

Mikromechanische Simulation der Gefügebildung und der Eigenschaften einer Magnesia-Spinell Keramik

Dissertation

von

Dipl. Ing. Fasching Christoph

am Lehrstuhl für Gesteinshüttenkunde der Montanuniversität Leoben
zur Erlangung des Grades Doktor der montanistischen Wissenschaften

Danksagung

Eine wissenschaftliche Arbeit wie diese braucht eine große Anzahl von Unterstützern, um sie erfolgreich abschließen zu können. Daher möchte ich mich bei allen recht herzlich bedanken die mich auf diesem spannenden Weg begleitet haben.

Im Besonderen gilt mein Dank meinen Lehrern und Professoren die den Grundstein meines heutigen Wissens gelegt haben. Speziell möchte ich mich bei meinen Betreuern und meinen Kollegen vom Lehrstuhl für Gesteinshüttenkunde bedanken. Die Diskussionen und Anregungen halfen mir tiefer in die Materie einzutauchen und die komplexen Vorgänge besser zu verstehen.

Außerdem!

...bedanke ich mich sehr herzlich bei meinen Eltern Christine und Andreas und bei meiner Schwester Michaela für ihre Unterstützung. Ohne den Rückhalt und das stetig entgegengebrachte Vertrauen wären die gesamte Ausbildung und diese Arbeit nicht möglich gewesen. Dennoch muss ich anmerken, ihr wusstet was auf euch zukommt! Christine: „Was willst du mal werden?“ Ich (6): „Erfinder, dann liege ich den ganzen Tag in der Hängematte denk nach und erfinde was!“

Ein ganz besonderer Dank gilt meiner Frau der ich diese Arbeit widmen möchte. Dein stetiger Rückhalt und deine grenzenlose Ehrlichkeit halfen mir in schwierigen Zeiten weiter zu machen. Deine kritischen Fragen, die mich hin und wieder in den Wahnsinn treiben, zeigen mir, dass es auch andere Sichtweisen gibt. Ohne dich wäre ich nicht komplett und das Leben nur halb so spannend, ich liebe dich!

Zu guter Letzt:

Der österreichischen Bundesregierung (insbesondere dem Bundesministerium für Verkehr, Innovation und Technologie und dem Bundesministerium für Wissenschaft, Forschung und Wirtschaft) vertreten durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft mbH (FFG), und den Ländern Steiermark und Tirol, vertreten durch die Steirische Wirtschaftsförderungsgesellschaft mbH (SFG) sowie die Standortagentur Tirol, wird für die Förderung im Rahmen des COMET Förderprogramms herzlich gedankt.

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt und mich auch selbst sonst keiner unerlaubten Hilfsmittel bedient habe.

Abstract

In high temperature processes, such as the steel or cement industry, refractory materials are required to withstand chemical, thermal and mechanical loads. A rapid change in temperature, a so-called thermal shock, often leads to tensile stresses that cause crack initiation and / or further crack propagation. Consequently the requirements of the used materials with respect to temperature resistance, resistance against crack initiation and propagation have to be fulfilled in the best possible way. These properties can be described by figures of merit that enable a comparison between various refractory ceramics. An important representative is the brittleness number B and the characteristic length l_{ch} of the material. These figures of merit are dependent on material's strength, Young's Modulus and specific fracture energy.

In the present work, the brittleness reducing property of micro-cracks in a magnesia spinel structure is investigated. For this purpose, calculations are performed to simulate the formation of these cracks during the production process. The finite element model describes the crack initiation in a microstructure due to unequal coefficient of thermal expansion between magnesia and spinel. The resulting micro-crack network causes a reduction in strength, an increase in specific fracture energy and thereby a reduced brittleness. Compared with the starting materials properties, the resistance against crack growth and the thermal shock resistance are increased.

Another part focuses on the correct representation of the material microstructure by a representative volume element in the FE analysis. Several aspects and their influence, among others the spinel content of the model, are investigated. Also the influence of different thermal expansion coefficients on the resulting mechanical properties is examined. By varying the contact properties between the two materials and by the addition of a third material, the importance of the contact can be shown.

Kurzfassung

In Hochtemperaturprozessen, wie etwa der Stahl- oder Zementindustrie, werden feuerfeste Materialien benötigt, die chemischen, thermischen und mechanischen Belastungen standhalten müssen. Eine rasche Temperaturänderung, ein sogenannter Thermoshock, ruft in einer feuerfesten Ausmauerung Spannungen hervor, die zu einer Rissinitiation bzw. Rissausbreitung führen. Daher müssen die eingesetzten Materialien neben der Temperaturbeständigkeit auch einen größtmöglichen Widerstand gegen Rissentstehung und –ausbreitung aufweisen. Diese Eigenschaften können durch Kennwerte beschrieben werden, die einen Vergleich zwischen verschiedenen feuerfesten Keramiken ermöglichen. Ein wichtiger Vertreter ist die Sprödigkeitskennzahl B bzw. die charakteristische Länge l_{ch} des Materials. Diese Kennzahlen sind von der Zugfestigkeit, dem E-Modul und einer spezifischen Bruchenergie abhängig.

In der vorliegenden Arbeit wird die sprödigkeitsreduzierende Eigenschaft von Mikrorissen in einem Magnesia-Spinell Gefüge untersucht. Zu diesem Zweck werden Simulationen durchgeführt die die Entstehung dieser Risse während des Produktionsprozesses nachbilden. Das verwendete finite Elemente Modell beschreibt dabei die Rissinitiierung in einem Gefügebrauchstück aufgrund ungleicher thermischer Wärmeausdehnungskoeffizienten von Magnesia und Spinell. Das so entstehende Mikrorissnetzwerk führt zu einer Herabsetzung der Festigkeit, zu einer Erhöhung der spezifischen Bruchenergie und dadurch zu einer geringeren Sprödigkeit. Im Vergleich mit den Ausgangsmaterialien erhöht sich der Widerstand gegen Risswachstum bzw. verbessert sich die Temperaturwechselbeständigkeit.

Ein weiterer Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der Erstellung und Darstellung des Materials als FE-Gefüge durch ein repräsentatives Volumenelement. In Folge werden verschiedene Aspekte, wie z.B. der Spinell-Gehalt, hinsichtlich deren Auswirkungen betrachtet. Unter anderem wird auch der Einfluss unterschiedlicher Wärmeausdehnungskoeffizienten auf die resultierenden mechanischen Eigenschaften untersucht. Durch die Variation der Kontakteigenschaften zwischen den beiden Materialien und durch die Erweiterung um ein drittes Material, wird gezeigt, dass der Kontakteigenschaften von grundlegender Bedeutung sind.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|-------|--|----|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Problemstellung | 2 |
| 3 | Stand der Technik | 3 |
| 3.1 | Thermo-mechanische Kennwerte | 3 |
| 3.2 | Rohstoffe und Eigenschaften der Materialien | 6 |
| 3.3 | Methoden zur Berechnung der Eigenschaften eines heterogenen Gefüges | 7 |
| 3.3.1 | Homogenisierung | 7 |
| 3.3.2 | Mikromechanische Simulation eines heterogenen Materials | 8 |
| 4 | Modell zur Simulation eines M/MA-Spinell Gefüges | 13 |
| 4.1 | Darstellung eines heterogenen Gefüges mittels eines repräsentativen Volumenelements | 13 |
| 4.2 | Erstellung des FE-Gefüge-Modells | 16 |
| 4.2.1 | Kornverteilung des Gefüges | 16 |
| 4.2.2 | Erstellung und Platzierung der Körner im Modell | 19 |
| 4.2.3 | Erstellung von polygonförmigen Körnern | 25 |
| 4.2.4 | Kontaktbeschreibung im FE-Gefüge | 26 |
| 4.3 | Angewandtes Materialmodell | 28 |
| 5 | FE-Simulation der Mikro-Rissbildung in einem M/MA-Spinell Gefüge | 31 |
| 5.1 | Erstellen des Modells | 31 |
| 5.1.1 | Variable Parameter des Scripts | 31 |
| 5.1.2 | Fixe Parameter des Scripts | 32 |
| 5.1.3 | Diskretisierung, Erstellen der PRB und Zuweisen der Materialeigenschaften | 34 |
| 5.1.4 | Rahmen- und Endbedingungen der Simulation | 35 |
| 5.2 | Kriterium des Bruchs und Auswertung des Zugversuchs | 36 |
| 5.3 | Simulationsbeispiel | 37 |
| 5.3.1 | Typische Spannungsverläufe in Elementen der Matrix | 37 |
| 5.3.2 | Energiebetrachtung für Kühlung und Zugversuch | 38 |
| 6 | Auswirkung ausgewählter Parameter auf Simulationsergebnisse | 41 |
| 6.1 | Größenunabhängigkeit des RVE und Einfluss der Vernetzung | 41 |
| 6.1.1 | Einfluss der Modellgröße | 41 |
| 6.1.2 | Einfluss der Kornplatzierung im Modell | 42 |
| 6.1.3 | Einfluss der FE-Netz-Feinheit | 43 |
| 6.2 | Haupteinflussfaktoren auf die Rissbildung | 45 |
| 6.2.1 | Einfluss der Differenz der thermischen Ausdehnungskoeffizienten | 45 |
| 6.2.2 | Einfluss der spezifischen Bruchenergie $G_{f,M}$ der Matrix | 48 |
| 6.2.3 | Einfluss der Kontakteigenschaften | 52 |

| | | |
|-------|--|----|
| 6.2.4 | Einfluss des Spinell-Gehalts..... | 60 |
| 6.2.5 | Einfluss einer dritten Gefügekomponente..... | 63 |
| 6.2.6 | Einfluss der Kornform und der Korngröße..... | 70 |
| 7 | Zusammenfassung und Interpretation der Ergebnisse..... | 75 |
| 8 | Resümee und Ausblick..... | 77 |
| 9 | Abbildungsverzeichnis..... | 78 |
| 10 | Tabellenverzeichnis..... | 81 |
| 11 | Literaturnachweis..... | 82 |
| | Appendix A..... | a |
| | Appendix B..... | b |

1 Einleitung

Feuerfestwerkstoffe kommen in praktisch allen industriellen Hochtemperaturprozessen zur Anwendung. Sie bilden eine wichtige Barriere zwischen Materialien, die auf über 1500 °C erhitzt werden, und der Umgebung. Als Beispiel sei hier die Zementherstellung genannt. Die feuerfeste Auskleidung des Drehrohrofens muss nicht nur den zyklisch wechselnden mechanischen Belastungen durch das Drehen standhalten, sondern auch den thermo-mechanischen Spannungen hervorgerufen durch die thermische Dehnung. Es ist daher von grundlegender Notwendigkeit geeignete Materialien einzusetzen, die den vorliegenden Ansprüchen genügen. Ein Versagen der feuerfesten Ausmauerung kann nicht nur fatale wirtschaftliche Konsequenzen zur Folge haben, sondern stellt auch ein Risiko für den Menschen dar. Das Material muss daher neben der chemischen Beständigkeit gegenüber den vorliegenden Stoffen auch den mechanischen Belastungen widerstehen um eine langzeitige Integrität aufzuweisen.

Ähnlich Betonen können feuerfeste Materialien hohen Druckbelastungen widerstehen, Zugbelastungen sind jedoch weitaus kritischer. Im Gegensatz zu Betonbauteilen kann dieser Nachteil in Feuerfestmaterialien nicht durch eine Eisenbewährung vermieden werden. Eine Verminderung der Belastung kann jedoch durch konstruktive Maßnahmen erfolgen.

Es gibt zwei grundlegende Ansätze ein mechanisches Versagen, hervorgerufen durch einen Temperaturgradienten, zu verhindern. Der erste Ansatz beschäftigt sich mit dem Widerstand gegen die Rissinitiierung. Der zweite Ansatz geht davon aus, dass eine Rissinitiierung unvermeidlich ist und dem Riss so viel Widerstand entgegengesetzt wird, dass die Rissverlängerung nicht zu einem Versagen führt. Die beiden Ansätze lassen sich eindrucksvoll an Werkstoffen aus Magnesia (MgO) und einem Magnesia/ Magnesia-Alumina-Spinell ($MgAl_2O_4$) Gemisch zeigen.

Magnesia Produkte weisen im Vergleich mit Magnesia/ Magnesia-Alumina-Spinell Produkten (M/MA-Spinell) eine höhere (Zug-)Festigkeit, und daher im Sinne des ersten Ansatzes einen größeren Initiierungswiderstand auf. MA-Spinell haltige Magnesia-Produkte hingegen besitzen, trotz einer relativ frühen Rissinitiierung auch bei folgenden wechselnden thermischen Belastungen ein ausreichendes Maß an struktureller Integrität. Untersuchungen von M/MA-Spinell Gefügen zeigten, dass Mikro-Risse im Gefüge die Ursache für dieses Verhalten reduzierter Sprödigkeit sind [1] [2] [3] [4]. Die beobachteten Mikro-Risse entstehen während der Produktion durch unterschiedliche Wärmeausdehnungskoeffizienten der verwendeten Gefügebestandteile.

2 Problemstellung

In Hochtemperaturprozessen mit wechselnden thermo-mechanischen Belastungen werden oft MA-Spinell haltige Magnesia Materialien eingesetzt. Die hervorragende Temperaturwechselbeständigkeit dieser Produkte wurde früh erkannt und in zahlreichen Arbeiten untersucht. Aufgrund einer Vielzahl von Einflussfaktoren ist es nicht möglich anhand einer einfachen Berechnung wie z. B. einer Mischungsregel, die thermo-mechanischen Kennwerte aufgrund der Zusammensetzung zu berechnen. Zurzeit gibt es nur wenige Ansätze, die eine allgemeine Ableitung der mechanischen Eigenschaften vom Spinell-Gehalt ermöglichen [5]. Fraktographische Untersuchungen des Materials zeigen ein Netzwerk von Mikro-Rissen im Gefüge, das während des Produktionsprozesses entsteht. Aus den Untersuchungen geht hervor, dass diese Mikro-Risse ausschlaggebend für die Verminderung der mechanischen Eigenschaften sind, jedoch auch zu der gewollten besseren Temperaturwechselbeständigkeit gegenüber reinen MgO Produkten führen. Ziel dieser Arbeit ist es die Entstehung des Rissnetzwerkes in einem Magnesia-MA Spinell Werkstoff während des Produktionsprozesses mittels Finite Elemente Simulation zu beschreiben.

3 Stand der Technik

Feuerfestmaterialien werden in verschiedenen Hochtemperaturprozessen eingesetzt und ermöglichen zum Beispiel die Herstellung von Eisen, Stahl, Aluminium, Zement oder Glas. Dabei sind sie wechselnden Temperaturen und thermo-mechanischen Belastungen ausgesetzt. Hinsichtlich dieser Belastungen wurden Kennzahlen eingeführt, die erlauben die feuerfesten Materialien zu beurteilen und zu vergleichen. Des Weiteren liefern diese Kennzahlen Aussagen über das zu erwartende Verhalten der Werkstoffe während ihres Einsatzes. In weiterer Folge werden einige wichtige Kennzahlen beschrieben die neben der Zugfestigkeit und dem E -Modul auch vom thermischen Ausdehnungskoeffizienten und der Wärmeleitfähigkeit abhängig sind. Sie helfen unter anderem, das Grundverständnis zwischen der theoretischen mechanischen Belastbarkeit und der daraus resultierenden thermischen möglichen Belastung zu verbessern.

3.1 Thermo-mechanische Kennwerte

Erfährt ein Körper eine Temperaturänderung, entstehen aufgrund eines Temperaturgradienten thermische Spannungen σ_{th} . Für die Beurteilung der mechanischen Belastung, hervorgerufen durch eine Temperaturänderung, ist der thermische Ausdehnungskoeffizient α des Materials und der E -Modul von Bedeutung. Im Falle einer eindimensionalen Betrachtung eines bei der Temperatur T_1 eingespannten Stabs lassen sich die entwickelten Spannungen wie folgt berechnen:

$$\sigma_{th} = E \cdot \varepsilon_{th} = E \cdot \alpha \cdot (T_1 - T_2) \quad (1)$$

Die thermo-mechanische Spannung σ_{th} ist das Produkt aus dem Elastizitätsmodul des Materials und der thermischen Dehnung ε_{th} . Dabei wird zwischen Zugspannungen bei $T_1 > T_2$ und Druckspannungen bei $T_1 < T_2$ unterschieden. Die temperaturabhängige Dehnung ε_{th} ergibt sich aus dem Produkt aus α und der Temperaturänderung $T_1 - T_2$. Die kritische Temperaturänderung ist erreicht, wenn die Spannung der Zugfestigkeit des Materials entspricht $\sigma_{th} = \sigma_t$.

Rasche Temperaturänderungen des Materials werden als Thermoschock bezeichnet. Ein Beispiel ist das Eintauchen eines heißen Objekts in kaltes Wasser. In diesem Fall hindert das heiße Innere des Objekts das Schrumpfen des rasch abgekühlten Äußeren. An der kühleren Materialoberfläche entstehen Zugspannungen die zum Versagen führen können.

Die Auswirkung einer Temperaturänderung auf ein feuerfestes Material ist von vielen Faktoren wie z.B. der Art des Temperaturschocks oder der Anzahl der Temperaturwechsel abhängig. Nicht immer führt ein Thermoschock zu einer Rissentwicklung. In diesem Zusammenhang ist der durch Kingery [6] postulierte R -Wert zu nennen:

$$R = \frac{\sigma_t}{E \cdot \alpha} \cdot (1 - \nu) \quad (2)$$

Gleichung (2) gilt für eine symmetrisch gekühlte (oder beheizte) unendlich ausgedehnte Platte und einer großer Biot Zahl, z.B. beim Eintauchen einer Platte in Wasser. Dabei ist σ_t die Zugfestigkeit, E der E -Modul und ν die Querkontraktionszahl des Materials. Der R -Wert beschreibt für den oben genannten Fall eines „cold shocks“ die kritische Temperaturdifferenz zwischen der mittleren Temperatur T_m und der Temperatur T_a an der Außenseite der Platte, $R = (T_m - T_a)$. Für den Fall eines „hot shocks“ wird die Kerntemperatur T_i im inneren der Platte benötigt.

Solange diese Temperaturdifferenz nicht überschritten wird, erfährt das Material keine Rissinitiation durch den Temperaturwechsel. Im Falle einer kleinen Biot Zahl kann ein weiterer Thermoschockwiderstands-Parameter R' durch die Erweiterung von R durch den Wärmeleitfähigkeit λ herangezogen werden:

$$R' = \lambda \cdot R \quad (3)$$

Für gebrannte Magnesia [7] ergibt sich z.B. ein theoretischer R -Wert von $R = 6,7 \text{ }^\circ\text{C}$. In der Praxis müsste die Magnesia langsam erwärmt werden, um diesen theoretischen Temperaturunterschied nicht zu überschreiten. Durch Aufheizrampen und langsame Vorwärmung von z.B. Stahlpfannen wird versucht den Temperaturunterschied beim Kontakt mit flüssigem Metall gering zu halten und eine Rissinitiation zu verhindern. In vielen Fällen kann dies aufgrund der Prozessführung jedoch nicht vermieden werden. Entstandene Risse führen aber nicht zwingend zu einer Verminderung der Haltbarkeit, wenn sie im Vergleich zum Bauteil klein bleiben. Es ist daher wichtig, den Riss an seiner Verlängerung zu hindern. Ein Kennwert, der den Widerstand gegen ein weiteres Risswachstum aufgrund eines Thermoschocks beschreibt, wurde von Hasselman [8] [9] wie folgt vorgeschlagen:

$$R'''' = \frac{\gamma \cdot E}{\sigma_t^2} \quad (4)$$

Der *thermal shock damage resistance parameter* R'''' ist vom E -Modul, der spezifischen Bruchflächenenergie γ und der Zugfestigkeit σ_t des Materials abhängig. Je größer der *thermal shock damage resistance parameter* ist, desto größer ist der Widerstand gegen eine Rissverlängerung.

Aus Gleichung (4) ist der bedeutende Einfluss der Materialfestigkeit σ_t ersichtlich. Bei gleichbleibendem γ bewirkt eine Abnahme von σ_t einen größeren R'''' Wert. Im Gegensatz dazu verringern sich nach Gleichung (2) der Rissinitiationswiderstand und die mechanische Belastbarkeit mit zunehmender Materialfestigkeit. Die beiden Kennwerte R und R'''' stehen sich dabei konkurrierend gegenüber und eine Steigerung des Widerstands gegen eine Rissverlängerung bei gleichbleibenden Widerstand gegen Rissinitiation und E -Modul ist nur durch eine höhere spezifische Bruchflächenenergie des Materials möglich.

Beispiele für unterschiedliche Feuerfestmaterialien und die beschriebenen thermo-mechanischen Kennwerte sind in Tabelle 1 angegeben. Die Festigkeit σ_{NT} der Materialien wurde mit Hilfe eines *Keilspalttest* bestimmt [10] [11].

Tabelle 1: Auszug aus den Ergebnissen einer fraktographischen Untersuchung unterschiedlicher feuerfester Materialien [12]

| Material | σ_{NT} [MPa] | E [GPa] | G_f [Nm ⁻¹] | l_{ch} [mm] | R [°C] | R'''' [mm] |
|--|------------------------|--------------|------------------------------|------------------|-------------|-----------------|
| gebrannte Magnesia 97 gew% | 9,97 | 110 | 168 | 186 | 6,7 | 93 |
| gebrannte M/MA-Spinell 10 gew% Al ₂ O ₃ | 3,91 | 33,8 | 147 | 325 | 8,5 | 126,5 |
| gebrannte Alumina 99,3 gew% | 7,85 | 88,1 | 184 | 263 | 11,0 | 131,5 |

Der gebrannte Magnesia Stein zeigt im Vergleich zum M/MA-Spinell Stein bei einer höheren Festigkeit den erwarteten geringeren R'''' Wert. Bereits durch die Beimengung von 10 gew % Al₂O₃ zu Magnesia erfolgt eine erhebliche Veränderung der Materialeigenschaften.

Bei nahezu gleichbleibender spezifischer Bruchenergie G_f haben sich der E -Modul und die Festigkeit mehr als halbiert. In einer Arbeit von Pop et al. [4] wurde der Einfluss von 15 % Spinell in einem ähnlichen Ausmaß nachgewiesen.

Spröde Materialien wie z.B. Glas versagen oftmals durch ein instabiles Risswachstum. Duktile Materialien wie z.B. Metalle, zeigen hingegen nach der Überschreitung der Steckgrenze eine irreversible Dehnung, die vor dem endgültigen Versagen beobachtbar ist. Die Sprödigkeit eines Materials ist durch die Sprödigkeitskennzahl B angegeben [13] [14]. Diese Kennzahl beruht auf dem Verhältnis zwischen der bis zur Rissinitiierung benötigten elastischen Energie E_{el} und der Energie für die Bildung der Rissfläche bzw. für die Trennung der Probe in zwei Teile, E_{WOF} :

$$B \sim \frac{E_{el}}{E_{WOF}} \quad (5)$$

Durch eine Belastung wie z.B. eine Verbiegung eines Stabs erhöht sich die elastisch eingebrachte Energie im Stab. Erreicht die Belastung die Materialfestigkeit wird ein Riss initiiert. Für die Art des Risswachstums ist die benötigte Bruchenergie E_{WOF} von Bedeutung. Ist die Abnahme der elastisch gespeicherten Energie mit zunehmender Risslänge größer als die benötigte Bruchenergie, erfolgt ein instabiles Risswachstum. Diese Rissausbreitungsart wird durch eine Sprödigkeitszahl $B > 2$ gekennzeichnet. Aus der Herleitung der Gleichung (5) für einen Stab ist ersichtlich, dass B von dessen Länge l abhängig ist:

$$B = \frac{\sigma_t^2 \cdot l}{G_f \cdot E} \quad (6)$$

Anhand zweier unterschiedlich großer Stäbe aus demselben Material kann sowohl ein stabiler (kleiner Stab, $B < 2$) als auch ein instabiler (großer Stab, $B > 2$) Riss produziert werden¹. Ein weiteres Maß, das für die Beurteilung der Materialsprödigkeit herangezogen werden kann, ist die charakteristische Länge. Dieser Kennwert hat den Vorteil probengrößenunabhängig zu sein. Diese charakteristische Länge l_{ch} nach Hillerborg [15] ist vergleichbar mit dem Parameter R'''' :

$$l_{ch} = \frac{G_f \cdot E}{\sigma_{t,max}^2} = 2 \cdot R'''' \quad (7)$$

Je kleiner l_{ch} ist, desto eher neigt das Material zu einem spröden Versagen. Die beiden Kennwerte für die Sprödigkeit verhalten sich invers proportional zu einander und können wie folgt miteinander in Verbindung gebracht werden:

$$l_{ch} = \frac{l}{B} \quad (8)$$

Feuerfeste Baustoffe, bei denen eine Rissinitiierung nicht verhindert werden kann, sollten daher eine möglichst große charakteristische Länge aufweisen.

¹ Voraussetzung ist eine „steife“ Prüfmaschine die wenig Energie speichert

3.2 Rohstoffe und Eigenschaften der Materialien

Diese Arbeit beschäftigt sich mit Feuerfestkeramiken aus einem Gemisch aus Magnesia und MA-Spinell. Die Ausgangsprodukte des Materials sind Magnesiumoxid und Magnesia-Alumina-Spinell, die hier kurz beschrieben werden.

Magnesiumoxid (MgO)

Der Mineralname für Magnesiumoxid ist Periklas, in der Feuerfesttechnik wird MgO als Magnesia bezeichnet. Periklas kommt in der Natur selten in seiner Reinform vor. Die Gewinnung kann z.B. durch das Kalzinieren von natürlich vorkommendem Magnesit ($MgCO_3$) bei ca. 900 °C erfolgen:



Weitere synthetische Grundstoffe sind Seawater Magnesia und Brine Magnesia. Die dabei zunächst gewonnene kaustische Magnesia MgO wird in Schacht- oder Drehrohröfen zu Sintermagnesia (1800 °C – 2200 °C) oder durch Elektroschmelze zu Schmelzmagnesia (> 2800 °C) weiterverarbeitet. Die Eigenschaften der Magnesia sind abhängig vom Produktionsweg und eventuellen Verunreinigungen, wie z.B. Eisen (Fe). Mit einem Schmelzpunkt von über 2800 °C [16] ist reine Magnesia ein bedeutender Rohstoff für feuerfeste Materialien in Hochtemperaturprozessen.

Spinell ($MgAl_2O_4$):

Im Folgenden bezeichnet „*Spinell*“ den Magnesium-Alumina-Spinell ($MgAl_2O_4$). Der Rohstoff Spinell wird synthetisch aus einem Gemenge von ca. 66 % - 80 % Tonerde (Al_2O_3) und 21 % - 33 % Magnesia zu Sinter- oder Schmelzspinell verarbeitet. Die stöchiometrische Zusammensetzung des Spinells von 71,8 gew% Al_2O_3 und 28,2 gew% MgO hat eine Schmelztemperatur von 2135 °C. Spinell wird hauptsächlich als Rohstoff für die Erzeugung von Magnesia-Spinell-Produkten verwendet.

Magnesia/ Magnesia-Alumina-Spinell (M/MA-Spinell):

Die Herstellung von Magnesia/ Magnesia-Alumina-Spinell (M/MA-Spinell) Produkten erfolgt durch den Brand einer Mischung aus Magnesia und Spinell bzw. Tonerde (in-situ) zwischen 1500 °C und 1700 °C [17] [18]. Bei der in-situ Herstellung erfolgt die Spinellbildung während des Brennprozesses. Je nach Anwendungseinsatz kann der Spinellgehalt eines M/MA-Spinell Produkts stark variieren.

Durch den Brand erhält der M/MA-Spinell seine hohe Temperaturwechselbeständigkeit die auch bei Magnesia-Chromit Produkten beobachtet wird. Aufgrund der potentiellen Umweltgefährlichkeit durch das enthaltene Chrom, gelten diese Produkte nach ihrem Einsatz als problematisch. In vielen Bereichen gelten daher M/MA-Spinell Produkte als Alternative, wie z.B. im Zementdrehrohr. In einem direkten Vergleich konnte eine längere Lebensdauer einer M/MA-Spinell Zustellung gegenüber einer Zustellung mit chromhaltigen Produkten in einem Zementdrehrohr gemessen werden [19] [20].

Wie bereits erwähnt, besitzt das M/MA-Spinell Material eine relativ gute Temperaturwechselbeständigkeit, das drückt sich zum Beispiel in einem hohen R'''' Wert aus. Dieser Sachverhalt und andere Eigenschaften wurden anhand eines Materials mit relativ feinem Spinell in vielen Arbeiten von Aksel et al. untersucht [1] [17] [18] [21] [22] [23]. Fraktographische Untersuchungen zeigten Mikro-Risse im M/MA-Spinell die hauptsächlich an den Korngrenzen verliefen [1] [2].

Diese Arbeiten beschreiben einen Zusammenhang zwischen den Mikro-Rissen im Gefüge und der Materialfestigkeit. Eine erweiterte fraktographische Beobachtung durch Harmuth et al. bestätigt die zuvor beobachteten Ergebnisse und zeigt eine Verbindung zwischen dem Risspfad und der Sprödigkeit von verschiedenen Feuerfestmaterialien [2] [7] [12] [24] [25]. In den Arbeiten von Grasset-Bourdel et al. wurde versucht die Auswirkung der Mikro-Risse in homogener Form zu berücksichtigen und die erwähnten Eigenschaften mit einer thermischen Schädigungsvariablen D_{th} zu beschreiben [3] [26] [27]. Diesem Ansatz zu folge berechnet sich D_{th} aus einem gemessenen E -Modul und dem Modell von Hashin and Strikman. Dieses Modell ist abhängig vom Spinell Gehalt und dem E -Modul der Materialien [28] [29].

3.3 Methoden zur Berechnung der Eigenschaften eines heterogenen Gefüges

Im Falle von grobkeramischen heterogenen Gefügen gibt es zwei wesentliche Herangehensweisen das Verhalten unter verschiedenen Belastungen (mechanisch, thermisch, chemisch, ...) zu beschreiben. Einerseits besteht die Möglichkeit, das heterogene Gefüge durch ein äquivalentes homogenes Material zu ersetzen, andererseits können die Wechselwirkungen der Heterogenität bei den Berechnungen berücksichtigt werden. Der zweitgenannte Ansatz ist meist aufgrund seiner Komplexität und der Vielzahl an Zusammenhängen schwieriger zu realisieren und rechenintensiver.

3.3.1 Homogenisierung

Das grundlegende Bestreben der Homogenisierung liegt darin, ein heterogenes Material durch ein äquivalentes homogenes zu ersetzen. Dabei steht die Reduktion der Komplexität bei gleichzeitigem Erhalt der z.B. anisotropen oder nicht-linearen Eigenschaften im Vordergrund. Schematisch wird die Homogenisierung eines Materials in Abbildung 1 gezeigt.

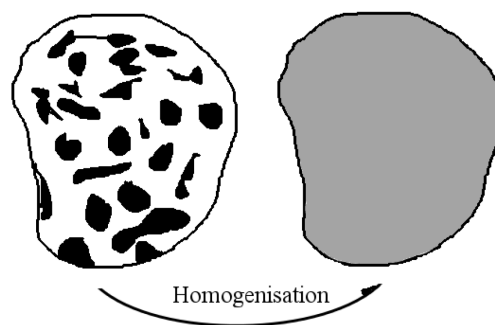


Abbildung 1: Homogenisierung eines heterogenen Objekts

Die Homogenisierung ist größenunabhängig und kann auf jede beliebige Größenordnung angewandt werden. Als Beispiel sei hier eine Wand mit einer Abmessung von mehreren Metern genannt. Für eine Berechnung der Traglast kann der Aufbau aus Ziegeln mit Abmessungen im Zentimeterbereich vernachlässigt werden. Im Falle eines Gefüges gibt es mehrere Größenordnungsbereiche, die homogenisiert werden können. Bereits bei einer Nichtberücksichtigung von z.B. Körnern kleiner als 1 μm in Metallen, oder millimetergroße Objekten in Beton wird von einer Homogenisierung gesprochen. Durch die Homogenisierung können Informationen über z.B. unterschiedliche Stoffe, Poren, sonstige Einschlüsse, Mikro-Risse oder ähnlichem verloren gehen. Es ist daher abzuwägen, welche Informationen für eine weitere Beschreibung unbedingt erforderlich sind.

Frühe Arbeiten, die in einer umfassenden Übersicht von Hashin [29] präsentiert werden, beschäftigen sich mit der Berechnung der Eigenschaften heterogener Materialien ohne Computerunterstützung. Zu diesen Modellen zählen unter anderem

- der Energieansatz von Hashin und Strikman [28] [29], der die maximale obere und minimale untere Grenze eines äquivalenten Zwei-Komponenten Materials angibt,
- das Modell nach Mori und Tanaka (MT) [30] [31] [32], das die Interaktion zwischen den Einschlüssen und deren Volumenanteil in der Matrix berücksichtigt und
- das viel untersuchte Generalized Self Consistent Scheme (GSCS, GSCM) [33] [34] [35] [36] [37] bzw. das ähnliche Self Consistent Scheme (SCS) nach Hill [38] [39] [40].

Ein weiterer Überblick der genannten Modelle wird von Christensen [41] oder Kari [42] gegeben.

Hervorzuheben ist der Energieansatz von Hashin und Strikman. Die obere und untere Grenze dieser Berechnung dient oftmals als Validierung anderer Modelle auf ihre Richtigkeit [28] [43]. Sie erweist sich jedoch nicht immer als aussagekräftig, da sie von Idealzuständen ausgeht. Am Beispiel von Beton kann gezeigt werden, dass die berechneten Eigenschaften von tatsächlichen Werten deutlich abweichen [44].

Das GSCS ist eine inverse Berechnung der isotropen Eigenschaften einer Materialmischung. Die Annahme dieser Methode ist, dass zwei Komponenten in der eigenen Mischung eingebettet sind. Durch eine iterative Berechnung erfolgt die Eigenschaftsbestimmung der noch unbekanntem Mischung. Diese Methode wurde zum Beispiel verwendet um die thermomechanischen Eigenschaften von Alumina-Karbon-Feuerfestmaterialien [45] zu berechnen. Durch eine Modifikation ist es möglich mehrere aufeinanderfolgende unbekanntem Materialschichten zu berücksichtigen. Dabei ergeben sich Unklarheiten über die Wahl der Anzahl, Eigenschaften und Dimensionen der unbekanntem Schichten [35] [46] [47] [48].

Für linear-elastische Materialien liefern alle genannten Methoden realitätsnahe Ergebnisse. Bei einem nicht-linearem Verhalten, wie es zum Beispiel ein M/MA-Spinell Material zeigt, versagen die Berechnungen und eine numerische FE-Simulation bietet eine vielversprechende Alternative [42].

3.3.2 Mikromechanische Simulation eines heterogenen Materials

Die zweite Methode beschäftigt sich daher mit der detaillierten Betrachtung des Materials und berücksichtigt die Heterogenität und dessen Einfluss auf verschiedene Belastungen. In weiterer Folge gibt es verschiedene Möglichkeiten einen bzw. mehrere Risse und deren Entwicklung und Verlauf im Gefüge darzustellen. Ein Konzept ist die linear elastische Bruchmechanik (LEBM) basierend auf Irwin [49]. Der Spannungszustand in der Nähe der Rissspitze wird dabei durch den Spannungsintensitätsfaktor K_I beschrieben. Mit diesem Konzept kann die Bauteilsicherheit beurteilt werden. Solange ein kritischer Spannungsintensitätsfaktor K_{IC} nicht überschritten wird, $K_I \leq K_{IC}$, erfolgt keine Rissverlängerung. Eine Erweiterung der LEBM basiert auf einer Energiebetrachtung nach Griffith [50]. Ein Riss breitet sich aus, wenn die risstreibende Kraft G größer als die Risswiderstandskraft R ist, $G \geq R$. Üblicherweise betrachtet die LEBM nur einen Riss in einem homogenen Material. Ein weiterer Nachteil der linear elastischen Bruchmechanik ist die Voraussetzung eines bestehenden Risses. Dieser sollte so spitz wie möglich sein und eine relativ kleine Prozesszone vor der Spitze aufweisen [51]. Die Prozesszone ist dabei der Bereich in der Energie für z.B. die Rissoberflächenschaffung oder eine plastische Verformung konsumiert wird. Mit zunehmender Größe der Prozesszone bei gleichbleibender Probengröße verliert die linear elastische Bruchmechanik ihre Gültigkeit und nichtlineare Effekte treten auf.

In diesem Fall müssen abweichende Konzepte angewandt werden. Dies ist mitunter bei vielen grobkeramischen Feuerfestmaterialien der Fall. Bei der fraktographischen Betrachtung eines M/MA-Spinells vor einem kontrollierten, zerstörenden Zugversuch sind bereits Mikro-Risse, Kontaktverluste zwischen den Komponenten, Poren oder Sinterbrücken im Gefüge erkennbar. Die Gültigkeit der linear elastischen Bruchmechanik für feuerfeste Materialien wurde durch Bradt et al. [12] untersucht. In dieser Arbeit wurden drei Gültigkeitsbereiche für Berechnungskonzepte in Abhängigkeit der Sprödigkeitskennzahl B und dem Verhältnis der 3-Punkt Biegefestigkeit σ_{tpb} geteilt durch Zugfestigkeit σ_t definiert (Abbildung 2).

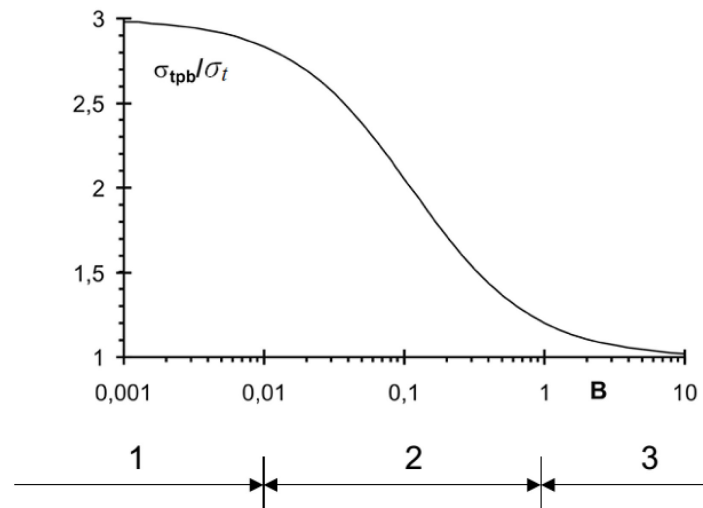


Abbildung 2: Gültigkeitsbereiche für die Wahl des bruchmechanischen Konzepts für feuerfeste Materialien nach Bradt et al. [12]

Die drei Bereiche werden wie folgt eingeteilt [12]:

Bereich 1: Das Material zeigt geringe Sprödigkeit, $B < 0,01$. Ein Konzept abweichend zur strikten LEBM, etwa ein Plastizitäts-Kriterium, ist notwendig.

Bereich 2: Auf Grund eines Größeneffekts zeigt die Probe Abweichungen zur LEBM, $0,01 < B < 1$, Die LEBM kann bedingt verwendet werden.

Bereich 3: Das Material zeigt ein sehr sprödes Verhalten $B > 1$. Dies erlaubt die Verwendung der LEBM.

Ausschlaggebend für den Gültigkeitsbereich ist das Verhältnis Prozesszone zu Probengröße. Ein Beispiel wäre die Berechnung der Verlängerung eines Risses in einem Bauwerk aus Beton. Ist das Verhältnis Risslänge bzw. Prozesszone zu Bauwerk bzw. Probenkörper klein, ist die Anwendung der LEBM zulässig (Bereich 3) [52]. Betrachtet man hingegen einen ähnlich großen Riss in einer kleineren Probe aus demselben Material, ändert sich das Verhältnis und B wird kleiner (Bereich 1). Im Falle der Betrachtung eines M/MA-Spinell Gefüges wird die Prozesszone von der Heterogenität des Materials beeinflusst und die LEBM verliert ihre Gültigkeit.

In einer FE-Simulation kann ein Riss, unabhängig vom bruchmechanischen Konzept, durch einen expliziten Riss („discrete crack“) Abbildung 3 (a) oder durch einen geschädigten Bereich („smeared crack“) Abbildung 3 (b) dargestellt werden.

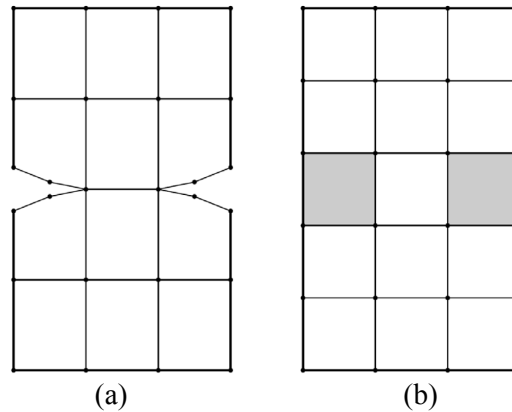


Abbildung 3: Unterschied der Schädigungsdarstellung an einem Objekt durch (a) zwei diskrete Risse und (b) zwei geschädigte Elemente

Die Finite Elemente Simulation eines diskreten Risses in spröden Materialien kann durch eine kohäsive Zone beschrieben werden, die sich zwischen den Rissflanken befindet. Die kohäsive Zone beschreibt die Abnahme der übertragbaren Spannung zwischen den Rissflanken. Die kohäsiven Modelle beruhen auf den Arbeiten von Barenblatt [53] [54] Dugdale [55] und wurden von Hillerborg [15] (für Beton unter der Bezeichnung *fictitious crack model*) sowie Needelman und Xu [56] erweitert. Camacho und Ortiz [57] fügten dem ursprünglichen Modell die Möglichkeit multipler Risse und die Berechnung im dreidimensionalen Raum hinzu [58]. Ein Überblick über die Entwicklung unterschiedlicher Abwandlungen des kohäsiven Zonen Modells wurde z.B. in den Arbeiten [59] [60] gegeben. Eine weitere Formulierung einer kohäsiven Zone ist in der Arbeit von Neittaanmäki [61] zu finden. Generell zeigen alle Modelle eine Abhängigkeit der Diskretisierung, die in der Nähe des Risses eine kleine Diskretisierungsgröße aufweisen sollte. Wichtige Vertreter der kohäsiven Zone-Modelle sind das *discrete cohesive zone model* (DCZM) oder das *continuum cohesive zone model* (CCZM), die sich in ihrer Beschreibung der kohäsiven Zonen unterscheiden [60]. Abbildung 4 zeigt, dass im CCZM die kohäsive Zone als eigenes Element und in der DCZM als Funktion zwischen Knoten beschrieben wird. Das DCZM bietet eine einfache Lösung, die Kontaktzone zwischen Körnern und einer Matrix zu beschreiben. In der Software ABAQUS kann es z.B. unter der Bezeichnung *Cohesive Surface* (CS) verwendet werden. Ein Nachteil beider diskreten Modelle ist, dass der Risspfad im Voraus bekannt sein muss und er von der Diskretisierung abhängig ist. Sie eignen sich daher nicht für eine Simulation der multiplen Rissinitiierung und -entwicklung in einem M/MA-Spinell Gefüge.

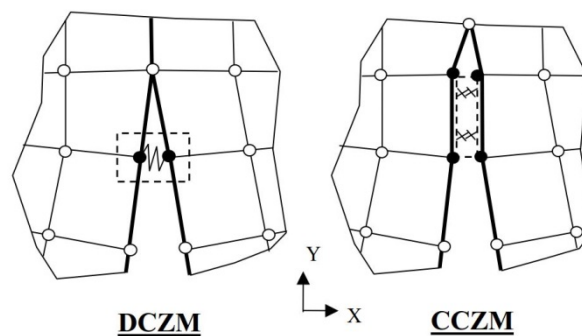


Abbildung 4: Diskrete Beschreibung eines Risses durch kohäsive Modelle [60]

Das *fictitious crack model* nach Hillerborg [15] beschreibt die Spannungsentwicklung bzw. das Entfestigungsverhalten des Materials anhand der Rissöffnungsverschiebung x . Hillerborg definiert dafür die spezifische Bruchenergie G_f als jene flächenspezifische Energie, die benötigt wird, um die beiden Rissflächen zu bilden und die Rissflanken um x_{ult} voneinander zu trennen. Die Bruchenergie G_f ist laut Definition eine Materialkonstante und berechnet sich wie folgt:

$$G_f = \int_0^{x_{ult}} \sigma(x) dx \quad (10)$$

Die einfachste Spannungs-Verschiebungs-Beziehung ist das lineare Entfestigungsverhalten. In der Literatur werden auch Ansätze eines bilinearen [62], multilinearen [63] oder exponentiellen Entfestigungsverhalten, vor allem für Beton, beschrieben. Abbildung 5 zeigt das *fictitious crack model* anhand eines belastenden Stabs und die Entwicklung der Bruchzone durch ein mögliches lineares, bilineares oder nach Hordijk [64] beschriebenes Entfestigungsverhalten.

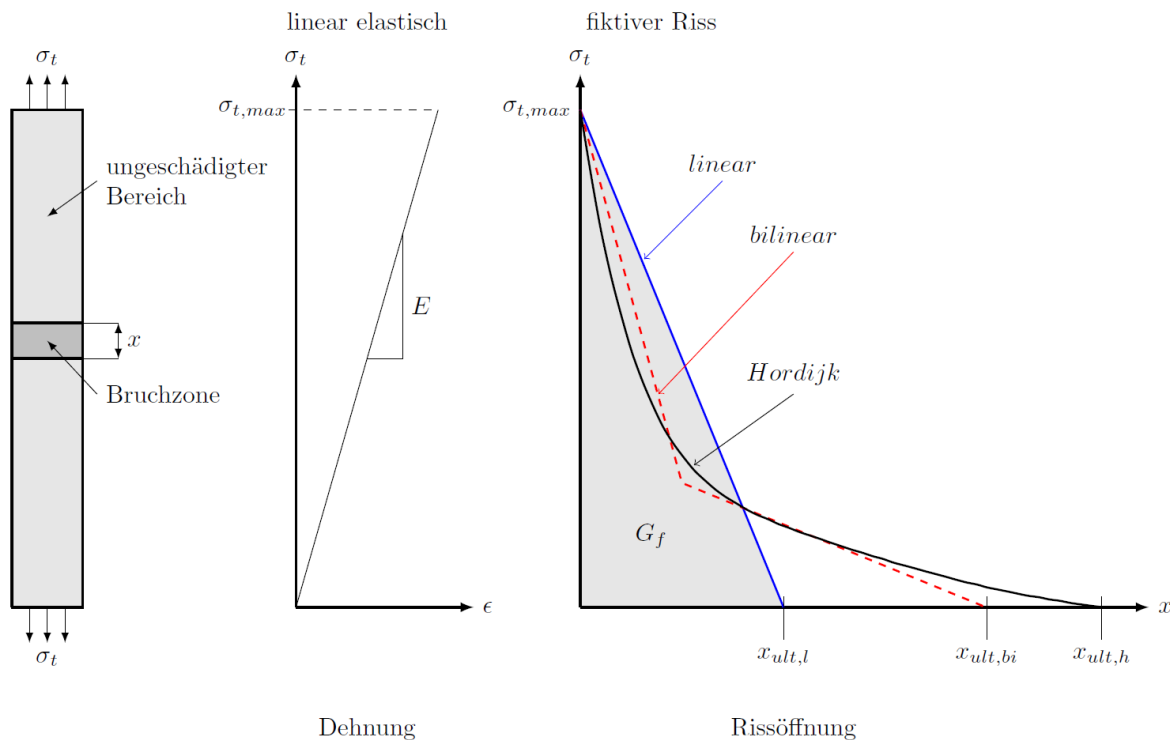


Abbildung 5: Schema des *fictitious crack model* und verschiedene Entfestigungsverhalten mit gleicher Bruchenergie G_f

Bis zum Erreichen der Materialfestigkeit $\sigma_{t,max}$ beschreibt eine Spannungs-Dehnungs-Beziehung das mechanische Verhalten des Materials. Bei einer andauernden Verschiebung nach Rissinitiierung wird das Entfestigungsverhalten unter Verbrauch der spezifischen Bruchenergie G_f durch eine Spannungs-Verschiebungs-Kurve beschrieben. Nach vollständigem Verbrauch der spezifischen Bruchenergie bzw. einer Rissöffnung von x_{ult} , herrscht Spannungsfreiheit im Stab. Die Verschiebung x_{ult} ist abhängig vom Entfestigungsverhalten und beträgt für lineares Entfestigungsverhalten $x_{ult} = 2 \cdot G_f / \sigma_{t,max}$. Die spezifische Bruchenergie bzw. die Flächen unter den gezeigten Kurven der jeweiligen Entfestigungsverhalten in Abbildung 5 sind gleich groß.

Kontinuums mechanische Simulation der Schädigung eines heterogenen Materials:

Im Gegensatz zu einem diskreten Riss erfolgt in einer kontinuums mechanischen Betrachtung keine Trennung der Knotenverbindungen zwischen den Finiten-Elementen und der Riss wird durch eine Entfestigung des Materials („smeard crack“) dargestellt. In einer FE-Simulation führt die kontinuums mechanische Betrachtung zu einer Dehnungs-Lokalisation, welche von der Elementgröße beeinflusst wird. Um dieses Problem zu umgehen entwickelten Bazant und Oh [65] das *crack band model*. Die Bruchenergie eines Elementes ergibt sich aus der Bruchenergie des Werkstoffs G_f multipliziert mit dem Quotienten aus der Elementgröße geteilt durch die Rissbandbreite h . Die übertragbare Spannung der betroffenen Elemente wird durch eine Spannungs-Dehnungs-Beziehung festgelegt. Die Verwendung der Rissbandbreite h verringert damit den Einfluss der Netzgröße. Es ist aus dieser Überlegung aber auch ersichtlich, dass die Wahl der Rissbandbreite h Einfluss auf die konsumierte Bruchenergie ausübt. Für übliche Problemstellungen ist also ein iteratives Vorgehen für die Wahl der Rissbandbreite erforderlich. Das *crack band model* und das *fictitious crack model* liefern dasselbe Ergebnis wenn Gleichung (11) erfüllt wird [66].

$$x_{ult} = \int_{h_c} \varepsilon_{cr} dh \quad (11)$$

Hier ist x_{ult} die maximale Rissöffnungsverschiebung des *fictitious crack models*, h_c die Rissbandweite und ε_{cr} die Rissöffnungsdehnung.

Nachfolgend sind einige Konzepte angeführt die eine Rissausbreitung in grobkeramischen Materialien beschreiben. Ein Ansatz, das Gefüge durch reine Plastizität [67] [68] oder durch Einführen von Schädigungsvariablen [69] [70] [71] zu beschreiben, führte zu nicht zufriedenstellenden Ergebnissen [72]. Die Kombination aus Plastizität und Schädigung, die auf die Steifigkeit des Materials wirkt, basiert auf isotroper Verfestigung (*isotropic hardening*) kombiniert mit isotroper [73] oder anisotroper [74] [75] [76] Zugschädigung (*tension stiffening*). Eine Variante der Kombination ist die Betrachtung des durchschnittlichen Mikro-Stresses als effektiven Stress, der nur auf das ungeschädigte Material wirkt [72] [73] [75] [77]. Eine zweite, numerisch weniger stabile Variante [78] berücksichtigt zusätzlich die Auswirkungen des effektiven Stresses auf die geschädigten Bereiche im Material [74] [79] [80]. Ein einfaches und weitverbreitetes Modell basiert auf der Hypothese von Drucker und Prager, das durch Lee und Fenves [73] verbessert und unter der Bezeichnung *concrete damaged plasticity* (CDP) in der Software ABAQUS verwendet wird. Dieses Modell erweiterte Cicekli [77] um eine anisotrope Schädigung des Materials. Eine weitere Verbesserung findet in den Arbeiten von Kim [72] [76] Anwendung. Al-Rub et al. [81] haben das Modell von Cicekli [77] um eine gradientenabhängige Schädigung erweitert um die Netzabhängigkeit weiter zu reduzieren.

4 Modell zur Simulation eines M/MA-Spinell Gefüges

Für die Simulation der Rissinitiierung und -entwicklung in einem M/MA-Spinell Gefüge wird ein Materialmodell benötigt, das den Mechanismus der Rissbildung beschreiben kann. Das FE-Modell muss daher alle wichtigen Informationen zum Materialverhalten unter der thermo-mechanischen Belastung beinhalten. In diesem Kapitel werden die Darstellung eines Gefüges, das verwendete Materialmodell, die Erstellung des heterogenen Gefüges und die Kontakte zwischen Körnern und der umgebenden Matrix beschrieben.

4.1 Darstellung eines heterogenen Gefüges mittels eines repräsentativen Volumenelements

Um die benötigte Rechenleistung und -zeit einer Simulation zu verringern, hat sich das Konzept der Einheitszelle bzw. eines repräsentativen Volumenelements (RVE) etabliert. Der Grundgedanke dieses Konzepts ist die Darstellung eines Materials durch einen kleinen Ausschnitt der die Eigenschaften des gesamten Materials beschreibt. Das RVE ist daher ein Ausschnitt eines Körpers und umfasst ein makroskopisches Gebiet mit allen mikroskopischen Einschlüssen. Es beschreibt statistisch die Heterogenität des Körpers und dessen Eigenschaften. Eine eindeutige Definition eines RVE für ein willkürliches heterogenes Material existiert nicht. Hill [82] definiert das repräsentative Volumen als eine Probe deren Struktur typisch für den Durchschnitt der Gesamtheit ist. Es beinhaltet genügend Einschlüsse damit die resultierenden Eigenschaften unabhängig von den Verschiebungen oder Zugkräften an den Rändern sind, solange diese gleichmäßig von außen an der Oberfläche wirken. Gitman [83] beschreibt in seiner Arbeit einige verschiedene Definitionen eines RVE, zusätzlich beschäftigte er sich mit der Größenwahl eines RVE. Nguyen [84] zeigte, dass ein RVE für quasi-spröde Materialien die ein Entfestigungsverhalten zeigen, existiert. In der vorliegenden Arbeit ist das RVE mindestens so groß, dass ein Korn der größten Kornfraktion abgebildet werden kann. Durch diese Bedingungen ergibt sich die minimalste Größe des RVE aus der kleinsten Abmessung bei deren weiteren Verkleinerung ein Informationsverlust eintritt. Eine Vergrößerung führt demnach zu keiner wesentlichen Abweichung. Eine Bedingung fordert weiter, dass eine periodische Anordnung des RVE das Material bildet. In Abbildung 6 wird das Größenverhältnis und die periodische Anordnung der repräsentativen Volumenelemente in einem makroskopischen Objekts schematisch verdeutlicht.

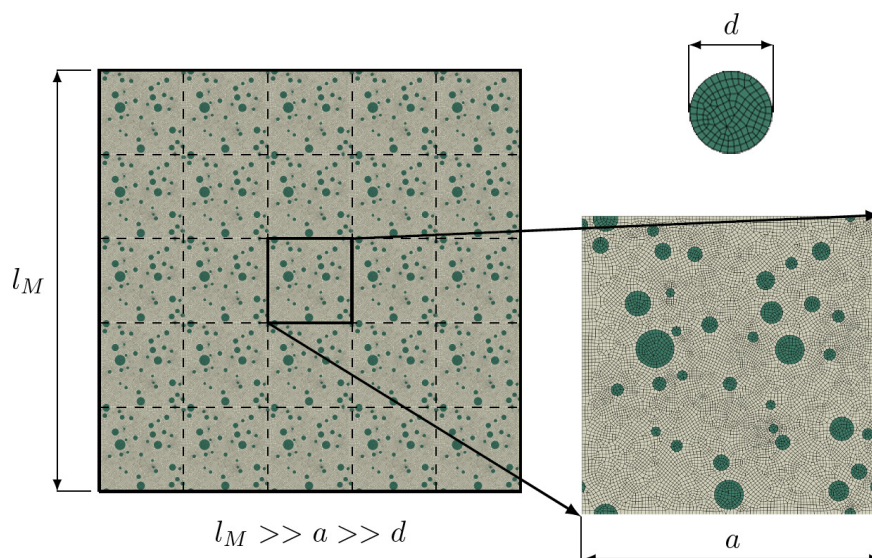


Abbildung 6: Anordnung und Größenvergleich eines RVE in einem Material

Um das Verhalten der umliegenden Zellen an den Rändern des RVE in Abbildung 6 zu berücksichtigen ist die entsprechende Formulierung der Randbedingungen erforderlich. Eine Methode, die Einflüsse umliegender repräsentativer Volumenelemente zu wahren, ist die Verwendung von periodischen Randbedingungen (PRB). Die periodischen Randbedingungen beschreiben den Spannungs- und Dehnungszustand an den Rändern des RVE, der sich durch umgebende RVE ergeben würde. Dadurch reduziert sich der zu berechnende Materialausschnitt. Die mathematische Berechtigung periodischer Randbedingungen wird in den Arbeiten von Michel [85] erläutert. In der Literatur finden sich auch Randbedingungen die für die folgenden Simulationen nicht verwendet wurden [86] [87] [88].

Das Grundprinzip der periodischen Randbedingungen ist eine periodische Verschiebungsgleichheit und entgegengesetzte Spannungen gegenüberliegenden Seiten. Der resultierende Effekt auf das RVE ist in Abbildung 7 in einer vereinfachten Form dargestellt. In dieser Darstellung sind die Seiten mit Γ_{ij} , Eckpunkte mit C_i und Knotenpunkte x_{n,Γ_j} mit fortlaufendem Index n bezeichnet.

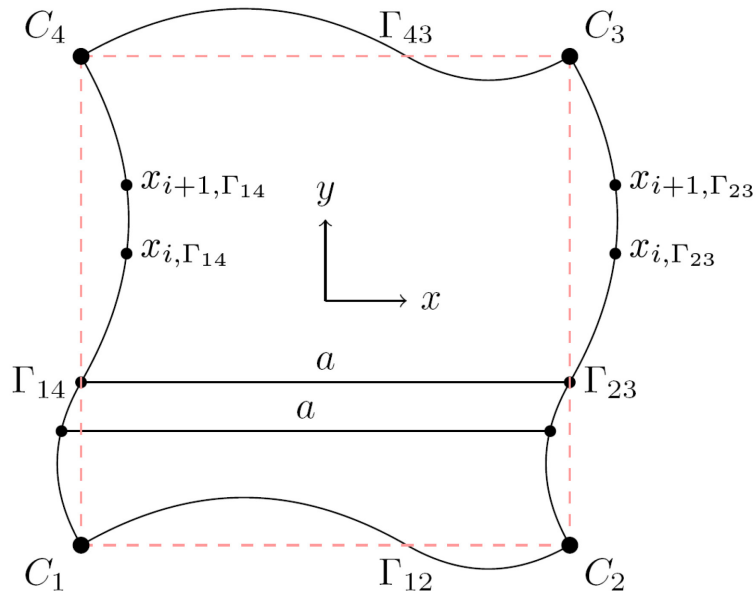


Abbildung 7: Schematische Darstellung des Effekts periodischer Randbedingungen

Die gewählten periodischen Randbedingungen werden anhand der Verschiebung eines Punktes $u(x)$ am Rand des RVE beschrieben. Die Verschiebung setzt sich aus der Längenänderung durch die makroskopische Dehnung $\bar{\varepsilon} \cdot a$ und einer mikroskopischen Verschiebung $u^*(x)$ eines Punktes, die durch die Heterogenität des Materials verursacht wird, zusammen:

$$u(x) = \bar{\varepsilon} \cdot a + u^*(x) \quad (12)$$

In dieser Formel bezeichnet a die Abmessung des RVE. Die mikroskopische Verschiebung $u^*(x)$ verursacht eine Abweichung vom Dehnungsfeld ε um die periodische Dehnung $\varepsilon^*(u(x))$. Bei Anwendung periodischer Randbedingungen ergibt die Integration der periodischen Dehnungen ε^* über einen Bereich der Zelle Ω geteilt durch deren Volumen $|\Omega|$ den Wert null:

$$\langle \varepsilon^*(u(x)) \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \varepsilon^* dV = 0 \quad (13)$$

Dadurch entsprechen die Dehnungen ε in Ω der makroskopischen Dehnung $\bar{\varepsilon}$:

$$\langle \varepsilon(u(x)) \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \varepsilon dV = \bar{\varepsilon} \quad (14)$$

Dieser Umstand hat folgende Auswirkungen:

Der Abstand zwischen gegenüberliegenden Seiten ist am Anfang die Abmessung a und berechnet sich aus zwei gegenüberliegenden Punkte, $a = (x_2 - x_1)$. Die Längenänderung Δl ist eine Funktion der makroskopischen Dehnung $\bar{\varepsilon}$ und dem Abstand a , $\Delta l = \bar{\varepsilon} \cdot (x_2 - x_1)$. Die Beschreibung von Δl kann ebenfalls über die Verschiebung der betrachteten einzelnen Punkte $u(x_{\Gamma_{ij}})$ erfolgen:

$$\Delta l = u(x_{n,\Gamma_{23}}) - u(x_{n,\Gamma_{14}}) \quad (15)$$

In Gleichung (15) wird der Fall der Punkte für das Seitenpaar Γ_{14} und Γ_{23} aus Abbildung 7 beschrieben. Die Verschiebung $u(x_{\Gamma_{14}})$ setzt sich laut Gleichung (12) aus der makroskopischen und der periodisch auftretenden Verschiebung zusammen. Da der Kraftvektor an gegenüberliegenden Seiten Γ entgegengesetzt wirkt, entsteht eine gleichgroße periodische Verschiebung u^* wie hier für das Punktepaar n gezeigt wird:

$$u_{n,\Gamma_{14}}^* = u_{n,\Gamma_{23}}^* \quad (16)$$

Aus Gleichung (12) und (15) unter Berücksichtigung von Gleichung (16) heben sich die periodischen Abweichungen um die mittlere Dehnung für das Punktepaare $x_{n,\Gamma_{14}}$ und $x_{n,\Gamma_{23}}$ auf. Die Längenänderung zwischen ihnen wird dann beschrieben durch:

$$u(x_{n,\Gamma_{23}}) - u(x_{n,\Gamma_{14}}) = \bar{\varepsilon} \cdot (x_{n,\Gamma_{23}} - x_{n,\Gamma_{14}}) \quad (17)$$

Diese Überlegungen zeigen, dass die Anwendung der verwendeten periodischen Randbedingungen die Materialheterogenität berücksichtigt und keine Auswirkung auf die makroskopischen Dehnungen hat.

Für die Verwendung dieser Randbedingungen müssen sich Integrationspunkte einer Seite wie z.B. Γ_{14} mit der Projektion der Integrationspunkte der gegenüberliegenden Seite Γ_{23} decken. Deckungsgleiche Punktepaare der Seiten (Γ_{14} , Γ_{23}) und (Γ_{43} , Γ_{12}) besitzen denselben Index n . Die Implementierung von periodischen Randbedingungen in der Software ABAQUS erfolgt durch ein Gleichungssystem. Diese sogenannten „Constraint – Equations“ (CE) erfordern für die Verknüpfung zweier gegenüberliegender Punkte einen Referenzpunkt RP_{ij} . Für jedes Knotenpaar, z.B. $x_{n,\Gamma_{14}}$ und $x_{n,\Gamma_{23}}$, müssen Gleichungen in x - und y - Richtung erstellt werden. In der folgenden Gleichungssammlung werden daher vier Referenzpunkte gezeigt. Die jeweilige Richtung ist durch den hochgestellten Index (x , y) gekennzeichnet.

$$\left. \begin{aligned} u^x(x_{n,\Gamma_{14}}^x) - u^x(x_{n,\Gamma_{23}}^x) - u^x(RP^{xx}) &= 0 \\ u^y(x_{n,\Gamma_{14}}^y) - u^y(x_{n,\Gamma_{23}}^y) - u^y(RP^{yy}) &= 0 \\ u^x(x_{n,\Gamma_{12}}^x) - u^x(x_{n,\Gamma_{43}}^x) - u^x(RP^{yx}) &= 0 \\ u^y(x_{n,\Gamma_{12}}^y) - u^y(x_{n,\Gamma_{43}}^y) - u^y(RP^{xy}) &= 0 \end{aligned} \right\} \text{für } : 0 \leq n \leq m \quad (18)$$

Um die Gleichungen (18) zu erstellen muss jedem Randknoten $x_{n,\Gamma_{ij}}$ und Eckpunkt C_i eine eindeutige Benennung zugewiesen sein. Die nötigen Schritte können durch ein Script schnell und zuverlässig durchgeführt werden. Die Anzahl der Gleichungen ist von der Diskretisierung d.h. von der Anzahl der Knoten abhängig (siehe Kapitel 5.1.3). Ein Nachweis für die richtige Implementierung der periodischen Randbedingungen anhand eines makroskopischen Ergebnisses befinden sich in Appendix B.

Die Arbeit von Tyrus [89] beschreibt die Möglichkeit auf eine Knoten-Kopplung zu verzichten. In dieser Arbeit werden die Verschiebungsfelder gegenüberliegender Seiten durch eine Interpolation verknüpft. Diese Methode eliminiert die Notwendigkeit identischer Knoten auf gegenüberliegenden Seiten, erfordert jedoch eine aufwändige Berechnung, weshalb hier nicht weiter darauf eingegangen wird.

4.2 Erstellung des FE-Gefüge-Modells

Bei der Nachbildung eines heterogenen Gefüges mithilfe eines FE-Modelles tritt jedenfalls ein Informationsverlust auf. Bei einer detailreicheren Beschreibung des FE-Gefüges kann auf Kosten eines höheren Rechenaufwands dieser Informationsverlust gering gehalten werden. In dieser Arbeit werden lediglich zufällig verteilte Spinell-Körner in einer homogenen Matrix berücksichtigt. Poren, Einschlüsse, Verunreinigungen oder ähnliches, die ein reales Gefüge aufweist, werden nicht im FE-Modell dargestellt. Unter Berücksichtigung der Anforderungen an ein RVE wird nachfolgend die Erstellung des FE-Modelles für die Simulation eines M/MA-Spinell Materials erklärt.

4.2.1 Kornverteilung des Gefüges

Für die FE-Simulation wird ein Modell bestehend aus zwei Materialien, Magnesia und Spinell, angenommen. Sonstige Poren, Einschlüsse oder ähnliches werden nicht berücksichtigt. Die Korngrößenverteilung für das FE-Modell folgt der Dinger-Funk Gleichung [90]. Hierbei wird der kumulative prozentuale Rückstand P bis zu einem beliebigen Durchmesser d_i abhängig von einem Korngrößenexponent n , einem minimalen Korndurchmessern d_{min} und einem maximalen Korndurchmesser d_{max} berechnet.

$$P(d_i) = \frac{d_i^n - d_{min}^n}{d_{max}^n - d_{min}^n} \cdot 100\% \quad (19)$$

Für eine größtmögliche Kugelpackungsdichte wurde der Exponent $n = 0,37$ gewählt [90]. Der gesamte Werkstoff (Spinell und MgO) besteht aus Körnern zwischen $d_{min} = 0$ mm und $d_{max} = 5$ mm, die in fünf unterschiedliche Kornklassen ($KF_1 - KF_4$ und *Matrix*) unterteilt sind. Die Berechnung der jeweiligen Anteile einer Kornklasse erfolgt über eine Abwandlung der Gleichung (19) zu:

$$KF_i = \frac{d_{i+1}^n - d_i^n}{d_{max}^n - d_{min}^n} \cdot 100\% \quad (20)$$

Darin ist d_i die untere und d_{i+1} die obere Korngrenze der Kornfraktion. Im Modell werden Körner ab dem Grenzkorndurchmesser $d_{grenz} = 1$ mm dargestellt. Er ist die Grenze zwischen den darstellbaren Körnern und den Körnern die in der Matrix zusammengefasst sind und wurde willkürlich gewählt. Die Matrix besteht nur aus Magnesia und wird im FE-Modell homogen dargestellt.

Die Berechnung des Anteils der Matrix mit $d_{min} = 0$ erfolgt nach Formel (19):

$$Matrix = \left(\frac{d_{grenz}}{d_{max}} \right)^n \cdot 100\% \quad (21)$$

Der Grenzdurchmesser $d_{grenz} = 1$ mm bedingt einen Matrixanteil im Gefüge von $\geq 55,2$ %. Der maximale durch Körner darstellbare Anteil beträgt demnach die restlichen $\leq 44,8$ %. Für die Simulation wird ein Spinell-Gehalt von $vol = 10$ vol% angenommen, der sich aus Körnern der Kornfraktionen $KF_1 - KF_4$ zusammensetzt. Die resultierende Korngrößenverteilung nach Gleichung (19) wird in Tabelle 2 und grafisch in Abbildung 8 gezeigt.

Tabelle 2: Korngrößenverteilung nach Gleichung (19) und (20) mit den gewählten Korngrenzen

| Bezeichnung | Kornklasse [mm] | Kornfraktion KF_i [%] | Kumulierter Rückstand R [%] | Spinell [%] |
|-------------|--------------------|----------------------------|-------------------------------------|----------------|
| KF_4 | 4 - 5 | 7,92 | 7,92 | 1,77 |
| KF_3 | 3 - 4 | 9,30 | 17,22 | 2,07 |
| KF_2 | 2 - 3 | 11,53 | 28,75 | 2,57 |
| KF_1 | 1 - 2 | 16,12 | 44,87 | 3,59 |
| Matrix | < 1 | 55,13 | 100 | - |
| Σ | | 100 | | 10 |

Die unteren Balken in Abbildung 8 zeigen den MgO- bzw. den Matrix-Gehalt (in Summe 90 %) und die darüber liegenden Balken (für KF_1 bis KF_4) den Spinell-Gehalt (die restlichen 10%) an.

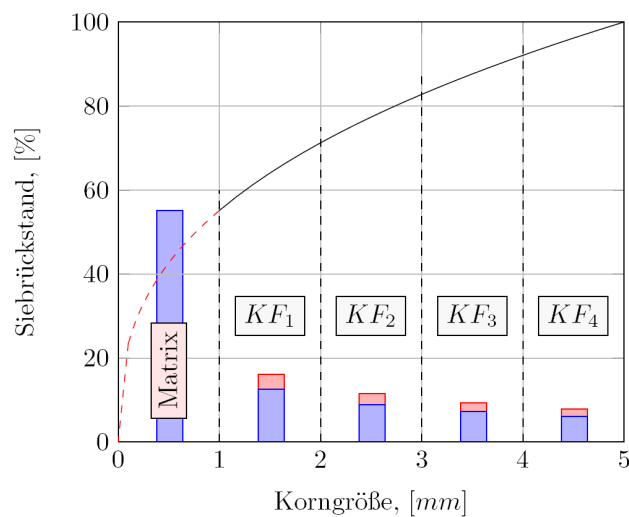


Abbildung 8: Rückstandskurve der gewählten fünf Kornklassen des M/MA-Spinell Materials

In Appendix A befindet sich eine Rückstandskurve mit dem Grenzkorndurchmesser $d_{grenz} = 0,5$ mm, der die maximale Darstellung von Körnern auf 57,3 % erhöht.

In Simulationsreihen mit Beton wird eine Mindestgröße des RVE von 3 - 5 Mal [91] bzw. 7 - 8 Mal [92] des maximalen Korndurchmessers vorgeschlagen. Unter Berücksichtigung dieser Werte muss das Modell mit $d_{max} = 5$ mm zwischen 15 mm und 40 mm groß sein. Um Rechenleistung zu sparen wird das in Kapitel 4.1 erwähnte Konzept des repräsentativen Volumenelements verwendet.

Für die Darstellung eines quadratischen Modelles mit gewählter Kornverteilung wird die minimale Kantenlänge so definiert, dass zumindest ein Korn der größten Kornfraktion im Modell zu finden ist. Im gezeigten Modell muss daher mindestens ein Spinell-Korn mit dem Durchmesser $d = 4$ mm vorhanden sein. Die minimale Kantenlänge a_{min} eines quadratischen Modelles ist von verschiedenen Faktoren abhängig. Neben dem Spinell-Gehalt vol und der unteren und oberen Korngrenze der größten Kornfraktion (in diesem Fall KF_4), beeinflusst auch d_{min} der feinsten Kornfraktion (in diesem Fall KF_1 und $d_{min} = d_{grenz}$) die minimale Kantenlänge:

$$a_{min} = d_{min} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{4} \cdot \frac{(d_{max}^n - d_{grenz}^n)}{(d_{max}^n - d_{min}^n)} \cdot \frac{100}{vol}} \quad (22)$$

Ein Spinell-Gehalt von $vol = 10$ % mit den Korngrenzen $d_{grenz} = 1$ mm, mit der größten Kornklasse $d_{min} = 4$ mm und $d_{max} = 5$ mm ergibt nach Gleichung (22) eine minimal benötigte Abmessung des Modells von $a_{min} = 26,7$ mm. Dieser Wert liegt zwischen den oben angeführten vorgeschlagenen Abmessungen einer RVE. Gleichung (22) lässt sich als Funktion des Grenzkorns und des Spinell-Gehalts darstellen. Die Kurven für $d_{max} = 5$ mm bei einem Grenzkorndurchmesser $d_{grenz} = 1$ mm sowie $d_{grenz} = 0,5$ mm sind in Abbildung 9 für einen Spinell-Gehalt von $vol = 1$ % bis zum jeweils maximal möglichen Gehalt dargestellt.

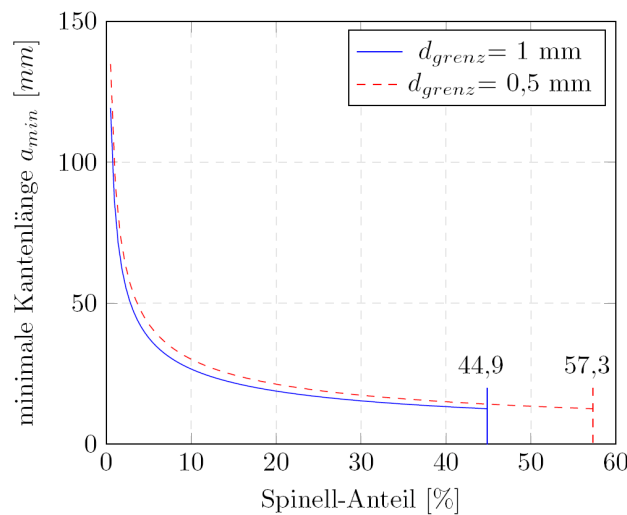


Abbildung 9: Abhängigkeit der minimalen Kantenlänge vom Spinell-Gehalt für verschiedene Grenzkorndurchmesser

Je kleiner d_{grenz} ist, desto mehr Körner können im Modell dargestellt werden und umso größer wird die benötigte Kantenlänge a_{min} . Aus Abbildung 9 ist ebenso ersichtlich, dass der Spinell-Gehalt die Abmessung beeinflusst. Mit der Darstellung geringerer Spinell-Anteile, bei gleicher Verteilung, muss a_{min} zunehmend größer gewählt werden.

4.2.2 Erstellung und Platzierung der Körner im Modell

Für die Erstellung und Platzierung von Körner gibt es verschiedene Möglichkeiten. Eine frühe Methode nach Wittmann [93] erstellt polygonförmige Körner im dreidimensionalen Raum und erzeugt somit möglichst realitätsnahe Körner. Eine weitere Methode die herangezogen werden kann, wird z.B. von Du und Sun [94] beschrieben. Um die Komplexität des Modells gering zu halten beschränken sich die Simulationen auf zweidimensionale Modelle mit runden Körnern. Der für die Modellerstellung in der Programmiersprache Python entwickelte Algorithmus (im Folgenden als Script bezeichnet) erstellt zufällig zweidimensionale kreisförmige Körner und berücksichtigt unter anderem die Periodizität des Modells, d.h. idente gegenüberliegende Ränder. Durch die zufällige Anordnung der Körner ist jedes Gefüge einzigartig.

Das Script ist aus einer Anzahl von logischen Bedingungen aufgebaut. Es beginnt mit einer *For*-Schleife², deren logisches Abbruchkriterium das Ende der Kornplatzierung der letzten Kornfraktion bedeutet. Die Iteration der *For*-Schleife, FL_i , beginnt bei der größten Kornfraktion³ und geht danach zur nächst Feineren. Der Index i läuft bis zur Anzahl der Kornfraktionen minus eins, w , mit der Prüfung $i < w$. Die Erhöhung von i erfolgt durch die Verletzung der nachfolgenden logischen Bedingung, die in einer *While*-Schleife⁴ überprüft wird. Für diese Prüfung wird die kleinstmögliche Kornfläche $A_{k,\min} = \frac{d_{i+1}^2 \cdot \pi}{4}$ mit der theoretisch zur Verfügung stehenden Kornfraktionsfläche A_{KF_i} verglichen. Die Berechnung der freien zu Verfügung stehenden Fläche der einzelnen Kornfraktionen A_{KF_i} erfolgt durch die Kantenlänge a des Modells, den Volumenanteil vol der darzustellenden Körner und dem Anteil der jeweiligen Kornfraktion KF_i :

$$A_{KF_i} = \frac{KF_i}{100} \cdot A_{Spinell} = \frac{d_{i+1}^n - d_i^n}{d_{\max}^n - d_{\min}^n} \cdot a^2 \cdot \frac{vol}{100} \quad (23)$$

Nach jeder Prüfung $i < w$ wird A_{KF_i} nach Gleichung (23) neu berechnet und die Restfläche der vorherigen Kornfraktion $A_{KF_{i-1},rest} < A_{k,\min}$ steht dann der nächst Feineren zur Verfügung, $A_{KF_i} = A_{KF_i} + A_{KF_{i-1},rest}$. Im ersten Durchlauf ist $A_{KF_{i-1},rest}$ null, da es keine gröbere Kornfraktion gibt. Schematisch ist FL_i in Abbildung 10 dargestellt.

² Eine *For-Schleife* iteriert über die Elemente einer Sequenz (in diesem Fall ist das die Anzahl der Kornfraktionen).

³ Der Index der größten Kornfraktion beginnt mit $i = 5$. Im Script sind die verwendeten unteren Durchmesser in absteigender Reihenfolge $\{5, 4, 3, 2, 1, 0 \text{ mm}\}$ geordnet. Der erste Grenzdurchmesser ist daher 4 mm und es ergeben sich gegenüber Abbildung 8 auf den kopfgestellte Indizes.

⁴ Eine *While-Schleife* wiederholt eine Anweisung solange ein logischer Ausdruck wahr ist.

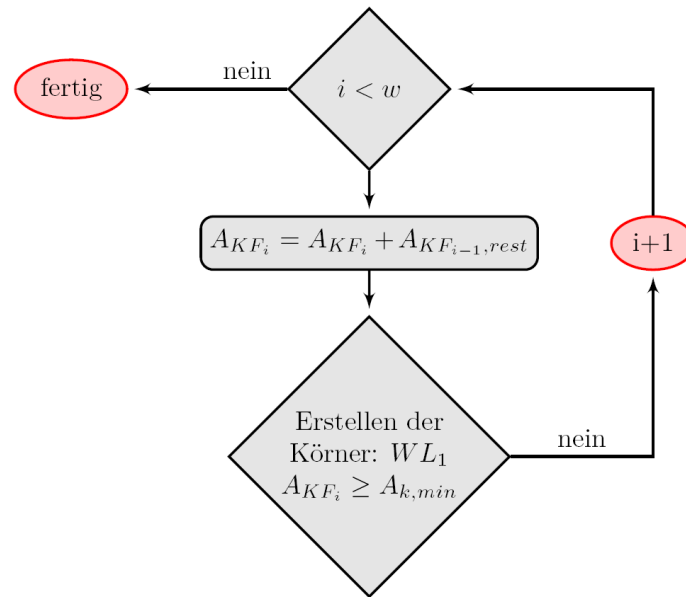
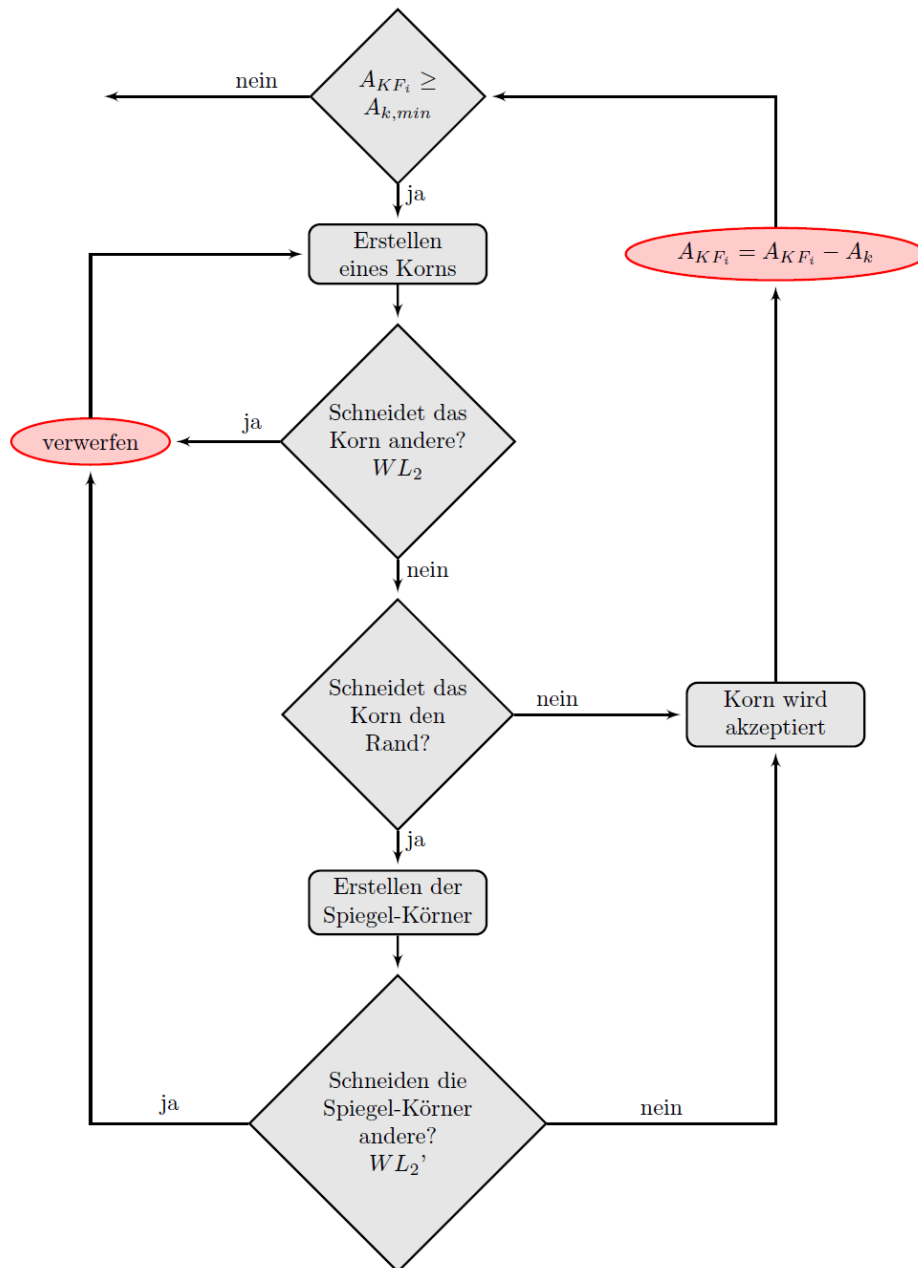


Abbildung 10: *For*-Schleife FL_l für die Kornverteilung

Die wiederkehrende Prüfung der *While*-Schleife wird solange durchlaufen bis es zu einer Verletzung der Bedingung kommt. In diesem Fall ist die Restfläche für ein weiteres Korn dieser Kornfraktion zu klein und der laufende Index i von FL_l wird um eins erhöht. Die Aufgabe der *While*-Schleife WL_l besteht in der Erstellung der Körner der laufenden Kornfraktion. Solange die logische *While*-Bedingung von $A_{KF_i} \geq A_{k,min}$ wahr ist, werden weitere Körner generiert. Nach jedem Durchlaufen der Schleife reduziert sich dabei die Fläche A_{KF_i} um die Fläche A_k des gerade erstellten und platzierten Korns. Die *While*-Schleife WL_l ist in Abbildung 11 gezeigt.



1

Abbildung 11: *While*-Schleife WL_1 für die Erstellung der Körner

Die Erstellung der Körner innerhalb der ersten *While*-Schleife WL_1 beginnt mit der Festlegung des zufälligen Durchmesser d_k und des Mittelpunktes (x_k, y_k) des Kornes nach den folgenden Gleichungen (24):

$$\begin{aligned}
 d_k &= d_{i+1} + \eta [0;1] \cdot (d_i - d_{i+1}) \\
 x_k, y_k &= \frac{d_k}{2,02} + \eta [0;1] \cdot \left(a - \frac{d_k}{2,02} \right)
 \end{aligned}
 \tag{24}$$

Dabei erfolgt die Erstellung des Durchmesser d_k innerhalb der jeweiligen Kornfraktion $\{d_k \in \mathfrak{R} \mid d_{i+1} \leq d_k < d_i\}$, durch die Addition des unteren Grenzdurchmessers d_{i+1} und einer zufälligen Länge. Diese wird durch die Multiplikation der Kornklassenbreite $(d_i - d_{i+1})$ mit einer gleichverteilten zufälligen Zahl η im halb offenen Intervall zwischen 0 und 1 gebildet.

Die Erstellung der Kornmittelpunkte nach Gleichungen (24) wird ebenfalls von einem halboffenen Intervall bestimmt und verhindert eine Position außerhalb des Modells. Um zusätzlich eine tangentielle Berührung zwischen Korn und der Modellgrenze a zu verhindern wird durch der Durchmesser durch 2,02 dividiert. Dadurch ergibt sich der Radius von 99 % ($r_{0,99} = d_k \cdot 0,5 \cdot 99 \% = 1 / 2,02$). In Abbildung 12 ist die Kornerstellung und das Modell schematisch dargestellt.

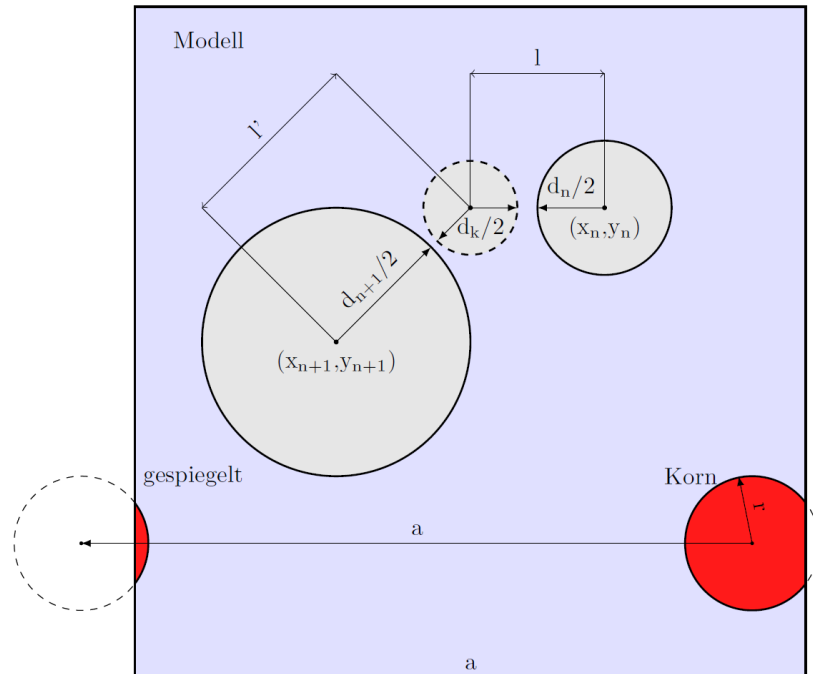


Abbildung 12 Platzieren von Körnern innerhalb definierter Modellgrenzen ohne Überschneidung der Körner

Nach der Kornerstellung, erfolgt in der *While*-Schleife WL_2 die Überprüfung auf eine mögliche Überschneidung des gerade erstellten Kornes mit bestehenden Körnern. Das Kriterium der *While*-Schleife WL_2 wird durch das strichlierte Korn in Abbildung 12 graphisch verdeutlicht. Um eine Überschneidung auszuschließen, muss der Abstand zwischen den Körnern l größer als die Summe der beiden Radien sein. Zusätzlich zum theoretischen Mindestabstand muss im FE-Modell ausreichen Platz für ein Element der Größe ms vorhanden sein. Ist der Abstand zu klein wird das Korn verworfen und ein neues erstellt. Ist die Distanz zwischen den Körnern ausreichend groß wird der Abstand zum nächsten Korn $n+1$ verglichen. Dieses Kriterium wird mathematisch wie folgt formuliert:

$$\sqrt{(x_n - x_k)^2 + (y_n - y_k)^2} < \frac{d_k + d_n}{2} + ms \quad (25)$$

Für die Abstandsberechnung nach Gleichung (25) werden die jeweiligen Koordinaten des Mittelpunkts (x, y) sowie die Durchmesser d benötigt. Der fortlaufende Index n bezieht sich auf die bereits platzierten Körner, der Index k auf das gerade erstellte Korn und m ist die Anzahl aller bisher erstellten Körner. Die Überprüfung durch die *While*-Schleife WL_2 ist schematisch in Abbildung 13 gezeigt.

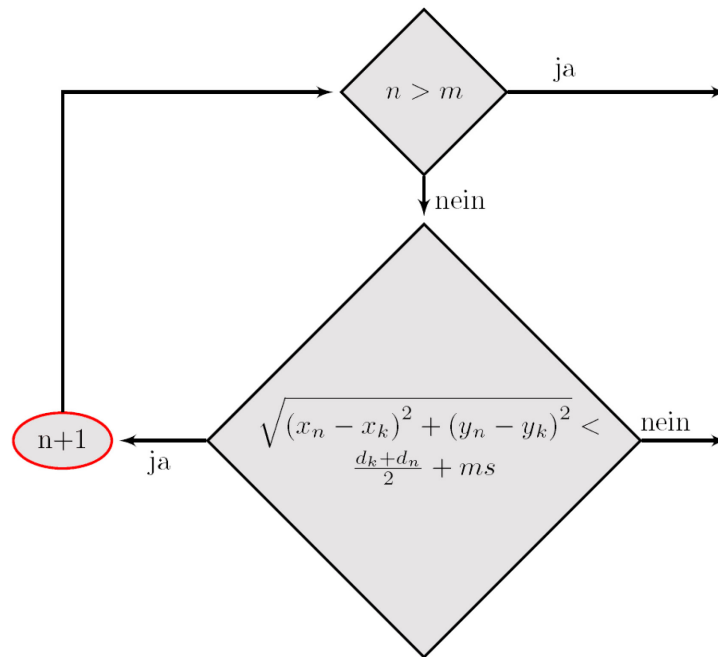


Abbildung 13: Schema der *While*-Schleife WL_2 die auf eine Körnüberschneidung prüft

Führt keine Überprüfung zu einer Verletzung der logischen Bedingung, kann das Korn im Modell platziert werden. Auf Grund der Anwendung von periodischen Randbedingungen und des Konzepts eines RVE muss jedoch garantiert werden, dass jedes Korn vollständig im Modell enthalten ist. Im Falle einer Überschneidung eines Kornes mit der Modellgrenze a , wird dieses daher auf die gegenüberliegende Seite gespiegelt. Durch die Spiegelung ergeben sich neun mögliche Szenarien, die sich in drei Gruppen einteilen lassen und durch das Script überprüft werden:

- Kein Schnitt: Das Korn wird im Modell als Ganzes dargestellt.
- Schnitt einer Kante: Das Korn wird im Modell vollständig durch zwei Teile dargestellt.
- Schnitt zweier Kanten: Das Korn wird im Modell vollständig durch vier Teile dargestellt.

In Abbildung 12 wird das Beispiel „Schnitt einer Kante“ dargestellt. Da sich das Korn rechts zu einem Großteil im Modell darstellen lässt, wird der Rest des Kornes, der sich außerhalb des Modells befindet, auf die linke gegenüberliegende Seite gespiegelt. Die beiden roten Teile am rechten und linken Rand ergeben in Summe das ganze Korn. Befindet sich das Korn z.B. in einer Ecke, d.h. es schneidet zwei Kanten, werden drei Teile des Kornes in den verbleibenden Ecken erstellt. Dadurch entstehen weitere Teilkörner im Modell deren Abstand ebenfalls auf Überschneidung überprüft werden muss. Dieser Vorgang erfolgt in der leicht angepassten *While*-Schleife WL_2' , die im Fließschema in Abbildung 14 gezeigt wird.

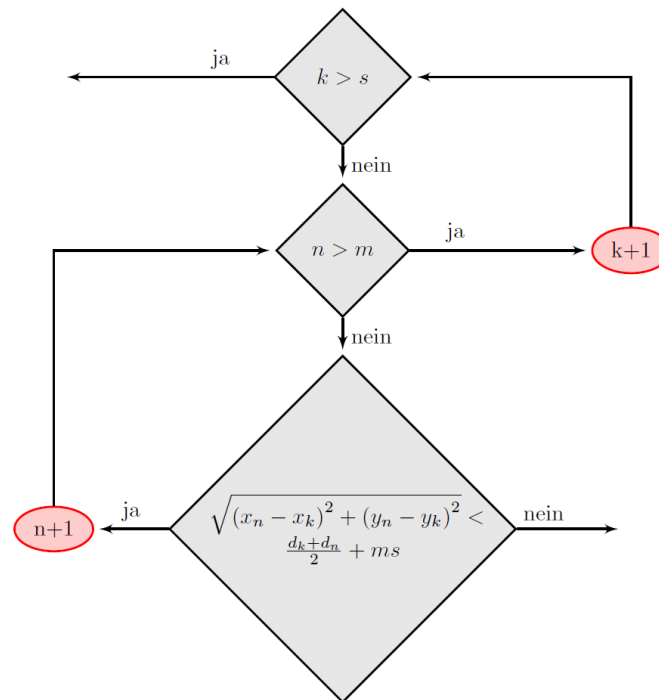


Abbildung 14: *While*-Schleife WL_2 für die Überprüfung der gespiegelten Körner auf Überschneidung

Die Schleife WL_2 muss dabei maximal die Anzahl der gespiegelten Körner s durchlaufen. Sollte ein gespiegeltes Korn eine Überschneidung aufweisen, werden alle (folgenden) Spiegelungen und das Original verworfen und ein neues Korn kreiert. Wird im Zuge der Überprüfung keine Überschneidung der zwei oder maximal drei Spiegelungen festgestellt, $k > s$ ergibt *ja*, wird die Fläche des Kornes A_k von der zur Verfügung stehenden Fläche der Kornfraktion A_{KF_i} abgezogen, $A_{KF_i} = A_{KF_i} - A_k$. Danach erfolgt die erneute Überprüfung der *While*-Schleife WL_1 , $A_{k, \min} > A_{KF_i}$.

Dieser Ablauf wird solange durchgeführt bis die Restfläche der feinsten Kornfraktion (in diesem Fall A_{KF_1}) keinen Platz mehr für ein weiteres Korn bietet. Die Bedingung ist nur dann erfüllt wenn mit der letzten Erhöhung des Laufindex i der *While*-Schleife WL_1 die Bedingung der *For*-Schleife FL_1 , $i < w$, *nein* ergibt und die Fläche $a^2 \cdot vol$ durch erzeugte Körner abgedeckt wird.

Aus den gespeicherten Koordinaten der erzeugten Körner wird in ABAQUS eine zweidimensionale Grundform mit der Verteilung der Körner in der Fläche erstellt. Die Abmessung der Körnergrundform ist in diesem Stadium größer als die Modellgröße a . In einem nachfolgenden Schritt subtrahiert das Script aus einem Quadrat $(2a)^2$ die Körnergrundform und erstellt die Ausgangsform der Matrix. Anschließend wird sowohl die Körnergrundform als auch die Ausgangsform der Matrix mit einem Negativ der vorgesehenen Modellgröße beschnitten. Das Resultat bildet die Objekte *Körner*, jener Teil in Abbildung 15 (a) der sich innerhalb der strichlierten Umrandung befindet, und *Matrix* in Abbildung 15 (b). Die Zusammenlegung der *Körner* und der *Matrix* ergibt das fertige Gefüge Abbildung 15 (c).

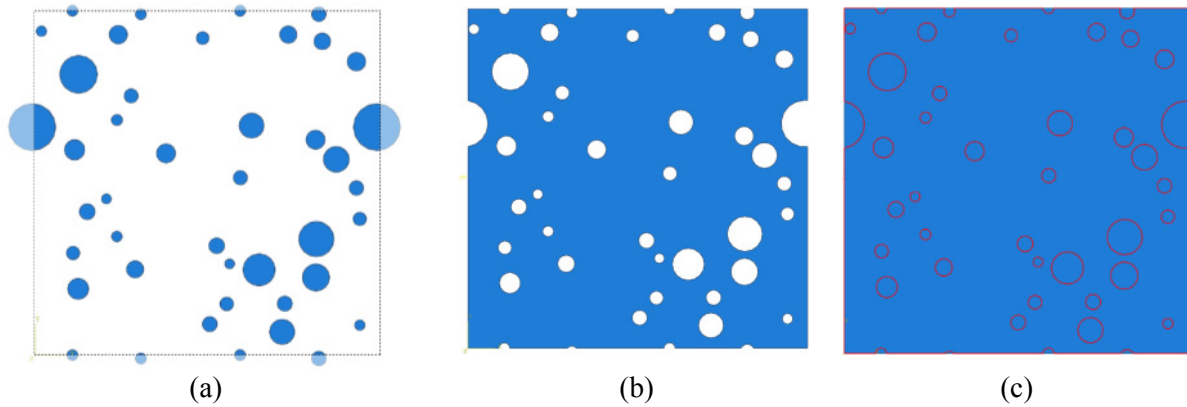


Abbildung 15: Schritte der Erstellung des FE-Gefüges in ABAQUS. Beschneidung der Grundform der Körner (a), die Matrix (b) und das fertige Gefüge (c)

Am Ende dieses Prozesses entsteht ein fertiges geometrisches Modell, in dem jedoch noch keine Kontakte zwischen den Körnern und der Matrix berücksichtigt sind.

4.2.3 Erstellung von polygonförmigen Körnern

Wie anfänglich erwähnt, weicht die Kornform der realen Spinellkörner von der Kugelform ab. Daher wird für eine Simulationsreihe ein Modell mit polygonförmigen Körnern unter folgenden Annahmen erstellt:

- Die Körner werden durch Polygone mit unterschiedlicher Anzahl von Eckpunkten P_n dargestellt. Die minimale Eckanzahl n_{min} ist drei, die maximale n_{max} kann vom Benutzer frei gewählt werden, $n_{min} \leq n \leq n_{max}$.
- Die Eckpunkte befinden sich innerhalb zweier Radien $r_{max} > r_i > r_{min}$. Hier ist r_i der zufällige Radius eines kreisrunden Kornes der aktuellen Kornklasse. r_{max} ist der maximale Radius und r_{min} der innere Radius. Beide Begrenzungen weichen um plus bzw. minus 20 % von r_i ab (diese Abweichung kann für jede Begrenzung verändert werden). Der Mittelpunkt und der Radius $r_i = d_k / 2$ berechnen sich nach Gleichung (24).
- Jeder Eckpunkt P_i liegt zufällig in einem gleichgroßen Sektor eines Kreises mit dem Radius r_i .

Die Aufteilung in gleichgroße Sektoren erfolgt durch die Berechnung des Winkels mit $\alpha = 360^\circ / n$. Innerhalb eines Sektors ist der Winkel α_i zufällig. Die Berechnung von α_i des i -ten Punktes ergibt sich aus der zufälligen Anzahl der Eckpunkte n des Polygons:

$$i \cdot \frac{360^\circ}{n} \leq \alpha_i \leq (i+1) \cdot \frac{360^\circ}{n} \quad (26)$$

Die jeweiligen Eckpunkte P_i des Polygons werden durch den zufälligen Radius r_i , dem Winkel α_i und dem Kornmittelpunkt mit den Koordinaten x_m und y_m erstellt:

$$\begin{aligned} x_i &= \cos(\alpha_i) \cdot r_i + x_m \\ y_i &= \sin(\alpha_i) \cdot r_i + y_m \end{aligned} \quad (27)$$

Die weitere Generierung des Modells wie z. B. das Überprüfen auf Überschneidung bleibt unverändert. Ein nach diesen Annahmen zufällig erstelltes Polygon ($n = 8$) wird in Abbildung 16 gezeigt.

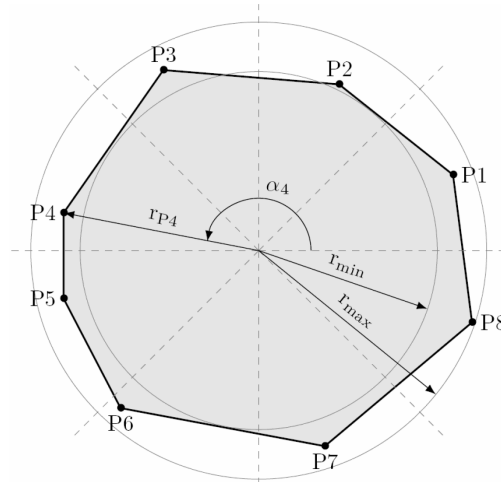


Abbildung 16: Schematische Darstellung eines zufällig generierten Oktagon

Die Berechnung der Korn bzw. Polygonfläche erfolgt nach der Gauß'schen Trapezformel (28).

$$A_{poly} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i \cdot y_{i+1} - x_{i+1} \cdot y_i) \quad (28)$$

Da A_{poly} kleiner als die Fläche eines Kreises mit dem Radius r_i ist, wird die restliche Fläche der Kornfraktion durch eine größere Anzahl an Körnern beschrieben.

4.2.4 Kontaktbeschreibung im FE-Gefüge

Auf die Wichtigkeit der Berücksichtigung des Interfaces wird in vielen Arbeiten hingewiesen. Es kennzeichnet die Grenze eines Kornes oder den Übergang von einem Material zu einem anderen. Needelman untersuchte die Ablösung zwischen Körnern und Matrix an teilweise verbundenen Kontakten [95]. Gegenüber den reinen Komponenten des Gefüges weist das Interface reduzierte mechanische Eigenschaften auf. Gerade bei quasi spröden Materialien zeigen sich hier Ablösungen und Orte der Rissinitiierung. Es ist daher wichtig diese Zone zu berücksichtigen. Ramesh et al. versuchten mittels *GSCS* (siehe Kapitel 3.3.1) den Einfluss der Interfaces zu berechnen [35] [48] [96] [97]. Bei dieser Methode müssen die Abmessungen und die mechanischen Eigenschaften der Interface-Zone bekannt sein. Ein Versuch die Abmessung der Interface-Zone, sowie deren mechanischen Eigenschaften zu bestimmen, wurde als eine herausfordernde Angelegenheit bezeichnet [98]. Bisher sind die Eigenschaften daher weitgehend unbekannt, da sie auch entlang der Korngrenze variieren können. Kim beschreibt die Interface-Zone in seiner Arbeit als eigenständiges Material mit dem *concrete damaged plasticity* Modell und erlaubt ein Versagen durch Zug- und Druckbelastung. In seiner Arbeit führt eine größere Interface-Zone zu einer Zunahme der Sprödigkeit und einer leicht reduzierten Materialfestigkeit [72].

In ABAQUS ist es unter anderem möglich, diese Interface-Zone durch kohäsive Flächen (CS) Abbildung 17 (a) oder durch kohäsive Elemente (CE) Abbildung 17 (b) zu beschreiben. Die Grundlage bildet das in Kapitel 3.3 beschriebene Konzept der kohäsiven Zone.

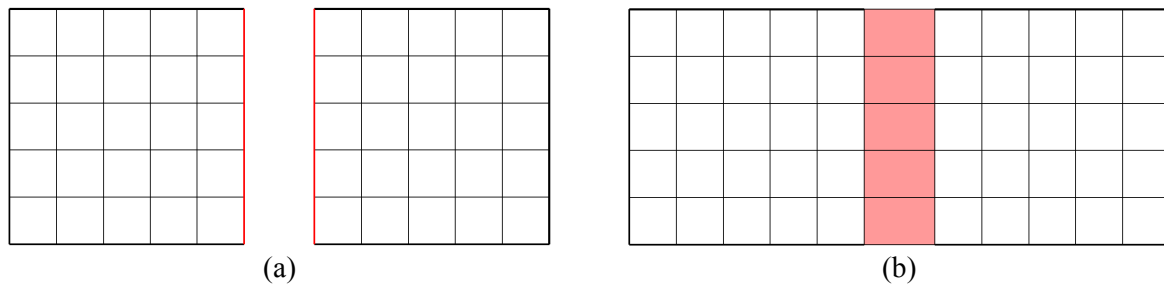


Abbildung 17: Skizze zweier Körper mit einer Kontaktbeschreibung durch (a) eine kohäsive Fläche oder durch (b) kohäsive Elemente

Anhand eines einfachen Modells werden die beiden Methoden zur Beschreibung der Interface-Zone verglichen. Nach einem simulierten Zugversuch soll bei einer gleichen Verschiebung der gleiche Spannungszustand bei gleicher benötigter externer Arbeit W_k vorliegen. Der jeweilige Verlauf der dafür benötigten externen Arbeit ist in Abbildung 18 abgebildet. Es zeigt sich, dass beide Varianten bei gleichem linearem Entfestigungsverhalten auch den identen W_k -Verlauf aufweisen. Ab ca. $30 \mu\text{m}$ wird keine weitere Energie für eine weitere Verschiebung benötigt und die beiden Körper sind getrennt.

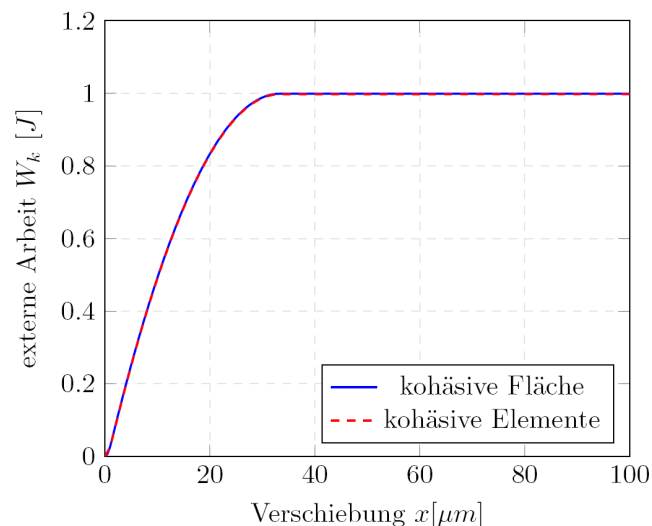


Abbildung 18: Vergleich der benötigten Bruchenergie zwischen kohäsiven Elementen und kohäsiver Fläche

Wie in Abbildung 17 (b) erkenntlich ist, besitzen kohäsive Elemente eine Abmessung und sind eigenständige Objekte im Modell. Im Gegensatz dazu besitzen kohäsive Flächen keine physikalischen Abmessungen. Hier wird die Interface-Zone durch Kontakte mit Kontakteigenschaften definiert. Ähnlich wie auch in Kapitel 3.3 kann das Spannungs/ Verschiebungsverhalten des Interface-Kontakts auf verschiedene Weise in ABAQUS beschrieben werden⁵. Die Anwendung der kohäsiven Flächen ist benutzerfreundlich und ist Ausreichend für Beschreibung der Interface-Zonen. Die kohäsiven Flächen erfordern lediglich die Wahl einer „Master“ und einer „Slave“ Fläche. Diese beiden Flächen regeln das Penetrationsverhalten der teilhabenden Knoten. Die Wahl der *Master*-Fläche sollte auf jenes Objekt fallen, dass eine gröbere Diskretisierung aufweist. In den folgenden Simulationen des M/MA-Spinell Gefüges wird die Kontaktfläche der Körner als *Master*-Fläche gewählt. Informationen über die Einstellmöglichkeiten und den Mechanismus der kohäsiven Flächen sind in Kapitel 5.1.2 sowie in der Dokumentation von ABAQUS zu finden [99].

⁵ Bei der Wahl eines bilinearen Kontaktverhaltens wurde ein - durch SIMULIA bestätigter - Fehler in ABAQUS festgestellt. Eine Separation abweichend von einer linearen Beschreibung führt daher zu falschen Ergebnissen.

4.3 Angewandtes Materialmodell

Die grundlegende Theorie zur Entstehung von Mikro-Rissen durch eine Temperaturänderung beruht auf unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten der Materialbestandteile [100]. Bei Raumtemperatur ist der Ausdehnungskoeffizient bei Magnesia α_{MgO} etwa doppelt so groß wie jener von Spinell $\alpha_{Spinell}$ [101] [102]. Die Rissbildung in einem M/MA-Spinell während des Abkühlens nach dem ersten Brand ist in Abbildung 19 schematisch dargestellt.

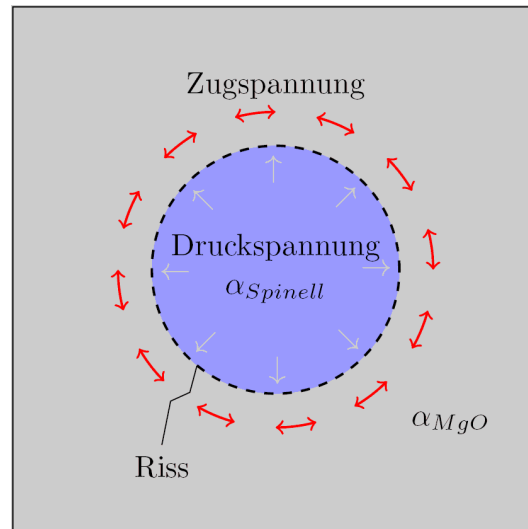


Abbildung 19: Auftretende Spannungen im M/MA-Spinell beim Abkühlvorgang

Mit sinkender Temperatur kontrahiert Magnesia stärker als Spinell und erzeugt radiale Druckspannungen in den Körnern. Der unmittelbare Bereich um ein Korn erfährt dadurch eine Zugspannung die beim Erreichen der Materialfestigkeit zur Rissinitiierung führt. Die Zugspannungen sind am Materialübergang, also im Interface, am größten.

Um dieses thermo-mechanische Verhalten des heterogenen M/MA-Spinell Gefüges zu beschreiben, wurde das in der Software ABAQUS bereitgestellte *concrete damaged plasticity* (CDP) Materialmodell verwendet. Die Grundlage des CDP Modells bildet die Arbeit von Lubliner [79] und die Modifikationen durch Fenves [73], die eine unterschiedliche Entwicklung der Zug- und Druckfestigkeit durch ein Plastizitäts-Modell erlauben. Für das Entfestigungsverhalten nach Rissinitiierung wird das Konzept von Hillerborg [15] unter Verwendung der spezifischen Bruchenergie G_f herangezogen (siehe Kapitel 3.3). Es ist in der Lage das Versagen unter Zug- und Druckbelastungen von Beton und anderen quasi-spröden Materialien ausreichend genau zu beschreiben. Beide Materialien, M/MA-Spinell und Beton, besitzen ein ähnliches Gefüge und ein vergleichbar sprödes Verhalten unter Zug- und Druckbelastung [99]. In Abbildung 20 wird das Zugverhalten des CDP-Modells dargestellt.

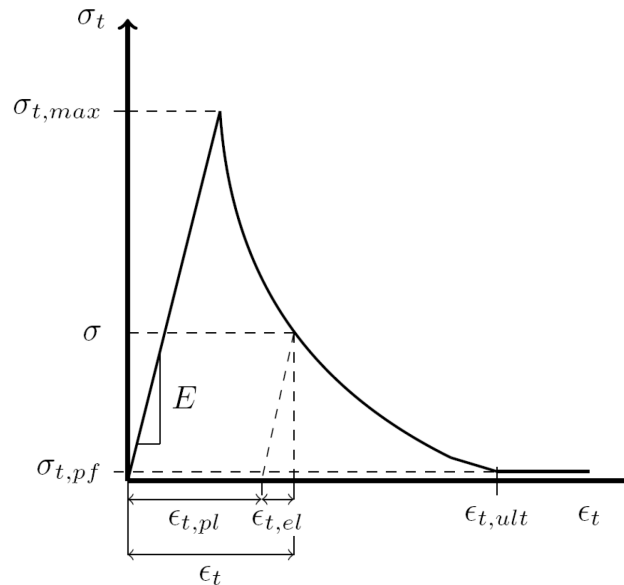


Abbildung 20: Spannungs-Dehnungs-Verhalten des *concrete damaged plasticity* Modells unter ein-axialem Zug

Bis zum Erreichen der Zugfestigkeit $\sigma_{t,max}$ verhält sich das Material linear-elastisch und die Dehnung ϵ_t entspricht der elastischen Dehnung $\epsilon_{t,el} = \sigma_t / E$. Mit fortlaufender Belastung tritt eine Entfestigung ein, die eine Reduktion der Spannung unter Verbrauch der spezifischen Bruchenergie G_f verursacht. Die totale Dehnung ϵ_t setzt sich, wie in Abbildung 20 gezeigt, aus der elastischen und der plastischen Dehnung $\epsilon_{t,pl}$ zusammen, $\epsilon_t = \epsilon_{t,pl} + \epsilon_{t,el}$. Die plastische Dehnung $\epsilon_{t,pl}$ kennzeichnet die Rissentwicklung in einem Element unter Verbrauch der jeweiligen zugewiesenen spezifischen Bruchenergie des Elements. Die plastische Dehnung wird aus der Rissöffnungsverschiebung x_t und einer Länge l_0 berechnet. Diese Länge wird benötigt, um die Spannungs-Verschiebungs-Beziehung nach Hillerborg in eine Spannungs-Dehnungs-Beziehung zu transformieren. Laut Dokumentation der Software [99] wird l_0 automatisch berechnet⁶. Dabei ist l_0 abhängig vom Seitenverhältnis (*aspect ratio*) des Elements. Für quadratische Elemente mit linearer Interpolationsfunktion (*first order*) entspricht l_0 der Seitenlänge des Elements, für quadratische Elemente mit quadratischer Interpolationsfunktion (*second order*) besitzt l_0 die halbe Elementlänge. Mit abweichendem *aspect ratio* von Eins, ergibt sich eine Abhängigkeit der Länge l_0 von der Diskretisierung. Mithilfe dieser Länge wird die spezifische Bruchenergie der jeweiligen Elemente $G_{f,Element}$ berechnet:

$$G_{f,Element} = G_f \cdot \frac{l_0}{l} \quad (29)$$

Dazu wird die spez. Bruchenergie G_f mit l_0 multipliziert und durch eine Einheitslänge l' dividiert. Die spezifische Bruchenergie kann in ABAQUS direkt durch einen Wert G_f und einer Zugfestigkeit $\sigma_{t,max}$, oder durch eine Tabelle von Spannungs- spez. Bruchenergie-Werten angegeben werden⁷. Durch die Eingabe von $\sigma_t - G_f$ Werten können die verschiedenen Entfestigungsverhalten aus Abbildung 5 realisiert werden.

⁶ Aus der Dokumentation geht jedoch nicht hervor wie sich diese Länge berechnet.

⁷ Es besteht auch die Möglichkeit das Entfestigungsverhalten durch Spannungs-Dehnungs-Werte oder Verschiebungs-Dehnungs-Werte zu definieren.

Es ist zu erwähnen, dass die Software ein unteres Spannungslimit vorgibt und damit eine komplette Entlastung eines geschädigten Elements nicht möglich ist. Dies soll der Vermeidung von potentiellen numerischen Problemen dienen. Das untere Spannungslimit $\sigma_{t,pf}$ wird auf 1/100 der Festigkeit begrenzt $\sigma_{t,pf} \geq \sigma_{t,max}/100$. Das heißt, dass ein Element, das bereits seine Bruchenergie verbraucht hat und eigentlich spannungsfrei sein sollte, weiterhin einen Widerstand gegen eine Verschiebung aufweist. Die Folge dieses Limits ist eine stetige Zunahme konsumierter Energie bei fortlaufender Dehnung.

Eine Erläuterung der grundlegenden theoretischen Überlegungen zum CDP Modell befinden sich in der Dokumentation von ABAQUS [99].

5 FE-Simulation der Mikro-Rissbildung in einem M/MA-Spinell Gefüge

In einem M/MA-Spinell Gefüge wird anhand eines FE-Modells eine Mikro-Rissbildung mit der Software ABAQUS simuliert. Das Modell des Gefüges wird nach dem in Kapitel 4.2 beschriebenen Schema mit Hilfe eines Python-Scripts [103] automatisch erstellt. Für die Modellerstellung und die Simulation werden verschiedene Parameter und Variablen benötigt, die unter anderem z.B. die Diskretisierung des FE-Modelles, oder die Größe der Inkremente regeln. Einige dieser Parameter beeinflussen direkt das Modell, andere, modellunabhängige Parameter sind für die nachfolgende Auswertung von Bedeutung. Anhand eines Simulationsbeispiels werden der Spannungszustand und die Energieaufteilung bei der Bildung der Risse im M/MA-Spinell Gefüge betrachtet. Die Simulation erfolgt durch eine transiente *coupled temp-displacement* Berechnung mit einem *Newton-Raphson*-Verfahren [99].

5.1 Erstellen des Modells

Für die Simulation werden variable Parameter benötigt die einen direkten Einfluss auf das Ergebnis ausüben, wie z.B. die Größe des RVE, und zur Untersuchung des Modells und dessen Verhalten dienen. Andere, fixe Parameter beeinflussen das Lösen des Gleichungssystems und sollten weitgehend keinen Einfluss auf das Ergebnis haben. Die letztgenannten Parameter dienen vor allem das Konvergenzverhalten zu verbessern. Zur Durchführung der Simulation ist es weiter notwendig, das FE-Gefüge zu diskretisieren, die periodischen Randbedingungen zu erstellen sowie dem Modell die Eigenschaften des Materials inklusive der Startbedingungen zuzuweisen.

5.1.1 Variable Parameter des Scripts

Mit dem Starten des Scripts in ABAQUS wird der Benutzer aufgefordert notwendige Parameter für die Simulation einzugeben. Die Eingabe erfolgt in zwei Schritten. In einem ersten Schritt sind Parameter für die Erstellung des FE-Modells, wie die Abmessung des Modells, die Start- und Endtemperatur oder die Materialkennwerte, festzulegen. Bei der Eingabe wird ein Vorgabewert vorgeschlagen. In Tabelle 3 sind die ersten benötigten Variablen und ihre vorgegebenen Werte inklusive einer kurzen Erklärung aufgelistet.

Tabelle 3: Notwendige Parameter für die Erstellung des FE-Modells

| Eingabeaufforderung | Vorgabe | Bedeutung & Anmerkung |
|--------------------------------|---------|--|
| Abmessung des Modells a [mm] | 35 | Festlegung der Kantenlänge des Modells, minimale Kantenlänge nach Gleichung (22) |
| Starttemperatur T_0 [°C] | 1200 | Temperatur des Modells zu Beginn der Simulation, bei der Spannungsfreiheit angenommen wird |
| Endtemperatur T_{end} [°C] | 25 | Temperatur des Modells am Ende der Simulation |
| Spinell-Gehalt vol [%] | 10 | Anteil der Spinell-Körner an der Gesamtfläche |
| Diskretisierungsgröße ms [m] | 0,0004 | Elementgröße des Modells, Anzahl der Elemente ist indirekt proportional zum Quadrat des Wertes |

Optional kann die Kornklassenverteilung durch die Eingabe von neuen Korndurchmessern in der Eingabeaufforderung geändert werden. Die Anzahl von fünf Kornklassen orientiert sich an üblichen Rezepturen, kann prinzipiell um eine beliebige Anzahl erweitert werden.

In einer zweiten Eingabeaufforderung werden die materialspezifischen Kennwerte sowie die Kontakteigenschaften abgefragt. Die vorgeschlagenen Vorgabewerte sind in Tabelle 4 angegebenen.

Tabelle 4: Erforderliche Materialparameter:

| Eingabeaufforderung | Vorgabe |
|--|---------|
| Zugfestigkeit der Matrix σ_t [MPa] | 7 |
| E -Modul der Matrix [GPa] | 110 |
| Spezifische Bruchenergie der Matrix $G_{f,M}$ [Nm^{-1}] | 100 |
| Kontakt-Festigkeit $\sigma_{t,c}$ [MPa] | 7 |
| Kontakt-Bruchenergie $G_{f,c}$ [Nm^{-1}] | 100 |

Nach Bestätigen der zweiten Eingabeaufforderung wird das Modell erstellt. Sollte ein Fehler auftreten wird der Benutzer darauf hingewiesen und es besteht die Möglichkeit einer erneuten Parametereingabe und das Script erneut zu starten.

5.1.2 Fixe Parameter des Scripts

Neben den variablen Parametern, die vor dem Simulationsstart abgefragt werden, sollten die fixen Parameter nur unter großer Vorsicht im Script verändert werden. Eine unbedachte Änderung kann zu einer numerischen Instabilität führen. Die fixen Parameter werden wie folgt in drei Gruppen eingeteilt:

System-Variablen:

Die System-Variablen beeinflussen das Konvergenzverhalten und die Stabilität der Simulation. Eine Änderung dieser Variablen sollte nur einen geringen Einfluss auf die Ergebnisse ausüben. Im Script-Ausschnitt Code 1 sind fünf solcher System-Variablen aufgelistet.

```
# System Variable
#-----
stab=1          #1:  Stabilisation (0.0001; 0.01)
                #2:  Stabilisation (0.0002; 0.05)
                #3:  Stabilisation None

CB=20          # Anzahl der Iterationsversuche
CF=0.05        # Cut-Back Faktor

# Schreiben des Outputs alle x Unterteilungen:
OP_time_C=10.0 # (COOLING)
OP_time_T=2.0  # (TENSILE)
#-----
```

Code 1: System Variable

Die erste im Script-Ausschnitt Code 1 Variable *stab* regelt die Stabilisation der Lösung. Dabei wird die Energie des Modells verändert um das Konvergenzverhalten zu verbessern. In ABAQUS steht eine automatische Stabilisation zur Verfügung, es können jedoch auch beliebige Wertegewählt werden. Kleine Werte sind zu bevorzugen, da sie zunehmend Einfluss auf das Ergebnis haben können. Im Script wird durch die Variable *stab* semi-automatisch zwischen drei verschiedenen Modi gewechselt. Als Vorgabe wird für die *dissipated energy fraction*: 0,0001 und für die *adaptive stabilization with max. ratio of stabilization to strain energy*: 0,01 gewählt, es handelt sich also jeweils um Anteile im Modell tatsächlich vorhandener Energien.

Die zweite und dritte System-Variable CB und CF regeln die Anzahl der Lösungsversuche und den Faktor zur Verminderung der Iterationsschrittweite, die für das Lösen des Gleichungssystems notwendig sind. Je schneller eine stabile Lösung gefunden wird, desto größer können die Inkremente sein. Führt ein Iterationsschritt zu keinem stabilen Ergebnis, also zur Konvergenz, wird die aktuelle Inkrement-Größe mit dem *Cut-Back* Faktor CF multipliziert und die Berechnung erneut durchgeführt. Die Anzahl der Versuche zur Lösungsfindung wird mit der Variable CB (*Cut-Backs*) geregelt.

Die letzten beiden Variablen OP_time_C und OP_time_T bestimmen die Zeitpunkte bzw. die Anzahl der Intervalle, in welchen Ergebnisse später zur Verfügung stehen. Für den Kühlungsversuch ist OP_time_C und für den Zugversuch ist OP_time_T ausschlaggebend. Je kleiner diese Werte sind, desto mehr Ergebnisse stehen später zur Verfügung. Der voreingestellte Wert von z.B. $OP_time_C = 10$ zeichnet alle $\Delta T = 10$ °C ein Zwischenergebnis auf. Im Falle des Kühlversuchs ist das ausreichend. Aufgrund des steilen Spannungsanstieges am Beginn des Zugversuches wird hier vorgeschlagen jeden zweiten Schritt aufzuzeichnen. Der benötigte Speicherplatz steigt mit der Anzahl der ausgeschriebenen Ergebnisse.

Modell-Variablen:

Die zweite Gruppe regelt das Verhalten des *concrete damaged plasticity* Modells. Das CDP Modell benötigt einen Dilatationswinkel Ψ , eine Exzentrizität ε , das Verhältnis der equibiaxialen Yield-Druckspannung zu der initialen uniaxialen Yield-Druckspannung f_{b0}/f_{c0} , den Wert des Spannungsinvariants K_c und einen Viskositäts-Parameter ν . Die verwendeten Werte des Scripts sind in dieser Reihenfolge in Code 2 angeführt.

```
AM.materials['Matrix_m'].ConcreteDamagedPlasticity(table=((10.0, 0.1, 1.16, 0.6667, 0.0),))
```

Code 2: Einstellungen des CDP Modells

Auf eine nähere Erläuterung der Parameter wird hier verzichtet. Ein ausführliche Beschreibung und Bedeutung der genannten Variablen erfolgt in der Softwaredokumentation [99] und in [104]. Die verwendeten Werte entsprechen den vorgeschlagenen Werten von ABAQUS für Beton. Zusätzlich zu den variablen Materialwerten aus Tabelle 4, sind die Druckfestigkeit σ_c , der thermische Ausdehnungskoeffizient α , die Poisson's Zahl ν und die inelastische Dehnung bei Druckversagen $\varepsilon_{c,in}$ als Materialeigenschaften anzugeben. Diese Materialkennwerte sind in Tabelle 5 angegeben.

Tabelle 5: Fixe Materialwerte des Modells

| Materialkennwert | | | Matrix | Spinell |
|------------------------------------|----------------------|--------------------------------------|--------|---------|
| Poisson's Zahl | ν | [-] | 0,17 | 0,24 |
| thermischer Ausdehnungskoeffizient | α | [10 ⁻⁶ ·K ⁻¹] | 13,6 | 7,6 |
| Druckfestigkeit | σ_c | [GPa] | 80 | - |
| Inelastische Druckdehnung | $\varepsilon_{c,in}$ | [-] | 0 | - |
| E-Modul | E | [GPa] | 110 | 210 |

Aufgrund des isothermen Verhaltens des Modelles während der Abkühlung sind die Wärmeleitfähigkeit λ (k), die Dichte ρ und die spezifische Wärmekapazität c_p beliebig wählbar.

Kontakt-Variablen:

Die Kontakt-Variablen beziehen sich ausschließlich auf die Definitionen des Interfaces im ABAQUS Menü *Interactions*. Wie in Kapitel 4.2.4 erwähnt sind für die Kontaktbeschreibung durch kohäsive Flächen zwei berührende Flächen, *Master* und *Slave*, anzugeben. In Code 3 erfolgt die Wahl durch die Variable *msinter*.

Die Fläche des Kornes wird dabei als *Master*- und die der Matrix als *Slave*-Fläche deklariert. Die Art der Kontaktverfolgung kann durch ein *finite sliding* oder *small sliding* gewählt werden. Standardmäßig wird das numerisch einfachere *small sliding* verwendet. Die Art der Kontaktverknüpfung wird mit der *discretization method* und der Variable *discret* bestimmt. Als Standardauswahl wird hier *NODE_TO_SURFACE* verwendet. Die Unterschiede der Kontakt-Variablen sind kurz im Appendix B und ausführlich in der Software Dokumentation von ABAQUS [99] zu finden.

```
# Kontakt Variablen
#=====
# Die Wahl NODE_TO_SURFACE und FINITE ist nicht moeglich

# Wahl der Master-Surface Beziehung
# 1 = Matrix ist die Masterflaeche
# 2 = Grain ist die Masterflaeche
msinter = 2

# Wahl der Diskretisierung
# SURFACE_TO_SURFACE          zeigt Probleme
# NODE_TO_SURFACE
discret = NODE_TO_SURFACE

# Wahl des Slidings
# SMALL          simpler, Salve Node darf sich nur gering vom Master verschieben
# FINITE         aufwendiger
rutschen = SMALL
```

Code 3: Grundlegende Einstellungen der *Surface-to-Surface*-Kontakte

In den Simulationen wird das Interface für jedes einzelne Korn und dessen Kontakt mit der Matrix über eine kohäsive Fläche beschrieben. Für jeden dieser Kontakte ist eine eindeutige Bezeichnung der Berührungsflächen, *Master* und *Slave*, nötig. Diese Aufgabe wird ebenfalls vollautomatisch durch das Python-Script durchgeführt. Die Kontakteigenschaften werden jedoch global zugewiesen. Bei Bedarf können manuell abweichende Kontakteigenschaften erstellt und gezielt Kontakten zugewiesen werden.

5.1.3 Diskretisierung, Erstellen der PRB und Zuweisen der Materialeigenschaften

Die Diskretisierung der zwei Teile des Gefüges (*Körner* und *Matrix*) erfolgt durch einen *advanced front* Algorithmus unter der Bedingung, quadratische Elemente dreieckigen vorzuziehen. Durch die Diskretisierung wird das Gefüge in kleinere Elemente, die das FE-Netz bilden, unterteilt. Die verwendeten Elemente sind in ABAQUS unter der Bezeichnung *Coupled temperature-displacement generalized plane strain elements* (CPEG4T/ CPEG3T) zu finden und ermöglichen eine Kopplung der thermischen und mechanischen Belastung [99]. Die Wahl von *CPEG* benötigt eine Abmessung in die dritte Dimension um eine gleichgroße Dehnung aller Elemente in diese zu bewirken (*generalized plane strain*). Die Zuweisung der Länge der dritten Dimension erfolgt nach dem Erstellen des FE-Netzes. Diese Abmessung ist für die 2D-Betrachtung frei zu wählen.

Zur Herstellung der periodischen Randbedingungen (siehe Kapitel 4.1), durchläuft das Script in einer Schleife jeden Knoten aller vier Ränder und weist ihnen eine eindeutige Bezeichnung zu. Am Ende dieser Schleife wird überprüft, ob die Anzahl der Knoten für gegenüberliegende Seiten gleich ist. Ungleiche Knotenanzahl führt zu einem fehlerhaften Modell und der Benutzer erhält eine Aufforderung das Script neu zu starten. Gründe die zu einer unterschiedlichen Knotenanzahl führen sind z.B. Körner die sehr nahe an Ecken liegen und dort Elemente verzerren, oder eine zu feine bzw. eine schlechte Vernetzungsqualität.

Ist das Kriterium gleicher Knotenanzahl erfüllt, wird überprüft ob die Knotenpaare auf einer Projektionslinie liegen. Bei einer geringen geometrischen Abweichung wird einer der betroffenen Knoten um diese Differenz verschoben.

Im nachfolgenden Schritt wird das Gleichungssystem der periodischen Randbedingungen mit den dazugehörigen vier Referenzpunkten erstellt. Die Anzahl der benötigten Gleichungen Gl berechnet sich durch die Anzahl der Knoten kn zweier Seiten:

$$Gl = 2 \cdot (kn_{\Gamma_{12}} + kn_{\Gamma_{14}}) - 2 \quad (30)$$

Das Gleichungssystem (18) für die Beschreibung der PRB in Kapitel 4.1 würde in ABAQUS zu einer Überbestimmung des Systems führen, weswegen zwei Gleichungen für einen Eckpunkt gelöscht werden müssen.

5.1.4 Rahmen- und Endbedingungen der Simulation

Die Initialbedingungen beschreiben den Anfangszustand des Modells vor Beginn der Simulation. Sie beinhalten die Starttemperatur des Gefüges, die Gleichungen der periodischen Randbedingungen sowie die Eigenschaften der Kontakte und die der Materialien. Die Endbedingung bestimmt die Temperatur im Gefüge am Ende des Abkühlvorgangs. Die Simulation wird in Inkremente unterteilt. Per Definition entspricht das letzte Inkremente N dem numerischen Wert der Starttemperatur. Zusätzlich wird die Temperaturänderung in Kelvin je Inkrement definiert, mit der die Endtemperatur von 25 °C erreicht werden soll. Für jedes Inkrement i wird dem Modell eine Temperatur zugewiesen, für die die mechanische FE-Simulation durchgeführt wird. Die Temperatur T_i im Inkrement i berechnet sich wie folgt:

$$T_i = T_{start} - i \cdot \Delta T \quad \text{mit} \quad \Delta T = \frac{T_{start} - T_{ende}}{N} \quad (31)$$

Anschließend an die Kühlung wird ein Zugversuch simuliert. Die gesamte Verschiebung des Zugversuches beträgt 0,05 mm und die zuvor erzielte thermische Längenänderung der Abkühlsimulation. Die Verschiebung wird über die jeweiligen Referenzpunkte (RP^{11} und RP^{22} , siehe Kapitel 4.1) aufgebracht.

Die maximale Größe und die Anzahl der Inkremente sind von der Stabilität abhängig und können vom Benutzer begrenzt werden. Während der Berechnung wird automatisch versucht die Inkremente zu vergrößern um die Simulation zu beschleunigen. Bei Konvergenzproblemen wird das Inkrement verkleinert und erneut versucht das Gleichungssystem zu lösen. Aufgrund von Konvergenzproblemen wurde die standardmäßige Verkleinerung der Inkrementgröße von 25 % auf 5%, und die Anzahl der Versuche (*cut-backs*) für ein neues stabiles Ergebnis von fünf auf 20 verändert.

Die Aufzeichnung der Ergebnisse der Kühlsimulation erfolgt nach jeder Abkühlung um 10 °C. Am Beginn des Zugversuches werden alle 0,04 % der Gesamtverschiebung Ergebnisse aufgezeichnet. Durch dieses Vorgehen kann die Spannungs-Dehnungskurve ausreichend erfasst werden. Ab einem Anteil von 4 % verringert sich die Aufzeichnungsrate auf 0,4 % bis 100 % der Verschiebung erreicht sind. Durch eine Verringerung der Variablen in Code 1 kann die Aufzeichnungsrate erhöht werden. Durch diese Maßnahme wird Speicherplatz gespart ohne Informationen zu verlieren. Ein weiterer Vorteil ist die beschleunigte Auswertung der Ergebnisse.

5.2 Kriterium des Bruchs und Auswertung des Zugversuchs

Wie in Kapitel 4.3 beschrieben besitzt das CDP eine untere Spannungsgrenze $\sigma_{t,pf}$ die auch bei fortlaufender Verschiebung zu einer Zunahme der konsumierten Energie, und daher der Bruchenergie des Gefüges $G_{f,G}$, führt. Dadurch kann kein eindeutiger Punkt bestimmt werden an dem das Gefüge als geteilt angesehen werden kann. Für die Simulationen wurde daher der Gradient der Spannungsänderung, $\partial\sigma_t/\partial x$, verwendet. Ist er Null, wird von einer vollständigen Trennung des Gefüges ausgegangen. Für den Fall, dass der Gradient Null nicht erreicht, wird ein erweitertes Abbruchkriterium angewendet. Entspricht der Betrag des Gradienten $\partial\sigma_t/\partial x$ dem Wert 0,5 ‰ der zweiten Ableitung im Ursprung und bleibt die Spannung auf einem niedrigen Niveau konstant, wird dieser Punkt als Auswertekriterium gewählt. In Abbildung 21 sind ein typischer Verlauf der Spannung, die Zunahme der Bruchenergie und die Annäherung des Spannungsgradienten an Null dargestellt. Die Kurven der Dehnung und der Bruchenergie sind auf die Werte, die bei der Anwendung des Abbruchkriteriums vorliegen, normiert. Wie erwähnt, nimmt $G_{f,G}$ fälschlicher Weise nach Erreichen von ε_{Bruch} durch die untere Spannungsgrenze weiter zu. Die Änderung des Spannungsgradienten ist ab der maximalen Zugspannung negativ und nähert sich mit Erreichen der Bruchdehnung ε_{Bruch} gegen Null an.

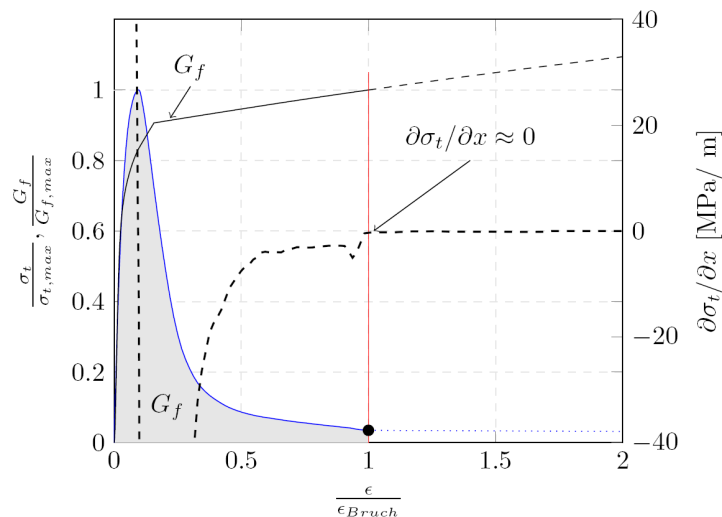


Abbildung 21: Änderung des Spannungsgradienten als Abbruchkriterium für den Zugversuch

Die Spannungs-Dehnungskurve wird aus der erhaltenen Kraft-Verschiebungs-Kurve ($F_i - \Delta_i$) des Zugversuches erhalten. Die Berechnung der Dehnung ε_i und der Spannung σ_i erfolgt nach folgender Formel:

$$\sigma_i = \frac{F_i}{A_{cross}} \quad \text{und} \quad \varepsilon_i = \frac{\Delta_i}{a'_i} \quad (32)$$

Hier entspricht F_i der aufgezeichneten Kraft des um Δ_i verschobenen Referenzpunktes RP^{ij} in i Richtung und A_{cross} der projizierte Querschnittsfläche des kalten Materials. Die Querschnittsfläche A_{cross} berechnet sich dabei aus der Modellkante a'_j im kalten Zustand und der Ausdehnung des Gefüges in die dritte Richtung s , ($A_{cross} = s \cdot a'_j$). Die Zugfestigkeit des Materials $\sigma_{t,max}$ berechnet sich aus der maximalen aufgezeichneten Kraft F_{max} . Das Integral über die Kraft-Verschiebungskurve wird in ABAQUS automatisch berechnet und liefert die benötigte externe aufgebrauchte Energie, die in weiterer Folge für die Berechnung der spezifischen Bruchenergie benötigt wird.

Der E -Modul des erkalteten Materials wird aus der ersten Steigung der Kurve bestimmt. Wie in Abbildung 21 zu sehen ist, verhält sich das Material mit zunehmender Dehnung nicht linear. Kurz vor dem Erreichen der Materialfestigkeit lokalisiert ein Riss in einer Bruchzone. Beim Überschreiten der Festigkeit bewirkt die schnell vorschreitende Entfestigung in der Bruchzone den beobachteten steilen Spannungsabfall.

5.3 Simulationsbeispiel

Aufgrund der Beanspruchung während des Kühlens und des anschließenden Zugversuches kommt es hauptsächlich zu Zugbeanspruchung des Gefüges. Die betrachteten Gefügekomponenten verhalten sich nach Modelldefinition im Druckbereich linear elastisch. Zur Illustration des Materialverhaltens wird im Folgenden ein Beispiel für die Entwicklung von Spannungen in einzelnen Elementen sowie eine energetische Betrachtung an einem Simulationsmodell gezeigt.

5.3.1 Typische Spannungsverläufe in Elementen der Matrix

Die Entwicklung thermischer Spannungen ist neben der Temperatur auch vom Abstand der Spinell-Körner zueinander abhängig, da sich um die Körner Zugspannungsbereiche bilden. In Abbildung 22 (a – c) wird die Rissentwicklung in einem Gefüge bei verschiedenen Temperaturen gezeigt.

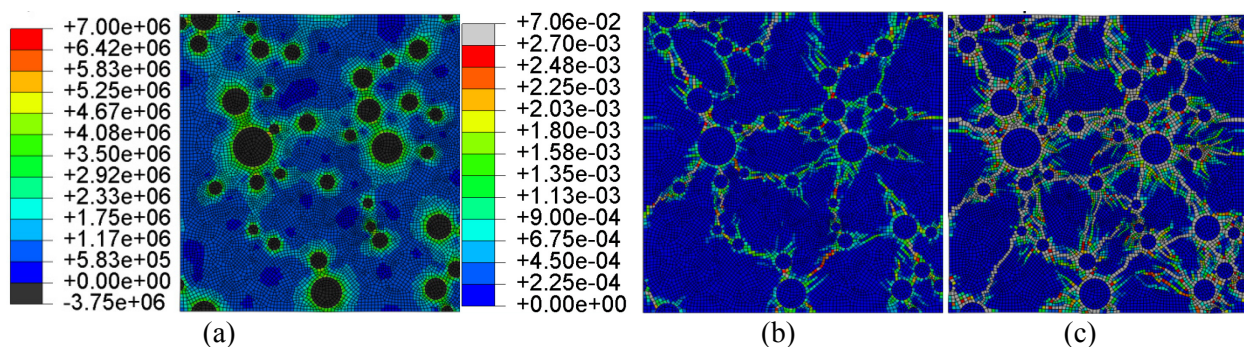


Abbildung 22: Spannungszustand in MPa der Abkühlsimulation nach $\Delta T = 10 \text{ °C}$ (a) und Ausbildung irreversibler Dehnungen nach $\Delta T = 200 \text{ °C}$ (b) bzw. 1175 °C (c)

Wie in Abbildung 22 (a) zu sehen ist, wird die Zugfestigkeit der Matrix (7 MPa) in einigen Elementen des Modells bereits nach einer Temperaturdifferenz von $\Delta T = 10 \text{ °C}$ überschritten. Die Spinell-Körner befinden sich zu diesem Zeitpunkt unter Druckspannungen. Mit fortgeschrittener Kühlung entsteht ein dichter werdendes Rissnetzwerk zwischen den Körnern. Dies ist in Abbildung 22 (b) und (c) durch irreversible Dehnungen dargestellt. Bis zum Erreichen der Endtemperatur entsteht ein Rissnetzwerk im Gefüge. In allen Abbildungen werden Zonen sichtbar, die keine irreversible Dehnungen aufweisen. Um die Ortsabhängigkeit zu verdeutlichen wird der Spannungsverlauf zweier Elemente verglichen. Abbildung 23 zeigt den Spannungsverlauf beider Elemente während des Kühlvorgangs bzw. des anschließenden Zugversuches.

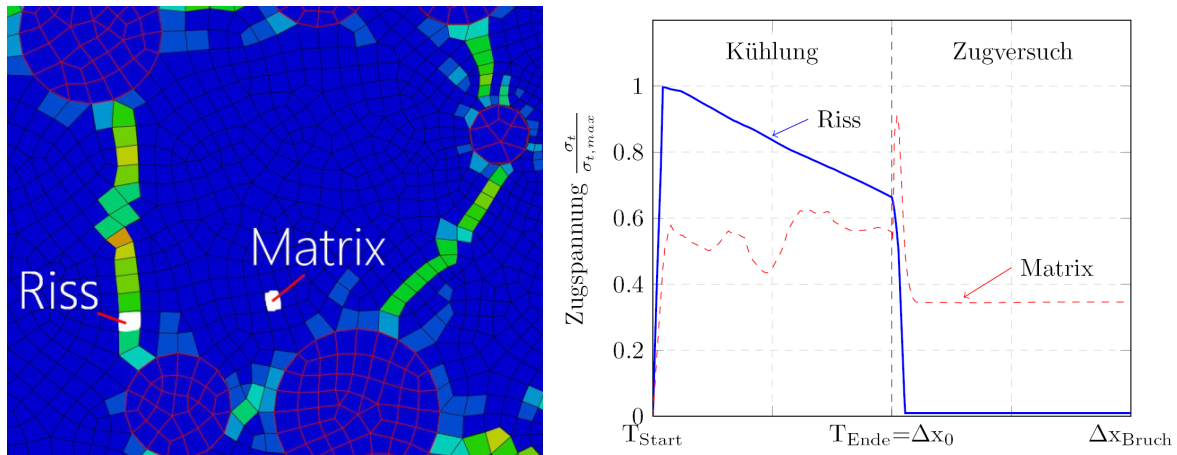


Abbildung 23: Unterschiedliche Spannungsverläufe zweier Elemente während des Abkühlens und des Zugversuches

Wie im Spannungsverlauf des als „Matrix“ bezeichneten Elements zu erkennen ist, erreicht es im Gegensatz zum „Riss“-Element nie die Zugfestigkeit. Mit Beginn des Zugversuches steigt die Spannung stark an, die Zugfestigkeit wird aber wieder nicht erreicht. Im Gegensatz dazu erreicht das „Riss“-Element, das Teil des zukünftigen Makro-Risses ist, die Materialfestigkeit früh. Anschließend zeigt das „Riss“-Element während des Kühlens einen linearen Spannungsabfall. Durch den Zugversuch entfestigt es sich bereits nach geringer Verschiebung und weist am Ende die Restfestigkeit $\sigma_{t,pf}$ auf (siehe Kapitel 4.3). Während der Verschiebung von $\Delta x_0 = 0$ bis $\Delta x_0 = \Delta x_{Bruch}$ erreicht auch das „Matrix“-Element einen höheren Spannungszustand.

5.3.2 Energiebetrachtung für Kühlung und Zugversuch

Durch die Simulation der Kühlung entstehen Zugspannungen im Material, die bis zum Erreichen der Zugfestigkeit linear elastisch, also reversibel sind. Nach dem Erreichen der Zugfestigkeit beginnt das irreversible Entfestigungsverhalten des Materials. Der Verlauf der elastischen Energie im Modell und der vom Modell konsumierten Bruchenergie sind für „Kühlung“ und „Zugversuch“ in Abbildung 24 dargestellt. Die verwendeten Kontakteigenschaften für das Modell *Abb.24* sind $\sigma_{t,c} = 7 \text{ MPa}$ und $G_{f,c} = 10 \text{ Nm}^{-1}$. Die Energien sind auf die konsumierte irreversible Energie bei Erreichen des Bruchkriteriums normiert.

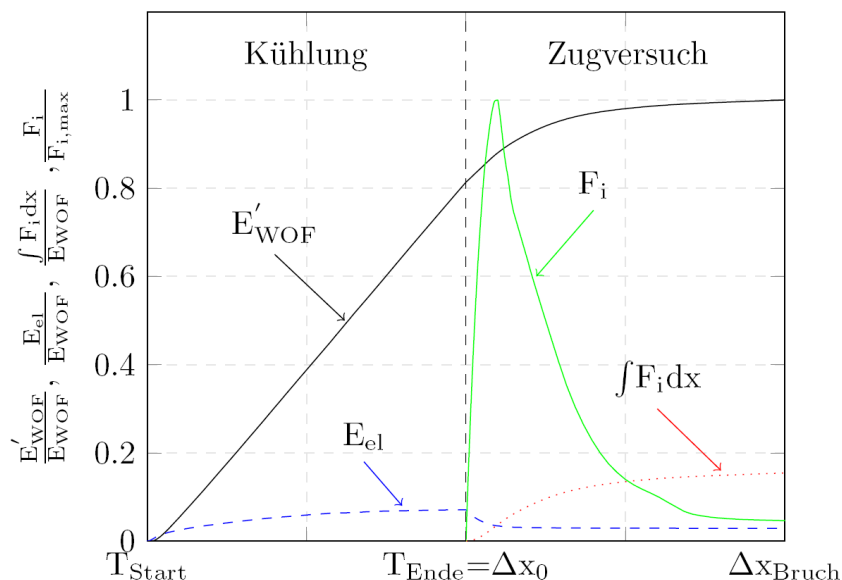


Abbildung 24: Energien während „Kühlung“ und „Zugversuch“

Energieverlauf während der Kühlung

Anhand der obigen Grafik ist zu erkennen, dass bis zum Erreichen der Endtemperatur T_{Ende} (25 °C), und unter Bildung des Rissnetzwerkes, die Bruchenergie E_{WOF} (der Index *WOF* steht für *work of fracture*) linear ansteigt. Die elastische Energie E_{el} nimmt währenddessen nur sehr gering zu und ist um über 90 % kleiner als die Bruchenergie. Mit Beginn des Zugversuches sinkt E_{el} auf ein Niveau das sich bis zum Erreichen von T_{Ende} kaum ändert.

Energieverlauf während des Zugversuchs

Für den Zugversuch wird eine externe Kraft F_i aufgewandt um das Gefüge unter Bildung eines Makro-Risses zu trennen. Die Kraft F_i steigt mit zunehmender Verschiebung bis zum Erreichen der Modell-Festigkeit steil an und verursacht den Makro-Riss. Mit der Lokalisierung des Makro-Risses wird das Gefüge in vielen Gebieten entlastet und es kommt zu einem Rückgang der elastischen Energie. Mit fortlaufender Verschiebung sinkt die benötigte Kraft und läuft am Ende flach aus. Die Fläche unter der Last-Verschiebungskurve $\int F_i dx$ entspricht der externen benötigten Energie für die Trennung in zwei Teile. Mit der Division durch die neugebildete Bruchfläche A_{cross} erhält ergibt sich die spezifischen Bruchenergie des Gefügs $G_{f,G} = 1/A_{cross} \cdot \int F_i dx$ des Materials.

In Abbildung 24 ist weiter zu erkennen, dass am Ende der Simulation ca. 80 % von E_{WOF} aus dem Kühlvorgang und der Rest aus dem Zugversuch stammen. Dieses Verhältnis ist an vier weiteren Simulationen (*A*, *B*, *C* und *D*) genauer untersucht worden. Dafür wurden an ein und demselben Gefüge die spezifische Bruchenergie und die Kontakteigenschaften variiert. Die Modelleigenschaften sind in Tabelle 6 angeführt.

Tabelle 6: Eigenschaften der Modelle für die Energiebetrachtung

| Modell | Festigkeit σ_t | Spez. Bruchenergie der Matrix $G_{f,M}$ | Kontaktfestigkeit $\sigma_{t,c}$ | Spez. Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$ |
|---------------|-----------------------|---|----------------------------------|-------------------------------------|
| | [MPa] | [Nm ⁻¹] | [MPa] | [Nm ⁻¹] |
| <i>Abb.24</i> | 7 | 100 | 7 | 10 |
| <i>A</i> | 7 | 100 | 7 | 100 |
| <i>B</i> | 7 | 100 | 6 | 10 |
| <i>C</i> | 7 | 196 | 7 | 100 |
| <i>D</i> | 7 | 196 | 6 | 10 |

Die spezifische Bruchenergie der Matrix von Modell *A* und *B* beträgt $G_{f,M} = 100 \text{ Nm}^{-1}$, die von den Modellen *C* und *D* wurde erhöht auf $G_{f,M} = 196 \text{ Nm}^{-1}$. Die Kontakteigenschaften (siehe Kapitel 6.2.3) der Modell *A* und *C* sind $\sigma_{t,c} = 7 \text{ MPa}$ und $G_{f,c} = 100 \text{ Nm}^{-1}$ und jene der Modelle *B* bzw. *D* sind $\sigma_{t,c} = 6 \text{ MPa}$ und $G_{f,c} = 10 \text{ Nm}^{-1}$. Die Ergebnisse der Simulationen sind in Tabelle 7 angeführt.

Tabelle 7: Ergebnisse der Energiebetrachtung des Simulationsbeispiels

| Modell | E_{el}/A_{cross} | | $\Delta E_{el}/A_{cross}$ | E_{WOF}/A_{cross} | | $\Delta E_{WOF}/A_{cross} \triangleq G_{f,G}$ |
|----------------|---------------------|-------|---------------------------|---------------------|-------|---|
| | [J/m ²] | | | [J/m ²] | | |
| | Kühlung | Bruch | [J/m ²] | Kühlung | Bruch | [J/m ²] |
| <i>Abb. 24</i> | 37 | 15 | -22 | 425 (81 %) | 523 | 97 (19 %) |
| <i>A</i> | 36 | 12 | -24 | 440 (61 %) | 719 | 279 (39 %) |
| <i>B</i> | 36 | 18 | -18 | 423 (85 %) | 496 | 73 (15 %) |
| <i>C</i> | 46 | 17 | -29 | 441 (50 %) | 885 | 444 (50 %) |
| <i>D</i> | 43 | 20 | -23 | 422 (68 %) | 621 | 199 (32 %) |

Die spezifische Bruchenergie des Modells E_{WOF} / A_{cross} nach dem Kühlen wird durch die gesamten Risse im Gefüge erzeugt. Am Ende des Zugversuches macht sie den größten Teil der gesamten Energie aus. Betrachtet man den Einfluss der Kontakte (A, B und C, D) erkennt man das E_{WOF} / A_{cross} am Ende des Kühlens nahezu gleich ist. Während des Zugversuches wird aufgrund der schwächeren Kontakte weniger Energie benötigt, das spiegelt sich in den jeweiligen geringeren $G_{f,G}$ Werten wider. Der Vergleich der Modelle A, C und B, D bezüglich E_{el} / A_{cross} am Ende des Zugversuches, sowie auf $G_{f,G}$ des Gefüges, zeigt, dass die spezifische Bruchenergie der Matrix $G_{f,M}$ einen wichtigen Einfluss ausübt. Es zeigt sich wieder, dass die Bruchenergie hauptsächlich während der Kühlung konsumiert wird. Nur Modell C zeigt aufgrund der hohen spezifischen Bruchenergie der Matrix und der starken Kontakte eine gleichgroße Aufteilung der benötigten Bruchenergie zwischen Kühlungs- und Zugsimulation. Aus den erhaltenen Energien nach der Kühlung bzw. nach dem Zugversuch kann eine theoretische Risslänge l_{Riss} im Gefüge berechnet werden:

$$l_{Riss} = \frac{E_{WOF}}{G_{f,M} \cdot s} \quad (33)$$

Hier ist s die Stärke des Gefüges (Modellausdehnung in die dritte Ebene), E_{WOF} die irreversible Energie beim Abbruchkriterium und $G_{f,M}$ die spezifische Bruchenergie der Matrix. Diese theoretische Risslänge bezieht sich auf einen Riss mit einer Rissöffnung von x_{ult} bzw. einer 100 % konsumierten Bruchenergie. Da es im Gefüge Risse gibt die noch keine vollständige Rissöffnung x_{ult} aufweisen, aber trotzdem als solcher anzusehen sind, kann die tatsächliche Risslänge mit dieser theoretischen Überlegung nicht bestimmt werden. Die Ergebnisse der beschriebenen Modelle sind in Tabelle 8 angeführt.

Tabelle 8: Theoretische Risslängen l_{Riss} im Gefüge

| Modell | l_{Riss} nach Kühlung [mm] | l_{Riss} durch Zugversuch [mm] | l_{Riss} gesamt [mm] |
|----------|---------------------------------|-------------------------------------|---------------------------|
| <i>A</i> | 130 | 82 | 212 |
| <i>B</i> | 125 | 21 | 147 |
| <i>C</i> | 67 | 67 | 134 |
| <i>D</i> | 64 | 30 | 94 |

Der in Gleichung (33) beschriebene indirekt proportionale Zusammenhang zwischen l_{Riss} und $G_{f,M}$ bestätigt sich durch den Vergleich von l_{Riss} nach Kühlung der Modell A und C bzw. B und D in Tabelle 8. Im Gegensatz dazu kann dieser Zusammenhang aufgrund des Einflusses der Kontakteigenschaften für l_{Riss} durch Zugversuch nicht mehr beobachtet werden. Durch die Verminderung von $G_{f,c}$ bzw. $\sigma_{t,c}$ kommt es theoretisch bereits bei einer geringen Verschiebung zur Bildung eines Makro-Risses. Insgesamt bewirken eine Verminderung der Kontaktfestigkeit und der spez. Bruchenergie der Matrix eine starke Reduzierung der theoretischen Risslänge.

6 Auswirkung ausgewählter Parameter auf Simulationsergebnisse

Im Zuge der Simulationen werden die Auswirkungen verschiedener Parameter auf das Modellverhalten untersucht. Zu diesen Parametern zählen neben geometrischen auch thermische und bruchmechanische Größen sowie verschiedene modellabhängige Faktoren. Auf Basis dieser Ergebnisse werden auch die Anforderungen an die Modellgröße (RVE) untersucht.

6.1 Größenunabhängigkeit des RVE und Einfluss der Vernetzung

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse jener Parameter gezeigt, die theoretisch keinen Einfluss auf Simulationsergebnisse ausüben sollten. Dazu gehören die in Kapitel 4.1 beschriebene Größe des RVE, die örtliche Anordnung der Körner und die Größe der Elemente des FE-Netzes. Für die Simulationen wurde, wenn nicht anders angegeben, ein Spinell-Gehalt von 10 vol% gewählt.

6.1.1 Einfluss der Modellgröße

Je größer das RVE, desto mehr Körner einer Fraktion können in einem Modell dargestellt werden. Die minimal verwendbare Modellgröße a um ein Korn mit $d = 4$ mm und einem Anteil von 10 vol% darzustellen ergibt nach Kapitel 4.2 $A = (26,7 \text{ mm})^2 = 713 \text{ mm}^2$. Diese Fläche wurde um 3 % vergrößert, um auch ein Körner größer als 4 mm zu erzeugen. Für die Untersuchung des Modells in Bezug auf die Größenunabhängigkeit wurden an sechs verschiedenen Modellgrößen Simulationen durchgeführt. In Tabelle 9 sind die Ergebnisse dieser Simulationen aufgelistet.

Tabelle 9: Ergebnisse sechs unterschiedlich großer Modelle mit einem Spinell-Anteil von 10 vol%

| Modellgröße | Seitenlänge a | Anzahl der Simulationen | σ_t | E | G_{fG} | l_{ch} |
|--------------------|--------------------|----------------------------|------------|---------|----------|----------|
| [mm ²] | [mm] | | [MPa] | [GPa] | [N/m] | [mm] |
| 735 | 27,1 | 6 | 4,9 ±0,2 | 36,2 ±2 | 147 ±10 | 222 ±27 |
| 1225 | 35 | 11 | 5,2 ±0,2 | 33,1 ±4 | 197 ±44 | 241 ±64 |
| 1837,5 | 42,9 | 6 | 5,0 ±0,2 | 35,7 ±5 | 187 ±27 | 267 ±58 |
| 2450 | 49,9 | 11 | 5,1 ±0,2 | 36,1 ±3 | 188 ±30 | 261 ±51 |
| 3675 | 60,6 | 4 | 5,0 ±0,1 | 40,0 ±2 | 208 ±48 | 333 ±80 |
| 4900 | 70 | 4 | 4,8 ±0,1 | 38,6 ±1 | 187 ±7 | 313 ±19 |

Der Vergleich der Ergebnisse in Tabelle 9 zeigt eine geringe Abweichung der durchschnittlichen Materialeigenschaften zwischen den Modellgrößen. Die erhaltenen Ergebnisse sind für eine leichtere Interpretation in Abbildung 25 graphisch dargestellt.

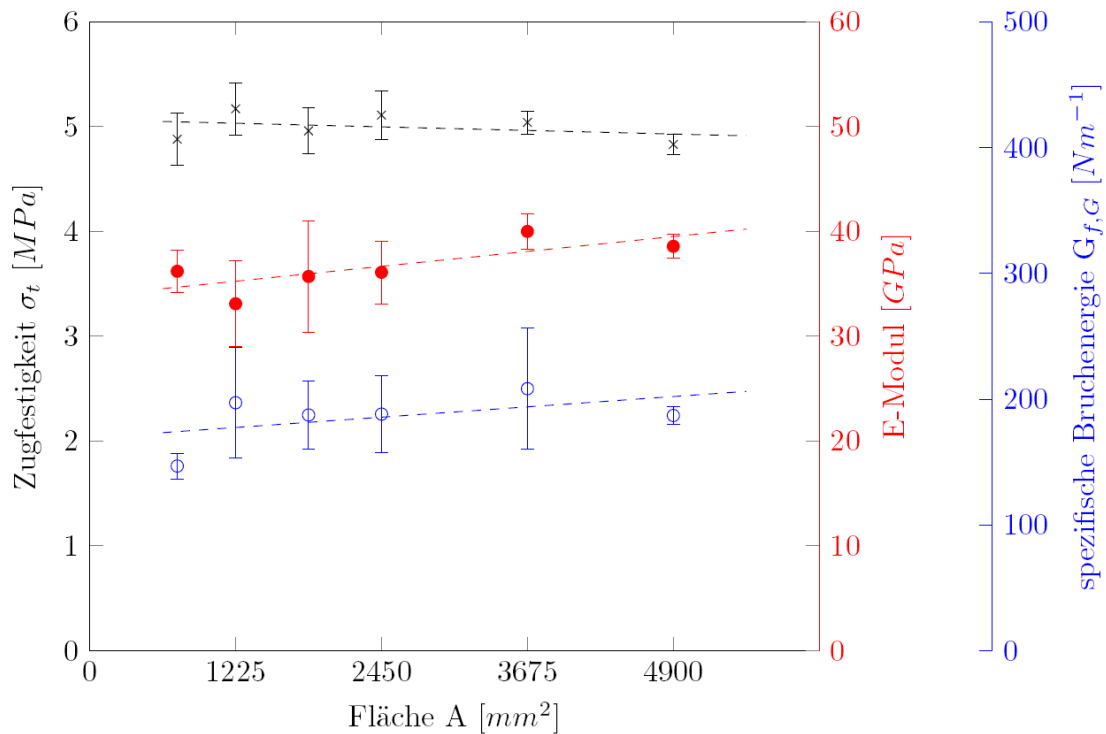


Abbildung 25: Einfluss der Modellgröße auf die mechanischen Eigenschaften Festigkeit, E -Modul und spezifische Bruchenergie inklusive Standardabweichung

Aus den Werten in Tabelle 9 und Abbildung 25 kann keine Abhängigkeit der Eigenschaften abgeleitet werden. Einzig das kleinste Modell ($735 \text{ mm}^2 / a = 27,1 \text{ mm}$) zeigte reduzierte Werte der Festigkeit und der spezifischen Bruchenergie. Die spez. Bruchenergie weist hierbei große Standardabweichungen auf, die durch das Abbruchkriterium und die Bildung eines zweiten Makro-Risses begründet werden können. Anhand der Ergebnisse wurde gezeigt, dass der Einfluss der Modellgröße gering ist. Aufgrund der sehr abweichenden spezifischen Bruchenergie des kleinsten Modells gegen über den Größeren und der Tatsache, dass größere Modelle mehr als nur ein einzelnes Korn der größten Fraktion enthalten, erscheint es empfehlenswert, die kleine Modellgröße mit einer Kantenlänge von $26,7 \text{ mm}$ zu vermeiden. Für die folgenden Simulationen wurden deshalb Gefüge mit einer Kantenlänge von 35 mm (1225 mm^2) verwendet. Es ist festzuhalten, dass mit zunehmender Modellgröße die Rechendauer stark ansteigt und es vermehrt zu numerischen Problemen bis hin zum Abbruch der Simulation kommt.

6.1.2 Einfluss der Kornplatzierung im Modell

Die Platzierung der Körner im Gefüge erfolgt zufällig nach dem in Kapitel 4.2.2 beschriebenen Algorithmus. Die durchschnittlichen Eigenschaften der Simulation mit der Modellgröße 1225 mm^2 bzw. $a = 35 \text{ mm}$ stammen aus elf unterschiedlichen Kornanordnungen. Die erhaltene Standardabweichung der Zugfestigkeit beträgt ca. 4% , die des E -Moduls 11% und die der Bruchenergie 19% . Abbildung 26 zeigt den arithmetischen Mittelwert dieser elf Simulationen inklusive der Standardabweichungen.

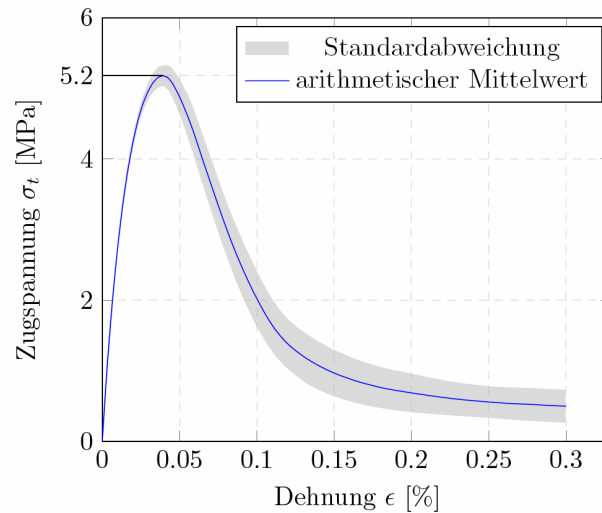


Abbildung 26: Arithmetischer Mittelwert des Spannungsverlaufs inklusive Standardabweichung einer Simulationsreihe von elf verschiedenen Gefügen (1225 mm^2 , $T_{start} = 1200 \text{ °C}$)

Abbildung 26 zeigt eine geringe Spannungsabweichung bis zur Festigkeit von 5,2 MPa. Die anschließende Standardabweichung der Zugspannung ist größer, nimmt aber ist bis zum Auswertungsende von $\epsilon_{Bruch} = 0,3 \%$ nicht übermäßig zu. Die Abweichungen werden als gering genug für die weiter Verwendung des Modells betrachtet. Zusammengefasst zeigt sich ein geringer Einfluss der Kornverteilung auf die resultierende Festigkeit, der auch in der Arbeit von Kim [72] festgestellt wurde.

6.1.3 Einfluss der FE-Netz-Feinheit

Da jede FE-Simulation von der Diskretisierung abhängig ist, erfolgt eine vergleichende Simulation eines Gefüges mit unterschiedlicher Elementgröße. Der bisher zielführende Diskretisierungsgröße von $400 \mu\text{m}$ wurden eine Diskretisierung durch Elemente der Größe $350 \mu\text{m}$ und $300 \mu\text{m}$ gegenübergestellt. Die entstanden Makro-Risse der Zugversuche in x - und y -Richtung und die dazugehörigen Spannungs-Verläufe sind in Abbildung 27 (a-c) und Abbildung 28 (a, b) abgebildet.

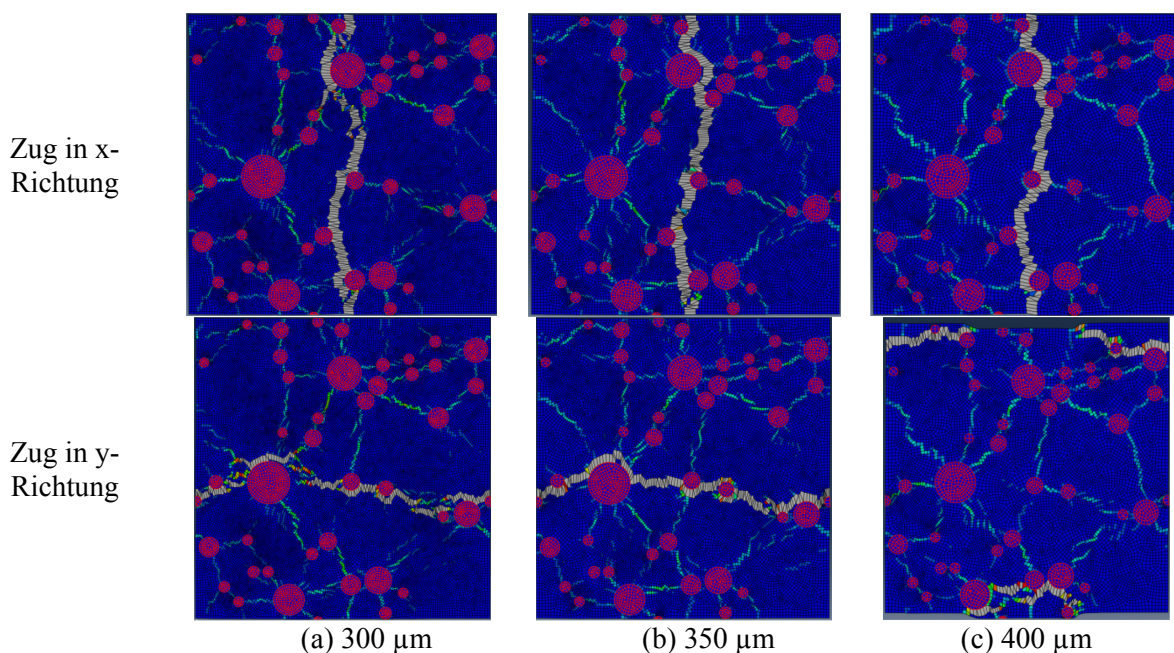


Abbildung 27: Makro-Rissbildung (grau) in einem Gefüge aufgrund unterschiedlicher Elementgrößen (a) $300 \mu\text{m}$, (b) $350 \mu\text{m}$ und (c) $400 \mu\text{m}$

Die Makro-Risse aus den Zugversuchen weichen, mit Ausnahme des Zugversuchs in y -Richtung mit $400\ \mu\text{m}$, nur geringfügig erkennbar voneinander ab. Die dazugehörigen Spannungs-Dehnungskurven sind in Abbildung 28 und die Ergebnisse in Tabelle 10 abgebildet.

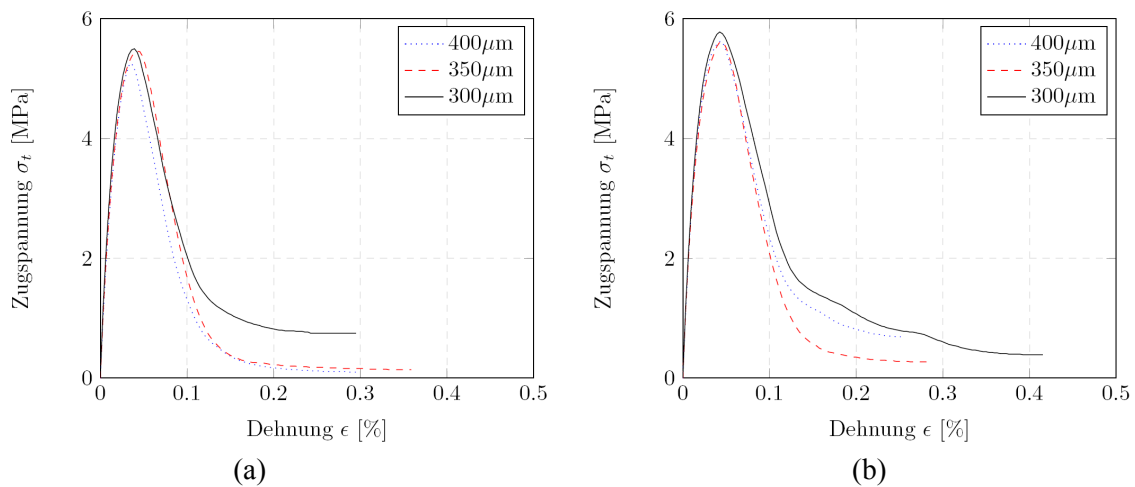


Abbildung 28: Mesh-Größenabhängigkeit ($400\ \mu\text{m}$, $350\ \mu\text{m}$ und $300\ \mu\text{m}$) der Zugfestigkeit einer $35\ \text{mm}$ Struktur mit Verschiebung in (a) x -Richtung und (b) y -Richtung

Die Spannungs-Dehnungskurve des Modells $300\ \mu\text{m}$ in Abbildung 28 (a) weist eine hohe Restfestigkeit auf. Bei Betrachtung einiger Elemente im Makro-Riss ist zu erkennen, dass diese nicht vollständig entlastet sind und trotz des Erreichens des Abbruchkriteriums eine Restfestigkeit aufweisen. Dieser Einfluss kann auch in den jeweiligen y -Versuchen beobachtet werden.

Tabelle 10: Ergebnisse bei unterschiedlicher Vernetzung derselben Struktur

| Elementgröße – Zugversuchsrichtung | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [N/m] | l_{ch} [mm] |
|---------------------------------------|---------------------|--------------|--------------------|------------------|
| $400\ \mu\text{m}$ -x | 5,3 | 31,5 | 136 | 153 |
| $350\ \mu\text{m}$ -x | 5,6 | 34,7 | 173 | 191 |
| $300\ \mu\text{m}$ -x | 5,5 | 36,2 | 197 | 236 |
| $400\ \mu\text{m}$ -y | 5,6 | 33,7 | 198 | 213 |
| $350\ \mu\text{m}$ -y | 5,5 | 32,9 | 160 | 174 |
| $300\ \mu\text{m}$ -y | 5,9 | 36,3 | 252 | 263 |

Grundsätzlich sollte der Einfluss der Elementgröße auf die Lösung der Simulation klein sein. Wie am Ende der Spannungs-Dehnungskurven in Abbildung 28 und aus den Werten in Tabelle 10 zu sehen ist, ergeben sich jedoch Unterschiede. Der Vergleich der Rissbilder in y -Richtung in Abbildung 26 (a) und (c) zeigt eine unterschiedliche Lokalisierung des Makro-Risses im Gefüge. Der Vergleich der anderen Rissbilder zeigt kleine Abweichungen bei unterschiedlicher irreversibler Dehnung. Mit zunehmender Verkleinerung der Elemente steigen die erhaltenen mechanischen Eigenschaften an. Die aus allen Modellen berechnete Durchschnittsfestigkeit beträgt $\sigma_t = 5,6\ \text{MPa}$ mit einer Standardabweichung von $s = 3,2\ \%$. Diese geringe Abweichung konnte nicht für den E -Modul ($E = 34,2\ \text{GPa}$, Standardabweichung $s = 5\ \%$) und die Bruchenergie ($G_{f,G} = 186\ \text{Nm}^{-1}$, Standardabweichung $s = 19,6\ \%$), erreicht werden. Eventuell auftretende Nebenrisse üben daher nur einen keinen Einfluss auf die Festigkeit und den E -Modul aus, führen jedoch zu einer erhöhten spezifische Bruchenergie. Anhand der Ergebnisse und der Rissbilder kann gezeigt werden, dass die Elementgröße einen Einfluss auf die Rissentwicklung und das Simulationsergebnis hat. Durch die Beeinflussung des Risspfades aufgrund der Elementgröße sind in Folge unterschiedliche Ergebnisse zu erwarten.

Aufgrund der Tatsache des erhöhten zeitlichen Aufwands durch eine Netzverfeinerung erfolgten die weiteren Simulationen mit einer Diskretisierungsgröße von 400 μm . Ein Ansatz den Netz-Einfluss zu minimieren bietet eine Regularisierung der Rissausbreitung.

6.2 Haupteinflussfaktoren auf die Rissbildung

Das Kühlen nach dem Produktionsprozess verursacht wie in Kapitel 4.3 beschrieben Risse, die eine Schwächung der Matrix verursachen. In diesem Kapitel werden einzelne Versuche mit unterschiedlichen Parametern vorgestellt und deren Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften des Gefüges untersucht. Für eine Vielzahl der Simulationen wurde ein Spinell-Gehalt von 10 vol% und eine Start- sowie Endtemperatur von 1200 $^{\circ}\text{C}$ bzw. 25 $^{\circ}\text{C}$ gewählt. Normalerweise liegt die Produktionstemperatur zwischen 1600 $^{\circ}\text{C}$ und 1700 $^{\circ}\text{C}$, für einen Spinell-Gehalt von 20 gew% wird eine optimale Sintertemperatur von 1650 $^{\circ}\text{C}$ vorgeschlagen [23]. Bei diesen Temperaturen beeinflusst ein Kriechen den Spannungszustand des Gefüges. Für vergleichbare Materialien wurde für Temperaturen unter 1200 $^{\circ}\text{C}$ kein wesentliches Kriechen beobachtet [105] [106]. Es wird daher vereinfachend angenommen, dass das Kriechen bei dieser Temperatur keinen Einfluss auf die Rissbildung ausübt, jedoch das Gefüge bei der Starttemperatur von 1200 $^{\circ}\text{C}$ spannungsfrei ist. Neben der Brenntemperatur hat die Differenz zwischen den thermischen Ausdehnungskoeffizienten der verwendeten Materialien einen ausschlaggebend Einfluss auf die Rissbildung.

6.2.1 Einfluss der Differenz der thermischen Ausdehnungskoeffizienten

Um die Auswirkung der Differenz unterschiedlicher thermischer Ausdehnungskoeffizienten während des Kühlens auf die Rissbildung zu verstehen wird bei dieser Simulationsreihe ein und dieselbe Struktur verwendet. Die Kantenlänge wurde mit $a = 30 \text{ mm}$ (900 mm^2) gewählt, und die Kontakte haben die gleichen Eigenschaften wie die Matrix. Für diese Versuche wurde $\Delta\alpha$ zwischen 8 % und 150 % variiert wobei $\Delta\alpha = 100 \%$ der Differenz der in Tabelle 5 angegebenen Werte entspricht. Daraus ergeben sich 14 Modelle die sich vor der Simulation nur durch verschiedene $\Delta\alpha$ unterscheiden. Ein Teil der Ergebnisse der Einzelversuche ist in Abbildung 29 abgebildet.

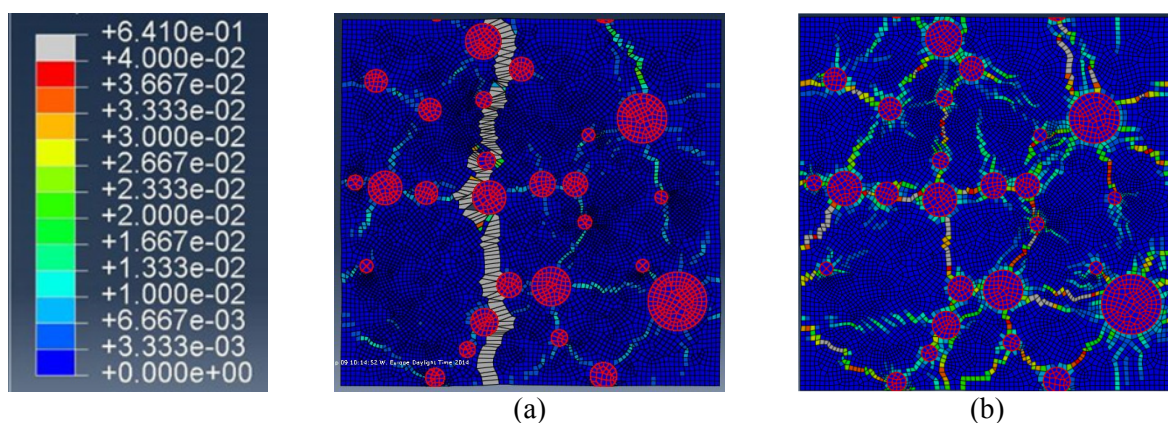


Abbildung 29: Mikro-Rissnetzwerke nach einer Kühlung mit (a) $\Delta\alpha = 92 \%$ und (b) $\Delta\alpha = 150 \%$; Körner werden rot, die irreversiblen Dehnungen bis zu 0,04 % durch eine farbige Skala und anschließend grau dargestellt

Die erhaltenen Mikro-Rissnetzwerke nach der Kühlung unterscheiden sich größtenteils durch die Ausprägung der irreversiblen Dehnung und nicht durch die Lage der Risse. Die anschließend simulierten Zugversuche in Abbildung 30 zeigen Abweichungen im örtlichen Verlauf des entstandenen Makro-Risses.

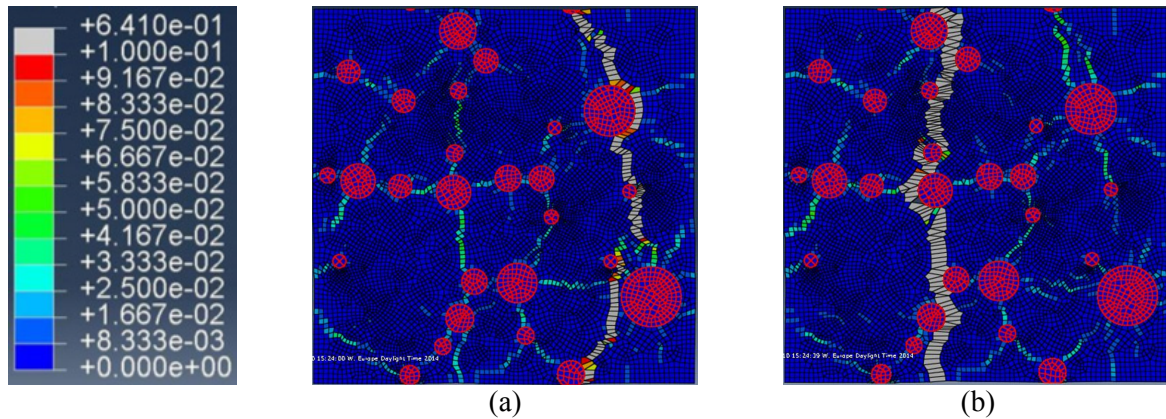


Abbildung 30: Repräsentative Mikro-Rissbilder für ein Modell mit unterschiedlichen Makro-Rissverläufen; Körner werden rot und Dehnungen $> 0,1\%$ grau dargestellt

Mit Ausnahme von $\Delta\alpha = 104\%$ und $\Delta\alpha = 117\%$, abgebildet in Abbildung 30 (a), verläuft der Makro-Riss der restlichen Modelle, wie in Abbildung 30 (b) gezeigt, zentral durch das RVE. Die Ergebnisse in Tabelle 11 zeigen, dass sich mit zunehmenden $\Delta\alpha$ alle betrachteten Werte verringern. Die charakteristische Länge ändert sich ab $\Delta\alpha = 67\%$ kaum. Das Ergebnis für $\Delta\alpha = 8\%$ dient als Vergleich, wie sich das Modell bei einer sehr geringen thermischen Ausdehnungsdifferenz verhält.

Tabelle 11: Eigenschaften in Abhängigkeit der Differenz der thermischen Ausdehnungskoeffizienten [107]⁸

| $\Delta\alpha$ | [%] | ∞ | 58 | 67 | 92 | 96 | 100 | 108 | 113 | 117 | 121 | 125 | 133 | 142 | 150 |
|----------------|-------|----------|-----|-----|------|------|------|-----|------|------|------|------|------|------|------|
| σ_t | [MPa] | 6,3 | 5,8 | 5,8 | 5,4 | 5,4 | 5,3 | 5,1 | 5,1 | 5 | 4,9 | 4,9 | 4,7 | 4,7 | 4,5 |
| E | [GPa] | 85 | 45 | 43 | 38,5 | 38,6 | 38,6 | 38 | 37,8 | 35,5 | 35,5 | 34,5 | 33,2 | 32,6 | 32,3 |
| $G_{f,G}$ | [N/m] | 218 | 190 | 180 | 160 | 160 | 157 | 147 | 147 | 147 | 143 | 147 | 127 | 133 | 130 |
| l_{ch} | [mm] | 469 | 254 | 230 | 211 | 212 | 216 | 215 | 214 | 209 | 211 | 211 | 191 | 196 | 207 |

Aus Tabelle 11 ist ersichtlich, dass die thermische Ausdehnungsdifferenz zwischen den Materialien $\Delta\alpha$ einen deutlichen Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften ausübt. Um den Trend der einzelnen Simulationen zu bestätigen, wurden je zwölf Berechnungen mit unterschiedlichen Gefügen für $\Delta\alpha = 92\%$ bis $\Delta\alpha = 125\%$ durchgeführt. Die Ergebnisse der untersuchten Eigenschaften sind in Tabelle 12 angeführt. Der Trend der einzelnen Simulationen konnte erfolgreich reproduziert werden. Die Abweichung von σ_t beträgt im Mittel zwischen $3,6\%$ und $6,5\%$, die des E -Moduls zwischen $4,2\%$ und $11,3\%$, und die der spezifischen Bruchenergie bis zu 25% .

Tabelle 12: Auswertung von je zwölf Simulationen für verschiedene thermische Ausdehnungsdifferenzen [107]

| $\Delta\alpha$ | σ_t | E | $G_{f,G}$ | l_{ch} |
|----------------|---------------|--------------|--------------|--------------|
| [%] | [MPa] | [GPa] | [N/m] | [mm] |
| 92 | $5,5 \pm 0,2$ | $40,7 \pm 2$ | 164 ± 21 | 221 ± 37 |
| 100 | $5,2 \pm 0,2$ | $35,4 \pm 4$ | 179 ± 35 | 234 ± 62 |
| 117 | $4,7 \pm 0,3$ | $35,9 \pm 3$ | 137 ± 22 | 223 ± 64 |
| 125 | $4,6 \pm 0,3$ | $33,9 \pm 3$ | 134 ± 34 | 215 ± 76 |

⁸ In der angegebenen Quelle sind Temperaturdifferenzen angegeben; da die Schädigung durch die thermische Spannung verursacht wird, macht es keinen Unterschied, ob $\Delta\alpha$ oder ΔT variiert wird.

Alle Werte aus den Einzel- und Mehrfachversuchen sind graphisch in Abbildung 31, Abbildung 32 und Abbildung 33 dargestellt. Die jeweilige Abhängigkeit der Zugfestigkeit und der Bruchenergie von $\Delta\alpha$ kann über den gesamten betrachteten Bereich durch eine lineare Funktion angenähert werden.

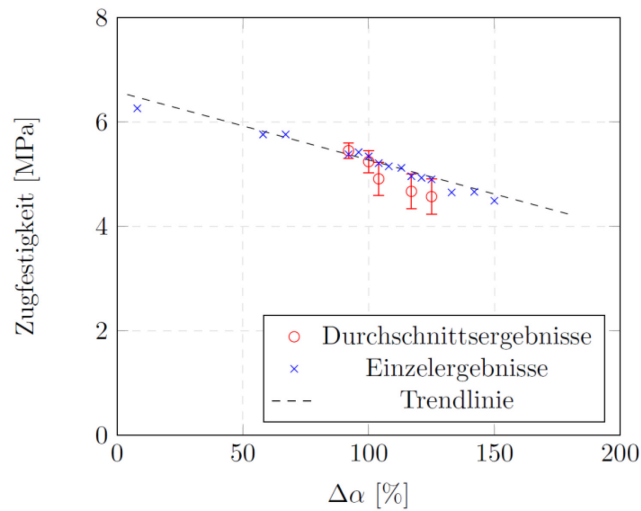


Abbildung 31: Linearer Einfluss der thermischen Ausdehnungsdifferenz auf die Festigkeit des Materials

In Abbildung 31 liegen die Ergebnisse für die Festigkeit des Materials der einzelnen Versuche innerhalb der Abweichung der Durchschnittsergebnisse aus den vergleichbaren zwölf Simulationen. Die Durchschnittsergebnisse liegen nahe an den Einzelergebnissen.

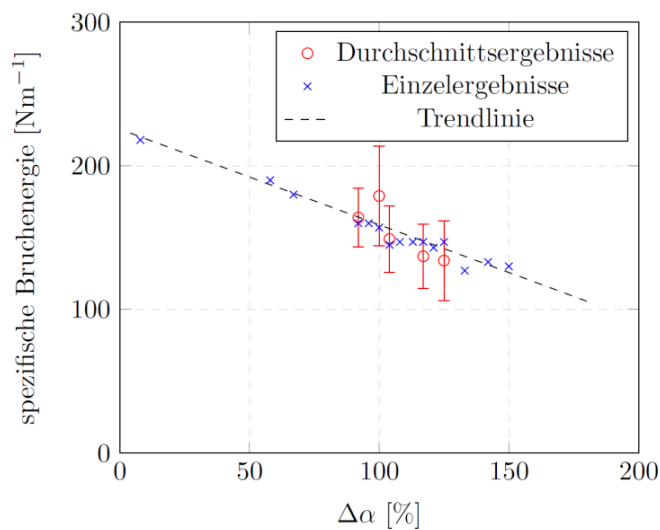


Abbildung 32: Linearer Einfluss der thermischen Ausdehnungsdifferenz auf spezifische Bruchenergie des Materials

Die spezifische Bruchenergie des RVE ist beeinflusst vom Spannungsverlauf nach Erreichen der Maximalkraft und dem Moment der Lokalisierung des Makro-Risses. Dieses Kriterium ist in Kapitel 5.2 beschrieben und wird zum Beispiel durch die anfängliche Bildung von mehreren Makro-Rissen, bis schlussendlich ein Makro-Riss lokalisiert, beeinflusst. Darin sind die Abweichungen begründet. In jedem Fall zeigen alle Ergebnisse einen ähnlichen Trend. Je größer die thermische Ausdehnungsdifferenz ist, desto geringer ist die restliche spezifische Bruchenergie des Modells.

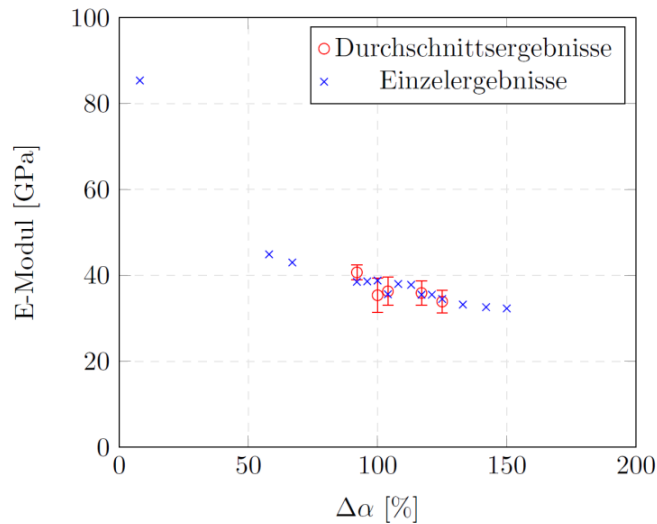


Abbildung 33: Einfluss der thermischen Ausdehnungsdifferenz auf den E -Modul des Materials

Im Bereich zwischen $\Delta\alpha = 58$ % und $\Delta\alpha = 150$ % zeigt sich eine lineare Abhängigkeit des E -Moduls. In Kapitel 6.2.3 wird ein Zugversuch an einem Gefüge mit $\Delta\alpha = 0$ % gezeigt. Der erhaltene Wert aus der Simulation C in Tabelle 17 (mit Kontakten, keine Kühlung) $E^C = 117$ GPa ist deutlich höher als jener bei $\Delta\alpha = 8$ % mit $E^{100} = 85$ GPa. Damit ist gezeigt, dass bereits eine geringe Differenz der thermischen Ausdehnungskoeffizienten einen deutlichen Einfluss auf die Mikro-Rissbildung ausübt.

6.2.2 Einfluss der spezifischen Bruchenergie $G_{f,M}$ der Matrix

Neben dem Entfestigungsverhalten beeinflusst auch der absolute Wert der spezifischen Bruchenergie $G_{f,M}$ das Materialverhalten und die Ergebnisse der Simulationen. Die durch eine Reduktion der Bruchenergie erhöhte Sprödigkeit des Materials ist an einer Struktur mit unterschiedlichen Bruchenergiewerten $G_{f,M} = 80$ Nm^{-1} , 100 Nm^{-1} und 120 Nm^{-1} überprüft worden. Die nach den Zugversuchen erhaltenen Rissbilder zeigen keine Besonderheiten und der beobachtete Makro-Riss bildet sich in jedem Modell an vergleichbarer Stelle. Die Verläufe der Spannungs-Dehnungskurven aus den drei Zugversuchen sind in Abbildung 34 dargestellt.

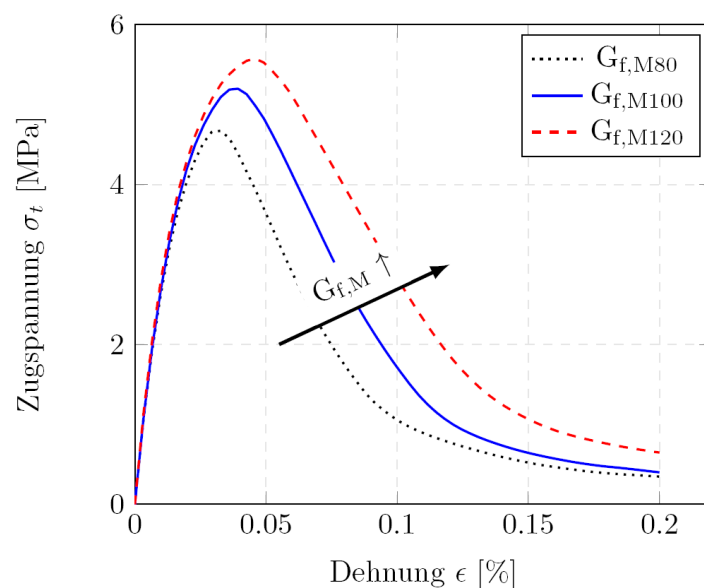


Abbildung 34: Einfluss der spezifischen Bruchenergie der Matrix auf den Spannungsverlauf des Zugversuchs.

Die Ergebnisse der Änderung von $G_{f,M80}$ und $G_{f,M120}$ um $\pm 20\%$ gegenüber $G_{f,M100}$ in Tabelle 13 und Abbildung 34 zeigen nahezu keinen Einfluss auf den E -Modul. Hingegen erhöhen sich die Zugfestigkeit und die dazu benötigte Dehnung zum Erreichen der Festigkeit mit steigender Bruchenergie. Die prozentuale Änderung der Bruchenergie des Gefüges ist nahezu ident mit jener der Matrix. Die Ergebnisse der charakteristischen Länge zeigen widersprüchliche Trends. Bei einer Erhöhung der spezifischen Bruchenergie um 20% erfährt l_{ch} eine Steigerung fast gleichen Ausmaßes. Dieser Trend wird jedoch bei einer Senkung nicht festgestellt.

Tabelle 13: Ergebnisse mit unterschiedlichen spezifischen Bruchenergien der Matrix

| Bezeichnung | σ_t | | E | | $G_{f,M}$ | | l_{ch} | |
|--------------|------------|-----|-------|-----|-----------|-----|----------|-----|
| | [MPa] | [%] | [GPa] | [%] | [N/m] | [%] | [mm] | [%] |
| $G_{f,M80}$ | 4,7 | 90 | 32,4 | 99 | 120 | 79 | 178 | 97 |
| $G_{f,M100}$ | 5,2 | 100 | 32,7 | 100 | 151 | 100 | 183 | 100 |
| $G_{f,M120}$ | 5,6 | 108 | 34,6 | 106 | 192 | 127 | 214 | 117 |

Die Änderung der $G_{f,M}$ -Werte beeinflusst vor allem die resultierende Bruchenergie des Gefüges. Durch den geringeren Einfluss auf die Zugfestigkeit ändert sich die Sprödigkeit nur geringfügig. In allen Fällen stammen die Ergebnisse aus einem linearen Entfestigungsverhalten. Wie bereits in Kapitel 3.3 beschrieben, kann das Entfestigungsverhalten durch die spezifische Bruchenergie auf verschiedene Arten angegeben werden. Die einfachste Annahme ist eine lineare Beziehung zwischen Rissöffnung und übertragbarer Spannung:

$$G_f = \frac{x_{t,ult} \cdot \sigma_{t,max}}{2} \quad (34)$$

Eine weitere Variante ist die Funktion nach Hordijk [64], die eine rasche Spannungsabnahme schon bei geringer Rissöffnung beschreibt und zunehmend flach ausläuft:

$$\sigma = (1 + 27 \cdot x^3) \cdot e^{-6,93 \cdot x} - 0,0274 \cdot x \quad (35)$$

Eine weitere Möglichkeit bietet die Beschreibung durch einen bilinearen oder multilinearen Verlauf. Theoretisch gibt es, selbst bei der Festlegung der Festigkeit, unendlich viele Möglichkeiten, ein und dieselbe spezifische Bruchenergie durch einen bilinearen Verlauf zu beschreiben. Verwendet man einen fixen Wert für die ultimative Rissöffnung x_{ult} , kann die mögliche Position des Knickpunktes durch eine lineare Funktion berechnet werden. Mit zunehmenden x_{ult} flacht die hier mit ϕ bezeichnete Funktion ab. Dieses Verhalten ist anhand der Funktionen $\phi_{x_{ult},1}$, $\phi_{x_{ult},2}$ und $\phi_{x_{ult},3}$ in Abbildung 35 dargestellt. Dabei kennzeichnet der Index $x_{ult,i}$ den i -fachen Wert der ultimativen Rissöffnungsverschiebung gegenüber der linearen Rissöffnungsverschiebung $x_{ult,i}$. Die Funktion $\phi_{x_{ult},2}$ besitzt z.B. die zweifache Rissöffnung gegenüber der linearen Funktion $\phi_{x_{ult},1}$.

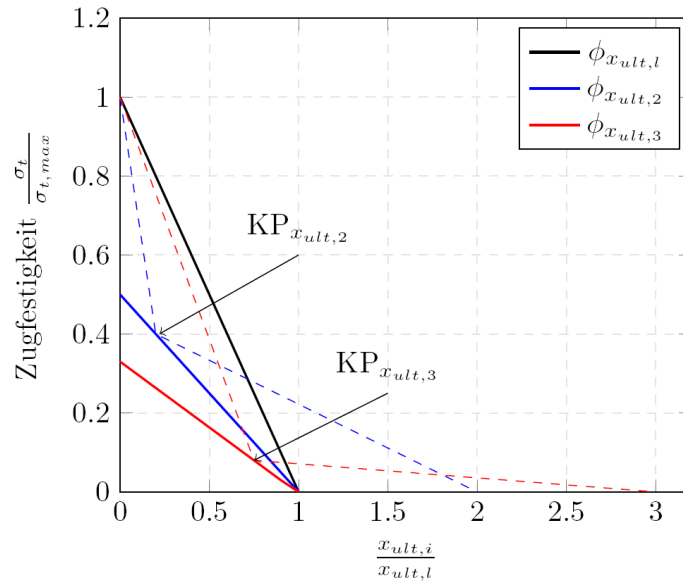


Abbildung 35: Beschreibung der Bruchenergie für verschiedene ultimative Verschiebungen bei gleicher Initialfestigkeit und selber Bruchenergie

In Abbildung 35 werden zwei mögliche Knickpunkte $KP_{x_{ult,2}}$ bzw. $KP_{x_{ult,3}}$ auf den jeweiligen Funktionsgeraden dargestellt. Die daraus bedingten bilinearen Verläufe enden in den jeweiligen ultimativen Rissöffnungsverschiebungen $x_{ult,i}$. Die dabei beschriebenen Flächen unter den strichlierten Kurven sind für jeden Verlauf gleich.

Die Auswirkung fünf verschiedener Entfestigungsverhalten auf die mechanischen Eigenschaften wird im Folgenden gezeigt. Dafür wurden ein lineares, drei bilineare und das Entfestigungsverhalten beschrieben nach Hordijk gewählt. In Abbildung 36 sind die gewählten Bruchenergieverläufe graphisch veranschaulicht.

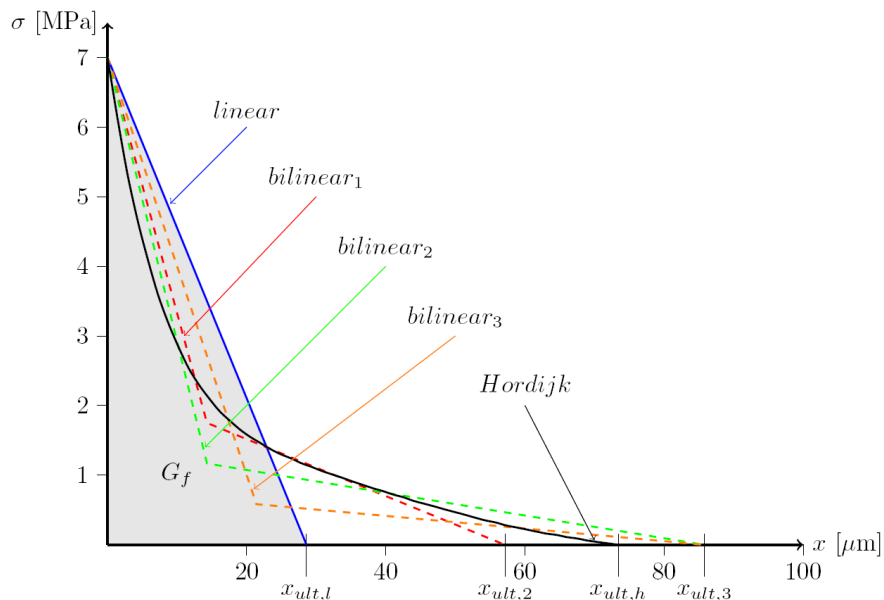


Abbildung 36: Fünf verschiedene Entfestigungsverhalten mit selben $\sigma_{t,max}$ und $G_{f,M}$

Jedes der fünf Entfestigungsverhalten besitzt die gleiche Zugfestigkeit $\sigma_t = 7 \text{ MPa}$ und der spezifischen Bruchenergie $G_{f,M} = 100 \text{ Nm}^{-1}$. Die Werte der Knickpunkte der beschriebenen Entfestigungsverhalten aus Abbildung 36 sind in Tabelle 14 aufgelistet.

Tabelle 14: Spannungs-Verschiebungs-Werte unterschiedlicher Entfestigungsverhalten mit $G_{f,M} = 100 \text{ Nm}^{-1}$ und $\sigma_t = 7 \text{ MPa}$.

| Bezeichnung | $\sigma_{t, kp}$ [MPa] | x_{kp} [μm] | x_{ult} [μm] | $x_{ult,i}/x_{ult,l}$ [-] | $x_{kp,i}/x_{ult,l}$ [-] |
|-----------------------------|---------------------------|-------------------------------|--------------------------------|------------------------------|-----------------------------|
| <i>linear</i> | - | - | 28,56 | 1 | - |
| <i>bilinear₁</i> | 1,75 | 14,29 | 57,14 | 2 | 0,5 |
| <i>bilinear₂</i> | 1,16 | 14,29 | 85,71 | 3 | 0,5 |
| <i>bilinear₃</i> | 0,58 | 21,43 | 85,71 | 3 | 0,75 |
| <i>Hordijk</i> | - | - | 73,37 | 2,57 | 2,57 |

Die Verschiebung bis zum Knickpunkt der beiden Varianten *bilinear₁* $x_{kp,1}$ und *bilinear₂* $x_{kp,2}$ beträgt $0.5 \cdot x_{ult,i}$, jene von *bilinear₃* $x_{kp,3}$ $0.75 \cdot x_{ult,3}$. Die lineare Variante zeigt anfänglich den geringsten Spannungsabfall, *Hordijk* anfänglich den größten Spannungsabfall bei geringer Verschiebung. Im weiteren Verlauf zeigt *bilinear₃* die geringste Spannungsabnahme mit fortlaufender Rissöffnung. Die fünf gezeigten Entfestigungsverhalten wurden an jeweils drei unterschiedlichen Gefügen angewandt. Für jedes Entfestigungsverhalten wurden so aus den drei Modellen und zwei Zugrichtungen, x bzw. y, sechs Einzelergebnisse erzielt. Die durchschnittlichen Spannungs-Dehnungskurven sind in Abbildung 37 veranschaulicht. Die dazugehörigen Ergebnisse sind in Tabelle 15 aufgelistet.

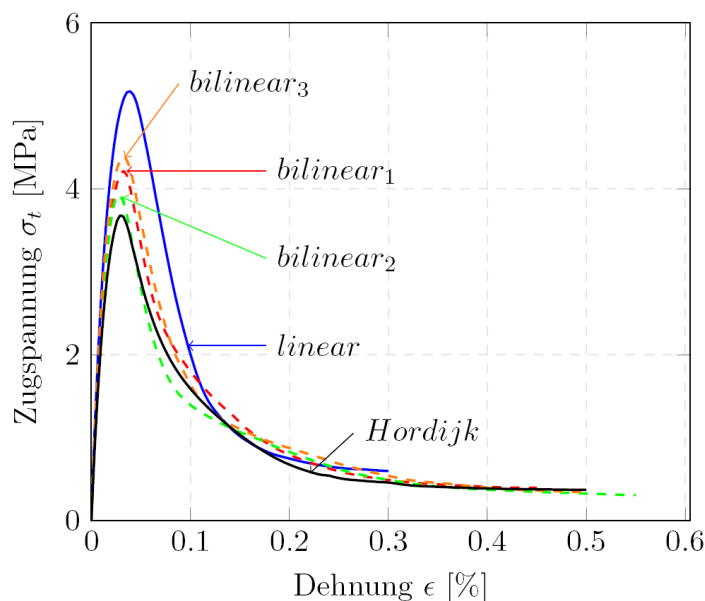


Abbildung 37: Spannungs-Dehnungs-Verhalten verschiedener Entfestigungsverhalten

Die Änderung des Entfestigungsverhaltens beeinflusst die Zugfestigkeit des Gefüges wesentlich. Bereits eine kleine Verringerung der Anfangssteigung der Entfestigungskurve vermindert die erreichte Festigkeit beträchtlich. Je größer der Spannungsgradient ist, desto geringer ist die Zugfestigkeit, $\sigma_{t,l} > \sigma_{t,b3} > \sigma_{t,b1} > \sigma_{t,b2} > \sigma_{t,h}$, und der E -Modul. Dieser Trend zeigt sich, mit einer Ausnahme, auch für die konsumierte spezifische Bruchenergie. Das Entfestigungsverhalten *bilinear₃* weist die höchste spezifische Bruchenergie auf.

Tabelle 15: Vergleich der resultierenden mechanischen Eigenschaften unterschiedlicher Entfestigungsverhalten mit derselben spezifischen Bruchenergie $G_{f,M}$ und Zugfestigkeit σ_t

| Bezeichnung | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [N/m ¹] | l_{ch} [mm] |
|-----------------------------|---------------------|--------------|----------------------------------|------------------|
| <i>linear</i> | 5,2 | 33,7 | 189 | 238 |
| <i>bilinear₁</i> | 4,2 | 30,3 | 184 | 315 |
| <i>bilinear₂</i> | 3,9 | 29,8 | 178 | 343 |
| <i>bilinear₃</i> | 4,4 | 31,8 | 196 | 323 |
| <i>Hordijk</i> | 3,7 | 26,8 | 170 | 336 |

Generell bewirkt eine Abweichung vom linearen Entfestigungs-Verhalten, unter der Voraussetzung einer Vergrößerung des Spannungsgradienten zu Beginn der Kurve, eine Verminderung der Zugfestigkeit und des E -Moduls des Materials. Das Verhalten nach *Hordijk* zeigt die geringsten Werte für Zugfestigkeit, E -Modul und spezifischer Bruchenergie, und in Bezug auf die Sprödigkeit eine den bilinearen Entfestigungsverhalten ähnliche charakteristische Länge.

6.2.3 Einfluss der Kontakteigenschaften

In fraktographischen Untersuchungen ist erkennbar, dass Risse entlang der Interface-Zone, dem Bereich zwischen Körnern und Matrix, verlaufen [7]. Diese Interface-Zone bildet sich während des Produktionsprozesses und gilt als eine Schwachstelle in der Struktur. Während des Abkühlprozesses ist hier die Mikro-Rissbildung am wahrscheinlichsten. In einer ersten Simulation wird gezeigt wie wichtig eine Beschreibung des Interfaces mit kohäsiven Flächen (CS) bei dieser Art der Simulation ist, bzw. welche Ergebnisse ohne eine derartige Berücksichtigung aussehen. Wie in Kapitel 4.2.4 beschrieben kann diese Interface-Zone zwischen den Körnern und der Matrix durch kohäsive Flächen (CS), also Kontakte, modelliert werden. Die Eigenschaften und das Entfestigungsverhalten der Kontakte entsprechen dem Materialmodell der Matrix. Der Einfluss der Kontakte wird anhand der zwei Modelle „Modell mit Kontakten“ und „Modell ohne Kontakte“ gezeigt. Das „Modell mit Kontakten“ besteht aus zwei durch kohäsive Flächen verbundene Teile (siehe Kapitel 4.2). Das „Modell ohne Kontakte“ weist dieselbe Kornverteilung auf. Es besteht jedoch im Gegensatz aus nur einem Teil das in unterschiedliche Materialsektionen eingeteilt wird und daher keine Kontakte beinhaltet. Die Ergebnisse der simulierten Zugversuche beider Modelle (ohne Kühlung) sind in Abbildung 38 abgebildet.

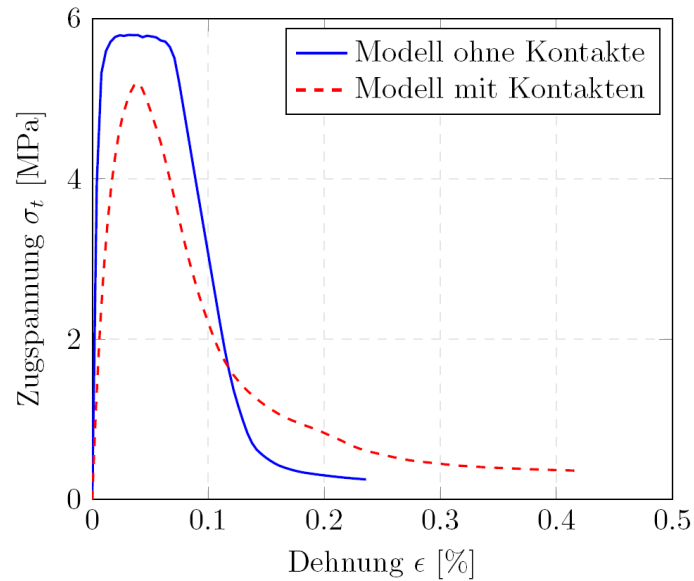


Abbildung 38: Spannungs-Dehnungsverlauf von Modellen mit und ohne Kontakten

Der Vergleich beider Ergebnisse aus Abbildung 38 zeigt einen deutlichen Einfluss der Kontaktdefinition auf den Spannungs-Dehnungsverlauf. Während das „Modell ohne Kontakte“ eine deutlich höhere Zugfestigkeit und eine geringere Bruchdehnung aufweist, zeigt sich beim „Modell mit Kontakten“ keine Plateaubildung im Spannungsverlauf und ein flach auslaufendes Entfestigungsverhalten. Aufgrund des großen Spannungsgradienten um die Körner kommt es in Abhängigkeit der Kontaktdefinition zu einer unterschiedlich ausgeprägten Rissbildung. Die Ergebnisse der Simulation sind in Tabelle 16 ersichtlich.

Tabelle 16: Einfluss des Interfaces auf die mechanischen Eigenschaften

| Modell | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [Nm ⁻¹] | l_{ch} [mm] |
|-----------------------------|---------------------|--------------|----------------------------------|------------------|
| <i>Modell ohne Kontakte</i> | 5,8 | 100 | 211 | 631 |
| <i>Modell mit Kontakten</i> | 5,2 | 35,9 | 210 | 279 |

Der E -Modul des „Modell ohne Kontakte“ entspricht zirka jenem der Matrix ($E_{Matrix} = 110$ GPa). Durch die Verwendung von Kontakten („Modell mit Kontakten“) verringert sich dieser im Vergleich um ca. 64 % und beeinflusst deutlich die charakteristische Länge. Aufgrund dieser Ergebnisse wurde gezeigt, dass für weitere Simulationen eine Verwendung von Kontakten notwendig ist.

Ausgehend von den oben gezeigten Ergebnissen werden an ein und demselben Gefüge mit Kontakten vier Extremfälle betrachtet. Anhand dieser Simulationen wird die Auswirkung der Kühlung und dem Fall einer Kontaktfestigkeit von $\sigma_{t,c} = 0$ untersucht. In den vier Simulationen wird jede mögliche Kombination betrachtet. Die Extremfälle A und B beziehen sich auf ein Modell mit Kühlung und Zugversuch, hingegen wird an den Modellen C und D nur ein Zugversuch ohne Kühlung simuliert. Das Entfestigungsverhalten der Kontakte der Modelle A und C entspricht jenem der Matrix. Im Gegensatz dazu ist die Kontaktfestigkeit der Modellen B und D $\sigma_{t,c} = 0$, d.h. bereits vor der Kühlung bzw. dem Zugversuch gibt es keine Verbindung zwischen den Körnern und der Matrix. Die erhaltenen Ergebnisse sind in Abbildung 39 und in Tabelle 17 abgebildet.

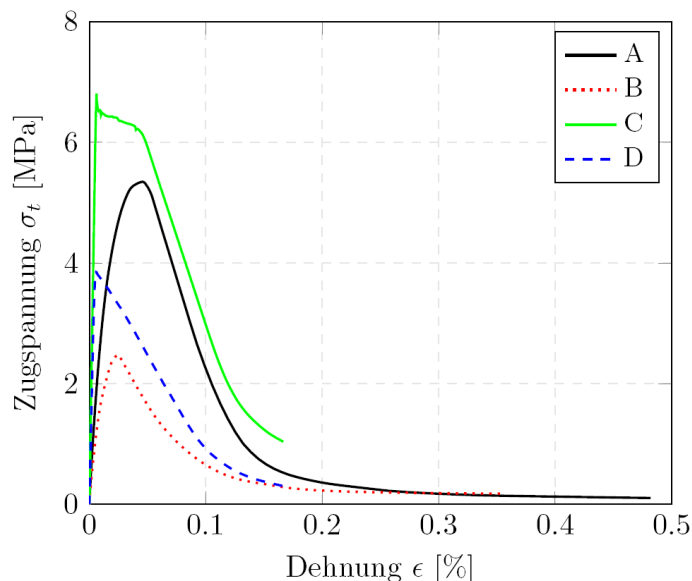


Abbildung 39: Einfluss der Kühlung und Bindungen auf die Spannungs-Dehnungskurven

Der Spannungsverlauf im Modell *C* in Abbildung 39 zeigt die größte Zugfestigkeit. Die durch die Kühlung erhaltene Mikro-Rissbildung beeinflusst sichtlich den Verlauf der Spannung, wie z.B. der Vergleich *A* mit *C* zeigt.

Tabelle 17: Einfluss der Kühlens und der Kontakte

| Modell | Kurzbezeichnung | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [Nm ⁻¹] | l_{ch} [mm] |
|--------------------------------|-----------------|---------------------|--------------|----------------------------------|------------------|
| mit Kühlvorgang mit Kontakten | <i>A</i> | 5,4 | 38,9 | 157 | 213 |
| mit Kühlvorgang ohne Bindung | <i>B</i> | 2,5 | 25,3 | 63 | 260 |
| ohne Kühlvorgang mit Kontakten | <i>C</i> | 6,8 | 116,6 | 191 | 482 |
| ohne Kühlvorgang ohne Bindung | <i>D</i> | 3,7 | 85,6 | 82 | 472 |

Ein Vergleich zwischen *A*, *C* und *B*, *D* zeigt, dass das Kühlen den größten Einfluss auf den E -Modul in Tabelle 17 hat und die Dehnung bei maximaler Festigkeit in Abbildung 39 vergrößert. Ohne Kühlung und mit Kontakten bildet die Spannungskurve *C* ein Plateau, das durch mehrere Makro-Risse verursacht wird. Bei der Gegenüberstellung von *A*, *B* und *C*, *D* wird verdeutlicht, dass eine Verbindung zwischen den Körnern und der Matrix, also $\sigma_{t,c} > 0$, einen relativ großen Einfluss auf die Festigkeit und Bruchenergie zur Folge haben, den E -Modul aber weniger beeinflussen. Generell weisen die Modelle ohne Bindung ($\sigma_{t,c} = 0$; *B*, *D*) eine geringere Festigkeit und einen kleineren E -Modul auf. Bei Zugbelastungen verringern die Körner den belastbaren Querschnitt und damit die Festigkeit. Modell *C*, das keine Kühlung erfährt, erreicht fast die Zugfestigkeit der Matrix und den theoretische E -Modul gemäß einer linearen Mischungsrechnung $E_{theo} = vol \cdot E_{Spinell} + (1 - vol) \cdot E_{Matrix} = 0,1 \cdot 210 \text{ GPa} + 0,9 \cdot 110 \text{ GPa} = 119 \text{ GPa}$.

In den folgenden Unterkapiteln wird der jeweilige Einfluss der Kontaktfestigkeit $\sigma_{t,c}$ und der Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$ an Gefügen mit 30 mm Kantenlänge (900 mm²) und 10 vol% Spinell Körnern untersucht.

6.2.3.1 Einfluss der Kontaktfestigkeit $\sigma_{t,c}$

Die Auswirkung der Kontaktfestigkeit wird anhand einer Variation von $\sigma_{t,c} = 7, 3, 1$ und 0 MPa bei konstanter Kontaktbruchenergie $G_{f,c} = 100 \text{ Nm}^{-1}$ untersucht. Bei $\sigma_{t,c} = 0$ MPa können nur Druck-, aber keine Zugkräfte übertragen werden. Durch die Reduzierung der Kontaktfestigkeit entstehen bereits bei geringen thermischen Spannungen Kontaktverluste in den Modellen. Bei vollständigem Versagen der Kontakte können im anschließenden Zugversuch keine Zugkräfte übertragen werden und das Gefüge weist eine verminderte Festigkeit auf. Die Spannungs-Dehnungs-Verläufe der Simulationen sind in Abbildung 40 abgebildet.

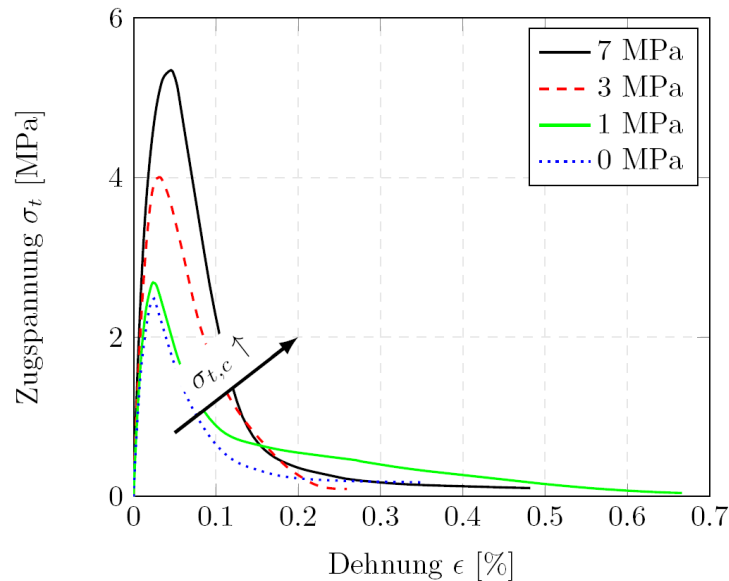


Abbildung 40: Einfluss verschiedener Kontaktfestigkeiten auf die resultierende Materialfestigkeit

Im Vergleich aller vier Varianten zeigt der Verlauf der Spannung für $\sigma_{t,c} = 1$ MPa eine große Bruchdehnung, die nicht durch Auffälligkeiten im Rissbild erklärt werden kann. Mit verringerten $\sigma_{t,c}$ reduziert sich die Festigkeit des Gefüges. Die Ergebnisse dieser Simulationen sind in Tabelle 18 angeführt.

Tabelle 18: Einfluss der Kontaktfestigkeit zwischen Körnern und Matrix

| Kontaktfestigkeit $\sigma_{t,c}$ [MPa] | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [N/m] | l_{ch} [mm] |
|---|---------------------|--------------|--------------------|------------------|
| 7 | 5,4 | 38,9 | 157 | 209 |
| 3 | 4,0 | 32,9 | 109 | 224 |
| 1 | 2,7 | 27,1 | 104 | 387 |
| 0 | 2,5 | 25,3 | 63 | 255 |

Die Festigkeit der Kontakte beeinflusst auch den E -Modul und die spezifische Bruchenergie des Modells. Je früher die Kontakte versagen, desto geringer sind die mechanischen Werte. Die resultierende Sprödigkeit, bestimmt durch die charakteristische Länge, nimmt aufgrund der stark verminderten Materialfestigkeit ab. Durch eine anfängliche Kontaktlosigkeit ($\sigma_{t,c} = 0$ MPa) ist die spezifische Bruchenergie jedoch so gering, dass die Sprödigkeit wieder zunimmt. Die beiden Modelle mit $\sigma_{t,c} = 1$ MPa und $\sigma_{t,c} = 0$ MPa zeigen bereits nach dem Kühlen einen totalen Kontaktverlust zwischen den Materialien.

Bei den weiteren Modellen mit $\sigma_{t,c} = 3$ MPa bzw. $\sigma_{t,c} = 7$ MPa tritt dieser Kontaktverlust nur teilweise auf. Graphisch sind die ermittelten mechanischen Eigenschaften in Abhängigkeit der Kontaktfestigkeit in Abbildung 41 dargestellt.

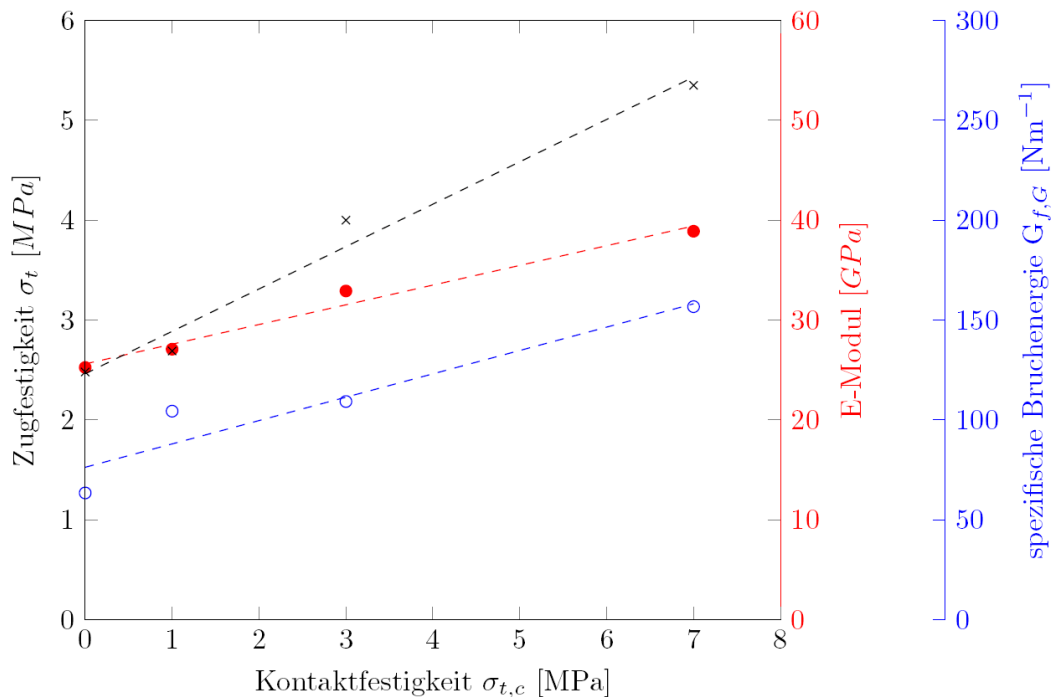


Abbildung 41: Einfluss der Kontaktfestigkeit $\sigma_{t,c}$ auf die Zugfestigkeit, den E -Modul und spezifische Bruchenergie

6.2.3.2 Einfluss der spezifischen Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$

Ein weiterer Einflussparameter ist die Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$. Am definierten Gefüge wird dessen Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften durch die Werte $G_{f,c} = 100, 50, 10$ und 0 Nm^{-1} untersucht. Mit Verminderung von $G_{f,c}$ wird weniger Energie für eine Separation der Matrix von den Körnern benötigt. Die Kontaktfestigkeit beträgt in dieser Simulationsreihe konstant $\sigma_{t,c} = 7$ MPa. Die erhaltenen Spannungs-Dehnungsverläufe sind in Abbildung 42 dargestellt.

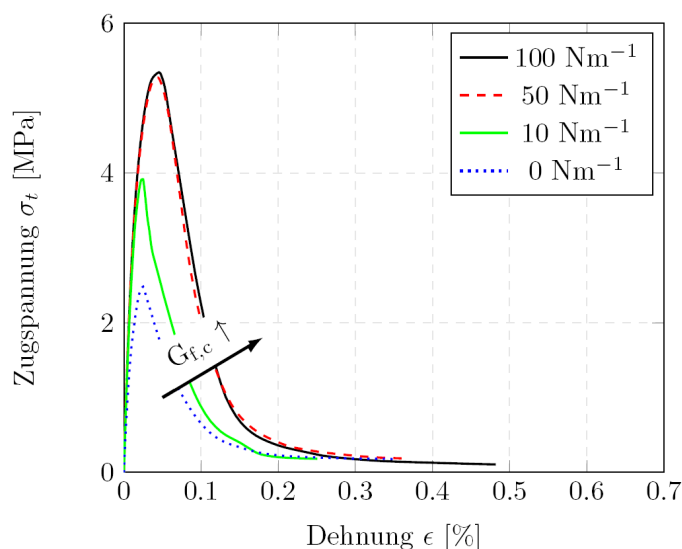


Abbildung 42: Einfluss verschiedener spezifischer Kontaktbruchenergien auf die resultierende Materialfestigkeit

Durch eine Halbierung der Kontaktbruchenergie von $G_{f,c} = 100$ auf $G_{f,c} = 50 \text{ Nm}^{-1}$ ist keine merkliche Änderung des Spannungsverlauf festzustellen. Erst bei 10 % der ursprünglichen Kontaktbruchenergie kann ein eindeutiger Einfluss beobachtet werden. Die erhaltenen Werte zu den Spannungsverläufen sind in Abbildung 42 und Tabelle 19 aufgelistet.

Tabelle 19: Einfluss der spezifischen Bruchenergie der Matrix

| Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$ [Nm ⁻¹] | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [Nm ⁻¹] | l_{ch} [mm] |
|--|---------------------|--------------|----------------------------------|------------------|
| 100 | 5,4 | 38,9 | 157 | 213 |
| 50 | 5,3 | 38,3 | 151 | 210 |
| 10 | 3,9 | 35,5 | 81 | 187 |
| 0 | 2,5 | 25,3 | 63 | 260 |

Mit einer anfänglichen Kontaktbruchenergie von $G_{f,c} = 0 \text{ Nm}^{-1}$ bzw. mit der Kontaktfestigkeit von $\sigma_{t,c} = 0 \text{ MPa}$ können bereits vor der Kühlung lediglich Druckspannungen übertragen werden. Daher liefern gleiche Modelle mit diesen Kontakteigenschaften erwartungsgemäß dieselben Ergebnisse. Ein graphische Zusammenfassung der Werte aus Tabelle 19 findet sich in Abbildung 43.

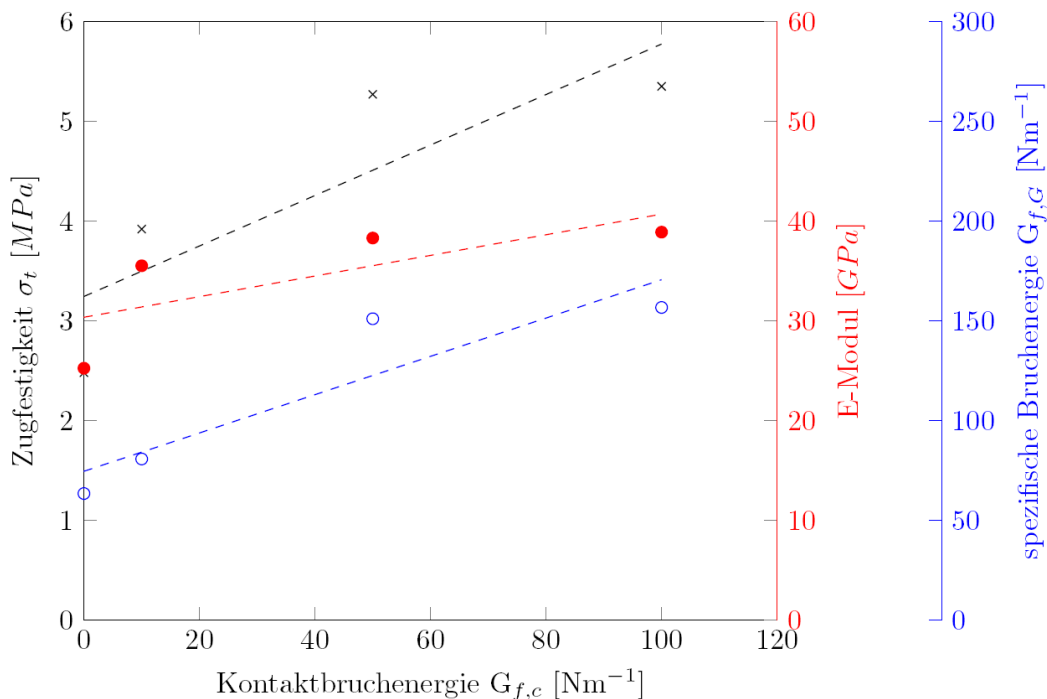


Abbildung 43: Einfluss der Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$ auf die Zugfestigkeit, den E -Modul und die spezifische Bruchenergie

Eine mögliche lineare Korrelation zwischen der Kontaktfestigkeit und den erhaltenen mechanischen Eigenschaften wurde nicht beobachtet.

6.2.3.3 Zusammenfassung der Ergebnisse in Bezug auf die Kontakteigenschaften

Aus den gezeigten Ergebnissen mit Kontakten, deren Entfestigung vor jener der Matrix eintritt, geht hervor, dass bereits während des Kühlens ein teilweiser Verlust der Kontakte zwischen den Körnern und der Matrix stattfindet. Bei vergleichsweise sehr geringer Kontaktfestigkeit bzw. spezifischer Kontaktbruchenergie können nach dem Kühlen nur mehr Druckspannungen zwischen den Körnern und der Matrix übertragen werden.

Mit den Extremwerten $\sigma_{t,c} = 0$ MPa kann dieser Zustand bereits am Anfang der Kühlsimulation und mit $G_{f,c} = 0$ Nm⁻¹ sehr früh bei dem Erreichen der Kontaktfestigkeit erzielt werden. Nachfolgend zeigen Rissbilder in Abbildung 44 das vollständige Lösen der Körner von der Matrix entlang des Makro-Risses für unterschiedliche Kontakteigenschaften.

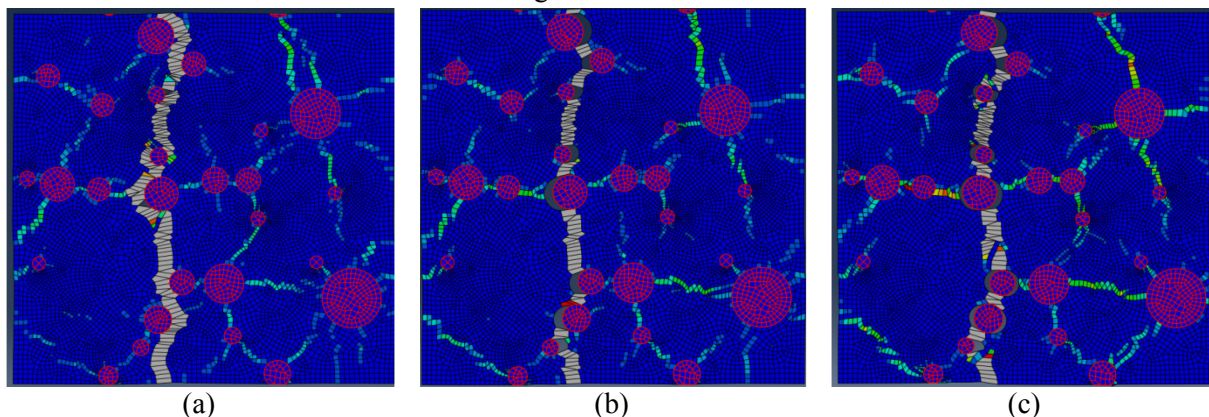


Abbildung 44: Rissbilder mit verschiedenen Kontakteigenschaften, in b und c ist entlang des Makro-Risses (grau) ein Ablösen der Matrix von den Körnern

In Abbildung 44 (a) besitzen die Kontakte dieselben Eigenschaften wie die Matrix. Wie zu erkennen ist, lösten sich keine Körner vom umgebenden Material. Das Rissbild in Abbildung 44 (b) zeigt eine teilweise Ablösung der Körner bei niedrigerer Festigkeit von $\sigma_{t,c} = 3$ MPa und einer spezifischen Bruchenergie von $G_{f,c} = 50$ Nm⁻¹. Besteht bereits vor dem Kühlen teilweise keine Verbindung ($\sigma_{t,c} = 7$ MPa bzw. $G_{f,c} = 0$ Nm⁻¹), wird das in Abbildung 44 (c) gezeigte Rissbild erhalten. Hier ist zu erkennen, dass sich Kontakte auf zwei Seiten eines Kornes gelöst haben. Die erhaltenen Rissbilder zeigen ähnliche Makro-Risse, die sich in ihren Verläufen nur geringfügig unterscheiden. Alle Simulationen, die im Zuge der Untersuchung der Kontakteigenschaften durchgeführt wurden, sind in Tabelle 20 zusammengefasst.

Tabelle 20: Ergebnisse der Simulationsreihen in Bezug auf die Kontakteigenschaften $\sigma_{t,c}$ und $G_{f,c}$

| Bezeichnung | Kontaktfestigkeit | Kontaktbruchenergie | σ_t | E | $G_{f,G}$ | l_{ch} |
|-------------|-------------------------|----------------------------------|------------|------|-----------|----------|
| | $\sigma_{t,c}$ [MPa] | $G_{f,c}$ [Nm ⁻¹] | | | | |
| A | 7 | 100 | 5,4 | 38,9 | 157 | 213 |
| B | 3 | 100 | 4,0 | 32,9 | 109 | 224 |
| C | 1 | 100 | 2,7 | 27,1 | 104 | 387 |
| D | 0 | 100 | 2,5 | 25,3 | 63 | 255 |
| E | 7 | 50 | 5,3 | 38,3 | 151 | 210 |
| F | 7 | 10 | 3,9 | 35,5 | 81 | 187 |
| G | 7 | 0 | 2,5 | 25,3 | 63 | 260 |
| H | 3 | 50 | 4 | 31,5 | 85 | 168 |
| I | 1 | 50 | 2,7 | 27,1 | 67 | 251 |
| J | 6 | 10 | 3,6 | 37,4 | 67,6 | 191 |

Der Vergleich der Simulationen gleicher Kontaktfestigkeit, also A zu E, B zu H und C zu I aus Tabelle 20 zeigt Parallelen: Trotz der jeweiligen Halbierung von $G_{f,c}$ ändern sich die Zugfestigkeit und der E-Modul kaum. Demnach ist der Einfluss der Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$ bis zu mindestens einer Halbierung (im Vergleich zur Matrix-Bruchenergie $G_{f,M}$) für die Ergebnisse nicht relevant. Erst ab deutlich geringeren Werten bewirken die schwächeren Kontakte eine Verminderung der ermittelten bruchmechanischen Kenngrößen des Modells. Der Einfluss der Kontaktfestigkeit auf die Modelleigenschaften ist aus der Korrelations-Matrix in Tabelle 21 zu erkennen.

Tabelle 21: Korrelationsmatrix der Werten aus Tabelle 20

| | Kontaktfestigkeit $\sigma_{t,c}$ | spez. Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$ | σ_t | E | $G_{f,G}$ |
|----------------------------------|----------------------------------|-------------------------------------|------------|-----|-----------|
| Kontaktfestigkeit $\sigma_{t,c}$ | 1 | | | | |
| Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$ | -0,28 | 1 | | | |
| σ_t | 0,68 | 0,23 | 1 | | |
| E | 0,74 | 0,06 | 0,92 | 1 | |
| $G_{f,G}$ | 0,49 | 0,5 | 0,87 | 0,7 | 1 |

Es zeigt sich der deutlichen Einfluss von $\sigma_{t,c}$ auf die Festigkeit und den E -Modul. Die spezifische Kontaktbruchenergie scheint laut dieser Betrachtung keinen wesentlichen Einfluss zu nehmen, jedoch ist eine zunehmende Bedeutung bei niedrigen Werten zu beobachten (Abbildung 45 (a)). In dieser Abbildung werden die erhaltenen Zugfestigkeiten über der jeweiligen Kontaktfestigkeit und in Abbildung 45 (b) über der Kontaktbruchenergie aus Tabelle 20 aufgetragen. Die Ergebnisse sind mit dem jeweiligen zweiten Parameter beschriftet.

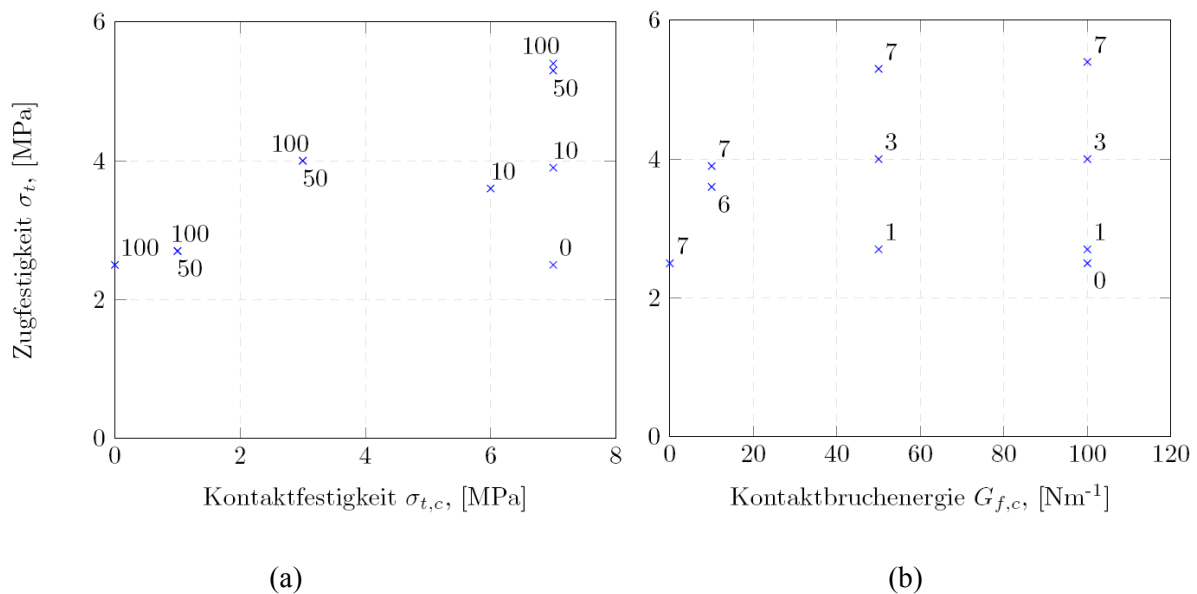


Abbildung 45: Entwicklung der Zugfestigkeit in Abhängigkeit der spezifischen Kontaktfestigkeit (a) und Kontaktbruchenergie (b). Die Zahlen zeigen den Wert des jeweiligen zweiten Parameters an.

6.2.4 Einfluss des Spinell-Gehalts

Je mehr Spinell in der Struktur vorhanden ist, desto näher liegen die Bereiche, in denen es zu thermischen Spannungen kommt. Es wird beobachtet, dass sich bei zunehmendem Spinell-Gehalt ein dichteres Rissnetzwerk ausbildet. Als Folge nehmen die Festigkeit und die spezifische Bruchenergie ab. Anhand einer Simulationsreihe mit Kontakteigenschaften, die jener der Matrix entsprechen, und einer Reihe mit den reduzierten Kontaktwerten $\sigma_{t,c} = 6 \text{ MPa}$ und $G_{f,c} = 10 \text{ Nm}^{-1}$, wurde die Auswirkung des Spinell-Gehalts untersucht. In der folgenden Abbildung 47 wird das Rissbild eines Gefüges mit 5 vol% Spinell und eines mit 15 vol% Spinell nach dem Kühlen gezeigt.

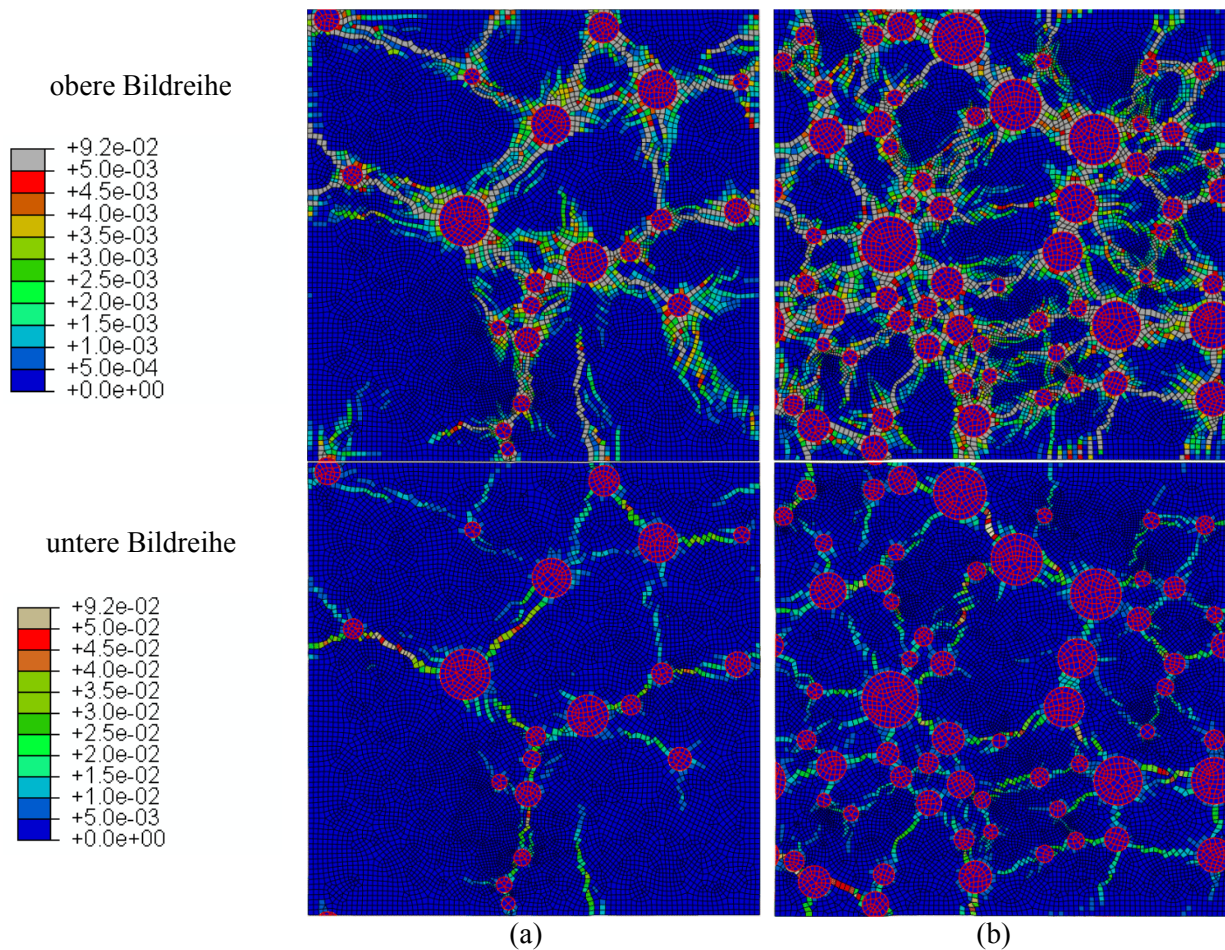


Abbildung 46: Rissnetzwerk, dargestellt durch irreversible Dehnungen, nach dem Kühlen in einem Gefüge mit (a) 5 vol% Spinell und mit (b) 15 vol%, die beiden Bildreihen unterscheiden sich durch die obere Begrenzung der Farbskala

Das Gefüge in Abbildung 46 (a) mit 5 vol% Spinell zeigt ein deutlich weniger verzweigtes Rissnetzwerk als das Gefüge in Abbildung 46 (b), in dem 15 vol% Spinell vorhanden sind. Die nachfolgenden Spannungsverläufe in Abbildung 47 zeigen Ergebnisse aus Simulationen mit 5 vol%, 10 vol% und 15 vol% Spinell-Gehalt. Die vollen Linien zeigen Ergebnisse mit Kontakteigenschaften die dem Matrix-Material entsprechen, die gestrichelten wurden mit den erwähnten reduzierten Kontakteigenschaften erhalten.

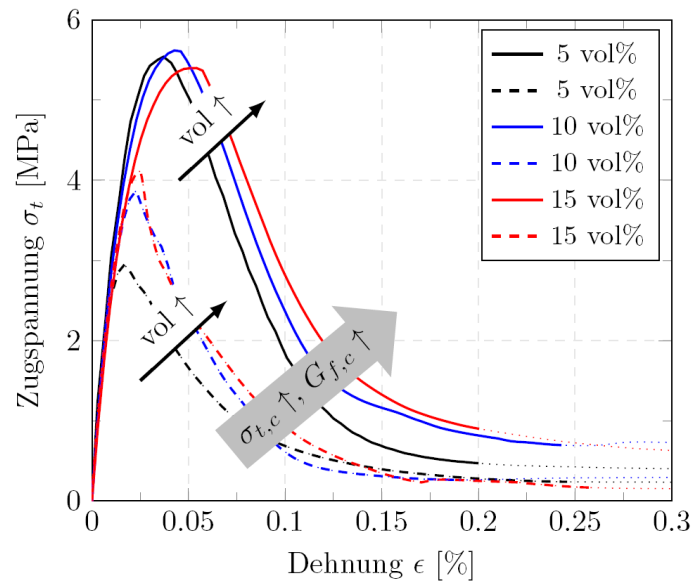


Abbildung 47: Vergleich des Einflusses des Spinell Gehalts von 5 vol%, 10 vol% und 15 vol% und verminderter Kontakteigenschaften auf den Spannungsverlauf an dem gleichen Gefüge anhand von Einzelsimulationen

Die Verläufe der Spannungen in Abbildung 47 zeigen eine Rechtsverschiebung der Kurven mit steigendem Spinell-Gehalt, der unabhängig von den Kontakten ist. Die Restspannungen am Ende der Kurven der Einzelsimulationen mit starken Kontakten beträgt ca. 0,8 MPa. Im Gegensatz dazu sind die Restspannungen der Modelle mit schwachen Kontakten deutlich unter diesem Wert. In weiterer Folge wurden Simulationen mit Spinell-Gehalten bis zu 35 vol% durchgeführt. Diese Ergebnisse sind in Abbildung 48 zusammengefasst dargestellt.

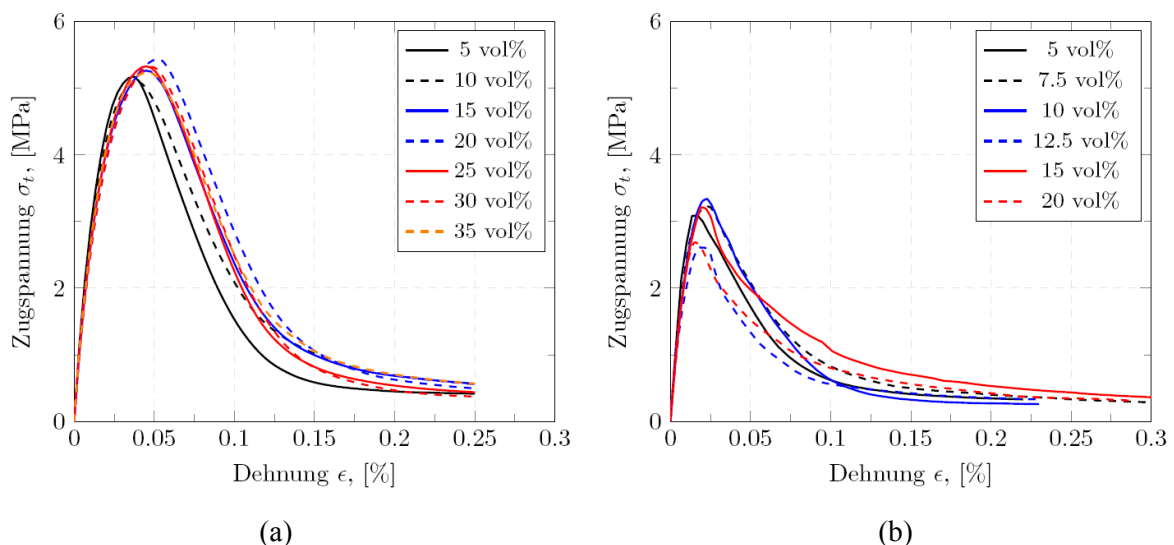


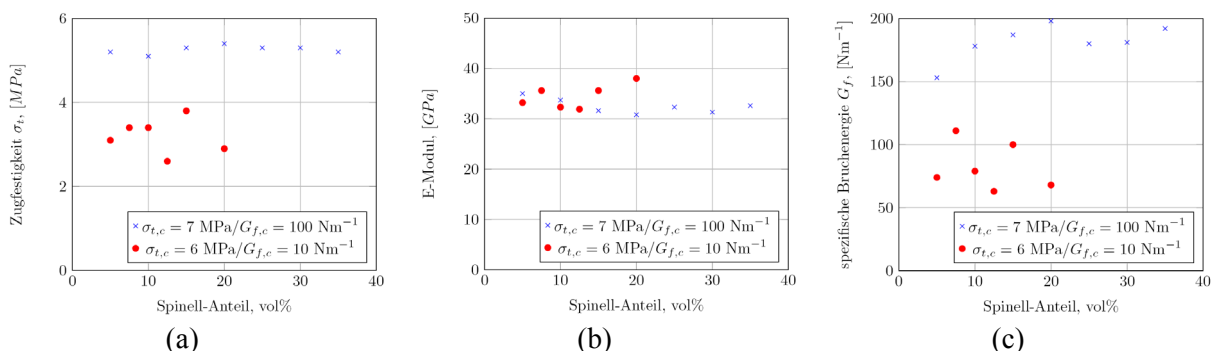
Abbildung 48: Spannungsverläufe von Gefügen mit unterschiedlichen Spinell-Anteilen mit den Kontaktwerten in (a) $\sigma_{t,c} = 7 \text{ MPa}$, $G_{f,c} = 100 \text{ Nm}^{-1}$ und in (b) $\sigma_{t,c} = 6 \text{ MPa}$, $G_{f,c} = 10 \text{ Nm}^{-1}$

Aus Abbildung 48 (a) mit starken Kontakten und Abbildung 48 (b) mit schwachen Kontakten, kann kein ersichtlicher Trend in Bezug auf den Spinell-Gehalt festgestellt werden. Die zur Abbildung 48 gehörenden Werte sind in Tabelle 22 gelistet.

Tabelle 22: Ergebnisse aus den Simulationen verschiedener Spinell-Gehalte und unterschiedlicher Kontakte

| Spinell-Anteil [%] | Anzahl der Simulationen | | σ_t [MPa] | | E [GPa] | | $G_{f,G}$ [Nm ⁻¹] | | l_{ch} [mm] | |
|--------------------|-------------------------|---------|------------------|---------|-----------|---------|-------------------------------|---------|---------------|---------|
| | stark | schwach | stark | schwach | stark | schwach | stark | schwach | stark | schwach |
| 5 | 6 | 2 | 5,2 | 3,1 | 35 | 33,2 | 153 | 75 | 198 | 250 |
| 7,5 | 0 | 4 | - | 3,4 | - | 35,6 | - | 111 | - | 324 |
| 10 | 8 | 3 | 5,1 | 3,4 | 33,7 | 32,3 | 178 | 78 | 231 | 225 |
| 12,5 | 0 | 3 | - | 2,6 | - | 31,9 | - | 69 | - | 319 |
| 15 | 6 | 4 | 5,3 | 3,3 | 31,6 | 29,6 | 187 | 122 | 210 | 335 |
| 20 | 6 | 4 | 5,4 | 2,8 | 30,8 | 36,6 | 198 | 82 | 209 | 391 |
| 25 | 6 | 0 | 5,3 | - | 32,3 | - | 180 | - | 207 | - |
| 30 | 6 | 0 | 5,3 | - | 31,3 | - | 181 | - | 202 | - |
| 35 | 6 | 0 | 5,2 | - | 32,6 | - | 192 | - | 231 | - |

Wider Erwarten wirkt sich eine Erhöhung des Spinell-Gehalts mit starken Kontakten nicht auf die Eigenschaften des Materials aus. Einzig die Bruchenergie variiert in einem Bereich zwischen 5 vol% und 15 vol%, und bleibt bei höheren Spinell-Gehalten weitgehend konstant. Die stark variierenden Ergebnisse in Abbildung 49 (a) und (c) ab einem Spinell-Gehalt von 10 vol% lassen auch vermuten, dass speziell bei schwächeren Kontakten die Kornanordnung einen zunehmenden Einfluss auf die Ergebnisse haben.

Abbildung 49: Einfluss des Spinell-Gehalts und unterschiedlicher Kontakteigenschaften auf (a) die Zugfestigkeit, (b) den E -Modul und (c) auf die spezifische Bruchenergie

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die ermittelten Größen weitgehend unabhängig vom Spinell-Gehalt sind. Weder mit starken noch mit schwachen Kontakten kann ein eindeutiger Zusammenhang zwischen Spinell-Gehalt und der Festigkeit und dem E -Modul gefunden werden. Einzig mit der Wahl von Kontakten, die dasselbe Entfestigungsverhalten wie die Matrix aufweisen, kann ein Zusammenhang zwischen dem Spinell-Anteil und der spezifischen Bruchenergie in einem Bereich bis 20 vol% Spinell erkannt werden. Der nahezu fehlende Einfluss des Spinell-Gehalts auf die Eigenschaften wurde nicht erwartet. Aufgrund des nichtberücksichtigten MgO Anteils, der einen wesentlichen Einfluss auf die Eigenschaften ausübt, können die erhaltenen Trends und Ergebnisse nicht mit jenen aus experimentellen Untersuchungen verglichen werden. In diesen Versuchen ist im Bereich zwischen 5 vol% und 15 vol% eine deutliche Reduktion des E -Moduls und der Festigkeit festgestellt worden. Ab 15 vol% bis zu einem Gehalt von 35 % änderte sich die Festigkeit nur mehr geringfügig [5].

6.2.5 Einfluss einer dritten Gefügekomponente

Das Script wurde dahin erweitert, auch andere Materialien als weitere Gefügebestandteile darzustellen. In den folgenden Ergebnissen wurden neben 10 vol% Spinell auch zusätzlich unterschiedliche Gehalte an Magnesia-Körnern, bei gleichbleibender Korngrößenverteilung, berücksichtigt. Der maximal darstellbare Anteil an MgO vol_{MgO} ist durch den darstellbaren Gesamtgehalt vol_{max} (Kapitel 4.2.1) abzüglich des Spinell-Anteils vol_{MA} begrenzt. Die Materialeigenschaften des MgO-Materials in Tabelle 23 sind als Ergänzung zu den Materialwerten des Spinells in Tabelle 5 angegeben.

Tabelle 23: Verwendete Materialeigenschaften für Simulationen mit unterschiedlichen MgO-Gehalten

| Materialkenngröße | | | MgO |
|------------------------------------|----------|--------------------------|------|
| E -Modul | E | [GPa] | 300 |
| Poisson's Zahl | ν | [-] | 0,17 |
| thermischer Ausdehnungskoeffizient | α | $[10^{-6} \cdot K^{-1}]$ | 13,6 |

Mit der Annahme gleicher thermischer Ausdehnungskoeffizienten der Magnesia und der Matrix entstehen während des Kühlens durch die MgO-Körner keine zusätzlichen Spannungen im Gefüge. An fünf Modellen mit unterschiedlichen MgO-Gehalten von 0, 10, 15, 25 und 30 vol% und einem Spinell-Gehalt von 10 vol% wurde der Einfluss der zusätzlichen Körner untersucht. Die verwendeten Kontakteigenschaften aller Körner betragen $\sigma_{t,c} = 7$ MPa, $G_{f,c} = 100$ Nm⁻¹. Das Ergebnis der Spannungs-Dehnungskurven dieser Simulationsreihe wird in Abbildung 50 gezeigt.

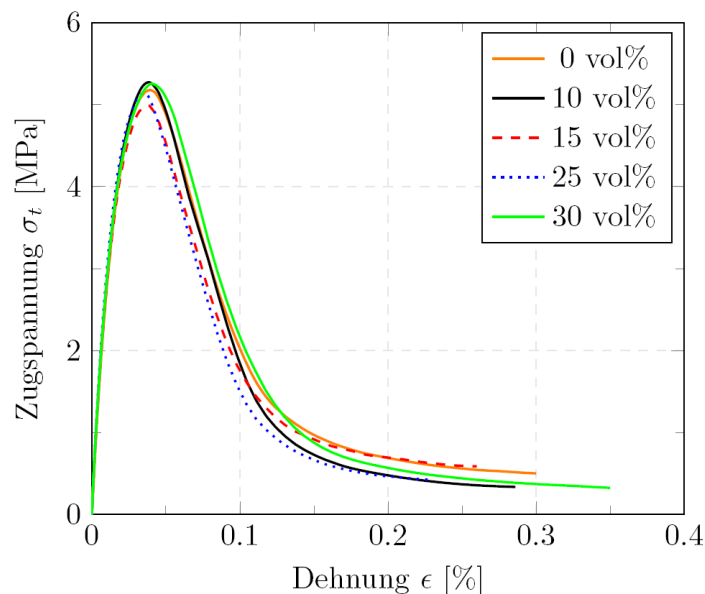


Abbildung 50: Spannungsverläufe unterschiedliche Volumens-Anteile an MgO bei 10 vol% Spinell

Da im Vergleich zu einem höheren Spinell-Gehalt durch die MgO-Körner keine zusätzlichen Spannungen auftreten, war zu erwarten, dass der MgO-Gehalt keinen Einfluss auf den Spannungsverlauf ausübt. Diese Annahme wird durch die nahezu identen Spannungsverläufe in Abbildung 50 und durch die Ergebnisse in Tabelle 24 bestätigt.

Tabelle 24: Ergebnisse aus Simulationen mit unterschiedlichen MgO-Gehalten

| 10 vol% MA inkl. Vol MgO [%] | Anzahl der Sim. | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [Nm ⁻¹] | l_{ch} [mm] |
|---------------------------------|--------------------|---------------------|--------------|----------------------------------|------------------|
| 0 | 11 | 5,2 ±0,3 | 34 ±4 | 179 ±44 | 241 ±71 |
| 10 | 6 | 5,3 ±0,2 | 42 ±3 | 173 ±28 | 261 ±50 |
| 15 | 2 | 5,0 ±0,2 | 41 ±1 | 179 ±6 | 290 ±26 |
| 25 | 2 | 5,2 ±0,0 | 43 ±1 | 159 ±27 | 254 ±44 |
| 30 | 2 | 5,3 ±0,2 | 42 ±4 | 189 ±16 | 285 ±42 |

Einzig der E -Modul wird durch die zusätzlichen MgO-Körner geringfügig erhöht. Die Berücksichtigung von MgO führt zu einer scheinbaren Beeinflussung der charakteristischen Länge, die aber aufgrund der Standardabweichungen der Bruchenergie zweifelhaft ist. Die graphische Zusammenfassung der Simulationsergebnisse ist in Abbildung 51 gezeigt.

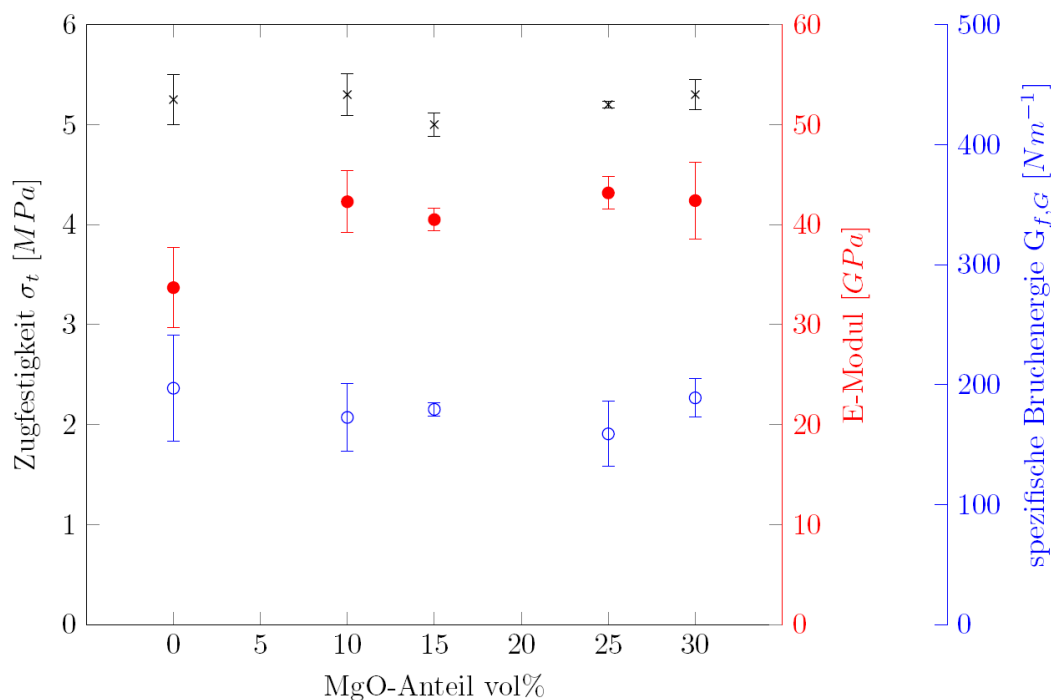


Abbildung 51: Einfluss des MgO-Gehalts auf die Zugfestigkeit, den E -Modul und die spezifische Bruchenergie

Durch die alleinige Berücksichtigung der MgO-Körner mit „starken“ Kontakten, ändert sich die Charakteristik des Modells kaum. In den folgenden Simulationen werden daher der Einfluss reduzierter Kontakteigenschaften und die Variation des MgO-Gehalts untersucht. Für diese Simulationen werden Werte für den E -Modul der Matrix und deren Bruchenergie aus einem Experiment [27] verwendet. Die Auswirkung reduzierter Kontakteigenschaften wird zuerst an ein und demselben Gefüge mit zwei unterschiedlichen Kontakteigenschaften untersucht. Die Modellbezeichnungen und die verwendeten Kennwerte der vier Modelle sind in Tabelle 25 angeführt.

Tabelle 25: Modellbezeichnungen der Modelle mit unterschiedlichen Kontakteigenschaften

| Modellbezeichnung | $\sigma_{t,c}$ [MPa] | $G_{f,c}$ [Nm ⁻¹] | E [GPa] | $G_{f,M}$ [Nm ⁻¹] |
|-------------------|-------------------------|----------------------------------|--------------|----------------------------------|
| <i>A</i> | 7 | 100 | 110 | 100 |
| <i>B</i> | 6 | 10 | 110 | 100 |
| <i>A'</i> | 7 | 100 | 90 | 196 |
| <i>B'</i> | 6 | 10 | 90 | 196 |

Die Matrix der Modelle *A* und *B* weisen dieselbe Bruchenergie $G_{f,M} = 100 \text{ Nm}^{-1}$ und denselben E -Modul $E = 110 \text{ GPa}$ auf, und unterscheiden sich durch ihre Kontakteigenschaften. Die Modelle *A'* und *B'* unterscheiden sich ebenfalls durch die Kontakte, ihre Matrizen besitzen im Vergleich mit *A* bzw. *B* geänderte Werte. Die Spannungsverläufe aller vier Modelle sind in Abbildung 52 dargestellt.

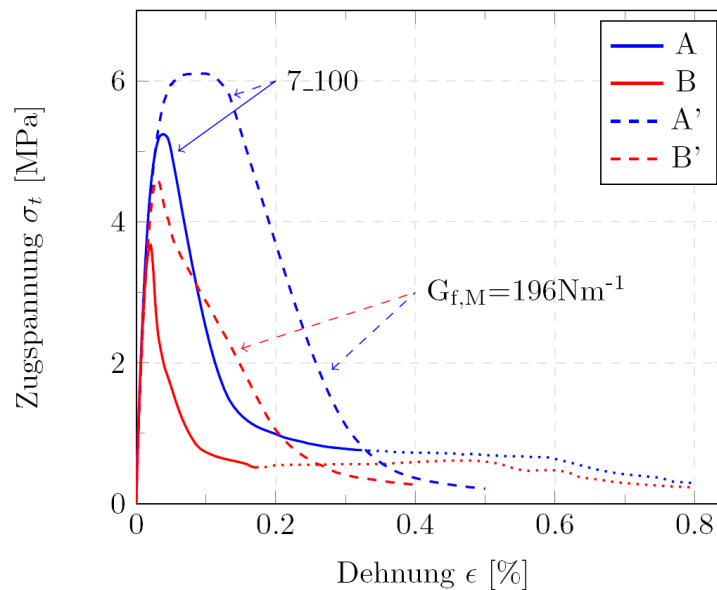


Abbildung 52: Spannungsverlauf der simulierten Modelle mit unterschiedlichen Kontakteigenschaften und erhöhter Bruchenergie

Wie an den Spannungsverläufen *A* vs. *A'* ($\sigma_{t,c} = 7, G_{f,c} = 100$) bzw. *B* vs. *B'* ($\sigma_{t,c} = 6, G_{f,c} = 10$) zu erkennen ist, bewirkt die Erhöhung der spezifischen Bruchenergie der Matrix eine deutliche Steigerung der Festigkeit. Weitere Ergebnisse zu diesen Simulationen sind in Tabelle 26 angegeben.

Tabelle 26: Ergebnisse aus Simulationen mit erhöhter Bruchenergie der Matrix

| | Anzahl der Simulationen | $\sigma_{t,c}$ [MPa] | $G_{f,c}$ [Nm ⁻¹] | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [Nm ⁻¹] | l_{ch} [mm] |
|-----------|-------------------------------|-------------------------|----------------------------------|---------------------|--------------|----------------------------------|------------------|
| <i>A</i> | 2 (inkl. gepunktete Linie) | 7 | 100 | 5,3 | 38,4 | 189 (274) | 263 (382) |
| <i>B</i> | 1 (inkl. gepunktete Linie) | 6 | 10 | 3,7 | 39 | 66 (154) | 190 (439) |
| <i>A'</i> | 2 | 7 | 100 | 6,1 | 37,8 | 406 | 410 |
| <i>B'</i> | 2 | 6 | 10 | 4,7 | 35,1 | 196 | 316 |

Die Ergebnisse in Tabelle 26 zeigen eine Verminderung des resultierenden E -Moduls (*A* vs. *A'*: -1,6 %, *B* vs. *B'*: -10 %), der im Vergleich mit der Änderung des ursprünglichen E -Moduls in der Matrix nicht sehr groß ist (-18,2 %). Es ist eine erkennbare Zunahme der spezifischen Bruchenergie $G_{f,G}$ zu beobachten (*A* vs. *A'* bzw. *B* vs. *B'*).

Insgesamt erhöht sich dadurch die charakteristische Länge des Materials um ca. 55 %. Die in Klammer angegebenen Werte resultieren aus der Erweiterung des Auswertungsbereichs, dargestellt durch eine gepunktete Linie. Diese endet bei jenem Spannungsniveau, die der jeweiligen korrespondierenden Kurve entspricht. Dadurch ergeben sich deutlich erhöhte spezifische Bruchenergien sowie höhere charakteristische Längen. In weitere Folge wurden Simulationen mit den Matrix-Werten $G_{f,M} = 196 \text{ Nm}^{-1}$ bzw. $E = 90 \text{ GPa}$, den angegebenen Kontakteigenschaften und einem variierenden MgO-Gehalt durchgeführt. Zusätzlich wurde der Risspfad des Makro-Risses untersucht.

Auswertung des Risspfades

Die Auswertung des Risspfades erfolgte durch Abmessen der Länge des entstandenen Makro-Risses im Gefüge. Beispielhaft wird die Auswertung an einem Modell mit 30 vol% MgO erläutert. Der Makro-Riss in Abbildung 53 (a), der bei Erreichen des Abbruchkriteriums vorhanden ist, kann prinzipiell in zwei Arten unterteilt werden: Die Rissart *Riss in der Interface* (rot) und *Riss in der Matrix* (schwarz) sind in Abbildung 53 (b) abgebildet und bezeichnen den Ort des Risses im Material. Eine vergleichbare (experimentelle) fraktographische Untersuchung des Risspfades wurde auch in anderen Arbeiten durchgeführt [7] [24].

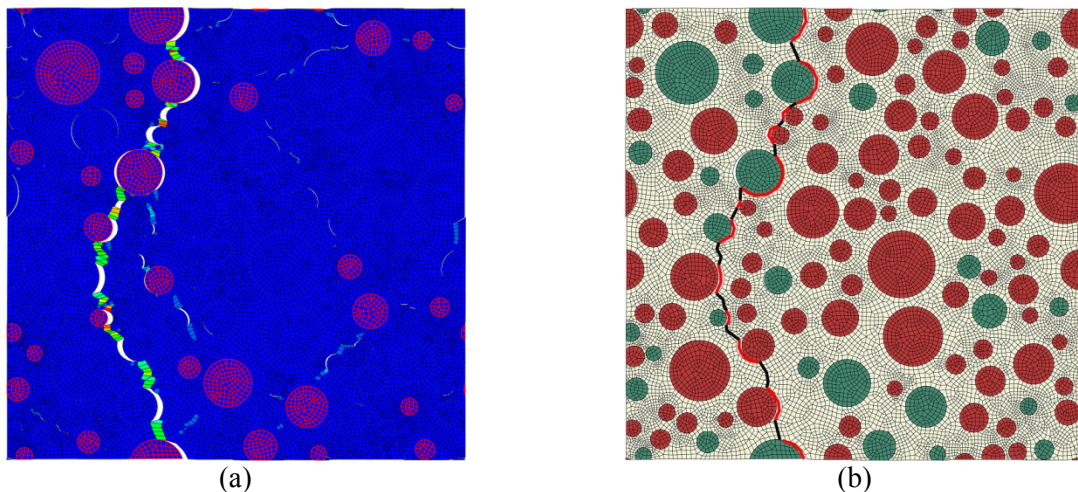


Abbildung 53: Rissverlauf nach dem Zugversuch.

Bild (a) in Abbildung 53 stellt die irreversiblen Dehnungen dar, wobei der weiße Anteil die Öffnung des Interfaces Korn/Matrix kennzeichnet. In Bild (b) werden die Matrix beige, die 30 vol% MgO-Körner rot und die 10 vol% Spinell-Körner grün dargestellt. Der Risspfad unterscheidet zwischen Verlauf in der Matrix (schwarz) und Verlauf entlang des Interfaces (rot).

In Abbildung 54 sind zwei unterschiedliche Arten der Rissbetrachtung dargestellt. Im oberen Bild wird die Länge des Risspfades mit all seinen Richtungsänderungen bestimmt. Im Gegensatz dazu ist die Länge des Risses im untern Bild in jedem Fall die Modelllänge a . Beide Risse setzen sich aus schwarzen und roten Linien zusammen. Dabei wird der Verlauf des Risses entlang der Korngrenze durch die rote Linie und jener in der Matrix durch die schwarze symbolisiert. Durch die Projektion des Risses auf die Modellabmessung ergeben sich unterschiedlicher Längen, so verlaufen im oberen Bild 44,8 % des Risses entlang der Korngrenzen und im unteren Bild lediglich 34,5 %.

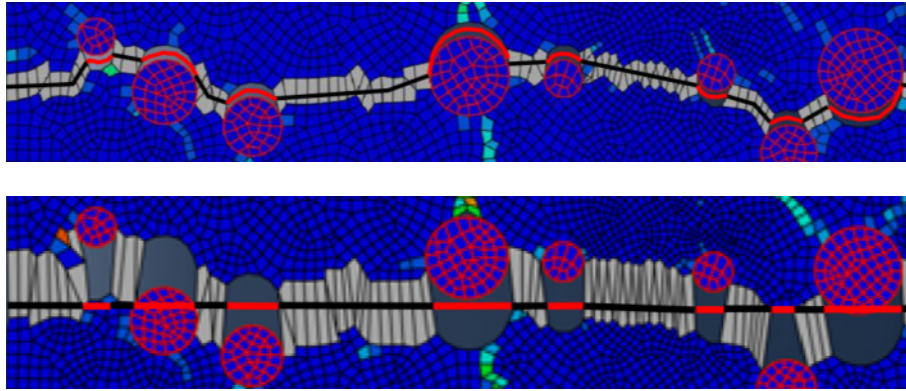


Abbildung 54: Ausschnitt des Makro-Risses durch die Matrix.

Durch die theoretische Betrachtung der roten Linien als Leerstellen und die schwarzen als jenes Materials das die Zugfestigkeit σ_t aufweist, kann eine theoretische Festigkeit $\sigma_{theo} = \sigma_t \cdot \frac{l_{Riss_Matrix}}{l_{Riss_ges}}$ vor dem Kühlen berechnet werden. Unter der Berücksichtigung der gesamten Risslänge beträgt $\sigma_{theo} = 7MPa \cdot 0,552 = 3,9MPa$ im zweiten Fall wäre $\sigma_{theo} = 4,6MPa$. In den weiteren Simulationsergebnissen, die sich ausschließlich mit der gesamten Risslänge beschäftigen, liegen die Festigkeiten zwischen den beschriebenen zwei möglichen theoretischen Festigkeiten σ_{theo} .

Erhöhung des Interface-Anteils im Modell

Durch die zusätzlichen MgO-Körner steht dem Modell mehr Interface zur Verfügung. Anhand der Ergebnisse der folgenden Simulationen mit den Kontakteigenschaften $\sigma_{t,c} = 6 MPa$, $G_{f,c} = 10 Nm^{-1}$ und den MgO-Gehalten 0, 10, 20 und 30 vol%, wird der Einfluss der Kontakte weiter verdeutlicht. Nachfolgend sind die erhaltenen Ergebnisse in der Abbildung 55 dargestellt.

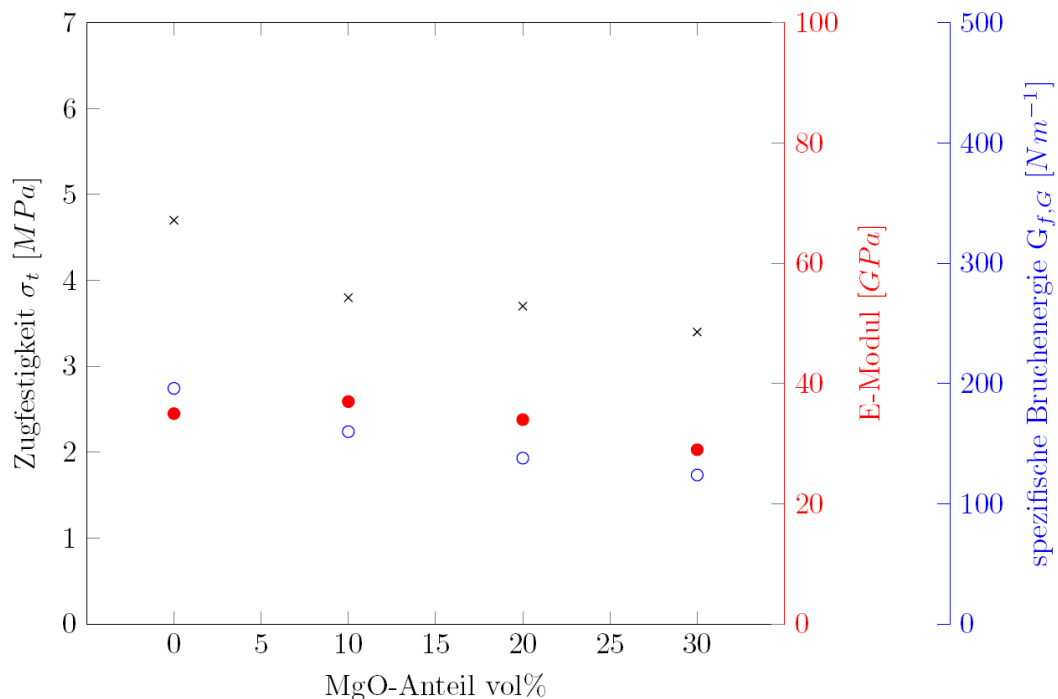


Abbildung 55: Einfluss des MgO-Gehalts und stark verminderten Kontakteigenschaften auf die Zugfestigkeit, den E-Modul und die spezifische Bruchenergie

Wie in Abbildung 55 zu erkennen ist, nehmen die mechanischen Eigenschaften mit zunehmenden MgO-Gehalt bzw. größerem Interface-Anteil ab. Die genauen Werte sind in Tabelle 27 angeführt. Für die verschiedenen MgO-Gehalte wird der Anteil des *Risses im Interface* und die gesamte Risslänge, bezogen auf die kalte Modellgröße a , festgehalten.

Tabelle 27: Ergebnisse der Simulation mit zunehmenden MgO-Gehalt und stark reduzierten Kontakteigenschaften $\sigma_{t,c} = 6$ MPa und $G_{f,c} = 10$ Nm⁻¹ und 10 vol% Spinell

| MgO-Anteil [%] | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [Nm ⁻¹] | l_{ch} [mm] | Riss im Interface [%] | Risslänge / a [%] |
|----------------|------------------|-----------|-------------------------------|---------------|-----------------------|---------------------|
| 0 | 4,7 | 35 | 196 | 310 | 49 | 127 |
| 10 | 3,8 | 37 | 160 | 410 | 52 | 130 |
| 20 | 3,7 | 34 | 138 | 343 | 58 | 132 |
| 30 | 3,4 | 29 | 124 | 311 | 69 | 129 |

Mit steigendem Interface- bzw. MgO-Anteil kommt es zu einer Verminderung der Zugfestigkeit, des E -Moduls und der spezifischen Bruchenergie. In weiterer Folge steigt die charakteristische Länge leicht an. Mit steigendem MgO-Gehalt verläuft, wie zu erwarten, der Riss zunehmend entlang der Korngrenzen im Interface. Das Verhältnis Risslänge zu Modellgröße a bleibt jedoch weitgehend unverändert.

Tabelle 28: Korrelationsmatrix der Werte aus Tabelle 27

| | MgO Anteil | σ_t | E | $G_{f,G}$ | l_{ch} | Riss entlang des Interfaces | Risslänge / a |
|-----------------------------|------------|------------|-------|-----------|----------|-----------------------------|-----------------|
| MgO-Anteil | 1 | | | | | | |
| σ_t | -0,92 | 1 | | | | | |
| E | -0,80 | 0,52 | 1 | | | | |
| $G_{f,G}$ | -0,98 | 0,97 | 0,66 | 1 | | | |
| l_{ch} | -0,18 | -0,22 | 0,69 | -0,01 | 1 | | |
| Riss entlang des Interfaces | 0,96 | -0,82 | -0,92 | -0,89 | -0,37 | 1 | |
| Risslänge / a | 0,50 | -0,66 | 0,07 | -0,65 | 0,45 | 0,25 | 1 |

Die Korrelation zwischen MgO-Anteil und dem Anteil des Risspfandes, der entlang der Korngrenze verläuft, ist erwartungsgemäß sehr ausgeprägt. Aufgrund der geringen spezifischen Kontaktbruchenergie wird diese schon während des Kühlens verbraucht und es entsteht ein Material, das wenig Querschnittsfläche für eine Zugbelastung zur Verfügung stellt. Das erklärt die starke Abnahme der Festigkeit und der spezifischen Bruchenergie mit steigendem MgO-Anteil, der sich auch in der Korrelationsmatrix in Tabelle 29 wieder spiegelt. Aufgrund dieser relativ spröden Kontakte entsteht eine Korrelation, die in dieser Form nicht durch Experimente [7] gestützt ist und hinterfragt werden muss. Zwar steigt das Verhältnis E/σ_t^2 durch die sinkende Materialfestigkeit, jedoch wird auch die Bruchenergie stark vermindert. Zur Abklärung dieses Sachverhalts wurden weitere Simulationen mit weniger spröden Kontakten, $\sigma_{t,c} = 6$ MPa und $G_{f,c} = 137$ Nm⁻¹, durchgeführt, deren Ergebnisse in Abbildung 56 und in Tabelle 29 gezeigt werden.

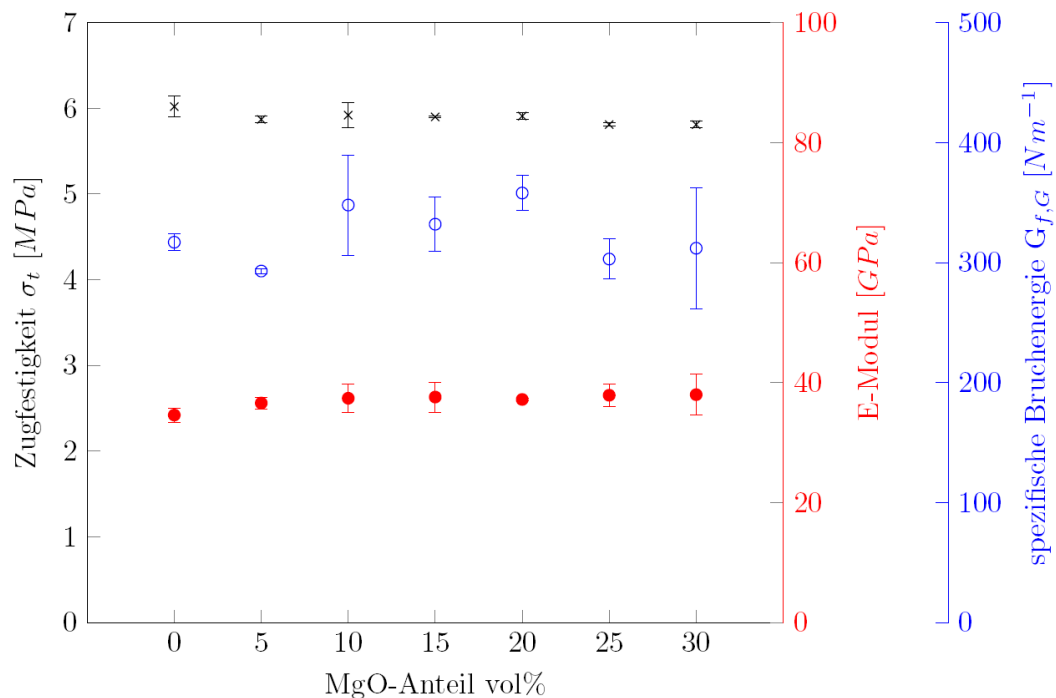


Abbildung 56: Einfluss des MgO-Gehalts und verminderten Kontakteigenschaften auf die Zugfestigkeit, den E -Modul und die spezifische Bruchenergie

Durch die deutliche Erhöhung der Kontaktbruchenergie auf $G_{f,c} = 137 \text{ Nm}^{-1}$ ergibt sich, im Vergleich mit $G_{f,c} = 10 \text{ Nm}^{-1}$, eine nahezu konstante Zugfestigkeit des abgekühlten Materials in Tabelle 29.

Tabelle 29: Ergebnisse der Simulation mit zunehmenden MgO-Gehalt mit Kontakteigenschaften von $\sigma_{t,c} = 6 \text{ MPa}$ und $G_{f,c} = 137 \text{ Nm}^{-1}$ und 10 vol% Spinell

| MgO-Anteil | σ_t | E | $G_{f,G}$ | l_{ch} | Riss entlang des Interfaces | Risslänge / a |
|------------|------------|-------|---------------|----------|-----------------------------------|-----------------|
| [%] | [MPa] | [GPa] | [Nm^{-1}] | [mm] | [%] | [%] |
| 0 | 6 | 34,6 | 317 | 303 | 45 | 118 |
| 5 | 5,9 | 36,6 | 293 | 311 | 42 | 114 |
| 10 | 5,9 | 37,4 | 348 | 371 | 42 | 114 |
| 15 | 5,9 | 37,6 | 332 | 358 | 56 | 116 |
| 20 | 5,9 | 37,2 | 358 | 382 | 55 | 123 |
| 25 | 5,8 | 37,9 | 303 | 341 | 54 | 119 |
| 30 | 5,8 | 38,0 | 312 | 352 | 59 | 130 |

Die Werte in Tabelle 29 lassen sich durch die höhere spezifische Bruchenergie der nach dem Kühlen stabileren Kontakte erklären. Da das Interface zwischen den Körnern und der Matrix während des Kühlens nur einen Teil von $G_{f,c}$ konsumiert, können weiterhin Spannungen auf die MgO-Körner übertragen werden. Das führt dazu, dass mit zunehmendem MgO-Gehalt auch der E -Modul ansteigt. Die allgemein beobachtete hohe Zugfestigkeit und ihre geringe Verminderung mit der MgO Erhöhung resultiert daraus, dass sich bis zur tatsächlichen makroskopischen Rissentwicklung die Spannung aufgrund der bestehenden Kontakte im gesamten Modell verteilen. Bis zur Trennung des Materials muss daher nicht nur die Kontaktbruchenergie der am Makro-Riss beteiligten Kontakte, sondern auch aller im restlichen Modell befindlichen Kontakte aufgewandt werden. Die Werte der erstellte Korrelationsmatrix in Tabelle 30 müssen unter der Berücksichtigung von Tabelle 29 interpretiert werden. Trotz der eindeutigen Korrelation zwischen σ_t und dem MgO-Anteil ist das Ausmaß gering.

Tabelle 30: Korrelationsmatrix der Werte aus Tabelle 29

| | MgO-Anteil | σ_t | E | $G_{f,G}$ | l_{ch} | Riss entlang des Interfaces | Risslänge / a |
|-----------------------------|------------|------------|------|-----------|----------|-----------------------------|---------------|
| MgO-Anteil | 1 | | | | | | |
| σ_t | -0,83 | 1 | | | | | |
| E | 0,83 | -0,86 | 1 | | | | |
| $G_{f,G}$ | 0,05 | 0,35 | 0,11 | 1 | | | |
| l_{ch} | 0,58 | -0,29 | 0,69 | 0,79 | 1 | | |
| Riss entlang des Interfaces | 0,84 | -0,53 | 0,58 | 0,14 | 0,48 | 1 | |
| Risslänge / a | 0,74 | -0,44 | 0,31 | 0,00 | 0,24 | 0,76 | 1 |

Hinsichtlich des MgO-Anteils im Modell und den Werten für die Zugfestigkeit, den E -Modul und dem Anteil des Risspfades im Interface bestehen Korrelationen, die widersprüchlich zu experimentell erhaltenen Werten sind [7]. Im Gegensatz zu den Korrelationen der sehr spröden Kontakte in Tabelle 28, kann hier jedoch eine positive Abhängigkeit des E -Moduls erkannt werden. Die resultierende Bruchenergie ist weitgehend unabhängig vom MgO-Anteil. Durch die Wahl der Kontakteigenschaften wird zwar eine reduzierte Festigkeit erzielt, diese reicht aber nicht aus um bei gleichbleibender Bruchenergie das Verhältnis E/σ_t^2 zu erhöhen.

6.2.6 Einfluss der Kornform und der Korngröße

In diesem Kapitel wird beschrieben wie das Modell um die Möglichkeit polygonförmiger Körner im Gefüge erweitert wird. Nachfolgend wird die Auswirkung einer veränderten Korngrößenverteilung untersucht.

6.2.6.1 Einfluss polygonförmige Körner

In den bisherigen Simulationen wurden die Körner idealisiert als rund dargestellt, in realen Gefügen weicht die Kornform jedoch stark davon ab. Mithilfe unregelmäßiger Polygone soll diese Abweichung nachgeahmt werden. Ein Ergebnis eines Gefüges mit polygonförmigen Körnern, das nach dem beschriebenen Konzept in Kapitel 4.2.3 erstellt wurde, ist in Abbildung 57 zu sehen.

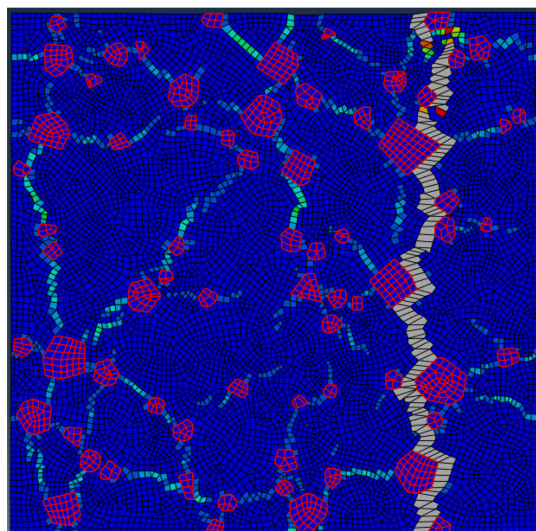


Abbildung 57: Gefüge mit 10 vol% polygonförmiger Spinell-Körner

Die Anzahl polygonförmiger Körner in einem Modell mit 10 vol% Spinell beträgt bei einer Modelgröße von 1225 mm² ca. 70 Körner.

In einem vergleichbaren Modell mit runden Spinell-Körnern werden für die 10 vol% Spinell ungefähr 40 Körner benötigt. Insgesamt werden sechs Simulationen mit 10 vol% Spinell durchgeführt um den Einfluss der Kornform zu untersuchen. In Abbildung 58 und Tabelle 31 werden die Ergebnisse aus den sechs Simulationen mit polygonförmigen Körnern mit den Werten aus elf Berechnungen mit kreisförmigen Körnern verglichen.

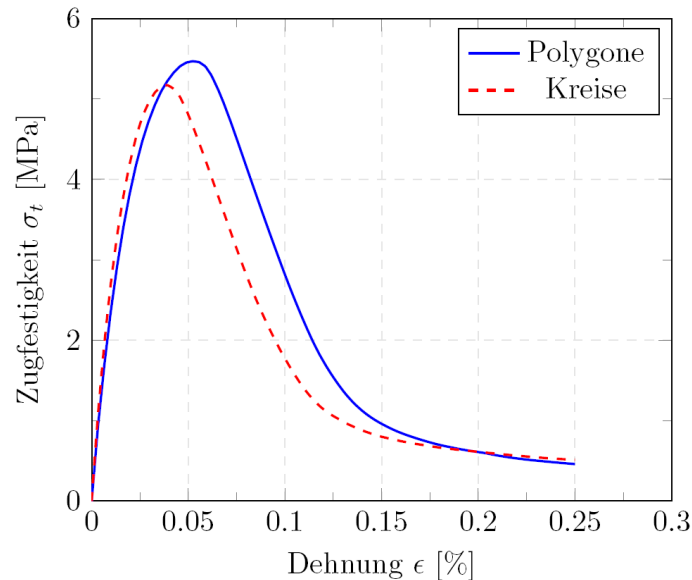


Abbildung 58: Einfluss unterschiedlicher Kornformen auf den Spannungsverlauf

Generell unterscheiden sich die Werte der Modelle für polygonförmige und kreisförmige Körner nur geringfügig. Der größte erkennbare Einfluss ist am E -Modul sichtbar. Bei gleichbleibender Zugfestigkeit reduziert sich der E -Modul um ca. 10 GPa. Trotz der höheren Bruchenergie verringert sich die charakteristische Länge in den Modellen mit Polygonen.

Zusätzlich werden Simulationen an einem Gefüge mit reduzierten Kontaktfestigkeiten und reduzierter spezifischer Bruchenergie durchgeführt. Der Spannungsverlauf und das Ablösen der Körner von der Matrix sind in Abbildung 59 gezeigt.

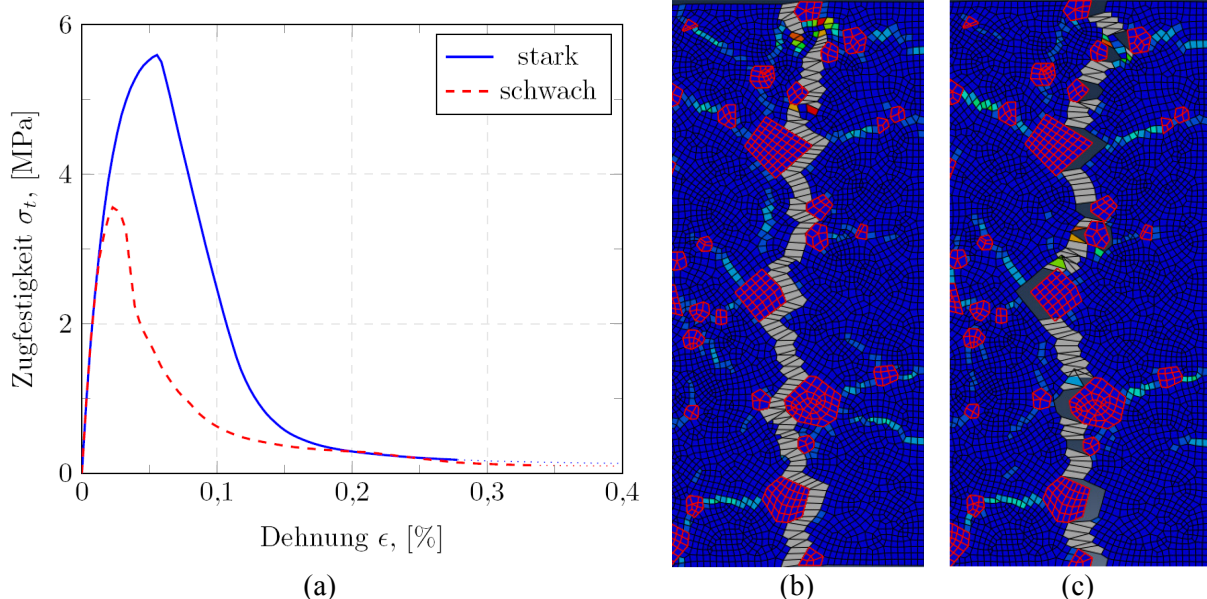


Abbildung 59: Einfluss der Kontakteigenschaften bei polygonförmigen Körnern auf (a) den Spannungsverlauf und den Makro-Riss mit (b) starken und (c) schwachen Kontakten

In Abbildung 59 (a) zeigt die Verwendung von reduzierten Kontakten ($\sigma_{t,c} = 6 \text{ MPa}$, $G_{f,c} = 10 \text{ Nm}^{-1}$ vs. $\sigma_{t,c} = 7 \text{ MPa}$, $G_{f,c} = 100 \text{ Nm}^{-1}$) einen deutlichen Unterschied im Spannungsverlauf. Wie erwartet führen die schwächeren Kontakteigenschaften zu einer geringeren Materialfestigkeit. Der Vergleich der entstandenen Makro-Risse in Abbildungen (b) und (c) zeigt die deutliche Ablösung von Körnern durch schwache Kontakteigenschaften in Abbildung 59 (c). Es wird eine Halbierung der Bruchenergie bei gleichbleibendem E -Modul beobachtet. Dies führt zu einer um 20 % höheren charakteristischen Länge l_{ch} . Die gesammelten Werte aus den beschriebenen Simulationen sind in Tabelle 31 gezeigt.

Tabelle 31: Einfluss der Kornform und Kontakte auf die mechanischen Eigenschaften

| Modell | Bemerkung | σ_t | E | $G_{f,G}$ | l_{ch} |
|---|--------------------|------------|-------|---------------------|----------|
| | | [MPa] | [GPa] | [Nm ⁻¹] | [mm] |
| <i>Schwache Kontakte</i> | gleiches Gefüge | 3,6 | 29,6 | 84 | 196 |
| <i>Starke Kontakte</i> | Abbildung 59 | 5,6 | 29,5 | 175 | 165 |
| <i>Polygone (mit starken Kontakten)</i> | sechs Simulationen | 5,5 | 28,4 | 196 | 184 |
| <i>Kreise (mit starken Kontakten)</i> | elf Simulationen | 5,4 | 38,9 | 157 | 213 |

Untersuchungen in anderen Arbeiten, in denen eine schwache Interfacezone im Beton berücksichtigt wurde, zeigten, dass Gefüge mit Kreisen die höchste Zugfestigkeit und einen höheren E -Modul [72] [94] aufweisen. Dieses Verhalten konnte in dem betrachteten Fall nicht beobachtet werden. Eine Gemeinsamkeit mit dem hier beschriebenen Modell sind die höheren Spannungen an den Ecken der Polygone.

6.2.6.2 Einfluss der Korngrößenverteilung

Durch eine Simulationsreihe wird das Verhalten des Modelles hinsichtlich einer unterschiedlichen Korngrößenverteilung untersucht. Dafür werden zwei Modelle erstellt, wobei Gefüge mit der Bezeichnung „*grob*“ ausschließlich Spinell-Körner zwischen 3 mm und 5 mm, und Gefüge mit der Bezeichnung „*fein*“ Spinelle zwischen 1 mm und 3 mm enthalten. Die vorgeschriebenen Anteile der jeweiligen Kornfraktionen sind in Tabelle 32 angeführt, der gesamt Anteil an Spinell beträgt für beide Modelle 10 vol%. Die Kontakteigenschaften entsprechen jener der Matrix, $\sigma_{t,c} = 7 \text{ MPa}$ $G_{f,c} = 100 \text{ Nm}^{-1}$. Die erhaltenen Rissbilder nach der Kühlung sind in Abbildung 61 abgebildet.

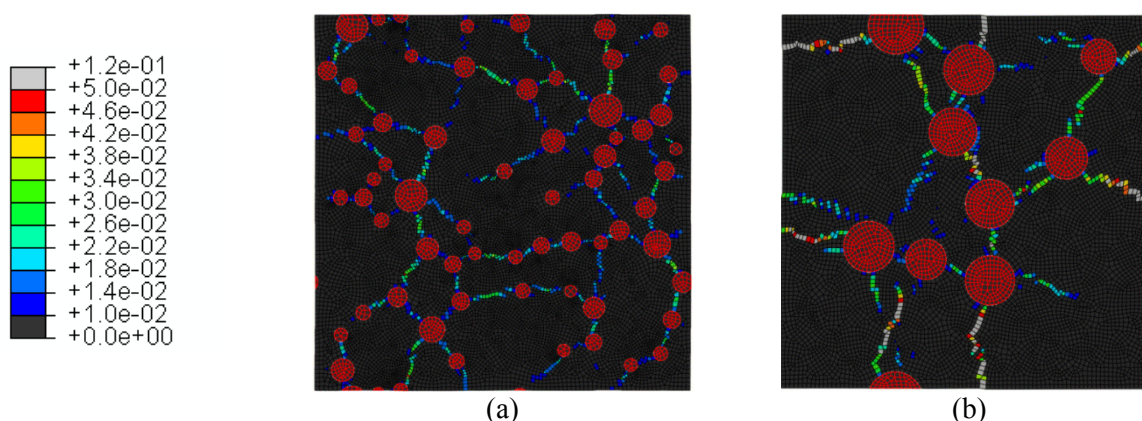


Abbildung 60: Mikro-Risse des Modells (a) *fein* mit Körnern zwischen 1 mm und 3 mm und des Modells (b) *grob* mit Körnern zwischen 3 mm - 5 mm. Der gesamt Spinell-Anteil ist 10 vol%

Das Gefüge *fein* in Abbildung 61 (a) zeigt nach der Kühlung ein über die Struktur verteiltes Rissnetzwerk. Im Gegensatz dazu prägen in Abbildung 61 (b) wenige, dafür weiter fortgeschrittene Risse das Gefüge von *grob*. Die erzeugten Makro-Risse des Zugversuches an den kalten Gefügen sind in Abbildung 61 dargestellt.

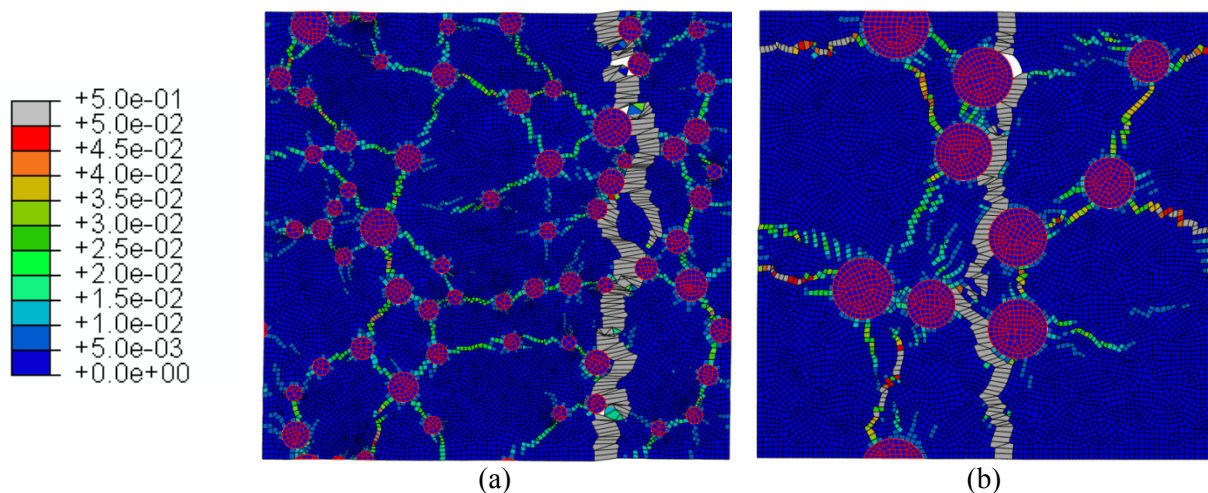


Abbildung 61: Makro-Riss des Modells (a) *fein* mit Körnern zwischen 1 mm und 3 mm und des Modells (b) *grob* mit Körnern zwischen 3 mm - 5 mm. Der gesamte Spinell-Anteil beträgt 10 vol%

Die Spannungs-Dehnungskurven des Zugversuches in Abbildung 62 offenbaren einen starken Einfluss der Kornverteilung auf ihren Verlauf.

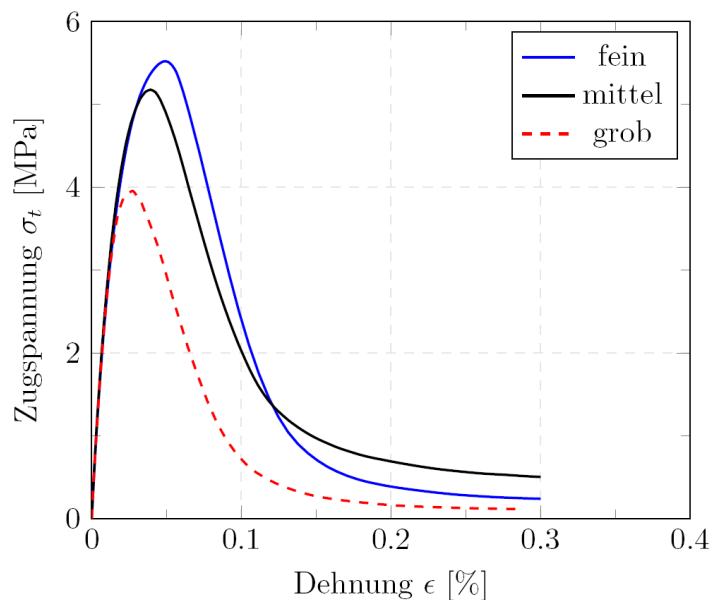


Abbildung 62: Spannungs-Dehnungskurve der im Text beschriebenen Gefüge „fein“ und „grob“

Die Darstellung der 10 vol% Spinell erfolgte in den Gefügen *fein* durch 61 Körner und in dem Gefüge *grob* durch neun. Das Modell *mittel* gleicht der Kornverteilung nach Dinger-Funk [90]. Die erhaltenen Ergebnisse sind in Tabelle 32 zusammengefasst.

Tabelle 32: Materialeigenschaften bei vorgegebener Korngrößenverteilung

| Modell | Korngröße [mm] | Anteil [%] | σ_t [MPa] | E [GPa] | $G_{f,G}$ [Nm ⁻¹] | l_{ch} [mm] |
|---------------|-------------------|---------------|---------------------|--------------|----------------------------------|------------------|
| <i>fein</i> | 1 – 2 | 8 | 5,5 | 38,1 | 186 | 234 |
| | 2 - 3 | 2 | | | | |
| <i>mittel</i> | 1 – 5 | 10 | 5,2 | 33,7 | 178 | 231 |
| | 3 - 4 | 2 | | | | |
| <i>grob</i> | 3 - 4 | 2 | 4,0 | 37,1 | 99 | 227 |
| | 4 - 5 | 8 | | | | |

Das Gefüge mit groben Körnern zeigt eine verminderte Festigkeit sowie eine Halbierung der spezifischen Bruchenergie gegenüber dem Modell *fein*. Die *E*-Module von *fein* und *grob* unterscheiden sich nur unwesentlich, sind aber jeweils größer als jene von *mittel*. Alle drei Kornverteilungen zeigen eine ähnliche charakteristische Länge. Ein Vergleich der sehr ähnlichen Werte der Modelle 5 vol% (21 Körner) und 35 vol% (137 Körner) aus Kapitel 6.2.4 zeigt, dass die Anzahl der Körner nicht für das Ergebnis ausschlaggebend ist. Somit sind die Ergebnisse eindeutig der Korngröße zuordenbar.

7 Zusammenfassung und Interpretation der Ergebnisse

Im Zuge dieser Arbeit wurde die Rissentwicklung in einem M/MA-Spinell Material während des Produktionsprozesses simuliert. Die Grundlage des FE-Modells bildet ein M/MA-Spinell Gefüge und ein Material-Modell, das die Rissentwicklung beschreibt. Das reale, sehr heterogene Gefüge wird vereinfacht durch Körner abgebildet, die in einer homogenen Magnesia-Matrix eingebettet sind. Die Körner sind ab einer Größe von 1 mm im Gefüge dargestellt. Die maximale Korngröße von 5 mm erlaubt bei der gewählten Korngrößenverteilung nach der Funktion von Dinger-Funk einen maximalen Kornanteil von ca. 44 % im Gefüge.

Das Material wird bei Temperaturen über 1600°C im Produktionsprozess gebrannt. Bei diesen Temperaturen bewirkt das Kriechen eine Verminderung der inneren Spannungen. Durch das Kriechen wird im Material Spannung abgebaut, daher wird angenommen, dass das Material bei ca. 1200 °C spannungsfrei ist. Durch die relativ langsame Abkühlrate und die Betrachtung eines Gefüge-Ausschnitts von einigen Zentimetern, wird die Temperatur im gesamten Modell als homogen betrachtet. Die Rissentwicklung während des Kühlens von 1200 °C auf Raumtemperatur ist auf die Differenz der thermischen Ausdehnungskoeffizienten der betrachteten Stoffe Magnesia und Magnesia-Spinell zurückzuführen.

Ein Script wurde geschrieben, das das FE-Modell des Gefüges automatisch erstellt und gewährleistet, dass zumindest ein kreisrundes Korn der größten Kornfraktion darin vorhanden ist. Durch die Verwendung periodischer Randbedingungen an den Rändern des Gefüges wird das umliegende Material berücksichtigt und muss nicht explizit dargestellt werden. Mithilfe eines repräsentativen Volumenelements stellt das erzeugte Gefüge das gesamte Material mit allen Eigenschaften dar. Das Ziel dieses Ansatzes ist, den zu simulierenden Bereich klein zu halten, keine Informationen über dessen Eigenschaften zu verlieren und Rechenkapazität zu sparen. Dabei muss dieser Gefüge-Ausschnitt des RVE die grundlegenden Informationen enthalten wie, z.B. die Korngrößenverteilung und die Heterogenität, um das Material im statistischen Sinne zu repräsentieren.

Das Materialverhalten im FE-Modell wird durch das *concrete damaged plasticity* Modell beschrieben. Die entstehenden Risse werden durch ein Entfestigungsverhalten bestimmt und als irreversible Dehnung der Elemente im Modell dargestellt. Im FE-Modell wird davon ausgegangen, dass die Schädigung bzw. das Entfestigen nur unter Zugbelastungen stattfindet. Wichtig ist die Beschreibung der Kontakte zwischen den Körnern und der Matrix in der sie eingebettet sind. Die Kontakte werden durch kohäsive Flächen beschrieben deren Eigenschaften, wie z.B. die Festigkeit, variiert werden können. Eine Vernachlässigung der Kontakte führt zu unrealistischen Spannungsverläufen und Ergebnissen im vorgestellten Modell.

Im Zuge der Arbeit wurde der Einfluss verschiedener Parameter des Modells auf die Rissbildung und die mechanischen Kennwerte, wie die Zugfestigkeit, der E-Modul und die spezifische Bruchenergie, untersucht. Im besten Fall sollten gewisse Faktoren, wie z.B. die Elementgröße des Netzes und die Größe des RVE, keine Auswirkungen haben. Wie sich jedoch zeigte, konnte ein, wenn auch geringer, Einfluss auf die mechanischen Kennwerte durch die Elementgröße festgestellt werden. Die minimale Modellgröße, die vom Kornanteil und der minimalen Korngröße abhängig ist, zeigt im Gegensatz zu größeren Modellen eine reduzierte spezifische Bruchenergie. In dieser Simulationsreihe bestätigte sich auch das Konzept des RVE, da die örtliche Verteilung der Körner einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Ergebnisse ausübt.

Modellbeeinflussende Parameter, wie z.B. die spezifische Bruchenergie der Matrix, die thermischen Ausdehnungskoeffizienten, der Spinell-Gehalt, bewirkten die zu erwartenden Tendenzen in den

Ergebnissen. Die Untersuchung vier verschiedener Entfestigungsverhalten zeigte, dass eine Abweichung von einem linearen Verhalten in Richtung größere Dehnungen bei gleicher Bruchenergie eine Reduktion der mechanischen Eigenschaften zur Folge hat. Das exponentielle Entfestigungsverhalten nach Hordijk erwies sich als jenes mit den niedrigsten Werten für die bruchmechanischen Kenngrößen. Bezüglich der Differenz der thermischen Ausdehnungskoeffizienten $\Delta\alpha$ wurde eine lineare Beziehung zwischen $\Delta\alpha$ und den mechanischen Eigenschaften festgestellt; je größer die Differenz der beiden Ausdehnungskoeffizienten ist, desto niedrigere mechanische Werte sind zu erwarten. Eine Auswirkung auf die charakteristische Länge, die ein Maß für die Sprödigkeit ist, konnte nicht festgestellt werden. Eine Variation des Spinell-Gehalts zeigte wider Erwarten nur einen kleinen Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften des Materials. Mit einem Gehalt von 20 vol% Spinell wurde dabei die größte spezifische Bruchenergie erzielt.

In einer weiteren Simulationsreihe enthielt das Gefüge einen variablen Anteil an MgO-Körnern, die dieselbe thermische Ausdehnung wie die Matrix aufweisen. Dies führt zu einer höheren Anzahl an Kontakten und ermöglichte einen anderen Rissverlauf im Gefüge. Das Modell zeigte dadurch einen größeren E -Modul. Eine Korrelation zwischen dem MgO-Anteil und den mechanischen Eigenschaften konnte jedoch nicht gezeigt werden. Eine zusätzliche Risspfadanalyse ergab, dass die Länge des Makro-Risses im Modell nicht vom MgO-Anteil abhängig ist. Selbst die Ausreizung des maximal darstellbaren Anteils an Körnern von ca. 44 % hatte keinen wesentlichen Einfluss auf den Rissverlauf. Der Anteil des Risses entlang der Korngrenzen steigt hingegen mit dem MgO-Gehalt an.

Die Korngrenzen, die durch kohäsive Kontakte beschrieben werden, haben eine wesentliche Bedeutung im Modell. Erst durch diese Kontakte ergeben sich der typische Spannungsverlauf des Zugversuches und mechanische Werte, die sich mit experimentell erhaltenen Werten vergleichen lassen. In der weiteren Folge wurden die Kontakteigenschaften der Körner und deren Anteil variiert, um deren Einfluss weiter zu untersuchen. Das Ergebnis zeigt einen ausgeprägten Einfluss der Kontaktfestigkeit. Die Kontaktbruchenergie hingegen bewirkte erst bei sehr kleinen Werten eine merkbare Verminderung der mechanischen Eigenschaften. Durch die Verwendung sehr spröder Kontakte lösten sich bereits während des Kühlens die Körner von der Matrix. Dieses Verhalten bewirkte eine Reduktion der spezifischen Bruchenergie. Es konnte festgestellt werden, dass sich das Verhältnis E -Modul zum Quadrat der Zugfestigkeit, E / σ_t^2 ähnlich verhält wie experimentell beobachtet. Mit der Erhöhung der Kontaktbruchenergie von $G_{f,c} = 10 \text{ Nm}^{-1}$ auf $G_{f,c} = 137 \text{ Nm}^{-1}$ kann die spezifische Bruchenergie konstant gehalten werden, führt jedoch zu einer Senkung des Verhältnis E / σ_t^2 . Auch in diesem Fall wird gezeigt, dass die Kontakte einen wesentlichen Einfluss auf die Materialeigenschaften haben.

Die Auswirkung der Kornform konnte durch polygonförmige Körner betrachtet werden. An den Ecken der Körner wurde gegenüber einem Kreis eine erhöhte Spannungskonzentration festgestellt. Die resultierenden mechanischen Eigenschaften zeigten eine Erhöhung der Festigkeit und der spezifischen Bruchenergie bei kleinerem E -Modul im Vergleich mit einem Modell, das kreisförmige Körner beinhaltet.

Ein weiterer untersuchter Aspekt ist die direkte Variation der Korngrößenverteilung. Anhand von Simulationen, die einen überwiegenden Grob- bzw. Feinanteil aufweisen, konnte festgestellt werden, dass größere Körner eine deutliche Verminderung der Festigkeit und der spezifischen Bruchenergie herbeiführen. Dieses Ergebnis ist dabei nicht von der Gesamtanzahl der Körner abhängig.

8 Resümee und Ausblick

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass das Ziel, die Rissentwicklung in einem Magnesia-Spinell Gefüge während des Produktionsprozesses durch eine Simulation zu beschreiben, mit dem beschriebenen FE-Modell erfüllt wurde. Trotz der Komplexität des Themas gelang es, durch eine Anzahl von Annahmen und Vereinfachungen in der Simulation, ein typisches Rissnetzwerk zu simulieren. Das Modell beschreibt anschaulich die Festigkeitsverminderung durch die entstehenden Risse. Trotz der willkürlichen Wahl eines geeigneten Abbruchkriteriums zur Ermittlung der spezifischen Bruchenergie liegen die erhaltenen mechanischen Ergebnisse in einem für dieses Material typischen Bereich. Durch die Möglichkeit, eine Vielzahl von Parametern und Einflussgrößen zu variieren, ergeben sich weitere Chancen, das Grundverständnis der Rissbildung zu verbessern. Im Zuge dieser Arbeit konnte der Einfluss eines Großteils der Parameter untersucht werden. Jedoch sollten die Ergebnisse und Trends durch eine höhere Anzahl von leider sehr zeitaufwendigen Simulationen überprüft werden, um die erhaltenen Ergebnisse zu bestätigen. Unter anderem wäre es sinnvoll, mehr Augenmerk auf die Kontakteigenschaften zu legen, die, wie gezeigt wurde, einen erheblichen Einfluss auf das Modellverhalten ausüben. So wäre es möglich anstelle von globalen Kontakteigenschaften, die für alle Kontakte gelten, den Körnern unterschiedliche zufällige Kontakteigenschaften zuzuweisen. Außerdem kann das Modell in verschiedenen Punkten verbessert bzw. erweitert werden. Das betrifft unter anderem die Verwendung einer anisotropen Schädigung (siehe z. B. Kim [72]), die Berücksichtigung des Scherversagens durch Druck, eine intragranulare Rissentwicklung, das Löschen vollständig geschädigter Elemente, die Berücksichtigung von Poren in den verwendeten Materialien, die generelle Verwendung von gemessenen und temperaturabhängigen Materialwerten und die Berücksichtigung des Kriechverhaltens speziell in höheren Temperaturbereichen. Durch die Einfachheit des Scripts kann dieses leicht modifiziert werden, um auch andere Themengebiete (z.B. verschiedene Materialien, Verteilungskurven, Kornformen, Körnungslücken, ...) abzudecken. Weitere Versuche zeigten, dass bereits eine kleine Inhomogenität zu einer raschen Lokalisierung von Rissen führt. Daher sollte das zweite Augenmerk auf die Detailtiefe der Heterogenität des Gefüges gelegt werden. Anhand des Wissenszuwachses ergeben sich weitere Fragestellungen, die mitunter nicht durch das präsentierte Modell beantwortet werden können. Zum Beispiel limitiert der untere Korndurchmesser die maximal darstellbare Anzahl an Spinell- und MgO-Körnern. Für dieses Problem, und auch das der Netz-Abhängigkeit, könnten andere Ansätze, wie z. B. die *Discrete element method* (DEM) oder eine Netz-Verfeinerung inklusive einer entsprechenden Riss-Regularisation, zielführend sein. Ansätze zur Regularisation und der damit erhofften Unabhängigkeit eines FE-Modells von der Vernetzung werden bereits angewandt. Generelle Methoden, die in der Literatur zu finden sind, können in eine *Gradienten-abhängige (gradient-dependent)* [108] [109] [110] und eine *Nichtlokale (nonlocal theory)* [100] [111] [112] [113] eingeteilt werden. Mehr zum Thema der Regularisationsmethoden findet sich in der Arbeit von Al-Rub [76] und Maier [114], der auch eine mögliche Implementierung in ABAQUS beschreibt. Abschließend bleibt zu erwähnen, dass die vorgelegte Arbeit die Basis für weitere Forschungen in diesem Bereich bilden kann.

9 Abbildungsverzeichnis

| | |
|---|----|
| Abbildung 1: Homogenisierung eines heterogenen Objekts | 7 |
| Abbildung 2: Gültigkeitsbereiche für die Wahl des bruchmechanischen Konzepts für feuerfeste Materialien nach Bradt et al. [12]..... | 9 |
| Abbildung 3: Unterschied der Schädigungsdarstellung an einem Objekt durch (a) zwei diskrete Risse und (b) zwei geschädigte Elemente..... | 10 |
| Abbildung 4: Diskrete Beschreibung eines Risses durch kohäsive Modelle [60]..... | 10 |
| Abbildung 5: Schema des <i>fictitious crack model</i> und verschiedene Entfestigungsverhalten mit gleicher Bruchenergie G_f | 11 |
| Abbildung 6: Anordnung und Größenvergleich eines RVE in einem Material | 13 |
| Abbildung 7: Schematische Darstellung des Effekts periodischer Randbedingungen..... | 14 |
| Abbildung 8: Rückstandskurve der gewählten fünf Kornklassen des M/MA-Spinell Materials | 17 |
| Abbildung 9: Abhängigkeit der minimalen Kantenlänge vom Spinell-Gehalt für verschiedene Grenzkorndurchmesser..... | 18 |
| Abbildung 10: <i>For</i> -Schleife FL_1 für die Kornverteilung..... | 20 |
| Abbildung 11: <i>While</i> -Schleife WL_1 für die Erstellung der Körner | 21 |
| Abbildung 12 Platzieren von Körnern innerhalb definierter Modellgrenzen ohne Überschneidung der Körner..... | 22 |
| Abbildung 13: Schema der <i>While</i> -Schleife WL_2 die auf eine Körnüberschneidung prüft..... | 23 |
| Abbildung 14: <i>While</i> -Schleife WL_2' für die Überprüfung der gespiegelten Körner auf Überschneidung | 24 |
| Abbildung 15: Schritte der Erstellung des FE-Gefüges in ABAQUS. Beschneidung der Grundform der Körner (a), die Matrix (b) und das fertige Gefüge (c)..... | 25 |
| Abbildung 16: Schematische Darstellung eines zufällig generierten Oktagon..... | 26 |
| Abbildung 17: Skizze zweier Körper mit einer Kontaktbeschreibung durch (a) eine kohäsive Fläche oder durch (b) kohäsive Elemente..... | 27 |
| Abbildung 18: Vergleich der benötigten Bruchenergie zwischen kohäsiven Elementen und kohäsiver Fläche | 27 |
| Abbildung 19: Auftretende Spannungen im M/MA-Spinell beim Abkühlvorgang | 28 |
| Abbildung 20: Spannungs-Dehnungs-Verhalten des <i>concrete damaged plasticity</i> Modells unter ein-axialem Zug..... | 29 |
| Abbildung 21: Änderung des Spannungsgradienten als Abbruchkriterium für den Zugversuch..... | 36 |
| Abbildung 22: Spannungszustand in MPa der Abkühlsimulation nach $\Delta T = 10$ °C (a) und Ausbildung irreversibler Dehnungen nach $\Delta T = 200$ °C (b) bzw. 1175 °C (c)..... | 37 |
| Abbildung 23: Unterschiedliche Spannungsverläufe zweier Elemente während des Abkühlens und des Zugversuches..... | 38 |
| Abbildung 24: Energien während „Kühlung“ und „Zugversuch“ | 38 |
| Abbildung 25: Einfluss der Modellgröße auf die mechanischen Eigenschaften Festigkeit, E -Modul und spezifische Bruchenergie inklusive Standardabweichung..... | 42 |
| Abbildung 26: Arithmetischer Mittelwert des Spannungsverlaufs inklusive Standardabweichung einer Simulationsreihe von elf verschiedenen Gefügen (1225 mm^2 , $T_{start} = 1200$ °C)..... | 43 |
| Abbildung 27: Makro-Rissbildung (grau) in einem Gefüge aufgrund unterschiedlicher Elementgrößen (a) $300 \mu\text{m}$, (b) $350 \mu\text{m}$ und (c) $400 \mu\text{m}$ | 43 |
| Abbildung 28: Mesh-Größenabhängigkeit ($400 \mu\text{m}$, $350 \mu\text{m}$ und $300 \mu\text{m}$) der Zugfestigkeit einer 35 mm Struktur mit Verschiebung in (a) x -Richtung und (b) y -Richtung..... | 44 |

| | |
|--|----|
| Abbildung 29: Mikro-Rissnetzwerke nach einer Kühlung mit (a) $\Delta\alpha = 92\%$ und (b) $\Delta\alpha = 150\%$; Körner werden rot, die irreversiblen Dehnungen bis zu $0,04\%$ durch eine farbige Skala und anschließend grau dargestellt | 45 |
| Abbildung 30: Repräsentative Mikro-Rissbilder für ein Modell mit unterschiedlichen Makro-Rissverläufen; Körner werden rot und Dehnungen $> 0,1\%$ grau dargestellt..... | 46 |
| Abbildung 31: Linearer Einfluss der thermischen Ausdehnungsdifferenz auf die Festigkeit des Materials..... | 47 |
| Abbildung 32: Linearer Einfluss der thermischen Ausdehnungsdifferenz auf spezifische Bruchenergie des Materials..... | 47 |
| Abbildung 33: Einfluss der thermischen Ausdehnungsdifferenz auf den E -Modul des Materials | 48 |
| Abbildung 34: Einfluss der spezifischen Bruchenergie der Matrix auf den Spannungsverlauf des Zugversuchs..... | 48 |
| Abbildung 35: Beschreibung der Bruchenergie für verschiedene ultimative Verschiebungen bei gleicher Initialfestigkeit und selber Bruchenergie..... | 50 |
| Abbildung 36: Fünf verschiedene Entfestigungsverhalten mit selben $\sigma_{t,max}$ und $G_{f,M}$ | 50 |
| Abbildung 37: Spannungs-Dehnungs-Verhalten verschiedener Entfestigungsverhalten..... | 51 |
| Abbildung 38: Spannungs-Dehnungsverlauf von Modellen mit und ohne Kontakten..... | 53 |
| Abbildung 39: Einfluss der Kühlung und Bindungen auf die Spannungs-Dehnungskurven | 54 |
| Abbildung 40: Einfluss verschiedener Kontaktfestigkeiten auf die resultierende Materialfestigkeit ... | 55 |
| Abbildung 41: Einfluss der Kontaktfestigkeit $\sigma_{t,c}$ auf die Zugfestigkeit, den E -Modul und spezifische Bruchenergie | 56 |
| Abbildung 42: Einfluss verschiedener spezifischer Kontaktbruchenergien auf die resultierende Materialfestigkeit..... | 56 |
| Abbildung 43: Einfluss der Kontaktbruchenergie $G_{f,c}$ auf die Zugfestigkeit, den E -Modul und die spezifische Bruchenergie..... | 57 |
| Abbildung 44: Rissbilder mit verschiedenen Kontakteigenschaften, in b und c ist entlang des Makro-Risses (grau) ein Ablösen der Matrix von den Körnern..... | 58 |
| Abbildung 45: Entwicklung der Zugfestigkeit in Abhängigkeit der spezifischen Kontaktfestigkeit (a) und Kontaktbruchenergie (b). Die Zahlen zeigen den Wert des jeweiligen zweiten Parameters an. | 59 |
| Abbildung 46: Rissnetzwerk, dargestellt durch irreversible Dehnungen, nach dem Kühlen in einem Gefüge mit (a) 5 vol\% Spinell und mit (b) 15 vol\% , die beiden Bildreihen unterscheiden sich durch die obere Begrenzung der Farbskala | 60 |
| Abbildung 47: Vergleich des Einflusses des Spinell Gehalts von 5 vol\% , 10 vol\% und 15 vol\% und verminderter Kontakteigenschaften auf den Spannungsverlauf an dem gleichen Gefüge anhand von Einzelsimulationen | 61 |
| Abbildung 48: Spannungsverläufe von Gefügen mit unterschiedlichen Spinell-Anteilen mit den Kontaktwerten in (a) $\sigma_{t,c} = 7\text{ MPa}$, $G_{f,c} = 100\text{ Nm}^{-1}$ und in (b) $\sigma_{t,c} = 6\text{ MPa}$, $G_{f,c} = 10\text{ Nm}^{-1}$ | 61 |
| Abbildung 49: Einfluss des Spinell-Gehalts und unterschiedlicher Kontakteigenschaften auf (a) die Zugfestigkeit, (b) den E -Modul und (c) auf die spezifische Bruchenergie | 62 |
| Abbildung 50: Spannungsverläufe unterschiedliche Volumens-Anteile an MgO bei 10 vol\% Spinell | 63 |
| Abbildung 51: Einfluss des MgO-Gehalts auf die Zugfestigkeit, den E -Modul und die spezifische Bruchenergie | 64 |
| Abbildung 52: Spannungsverlauf der simulierten Modelle mit unterschiedlichen Kontakteigenschaften und erhöhter Bruchenergie | 65 |
| Abbildung 53: Rissverlauf nach dem Zugversuch. | 66 |
| Abbildung 54: Ausschnitt des Makro-Risses durch die Matrix. | 67 |
| Abbildung 55: Einfluss des MgO-Gehalts und stark verminderten Kontakteigenschaften auf die Zugfestigkeit, den E -Modul und die spezifische Bruchenergie | 67 |

| | |
|---|----|
| Abbildung 56: Einfluss des MgO-Gehalts und verminderten Kontakteigenschaften auf die Zugfestigkeit, den E -Modul und die spezifische Bruchenergie | 69 |
| Abbildung 57: Gefüge mit 10 vol% polygonförmiger Spinell-Körner | 70 |
| Abbildung 58: Einfluss unterschiedlicher Kornformen auf den Spannungsverlauf..... | 71 |
| Abbildung 59: Einfluss der Kontakteigenschaften bei polygonförmigen Körnern auf (a) den Spannungsverlauf und den Makro-Riss mit (b) starken und (c) schwachen Kontakten..... | 71 |
| Abbildung 60: Mikro-Risse des Modells (a) <i>fein</i> mit Körnern zwischen 1 mm und 3 mm und des Modells (b) <i>grob</i> mit Körnern zwischen 3 mm - 5 mm. Der gesamt Spinell-Anteil ist 10 vol%..... | 72 |
| Abbildung 61: Makro-Riss des Modells (a) <i>fein</i> mit Körnern zwischen 1 mm und 3 mm und des Modells (b) <i>grob</i> mit Körnern zwischen 3 mm - 5 mm. Der gesamte Spinell-Anteil beträgt 10 vol% | 73 |
| Abbildung 62: Spannungs-Dehnungskurve der im Text beschriebenen Gefüge „fein“ und „grob“ | 73 |

10 Tabellenverzeichnis

| | |
|--|----|
| Tabelle 1: Auszug aus den Ergebnissen einer fraktographischen Untersuchung unterschiedlicher feuerfester Materialien [12]..... | 4 |
| Tabelle 2: Korngrößenverteilung nach Gleichung (19) und (20) mit den gewählten Korngrenzen..... | 17 |
| Tabelle 3: Notwendige Parameter für die Erstellung des FE-Modells..... | 31 |
| Tabelle 4: Erforderliche Materialparameter:..... | 32 |
| Tabelle 5: Fixe Materialwerte des Modells..... | 33 |
| Tabelle 6: Eigenschaften der Modelle für die Energiebetrachtung..... | 39 |
| Tabelle 7: Ergebnisse der Energiebetrachtung des Simulationsbeispiels..... | 39 |
| Tabelle 8: Theoretische Risslängen l_{Riss} im Gefüge..... | 40 |
| Tabelle 9: Ergebnisse sechs unterschiedlich großer Modelle mit einem Spinell-Anteil von 10 vol%.. | 41 |
| Tabelle 10: Ergebnisse bei unterschiedlicher Vernetzung derselben Struktur..... | 44 |
| Tabelle 11: Eigenschaften in Abhängigkeit der Differenz der thermischen Ausdehnungskoeffizienten [107]..... | 46 |
| Tabelle 12: Auswertung von je zwölf Simulationen für verschiedene thermische Ausdehnungsdifferenzen [107]..... | 46 |
| Tabelle 13: Ergebnisse mit unterschiedlichen spezifischen Bruchenergien der Matrix..... | 49 |
| Tabelle 14: Spannungs-Verschiebungs-Werte unterschiedlicher Entfestigungsverhalten mit $G_{f,M} = 100 \text{ Nm}^{-1}$ und $\sigma_t = 7 \text{ MPa}$ | 51 |
| Tabelle 15: Vergleich der resultierenden mechanischen Eigenschaften unterschiedlicher Entfestigungsverhalten mit derselben spezifischen Bruchenergie $G_{f,M}$ und Zugfestigkeit σ_t | 52 |
| Tabelle 16: Einfluss des Interfaces auf die mechanischen Eigenschaften..... | 53 |
| Tabelle 17: Einfluss der Kühlens und der Kontakte..... | 54 |
| Tabelle 18: Einfluss der Kontaktfestigkeit zwischen Körnern und Matrix..... | 55 |
| Tabelle 19: Einfluss der spezifischen Bruchenergie der Matrix..... | 57 |
| Tabelle 20: Ergebnisse der Simulationsreihen in Bezug auf die Kontakteigenschaften $\sigma_{t,c}$ und $G_{f,c}$ | 58 |
| Tabelle 21: Korrelationsmatrix der Werten aus Tabelle 20..... | 59 |
| Tabelle 22: Ergebnisse aus den Simulationen verschiedener Spinell-Gehalte und unterschiedlicher Kontakte..... | 62 |
| Tabelle 23: Verwendete Materialeigenschaften für Simulationen mit unterschiedlichen MgO-Gehalten..... | 63 |
| Tabelle 24: Ergebnisse aus Simulationen mit unterschiedlichen MgO-Gehalten..... | 64 |
| Tabelle 25: Modellbezeichnungen der Modelle mit unterschiedlichen Kontakteigenschaften..... | 65 |
| Tabelle 26: Ergebnisse aus Simulationen mit erhöhter Bruchenergie der Matrix..... | 65 |
| Tabelle 27: Ergebnisse der Simulation mit zunehmenden MgO-Gehalt und stark reduzierten Kontakteigenschaften $\sigma_{t,c} = 6 \text{ MPa}$ und $G_{f,c} = 10 \text{ Nm}^{-1}$ und 10 vol% Spinell..... | 68 |
| Tabelle 28: Korrelationsmatrix der Werte aus Tabelle 27..... | 68 |
| Tabelle 29: Ergebnisse der Simulation mit zunehmenden MgO-Gehalt mit Kontakteigenschaften von $\sigma_{t,c} = 6 \text{ MPa}$ und $G_{f,c} = 137 \text{ Nm}^{-1}$ und 10 vol% Spinell..... | 69 |
| Tabelle 30: Korrelationsmatrix der Werte aus Tabelle 29..... | 70 |
| Tabelle 31: Einfluss der Kornform und Kontakte auf die mechanischen Eigenschaften..... | 72 |
| Tabelle 32: Materialeigenschaften bei vorgegebener Korngrößenverteilung..... | 73 |

11 Literaturnachweis

- [1] C. Aksel und P. D. Warren, „Thermal shock parameters [R, R' and R''] of magnesia spinel composites,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 23, Nr. 2, pp. 301-308, 2003.
- [2] H. Harmuth und E. K. Tschegg, „A fracture mechanics approach for the development of refractory materials with reduced brittleness,“ *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, Bd. 20, Nr. 11, pp. 1585-1603, 1997.
- [3] R. Grasset-Bourdel, A. Alzina, M. Huger, D. Gruber, H. Harmuth und T. Chotard, „Influence of thermal damage occurrence at microstructural scale on the thermomechanical behaviour of magnesia-spinel refractories,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 32, Nr. 5, pp. 989-999, 2012.
- [4] I. O. Pop, Y. Belrhiti, P. Doumalin, J. C. Dupre, T. Auer, D. Gruber, H. Harmuth, M. Huger und T. Chotard, „The Mechanical Fracture Characterization of Non-Linear Flexible Ceramics Using Digital Image Correlation,“ in *13th International Conference on Fracture*, Beijing, 2013.
- [5] R. Grasset-Bourdel, A. Alzina, M. Huger, T. Chotard, R. Emler, D. Gruber und H. Harmuth, „Tensile behaviour of magnesia-spinel refractories: Comparison of tensile and wedge splitting tests,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 33, Nr. 5, pp. 913-923, 2013.
- [6] W. Kingery, H. Bowen und D. Uhlmann, *Introduction to ceramics*, Wiley, 1976.
- [7] H. Harmuth und R. Bradt, „Investigation of refractory brittleness by fracture mechanical and fractographic methods,“ *Keramische Zeitschrift*, Bd. 62, Nr. 4, pp. 264-269, 2010.
- [8] D. Hasselman, „Elastic energy at fracture and surface energy as design criteria for thermal shock,“ *Journal of the American Ceramic Society*, Bd. 46, Nr. 11, pp. 535-540, 1963.
- [9] D. Hasselman, „Unified theory of thermal shock fracture initiation and crack propagation in brittle ceramics,“ *Journal of the American Ceramic Society*, Bd. 52, Nr. 11, pp. 600-604, 1969.
- [10] E. Tschegg, „Equipment and appropriate specimen shapes for tests to measure fracture values“. Austria Patent 390328, 31 1 1986.
- [11] "Testing device for the determination of fracture mechanical parameters and specimens suitable for this device (in German)". 1986.
- [12] R. Bradt und H. Harmuth, „The fracture resistance of refractories,“ *Refractory Worldforum*, Bd. 3, Nr. 4, pp. 129-135, 2011.
- [13] H. Harmuth, K. Rieder, M. Krobath und E. Tschegg, „Investigation of the nonlinear fracture behaviour of ordinary ceramic refractory materials,“ *Materials Science and Engineering: A*, Bd. 214, pp. 53-61, 1996.
- [14] L. Elfgren, „Fracture Toughness and Fracture Energy - Test methods for concrete and rock,“ H. T. F. W. H. Mihashi, Hrsg., 1989, p. 575–590.

- [15] A. Hillerborg, M. Modéer and P.-E. Petersson, "Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements," *Cement and Concrete Research*, vol. 6, no. 6, pp. 773-781, 1976.
- [16] IFA, „GESTIS-Stoffdatenbank,“ [Online]. Available: <http://gestis.itrust.de>.
- [17] C. Aksel, B. Rand, F. L. Riley und P. D. Warren, „Mechanical properties of magnesia-spinel composites,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 22, Nr. 5, pp. 745-754, 2002.
- [18] C. Aksel, B. Rand, F. L. Riley und P. D. Warren, „Thermal shock behaviour of magnesia spinel composites,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 24, Nr. 9, pp. 2839-2845, 2004.
- [19] M. Kimura, Y. Uasuda und H. Nishio, „Development of magnesia spinel bricks for rotary cement kilns in Japan,“ in *Interceram Special Issue*, 1984.
- [20] D. R. Wilson, R. M. Evans, I. Wodsworth und J. Cawley, „Properties and application of sintered magnesia alumina spinels,“ in *Proceedings of UNITECR-93*, 1993.
- [21] C. Aksel, P. D. Warren und F. L. Riley, „Magnesia-spinel microcomposites,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 24, Nr. 10-11, pp. 3119-3128, 2004.
- [22] C. Aksel, P. D. Warren und F. L. Riley, „Fracture behaviour of magnesia and magnesia-spinel composites before and after thermal shock,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 24, Nr. 8, pp. 2407-2416, 2004.
- [23] A. Ghosh, R. Sarkar, B. Mukherjee und S. Das, „Effect of spinel content on the properties of magnesia-spinel composite refractory,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 24, Nr. 7, pp. 2079-2085, 2004.
- [24] H. Harmuth, „Characterisation of the Fracture Path in Flexible Refractories,“ *Advances in Science and Technology, Trans Tech Publications*, Bd. 70, pp. 30-36, 2010.
- [25] Y. Belrhiti, O. Pop, A. Germaneau, P. Doumalin, J. Dupra, H. Harmuth, M. Huger und T. Chotard, „Investigation of the impact of micro-cracks on fracture behavior of magnesia products using wedge splitting test and digital image correlation,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 35, Nr. 2, pp. 823-829, 2015.
- [26] R. Grasset-Bourdel, „Structure/property relations of magnesia-spinel refractories: experimental determination and simulation,“ 2011.
- [27] R. Grasset-Bourdel, R. Emler, D. Gruber, H. Harmuth, A. Alzina, M. Huger und T. Chotard, „Propriétés thermomécaniques de réfractaires magnésie/spinelle modèles,“ in *Materiaux*, 2010.
- [28] Z. Hashin und S. Shtrikman, „On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity,“ *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 10, Nr. 4, pp. 335-342, 1962.
- [29] Z. Hashin, „Analysis of composite materials - a survey,“ *Journal of Applied Mechanics*, Bd. 50, Nr. 3, pp. 481-505, 1983.

- [30] T. Mori und K. Tanaka, „Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions,“ *Acta metallurgica*, Bd. 21, Nr. 5, pp. 571-574, 1973.
- [31] G. Weng, „The theoretical connection between Mori-Tanaka's theory and the Hashin-Shtrikman-Walpole bounds,“ *International Journal of Engineering Science*, Bd. 28, Nr. 11, pp. 1111-1120, 1990.
- [32] Y. Benveniste, „A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials,“ *Mechanics of Materials*, Bd. 6, Nr. 2, pp. 147-157, 1987.
- [33] R. Christensen und K. Lo, „Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models,“ *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 27, Nr. 4, pp. 315-330, 1979.
- [34] R. Christensen, „Two Theoretical Elasticity Micromechanics Models,“ *Journal of Elasticity*, Bd. 50, Nr. 1, pp. 15-25, 1998.
- [35] G. Ramesh, E. Sotelino und W. Chen, „Effect of transition zone on elastic moduli of concrete materials,“ *Cement and Concrete Research*, Bd. 26, Nr. 4, pp. 611-622, 1996.
- [36] Y. Benveniste und G. Milton, „The effective medium and the average field approximations vis-a-vis the Hashin-Shtrikman bounds. II. The generalized self-consistent scheme in matrix-based composites,“ *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 58, Nr. 7, pp. 1039-1056, 2010.
- [37] Z. Hashin, „The elastic moduli of heterogeneous materials,“ *Journal of Applied Mechanics*, Bd. 29, Nr. 1, pp. 143-150, 1962.
- [38] Z. Hashin, „Assessment of the self consistent scheme approximation: conductivity of particulate composites,“ *Journal of Composite Materials*, Bd. 2, Nr. 3, pp. 284-300, 1968.
- [39] Y. Benveniste und G. Milton, „The effective medium and the average field approximations vis-a-vis the Hashin-Shtrikman bounds. I. The self-consistent scheme in matrix-based composites,“ *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 58, Nr. 7, pp. 1026-1038, 2010.
- [40] R. Hill, „A self-consistent mechanics of composite materials,“ *Journal of The Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 13, pp. 213-222, 1965.
- [41] R. M. Christensen, „A critical evaluation for a class of micro-mechanics models,“ in *Inelastic Deformation of Composite Materials*, Springer, 1991, pp. 275-282.
- [42] S. Kari, H. Berger, R. Rodriguez-Ramos und U. Gabbert, „Computational evaluation of effective material properties of composites reinforced by randomly distributed spherical particles,“ *Composite Structures*, Bd. 77, Nr. 2, pp. 223-231, 2007.
- [43] Z. Hashin und S. Shtrikman, „A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials,“ *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 11, Nr. 2, pp. 127-140, 1963.

- [44] A. U. Nilsen und P. J. Monteiro, „Concrete: A three phase material,“ *Cement and Concrete Research*, Bd. 23, Nr. 1, pp. 147-151, 1993.
- [45] N. Schmitt, A. Burr, Y. Berthaud und J. Poirier, „Micromechanics applied to the thermal shock behavior of refractory ceramics,“ *Mechanics of materials*, Bd. 34, Nr. 11, pp. 725-747, 2002.
- [46] Z. Hashin und P. Monteiro, „An inverse method to determine the elastic properties of the interphase between the aggregate and the cement paste,“ *Cement and Concrete Research*, Bd. 32, Nr. 8, pp. 1291-1300, 2002.
- [47] C. Neubauer, H. Jennings und E. Garboczi, „A three-phase model of the elastic and shrinkage properties of mortar,“ *Advanced Cement Based Materials*, Bd. 4, Nr. 1, pp. 6-20, 1996.
- [48] K. Lee und J. Park, „A numerical model for elastic modulus of concrete considering interfacial transition zone,“ *Cement and Concrete Research*, Bd. 38, Nr. 3, pp. 396-402, 2008.
- [49] G. R. Irwin, „Analysis of Stresses and Strains Near the End of a Crack Traversing a Plate,“ *J. Appl. Mech.*, 1957.
- [50] A. A. Griffith, „The phenomena of rupture and flow in solids,“ *Philosophical transactions of the royal society of london. Series A, containing papers of a mathematical or physical character*, pp. 163-198, 1921.
- [51] R. W. Hertzberg, *Deformation and fracture mechanics of engineering materials*, Bd. 89, Wiley, 1996.
- [52] V. Mechtcherine, *Bruchmechanische und fraktologische Untersuchungen zur Rissausbreitung in Beton*, Bd. 40, Karlsruhe: Inst. f. Massivbau u. Baustofftechnologie, 2000.
- [53] G. Barenblatt, „The formation of equilibrium cracks during brittle fracture. General ideas and hypotheses. Axially-symmetric cracks,“ *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, Bd. 23, Nr. 3, pp. 622-636, 1959.
- [54] G. I. Barenblatt, „The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture,“ *Advances in applied mechanics*, Bd. 7, Nr. 1, pp. 55-129, 1962.
- [55] D. Dugdale, „Yielding of steel sheets containing slits,“ *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 8, Nr. 2, pp. 100-104, 1960.
- [56] X.-P. Xu und A. Needleman, „Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids,“ *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 42, Nr. 9, pp. 1397-1434, 1994.
- [57] G. Camacho und M. Ortiz, „Computational modelling of impact damage in brittle materials,“ *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 33, Nr. 20-22, pp. 2899-2938, 1996.
- [58] M. Ortiz und A. Pandolfi, „Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis,“ *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Bd. 44, Nr. 9, pp. 1267-1282, 1999.

- [59] N. Chandra, H. Li, C. Shet und H. Ghonem, „Some issues in the application of cohesive zone models for metal--ceramic interfaces,“ *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 39, Nr. 10, pp. 2827-2855, 2002.
- [60] D. Xie und A. Waas, „Discrete cohesive zone model for mixed-mode fracture using finite element analysis,“ *Engineering Fracture Mechanics*, Bd. 73, Nr. 13, pp. 1783-1796, 2006.
- [61] P. Neittaanmäki, T. Rossi, K. Majava, O. Pironneau, R. Owen und M. Mikkola, „Comparison between two cohesive-zone models for the analysis of interface debonding,“ in *European Congress on Computational Methods in Applied Science and Engineering ECCOMAS*, 2004.
- [62] P.-E. Petersson, „Crack growth and development of fracture zones in plain concrete and similar materials,“ Div of Building Materials LTH, Lund university, 1981.
- [63] P.-J. Gustafsson, „Fracture mechanics studies of non-yielding materials like concrete: modelling of tensile fracture and applied strength analyses,“ 1985.
- [64] D. A. Hordijk, „Local approach to fatigue of concrete,“ 1991.
- [65] Z. P. Bazant und B. Oh, „Crack band theory for fracture of concrete,“ *Materiaux et Construction*, Bd. 16, Nr. 3, pp. 155-177, 1983.
- [66] J. P. Zdenek P. Bazant, *Fracture and Size Effect in Concrete and Other Quasibrittle Materials*, 1997, p. 640.
- [67] Z. Bazant und others, „Endochronic inelasticity and incremental plasticity,“ *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 14, Nr. 9, pp. 691-714, 1978.
- [68] P. Grassl, K. Lundgren und K. Gylltoft, „Concrete in compression: a plasticity theory with a novel hardening law,“ *International Journal of Solids and Structures* , Bd. 39, Nr. 20, pp. 5205-5223, 2002.
- [69] K. Loland, „Continuous damage model for load-response estimation of concrete,“ *Cement and Concrete Research* , Bd. 10, Nr. 3, pp. 395-402, 1980.
- [70] V. Lubarda, D. Krajcinovic und S. Mastilovic, „Damage model for brittle elastic solids with unequal tensile and compressive strengths,“ *Engineering Fracture Mechanics* , Bd. 49, Nr. 5, pp. 681-697, 1994.
- [71] M. Ortiz und E. P. Popov, „Plain concrete as a composite material,“ *Mechanics of Materials* , Bd. 1, Nr. 2, pp. 139-150, 1982.
- [72] S.-M. Kim und R. K. A. Al-Rub, „Meso-scale computational modeling of the plastic-damage response of cementitious composites,“ *Cement and Concrete Research* , Bd. 41, Nr. 3, pp. 339-358, 2011.
- [73] J. Lee und G. Fenves, „Plastic-Damage Model for Cyclic Loading of Concrete Structures,“ *Journal of Engineering Mechanics*, Bd. 124, Nr. 8, pp. 892-900, 1998.

- [74] M. Ortiz, „A constitutive theory for the inelastic behavior of concrete,“ *Mechanics of Materials*, Bd. 4, Nr. 1, pp. 67-93, 1985.
- [75] J. Y. Wu, J. Li und R. Faria, „An energy release rate-based plastic-damage model for concrete,“ *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 43, Nr. 3-4, pp. 583-612, 2006.
- [76] R. K. A. Al-Rub und S.-M. Kim, „Computational applications of a coupled plasticity-damage constitutive model for simulating plain concrete fracture,“ *Engineering Fracture Mechanics*, Bd. 77, Nr. 10, pp. 1577-1603, 2010.
- [77] U. Cicekli, G. Z. Voyiadjis und R. K. A. Al-Rub, „A plasticity and anisotropic damage model for plain concrete,“ *International Journal of Plasticity*, Bd. 23, Nr. 10-11, pp. 1874-1900, 2007.
- [78] G. Z. Voyiadjis, R. K. A. Al-Rub und A. N. Palazotto, „Thermodynamic framework for coupling of non-local viscoplasticity and non-local anisotropic viscodamage for dynamic localization problems using gradient theory,“ *International Journal of Plasticity*, Bd. 20, Nr. 6, pp. 981-1038, 2004.
- [79] J. Lubliner, J. Oliver, S. Oller und E. Onate, „A plastic-damage model for concrete,“ *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 25, Nr. 3, pp. 299-326, 1989.
- [80] Z. P. Bazant und S.-S. Kim, „Plastic-fracturing theory for concrete,“ *Journal of the Engineering Mechanics Division*, Bd. 105, Nr. 3, pp. 407-428, 1979.
- [81] R. K. A. Al-Rub und G. Z. Voyiadjis, „Gradient-enhanced coupled plasticity-anisotropic damage model for concrete fracture: computational aspects and applications,“ *International Journal of Damage Mechanics*, 2008.
- [82] R. Hill, „Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles,“ *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 11, Nr. 5, pp. 357-372, 1963.
- [83] I. Gitman, H. Askes und L. Sluys, „Representative volume: Existence and size determination,“ *Engineering Fracture Mechanics*, Bd. 74, Nr. 16, pp. 2518-2534, 2007.
- [84] V. P. Nguyen, O. Lloberas-Valls, M. Stroeve und L. J. Sluys, „On the existence of representative volumes for softening quasi-brittle materials: A failure zone averaging scheme,“ *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 199, Nr. 45-48, pp. 3028-3038, 2010.
- [85] J. Michel, H. Moulinec und P. Suquet, „Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach,“ *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Bd. 172, Nr. 1-4, pp. 109-143, 1999.
- [86] C. Miehe und A. Koch, „Computational micro-to-macro transitions of discretized microstructures undergoing small strains,“ *Archive of Applied Mechanics*, Bd. 72, Nr. 4-5, pp. 300-317, 2002.
- [87] D. Peric, E. A. de Souza Neto, R. A. Feijoo, M. Partovi und A. J. C. Molina, „On micro-to-macro transitions for multi-scale analysis of non-linear heterogeneous materials: unified variational basis and finite element implementation,“ *International Journal for Numerical*

- Methods in Engineering*, Bd. 87, Nr. 1-5, pp. 149-170, 2011.
- [88] V. P. Nguyen, M. Stroeve und L. J. Sluys, „Multiscale continuous and discontinuous modeling of heterogeneous materials: A review on recent developments,“ *Journal of Multiscale Modelling*, Bd. 3, Nr. 04, pp. 229-270, 2011.
- [89] J. Tyrus, M. Gosz und E. DeSantiago, „A local finite element implementation for imposing periodic boundary conditions on composite micromechanical models,“ *International Journal of Solids and Structures* , Bd. 44, Nr. 9, pp. 2972-2989, 2007.
- [90] D. R. Dinger und J. E. Funk, „Particle-Packing Phenomena and Their Application in Materials Processing,“ *MRS Bulletin*, Bd. 22, pp. 19-23, 12 1997.
- [91] J. van Mier, „Microstructural Effects on Fracture Scaling in Concrete, Rock and Ice,“ in *IUTAM Symposium on Scaling Laws in Ice Mechanics and Ice Dynamics*, Bd. 94, J. Dempsey und H. Shen, Hrsg., Springer Netherlands, 2001, pp. 171-182.
- [92] J. V. Mier und M. V. Vliet, „Influence of microstructure of concrete on size/scale effects in tensile fracture,“ *Engineering Fracture Mechanics* , Bd. 70, Nr. 16, pp. 2281-2306, 2003.
- [93] F. Wittmann, P. Roelfstra und H. Sadouki, „Simulation and analysis of composite structures,“ *Materials Science and Engineering* , Bd. 68, Nr. 2, pp. 239-248, 1985.
- [94] C.-B. Du und L.-G. Sun, „Numerical Simulation of Aggregate Shapes of Two-Dimensional Concrete and Its Application 1,“ *Journal of Aerospace Engineering*, Bd. 20, Nr. 3, pp. 172-178, 2007.
- [95] A. Needleman, „An analysis of decohesion along an imperfect interface,“ *International Journal of Fracture*, Bd. 42, Nr. 1, pp. 21-40, 1990.
- [96] P. Mondal, S. P. Shah und L. D. Marks, „Nanoscale characterization of cementitious materials,“ *ACI Materials Journal*, Bd. 105, Nr. 2, 2008.
- [97] G. Ramesh, E. Sotelino und W.-F. Chen, „Effect of transition zone on elastic stresses in concrete materials,“ *Journal of materials in civil engineering*, Bd. 10, Nr. 4, pp. 275-282, 1998.
- [98] P. Mondal, S. Shah und L. Marks, „Nanomechanical Properties of Interfacial Transition Zone in Concrete,“ in *Nanotechnology in Construction 3*, Springer Berlin Heidelberg, 2009, pp. 315-320.
- [99] „Abaqus/CAE User's Manual v6.12“.
- [100] Y. Joliff, J. Absi, M. Huger und J. Glandus, „Microcracks with unexpected characteristics induced by CTE mismatch in two-phase model materials,“ *Journal of Materials Science*, Bd. 43, Nr. 1, pp. 330-337, 2008.
- [101] J. Shackelford, W. Alexander und J. Park, *CRC materials science and engineering handbook*, CRC Press, 1994.

- [102] S. Burnett und U. K. A. E. Authority, Properties of Refractory Materials, Atomic Energy Research Establishment, 1969.
- [103] G. van Rossum, *Python*, 1991.
- [104] J. V. Carstensen, „Modelling of Reinforced Concrete at Elevated Temperatures,“ 2011.
- [105] S. Jin, H. Harmuth und D. Gruber, „Compressive creep testing of refractories at elevated loads- Device, material law and evaluation techniques,“ *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. In Press, 2014.
- [106] F. Nazaret, T. Cutard und O. Barrau, „Damage and creep modeling for refractory structures sizing,“ in *Advances in Refractories V - The Michel Riguard Symposium*, 2010.
- [107] M. Pressler, FE-Simulation der mechanischen Eigenschaften von Magnesia/MA Spinellbaustoffen nach Kühlung von unterschiedlichen Temperaturen, L. f. Gesteinshüttenkunde, Hrsg., Leoben, 2015.
- [108] C. Comi, „A non-local model with tension and compression damage mechanisms,“ *European Journal of Mechanics - A/Solids*, Bd. 20, Nr. 1, pp. 1-22, 2001.
- [109] R. de Borst, J. Pamin, R. Peerlings und L. Sluys, „On gradient-enhanced damage and plasticity models for failure in quasi-brittle and frictional materials,“ *Computational Mechanics*, Bd. 17, Nr. 1-2, pp. 130-141, 1995.
- [110] R. de Borst und J. Pamin, „Gradient plasticity in numerical simulation of concrete cracking,“ *Eur. J. Mech. A/Solids*, Bd. 15, Nr. 2, pp. 295-320, 1996.
- [111] G. Pijaudier-Cabot und Z. P. Bazant, „Nonlocal damage theory,“ *Journal of Engineering Mechanics*, Bd. 113, Nr. 10, pp. 1512-1533, 1987.
- [112] M. Jirasek, „Nonlocal models for damage and fracture: comparison of approaches,“ *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 35, Nr. 31, pp. 4133-4145, 1998.
- [113] G. D. Nguyen, „A thermodynamic approach to non-local damage modelling of concrete,“ *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 45, Nr. 7-8, pp. 1918-1934, 2008.
- [114] T. Maier, Numerische Modellierung der Entfestigung im Rahmen der Hypoplastizität, Lehrstuhl Baugrund, Grundbau, Univ. Dortmund, 2002.
- [115] D. P. W. Drucker, „Soil mechanics and plastic analysis for limit design,“ *Quarterly of Applied Mathematics*, Bd. 10, Nr. 2, pp. 157-165, 1952.
- [116] H. K. Hilsdorf, Versuchstechnische Probleme beim Studium der Verformungseigenschaften des Betons, Bd. 5, 1963, pp. 421-428.
- [117] A. Hillerborg, „Analysis of one single crack,“ *Fracture Mechanics of Concrete*, pp. 223-249, 1983.

Appendix A

Eine Änderung des Grenzkorndurchmessers auf $d_{grenz} = 0,5$ mm ermöglicht die maximal im Gefüge darstellbare Kornfraktion auf 57 %.

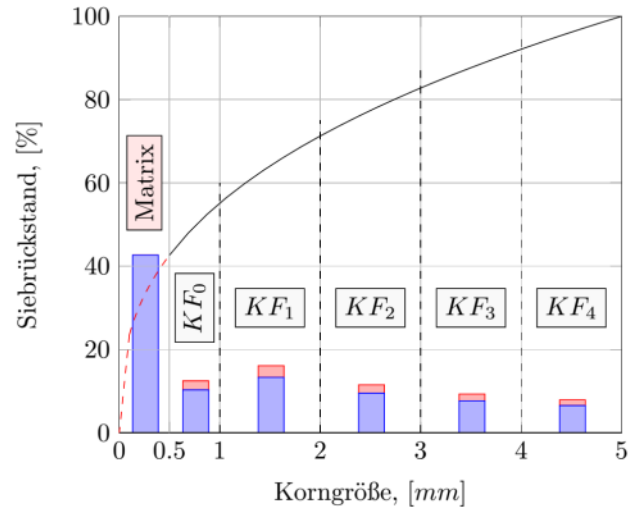


Abbildung a: Siebrückstandskurve nach Dinger-Funk [90] mit $d_{max} = 5$ mm, $d_{min} = 0$ mm, $d_{grenz} = 0,5$ mm und $n = 0,37$ und einer zusätzlichen Kornfraktion KF_0 , die roten Balken entsprechen dem Spinell und die blauen dem MgO-Anteil der jeweiligen Kornfraktion

Tab. 1: Siebrückstandskurve mit $d_{grenz} = 0,5$ mm

| Bezeichnung | Kornklasse [mm] | Kornfraktion KF_i [%] | Kumulierter Rückstand R [%] | Spinell [%] |
|-------------|--------------------|----------------------------|-------------------------------------|----------------|
| KF_4 | 4 - 5 | 7,92 | 7,92 | 1,38 |
| KF_3 | 3 - 4 | 9,30 | 17,22 | 1,62 |
| KF_2 | 2 - 3 | 11,53 | 28,75 | 2,01 |
| KF_1 | 1 - 2 | 16,12 | 44,87 | 2,81 |
| KF_0 | 0,5 - 1 | 12,47 | 57,34 | 2,18 |
| Matrix | < 0,5 | 42,66 | 100 | - |
| Σ | | 100 | | 10 |

Appendix B

Überprüfen der periodischen Randbedingungen

Für die Überprüfung der richtigen Implementierung der PBCs wurde eine einfache Geometrie mit einer möglichen Schädigungszone belastet. Für den Versuch ohne PBC wurde die linke Seite fixiert und die rechte Seite mit einem virtuellen Punkt gekoppelt. Die Verschiebung der rechten Seite erfolgte durch die Verschiebung des virtuellen Punktes. Aufgrund der Verknüpfung mittels CEs reicht eine positive Verschiebung des Referenzpunktes im Modell mit PBC aus. Der Vergleich der Energie-Verschiebungskurve (a) und der Kraft-Verschiebungskurve (b) in Abbildung b zeigen nahezu identische Ergebnisse. Die erkennbare Abweichung wird durch eine numerische Instabilität zurückgeführt.

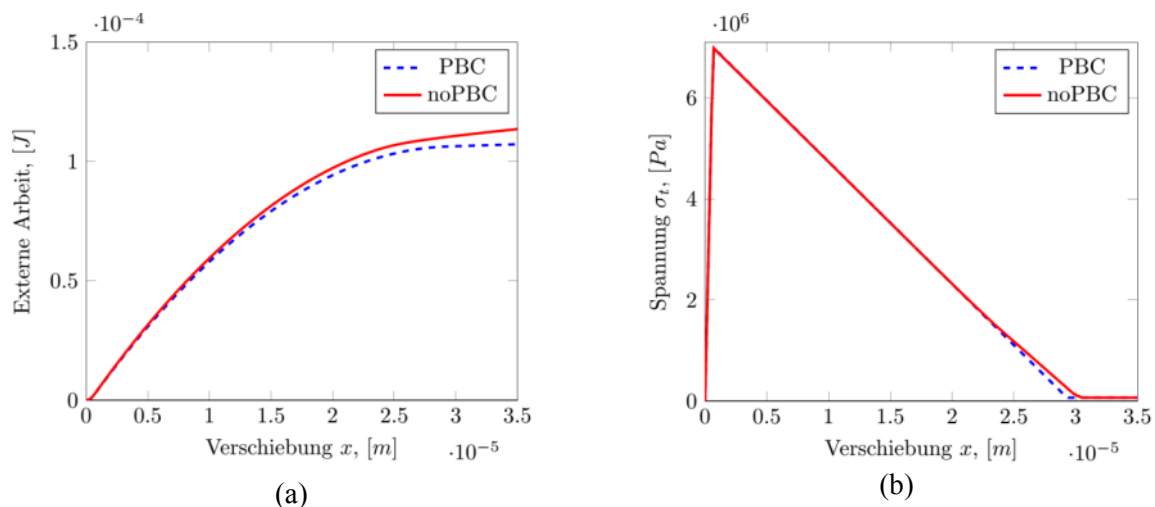


Abbildung b: Vergleich der externen benötigten Energie (a) und Spannungs- Verschiebungs-Verlauf (b) eines Zugversuches an einem Modell mit (PBC) und ohne (noPBC) periodischen Randbedingungen.

Sliding Formulation:

Finite sliding:

ABAQUS verfolgt kontinuierlich die Kontaktbeziehung zwischen Master- und Slave-Fläche. Es werden immer wieder neue Kontakte berechnet. Diese Methode ist aufwendiger und benötigt mehr Rechenleistung, das System wird insgesamt instabiler. Es erlaubt nur relativ kleine Relativbewegung zwischen zwei Körpern.

Small sliding:

Die Kontaktbeziehung zwischen den Flächen am Beginn bleibt bis zum Ende der Simulation bestehen. Diese Methode ist weniger komplex als das *finite sliding*, und sollte bei einer geringen relativen Verschiebung verwendet werden.

Discretization method:

Surface to surface (STS):

Diese Methode kann nicht in der Kombination mit *finite sliding* verwendet werden!

Die *surface to surface* Diskretisierung der Kontakte berücksichtigt die Form der beiden Flächen. Das Ergebnis wird aus dem Durchschnitt der Interaktionen der benachbarten Knoten gebildet. Dadurch erhöht sich der Rechenaufwand, liefert aber genauere Ergebnisse als die *Node to Surface*-Methode.

Node to surface (NTS):

Mit dieser Kontaktdefinition interagiert, wie in Abbildung c gezeigt, jeder Knoten auf der Slave-Fläche mit mehreren projizierten Punkten auf der Master-Fläche. Die Slave-Knoten können nicht in die Master-Fläche eindringen. Theoretisch wäre das umgekehrt möglich.

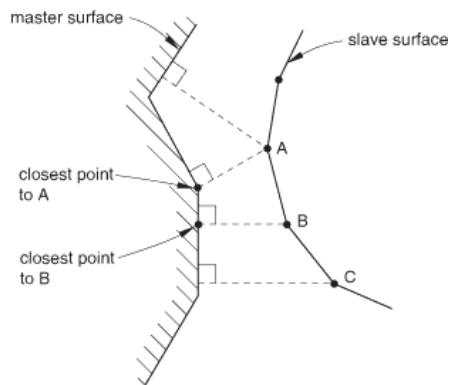


Abbildung c: Node-to-surface contact discretization [99]

Bei einer feineren Vernetzung nähert sich das Ergebnis der NTS jenem der STS an.