

**Computational methods for fatigue life prediction  
of high temperature components  
in combustion engines and exhaust systems**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
Doktors der Ingenieurwissenschaften

(Dr.-Ing.)

von der Fakultät für Maschinenbau  
der Universität Karlsruhe (TH)

genehmigte

DISSERTATION

von

Thomas Seifert, M.Sc.  
geboren in Lindau

Tag der mündlichen Prüfung: 15. Januar 2008  
Referent: Prof. Dr. H. Riedel  
Korreferent: Prof. Dr. P. Gumbsch





Fraunhofer Institut  
Werkstoffmechanik

# Computational methods for fatigue life prediction of high temperature components in combustion engines and exhaust systems

Thomas Seifert

Januar 2008

Die vorliegende Dissertation wird im Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM als wissenschaftlicher Bericht mit folgender Berichtsnummer geführt:

**W 2/2008**

Fraunhofer-Institut  
für Werkstoffmechanik IWM  
Wöhlerstraße 11  
79108 Freiburg



Schriftenreihe Werkstoffwissenschaft und Werkstofftechnik

Band 41/2008

**Thomas Seifert**

**Computational methods for fatigue life prediction of  
high temperature components in combustion  
engines and exhaust systems**

Shaker Verlag  
Aachen 2008

**Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek**

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: Karlsruhe, Univ., Diss., 2008

Copyright Shaker Verlag 2008

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8322-7061-2

ISSN 1439-4790

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen

Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • e-mail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

## Acknowledgment

This dissertation accrued during my occupation at the Fraunhofer Institute for Mechanics of Materials IWM in Freiburg.

I would like to express my gratitude to my academic teachers Prof. Hermann Riedel, Prof. Peter Gumbsch, Dr.-habil. Ingo Schmidt and Dr. Ralf Mohrmann. They supported, guided and inspired me and my work. Moreover, I would like to thank both professors for accepting to become referees for this thesis.

Furthermore, I would like to thank my colleagues of the group 'High temperature behavior of metals' at the Fraunhofer IWM, in particular Martin Tandler and Philipp von Hartrott, and my roommate Kersten Korn, for the many helpful discussions, the pleasant working conditions and the excellent social atmosphere.

Finally, I would like to seize the chance to thank my wife Charlotte and my children Gregor and Henri for the wonderful times we share.

Freiburg, January 2008

Thomas Seifert





## Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit rechnerischen Methoden zur Lebensdauer-  
vorhersage von Hochtemperaturbauteilen in Motoren und Abgassystemen. Diese  
Bauteile unterliegen scharfen Temperaturzyklen während An- und Abfahrvorgängen.  
Die Kombination von Temperaturübergängen mit den resultierenden mechanischen  
Dehnungszyklen führt zur thermo-mechanischer Ermüdung (TMF) des Werkstoffs  
und letztendlich, nach einer gewissen Zyklenzahl, zum Versagen der Bauteile. Zahl-  
reiche teure und zeitaufwändige Bauteilversuche sind häufig notwendig um die Bauteile  
auszulegen. Ziel der Arbeit ist es, verlässliche Lebensdauer vorhersagen zu machen, so  
dass die Anzahl an notwendigen Bauteilversuchen reduziert werden kann. Die ent-  
wickelte Methodik umfasst mechanismenbasierte Modelle für Wechsellastigkeit und  
Lebensdauer vorhersage sowie ein effizientes Versuchsprogramm zur Bestimmung der  
Modellparameter. Ein zentraler Aspekt der Arbeit sind Algorithmen zur effizienten  
Umsetzung der Modelle in Finite-Elemente Programmen und zur automatisierten Pa-  
rameteridentifikation. Die Werkstoffmodelle können so von Berechnungsingenieuren in  
der Industrie direkt eingesetzt werden.

Zur Beschreibung der zeit- und temperaturabhängigen Wechsellastigkeit bei nieder-  
frequenter Ermüdung (LCF) und TMF wird in dieser Arbeit das Chaboche Modell  
verwendet. Da Eisengusswerkstoffe aufgrund der Graphitausscheidungen ein asym-  
metrisches Verhalten in Zug und Druck aufweisen, wird das Chaboche Modell mit  
dem mikromechanischen Gurson Modell kombiniert. Dadurch kann der Einfluss der  
Graphitteilchen berücksichtigt werden kann. Ein wesentlicher Aspekt des kombinierten  
Modells ist, dass die Gurson Fließfunktion mit kinematischer Verfestigung erweitert  
wird. Diese Erweiterung wird mit Zellmodellrechnungen überprüft, indem Fließflächen  
mit Zellmodellen berechnet und mit dem Chaboche-Gurson Modell verglichen werden.  
Dabei zeigt sich eine gute Übereinstimmung. Mit diesem kombinierten Modell ist es  
möglich die Wechsellastigkeit bei LCF und TMF Versuchen wie auch die Plastizität  
bei größeren Verformungen in Zug- und Druckversuchen zu beschreiben.

Die Wechsellastigkeitsmodelle beinhalten eine relative große Anzahl an Parametern,  
die auf Basis von Versuchsdaten bestimmt werden müssen. Häufig sind angemessene  
Versuchsdaten nicht vorhanden, weil die Messung der Daten zu teuer und zeitinten-  
siv ist. Deshalb wird in dieser Arbeit ein effizientes Versuchsprogramm vorgeschlagen.  
Das Versuchsprogramm besteht aus komplexen LCF Versuchen. In einem komplexen  
Versuch werden verschiedenen Dehnraten und Dehnamplituden, wie auch Haltezeiten  
durchgeführt, so dass aus einem einzigen Versuch die Modellparameter für eine Tem-  
peratur bestimmt werden können. Stabilitäts- und Sensitivitätsanalysen zeigen, dass  
die so bestimmten Parameter von hoher Qualität sind. Außerdem zeigt sich, dass es  
mit den bei unterschiedlichen Temperaturen bestimmten Parametern möglich ist, das  
Werkstoffverhalten in nichtisothermen Versuchen vorauszusagen.

Zur Parameteridentifikation wird ein hybrider Optimierungsansatz zur Minimierung  
von Fehlerquadraten verwendet. Dazu wird eine Kriging-Schätzung verwendet, um  
Startwerte für gradientenbasierte Optimierungsverfahren zu bestimmen. Die notwendi-

gen Gradienten werden analytisch hergeleitet. Der hybride Ansatz erlaubt die Bestimmung der Parameter mit einem hohen Automatisierungsgrad.

Um die Wechselformungsmodelle in Finite-Elemente Programmen und damit auf Bauteilsimulationen anwendbar zu machen, werden die Modelle mit einem in dieser Arbeit entwickelten Algorithmus implementiert. Die Besonderheit dieses Algorithmus ist auf der einen Seite seine Effizienz, so dass in der industriellen Praxis großskalige Finite-Elemente Modelle berechnet werden können. Auf der anderen Seite ist der Algorithmus auch modular, so dass bei der Werkstoffmodellentwicklung Modifikationen sehr schnell umgesetzt werden können. Die verbesserten Modelle können somit unmittelbar für Bauteilsimulationen wieder zur Verfügung stehen.

Die in den Bauteilsimulationen berechneten Spannungen und Dehnungen werden in dieser Arbeit zur Voraussage der Lebensdauer mit einem mechanismusbasierten Modell genutzt. Unter LCF und TMF Belastung ist die Lebensdauer in erster Linie durch das Wachstum von kurzen Rissen bestimmt. Ein einfaches Ermüdungsrisswachstumsmodell geht davon aus, dass die Rissverlängerung in einem Belastungszyklus annähernd gleich der zyklischen Rissöffnung ist. Zur Überprüfung der Anwendbarkeit des Modells auf thermomechanische Probleme wird die zyklische Rissöffnung mit Finite-Elemente Simulationen berechnet und die daraus vorhergesagten Lebensdauern mit experimentellen Werten verglichen. Die Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung. Deshalb wird auf eine analytische Abschätzung der zyklischen Rissöffnung zurückgegriffen, die auf den bereits bekannten Schädigungsparameter DTMF führt. Mit diesem Modell lassen sich LCF und TMF Lebensdauern einheitlich beschreiben.

Die in dieser Arbeit entwickelte Methodik wird zur Lebensdauervorhersage zweier Abgaskrümmen eingesetzt. Die berechneten Versagensorte und Lebensdauern stimmen sehr gut mit Ergebnissen aus Bauteilversuchen in der Industrie überein. Somit ist es tatsächlich möglich, die Anzahl an Bauteilversuchen deutlich zu reduzieren.

# Contents

<b>Notation</b>	<b>1</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2 Basic concepts of continuum mechanics</b>	<b>5</b>
2.1 Kinematics of finite deformations . . . . .	5
2.2 Stress tensors and objective stress rates . . . . .	7
2.3 Balance laws . . . . .	8
2.4 Finite element method . . . . .	10
<b>3 Constitutive equations</b>	<b>12</b>
3.1 General framework . . . . .	13
3.1.1 Concept of internal variables and normality rule . . . . .	13
3.1.2 Simplified inelastic constitutive equations for metals . . . . .	15
3.2 Phenomenological models . . . . .	17
3.2.1 Von Mises model with kinematic hardening . . . . .	17
3.2.2 Armstrong-Frederik-type kinematic hardening laws . . . . .	18
3.2.3 Oscillations in finite simple shear deformation . . . . .	20
3.3 Micro-mechanical models for porous materials . . . . .	21
3.3.1 Gurson-type models . . . . .	21
3.3.2 Comparison of Gurson-type models with unit cell models . . . . .	25
3.3.3 Effective elastic properties . . . . .	32
<b>4 Implementation of the constitutive equations and parameter identification</b>	<b>36</b>
4.1 Objective integration . . . . .	37
4.1.1 Incrementally objective algorithms . . . . .	38
4.1.2 Canonical form return mapping algorithm . . . . .	40
4.1.3 Test example: Simple shear with superimposed rotation . . . . .	42
4.2 Finite element implementation of the integration algorithm . . . . .	43
4.2.1 Consistent linearization . . . . .	43
4.2.2 Finite element stiffness matrix . . . . .	48
4.2.3 Verification of the implementation . . . . .	49
4.2.4 Convergence properties of consistent and approximate linearization	51

4.3	Increasing efficiency of the integration algorithm . . . . .	54
4.3.1	Line-search methods . . . . .	54
4.3.2	Test example: Simulation of the necking of a tensile bar . . . . .	58
4.3.3	Sub-stepping . . . . .	75
4.3.4	Test example: Simulation of the wire drawing process . . . . .	76
4.4	Methods for parameter identification . . . . .	78
4.4.1	Least-square minimization . . . . .	78
4.4.2	Gradient-based optimization methods . . . . .	80
4.4.3	Evolutionary strategy . . . . .	83
4.4.4	Optimization using Kriging interpolation . . . . .	83
4.4.5	Test example: Approximation of a test function with Kriging interpolation . . . . .	88
4.4.6	Driver algorithm for parameter identification from uniaxial tests	91
4.5	A complex loading history for the identification of cyclic viscoplasticity parameters . . . . .	96
4.5.1	Stability and sensitivity analysis . . . . .	97
4.5.2	Initial parameters for gradient-based optimization methods . . . . .	102
<b>5</b>	<b>A mechanism-based model for fatigue life prediction</b>	<b>107</b>
5.1	Correlation of $\Delta CTOD$ and $N_f$ . . . . .	109
5.1.1	$\Delta CTOD$ from finite element calculations . . . . .	109
5.1.2	Fatigue life . . . . .	111
5.1.3	Comparison of the calculated and measured fatigue lives . . . . .	113
5.1.4	Kinetics of oxygen deposition at the crack tip . . . . .	115
5.2	The damage parameter $D_{TMF}$ . . . . .	117
5.2.1	Uniaxial formulation . . . . .	118
5.2.2	Multiaxial formulation . . . . .	118
5.3	Assessment of the degree of non-proportionality of stress histories . . . . .	119
<b>6</b>	<b>Fatigue life prediction of the nodular cast iron GJS700</b>	<b>122</b>
6.1	Experiments . . . . .	122
6.2	Adjustment of constitutive equations . . . . .	124
6.3	Adjustment of the $D_{TMF}$ fatigue life model . . . . .	127
<b>7</b>	<b>Fatigue life prediction of a D5S cast iron exhaust manifold</b>	<b>132</b>
7.1	Experiments . . . . .	132
7.2	Adjustment of constitutive equations . . . . .	134
7.3	Adjustment of the $D_{TMF}$ fatigue life model . . . . .	138
7.4	Component simulation and comparison with experiments . . . . .	143
<b>8</b>	<b>Fatigue life prediction of a 1.4301 sheet metal exhaust manifold</b>	<b>145</b>
8.1	Experiments . . . . .	145
8.2	Adjustment of constitutive equations . . . . .	146
8.3	Adjustment of the $D_{TMF}$ fatigue life model . . . . .	148

8.4	Component simulation and comparison with experiments . . . . .	150
<b>9</b>	<b>Discussion</b>	<b>154</b>
9.1	Constitutive equations and their adjustment to austenitic steels . . . . .	154
9.2	Porous materials with hardening matrix . . . . .	155
9.3	Efficient canonical form return mapping algorithm . . . . .	156
9.4	Tests with complex loading history . . . . .	157
9.5	Automatic parameter identification . . . . .	157
9.6	Microcrack growth models and fatigue lives . . . . .	158
9.7	Fatigue life of high temperature components . . . . .	159
<b>10</b>	<b>Summary and conclusions</b>	<b>161</b>
	<b>Bibliography</b>	<b>163</b>
	<b>Curriculum vitae</b>	<b>175</b>