $\Delta\phi_{ch,\theta}^{ij}$ des chemischen Potentials werden mit der j -ten Variante im i -ten Kristall verbunden. Für die Anfangswerte der Varianten gelten die Beziehungen

$$1. \quad \lambda_0^{ij} \leq \lambda^{ij} \quad \text{für } j \geq 1, \quad 2. \quad \lambda_0^{i0} \geq \lambda^{i0}. \tag{5.24}$$

Für den Fall fehlender Phasentransformationen, der beispielsweise bei $\lambda^{ij} = \lambda_0^{ij}$ vorliegt, tritt der Term für die chemische Energie in Gleichung (5.21.4) nicht auf.

Die Variable Ψ^θ in Gleichung (5.21.5) repräsentiert die thermische gespeicherte Energie (siehe dazu z.B. RANIECKI und BRUHNS [108]). Hierbei wird zur Vereinfachung die Abhängigkeit der spezifischen Wärmekapazität c_d von den Varianten vernachlässigt. In Übereinstimmung mit Gleichung (5.21.4) kann c_d als spezifische Wärmekapazität der anfänglichen Zusammensetzung der Varianten λ_0^{ij} verstanden werden.

5.2.2 Thermodynamische Kräfte

Die thermodynamischen Kräfte ergeben sich aus Gleichungen (5.12) und (5.13). Folglich stellt der makroskopische Cauchy-Spannungstensor für die freie Helmholtz-Energie in Gleichung (5.20) die konstitutive Gleichung (5.12.1) für die Variante j im Kristall i dar

$$1. \quad \sigma^{ij} = \xi^i \lambda^{ij} \sigma = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon_{el}^{ij}} = \xi^i \lambda^{ij} \mathbb{C}^{ij} : \epsilon_{el}^{ij} \implies 2. \quad \xi^i \lambda^{ij} [\mathbb{C}^{ij}]^{-1} \sigma = \xi^i \lambda^{ij} \epsilon_{el}^{ij}. \quad (5.25)$$

Die Anwendung der gewichteten Summen über alle Kristalle und Varianten in Gleichung (5.25.2) resultiert in

$$\sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} [\mathbb{C}^{ij}]^{-1} \sigma = \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \epsilon_{el}^{ij}. \quad (5.26)$$

Gleichung (5.26) lässt sich unter Einsatz der Definition (5.8) für die makroskopischen Verzerrungstensoren sowie der Gleichung (5.22) für den effektiven Elastizitätstensor umformen zu:

$$\sigma = \mathbb{C}_{eff} : \epsilon^{el}. \quad (5.27)$$

Definiert man die totale elastische freie Energie als

$$\Psi^{el}(\epsilon, \lambda^{ij}, \xi) := \frac{1}{2\rho_0} \epsilon^{el} : \mathbb{C}_{eff} : \epsilon^{el}, \quad (5.28)$$

erhält man in Übereinstimmung mit Gleichung (5.27) die makroskopische konstitutive Gleichung

$$\sigma = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon^{el}} = \mathbb{C}_{eff} : \epsilon^{el} = G[\theta] \text{dev} \epsilon^{el} + K[\theta] \text{tr} \epsilon^{el} \mathbf{1}. \quad (5.29)$$

Die additive volumetrisch-deviatorische Zerlegung in Gleichung (5.29) ist das Ergebnis der Darstellung von \mathbb{C}_{eff} in Gleichung (5.23).

Ferner lassen sich aus Gleichungen (5.13), (5.20) und (5.21) sowohl die Verfestigungsspannungen als auch die chemischen Treibkräfte ermitteln

$$\begin{aligned} 1. \quad Q_1^{ij} &= \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial q_1^{ij}} = Q_{oj} b q_1^{ij}, \quad Q_2^{ij} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial q_2^{ij}} = H_j q_2^{ij}, \\ 2. \quad \Lambda^{ij} &= \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda^{ij}} - \xi^i \sigma : \epsilon^{ij} \\ &= -\xi^i \left[\frac{1}{2} \sigma : (\mathbb{C}_{eff}^{ij})^{-1} : \sigma + \sigma : (\epsilon^{ij} + \epsilon_{pl}^{ij} + \eta_t^{ij}) - \rho_0 \psi_{pl}^{ij} \right. \\ &\quad \left. - \rho_0 (\Delta \phi_{ch}^{ij} + \Delta \phi_{ch,\theta}^{ij} \cdot \theta) \right]. \end{aligned} \quad (5.30)$$

In Gleichung (5.30.1) repräsentiert Q_1^{ij} die nichtlineare und Q_2^{ij} die lineare isotrope Verfestigung. Die chemische Treibkraft, die einen Teil der totalen treibenden Kraft in Gleichung (5.30.2) darstellt

$$\Lambda^{ij} \approx \xi^i \rho_0 (\Delta \phi_{ch}^{ij} + \Delta \phi_{ch,\theta}^{ij} \cdot \theta), \quad (5.31)$$

kann als Volumendichte der freien Enthalpie der Variante λ^{ij} im deformationslosen Fall interpretiert werden. Abbildung 5.2 veranschaulicht die Variation der chemischen treibenden Kräfte vom Bainit und Austenit in Abhängigkeit von der Temperatur.

Im betrachteten Prozess stellt der Austenit das Ausgangsgefüge in allen Körnern $i \in [1 \dots N]$ dar. Ferner erfolgt, wie schon in Abschnitt 5.1.2 begründet, die Umwandlung nur in eine Richtung, nämlich vom Austenit zum Bainit. Daher kann die Rate des Austenitanteils der jeweiligen Körner mit

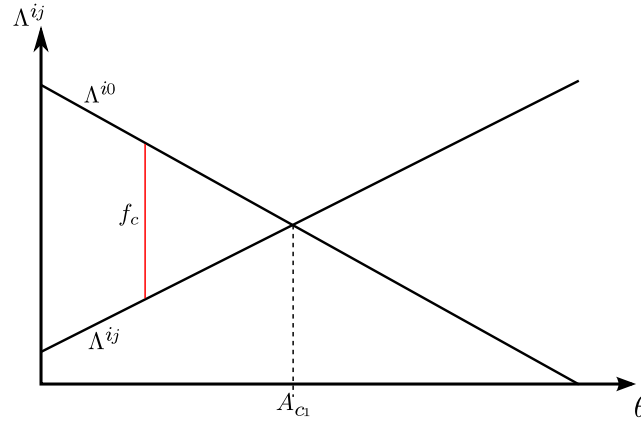


Abb. 5.2 Schematische Abbildung der chemischen treibenden Kraft des Bainits und des Austenits in Abhängigkeit von der Temperatur

Hilfe von verbliebenen Raten der Bainitvarianten unter Einsatz der Nebenbedingung (5.3) bestimmt werden

$$\dot{\lambda}^{i0} = - \sum_{j=1}^n \dot{\lambda}^{ij}. \quad (5.32)$$

Dies erlaubt eine Umformulierung der Dissipation in Anlehnung an Gleichung (5.14)

$$- \sum_{j=0}^n \Lambda^{ij} \dot{\lambda}^{ij} = - \left(\sum_{j=1}^n \Lambda^{ij} \dot{\lambda}^{ij} + \Lambda^{i0} \dot{\lambda}^{i0} \right) = \sum_{j=1}^n (\Lambda^{i0} - \Lambda^{ij}) \dot{\lambda}^{ij}. \quad (5.33)$$

5.2.3 Evolutionsgleichungen der Phasentransformationen

In Gegensatz zu der martensitischen displazive Phasentransformation wird die bainitische Phasenumwandlung durch Diffusionsprozesse begleitet. Dies macht die Bainitbildung zeitabhängig. Die ausführliche Beschreibung der Bainitbildung ist in Abschnitt 2.1.3 gegeben. Es wird hier postuliert, dass die Bainitvarianten sich unabhängig voneinander bilden können und allein von der treibenden Kraft der jeweiligen Variante abhängig sind. Die Analogie dazu ist in der Modellierung der Kristallplastizität [59] zu finden. Zur Formulierung der Evolutionsgleichungen der Phasentransformationen werden die aus der Modellierung des viskoplastischen Verhaltens stammende Methoden verwendet. Demnach lassen sich die Evolutionsgleichungen für die bainitischen Varianten mit Hilfe des Perzyna-Ansatzes wie folgt formulieren:

1. Evolution der bainitischen Varianten $\dot{\lambda}^{ij} = \frac{1}{\eta_{tr}} \left\langle \Phi_{tr}^{ij} \right\rangle^{n_{tr}} (H_s[\lambda^{i0}, \lambda^{ij}])^{n_{tr}}, \quad i, j > 0,$
2. Evolution des Austenits $\dot{\lambda}^{i0} = - \sum_{j=1}^n \dot{\lambda}^{ij}, \quad (5.34)$
3. Fließfunktion $\Phi_{ij}^{tr} = \Lambda^{ij} - f_c, (\Lambda^{i0} - \Lambda^{ij}) - f_c,$
4. Sättigungsfunktion $H_s[\lambda^{i0}] = (\lambda^{i0})^{s_1} (\lambda^{ij})^{s_2}.$

Die Macaulay'schen Klammern $\langle \bullet \rangle$ in der Evolutionsgleichung (5.34.2) gewährleisten, dass die Bedingung (5.3.3)

$$\dot{\lambda}^{ij} \geq 0$$

stets erfüllt ist. Zudem stellt die Überspannungsfunktion Φ_{tr}^{ij} in Gleichung (5.34.1) sicher, dass die Bildung der bainitischen Varianten erst dann beginnt, wenn die Differenz zwischen den freien Enthalpien von Austenit und Bainit die energetische Barriere f_c übersteigt. Dieser Sachverhalt wird in Abbildung 5.2 veranschaulicht. Die Evolution des Austenits wird aus der Nebenbedingung (5.3.1) als negative Summe über die Raten der bainitischen Varianten berechnet. Die Wachstumsrate des Bainits (Gleichung (5.34.1)) ist von der Sättigung H_s in Gleichung (5.34.4) abhängig. Dies gewährleistet in Übereinstimmung mit den experimentellen Daten eine verlangsamte Bildung des Bainits bei einer abnehmenden Menge an Austenit. Folglich können alle erforderlichen Materialparameter für die Beschreibung der Evolution der bainitischen Varianten zusammengefasst werden

$$\kappa_{tp}^j = [f_c, \eta_{tr}, n_{tr}, \gamma, s_1, \Delta\phi_{ch}^{ij}, \Delta\phi_{ch,\theta}^{ij}]. \quad (5.35)$$

Grundsätzlich können in diesem Modell jeder einzelnen bainitischen Variante verschiedene Materialparameter zugewiesen werden. Zur Vereinfachung wird im Rahmen dieser Analyse auf diese Möglichkeit verzichtet und der gleiche Satz von Materialparametern für alle Varianten verwendet. Dies bedeutet, dass für jede Evolutionsvariante lediglich ein Parametersatz existiert (siehe Tabelle 5.5).

5.2.4 Evolutionsgleichungen der Viskoplastizität

Für die Simulation des inelastischen Verhaltens wird die zeitabhängige Viskoplastizität in Kombination mit nichtlinearer isotropischer Verfestigung ausgewählt. Für $\dot{\epsilon}_{pl}^{ij}$ der j -ten Variante des i -ten Kristalls wird die allgemein gebräuchliche Fließregel (vgl. dazu beispielsweise LEMAITRE AND CHABOCHÉ [76]) angewandt

$$\begin{aligned} 1. \text{ Fließregel} & \quad \dot{\epsilon}_{pl}^{ij} = \sqrt{\frac{3}{2}} \dot{\mu}^{ij} \mathbf{n}, \\ 2. \text{ Fließfaktor} & \quad \dot{\mu}^{ij} = \frac{1}{\eta_{pj}} \lambda^{ij} \langle \Phi_{ij}^{pl} \rangle^{n_{pj}}, \\ 3. \text{ Fließrichtung} & \quad \mathbf{n} = \frac{\boldsymbol{\sigma}_{dev}^{ij}}{\|\boldsymbol{\sigma}_{dev}^{ij}\|}, \\ 4. \text{ Überspannungsfunktion} & \quad \Phi_{ij}^{pl} = \sigma_v^{ij} - (Y_j + Q_1^{ij} + Q_2^{ij}), \\ 5. \text{ Vergleichsspannung (von-Mises)} & \quad \sigma_v^{ij} = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\boldsymbol{\sigma}_{dev}^{ij}\|, \end{aligned} \quad (5.36)$$

wobei $\dot{\mu}^{ij}$ den viskoplastischen Multiplikator, Φ_{ij}^{pl} die viskoplastische Überspannungsfunktion, $\boldsymbol{\sigma}_{dev}^{ij}$ den deviatorischen Spannungstensor und \mathbf{n} den Normalvektor, der die Bedingung $\|\mathbf{n}\| = 1$ erfüllt, darstellen. Die Notation $\|\bullet\| = (\bullet : \bullet)^{1/2}$ repräsentiert die Norm des Tensors zweiter Stufe.

Aus Gleichung (5.36.1) folgt die Beziehung

$$\dot{\epsilon}_v^{ij} = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\epsilon}_{pl}^{ij}\| = \dot{\mu}^{ij}. \quad (5.37)$$

Demnach verallgemeinert e_v^{ij} die akkumulierte plastische Verzerrung. Für die internen Variablen q_1^{ij} und q_2^{ij} werden folgende Evolutionsgleichungen angenommen:

$$1. \quad \dot{q}_1^{ij} = \left(1 - \frac{Q_1^{ij}}{Q_0}\right) \dot{e}_v^{ij}, \quad 2. \quad \dot{q}_2^{ij} = \dot{e}_v^{ij}. \quad (5.38)$$

Aus der Verwendung der Beziehung (5.30.1) erhält man den Zusammenhang $Q_1^{ij}/Q_0 = b_1 q_1^{ij}$, der anschließend in Gleichung (5.38) integriert wird

$$q_1^{ij} = \left(1 - b q_1^{ij}\right) \dot{e}_v^{ij}. \quad (5.39)$$

Die Lösung dieser Differenzialgleichung lautet:

$$q_1^{ij} = 1 - \exp[-b e_v^{ij}]. \quad (5.40)$$

Somit ergibt sich für die Summe der beiden Verfestigungsspannungen aus (5.30.1) der Ausdruck

$$Q^{ij} = Q_1^{ij} + Q_2^{ij} = Q_{oj}(1 - \exp[-b e_v^{ij}]) + H_j e_v^{ij}. \quad (5.41)$$

Sämtliche Materialparameter der j -ten Variante in allen Kristallen, bezogen auf den viskoplastischen Verzerrungstensor ε_{pl}^{ij} können zusammengefasst werden zu

$$\kappa_{vp}^j = [\eta_{pj}, n_{pj}, Y_j, Q_{oj}, H_j, b]. \quad (5.42)$$

5.2.5 Thermodynamische Konsistenz

Die thermodynamische Konsistenz des betrachteten Modells ist gewährleistet, wenn die Clausius-Planck-Ungleichung (5.16.1) erfüllt ist. Es wird an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass das viskoplastische Verhalten aktiviert ist, wenn die Überspannungsfunktion ϕ in Gleichung (5.36) positiv ist

$$\Phi_{ij}^{pl} = \sigma_v^{ij} - (Y_j + Q_1^{ij} + Q_2^{ij}) > 0 \implies \dot{\mu}^{ij} > 0, \quad \sigma_v^{ij} - Q_1^{ij} - Q_2^{ij} > Y[\theta].$$

Dieses bleibt bei einer negativen Überspannungsfunktion ϕ in Gleichung (5.36) unverändert

$$\Phi_{ij}^{pl} = \sigma_v^{ij} - (Y_j + Q_1^{ij} + Q_2^{ij}) \leq 0 \implies \dot{\mu}^{ij} = 0.$$

Die Verwendung der Fließregel (5.36.1), der Evolutionsgleichungen (5.38.1), (5.38.2) für die Viskoplastizität und die internen Variablen q_1^{ij} und q_2^{ij} , der Bezeichnungen (5.24) (5.37) sowie der Aktivierungsenergie (5.34.1), der Überspannungsfunktion in Gleichung (5.34.2) resultiert in folgender Formulierung der Clausius-Planck-Ungleichung (5.14.1):

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^i &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^n \left(\boldsymbol{\sigma} : \dot{\varepsilon}_{pl}^{ij} - Q_1^{ij} \dot{q}_1^{ij} - Q_2^{ij} \dot{q}_2^{ij} - \Lambda^{ij} \dot{\lambda}^{ij} \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^n \left(\dot{\mu}^{ij} \underbrace{\left(\sigma_v^{ij} - Q_1^{ij} - Q_2^{ij} \right)}_{> Y[\theta]} + \frac{\dot{\mu}^{ij}}{Q_0} Q_1^2 \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n \left(\underbrace{\Lambda^{i0} - \Lambda^{ij}}_{> f_c} \right) \dot{\lambda}^{ij} \geq 0. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Da $Y[\theta]$ und $\Lambda^{i0} - \Lambda^{ij}$ stets nichtnegativ sind, ist das entwickelte Modell thermodynamisch konsistent. Ferner ist dieses Ergebnis von der Wahl der jeweiligen Evolutionsgleichung für die Bainitvarianten

unabhängig. Die Zusammenfassung der konstitutiven Gleichungen des vorgestellten Mehrskalenmodells erfolgt in Tabelle 5.1.

Makroskopische Gleichungen

Impuls und Wärmeleitung:

$$\begin{aligned} \rho_0 \ddot{\mathbf{u}} - \text{Div}(\boldsymbol{\sigma}) &= \rho_0 \mathbf{f} \text{ in } \mathcal{B} \times]0, T[, \\ \rho_0 c_d \dot{\theta} - \text{Div}(\lambda_\theta \nabla \theta) &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^n \boldsymbol{\sigma}^{ij} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{ij} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^n \sum_{k=1}^{n_q} Q_k^{ij} \dot{q}_k^{ij} + \\ &+ \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^n \theta \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}^{ij}}{\partial \theta} : \boldsymbol{\epsilon}_{el}^{ij} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n L^{ij0} \dot{\lambda}^{ij} + \rho_0 r \theta \end{aligned} \quad \text{in } \mathcal{B} \times]0, T[,$$

mit Rand- und Anfangsbedingungen aus Gleichung (3.22).

Makroskopische Spannungs-Dehnungs-Beziehung: $\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_{eff} (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\epsilon}_{th} - \boldsymbol{\epsilon}_{pl} - \boldsymbol{\eta}_t)$.

Effektiver Elastizitätstensor \mathbb{C}_{eff} : $(\mathbb{C}_{eff})^{-1} = \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} (\mathbb{C}^{ij})^{-1}$.

Makro-Meso-Übergang der Spannung und Verzerrung

Mesoskopischer Spannungs- und Verzerrungstensor:

$$\boldsymbol{\sigma}^{ij} = \mathbb{C}^{ij} \boldsymbol{\epsilon}_{el}^{ij}, \quad \boldsymbol{\epsilon}^{ij} = \boldsymbol{\epsilon}_{te}^{ij} + \boldsymbol{\epsilon}_{pl}^{ij} + \boldsymbol{\eta}_t^{ij}, \quad \text{mit } \boldsymbol{\epsilon}_{te}^{ij} = \boldsymbol{\epsilon}_{el}^{ij} + \boldsymbol{\epsilon}_{th}^{ij}.$$

Makroskopischer Verzerrungstensor:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\epsilon}^{ij}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_{te} = \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\epsilon}_{te}^{ij}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_{pl} = \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\epsilon}_{pl}^{ij}, \quad \boldsymbol{\eta}_t = \sum_{i=1}^N \xi^i \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\eta}_t^{ij}.$$

Mesoskopischer Spannungstensor: $\boldsymbol{\sigma}^{ij} = \xi^i \lambda^{ij} \boldsymbol{\sigma}$.

Evolutionsgleichungen der Phasenumwandlung und Viskoplastizität

Evolutionsgleichungen des Phasenanteils der bainitischen Varianten

$$\dot{\lambda}^{ij} = \frac{1}{\eta_{tr}} \langle (A^{i0} - A^{ij}) - f_c \rangle^{n_{tr}} (H_s[\lambda^{i0}])^{n_{tr}} \quad \text{für } i, j > 0, \quad \dot{\lambda}^{i0} = - \sum_{j=1}^n \dot{\lambda}^{ij}.$$

mit den Anfangsbedingungen: $\lambda^{ij} = 0$ für $i, j > 0$ und $\lambda^{i0} = 1$.

Evolutionsgleichungen der viskoplastischen Verzerrungen und internen Variablen:

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{pl}^{ij} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{\eta_{pj}} \langle \sigma_0^{ij} - (Y_j + Q_1^{ij} + Q_2^{ij}) \rangle^{n_{pj}} \frac{\boldsymbol{\sigma}_{dev}^{ij}}{\|\boldsymbol{\sigma}_{dev}^{ij}\|}, \\ \dot{q}_1^{ij} &= \left(1 - \frac{Q_1^{ij}}{Q_0}\right) \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{pl}^{ij}\|, \quad \dot{q}_2^{ij} = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{pl}^{ij}\|. \end{aligned}$$

mit den Anfangsbedingungen $\boldsymbol{\epsilon}_{pl}^{ij}(0) = 0$, $q_1^{ij}(0) = 0$ und $q_2^{ij}(0) = 0$.

Tabelle 5.1 Zusammenfassung der konstitutiven Gleichungen des Mehrskalenmodells

5.3 Numerische Implementierung

In diesem Abschnitt erfolgt die numerische Implementierung der konstitutiven Gleichungen.

5.3.1 Formulierung der diskreten Zustandsgleichungen

Zur numerischen Implementierung der konstitutiven Gleichungen aus Abschnitt 5.2 wird das verzerrungsgesteuerte Verfahren angewendet, wobei der totale Verzerrungstensor ${}^{n+1}\epsilon$ die Anfangswerte der Varianten ${}^n\lambda^{ij}$ und der viskoplastische Multiplikator ${}^n\mu^{ij}$ zu jedem Zeitpunkt ${}^{n+1}t$ gegeben sind. Folglich gilt es korrespondierende Mengen ${}^{n+1}\lambda^{ij}$ und ${}^{n+1}\mu^{ij}$ zum Zeitpunkt ${}^{n+1}t$ zu finden, die mit den konstitutiven Gleichungen des vorangegangenen Kapitels konsistent sind. Zwecks einer übersichtlichen Darstellung wird der Index $n + 1$, der den aktuellen Zeitschritt kennzeichnet, weggelassen.

Für die numerische Integration der Phasentransformationsvarianten λ^{ij} wird das implizite Euler-Verfahren mit folgendem Aktualisierungsschema verwendet:

$$\lambda^{ij} = {}^n\lambda^{ij} + \Delta\lambda^{ij}. \quad (5.44)$$

Das Inkrement der Phasentransformationsvarianten wird aus Evolutionsgleichungen (5.34) ermittelt

$$\Delta\lambda^{ij} = \Delta t \frac{1}{\eta_{tr}} \langle A^{i0} - A^{ij}[\lambda^{ij}] - f_c \rangle^{n_{tr}} (H[\lambda^{i0}])^{n_{tr}}. \quad (5.45)$$

Ferner ergibt sich aus Gleichung (5.3.1) das Inkrement der Austenitphasentransformation

$$\Delta\lambda^{i0} = - \sum_{j=1}^n \Delta\lambda^{ij}. \quad (5.46)$$

Analog dazu wird das implizite Euler-Verfahren im Aktualisierungsschema

$$\mu^{ij} = {}^n\mu^{ij} + \Delta\mu^{ij}, \quad (5.47)$$

für die numerische Integration von viskoplastischen Variablen μ^{ij} verwendet, wobei das Inkrement des viskoplastischen Multiplikators aus Evolutionsgleichungen (5.36) abgeleitet wird

$$\Delta\mu^{ij} = \Delta t \frac{\lambda^{ij}}{\eta_{pl}^j} \langle \Phi_{pl}^{ij} \rangle_{n_{pl}}^j. \quad (5.48)$$

Aus Gleichungen (5.45) und (5.48) werden zwei Zustandsresiduen definiert

$$\begin{aligned} 1. \quad r_{tr}^{ij}[\Delta\lambda^{ij}] &= A^{i0} - A^{ij}[\lambda^{ij}] - f_c - \left(\frac{\eta_{tr}}{\Delta t} \right)^{\frac{1}{n_{tr}}} (\Delta\lambda^{ij})^{\frac{1}{n_{tr}}} \frac{1}{H[\lambda^{i0}]}, \\ 2. \quad r_{pl}^{ij}[\Delta\mu^{ij}] &= \Phi_{pl}^{ij}[\Delta\mu^{ij}] - \left(\frac{\Delta\mu^{ij}}{\Delta t} \frac{\eta_{pl}^j}{\lambda^{ij}} \right)^{\frac{1}{n_{pl}}}. \end{aligned} \quad (5.49)$$

Es ist erkennbar, dass die Ergebnisse eines stark gekoppelten Modells unter Berücksichtigung des Einflusses der Varianten λ^{ij} sich auf das viskoplastische Materialverhalten in Gleichungen (5.36) auswirken und die plastischen Verzerrungen ϵ_{pl}^{ij} einen Einfluss auf die chemischen Kräfte für die Phasentransformation in Gleichung (5.30) haben.

Weil es sich hierbei um ein hoch komplexes, stark gekoppeltes nichtlineares Problem handelt, stellt die numerische Implementierung eine anspruchsvolle Aufgabe dar. Zur Reduzierung des Implementierungsaufwands wird ein zweistufiges Verfahren verwendet, das wie folgt aufgebaut ist:

Schritt I: Bestimmung der Varianten λ^{ij} mit Hilfe des projizierten Newton-Verfahrens, kombiniert mit einem Arbeits-Set-Algorithmus, wobei die viskoplastische Verzerrung ε_{pl}^{ij} als konstant angenommen wird.

Schritt II: Bestimmung der Viskoplastizität unter Einsatz der Newton-Iteration und der Radial-Return-Methode, mit konstanten Varianten λ^{ij} .

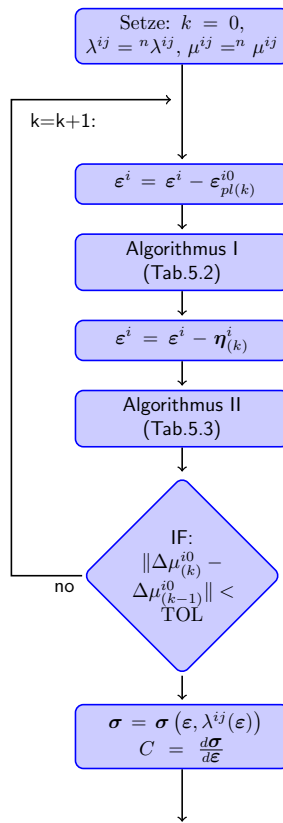


Abb. 5.3 Numerische Implementierung: zweistufig gestaffeltes Verfahren

Die Staffelung des Verfahrens wird damit begründet, dass zwischen den zwei Schritten eine Semi-Kopplung besteht. Während der getrennten Prüfung ist die Bestimmung der Varianten im ersten Schritt und die Ermittlung der Plastizität im zweiten Schritt implizit. Des Weiteren muss aufgrund der Tatsache, dass die Fließspannung in der austenitischen Phase wesentlich kleiner ist als in der bainitischen Phase, nur das plastische Verhalten in der austenitischen Phase während der Umwandlung berücksichtigt werden. Daher wird die Relation (5.49.2) nur für den Fall $j = 0$ behandelt. Darüber hinaus werden isothermische Umwandlungen anhand der im nächsten Abschnitt präsentierten Beispiele simuliert. Da thermische Verzerrungen ε_{th}^{ij} nur einen marginalen Teil der Gesamtverzerrung darstellen, werden diese vernachlässigt.

Die detaillierte Beschreibung des projizierten Newton-Verfahrens im Algorithmus I und der Newton-Iteration kombiniert mit der Radial-Return-Methode geschieht in den folgenden zwei Abschnitten.

5.3.2 Projizierte Newton-Iteration, Algorithmus I

Um die von den Variantenvolumenanteilen λ^{ij} abhängigen Residuen aus Gleichung (5.49.1) so lösen zu können, dass sowohl die Zustandsbedingungen (5.2) als auch die Entwicklungsbedingungen (5.3) gleichzeitig erfüllt sind, wird eine Newton-ähnliche Projektionsmethode verwendet. Das Grundprinzip dieser Methode stammt von BERTSEKAS [12], die Anwendung wurde von MAHNKEN [84] übernommen. Zunächst werden die Unbekannten in einem Vektor \underline{X} zusammengefasst. Ferner wird ein residualer Vektor definiert, der die reduzierten Zustandsresiduen r^{ij} aus Gleichung (5.49) miteinander verbindet

$$\begin{aligned} 1. \underline{X} &= \{\lambda^{ij}, j = 0, \dots, n, i = 1, \dots, N\}, \\ 2. \underline{R} &= \{r^{ij}, j = 0, \dots, n, i = 1, \dots, N\}. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Eine Zusammenfassung des projizierten Newton-Algorithmus, kombiniert mit einer Line-Search-Backtracking-Strategie [84], erfolgt in Tabelle 5.2.

0. Setze $k = 0$, initialisiere den Vektor der Unbekannten, das Residuum und die Suchrichtung
Setze $\beta = 0.1, \alpha_0 = 1.0$

$$\begin{aligned} \underline{X}_{(k=0)} &= \{\Delta\lambda_{(k=0)}^{ij}, i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, N\} \\ \underline{s}_{(k=0)} &= \underline{0}, \quad \|\underline{R}_{(k=0)}^*\| \rightarrow \infty \end{aligned}$$

1. Schrittweisenalgorithmus: Bestimme die kleinste Zahl $l = 0, 1, 2, \dots$ für $\alpha_{(l)} = \beta^l \alpha_0$, so dass $\|\underline{R}^*(\underline{X}_{(k,l)})\| < \|\underline{R}^*(\underline{X}_k)\|$, mit

Unbekannten	$\underline{X}_{(k,l)} = \mathcal{P}(\underline{X}_{(k)} + \alpha_{(l)} \underline{s}_{(k)})$
Residuen	$\underline{R}_{(k,l)} = \{r_{tr}^{ij}(k,l), i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, N\}$
Arbeits-Sets	$\mathcal{J}_{al}^{tr} = \{ij (\Delta^{ij}(\lambda_{(k,l)}^{ij}) - f_c) \leq 0\}$ $\mathcal{J}_{au}^{tr} = \{ij \lambda_{(k,l)}^{i0} = 0\}$ $\mathcal{J}_p^{tr} = \{ij\} \setminus \{\mathcal{J}_{al}^{tr} \text{ or } \mathcal{J}_{au}^{tr}\}$
projizierten Residuum	$\underline{R}_{(k,l)}^* = [\underline{R}_l^*]_{(k,l)} = \begin{cases} r_{tr}^{ij}(k,l), & ij \in \mathcal{J}_p^{tr}(k,l) \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$

2. Überprüfe Toleranz: Wenn $\|\underline{R}^*(\underline{X}_{(k,l)})\| < tol$, dann

Post-Processing: Bestimme die Spannungen: $\sigma = \mathbb{C}_{eff}(\epsilon - \eta - \epsilon_{pl}^{ij})$ und den Tangentenmodul: $\mathbb{C} = d\sigma/d\epsilon$,
aktualisiere Varianten: λ^{ij} , Ende

3. Berechne Jacobi-Matrix

$$\underline{J}_{(k)} = \frac{\partial \underline{R}}{\partial \underline{X}} = \left[\frac{\partial r_{tr}^{ij}}{\partial \Delta \lambda^{ij}} \right]$$

4. projizierte Jacobi-Matrix $\underline{J}_{(k)}^* = [\underline{J}_{lm}^*]_{(k)} = \mathcal{P}(\underline{J}_{(k)})$

5. Berechne Suchrichtung $\underline{s}_{(k+1)} = -[\underline{J}_{(k)}^*]^{-1} \underline{R}_{(k,l)}$

6. Aktualisiere $\underline{X}_{(k+1)} = \underline{X}_{(k,l)}, \underline{R}_{k+1} = \underline{R}_{(k,l)}, k \rightarrow k + 1$, gehe zu 1

Tabelle 5.2 Projizierter Newton-Algorithmus für ALGO I zum Zeitpunkt $n+1t$. Die Indizes k und l beziehen sich entsprechend auf die Newton- und Line-Search-Iteration

Hierbei nehmen der Vektor der Unbekannten, das Residuum aus Gleichung (5.50) und die Jacobi-Matrix aus Schritt 3 in Tabelle 5.2 unter Verwendung der Matrixnotation die Form an

$$1. \underline{X} = \underline{\Delta\lambda} = \begin{bmatrix} \Delta\lambda^{11} \\ \Delta\lambda^{12} \\ \vdots \\ \Delta\lambda^{N1} \\ \vdots \\ \Delta\lambda^{Nn} \end{bmatrix}, 2. \underline{R} = r_{tr} = \begin{bmatrix} r_{tr}^{11} \\ r_{tr}^{12} \\ \vdots \\ r_{tr}^{N1} \\ \vdots \\ r_{tr}^{Nn} \end{bmatrix}, 3. \underline{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_{tr}^{11}}{\partial \Delta\lambda^{11}} & \frac{\partial r_{tr}^{11}}{\partial \Delta\lambda^{12}} & \cdots & \frac{\partial r_{tr}^{11}}{\partial \Delta\lambda^{Nn}} \\ \frac{\partial r_{tr}^{12}}{\partial \Delta\lambda^{11}} & \frac{\partial r_{tr}^{12}}{\partial \Delta\lambda^{12}} & \cdots & \frac{\partial r_{tr}^{12}}{\partial \Delta\lambda^{Nn}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial r_{tr}^{nN}}{\partial \Delta\lambda^{11}} & \frac{\partial r_{tr}^{nN}}{\partial \Delta\lambda^{12}} & \cdots & \frac{\partial r_{tr}^{nN}}{\partial \Delta\lambda^{Nn}} \end{bmatrix}. \quad (5.51)$$

Die Dimensionen der Vektoren und der Jakobi-Matrix sind abhängig von der Anzahl der Körner sowie der Bainitvarianten und entsprechen $\dim(r) = \dim(\lambda) = N(n+1)$ und $\dim(J) = (N(n+1))^2$. Unter der Annahme, dass Indizes in Tabelle 5.2 mit $ij \in \mathcal{J}_p^{tr}$ beginnen, können für das projizierte Residuum und die projizierte Jacobi-Matrix folgende Ausdrücke verwendet werden:

$$1. \underline{R}^* = \mathcal{P}(\underline{R}) = \begin{bmatrix} \underline{r}_{tr}^* \\ 0 \end{bmatrix}, 2. \underline{J}^* = \mathcal{P}(\underline{J}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \underline{r}_{tr}^*}{\partial \underline{\Delta\lambda}} & 0 \\ 0 & \underline{I} \end{bmatrix}. \quad (5.52)$$

Hierbei stellt \underline{I} die Einheitsmatrix dar und die Dimension des Vektors der projizierten Residuen ist $\dim(\underline{r}_{tr}^*) = |\mathcal{J}_p^{tr}|$. Der in Tabelle 5.2 repräsentierte, projizierte Newton-Algorithmus findet den Zustand für das Residuum, für den gilt

$$\underline{R}^*[\underline{X}] = 0. \quad (5.53)$$

Im nächsten Schritt wird die Merit-Funktion als $f[\underline{X}] = \|\underline{R}^*[\underline{X}]\|$ definiert. Ferner werden mit Hilfe der Bedingung $f[\underline{X}] = 0$ die Unbekannten \underline{X} bestimmt. Aus dem Produkt der Suchrichtung und des Gradienten von f in Abhängigkeit von \underline{X} folgt:

$$\begin{aligned} \underline{s}^T \frac{\partial f}{\partial \underline{X}} &= \underline{s}^T \frac{\partial \|\underline{R}^*\|}{\partial \underline{X}} = \frac{1}{\|\underline{R}^*\|} \underline{s}^T \underline{J}^{*T} \underline{R}^* = \frac{-1}{\|\underline{R}^*\|} \underline{R}^T \underline{J}^{*-T} \underline{J}^{*T} \underline{R}^* \\ &= -\|\underline{R}^*\| < 0. \end{aligned} \quad (5.54)$$

Demnach dient die Suchrichtung \underline{s} in Schritt 5 des Algorithmus (Tabelle 5.2) als abnehmende Richtung für die Merit Funktion $\|\underline{R}^*\|$ (siehe dazu auch LUENBERGER [79]). Auf diesem Weg wird die globale Konvergenz gewährleistet. Bezüglich der quadratischen lokalen Konvergenz eines projizierten Newton-Algorithmus wird auf BERTSEKAS [12] verwiesen.

Der Projektionsoperator \mathcal{P} in Schritt 1 des Algorithmus wird wie folgt definiert:

$$\mathcal{P}[x] = \max\{\min\{x, x_{min}\}, x_{max}\}. \quad (5.55)$$

Ferner werden für die Varianten λ^{ij} sowohl die unteren als auch die oberen Schranken $x_{min} = 0, x_{max} = 1$ festgelegt.

Lässt sich der Vektor der Unbekannten \underline{X} in der Weise bestimmen, dass alle Zustandsbedingungen erfüllt sind, wird in Schritt 2 des Algorithmus ein Post-Processing durchgeführt. Anschließend werden die Spannungen σ entsprechend der Gleichung (5.27) bestimmt. Die detaillierte Herleitung des Tangentenmoduls $\mathbb{C} = d\sigma/d\varepsilon$ wird in Abschnitt 5.3.4 erläutert.

Für eine große Anzahl an Körnern N ist die Bestimmung der Suchrichtung \underline{s} in Schritt 5 mit der Lösung eines linearen Systems an Gleichungen verbunden und kann sehr aufwändig werden. Dieses Problem kann durch den Einsatz unterschiedlicher Iterationsmatrizen umgangen werden (siehe dazu [28, 84]). Im einfachsten Fall kann die Jacobi-Matrix durch eine Einheitsmatrix ersetzt werden. Dies reduziert den projizierten Newton-Algorithmus auf einen projizierten Gradientenalgorithmus (siehe dazu [24, 84, 90, 145]).

5.3.3 Viskoplastizität, Algorithmus II

Im nächsten Schritt der Implementierung wird das Modell um die Anwendung des Greenwood-Johnsson-Effekts (siehe dazu Abschnitt 2.1.5) erweitert. Dieser Effekt wird durch die Plastifizierung in der austenitischen Phase generiert und berücksichtigt außer der Wirkung des reinen Magee-Effekts, der lediglich durch die energetisch bevorzugte Anordnung der bainitischen Varianten in Bezug auf Belastungsrichtung verursacht wird, plastische Verzerrungen. Dies impliziert, dass die lokale Spannung in verschiedenen Körnern größer sein muss, als die Fließspannung des Austenits, selbst für den Fall, dass die globale Spannung die Fließspannung des Austenits unterschreitet.

In diesem Abschnitt wird ein einzelnes Korn i betrachtet. Zur Lösung des Residuums (2) in Tabelle 5.3 unter Berücksichtigung der Inkremente des viskoplastischen Multiplizierers μ^{i0} wird der Newton-Algorithmus in Kombination mit der Radial-Return-Methode eingesetzt. Die Grundprinzipien dieser Methode sind von SIMO and HUGHES [117] entwickelt worden und wurden im Rahmen dieser Analyse zur Formulierung der konstitutiven Gleichungen (5.36) verwendet.

0. Setze $k = 0, i=1$, initialisiere den Vektor der Unbekannten und das Residuum

$$\underline{X}_{(k=0)} = \{\Delta\mu_{(k+1)}^{i0}, i = 0, \dots, n\}$$

1. Überprüfe Fließbedingung: wenn $(\Phi_{pl}^{tri,i0} \leq 0)$, dann gehe zu 5

2. Berechne die Unbekannten $\Delta\mu_{(k+1)}^{i0}$

$$\text{mit Residuen} \quad r_{pl}^{i0}[\Delta\mu^{i0}] = \Phi_{pl}^{i0}[\Delta\mu^{i0}] - \left(\frac{\Delta\mu^{i0}}{\Delta t} \eta_{pl} \right)^{\frac{1}{n_{pl}}}$$

$$\text{und Jacobi-Matrix} \quad J^{i0}[\Delta\mu^{i0}] = \frac{\partial r_{pl}^{i0}[\Delta\mu^{i0}]}{\partial \Delta\mu^{i0}}$$

$$\Delta\mu_{(k+1)}^{i0} = \Delta\mu_{(k)}^{i0} - (J^{i0}[\Delta\mu^{i0}])^{-1} r_{pl}^{i0}[\Delta\mu^{i0}]$$

3. Überprüfe Toleranz: wenn $|r_p^{i0}| > tol$, dann gehe $k \rightarrow k + 1$ zu 1.

4. Aktualisiere $\epsilon_{pl}^{i0} = {}^n \epsilon_{pl}^{i0} + \Delta\epsilon_{pl}^{i0}$, mit $\Delta\epsilon_{pl}^{i0} = \sqrt{\frac{3}{2}} \Delta\mu^{i0}$, $i \rightarrow i + 1$, wenn $i \leq n$ dann gehe zu 1.

5. STOP

Tabelle 5.3 Newton-Algorithmus für ALGO II zum Zeitpunkt ${}^{n+1}t$. Die Indizes k und l beziehen sich entsprechend auf die Newton- und Line-Search Iteration

Im Algorithmus II sind die Anteile der bainitischen Varianten λ^{ij} konstant. Damit kann der Tensor der umwandlungsplastischen Verzerrung aus Gleichung (5.8.5) berechnet werden

$$\boldsymbol{\eta}^i = \sum_{j=0}^n \lambda^{ij} \boldsymbol{\eta}_t^{ij}. \quad (5.56)$$

Die Verwendung des impliziten Eulerschen Integrationsschemas für die Evolutionsgleichungen (5.36) liefert den Verzerrungstensor im Korn i

$$\epsilon_{pl}^{i0} = {}^n \epsilon_{pl}^{i0} + \Delta\epsilon_{pl}^{i0}. \quad (5.57)$$

Der elastische Verzerrungstensor im Zeitpunkt ${}^{n+1}t$ lässt sich aus Gleichung (5.4) ermitteln

$$\epsilon_{el}^i = \epsilon^i - \boldsymbol{\eta}^i - \epsilon_{pl}^{i0}. \quad (5.58)$$

Die anschließende Multiplikation der Gleichung (5.58) mit dem elastischen Tensor vierter Ordnung und die Berücksichtigung der Gleichungen (5.57) liefert nach mehreren Umformungen das Pendant der Gleichungen (5.36)

$$\begin{aligned}
1. \text{ Spannung im Korn } i \quad & \sigma^i = \sigma_{vol}^i + \sigma_{dev}^i, \quad \text{mit} \\
& \sigma_{dev}^i = \sigma_{dev}^{tr,i} - 2G\Delta\epsilon_{pl}^{i0}, \\
& \sigma_{dev}^{tr,i} = 2G\mathbf{I}^{dev} : (\epsilon^i - {}^n\epsilon^i - \eta^i), \\
& \sigma_{vol}^i = K(\text{tr}(\epsilon^i - \eta^i)) \mathbf{1}, \\
2. \text{ Fließregel} \quad & \Delta\epsilon_{pl}^{i0} = \sqrt{\frac{3}{2}} \Delta\mu^{i0} \mathbf{n}, \\
3. \text{ Fließrichtung} \quad & \mathbf{n}^i = \frac{\sigma_{dev}^i}{\|\sigma_{dev}^i\|}, \\
4. \text{ Fließfaktor} \quad & \Delta\mu^{i0} = \lambda^{i0} \frac{1}{\eta_{pl}} \left\langle \Phi_{pl}^{i0} \right\rangle^{n_{pl}} \Delta t, \\
5. \text{ Fließbedingung} \quad & \Phi_{pl}^{i0} = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\sigma_{dev}^i\| - R^{i0} - Y_0, \\
6. \text{ Äquivalente plastische Verzerrung } e_v^{i0} \quad & = {}^n e_v^{i0} + \Delta\mu^{i0}, \\
7. \text{ Isotrope Verfestigung} \quad & R^{i0} = H e_v^{i0} + Q_0 (1 - \exp(-b e_v^{i0})).
\end{aligned} \tag{5.59}$$

Folgende Ableitungen machen von der Tatsache Gebrauch, dass σ_{dev}^i aus Gleichung (5.59.1) unter Verwendung der Gleichungen (5.59.2), (5.59.3) und (5.59.5) umformuliert werden kann

$$\sigma_{dev}^i = \sigma_{dev}^{tr,i} - 2G\sqrt{\frac{3}{2}} \Delta\mu^{i0} \frac{\sigma_{dev}^i}{\|\sigma_{dev}^i\|}. \tag{5.60}$$

Nach der Argumentation der Radial-Return-Methode (siehe dazu beispielsweise SIMO und HUGHES [117] und die Referenzen darin) hat Gleichung (5.60) zwei Konsequenzen. Erstens ist ersichtlich, dass sowohl σ_{dev}^i als auch $\sigma_{dev}^{tr,i}$ koaxial sind, so dass die Fließrichtung in Gleichung (5.59.3) sich wie folgt ausdrücken lässt:

$$\mathbf{n}^i = \frac{\sigma_{dev}^i}{\|\sigma_{dev}^i\|} = \frac{\sigma_{dev}^{tr,i}}{\|\sigma_{dev}^{tr,i}\|}. \tag{5.61}$$

Zweitens erhält man die Skalarbeziehung

$$1. \quad \|\sigma_{dev}^i\| = \|\sigma_{dev}^{tr,i}\| - 2G\sqrt{\frac{3}{2}} \Delta\mu^{i0}. \tag{5.62}$$

Im nächsten Schritt wird das Residuum aus Gleichung (5.59.4) definiert

$$r_{pl}^i[\Delta\mu^{i0}] = \Phi_{pl}^{i0}[\Delta\mu^{i0}] - \left(\frac{\Delta\mu^{i0}}{\Delta t} \frac{\eta_{pl}}{\lambda^{i0}} \right)^{\frac{1}{n_{pl}}} = 0. \tag{5.63}$$

Aus der Verwendung der Fließbedingung (5.59.5) sowie der Gleichung (5.62) ergibt sich:

$$r_{pl}^i[\Delta\mu^{i0}] = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\sigma_{dev}^{tr,i}\| - 3G\Delta\mu^{i0} - \left(\frac{\Delta\mu^{i0}}{\Delta t} \frac{\eta_{pl}}{\lambda^{i0}} \right)^{\frac{1}{n_{pl}}} - R^{i0}[\Delta\mu^{i0}] - Y_0 = 0. \tag{5.64}$$

Dadurch werden die diskretisierten Gleichungen (5.59) auf ein eindimensionales, ausschließlich vom Fließfaktor $\Delta\mu^{i0}$ abhängiges Problem reduziert. Für dessen Lösung wird die Newton-Methode eingesetzt

$$\Delta\mu_{(k+1)}^{i0} = \Delta\mu_k^{i0} - \frac{r_{pl}^i[\Delta\mu_k^{i0}]}{J[\Delta\mu_k^{i0}]}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.65)$$

$$J[\Delta\mu^{i0}] = \frac{\partial r_{pl}^i[\Delta\mu^{i0}]}{\partial \Delta\mu^{i0}} = \frac{\partial \Phi_{pl}^{i0}[\Delta\mu^{i0}]}{\partial \Delta\mu^{i0}} - \frac{1}{n_{pl} \Delta\mu^{i0}} \left(\frac{\Delta\mu^{i0}}{\Delta t} \frac{\eta_{pl}}{\lambda^{i0}} \right)^{\frac{1}{n_{pl}}}, \quad (5.66)$$

$$\frac{\partial \Phi_Y}{\partial \Delta\mu^{i0}} = - \left(3G + H + bQ_0 \exp \left[-b(n_{ev} + \Delta\mu^{i0}) \right] \right), \quad (5.67)$$

wobei sich der Index k auf die Iterationsnummer bezieht.

5.3.4 Der Tangentenmodul

Die iterative Lösung der globalen Finite-Elementen-Gleichgewichtsgleichungen mit Hilfe der Newton-Methode erfordert den Einsatz eines algorithmischen Tangentenmoduls, welches durch Ableitung des Spannungstensors σ nach dem Verzerrungstensor ε definiert wird. Für den Fall der Abhängigkeit des Spannungstensors σ von den Unbekannten $\underline{X} = [\Delta\lambda^{ij}, \Delta\mu^{i0}]^T$ gelten die Bedingungen:

$$\sigma = \sigma(\varepsilon, \lambda^{ij}(\varepsilon)) \Rightarrow \mathbb{C} = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial \sigma}{\partial \Delta\lambda^{ij}} \otimes \frac{\partial \Delta\lambda^{ij}}{\partial \varepsilon}. \quad (5.68)$$

$\partial \Delta\lambda^{ij} / \partial \varepsilon$ lässt sich aus der Residuungleichung (5.52) ableiten

$$\underline{R}^*(\varepsilon, \Delta\lambda^{ij}(\varepsilon)) = \underline{0} \Rightarrow \frac{d\underline{R}^*}{d\varepsilon} = \frac{\partial \underline{R}^*}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial \underline{R}^*}{\partial \Delta\lambda^{ij}} \otimes \frac{\partial \Delta\lambda^{ij}}{\partial \varepsilon} = \underline{0}. \quad (5.69)$$

Unter Verwendung der Jacobi-Matrix erhält man den Zusammenhang

$$\frac{\partial \Delta\lambda^{ij}}{\partial \varepsilon} = - \left(\frac{\partial \underline{R}^*}{\partial \Delta\lambda^{ij}} \right)^{-1} \frac{\partial \underline{R}^*}{\partial \varepsilon} = - [\underline{J}^*]^{-1} \frac{\partial \underline{R}^*}{\partial \varepsilon}. \quad (5.70)$$

Daraus lässt sich der geforderte Term $\partial \Delta\lambda^{ij} / \partial \varepsilon$ ableiten. Die partiellen Ableitungen des Spannungstensors nach den bainitischen Varianten der Spannung liefern folgende Ergebnisse:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \lambda^{ij}} = -\xi^i (\mathbb{C}_{eff} : (\mathbb{C}^{ij})^{-1} : \mathbb{C}_{eff}) : (\varepsilon - \eta) - \mathbb{C}_{eff} \xi^i \eta_t^{ij}. \quad (5.71)$$

5.4 Numerische Beispiele

Dieses Kapitel befasst sich zunächst mit den Simulationen von Materialverhalten in einer monokristallinen Mikroskala während der Phasentransformation vom Austenit zum Bainit. Die daraus resultierenden Effekte werden auf eine polykristalline Makroskala übertragen. Die Simulation umfasst 24 mögliche bainitische Varianten für Mono- und Polykristalle. Im letzten Fall handelt es sich um stochastisch unterschiedlich orientierte Körner. Da für niedriglegierte Stähle keine gemessenen Transformationstensoren existieren, werden hier anhand des Ansatzes von WECHSLER *et al.* [140] synthe-

tisch ermittelten Werte verwendet. Die Umwandlungstensoren für die Varianten sind in Tabelle 5.4 aufgeführt.

\mathbf{U}_0	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000
\mathbf{U}_1	1.0000	1.0296	1.0000	0.1860	0.0000	0.0000
\mathbf{U}_2	1.0000	1.0000	1.0296	0.0000	-0.1860	0.0000
\mathbf{U}_3	1.0000	1.0000	1.0296	0.0000	0.1860	0.0000
\mathbf{U}_4	1.0000	1.0296	1.0000	-0.1860	0.0000	0.0000
\mathbf{U}_5	1.0000	1.0000	1.0296	0.0000	0.1860	0.0000
\mathbf{U}_6	1.0000	1.0000	1.0296	0.0000	-0.1860	0.0000
\mathbf{U}_7	1.0000	1.0296	1.0000	-0.1860	0.0000	0.0000
\mathbf{U}_8	1.0000	1.0296	1.0000	0.1860	0.0000	0.0000
\mathbf{U}_9	1.0000	1.0000	1.0296	0.0000	0.0000	0.1860
\mathbf{U}_{10}	1.0000	1.0000	1.0296	0.0000	0.0000	-0.1860
\mathbf{U}_{11}	1.0296	1.0000	1.0000	0.1860	0.0000	0.0000
\mathbf{U}_{12}	1.0296	1.0000	1.0000	-0.1860	0.0000	0.0000
\mathbf{U}_{13}	1.0000	1.0000	1.0296	0.0000	0.0000	0.1860
\mathbf{U}_{14}	1.0000	1.0000	1.0296	0.0000	0.0000	-0.1860
\mathbf{U}_{15}	1.0296	1.0000	1.0000	-0.1860	0.0000	0.0000
\mathbf{U}_{16}	1.0296	1.0000	1.0000	0.1860	0.0000	0.0000
\mathbf{U}_{17}	1.0000	1.0296	1.0000	0.0000	0.0000	0.1860
\mathbf{U}_{18}	1.0000	1.0296	1.0000	0.0000	0.0000	-0.1860
\mathbf{U}_{19}	1.0296	1.0000	1.0000	0.0000	0.1860	0.0000
\mathbf{U}_{20}	1.0296	1.0000	1.0000	0.0000	-0.1860	0.0000
\mathbf{U}_{21}	1.0000	1.0296	1.0000	0.0000	0.0000	-0.1860
\mathbf{U}_{22}	1.0000	1.0296	1.0000	0.0000	0.0000	0.1860
\mathbf{U}_{23}	1.0296	1.0000	1.0000	0.0000	0.1860	0.0000
\mathbf{U}_{24}	1.0296	1.0000	1.0000	0.0000	-0.1860	0.0000

Tabelle 5.4 Transformationstensoren (Voigtsche Notation) für 24 bainitische Varianten

Materialparameter für Simulationen sind derart angepasst worden, dass diese das Materialverhalten vom Bainit bei einer Temperatur von 340 °C abbilden.

Tabelle 5.5 liefert einen Überblick über die Parameterreihe, die in beiden, in dieser Arbeit vorgestellten Beispielrechnungen verwendet wurde.

Phasenumwandlung	η_{tr} [—]	n_{tr} [—]	f_c [MPa]	γ [—]	s_1 [—]	
	83285.1	2	25	0.76	0.6	
	s_2 [—]	$\Delta\phi_{ch}^{ij}$ [MPa]	$\Delta\phi_{ch,\theta}^{ij}$ [$\frac{\text{MPa}}{^\circ\text{C}}$]	$\phi_{ch,i0}$ [MPa]	$\Delta\phi_{ch,i0}^\theta$ [$\frac{\text{MPa}}{^\circ\text{C}}$]	
	0.37	5.0	0.3	5.01	0.5	
Viskoplastizität	η_{pl} [—]	n_{pl} [—]	Y_0 [MPa]	Q_0 [MPa]	H [GPa]	b [—]
	1	1	252.11	28.52	52.52	36.2

Tabelle 5.5 Materialparameter der Phasenumwandlung und der Viskoplastizität

Die im oberen Block der Tabelle aufsummierten Parameter beziehen sich auf die Routine für die Berechnung der Phasentransformation der bainitischen Varianten. Die Parameter im unteren Block nehmen Bezug auf die Routine für die Berechnung des viskoplastischen Materialverhaltens. Die in den Beispielrechnungen verwendeten Materialparameter sind fiktiv, erfüllen dennoch den erwünschten Zweck, die Möglichkeiten des Modells zu präsentieren.

5.4.1 Variantenselektion in einem Einzelkorn

Zur Untersuchung des Modellverhaltens und insbesondere der Bildung der Bainitvarianten wird in diesem Abschnitt zunächst die Simulation des Einzelkorns durchgeführt, welches einer externen Spannung und einer konstanten Temperatur unterzogen wird. Die Randbedingungen der Simulation werden exemplarisch in Abbildung 5.4 aufgezeigt. Hierbei gilt zu berücksichtigen, dass die

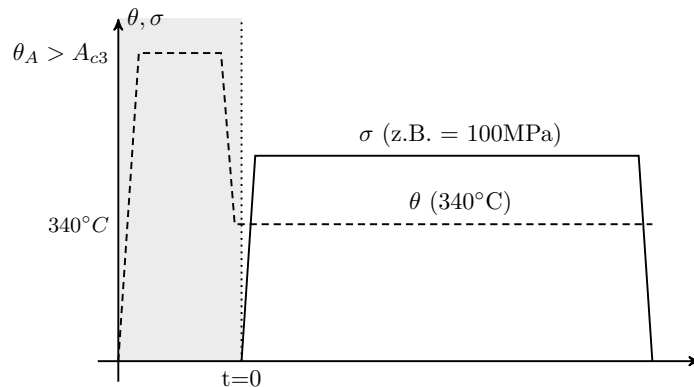


Abb. 5.4 Variantenauswahl: Schaubild der thermomechanischen Belastung (Punktierlinie: Temperatur, gestrichelte Linie: Spannung)

Körnerzahl i Eins entspricht und die Varianten j Werte zwischen 1 und 24 annehmen können. Die hellgrau markierte Zone repräsentiert den Austenitisierungsprozess sowie die darauf folgende Abkühlphase in Abhängigkeit von der für die Initialisierung der bainitischen Transformation notwendigen Solltemperatur. Während dieser Austenitisierungsphase wird der Stahl solange erhitzt, bis sein Gefüge vom Ferrit zum Austenit transformiert. Nach Erreichen der homogenen austenitischen Mikrostruktur erfolgt eine Abkühlung. Damit eine Bainitbildung zustande kommt, wird das Material mit einer moderaten Abkühlgeschwindigkeit auf eine Temperatur von 340°C gebracht. Dieser Punkt soll als Startpunkt für alle Simulationen in diesem Kapitel dienen. Für den weiteren Verlauf der Simulation wird eine konstante Temperatur von 340°C (Starttemperatur) angenommen. Darüber hinaus werden externe Spannungen als Randbedingungen angebracht und über die Zeit konstant gehalten.

5.4.1.1 Zugbelastung

Im Rahmen dieser Untersuchung werden vier unterschiedliche Belastungsfälle unter besonderer Berücksichtigung des Richtungseffekts untersucht. Damit soll die Frage geklärt werden, welcher Variantensatz bei gegebener Spannung ausgewählt wird und wie dieser die im Experiment gemessene Gesamtverzerrung beeinflusst.

Abbildung 5.5 zeigt die Evolution der Volumenanteile der aktiven Varianten für den Fall der uniaxialen Zugspannung von 0 MPa, 50 MPa, 250 MPa und 500 MPa bei Vorliegen konstanter Temperatur. Bei fehlender Spannung wird Bainit lediglich durch chemische Treibkraft gleichmäßig für alle Varianten gebildet. Die Einführung einer externen Belastung führt dazu, dass acht Varianten mit den Nummern 11, 12, 15, 16, 19, 20, 23 und 24 einen vergleichsweise höheren Volumenanteil aufweisen. Dies lässt sich dadurch erklären, dass das Auswahlverfahren Varianten vorzieht, die die höchsten mechanischen Treibkräfte erzeugen.

Sowohl der kinetische als auch der Volumenanteil der bainitischen Varianten sind von der Magnitude der aufgetragenen Zugspannung abhängig. Dieser Effekt wird in der Abbildung 5.6 am Beispiel der elften bainitischen Variante, die zu den energetisch präferierten Varianten gehört, demonstriert.

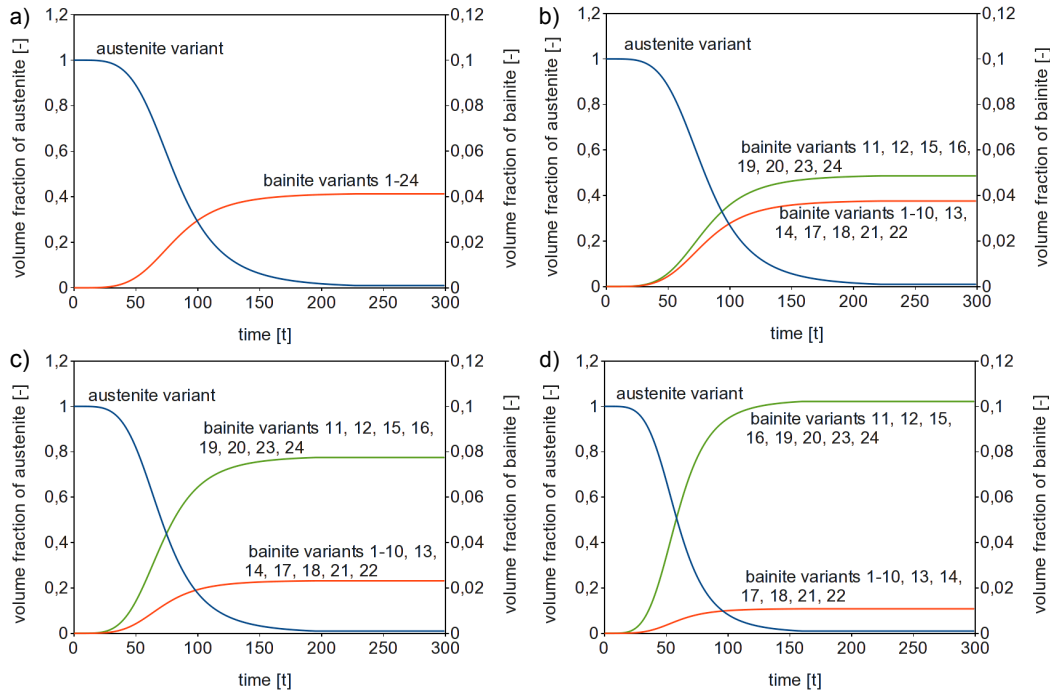


Abb. 5.5 Entwicklung der bainitischen Varianten unter Zugbelastung von a) 0 MPa, b) 5 MPa, c) 250 MPa, d) 500 MPa

Der Volumenanteil der bevorzugten Varianten, die während der bainitischen Transformation gebildet werden, wächst mit steigender mechanischen Belastung. Dies stimmt mit den Ergebnissen der Untersuchungen der Formgedächtnislegierungen von ANTRETTETTER et al. [3] überein.

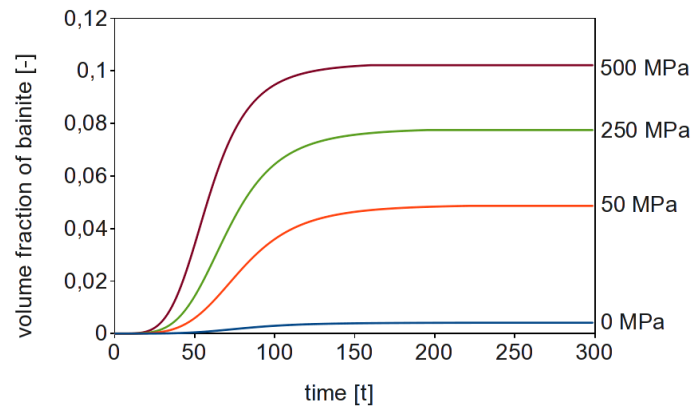


Abb. 5.6 Variantenauswahl: Evolution der 11. Variante für unterschiedliche Spannungsstufen

5.4.1.2 Druckbelastung

Analog zum Zugspannungsfall werden bei Untersuchung des Einflusses der Druckbelastung vier verschiedene Belastungsfälle verglichen. Abbildung 5.7 zeigt die Evolution des Volumenanteils der

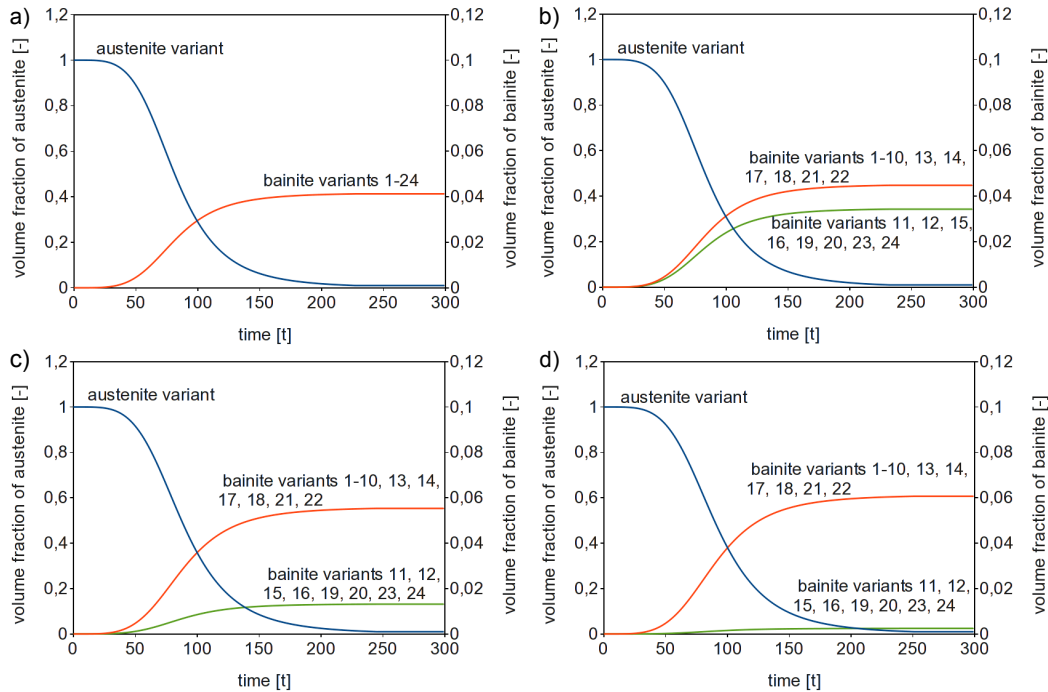


Abb. 5.7 Entwicklung der bainitischen Varianten unter Druckbelastung von a) 0 MPa, b) -50 MPa, c) -250 MPa, d) -500 MPa

aktiven Varianten für den Fall der uniaxialen Kompression von 0 MPa, -50 MPa, -250 MPa und -500 MPa bei Vorliegen konstanter Temperatur. Es tritt hier der gleiche Effekt wie im Zugspannungsfall auf: einige bainitische Varianten bilden sich schneller und in einem größeren Umfang. Bei der Analyse der Druckbelastung werden 16 bainitische Varianten 1-10, 13, 14, 17, 18, 21 und 22 bevorzugt. Dies hat zur Folge, dass die korrespondierenden Volumenanteile jeder dieser 16 Varianten im Vergleich zum Zugspannungsfall bei geringeren Werten der Volumenanteile gesättigt sind.

5.4.2 Modellierung eines Polykristalls (RVE)

Für die Simulation eines Polykristalls wird das Materialmodell mittels der UMAT-Subroutine im Finite-Elementen-Programm Abaqus implementiert. Dieses Beispiel konzentriert sich auf den Transfer der Forschungsergebnisse für eine Einkristallebene auf eine polykristalline Makroskala mittels der Homogenisierung der stochastisch orientierten Körner. Für diesen Zweck wird ein repräsentatives Volumenelement (RVE) in einer regulären kubischen Matrix mit 8^3 Elementen zusammengesetzt, wobei jedes dieser Elemente mit einem Korn vertreten ist. Abbildung 5.8 gibt einen schematischen Überblick über die Randbedingungen für sämtliche FEM-Simulationen in diesem Beispiel. Abbildung 5.8.a zeigt die Verschiebung von RVE am Ende der Simulation.

Wie schon in Abschnitt 5.4.1 angedeutet und erneut in Abbildung 5.8.b gezeigt, stimmt das Belastungsschema des Polykristalls mit der Belastung eines Monokristalls überein. Hierbei wird an das RVE eine isothermische Belastung in Kombination mit verschiedenen Spannungen aufgebracht. Des Weiteren wirken sich periodische Randbedingungen auf das RVE aus. Aus Abbildung 5.8.c wird ersichtlich, dass mehrfache Kopien des deformierten RVE zu einem raumfüllenden Kontinuum zusammengefasst werden können. Dies wird dadurch gewährleistet, dass die Verschiebungen der gegenüberliegenden Seiten der RVE sich um den Mittelwert des Verschiebungsvektors unterscheiden.

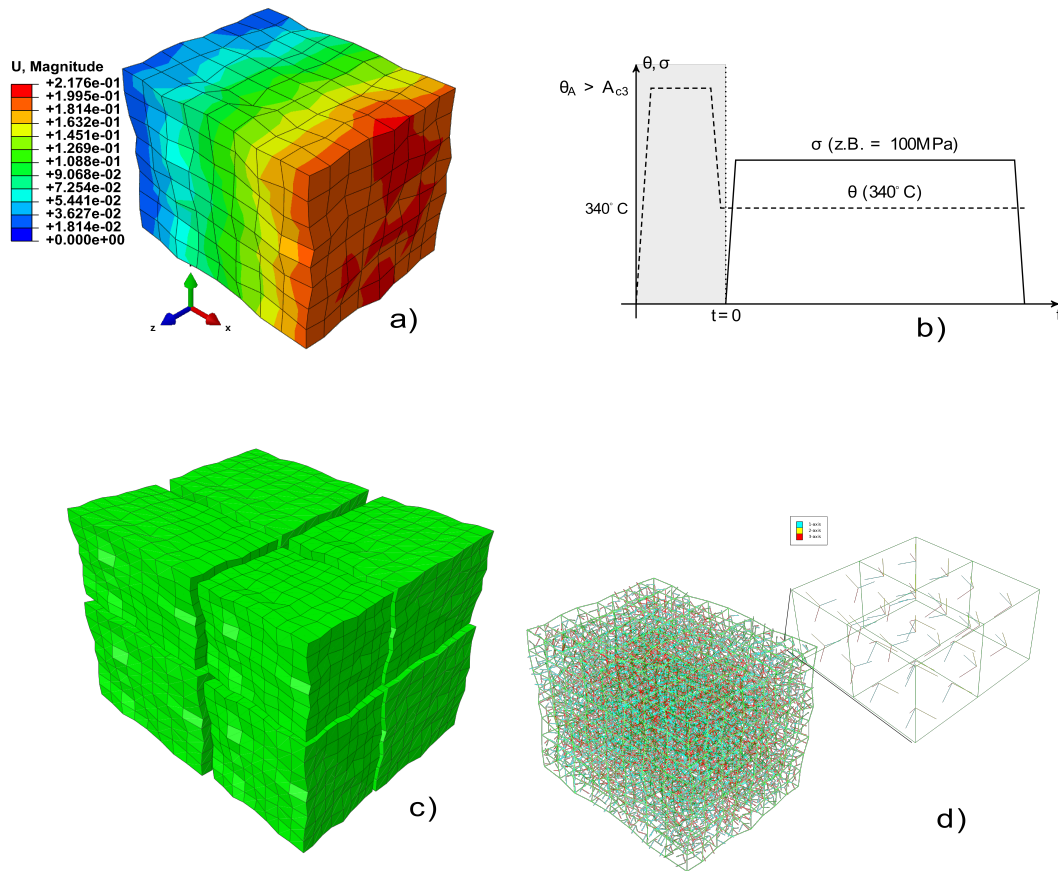


Abb. 5.8 Simulation des TRIP-Effekts an einem Polykristall: a) RVE mit 512 Elementen - schematisch für Verschiebung b) thermomechanische Belastung (Punktierlinie: Temperatur, gestrichelte Linie: Spannung) c) Periodische Randbedingungen und d) randomisierte Materialrichtungen

Abbildung 5.8.d stellt die Variation der Materialorientierungen in verschiedenen Monokristallen des Polykristalls dar. Die Materialorientierung und daher auch die Basisvektoren der Transformationsverzerrungen werden stochastisch jedem einzelnen von 512 im RVE enthaltenen Körnern zugewiesen. Dadurch sollen die energetisch am meisten favorisierten Varianten beeinflusst werden. Spezifische Varianten werden im Umwandlungsprozess, wie bereits in Abschnitt 5.4.1 erläutert, in Abhängigkeit von der Orientierung des Kristallgitters und der externen mechanischen Belastung favorisiert. Der Materialparametersatz, der in diesem Beispiel verwendet wird, stimmt mit dem Satz aus dem ersten Beispiel (vgl. Tabelle 5.5) überein.

Abbildung 5.9 stellt Verzerrungen in x-Richtung für unterschiedliche Belastungsfälle dar. Sie zeigt eine signifikant ansteigende inelastische Verzerrung (TRIP) während eines Phasenwechsels auf. In diesen Simulationen werden unterschiedliche, aber konstante mechanische Spannungen im Bereich von -140 MPa bis 140 MPa an das repräsentative Volumenelement aufgebracht, wobei für die Temperatur ein konstanter Wert von 340 °C angenommen wird. Es wird an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass bei fehlender äußeren Belastung die Transformation ausschließlich durch Änderung der chemischen Energie getrieben wird und die Gesamtverzerrung die umwandlungsbedingte Volumenzunahme repräsentiert. Jede Abweichung von dieser Kurve hat einen geringeren Einfluss auf elastische Verzerrungen, als auf die sogenannte Umwandlungsplastizität (TRIP).

Die Analyse der auftretenden Spannungen und der plastischen Verzerrungen im RVE offenbart, dass die Spannungen im betrachteten polykristallinen repräsentativen Volumenausschnitt nicht homogen verteilt sind und die angebrachte äußere Belastung deutlich übersteigen. Dies führt zu plastischen

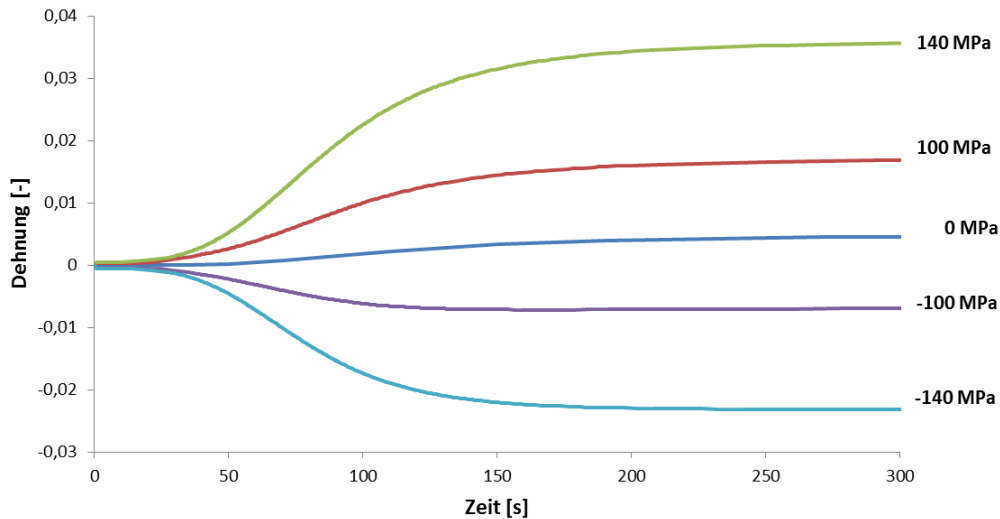


Abb. 5.9 Simulation des TRIP-Effekts an einem Polykristall: Verzerrung-Zeitkurven unter Zug- und Druckbelastung (mit Plastizität)

Verzerrung in den Bereichen, wo die Fließspannung des Austenits überschritten wird. Dieser Effekt wird in Abbildung 5.11 anhand der Verteilungen der von Mises-Spannung und der entsprechenden inelastischen Verzerrung ϵ_v in einem RVE mit 512 Elementen mit einer aufgetragenen Spannung von 125 MPa veranschaulicht. Die ausgewählten Zeitpunkte sind im Verzerrung-Zeitdiagramm 5.10 aufgetragen.

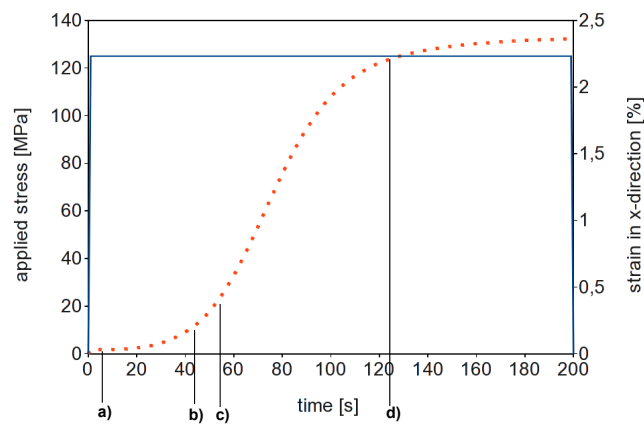


Abb. 5.10 Simulation des TRIP-Effekts an einem Polykristall: Verzerrung in x -Richtung (Punktierlinie) infolge einer angebrachten Spannung von 125 MPa (durchgezogene Linie). Zeitpunkte a) - d) stellen Markierungen für die Darstellung in Abbildung 5.11 dar

Die Frage, welcher der zwei, den TRIP beeinflussenden Phänomene, der Magee-Effekt oder der Greenwood-Johnson-Effekt bei der Umwandlungsplastizität eine größere Rolle spielt, kann mit Hilfe der Untersuchung der Einflüsse der plastischen Verzerrungen im Austenit beantwortet werden. Dazu werden die Simulationen eines repräsentativen Volumenelement (RVE) mit und ohne Berücksichtigung der viskoplastischen Materialverhaltens des Austenits durchgeführt. Der Vergleich von jeweils zwei Simulationen bei gleicher externen Belastung zeigt eine signifikante Differenz zwi-

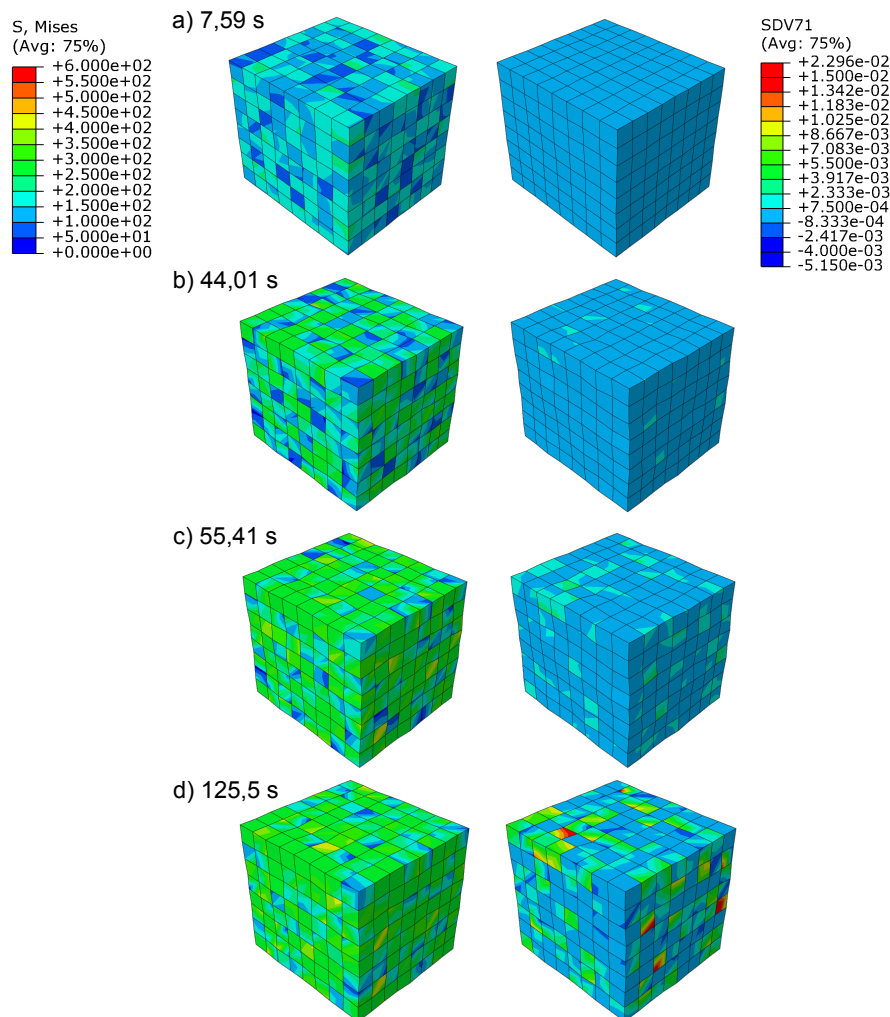


Abb. 5.11 Simulation des TRIP-Effekts an einem Polykristall: Evolution der von Mises-Spannung und der äquivalenten inelastischen Verzerrung ε_v (SDV71) am RVE mit 512 Elementen für eine angebrachte Spannung von 125 MPa

schen den resultierenden Verzerrungen auf. Dieser Effekt wird in Abbildung 5.12 exemplarisch für die mechanischen Belastungen von 100 MPa und 140 MPa aufgezeigt.

Neben elastischen Verzerrungen und Änderungen des Transformationsvolumens beinhaltet die Simulationskurve ohne Berücksichtigung der Plastizität die inelastische Verzerrung infolge der asymmetrischen Bildung der Bainitvarianten (Magee-Effekt). Die Differenz zwischen diesen zwei Kurven geht allein aus der viskoplastischen Verzerrung des austenitischen Gefüges (Greenwood-Johnson-Effekt) hervor. Während der Umwandlung entwickeln sich hohe Spannungen im Kristallgitter. Obwohl die aufgebrachte Spannung (≤ 140 MPa) die Fließspannung des Austenits (im Beispiel $Y_{0j} = 252$ MPa, vgl. Tabelle 5.5) unterschreitet, treten plastischen Verzerrungen auf.

Ein weiterer Effekt, der im Modell nachgebildet werden kann, ist die Rückverformung der umwandlungsplastischen Verzerrung (*backstress effect*) nach Entlastung der Nennspannung während der Phasenumwandlung auf 0 MPa. Abbildung 5.13 stellt die Entwicklung der umwandlungsplastischen Verzerrungen und deren Rückentwicklung infolge der Spannungsentlastung von 100 MPa auf 0 MPa nach 90 bzw. 200 Sekunden dar. Das Ausmaß der Rückverformung beträgt, abhängig vom Entlastungszeitpunkt, 0, 14% bzw. 0, 1% und entspricht dem Niveau der experimentell ermittelten Werte [1, 57].

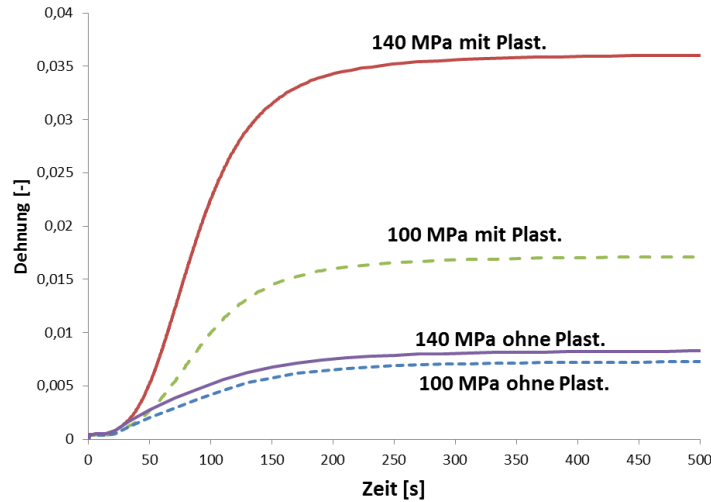


Abb. 5.12 Simulation des TRIP-Effekts an einem Polykristall: Gesamtverzerrungszeitkurven für die Simulation mit und ohne Plastizität (aufgebrachte Spannungen: 100 MPa und 140 MPa)

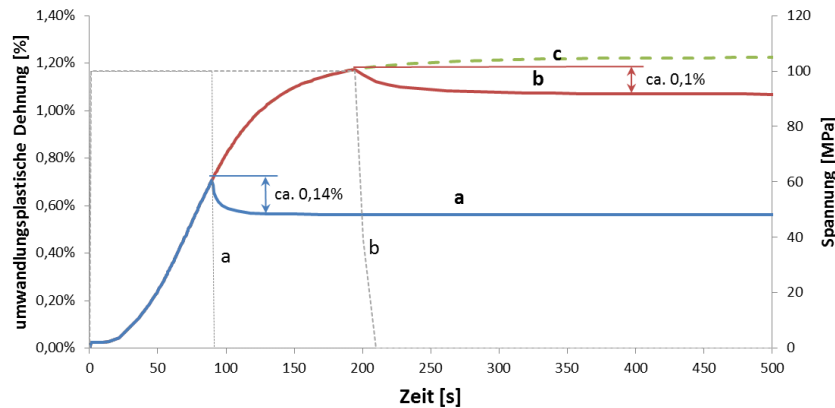


Abb. 5.13 Simulation des TRIP-Effekts an einem Polykristall: Entwicklung umwandlungsplastischer Verzerrungen in Abhängigkeit von der Zeit und Rückverformung nach Entlastung bei isothermer, bainitischer Umwandlung: a) Entlastung nach 90 s b) Entlastung nach 200 s c) ohne Entlastung

Fazit

Die aus der Literatur bekannten Ansätze zur mikromechanischen Mehrskalenmodellierung befassen sich lediglich mit der Umwandlung vom Austenit zum Martensit. Die Untersuchung in diesem Kapitels konzentriert sich hingegen auf die Simulation der Umwandlung vom Austenit zum Bainit. Dieses physikalisch motivierte und thermodynamisch konsistente, für N-Körner und n-Bainitvarianten entwickelte Modell kombiniert das elastisch-viskoplastische Verhalten mit einer Phasenumwandlung in einer polykristallinen Struktur. Dabei werden die makroskopischen Effekte der Phasenumwandlung anhand der Prozesse sowohl auf der Mikro- als auch der Mesoebene nachgebildet. Die Anwendung des Mehrskalenmodells findet nach der Implementierung in das Finite Elemente Programm Abaqus zur Simulation eines repräsentativen Volumenelements (RVE) mit 512 Elementen, das das makroskopische Materialverhalten reproduziert, statt. Zu den dargelegten Effekten zählen die Volumenänderung infolge der Phasenumwandlung, die Umwandlungsplastizität sowie die Rückverformung der umwandlungsplastischen Verzerrung. Ferner konnten mit Hilfe der FEM-Simulation der Magee-Effekt sowie der Greenwood-Johnson-Effekt abgebildet und separiert werden.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Die zentrale Zielsetzung der vorliegenden Dissertation ist die numerische Simulation von Hybridumformprozessen unter besonderer Berücksichtigung der Phasenumwandlung. Beim betrachteten Hybridumformprozess handelt es sich um eine Kombination aus Schmiede- und Härtingsprozess [119, 118, 143]. Aufgrund der komplexen Temperaturverteilungen sowie der zusätzlichen Umformbeanspruchungen stellen derartige Hybridumformprozesse thermomechanisch gekoppelte Problemstellungen mit verschiedenartig auftretenden Gefügezuständen im Bauteil dar. Im Ergebnis entstehen Werkstücke mit gradierten und somit flexiblen, nach speziellen Bedürfnissen angepassten Werkstoffeigenschaften. Zur genauen Abbildung der spezifischen Vorgänge in diesem Prozess wurden im Rahmen dieser Arbeit zwei Modellierungsstrategien, ein makroskopisch-phänomenologischer und ein mikromechanischer Mehrskalenansatz zur Simulation der Phasenumwandlung unter Berücksichtigung von viskoplastischem Verhalten eines niedriglegierten 51CrV4 Stahls in der Bainit- sowie der Martensitstufe verfolgt.

Als erstes wurde ein makroskopisch-phänomenologisches Mehrphasenmodell aufgebaut, das in sich vielfältige Eigenschaften vereint. Dazu zählen die zeit- und temperaturabhängige Phasenumwandlung, Austenitisierung des Ausgangsgefüges und die aus der Phasenumwandlung resultierenden Effekte wie Umwandlungsplastizität, Volumenveränderung sowie temperatur- und mikrostrukturabhängige Elasto- bzw. Viskoplastizität. Zur Vereinfachung der Implementierung wurde ein Mehrphasenmodell unter Verwendung der geometrisch linearen Theorie entwickelt. Dieses Modell analysiert insbesondere die Austenitisierung während des Aufheizens, die Bildung von Martensit, Bainit und Mischgefügen sowie das inelastische Verhalten in Form von Umwandlungsplastizität und Viskoplastizität während der Abkühlung. Dabei erfolgte die makroskopische Modellierung der bainitischen Umwandlung unter Betrachtung der Evolution der Keimradien sowohl für den oberen als auch den unteren Bainit mit dem daraus resultierenden, nicht symmetrischen Inkubationszeitverlauf und anschließender Entwicklung der Evolutionsgleichungen der bainitischen Phase unter Verwendung der Treibkräfte. Das für kleine Deformationen entwickelte, thermodynamisch konsistente Mehrphasenmodell wurde numerisch implementiert. Zur Ermittlung der Materialparameter auf der Grundlage der experimentellen Untersuchungen wurde das Parameteridentifikationstool „PARA“ eingesetzt. Die ermittelten Parameter werden zur FEM-Simulation des Hybridumformprozesses verwendet.

Da im Hybridumformprozess massive Umformungen im Flanschbereich auftreten, erwies sich die Entwicklung eines makroskopischen Modells für große Deformationen unter Berücksichtigung der Phasenumwandlungen als unumgänglich. In diesem makroskopischen Modell wurde sowohl die Austenitisierung während der Aufheizphase als auch die Bildung von Martensit, Bainit und Mischgefügen während der Umform- und der Abkühlphase untersucht. Die Beschreibung der Umwandlungsplastizität erfolgte auf der Grundlage des Leblond-Ansatzes. Für die Analyse des allgemeinen plastischen Verhaltens wurde der klassische Ansatz der von-Mises-Plastizität eingesetzt. Die Implementierung wurde um die spektrale Zerlegung des linken elastischen Cauchy-Green-Tensors, der Kirchhoff-Spannung sowie des Tangentenmoduls erweitert. Die daraus resultierenden FEM-Simulationsergebnisse des Hybridumformprozesses zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen

der errechneten Verteilung der martensitischen Phase mit der Gefügeverteilung im Schliffbild der realen Welle.

Ferner wurde im Rahmen dieser Dissertation die Möglichkeit des Einsatzes der Finite Elemente Methode für die Vorhersage der resultierenden Phasenverteilung durch die Variation der Prozessparameter untersucht. Den Gegenstand der Analyse bildete unter anderem die Untersuchung des Einflusses der Ausgangstemperatur auf die Phasenverteilung in der Welle. Es konnte aufgezeigt werden, dass durch das vorherige Vorheizen des Werkstücks eine signifikante Bildung des bainitischen Gefüges im Flansch ermöglicht wird. Des Weiteren steigt der bainitische Anteil bei höheren Ausgangstemperaturen. Die Veränderung des Leistungsprofils der induktiven Erwärmung stellt eine weitere Möglichkeit der Veränderung der Verteilung sowie der Form des harten Bereiches dar. Die Modifikation der Phasengradierung erfolgte hier exemplarisch anhand von drei Variationen des Aufheizprofils. Diese Beispiele repräsentieren die Möglichkeit der Anpassung der Härtegradienten in Hinblick auf die Form und die Position im Bauteil entsprechend den Anforderungen mittels einer Änderung der Prozessparameter.

Die spezifischen Vorgänge, die während der Phasenumwandlung im Werkstück auftreten, finden in der Regel sowohl auf der Mikro- sowie der Mesoebene des Materials statt. Um den Ursprung der makroskopischen Phänomene zu ermitteln, ist es notwendig, Simulationen des Materialverhaltens auf niedriger gelegenen Skalen durchzuführen und diese in das Materialverhalten auf der Makroebene einfließen zu lassen. Zu diesem Zweck wurde in Kapitel 5 ein Mehrskalenmodell entwickelt, dessen Gegenstand die Simulation der Umwandlung vom Austenit zum Bainit zum Gegenstand hat. Mit Hilfe dieses Modells wurden die makroskopischen Effekte der Phasenumwandlung anhand der kristallographischen Vorgänge sowohl auf der Mikro- als auch auf der Mesoebene nachgebildet. Dieses physikalisch motivierte und thermodynamisch konsistente, für N -Körner und n -Bainitvarianten entwickelte Modell kombiniert das elastisch-viskoplastische Verhalten mit der Phasenumwandlung in einer polykristallinen Struktur. Des Weiteren wurde das Mehrskalenmodell auf den niedriglegierten Stahl 51CrV4 adaptiert und in eine „UMAT“-Subroutine des Finite Elemente Programms Abaqus implementiert. Hierbei wurde die Bildung von 24 möglichen Bainitvarianten im Einzelkristall (Mikro-Ebene) berücksichtigt. Um das während der Phasenumwandlung auftretende makroskopische Verhalten erfassen zu können, erfolgte die Abbildung des Polykristalls auf der mesoskopischen Ebene mit Hilfe eines repräsentativen Volumenelements (RVE) mit 512 Elementen. Zu den dargelegten Effekten zählen die Volumenänderung infolge der Phasenumwandlung, die Umwandlungsplastizität sowie die Rückverformung der umwandlungsplastischen Dehnung. Ferner konnten mit Hilfe der FEM-Simulation der Magee-Effekt sowie der Greenwood-Johnson-Effekt abgebildet und separiert werden.

Die Simulationsergebnisse des Hybridumformprozesses auf der Grundlage des makroskopischen phänomenologischen Mehrphasenmodells zeigen bereits eine gute Übereinstimmung mit der Realität. Um die Abhängigkeit der Umwandlungskinetik von der vorherigen Austenitisierungsbehandlung zu berücksichtigen und damit die Vorhersagbarkeit des Prozesses verbessern zu können, ist eine Erweiterung des phänomenologischen Mehrphasenmodells erforderlich. Dafür eignet sich insbesondere der Einsatz von weiteren internen Variablen, die unterschiedliche Austenitisierungsszenarien repräsentieren und die Evolution sowie die Eigenschaften der bainitischen und der martensitischen Phasen beeinflussen. Ferner muss das entwickelte Materialmodell wegen seiner rein phänomenologischen Natur bezüglich der Berücksichtigung der tatsächlich im Material ablaufenden Vorgänge auf der Grundlage von aufwändigen experimentellen Untersuchungen parametrisiert werden.

Um die während einer unvollständigen, inhomogenen Austenitisierung entstehenden Phänomene, zu beschreiben und deren Ursachen zu untersuchen, erweist sich die Entwicklung eines Ansatzes, das in sich die Eigenschaften sowohl eines mikromechanischen Mehrskalenmodells als auch eines Phasenfeldmodells vereint, als zweckmäßig. Eine Phasenfeldmodellierung eignet sich insbesondere zur Beschreibung der Evolution des Austenitgefüges sowie des Abbaus des Zementits und ermöglicht die Abbildung der inhomogenen Kohlenstoffverteilung bzw. des inhomogenen austenitischen Volumenanteils im einzelnen Korn bei unterschiedlichen Zeit-Temperatur-Verläufen. Die inhomogenen Kohlenstoff- sowie Austenitverteilung wirken sich wiederum auf die Evolution der bainitischen Varianten aus. Hiermit wird in Abhängigkeit von der vorherigen Austenitisierungsbehandlung auf die Umwandlungskinetik Einfluss genommen.

Das in Kapitel 5 entwickelte Mehrskalenmodell ist durch eine entsprechende Anpassung der thermischen und chemischen Treibkräfte sowie der Materialparameter im Stande die martensitische Umwandlung abzubilden. Damit könnten sämtliche Phasenumwandlungseffekte während der FE-Simulation des Hybridumformprozesses in jedem Materialpunkt des zugrunde liegenden FE-Netzes mit einer weiteren FE-Simulation zum Verhalten der Mikrostruktur modelliert werden. Dieses Vorgehen basiert auf der FE^2 -Methode, deren Anwendung mit hohem numerischen Aufwand verbunden ist. Die Rechengeschwindigkeit des homogenisierten Verfahrens lässt sich durch die Verwendung paralleler Programmierung für mehrere CPUs oder die Verwendung von GPGPU (General Purpose Computation on Graphics Processing Unit) z.B. OpenCL oder CUDA drastisch erhöhen (siehe dazu z.B. [40]). Dies ist darauf zurückzuführen, dass die mikroskopischen Probleme innerhalb einer makroskopischen Iteration voneinander unabhängig sind und deshalb parallel gelöst werden können.

Aufgabe der weiterführenden Forschung liegt in der Suche nach einer geeigneten Alternative zur Homogenisierung der Simulationsergebnisse auf der Mikroskala. Dazu bietet sich insbesondere die Nonuniform Transformation Field Analysis (NTFA)-Methode [95, 39] an, die den numerischen Aufwand beim irreversiblen Materialverhalten durch eine Ordnungsreduktion senkt. Dabei können die benötigten plastischen Moden für einzelne RVEs in Abhängigkeit von den Phasenanteilen bereits im Vorfeld bestimmt werden und als eine Art innere Variablen bzw. Materialparameter in einer Datenbank abgespeichert werden. Die Aktualisierung der Datenbank für zuvor nicht abgedeckte Lastfäden oder Änderung der Mikrostruktur erfolgt während der Simulation des Hybridumformprozesses. Auf diese Weise lässt sich ein schnelles, flexibles und numerisch homogenisiertes Verfahren entwickeln.

Literaturverzeichnis

1. Ahrens, U.: Beanspruchungsabhängiges Umwandlungsverhalten und Umwandlungsplastizität niedrig legierter Stähle mit unterschiedlich hohen Kohlenstoffgehalten. Dissertation, Universität Paderborn (2003)
2. Altenbach, H.: Kontinuumsmechanik: Einführung in die materialunabhängigen und materialabhängigen Gleichungen, 2. Auflage, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York (2012)
3. Antretter, T., Fischer, F., Cailletaud, G.: A numerical model for transformation induced plasticity (TRIP). *Journal de Physique IV*, **115**, 233–241, (2004)
4. Antretter, T., Fischer, F.D., Tanaka, K., Cailletaud, G.: Theory, experiments and numerical modelling of phase transformations with emphasis on TRIP. *Steel research*, **73**(6-7), 225–235, (2002)
5. Avrami, M.: Kinetics of phase change. i general theory. *The Journal of Chemical Physics*, **7**(12), 1103–1112, (1939)
6. Azuma, M., Fujita, N., Takahashi, M., Iung, T.: Modelling upper and lower bainite transformation in steels. *Materials Science Forum*, **426**, 1405–1412, (2003)
7. Babu, K., Kumar, T.P.: Comparison of austenite decomposition models during finite element simulation of water quenching and air cooling of aisi 4140 steel. *Metallurgical and Materials Transactions B*, **45**(4), 1530–1544, (2014)
8. Bain, E.C., Dunkirk, N.: The nature of martensite. *Trans. AIME*, **70**(1), 25–47, (1924)
9. Bammann, D., Solanki, K.: On kinematic, thermodynamic, and kinetic coupling of a damage theory for polycrystalline material. *International Journal of Plasticity*, **26**(6), 775–793, (2010)
10. Barbe, F., Quey, R., Taleb, L.: Numerical modelling of the plasticity induced during diffusive transformation. case of a cubic array of nuclei. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, **26**(4), 611–625, (2007)
11. Bargel, H.J., Schulze, G.: *Werkstoffkunde*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2005)
12. Bertsekas, D.P.: Projected newton methods for optimization problems with simple constraints. *SIAM Journal on control and Optimization*, **20**(2), 221–246, (1982)
13. Besserdich, G.: Untersuchung zur Eigenspannungs- und Verzugsausbildung beim Abschrecken von Zylindern aus den Stählen 42 CrMo4 und Ck45 unter Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität. Dissertation, Universität Karlsruhe (1993)
14. Bhadeshia, H.: Martensite and bainite in steels: Transformation mechanism and mechanical properties. *Journal de Physique III*, **7**(5), C5–367–376, (1997)
15. Bhadeshia, H.: Carbon in cubic and tetragonal ferrite. *Philosophical Magazine*, **93**(28-30), 3714–3725, (2013)
16. Bhadeshia, H., Edmonds, D.: The bainite transformation in a silicon steel. *Metallurgical Transactions A*, **10**(7), 895–907, (1979)
17. Bhadeshia, H.K.D.H.: *Bainite in Steels - Transformations, Microstructure and Properties*, 2. Auflage, IOM Communications, London (2001)
18. Bhadeshia, H.K.D.H.: *Worked examples in the Geometry of Crystals*, 2. Auflage, Institute of Materials, London (2001)
19. Bhattacharyya, A., Weng, G.: An energy criterion for the stress-induced martensitic transformation in a ductile system. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **42**(11), 1699–1724, (1994)
20. Burtchen, M., Hunkel, M., Luebben, T., HOFFMANN, F., Zoch, H.W.: Simulation of quenching treatments on bearing components. *Strojniški vestnik*, **55**(3), 155–159, (2009)
21. Cahn, R.W., Haasen, P.: *Physical metallurgy*, Band 1, 4. Auflage, North-Holland, North (1996)
22. Cherkaoui, M.: Transformation induced plasticity: mechanisms and modeling. *Journal of engineering materials and technology*, **124**(1), 55–61, (2002)
23. Cherkaoui, M., Berveiller, M., Sabar, H.: Micromechanical modeling of martensitic transformation induced plasticity (TRIP) in austenitic single crystals. *International Journal of plasticity*, **14**(7), 597–626, (1998)
24. Ciarlet, P.G.: *Introduction to numerical linear algebra and optimisation*, Cambridge University Press, Cambridge (1989)
25. Coleman, B.D., Gurtin, M.E.: Thermodynamics with internal state variables. *The Journal of Chemical Physics*, **47**(2), 597–613, (1967)

26. Deng, D., Murakawa, H.: Finite element analysis of temperature field, microstructure and residual stress in multi-pass butt-welded 2.25 Cr-1Mo steel pipes. *Computational materials science*, **43**(4), 681–695, (2008)
27. Denis, S., Simon, A., Beck, G.: Analysis of the thermomechanical behaviour of steel during martensitic quenching and calculation of internal stresses. *Internal Stress: Origin–Measurement–Evaluation*(Eigenspannungen: Entstehung–Messung–Bewertung)., **1**, 211–238, (1983)
28. Dennis Jr, J.E., Schnabel, R.B.: Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations, Siam, Philadelphia (1996)
29. Dörrenberg Edelstahl GmbH: Werkstoffdatenblatt 1.8159
30. Eisenhüttenleute, V.D.: Werkstoffkunde Stahl, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1984)
31. Eterovic, A.L., Bathe, K.J.: A hyperelastic-based large strain elasto-plastic constitutive formulation with combined isotropic-kinematic hardening using the logarithmic stress and strain measures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **30**(6), 1099–1114, (1990)
32. Ferro, P., Porzner, H., Tiziani, A., Bonollo, F.: The influence of phase transformations on residual stresses induced by the welding process—3D and 2D numerical models. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **14**(2), 117, (2006)
33. Fischer, F.: A micromechanical model for transformation plasticity in steels. *Acta Metallurgica et Materialia*, **38**(8), 1535–1546, (1990)
34. Fischer, F.: Transformation induced plasticity in triaxially loaded steel specimens subjected to a martensitic transformation. *European journal of mechanics. A. Solids*, **11**(2), 233–244, (1992)
35. Fischer, F., Oberaigner, E., Tanaka, K., Nishimura, F.: Transformation induced plasticity revised an updated formulation. *International Journal of Solids and Structures*, **35**(18), 2209–2227, (1998)
36. Fischer, F., Reisner, G., Werner, E., Tanaka, K., Cailletaud, G., Antretter, T.: A new view on transformation induced plasticity (TRIP). *International Journal of Plasticity*, **16**(7), 723–748, (2000)
37. Fischer, F., Sun, Q.P., Tanaka, K.: Transformation-induced plasticity (TRIP). *Applied Mechanics Reviews*, **49**(6), 317–364, (1996)
38. Fischlschweiger, M., Cailletaud, G., Antretter, T.: A mean-field model for transformation induced plasticity including backstress effects for non-proportional loadings. *International Journal of Plasticity*, **37**, 53–71, (2012)
39. Fritzen, F., Böhlke, T.: Nonuniform transformation field analysis of materials with morphological anisotropy. *Composites Science and Technology*, **71**(4), 433 – 442, (2011)
40. Fritzen, F., Hodapp, M., Leuschner, M.: Gpu accelerated computational homogenization based on a variational approach in a reduced basis framework. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **278**(0), 186 – 217, (2014)
41. Furuhashi, T., Kawata, H., Morito, S., Maki, T.: Crystallography of upper bainite in Fe–Ni–C alloys. *Materials Science and Engineering: A*, **431**(1), 228–236, (2006)
42. Garrett, R., Xu, S., Lin, J., Dean, T.: A model for predicting austenite to bainite phase transformation in producing dual phase steels. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, **44**(7), 831–837, (2004)
43. Van der Giessen, E., Kollmann, F.: On mathematical aspects of dual variables in continuum mechanics. part 1: Mathematical principles. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, **76**(8), 447–462, (1996)
44. Govindjee, S., Miehe, C.: A multi-variant martensitic phase transformation model: formulation and numerical implementation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **191**(3), 215–238, (2001)
45. Govindjee, S., Mielke, A., Hall, G.J.: The free energy of mixing for n-variant martensitic phase transformations using quasi-convex analysis. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **51**(4), I–XXVI, (2003)
46. Greenwood, G., Johnson, R.: The deformation of metals under small stresses during phase transformations. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, **283**(1394), 403–422, (1965)
47. Hackl, K., Heinen, R.: A micromechanical model for pre textured polycrystalline shape-memory alloys including elastic anisotropy. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, **19**(8), 499–510, (2008)
48. Hackl, K., Heinen, R.: An upper bound to the free energy of n-variant polycrystalline shape memory alloys. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **56**(9), 2832–2843, (2008)
49. Hackl, K., Zhang, W., Schmidt-Baldassari, M., Hoppe, U.: Micromechanics of tension-compression asymmetry of polycrystalline shape-memory-alloys. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, **35**(5), 284–288, (2004)
50. Hagen, M.: Werkstoffmodelle zur thermomechanischen Behandlung des Stahls 50 CrV4. Dissertation, RWTH Aachen (1990)
51. Hallberg, H., Hakansson, P., Ristinmaa, M.: A constitutive model for the formation of martensite in austenitic steels under large strain plasticity. *International Journal of Plasticity*, **23**(7), 1213–1239, (2007)
52. Hallberg, H., Hakansson, P., Ristinmaa, M.: Thermo-mechanically coupled model of diffusionless phase transformation in austenitic steel. *International Journal of Solids and Structures*, **47**(11), 1580–1591, (2010)
53. Hasan, H., Peet, M., Bhadeshia, H., Wood, S., Booth, E.: Temperature cycling and the rate of the bainite transformation. *Materials Science and Technology*, **26**(4), 453–456, (2010)
54. Haupt, P.: Continuum mechanics and theory of materials, 2. Auflage, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (2002)
55. Hehemann, R.: The bainite transformation. *American Society for Metals*, 397–431, (1970)
56. Hehemann, R., Kinsman, K., Aaronson, H.: A debate on the bainite reaction. *Metallurgical Transactions*, **3**(5), 1077–1094, (1972)

57. Holzweißig, M.J.: Einfluss mechanischer Belastung auf das scherungsdominierte Phasenumwandlungsverhalten in niedrig legiertem Stahl-In-situ Charakterisierung von Variantenauswahl und-wachstum. Dissertation, Universität Paderborn (2014)
58. Hsu, T.: An approximate approach for the calculation of s in iron-base alloys. *Journal of Materials Science*, **20**(1), 23–31, (1985)
59. Huang, Y.: A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the abaqus finite element program. Division of Engineering and Applied Science, (1991)
60. Hunkel, M., Lübken, T., Hoffmann, F., Mayr, P.: Modellierung der bainitischen und perlitischen umwandlung bei stählen. *HTM. Härtereitechnische Mitteilungen*, **54**(6), 365–372, (1999)
61. Iwamoto, T.: Multiscale computational simulation of deformation behavior of TRIP steel with growth of martensitic particles in unit cell by asymptotic homogenization method. *International Journal of Plasticity*, **20**(4), 841–869, (2004)
62. Johnson, W.A., Mehl, R.F.: Reaction kinetics in processes of nucleation and growth. *Trans. AIME*, **135**(8), 396–415, (1939)
63. Kieback, B., Neubrand, A., Riedel, H.: Processing techniques for functionally graded materials. *Materials Science and Engineering: A*, **362**(1), 81–106, (2003)
64. Knowles, K., Smith, D., Clark, W.: On the use of geometric parameters in the theory of interphase boundaries. *Scripta Metallurgica*, **16**(4), 413–416, (1982)
65. Koistinen, D., Marburger, R.: A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. *Acta Metallurgica*, **7**(1), 59–60, (1959)
66. Kouznetsova, V., Geers, M.: A multi-scale model of martensitic transformation plasticity. *Mechanics of Materials*, **40**(8), 641–657, (2008)
67. Kurdjumow, G., Sachs, G.: Über den Mechanismus der Stahlhärtung. *Zeitschrift für Physik*, **64**(5-6), 325–343, (1930)
68. Lambers, H.G.: Einfluss thermo-mechanisch gekoppelter Prozesse auf das Umwandlungsverhalten und die mechanischen Eigenschaften des niedriglegierten 51 CrV 4 Stahls. Dissertation, Universität Paderborn (2011)
69. Lambers, H.G., Tschumak, S., Maier, H., Canadinc, D.: Role of austenitization and pre-deformation on the kinetics of the isothermal bainitic transformation. *Metallurgical and Materials Transactions A*, **40**(6), 1355–1366, (2009)
70. Lambers, H.G., Tschumak, S., Maier, H., Canadinc, D.: Pre-deformation–transformation plasticity relationship during martensitic transformation. *Materials Science and Engineering: A*, **527**(3), 625–633, (2010)
71. Lambers, H.G., Tschumak, S., Maier, H.J., Canadinc, D.: Evolution of transformation plasticity during bainitic transformation. *International Journal of Materials Research*, **102**(9), 1152–1163, (2011)
72. Leblond, J.: Mathematical modelling of transformation plasticity in steels ii: coupling with strain hardening phenomena. *International journal of plasticity*, **5**(6), 573–591, (1989)
73. Leblond, J., Devaux, J.: A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effect of austenite grain size. *Acta Metallurgica*, **32**(1), 137–146, (1984)
74. Leblond, J., Devaux, J., Devaux, J.: Mathematical modelling of transformation plasticity in steels i: case of ideal-plastic phases. *International journal of plasticity*, **5**(6), 551–572, (1989)
75. Lee, Y.K.: Empirical formula of isothermal bainite start temperature of steels. *Journal of materials science letters*, **21**(16), 1253–1255, (2002)
76. Lemaitre, J., Chaboche, J.: *Mechanics of solid materials*, Cambridge University Press, Cambridge (1994)
77. Levitas, V.I., Ozsoy, I.B.: Micromechanical modeling of stress-induced phase transformations. part 1. thermodynamics and kinetics of coupled interface propagation and reorientation. *International Journal of Plasticity*, **25**(2), 239–280, (2009)
78. Levitas, V.I., Ozsoy, I.B.: Micromechanical modeling of stress-induced phase transformations. part 2. computational algorithms and examples. *International Journal of Plasticity*, **25**(3), 546–583, (2009)
79. Luenberger, D.G., Ye, Y.: *Linear and nonlinear programming*, 3. Auflage, Springer, New York (2008)
80. Luo, C., Liu, J.: Crystallography of lath martensite and lower bainite in alloy steels. *Materials Science and Engineering: A*, **438**, 149–152, (2006)
81. Luzginova, N., Zhao, L., Sietsma, J.: Bainite formation kinetics in high carbon alloyed steel. *Materials Science and Engineering: A*, **481**, 766–769, (2008)
82. Luzginova, N., Zhao, L., Wauthier, A., Sietsma, J.: The kinetics of the isothermal bainite formation in 1% C-1.5% Cr steel. In: *Materials Science Forum*, Band 500, 419–428. *Trans Tech Publ* (2005)
83. Magee, C.L., Paxton, H.W.: Transformation kinetics, microplasticity and aging of martensite in Fe-31 Ni. *Tech. rep.*, DTIC Document (1966)
84. Mahnken, R.: *Duale Verfahren für nichtlineare Optimierungsprobleme in der Strukturmechanik*. Dissertation, Universität Hannover (1992)
85. Mahnken, R.: Identification of material parameters for constitutive equations. *Encyclopedia of computational mechanics*, Eds. E. Stein, de Borst, Hughes, Wiley, (2004)
86. Mahnken, R.: Void growth in finite deformation elasto-plasticity due to hydrostatic stress states. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **194**(34), 3689–3709, (2005)
87. Mahnken, R., Schneidt, A.: A thermodynamic framework and numerical aspects for transformation-induced plasticity at large strains. *Archive of Applied Mechanics*, **80**(3), 229–253, (2010)
88. Mahnken, R., Schneidt, A., Antretter, T.: Macro modelling and homogenization for transformation induced plasticity of a low-alloy steel. *International Journal of Plasticity*, **25**(2), 183–204, (2009)

89. Mahnken, R., Schneidt, A., Tschumak, S., Maier, H.: On the simulation of austenite to bainite phase transformation. *Computational Materials Science*, **50**(6), 1823–1829, (2011)
90. Mahnken, R., Wilmanns, S.: A projected newton algorithm for simulation of multi-variant textured polycrystalline shape memory alloys. *Computational Materials Science*, **50**(9), 2535–2548, (2011)
91. Mahnken, R., Wolff, M., Cheng, C.: A multi-mechanism model for cutting simulations combining visco-plastic asymmetry and phase transformation. *International Journal of Solids and Structures*, **50**, 3045 – 3066, (2013)
92. Mahnken, R., Wolff, M., Schneidt, A., Böhm, M.: Multi-phase transformations at large strains–thermodynamic framework and simulation. *International Journal of Plasticity*, **39**, 1–26, (2012)
93. Marsden, J.E., Hughes, T.J.: *Mathematical foundations of elasticity*, Dover Publications, Dover (1994)
94. Matzenmiller, A., Bröcker, C., Gerlach, S.: Thermo–mechanisch gekoppelte Prozesssimulation zur gleichzeitigen Warm–/Kaltumformung einer Flanschswelle, 6. LS–DYNA Anwenderforum, Frankenthal, 2007
95. Michel, J.C., Suquet, P.: Nonuniform transformation field analysis. *International journal of solids and structures*, **40**(25), 6937–6955, (2003)
96. Miehe, C.: On the representation of prandtl-reuss tensors within the framework of multiplicative elastoplasticity. *International journal of plasticity*, **10**(6), 609–621, (1994)
97. Nagayama, K., Terasaki, T., Goto, S., Tanaka, K., Antretter, T., Fischer, F., Cailletaud, G., Azzouz, F.: Back stress evolution and iso-volume fraction lines in a Cr–Ni–Mo–Al–Ti maraging steel in the process of martensitic transformation. *Materials Science and Engineering: A*, **336**(1), 30–38, (2002)
98. Nagayama, K., Terasaki, T., Tanaka, K., Fischer, F., Antretter, T., Cailletaud, G., Azzouz, F.: Mechanical properties of a Cr–Ni–Mo–Al–Ti maraging steel in the process of martensitic transformation. *Materials Science and Engineering: A*, **308**(1), 25–37, (2001)
99. Nishiyama, Z.: X-ray investigation of the mechanism of the transformation from face centered cubic lattice to body centered cubic. *Sci. Rep. Tohoku Univ*, **23**, 637–664, (1934)
100. Nishiyama, Z.: *Martensitic transformation*, Academic Press, New York, San Francisco, London (1978)
101. Paar, U., Becker, H., Alsmann, M.: Press-hardened components from kassel-chances and challenges. In: *Proceedings of the 1st International Conference on Hot Sheet Metal Forming of High-Performance Steel, GRIPS’Sparkling World of Steel, Band 1* (2008)
102. Pallett, R., Lark, R.: The use of tailored blanks in the manufacture of construction components. *Journal of materials processing technology*, **117**(1), 249–254, (2001)
103. Pancholi, V., Krishnan, M., Samajdar, I., Yadav, V., Ballal, N.: Self-accommodation in the bainitic microstructure of ultra-high-strength steel. *Acta Materialia*, **56**(9), 2037–2050, (2008)
104. Papatriantafillou, I., Agoras, M., Aravas, N., Haidemenopoulos, G.: Constitutive modeling and finite element methods for TRIP steels. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **195**(37), 5094–5114, (2006)
105. Polizzotto, C.: A nonlocal strain gradient plasticity theory for finite deformations. *International Journal of Plasticity*, **25**(7), 1280–1300, (2009)
106. Praveen, G., Reddy, J.: Nonlinear transient thermoelastic analysis of functionally graded ceramic-metal plates. *International Journal of Solids and Structures*, **35**(33), 4457–4476, (1998)
107. Raghavan, V., Olson, G., Owen, W.: *Martensite, a tribute to morris cohen*. ASM International, Materials Park, OH, 197, (1992)
108. Raniecki, B., Bruhns, O.: Thermodynamic reference model for elastic-plastic solids undergoing phase transformations. *Archives of Mechanics*, **43**(2-3), 343–376, (1991)
109. Raßbach, S.: *Grundlegende Untersuchungen zum Umformverhalten von Gradientenwerkstoffen unter Anwendung von Druckumformverfahren*. Freiburger Forschungshefte-Reihe B-Metallurgie und Werkstofftechnik, **323**, (2002)
110. Rees, G., Bhadeshia, H.: Bainite transformation kinetics part 1 modified model. *Materials Science and Technology*, **8**(11), 985–993, (1992)
111. Rees, G., Bhadeshia, H.: Bainite transformation kinetics part 2 non-uniform distribution of carbon. *Materials Science and Technology*, **8**(11), 994–1003, (1992)
112. Rose, A., Rademacher, L.: *Bedeutung der Karbidauflösung für die Austenitisierung und das Umwandlungsverhalten von Werkzeugstählen*, Verlag Stahleisen, Düsseldorf (1957)
113. Rose, A., Strassburg, W.: *Kinetik der Austenitbildung unlegierter und niedriglegierter untereutktoidischer Stähle*, Verlag Stahleisen, Düsseldorf (1956)
114. Schulze, G., Bargel, H.J.: *Eisenwerkstoffe*. In: H.J. Bargel, G. Schulze (eds.) *Werkstoffkunde*, Springer-Lehrbuch, 175–307. Springer Berlin Heidelberg (2012)
115. Marotti de Sciarra, F.: Novel variational formulations for nonlocal plasticity. *International Journal of Plasticity*, **25**(2), 302–331, (2009)
116. Simo, J.: Algorithms for static and dynamic multiplicative plasticity that preserve the classical return mapping schemes of the infinitesimal theory. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **99**(1), 61–112, (1992)
117. Simo, J., Hughes, T.: *Computational Inelasticity*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1998)
118. Steinhoff, K., Maier, H.J., Biermann, D.: *Functionally graded materials in industrial mass production*, Verlag Wiss. Scripten, Auerbach (2009)
119. Steinhoff, K., Weidig, U., Scholtes, B., Zinn, W.: Innovative flexible metal forming processes based on hybrid thermo-mechanical interaction. *Steel research international*, **76**(2-3), 154–159, (2005)

120. Steven, W., Haynes, A.: The temperature of formation of martensite and bainite in low-alloy steels. *Journal of the Iron and Steel Institute*, **183**(8), 349–359, (1956)
121. Stringfellow, R., Parks, D., Olson, G.: A constitutive model for transformation plasticity accompanying strain-induced martensitic transformations in metastable austenitic steels. *Acta Metallurgica et Materialia*, **40**(7), 1703–1716, (1992)
122. Szczepanik, S.: Gradient materials on aluminium alloy basis obtained from powders by hot forming. *Inżynieria materiałowa*, **28**(3–4), 602–605, (2007)
123. Taleb, L., Petit, S.: New investigations on transformation induced plasticity and its interaction with classical plasticity. *International journal of plasticity*, **22**(1), 110–130, (2006)
124. Tamura, I., Wayman, C.: Martensitic transformations and mechanical effects. ASM International, Martensite(USA), 228–242, (1992)
125. Tanaka, K., Terasaki, T., Goto, S., Antretter, T., Fischer, F., Cailletaud, G.: Effect of back stress evolution due to martensitic transformation on iso-volume fraction lines in a Cr–Ni–Mo–Al–Ti maraging steel. *Materials Science and Engineering: A*, **341**(1), 189–196, (2003)
126. Taylor, G.I.: Plastic strains in metals. *Journal of the Institute of Metals*, **62**, 307–324, (1938)
127. Thamburaja, P., Anand, L.: Polycrystalline shape-memory materials: effect of crystallographic texture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **49**(4), 709–737, (2001)
128. Tjahjanto, D., Turteltaub, S., Suiker, A.: Crystallographically based model for transformation-induced plasticity in multiphase carbon steels. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, **19**(7), 399–422, (2008)
129. Tschumak, S.: Experimentelle Untersuchungen des beanspruchungsabhängigen Umwandlungsverhaltens und der Umwandlungsplastizität des Stahls 51CrV4 in Anlehnung an einen thermo-mechanisch gekoppelten Umformprozess. Dissertation, Universität Paderborn (2012)
130. Turteltaub, S., Suiker, A.: Transformation-induced plasticity in ferrous alloys. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **53**(8), 1747–1788, (2005)
131. Turteltaub, S., Suiker, A.: A multiscale thermomechanical model for cubic to tetragonal martensitic phase transformations. *International journal of solids and structures*, **43**(14), 4509–4545, (2006)
132. Uslu, M., Canadinc, D., Lambers, H., Tschumak, S., Maier, H.: Modeling the role of external stresses on the austenite-to-bainite phase transformation in 51CrV4 steel. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **19**(4), 045,007, (2011)
133. Vladimirov, I.N., Pietryga, M.P., Reese, S.: Anisotropic finite elastoplasticity with nonlinear kinematic and isotropic hardening and application to sheet metal forming. *International Journal of Plasticity*, **26**(5), 659–687, (2010)
134. Voyiadjis, G.Z., Deliktas, B.: Formulation of strain gradient plasticity with interface energy in a consistent thermodynamic framework. *International Journal of Plasticity*, **25**(10), 1997–2024, (2009)
135. Voyiadjis, G.Z., Pekmezi, G., Deliktas, B.: Nonlocal gradient-dependent modeling of plasticity with anisotropic hardening. *International Journal of Plasticity*, **26**(9), 1335–1356, (2010)
136. Voyiadjis, G.Z., Shojaei, A., Li, G.: A thermodynamic consistent damage and healing model for self healing materials. *International Journal of Plasticity*, **27**(7), 1025–1044, (2011)
137. Voyiadjis, G.Z., Shojaei, A., Li, G.: A generalized coupled viscoplastic–viscodamage–viscohealing theory for glassy polymers. *International Journal of Plasticity*, **28**(1), 21–45, (2012)
138. Wassermann, G.: Einfluss der alpha-gamma-Umwandlung eines irreversiblen Nickelstahls auf Kristallorientierung und Zugfestigkeit [Influence of the alpha-gamma transformation of an irreversible nickel steel on crystal orientation and tensile strength]. *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, **6**(8), 347–351, (1933)
139. Weber, G., Anand, L.: Finite deformation constitutive equations and a time integration procedure for isotropic, hyperelastic-viscoplastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **79**(2), 173–202, (1990)
140. Wechsler, M.S., Lieberman, D.S., Read, T.A.: On the theory of the formation of martensite. *AIMS Trans. J. Metals*, **197**, 1503–1515, (1953)
141. Weidig, U., Hubner, K., Steinhoff, K.: Bulk steel products with functionally graded properties produced by differential thermo-mechanical processing. *Steel research international*, **79**(1), 59–65, (2008)
142. Weidig, U., Saba, N., Steinhoff, K.: Massivumformprodukte mit funktional gradierten Eigenschaften durch eine differenzielle thermo-mechanische Prozessführung. *wt Werkstatttechnik online*, **97**, 745–752, (2007)
143. Weidig, U., Saba, N., Steinhoff, K.: Functional gradation by differential thermo-mechanical treatment. *International Journal of Microstructure and Materials Properties*, **4**(5), 649–663, (2009)
144. Wever, F., Rose, A., Orlich, J.: Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle, Band 3., Verlag Stahleisen, Düsseldorf (1973)
145. Wilmanns, S.: Phänomenologische und mikroskopische Modellierung von Formgedächtnislegierungen. Dissertation, Universität Paderborn (2010)
146. Wolff, M., Böhm, M., Dalgic, M., Löwisch, G., Lysenko, N., Rath, J.: Parameter identification for a TRIP model with backstress. *Computational materials science*, **37**(1), 37–41, (2006)
147. Wolff, M., Böhm, M., Helm, D.: Material behavior of steel—modeling of complex phenomena and thermodynamic consistency. *International Journal of Plasticity*, **24**(5), 746–774, (2008)
148. Wolff, M., Böhm, M., Mahnken, R., Suhr, B.: Implementation of an algorithm for general material behavior of steel taking interaction between plasticity and transformation-induced plasticity into account. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **87**(12), 1183–1206, (2011)

149. Wolff, M., Böhm, M., Suhr, B.: Comparison of different approaches to transformation-induced plasticity in steel. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, **40**(5-6), 454–459, (2009)
150. Wriggers, P.: *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (2001)
151. Zhang, M.X., Kelly, P.: Crystallography of carbide-free bainite in a hard bainitic steel. *Materials Science and Engineering: A*, **438**, 272–275, (2006)
152. Zhao, J.C., Notis, M.R.: Continuous cooling transformation kinetics versus isothermal transformation kinetics of steels: a phenomenological rationalization of experimental observations. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, **15**(4), 135–207, (1995)
153. Zienkiewicz, O., R.L., T.: *The finite element method*, 6. Auflage, Elsevier, Oxford (2005)