

Verbesserung lokaler Spaltbruchmodelle unter Berücksichtigung mikromechanischer Vorgänge

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften

der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte

Dissertation

von

Dipl. Ing. Volker Hardenacke

Tag der mündlichen Prüfung:

20.10.2015

Hauptreferent:

Prof. Dr. Hermann Riedel

Korreferenten:

Prof. Dr. Thomas Böhlke

PD Dr. Ing. habil. Jörg Hohe

Vorwort

Die vorliegende Arbeit ist während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik (IWM) in Freiburg entstanden. Ein wesentlicher Teil der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) gefördert.

Herzlich bedanken möchte ich mich bei allen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank an dieser Stelle gilt Herrn PD Dr. Ing. habil. Jörg Hohe für die stets wohlwollende Förderung und Begleitung sowie für konstruktive Diskussionen und Gespräche. Herrn Prof. Dr. Hermann Riedel und Herrn Prof. Dr. Thomas Böhlke danke ich für ihr entgegengebrachtes Interesse an meiner Arbeit, für wertvolle Anregungen sowie für die bereitwillige Übernahme des Referats.

Außerdem mochte ich allen Kollegen danken. Das angenehme Betriebsklima und die tägliche Bereitschaft zur gegenseitigen Hilfestellung bei der Lösung verschiedenster Aufgaben haben maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Ganz herzlich danke ich meiner Familie für all ihre Unterstützung und Geduld.

Volker Hardenacke

Freiburg, Oktober 2015

VERBESSERUNG LOKALER SPALTBRUCH- MODELLE UNTER BERÜCKSICHTIGUNG MIKROMECHANISCHER VORGÄNGE

Volker Hardenacke

Oktober 2015

Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM
Wöhlerstraße 11
79108 Freiburg

Kurzfassung

Das Ziel der gegenwärtigen Arbeit ist die Ableitung, Implementierung und Validierung eines mikromechanisch basierten lokalen probabilistischen Spröbruchmodells zur Bewertung der Bruchwahrscheinlichkeit von Bauteilen aus ferritischen Werkstoffen unter Berücksichtigung komplexer mehraxialer Spannungszustände. Das Modell soll die Mikrodefektentstehung (durch Bruch spröder Partikel) und die mögliche Instabilität der potentiell Spaltbruch auslösenden Mikrodefekte gleichermaßen berücksichtigen. Hierzu werden zunächst mikrostrukturelle Untersuchungen mittels EBSD (Kornstruktur) und REM (karbidische Ausscheidungen) durchgeführt, um anschließend auf Grundlage der erhaltenen Ergebnisse Repräsentative Volumenelemente (RVE) der Mikrostruktur generieren zu können. Die RVE werden entsprechend der lokalen Feldgrößen am Bruchursprung belastet. So kann das Verhalten der als Spaltbruchauslöser agierenden spröden Partikel für verschiedene mechanische Belastungssituationen untersucht werden. Auf diese Weise erhält man die für die Formulierung des erweiterten lokalen probabilistischen Spaltbruchmodells erforderlichen Informationen bezüglich der für die Spaltbruchauslösung relevanten Parameter und deren Wechselwirkungen. Das vorgeschlagene mikromechanisch fundierte erweiterte Spaltbruchmodell basiert auf drei Termen. Der erste Term liefert die Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch auf Basis der Verteilung der Partikelbeanspruchung, während der zweite Term die Wahrscheinlichkeit für den Rissübergang in die ferritische Matrix über die Verteilung der dazu erforderlichen kritischen Partikelgröße erfasst. Der dritte Term beschreibt schließlich die mögliche Instabilität des ggf. entstandenen Mikrodefekts basierend auf dem Griffith-Kriterium. Mit dem im Rahmen der vorliegenden Arbeit definierten lokalen Spaltbruchmodell steht ein validiertes und zuverlässiges universell einsetzbares Berechnungswerkzeug zur Integritätsbewertung unter Berücksichtigung der jeweils vorliegenden lokalen Belastungssituation zur Verfügung.

Abstract

The objective of the current study is the derivation, implementation and validation of a micro mechanically based local probabilistic cleavage model for the assessment of the fracture probability of ferritic components considering complex multiaxial stress states. The model should account for the micro defect nucleation (by carbide cracking) as well as for the possible instability of the potentially critical micro defects. For this purpose Representative Volume Elements (RVE) of the microstructure are generated, accounting for both, the grain structure as well as the brittle particles within the grain structure. The RVE's are loaded based on the local mechanical field quantities at the cleavage origins. Thereby, the behavior of the brittle particles acting as cleavage initiation sites can be specified for different mechanical loading conditions. By this micromechanical modelling of the cleavage initiation process the effects and the interactions of the relevant parameters for the formulation of an enhanced local probabilistic cleavage model can be identified. The proposed micro mechanically motivated cleavage model is based on three terms. In this context, the first term provides the probability for particle fracture on the basis of the distribution of the particle stress, while the second term determines the probability for defect transition into the ferritic matrix via the distribution of the critical particle size necessary for that purpose. Finally, the third term estimates the possible instability of the contingently nucleated micro crack based on the Griffith criterion. The model defined in this study provides a validated and reliable all-purpose tool for the integrity assessment of components in consideration of the existing local loading conditions.

Wichtige Abkürzungen und Formelzeichen

Abkürzungen	
<i>EBSD</i>	Electron Backscatter Diffraction
<i>REM</i>	Rasterelektronenmikroskopie
<i>RVE</i>	Repräsentatives Volumenelement

Formelzeichen	
<i>a</i>	Risslänge
<i>B</i>	Probendicke
<i>D_k</i>	Kritischer Partikeldurchmesser
<i>E</i>	Elastizitätsmodul
<i>h</i>	Spannungsmehrachsigkeit σ_h/σ_e
<i>J</i>	J-Integral
<i>K_J</i>	Spannungsintensitätsfaktor aus J-Integral
<i>K_{Jc}</i>	Bruchzähigkeit
<i>P_f</i>	Akkumulierte Versagenswahrscheinlichkeit
<i>t</i>	Zeit
<i>T</i>	Temperatur
<i>T₀</i>	Mastercurve-Referenztemperatur
<i>V</i>	Volumen
<i>W</i>	Probenbreite
Δa	Duktile Rissverlängerung
Δx_1	Abstand von der Rissfront
Δx_3	Abstand von der Probenmittelebene
ε_1	Maximale Hauptdehnung
ε_e^{pl}	Akkumulierte plastische Vergleichsdehnung
ε_{ij}	Komponenten des log. Dehnungstensors
γ	Oberflächenenergie
ν	Querkontraktionszahl
σ_0	(Anfangs-)Flie遢spannung
σ_1	Maximale Hauptspannung
σ_e	Mises-Vergleichsspannung
σ_h	Hydrostatische Spannung
σ_{ij}	Komponenten des Cauchy-Spannungstensors
σ_p	Partikelspannung

Notation: Für Vektoren werden Kleinbuchstaben in Fettdruck verwendet, für Matrizen in der Regel Großbuchstaben in Fettdruck (Ausnahmen sind an den entsprechenden Stellen angegeben).

Tensoroperationen: es gilt die EINSTEIN-Summationskonvention, d.h. über in einem Term doppelt auftretende Indizes wird summiert:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{A} \mathbf{n} = A_{ij} n_j & \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} &= \mathbf{A} \mathbf{B} = A_{ij} B_{jk} \\ \mathbf{A} : \mathbf{B} &= A_{ij} B_{ji} & \mathbf{C} : \mathbf{B} &= C_{ijkl} B_{lk} \end{aligned}$$

Inhalt

Kurzfassung	i
Wichtige Abkürzungen und Formelzeichen	ii
1 Einleitung.....	1
2 Grundlagen.....	5
2.1 Grundlagen der Kontinuumsmechanik	5
2.1.1 Randwertproblem und Prinzip der virtuellen Arbeit	6
2.1.2 Finite-Elemente-Methode	8
2.2 Grundlagen der Bruchmechanik	11
2.2.1 Stadien des Bruchvorgangs und Bruchmechanismen	11
2.2.2 Grundlegende bruchmechanische Konzepte	14
2.3 Konzepte zur Bewertung der Spaltbruchsicherheit	17
2.3.1 Makroskopische Konzepte	17
2.3.2 Lokale Konzepte – local approach	19
2.3.3 Zusammenfassung und Diskussion	33
3 Modellwerkstoff	35
3.1 Materialcharakterisierung.....	35
3.1.1 Grundcharakterisierung	36
3.1.2 Bruchmechanische Charakterisierung.....	38
3.1.3 Fraktographische Untersuchungen	41
3.2 Untersuchung der Mikrostruktur	43
3.2.1 Stochastische Beschreibung der Kornstruktur	46
3.2.2 Stochastische Beschreibung der Partikel	51
3.3 Zusammenfassung und Diskussion	53
4 Finite-Elemente-Simulationsrechnungen	55
4.1 Numerische Analyse der Bruchmechanikexperimente	55
4.1.1 Finite-Elemente-Modelle	56
4.1.2 Lokale Lastgeschichten.....	57
4.2 Mikromechanische Simulationsrechnungen.....	65
4.2.1 Modellierung der Mikrostruktur	65
4.2.2 Feldgrößen an den Korngrenzen	87
4.2.3 Untersuchungen zum Partikelbruch - Partikelbeanspruchung	92
4.2.4 Untersuchungen zum Rissübergang in die Matrix.....	105
4.3 Zusammenfassung und Diskussion	115

5	Mikromechanisch basiertes Spaltbruchmodell	119
5.1	Bedingungen für die Spaltbruchauslösung	119
5.2	Wahrscheinlichkeiten im RVE	120
5.2.1	Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch	121
5.2.2	Wahrscheinlichkeit für Rissübergang in die Matrix	128
5.2.3	Wahrscheinlichkeit für Defektinstabilität	136
5.3	Formulierung eines mikromechanisch basierten lokalen Spaltbruchmodells	137
5.4	Zusammenfassung und Diskussion	139
6	Validierung und vergleichende Anwendung	142
6.1	Bestimmung der Materialparameter	142
6.2	Validierung des vorgeschlagenen Modells	143
6.3	Vergleich mit anderen Modellen	145
6.4	Zusammenfassung und Diskussion	147
7	Zusammenfassung und Ausblick	149
	Literaturverzeichnis	154
	Anhang	161

1 Einleitung

Im Rahmen der Sicherheitsbewertung technischer Anlagen ist das spröde Versagen von Komponenten aus ferritisch-bainitischen Stählen auszuschließen. In diesem Zusammenhang wird das Konzept der schadenstoleranten Auslegung angewendet. Dieses Konzept beinhaltet die Annahme, dass Risse im Bauteil vorhanden sind. Daher muss nachgewiesen werden, dass diese Risse unter den gegebenen Belastungsbedingungen unkritisch sind.

Bislang erfolgt die bruchmechanische Bewertung zumeist mittels makroskopischer Konzepte, welche auf dem Vergleich einer globalen Belastungsgröße mit einer für den betrachteten Werkstoff experimentell ermittelten (temperaturabhängigen) Bruchzähigkeit basieren. Das entsprechende technische Regelwerk (z.B. ASME-Code [2], [3], ASTM E 1921 [5], KTA 3201 [7]) enthält sowohl deterministische als auch probabilistische Konzepte. Das K_{Ic} -Konzept, welches als globale Belastungsgröße den Spannungintensitätsfaktor K_I und auf der Werkstoffseite eine untere Einhüllende auf Basis einer großen Anzahl an gemessenen Bruchzähigkeiten als Grenzkurve verwendet, ist ein deterministisches Konzept. Als solches kann es der probabilistischen Natur des Spaltbruchs, welcher seinen Ausgang an im Werkstoff zufällig verteilten Schwachstellen nimmt, nicht gerecht werden. Demgegenüber berücksichtigt das von Wallin [120] vorgeschlagene und in ASTM E 1921 [5] genormte Mastercurve-Konzept den stochastischen Charakter der Spaltbruchauslösung. Dieses Konzept erlaubt die Abschätzung der Versagenswahrscheinlichkeit durch die Gegenüberstellung der globalen Belastungsgröße und einer probabilistisch definierten Bruchzähigkeitskurve. Im Rahmen des Mastercurve-Konzepts wird zur Beschreibung der globalen Belastung der aus dem J -Integral berechnete Spannungintensitätsfaktor K_J verwendet.

Durch die Verwendung einer einzigen globalen Belastungsgröße weisen die makroskopischen Bewertungskonzepte in der Bewertungspraxis eine einfache Anwendbarkeit auf. Die Verwendung von Laborproben mit hoher Dehnungsbehinderung in Dickenrichtung zur Bestimmung der erforderlichen Materialparameter führt zu konservativen Bewertungen, die jedoch in einigen Fällen auch deutlich überkonservativ sein können. Weiterhin ist eine exakte Berücksichtigung des lokalen Spannungs- und Dehnungszustandes im hochbeanspruchten Bereich in der Umgebung der Rissfront aufgrund des integralen Charakters der globalen Belastungsparameter nicht möglich. Der lokale Spannungszustand vor der Rissfront realer (oder auch postulierter) Risse kann erheblich von dem den klassischen Bewertungskonzepten zu Grunde liegenden idealisierten Referenzfall abweichen. Insbesondere ist die Existenz des bei der Herleitung der Einparameterkonzepte konservativ angenommenen ebenen Dehnungszustandes oftmals nicht gegeben. Weiterhin findet die Spaltbruchauslösung in vielen Fällen nicht direkt an der Rissfront statt, sondern in einem erkennbaren Abstand zu dieser. Eine eindeutige Beschreibung des dort vorliegenden Spannungszustands durch den die Intensität des singulären Terms des Spannungsfelds charakterisierenden Belastungsparameter K (oder J) ist jedoch nicht möglich. Es existieren verschiedene Zweiparameterkonzepte, die durch Einführung sekundärer Beanspruchungsgrößen eine genauere Erfassung des lokalen Spannungszustands (in Abhängigkeit von der Proben- oder Bauteilgröße und Geometrie, der Rissgröße und Rissgeometrie und dem äußeren Belastungszustand) ermöglichen (vgl. Du und Hancock [32], Hebel et al. [46], O'Dowd [89], Yang et al. [124]).

Trotz dieser Erweiterungen ist die allgemeine Übertragbarkeit der makroskopischen Spaltbruchkonzepte auf komplexe äußere Belastungssituationen stark eingeschränkt. In diesem Zusammenhang muss besonders die Problematik der Bestimmung und Über-

tragbarkeit der jeweils erforderlichen Materialparameter erwähnt werden. Die Verwendung bruchmechanischer Normproben führt dazu, dass keine allgemeinen mehraxialen Belastungszustände realisiert werden können. So ist es z.B. nicht möglich, die Auswirkungen zusätzlicher, längs der Rissfront wirkender Spannungen zu erfassen. Diese Belastungen, welche beispielsweise in Anlagenkomponenten unter Thermoschockbelastung auftreten können, werden demnach bei Verwendung der zur Verfügung stehenden Zwei-Parameter-Konzepte nicht berücksichtigt.

Aufgrund der bekannten Defizite der auf einer globalen Belastungsgröße K oder J (ggf. ergänzt durch sekundäre makroskopische Parameter) basierenden Bewertungskonzepte wurden in den vergangenen Jahren zunehmend lokale Bruchkonzepte entwickelt (Berdin et al. [16], Mudry [87]). Die Grundidee dieser sogenannten „local approach“-Konzepte ist die Bewertung der Spaltbruchgefahr direkt auf Basis der im hochbeanspruchten Bereich in der Umgebung der Rissfront vorliegenden Spannungs- und Dehnungsfelder. Dieser Ansatz ermöglicht die Erfassung der Effekte des lokalen Spannungs- und Dehnungszustands am potentiellen Bruchursprungsort und somit die Berücksichtigung komplexer lokaler Beanspruchungssituationen. Dadurch können bei Verwendung der lokalen Bruchkonzepte übermäßige Konservativitäten abgebaut und vorhandene Ressourcen besser ausgenutzt werden. Derartige lokale Konzepte wurden bereits auf Experimente an Standardproben, auf Versuche an bauteilähnlichen Proben und auch auf Versuche an Bauteilen angewendet.

Dabei konnte ein Defizit der zu Verfügung stehenden Modelle festgestellt werden. Die Übertragbarkeit der anhand von Experimenten an Standard-Bruchmechanikproben ermittelten Material- bzw. Modellparameter auf Proben mit anderer Geometrie und Risstiefe oder reale Bauteile ist oftmals eingeschränkt (Hohe et al. [49], [52], siehe Abb. 01). Dieses Defizit wurde darauf zurückgeführt, dass die betrachteten Modelle im Wesentlichen auf einer Beschreibung der Instabilität vorhandener Mikrodefekte basieren. Der Effekt der Mikrorissbildung durch den Bruch spröder Partikel bei Spannungsumlagerungen aufgrund der plastischen Deformation des umgebenden duktilen Matrixmaterials wird nicht oder nur stark vereinfacht (Kroon und Faleskog [35], [63]) berücksichtigt, während der Einfluss der lokalen Spannungsmehrachsigkeit auf eine mögliche Abstumpfung der frisch gebildeten Mikrorisse (Chen et al. [29]) von keinem der betrachteten Modelle erfasst wird.

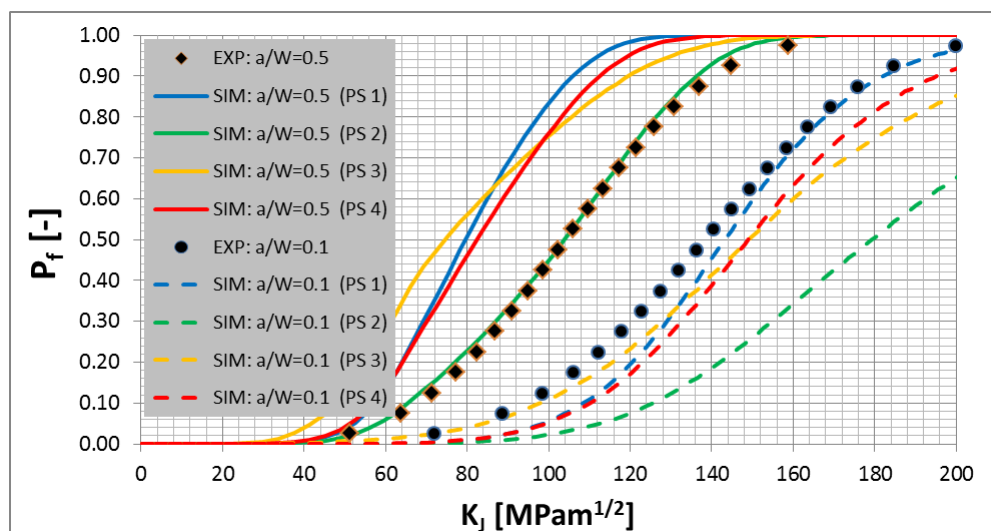


Abb. 01: Übertragbarkeitsproblematik: mit dem Beremin-Modell [18] berechnete Spaltbruchwahrscheinlichkeiten (SIM) für tief gerissene Proben ($a/W=0.5$) und Kurzrissproben ($a/W=0.1$); vier verschiedene Parametersätze; Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen (EXP)

Ein erweitertes Modell, welches neben der lokalen plastischen Deformation auch den Einfluss der lokalen Spannungsmehrachsigkeit berücksichtigt, wurde im Rahmen eines Forschungsvorhabens (Hohe et al.[49], [50]) entwickelt und validiert. Das Modell beruht

jedoch nicht auf detaillierten mikroskopischen Betrachtungen, sodass nur eine vereinfachte Beschreibung der für die Spaltbruchinitiierung relevanten Vorgänge möglich ist.

Weiterführende Untersuchungen zur Spaltbruchinitiierung, wie z.B. von Kroon und Faleskog [64], die einen Einfluss der lokalen Spannungsmehrachsigkeit auf den Rissübergang vom spröden Partikel in die umgebende duktile Matrix feststellen konnten, lieferten die Erkenntnis, dass eine genauere Betrachtung mikromechanischer Vorgänge sinnvoll ist, wenn ein verbessertes lokales Spaltbruchmodell angestrebt wird. Verschiedene Autoren führten daher mikromechanische Simulationsrechnungen unter Berücksichtigung der realen polykristallinen Mikrostruktur bainitischer Stähle durch. Mathieu et al. [83] untersuchten die Spannungsinhomogenitäten in der ferritischen Matrix bei plastischer Deformation und folgerten, dass der Einfluss der Spannungsmehrachsigkeit die Geometrieabhängigkeit der Spaltbruchwahrscheinlichkeit bei gegebener globaler Last erklären kann. Zhao et al. [125] kamen zu dem Schluss, dass die stochastische Natur des Spaltbruchs durch die inhomogene Spannungsverteilung auf Kornebene sowie die Eigenschaften der vorliegende Partikelpopulation charakterisiert werden kann. Rezaee und Berdin [98] ermittelten für die Spannungsverteilung der Karbide in einer polykristallinen Mikrostruktur eine Weibull-Verteilung.

Das Ziel der gegenwärtigen Arbeit ist daher eine weitere Aufklärung der Mikromechanismen der Spaltbruchauslösung in ferritisch-bainitischen Stählen, um auf Basis der dabei gewonnenen Erkenntnisse ein erweitertes lokales probabilistisches Spaltbruchmodell formulieren zu können. Dieses soll die Entstehung und die mögliche Instabilität potentiell Spaltbruch auslösender Mikrodefekte realitätsnah erfassen und so eine verbesserte Übertragbarkeit der anhand von Experimenten an Standard-Bruchmechanikproben ermittelten Material- bzw. Modellparameter auf Proben mit anderer Geometrie und Risstiefe oder reale Bauteile ermöglichen.

Im Rahmen dieser Arbeit werden zunächst einige für das Vorhaben relevante Grundlagen aufgezeigt, wobei ein besonderes Augenmerk auf den Grundlagen der bereits vorhandenen lokalen Spaltbruchmodelle liegt (**Kapitel 2**).

Anschließend erfolgt die Darstellung der Ergebnisse der Materialcharakterisierung des betrachteten Referenzwerkstoffs (22NiMoCr3-7) auf Basis der vorliegenden experimentellen Datenbasis. Weiterhin werden die Ergebnisse der Untersuchungen hinsichtlich des Aufbaus der Mikrostruktur dargestellt. Zur Untersuchung der Mikrostruktur werden die Verfahren der Electron Backscatter Diffraction (EBSD; Analyse der Kornstruktur) und der Rasterelektronenmikroskopie (REM; Analyse der spröden Partikel) angewendet, um auf Grundlage der so erhaltenen Ergebnisse eine stochastische Beschreibung der Kornstruktur (Form- und Größenverteilung sowie kristallographische Orientierungs- und Fehlorientierungsverteilung der Körner) und der darin enthaltenen spröden Partikel (Form-, Größen- und Orientierungsverteilung der Partikel) zu ermöglichen (**Kapitel 3**).

Die stochastischen Informationen erlauben die Generierung von Repräsentativen Volumelementen (RVE) der Mikrostruktur. Basierend auf diesen Ergebnissen werden schließlich Finite-Elemente-Mikrostrukturmodelle eingeführt, die die Durchführung von mikromechanischen Simulationsrechnungen ermöglichen. Die FE-Modelle der RVE werden dabei entsprechend der lokalen Feldgrößen am Bruchursprung, welche vorab durch numerische Simulationen verschiedener Bruchmechanikexperimente bestimmt werden müssen, belastet. So kann das Verhalten der als Spaltbruchauslöser agierenden spröden Partikel, welche mittels einer Submodelltechnik in die FE-Modelle der RVE eingebunden werden können, für verschiedene mechanische Belastungssituationen untersucht werden. Auf diese Weise erhält man die für die Formulierung eines erweiterten, mikromechanisch basierten lokalen probabilistischen Spaltbruchmodells erforderlichen Informationen bezüglich der für die Spaltbruchauslösung relevanten Parameter und deren Wechselwirkungen (**Kapitel 4**).

Darauf aufbauend erfolgt die Herleitung des erweiterten lokalen Spaltbruchmodells. Dieses berücksichtigt den Effekt der Instabilität vorhandener Mikrodefekte ähnlich der bereits früher durch die Beremin-Gruppe [18] oder durch Kroon und Faleskog [63] vorgeschlagenen Vorgehensweise mittels einer Funktion der maximalen Hauptspannung. Daneben wird zusätzlich die Bildung potentiell kritischer Mikrodefekte berücksichtigt. Dieser Vorgang wird in zwei wesentliche Phasen unterteilt. Der Bruch eines Partikels stellt die erste Phase dar. Die zweite Phase der Mikrodefektentstehung ist der Übergang des frisch entstandenen Defekts in die das spröde Partikel umgebende duktile Matrix. Der Vorteil dieser Vorgehensweise besteht darin, dass sie eine realitätsnahe bruchmechanische Bewertung direkt auf der Basis der bei der Spaltbruchauslösung ablaufenden physikalischen Vorgänge und damit losgelöst von bestimmten angenommenen Spannungs- und Deformationszuständen erlaubt und dabei inhärent der probabilistischen Natur der Spaltbruchauslösung gerecht wird (**Kapitel 5**).

Zur Validierung wird das neu entwickelte Modell auf die aus einem abgeschlossenen Forschungsvorhaben (Hohe et al. [52]) vorhandene und im Rahmen eines weiteren abgeschlossenen Vorhabens (Hohe et al. [49]) erweiterte experimentelle Datenbasis angewendet. Dabei erfolgt auch ein Vergleich mit bestehenden lokalen Spaltbruchmodellen (**Kapitel 6**).

2 Grundlagen

2.1 Grundlagen der Kontinuumsmechanik

In diesem Abschnitt sollen kurz einige kontinuumsmechanische Grundlagen zusammengestellt werden, wobei auf detaillierte Herleitungen verzichtet wird. Für weitergehende Informationen sei auf die einschlägige Fachliteratur verwiesen (z.B. Becker und Bürger [15]).

Betrachtet man einen beliebigen materiellen Körper (siehe Abb. 02), so kann ein materieller Punkt P dieses Körpers durch einen geeigneten Ortsvektor definiert werden. In der Ausgangs- oder Referenzkonfiguration Ω sei dies der Ortsvektor \mathbf{x} , in der aktuellen Konfiguration $\hat{\Omega}$ der Ortsvektor $\hat{\mathbf{x}}$. Damit lassen sich die Komponenten des Verschiebungsvektors $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ des Punktes P jeweils als Differenz $u_i = \hat{x}_i - x_i$ der entsprechenden Komponenten der beiden Ortsvektoren in der aktuellen Konfiguration und in der Ausgangskonfiguration bestimmen.

Eine analoge Betrachtung kann auch für einen benachbarten materiellen Punkt Q durchgeführt werden, welcher in der Ausgangskonfiguration durch das Linienelement $d\mathbf{x}$ mit dem Punkt P verbunden ist. Dieses Linienelement $d\mathbf{x}$ wird beim Übergang in die aktuelle Konfiguration auf das Linienelement $d\hat{\mathbf{x}}$ abgebildet. Der Ortsvektor von Q in der Ausgangskonfiguration ist somit $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$, der in der aktuellen Konfiguration $\hat{\mathbf{x}} + d\hat{\mathbf{x}}$. Für die Komponenten von $d\hat{\mathbf{x}}$ gilt dann $d\hat{x}_i = F_{ij}dx_j$ (EINSTEIN-Summationskonvention, d.h. über in einem Term doppelt auftretende Indizes wird summiert), wobei F_{ij} die Komponenten des Deformationsgradienten \mathbf{F} bezeichnet. Dieser stellt eine wichtige Größe bei der Beschreibung von Deformationsvorgängen dar. Die Komponenten des Deformationsgradienten sind in kartesischen Koordinaten durch $F_{ij} = u_{i,j} + \delta_{ij}$ definiert. Dabei bezeichnet $y_{,i}$ die partielle Ableitung einer Größe y nach x_i und das KRONECKER-Symbol δ_{ij} die Komponenten des Einheitstensors \mathbf{I} . Die Größe $u_{i,j}$ stellt die Komponenten des Verschiebungsgradienten dar (Ableitungen der Verschiebungen nach den materiellen Koordinaten).

Die polare Zerlegung des Deformationsgradienten liefert $\mathbf{F}=\mathbf{R}\mathbf{U}=\mathbf{V}\mathbf{R}$, wobei der Rotationsensor \mathbf{R} eine Drehung des Linienelements bei konstanter Länge beschreibt, während der rechte Strecktensor \mathbf{U} eine Streckung vor der Drehung und der linke Strecktensor \mathbf{V} eine Streckung nach der Drehung beschreibt. Der Deformationsgradient erfasst keine Starrkörpertranslation, eine verzerrungsfreie Rotation jedoch schon. Daher ist der Deformationsgradient als Maß für die Deformation eines materiellen Körpers nur bedingt geeignet. Auf Basis des Deformationsgradienten können jedoch verschiedene Verzerrungsmaße gebildet werden, z.B. der GREEN-LAGRANGESche Verzerrungstensor $\mathbf{E}=0.5(\mathbf{F}^T\mathbf{F}-\mathbf{I})=0.5(u_{i,j}+u_{j,i}+u_{k,i}u_{k,j})$. Bei kleinen Verschiebungen kann der letzte Term vernachlässigt werden, und man erhält den infinitesimalen Verzerrungstensor $\mathbf{e}=0.5(u_{i,j}+u_{j,i})$.

Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete Verzerrungsmaß ist der auf dem Rechts-Cauchy-Green-Tensor $\mathbf{C}=\mathbf{U}^2=\mathbf{F}^T\mathbf{F}$ basierende logarithmischen Dehnungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}$. Eine Transformation von \mathbf{C} auf die Hauptachsen liefert die Hauptwerte λ_i^2 , aus denen die Hauptwerte $\varepsilon_i = \ln(\lambda_i)$ und durch Rücktransformation in das Ausgangssystem die Komponenten ε_{ij} des logarithmischen Dehnungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}$ bestimmt werden können.

Die Komponenten t_i des Spannungsvektors auf der Oberfläche $\partial\widehat{\Omega}$ des betrachteten materiellen Körpers in der aktuellen Konfiguration $\widehat{\Omega}$ ergeben sich mit der als CAUCHY-Spannungsformel bezeichneten Abbildung $t_i = \sigma_{ij}\hat{n}_j$ aus den Komponenten \hat{n}_j des nach außen gerichteten Normaleneinheitsvektors auf $\partial\widehat{\Omega}$. Die Größen σ_{ij} sind dabei die Komponenten des auf die aktuelle Konfiguration bezogenen CAUCHY-Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$. Aufgrund des Momentengleichgewichts ist der CAUCHY-Spannungstensor symmetrisch. Eine Transformation von $\boldsymbol{\sigma}$ auf die Hauptachsen liefert die Hauptwerte σ_i mit $i = I, II, III$, wobei σ_I die maximale Hauptspannung darstellt. Für die hydrostatische Spannung gilt $\sigma_h = (\sigma_I + \sigma_{II} + \sigma_{III})/3$.

Für linear-elastisches Material gilt das HOOKEsche Gesetz $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}:\boldsymbol{\varepsilon}$ bzw. $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$. Der Elastizitätstensor \mathbf{C} (Tensor 4. Stufe) beschreibt dabei durch seine Komponenten die elastischen Eigenschaften des Materials.

Bei elastisch-plastischem Materialverhalten setzt sich die Gesamtdeformation des Materials aus einem elastischen reversiblen und einem plastischen irreversiblen Anteil zusammen, d.h. für den im Rahmen dieser Arbeit verwendeten logarithmischen Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ gilt dann näherungsweise $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ges}} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}}$ für $\varepsilon_{ij}^{\text{el}} \ll 1$ (ABAQUS [1]).

In diesem Zusammenhang von Bedeutung ist die plastische Vergleichsdehnung

$$\varepsilon_e^{\text{pl}} = \int_0^t \sqrt{2/3 \cdot \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{pl}} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{pl}}} dt.$$

Für plastisches Fließen muss ein Spannungszustand vorliegen, der eine Fließbedingung $F(\boldsymbol{\sigma})=0$ erfüllt. Diese Fließbedingung lässt sich als Fließfläche im Spannungsraum deuten. Ein Spannungszustand auf der Fließfläche ermöglicht einen Zuwachs an plastischer Deformation. Lage und Form der Fließfläche können sich im Laufe der Deformationsgeschichte (bei plastischer Deformation) verändern (selbstähnliche Aufblähung bei isotroper Verfestigung, Translation bei kinematischer Verfestigung). Im Rahmen der Beschreibung plastischen Materialverhaltens ist die sogenannte Mises-Vergleichsspannung $\sigma_e = \sqrt{1/2 \cdot ((\sigma_I - \sigma_{II})^2 + (\sigma_{II} - \sigma_{III})^2 + (\sigma_{III} - \sigma_I)^2)}$ von großer Bedeutung.

Die Mises-Fließbedingung lautet $\sigma_e - \sigma_y(\varepsilon_e^{\text{pl}}) = 0$, mit der aktuellen Fließspannung $\sigma_y(\varepsilon_e^{\text{pl}})$ und der Anfangsfließspannung $\sigma_y(\varepsilon_e^{\text{pl}} = 0) = \sigma_0$. Die Fließspannung in realen Werkstoffen steigt zumeist mit zunehmender plastischer Deformation an (Verfestigung). Oft kann auch ein Anstieg der Fließgrenze bei Erhöhung der Deformationsgeschwindigkeit beobachtet werden.

2.1.1

Randwertproblem und Prinzip der virtuellen Arbeit

Das allgemeine mechanische Anfangs- und Randwertproblem unter isothermen Bedingungen ist wie folgt aufgebaut: Gegeben ist ein Körper Ω in der Referenzkonfiguration (siehe Abb. 02). Der Körper wird durch einen Rand $\partial\Omega$ mit $\partial\Omega = \partial\Omega'' \cup \partial\Omega'$ begrenzt, wobei entlang des Teilrandes $\partial\Omega''$ die Verschiebungen u_i und entlang des Teilrandes $\partial\Omega'$ die Komponenten t_i des Spannungsvektors vorgegeben sind. Weiterhin wird der Körper Ω durch verteilt in seinem Inneren wirkende Volumenkräfte f_i belastet. Die Position aller materiellen Punkte in der Referenzkonfiguration zur Referenzzeit ist definitionsgemäß bekannt. Unter Wirkung der Belastungen wird der Körper Ω deformiert. Die gesuchten Größen sind die entstehenden Verschiebungen des Körpers sowie seine Deformationen und die resultierenden Spannungen.

Dabei existieren zwei Gruppen von mechanischen Feldgrößen. Die Verschiebungen u_i und die Verzerrungen des Körpers stellen als kinematische Größen die erste Gruppe von Feldgrößen dar. Als Verzerrungsmaß kann entweder der infinitesimale Dehnungs-

tensor oder aber ein entsprechendes nichtlineares Dehnungsmaß wie der GREEN-LAGRANGEsche Dehnungstensor verwendet werden. Die Verschiebungen und Verzerungen sind durch sechs kinematische Gleichungen verknüpft. Die Volumenkräfte ρf_i und die Spannungen bilden die zweite Gruppe der mechanischen Feldgrößen und werden als Kraftgrößen bezeichnet. Die Spannungen können durch den symmetrischen CAUCHY-Spannungstensor oder eine entsprechendes geometrisch nichtlineares Spannungsmaß definiert werden. Volumenkräfte und Spannungen sind dabei durch drei Gleichgewichtsbedingungen verknüpft, welche u.U. auch von den Beschleunigungen \ddot{u}_i abhängen können (Bewegungsgleichungen). Die kinematischen Größen und die Kraftgrößen werden durch das Materialgesetz verknüpft.

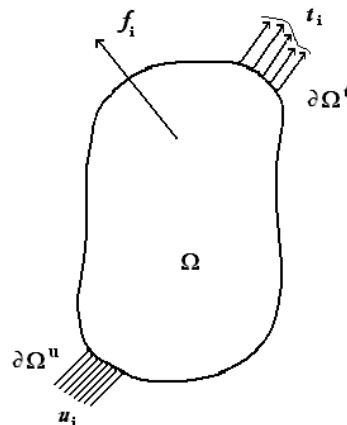


Abb. 02: Randwertproblem des deformierbaren Körpers

Zur Lösung des betrachteten mathematischen Problems steht demnach mit den kinematischen Beziehungen, den Bewegungsgleichungen bzw. den Gleichgewichtsbedingungen sowie dem gewählten Materialgesetz ein vollständiges Differentialgleichungssystem zur Verfügung, welches unter Berücksichtigung der zugehörigen Randbedingungen auf $\partial\Omega^u$ und $\partial\Omega^t$ und ggf. der Geschwindigkeiten \dot{u}_i zur Referenzzeit als zusätzliche Anfangsbedingungen die Bestimmung der mechanischen Feldgrößen in der aktuellen Konfiguration ermöglicht. In diesem Zusammenhang werden angenommene oder reale Verschiebungs- und Deformationsfelder, welche die kinematischen Beziehungen und die Verschiebungsrandbedingungen erfüllen, als kinematisch zulässig bezeichnet. Entsprechend werden Spannungsfelder, welche die Gleichgewichtsbedingungen erfüllen, als statisch zulässig bezeichnet.

Eine analytische Lösung des so definierten mathematischen Problems gelingt nur in Ausnahmefällen, wobei oftmals stark vereinfachende Annahmen getroffen werden müssen. Daher werden üblicherweise numerische Näherungsverfahren verwendet. Diese numerischen Näherungsverfahren basieren zumeist auf Variationsformulierungen, wie z.B. dem Prinzip der virtuellen Arbeit. Zur Herleitung dieses Variationsatzes werden zunächst die Bewegungsgleichungen skalar mit einer vektorwertigen Testfunktion δu_i multipliziert, anschließend wird über das Volumen des betrachteten Körpers integriert. Auf diese Weise erhält man die schwache Form der Bewegungsgleichungen:

$$\int_{\Omega} (\sigma_{ij,j} + \rho f_i) \delta u_i dV = \int_{\Omega} \rho \ddot{u}_i \delta u_i dV \quad (1)$$

bzw. die schwache Form des Gleichgewichts

$$\int_{\Omega} (\sigma_{ij,j} + \rho f_i) \delta u_i dV = 0 \quad (2)$$

bei denen die Erfüllung der jeweiligen Zusammenhänge nicht punktweise exakt, sondern nur im integralen Mittel über den gesamten Körper gefordert wird. Als Anforderung an die Testfunktion gilt, dass diese entlang des Teilrandes $\partial\Omega''$ verschwinden muss. Unter Verwendung der CAUCHY-Spannungsformel und des GREENSchen Satzes liefert Gleichung (1)

$$\int_{\Omega} \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV + \int_{\Omega} \rho \ddot{u}_i \delta u_i dV = \int_{\Omega} \rho f_i \delta u_i dV + \int_{\partial\Omega^t} t_i \delta u_i dA \quad (3)$$

bzw.

$$\int_{t_0}^{t_1} (\delta W^i + \delta T - \delta W^a) dt = 0 \quad (4)$$

Stellt die Testfunktion δu_i eine virtuelle Verschiebung des Körpers aus seiner momentanen, die Bewegungsgleichungen oder die Gleichgewichtsbedingungen erfüllenden Lage dar, so ist δW^i die aus der Änderung $\delta U = \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon}$ der Verzerrungsenergie dichte resultierende Änderung der inneren Energie. Für die Verzerrungsenergie dichte gilt

$$U = \int_0^{\varepsilon_{kl}} \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \quad (5)$$

δW^a ist die Arbeit der (hier als Totlasten angenommenen) äußeren Kräfte und δT die Änderung der kinetischen Energie bei dieser Auslenkung. Dieser Zusammenhang wird auch als HAMILTON-Variationsprinzip bezeichnet. Es besagt, dass sich ein Körper unter Einwirkung der externen Lasten f_i und t_i genau dann im Gleichgewicht oder einer die Bewegungsgleichungen erfüllenden Lage befindet, wenn bei einer virtuellen Auslenkung des Körpers aus dieser Lage Gleichung (4) erfüllt ist. Weiterhin kann gefolgert werden, dass von allen kinematisch zulässigen Deformations- und Verschiebungsfeldern diejenigen Felder die realen sind, bei denen die geleistete Gesamtarbeit einen Stationärwert erreicht. So wird bei elastischem Materialverhalten die im Körper gespeicherte Verzerrungsenergie minimal. Diese Aussage wird auch als das Prinzip vom Minimum der Verzerrungsenergie bezeichnet. Das HAMILTON-Variationsprinzip hat eine große Bedeutung im Hinblick auf die Lösung mechanischer Randwertprobleme.

2.1.2 Finite-Elemente-Methode

Das in Kapitel 2.1.1 beschriebene Prinzip der virtuellen Arbeit bildet die Basis für verschiedene numerische Verfahren, wie die Methode der Finiten Elemente, welche sich als universell einsetzbares numerisches Berechnungsverfahren zur Lösung elastisch-plastischer mechanischer Randwertprobleme weitgehend durchgesetzt hat. Das grundsätzliche Vorgehen im Rahmen der Methode der finiten Elemente soll nun kurz für den quasi-statischen Fall dargestellt werden. Hinsichtlich der Details sowie der umfangreichen Erweiterungen sei auf die einschlägige Fachliteratur verwiesen (Bathe [14], Wriggers [122], ABAQUS [1]).

Die Grundidee dieses Verfahrens ist die Aufteilung bzw. Diskretisierung des Integrationsbereichs Ω in Gleichung (3) in n_e Elemente finiter Größe,

$$\Omega \approx \tilde{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega_e \quad \text{und} \quad \partial\Omega \approx \partial\tilde{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \partial\Omega_e \quad (6)$$

so dass sich die Integrale über das Gesamtgebiet jeweils als Summe der Integrale über die einzelnen Elemente Ω_e ergeben:

$$\int_{\Omega} (...) dV \approx \sum_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega^e} (...) dV \quad \text{und} \quad \int_{\partial\Omega} (...) dA \approx \sum_{e=1}^{n_e} \int_{\partial\Omega^e} (...) dA \quad (7)$$

Zusätzlich wird für die Geometrie und das Verschiebungsfeld $\tilde{\mathbf{u}}$ ein kinematisch zulässiger, stückweise definierter Ansatz gemacht, bei dem das Verschiebungsfeld innerhalb jedes Elements aus den (unbekannten) Verschiebungen an einer Anzahl n_{ek} diskreter Punkte, den Elementknoten (üblicherweise die Eckpunkte und ggf. auch die Kantenmittelpunkte des Elements), in geeigneter Weise interpoliert wird:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \sum_{i=1}^{n_{ek}} N_i(\xi, \eta) \mathbf{v}_i \quad (8)$$

mit der Formfunktion $N_i(\xi, \eta)$ im lokalen ξ - η -(Element-)Koordinatensystem und den Verschiebungen \mathbf{v}_i der n_{ek} Knoten je Element.

Im Rahmen des sogenannten isoparametrischen Konzepts werden Geometrie und Verschiebungsfeld durch gleiche Ansätze bzw. Formfunktionen $N_i(\xi, \eta)$ interpoliert. Dabei haben die Formfunktionen die Eigenschaft, dass sie am jeweils zugehörigen Knoten den Wert eins annehmen und den Wert null an allen anderen Knoten.

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird im Folgenden der zweidimensionale Fall betrachtet.

Zur Berechnung der Verzerrungen werden Ableitungen des Verschiebungsfeldes im globalen x - y -Koordinatensystem benötigt. Dabei gilt der Zusammenhang

$$\begin{bmatrix} N_{i,x} \\ N_{i,y} \end{bmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \begin{bmatrix} N_{i,\xi} \\ N_{i,\eta} \end{bmatrix} = \frac{1}{\det \mathbf{J}} \begin{bmatrix} y_{,\eta} & -y_{,\xi} \\ -x_{,\eta} & x_{,\xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_{i,\xi} \\ N_{i,\eta} \end{bmatrix} \quad (9)$$

mit der Jacobimatrix \mathbf{J} .

Setzt man die Verschiebungsapproximation aus Gleichung (8) in die kinematischen Beziehungen ein, so folgt

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \sum_{i=1}^{n_{ek}} \begin{bmatrix} N_{i,x} & 0 \\ 0 & N_{i,y} \\ N_{i,y} & N_{i,x} \end{bmatrix} \mathbf{v}_i = \sum_{i=1}^{n_{ek}} \mathbf{B}_i \mathbf{v}_i \quad (10)$$

Für ein virtuelles Verschiebungsfeld gilt dann

$$\delta \tilde{\mathbf{u}} = \sum_{i=1}^{n_{ek}} N_i \delta \mathbf{v}_i \quad \text{und} \quad \delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \sum_{i=1}^{n_{ek}} \mathbf{B}_i \delta \mathbf{v}_i \quad (11)$$

mit den virtuellen Knotenverschiebungen $\delta \mathbf{v}_i$.

Das Einsetzen der virtuellen Verschiebungen sowie der virtuellen Verzerrungen aus Gleichung (11) in das Prinzip der virtuellen Arbeit in inkrementeller Form und die anschließende Anwendung der Assemblierung über alle Elemente gemäß Gleichung (6) liefert

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \delta \mathbf{v}_e^T \left\{ \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \Delta \boldsymbol{\sigma} dA - \int_{\Omega_e} \mathbf{N}^T \Delta \mathbf{f}^* dA - \int_{\partial \Omega_e} \mathbf{N}^T \Delta \mathbf{t}^* ds \right\} = 0 \quad (12)$$

Die Gruppierung der Matrizen \mathbf{B}_i in \mathbf{B} , der Knotenverschiebungen \mathbf{v}_i in \mathbf{v}_e und der Formfunktionen \mathcal{N}_i in \mathbf{N} ermöglicht dabei eine kompaktere Darstellung der Summation über die Knoten.

Damit Gleichung (12) für beliebige Variationen $\delta \mathbf{v}_e$ gilt, muss der Ausdruck in den geschweiften Klammern verschwinden. Die letzten beiden Integrale in Gleichung (12) können berechnet werden, da die Änderung $\Delta \mathbf{t}_i^*$ des Spannungsvektors sowie die Änderung der Volumenkräfte $\Delta \mathbf{f}_i^*$ als vorgegebene Belastungen und die Formfunktion \mathbf{N} aufgrund der gewählten Interpolation des diskretisierten Verschiebungsfeldes bekannt sind. So erhält man mit

$$\Delta \mathbf{T}_e = \int_{\partial \Omega_e} \mathbf{N}^T \Delta \mathbf{t}^* ds \quad (13)$$

und

$$\Delta \mathbf{F}_e = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}^T \Delta \mathbf{f}^* dA \quad (14)$$

die Änderungen der diskreten Knotenkräfte, die zu den Änderungen $\Delta \mathbf{t}_i^*$ und $\Delta \mathbf{f}_i^*$ der kontinuierlich verteilten äußeren Lasten, welche am betrachteten Element angreifen, äquivalent sind. Einsetzen der Gleichungen (13) und (14) in

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \left\{ \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \Delta \boldsymbol{\sigma} dA - \Delta \mathbf{F}_e - \Delta \mathbf{T}_e \right\} = 0 \quad (15)$$

liefert zusammen mit Gleichung (16) ein vollständiges Gleichungssystem zur Bestimmung des diskretisierten Verschiebungsfeldes. Zur Auswertung des Gleichungssystems ist die Berechnung der Spannungsinkremente $\Delta \boldsymbol{\sigma}$ erforderlich. Diese müssen über das Materialgesetz bestimmt werden.

Im einfachsten Fall eines linear-elastischen Materialgesetzes (HOOKEsches Gesetz) gilt dann mit der Elastizitätsmatrix \mathbf{E}

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E} \mathbf{B} \Delta \mathbf{v}_e \quad (16)$$

und man erhält ein lineares Gleichungssystem für die unbekanntenen Knotenverschiebungen. Im allgemeinen Fall (z.B. elastisch-plastisches Materialgesetz) besteht jedoch kein linearer Zusammenhang zwischen den Spannungsinkrementen und den Knotenverschiebungsinkrementen, so dass ein nichtlineares Gleichungssystem resultiert, welches Integrale enthält. Dieses Gleichungssystem kann in ein algebraisches Gleichungssystem überführt werden, wenn die Integration numerisch mittels Integrationsformeln, z. B. nach Gauss, im ξ - η -System auf dem Einheits-element durchgeführt wird. Die Lösung des nichtlinearen algebraischen Gleichungssystems erfolgt üblicherweise iterativ unter Verwendung des NEWTON-Verfahrens oder eines verwandten Verfahrens. Gegebenenfalls (z.B. zur Analyse plastischer Deformationsvorgänge) wird dieser Vorgang in eine Anzahl von Zeitinkrementen unterteilt. Details bezüglich der Vorgehensweise beim NEWTON-Verfahren findet man in einschlägigen Lehrbüchern zur numerischen Mathematik (z.B. Törnig und Spellucci [116]). Im Rahmen der Berechnung der Knotenver-

schiebungsinkremente muss der mit einem (vorgegebenen, nach den Vorschriften des NEWTON-Verfahrens berechneten) Näherungswert für die Knotenverschiebungsinkremente konsistente Wert für die Zunahme der Spannungen bestimmt werden. Im Falle elastisch-plastischer Materialgesetze geschieht dies durch eine Zeitintegration des jeweiligen plastischen Stoffgesetzes. Für Details zu diesem Verfahren sei auf die zu Beginn des Kapitels genannte Fachliteratur verwiesen.

2.2 Grundlagen der Bruchmechanik

Die Bewertung der Einsatzfähigkeit rissbehafteter Bauteile erfordert die Anwendung der Methoden der Bruchmechanik. Dabei umfasst die klassische Bruchmechanik in ihrer Anwendung drei wesentliche Aufgabengebiete (Blumenauer und Pusch [22]). Das erste Aufgabengebiet, die Charakterisierung der Beanspruchung, beinhaltet eine rechnerische oder experimentelle Ermittlung der vorliegenden Beanspruchungen in Form von Spannungen und Dehnungen. Das zweite Aufgabengebiet, die Charakterisierung der Beanspruchbarkeit, befasst sich mit der experimentellen Bestimmung von entsprechenden Werkstoffkennwerten (abhängig vom Werkstoffverhalten und den Beanspruchungsbedingungen). In diesem Zusammenhang ist besonders die Übertragbarkeit der zumeist an Laborproben ermittelten Kennwerte auf reale Bauteile von Interesse. Das dritte Aufgabengebiet, die Sicherheitsabschätzung, bildet den Abschluss einer bruchmechanischen Bewertung. Auf Basis einer Gegenüberstellung von vorliegender Beanspruchung und Beanspruchbarkeit können quantitative Aussagen bezüglich der Bruchsicherheit abgeleitet werden. Um mögliche Ungenauigkeiten hinsichtlich der ermittelten Beanspruchung sowie der Werkstoffbeanspruchbarkeit zu berücksichtigen, werden üblicherweise Sicherheitsfaktoren eingeführt, die den Werkstoffkennwert entsprechend reduzieren.

2.2.1 Stadien des Bruchvorgangs und Bruchmechanismen

Der Bruch eines metallischen Festkörpers erfolgt durch Zerstörung der atomaren Bindungen und die damit verbundene Schaffung freier Oberflächen. Daraus folgt letztendlich die makroskopische Werkstofftrennung, die zum Verlust der Tragfähigkeit führt. Abhängig von der Art der mechanischen Beanspruchung kann zwischen Gewaltbrüchen (aufgrund einmaliger statischer oder dynamischer Belastung) und Schwingungsbrüchen (aufgrund mehrfacher, zyklischer Belastung) unterschieden werden. Im Rahmen dieser Arbeit liegt der Fokus auf Gewaltbrüchen. Der Bruchvorgang kann dabei in verschiedene Stadien unterteilt werden (Blumenauer und Pusch [22]):

- Rissbildung (atomare, mikroskopische oder makroskopische Größenordnung)
- Risseinleitung bzw. Rissinitiierung (Übergang von einem stehenden in einen wachsenden Riss, keine Aussage über stabil/instabil)
- Risswachstum bzw. Rissausbreitung (unabhängig vom wirkenden Mechanismus)
 - stabil (Belastungszunahme erforderlich)
 - instabil (ohne weitere Belastungszunahme, Auftreten auch nach stabilem Risswachstum möglich)
- ggf. Rissarretierung (Stopp eines mit hoher Geschwindigkeit wachsenden Risses)

Hinsichtlich der Identifikation möglicher Bruchmechanismen ist eine Unterscheidung zwischen makroskopischen und mikroskopischen Bruchmerkmalen erforderlich (Roos et

al. [103], Blumenauer und Pusch [22]). Das makroskopische Bruchmerkmal der (globalen) plastischen Verformung des rissbehafteten Körpers zum Zeitpunkt des Versagens erlaubt eine Einteilung in Sprödbbruch (geringe Verformung) und Zähbruch (große Verformung). Beide makroskopischen Bruchformen können sowohl im Zusammenhang mit den mikroskopischen Bruchmerkmalen des Spaltbruchs als auch mit denen des Wabenbruchs oder einer Mischung dieser mikroskopischen Bruchformen auftreten. Beim Wabenbruch wird die Materialtrennung durch Entstehung, Wachstum und Zusammenwachsen von Poren verursacht, was zu der namensgebenden wabenartigen Struktur der Bruchfläche führt. Demgegenüber erfolgt die Materialtrennung beim Spaltbruch durch die Überwindung der atomaren Kohäsionsfestigkeit. Aufgrund der Zielsetzung dieser Arbeit werden nachfolgend lediglich die Vorgänge beim Spaltbruch näher betrachtet.

Die, in der Regel instabile, Rissausbreitung während des Spaltbruchs polykristalliner Materialien erfolgt entweder entlang der Korngrenzen (interkristallin) oder entlang bestimmter kristallographischer Ebenen (transkristallin). Die interkristalline Rissausbreitung kann bei Vorliegen geschwächter Korngrenzen auftreten (Lemaitre et al. [71]). Der transkristalline Spaltbruch breitet sich bevorzugt entlang bestimmter kristallographischer Ebenen aus (geringe effektive Oberflächenenergie). Für ferritische Stähle mit ihrem kubisch-raumzentriertem (*krz*) Kristallsystem sind dies die $\{1\ 0\ 0\}$ -Ebenen (Anderson [8], siehe Abb. 03 (b)). Dies bedeutet auch, dass ein sich transkristallin ausbreitender Riss an einer Korngrenze ggf. die Richtung ändert, um weiterhin einer günstigen kristallographischen Ebene folgen zu können (siehe Abb. 03 (a)). Aus makroskopischer Sicht ist die Bruchfläche zumeist senkrecht zur Wirkungsrichtung der maximalen Hauptspannung orientiert. Das typische fraktographische Erscheinungsbild des transkristallinen Spaltbruchs ist in Abb. 04 dargestellt. Aufgrund der bevorzugten Ausbreitung entlang kristallographischer Ebenen entstehen bei polykristallinen Werkstoffen linienförmige Strukturen („river patterns“) auf einer makroskopisch ebenen Bruchfläche. Dies liegt darin begründet, dass beim Übergang in ein neues Korn zunächst eine Aufteilung des Spaltbruchs in mehrere parallele Spaltebenen erfolgt, welche aus energetischen Gründen im Laufe der weiteren Ausbreitung eine Neigung zur Vereinigung aufweisen (Anderson [8]).

Das Versagen durch Spaltbruch kann als mehrstufiger Prozess betrachtet werden, bei dem der sich ausbreitende Riss einige Barrieren überwinden muss, bevor eine instabile Rissausbreitung erfolgt (Hertzberg [47]). Die Bildung eines Mikrodefekts bzw. Mikrorisses stellt die erste Phase des Spaltbruchs dar.

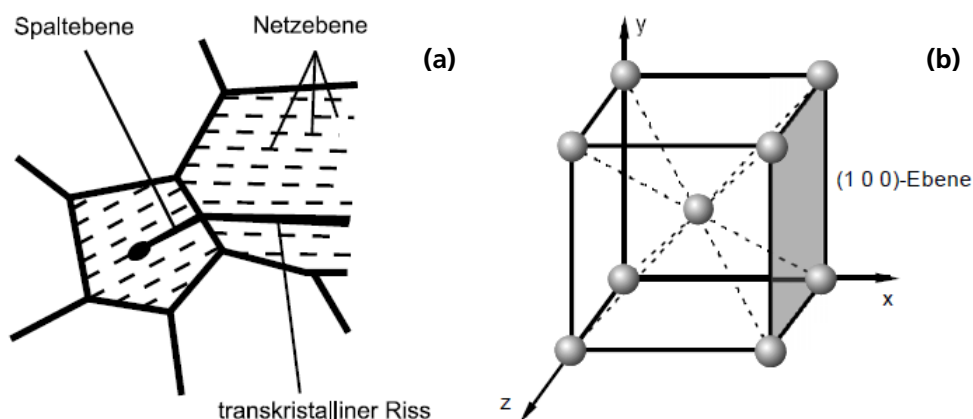
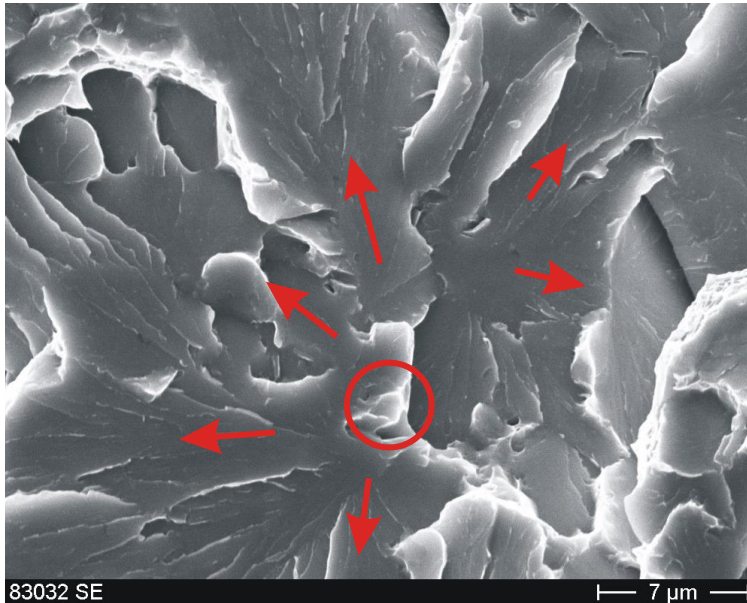


Abb. 03: Transkristalliner Spaltbruch entlang energetisch günstiger kristallographischer Ebenen (Quelle: Seebich [107]):
(a) Richtungsänderung an einer Korngrenze
(b) Lage der bevorzugten Spaltebenen im *krz*-Kristallsystem

Abb. 04: REM-Aufnahme einer transkristallinen Spaltbruchfläche (Werkstoff 22NiMoCr3-7)



Ein Mikroriss entsteht in ferritisch-bainitischen Stählen typischerweise durch Versetzungsaufstauung an einer Korngrenze oder aber durch den Bruch von spröden Zweitphasenteilchen bzw. Partikeln (Karbid, Oxide usw.) (Knott [62], McMahon und Cohen [85]). Der Übergang des sich dynamisch ausbreitenden Risses vom spröden Partikel in die umgebende duktile ferritische Matrix stellt die erste Barriere dar. Sind die Voraussetzungen für eine weitere Rissausbreitung nicht gegeben, so arretiert der Mikroriss im Grenzbereich von Partikel und Matrix. Kann sich der Riss jedoch weiter dynamisch ausbreiten, so stellt die erste Korngrenze die nächste Barriere dar, die ein Arretieren des Risses bewirken kann. Wird auch diese Barriere überwunden, bedeutet dies in der Regel eine ungehinderte instabile Ausbreitung des Risses. Lediglich eine makroskopisch inhomogene Spannungsverteilung oder aber inhomogene Materialeigenschaften (temperaturbedingt oder gefügebedingt) können in diesem Fall einen Rissarrest verursachen (Roos et al. [104]).

Der Spaltbruch wird durch Spannungszustände mit hoher Mehrachsigkeit begünstigt, da in solchen Fällen der Abbau von Spannungsspitzen durch plastische Verformung nur beschränkt möglich ist. Auch tiefe Temperaturen begünstigen für Werkstoffe mit kubisch raumzentrierter Kristallstruktur u.a. aufgrund der dann geringeren Anzahl aktiver Gleitsysteme das Auftreten des Spaltbruchs (Anderson [8]). Dieser Einfluss der Temperatur auf das Bruchverhalten ferritisch-bainitischer Stähle führt dazu, dass drei charakteristische Versagensbereiche definiert werden können. Die Tieflage der Bruchzähigkeit wird durch makroskopischen Sprödbbruch und geringe plastische Verformungen im Bereich der Rissfront gekennzeichnet. Hinsichtlich des mikroskopischen Bruchmechanismus liegt nahezu reiner instabiler Spaltbruch vor. Wird die Temperatur erhöht, so gelangt man in das sogenannte Übergangsgebiet. Hier tritt eine erkennbare makroskopische plastische Verformung auf. Der rissbehaftete Körper versagt nach vorhergehendem duktilem (stabilen) Risswachstum durch (instabilen) Spaltbruch. Abb. 05 zeigt eine typische Bruchfläche nach Versagen im Übergangsgebiet. Erhöht man die Temperatur weiter, so wird die Hochlage der Bruchzähigkeit erreicht. Dieser Versagensbereich ist gekennzeichnet durch eine massive makroskopische plastische Verformung sowie reinen Wabenbruch auf mikroskopischer Ebene.

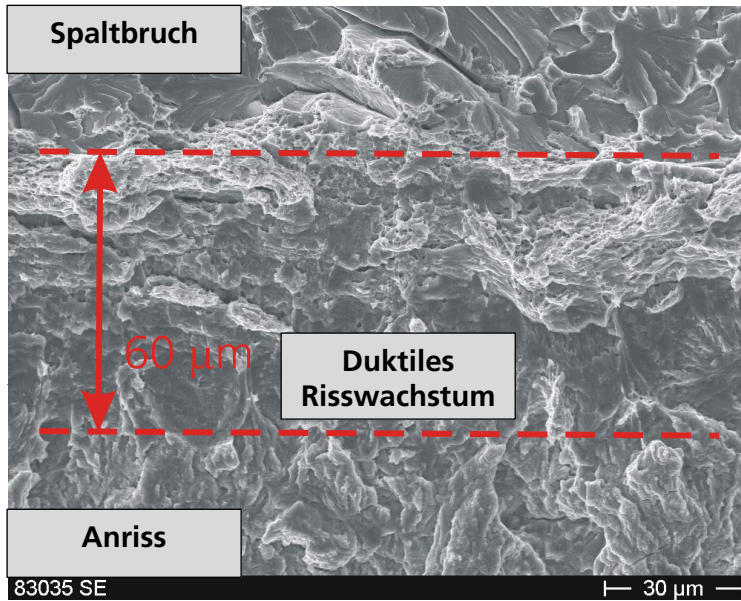


Abb. 05: REM-Aufnahme einer typischen Bruchfläche nach Versagen im Übergangsbereich (Werkstoff 22NiMoCr3-7)

2.2.2 Grundlegende bruchmechanische Konzepte

Bruchmechanische Konzepte stellen einen Zusammenhang zwischen der äußeren Belastung eines rissbehafteten Körpers und der lokalen Beanspruchung der Risspitze bzw. Rissfront her (siehe Abb. 06). An der im kontinuumsmechanischen Modell als scharf angenommenen Rissfront treffen die beiden bei vielen Problemstellungen unbelasteten Rissflanken zusammen. Im Hinblick auf die Deformation eines Risses werden drei grundlegende Rissöffnungsarten unterschieden. Für den Modus I erfolgt die Rissöffnung senkrecht zur x_1 - x_3 -Ebene (Rissebene), während die Rissöffnung bei Rissöffnungsmodus II durch eine Relativverschiebung der Rissflanken in der x_1 - x_3 -Ebene normal zur Rissfront verursacht wird. Bei Modus III werden die Rissflanken in der x_1 - x_3 -Ebene tangential zur Rissfront verschoben. Dem Modus I - Problem kommt eine übergeordnete Bedeutung zu, da dieser Modus für die meisten Werkstoffe aufgrund der relevanten Bruchmechanismen der kritischste ist. Weiterhin zeigen laufende Risse unter gemischter Beanspruchung zumeist die Tendenz, sich so auszubreiten, dass nach einem geringen Risswachstum nur noch eine Modus I - Beanspruchung vorliegt.

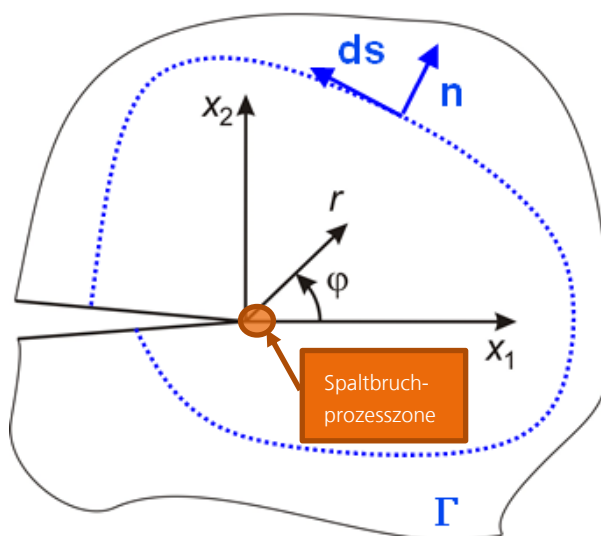


Abb. 06: Umgebung der Risspitze eines rissbehafteten Körpers

In der unmittelbaren Umgebung der Risspitze, der im Vergleich zum gesamten Körper vernachlässigbar kleinen Prozesszone (Abb. 06) findet auf atomarer Ebene der Prozess der Bindungslösung statt, welcher mit den Methoden der Kontinuumsmechanik nicht beschrieben werden kann. Der in der Bruchmechanik bereitgestellte Zugang besteht darin, die Feldgrößen in dem die Prozesszone umgebenden Gebiet zu beschreiben, von welchen angenommen wird, dass diese die Vorgänge innerhalb der Prozesszone kontrollieren. Die nachfolgend vorgestellten Konzepte stellen einen Ausschnitt aus einer ganzen Reihe von Konzepten dar, hinsichtlich einer umfassenden Darstellung sei auf die einschlägige Fachliteratur, zum Beispiel Gross und Seelig [41], verwiesen.

Im Rahmen der Bruchmechanik kommt den asymptotischen Rissspitzenfeldern eine große Bedeutung zu. Das zur Herleitung dieser Rissspitzenfelder betrachtete Grundproblem ist ein Riss unter ebener Belastung (EVZ, ESZ). Die Lösung dieses Problems beinhaltet die Forderungen nach Gleichgewicht und Kompatibilität (Verwendung linearer Verschiebungs-Verzerrungs-Beziehungen) und kann unter Verwendung einer AIRY-SCHEN Spannungsfunktion

$$\sigma_{rr} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r}, \quad \sigma_{\varphi\varphi} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2}, \quad \sigma_{r\varphi} = -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \right) \quad (17)$$

sowie eines separablen Reihenansatzes

$$\Psi(r, \varphi) = \sum_{\beta} A_{\beta} r^{s_{\beta}} f_{\beta}(\varphi) \quad \text{mit } \beta = 1, 2, 3, \dots \quad (18)$$

erfolgen, wobei das linear-elastische HOOKEsche-Gesetz verwendet wird.

Weiterhin wurde durch Rice [101] ein Erhaltungsintegral zur Bewertung von Rissen vorgeschlagen. Dieses hat die Form

$$J = \int_{\Gamma} \left(W_{\varepsilon} dx_2 - \sigma_{ij} n_i \frac{\partial u_j}{\partial x_1} ds \right) \quad (19)$$

mit der Verzerrungsenergiedichte W_{ε} . Das J -Integral ist ein Wegintegral entlang eines Weges Γ um die Risspitze (siehe Abb. 06). In (linear oder nichtlinear) elastischem Material ist J unabhängig vom gewählten Weg. Für ein durch ein Potenzgesetz beschreibbares Material kann das J -Integral auf Basis der äußeren Belastung und dimensionsloser geometrieabhängiger Faktoren berechnet werden (z.B. Kumar, German, Shih [67]). Ansonsten erfolgt die Berechnung zumeist auf numerischem Weg.

Wenn die eingeschlossene Fläche keine Singularität bzw. keinen Defekt enthält, liefert das Integral den Wert Null. Liegt jedoch zum Beispiel ein Riss vor, dann ist J im Allgemeinen von Null verschieden und charakterisiert den Deformationszustand an der Risspitze. Zudem hat J für elastisches Materialverhalten die physikalische Bedeutung einer Energiefreisetzungsrates bei Rissfortschritt.

Unter Verwendung der Gleichungen (17) und (18) kann im Bereich der linear-elastischen Bruchmechanik (LEBM) das asymptotische Rissspitzenfeld berechnet werden. Dabei ergibt sich für $r \rightarrow 0$ eine Dominanz des ersten (singulären) Terms, welcher folgende Form hat

$$\sigma_{ij}(r, \varphi) = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi}} r^{-\frac{1}{2}} f_{ij}(\varphi) \quad (20)$$

mit dem Spannungsintensitätsfaktor (Elastische Konstanten E und ν)

Grundlagen

$$K_I = \sqrt{J \frac{E}{(1-\nu^2)}} \quad (21)$$

Die Dominanz des ersten Terms führt dazu, dass die Spannungen innerhalb eines nach außen beschränkten Bereichs eindeutig durch den Spannungsintensitätsfaktor K_I charakterisiert werden. Nach innen hin ist der Bereich durch die plastische Zone beschränkt, welche wiederum die Prozesszone einschließt.

Mit der Deformationstheorie und dem Ramberg-Osgood-Gesetz kann elastisch plastisches Materialverhalten durch ein nichtlinear elastisches Verhalten beschrieben werden:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \sigma'_{ij} + \frac{1-2\nu}{E} \frac{\sigma_{kk}}{3} \delta_{ij} + \alpha_0 \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0} \right)^{n-1} \frac{\sigma'_{ij}}{\sigma_0} \quad (22)$$

Aufgrund der an der Rissspitze vorliegenden Verzerrungssingularität sind dort die elastischen Verzerrungen vernachlässigbar. So gilt vereinfacht

$$\varepsilon_{ij} = \alpha_0 \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0} \right)^{n-1} \frac{\sigma'_{ij}}{\sigma_0} \quad \text{mit} \quad \sigma'_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_h \delta_{ij} \quad (23)$$

Auch im Bereich der elastisch-plastischen Bruchmechanik (EPBM) kann für $r \rightarrow 0$ die Beschreibung des asymptotischen Rissspitzenfeldes allein durch den ersten Term der Reihenentwicklung erfolgen. Bei dem nach Hutchinson [55] sowie Rice und Rosengren [100] benannten HRR-Feld wird die Reihenentwicklung in Gleichung (18) daher nach dem ersten Glied abgebrochen. Weiterhin sind an der Rissspitze, wie oben erwähnt, die elastischen Dehnungen klein im Vergleich zu den plastischen Dehnungen und demnach vernachlässigbar.

So erhält man schließlich

$$\sigma_{ij}(r, \varphi) = \left(\frac{J}{I_n A_0 r} \right)^{\frac{1}{n+1}} g_{ij}(\varphi) \quad (24)$$

wobei I_n eine Konstante ist und $g_{ij}(\varphi)$ numerisch bestimmbare Funktionen darstellen. Für eine erweiterte asymptotische Lösung (Yang et al. [124]) werden auch höhere Terme der Spannungsfunktion berücksichtigt.

Das HRR-Feld gilt auch für die inkrementelle Plastizitätstheorie, da die Rissspitzenbelastung allein durch den Lastparameter J bestimmt wird und damit das Potenzgesetz zu einer Proportionalbelastung führt. In diesem Fall sind Deformationstheorie und inkrementelle Theorie äquivalent (Gross und Seelig [41]).

Ähnlich wie bei den linear-elastischen Rissspitzenfeldern ist der Gültigkeitsbereich der elastisch-plastischen Felder nach innen durch einen Bereich begrenzt, in dem große Verzerrungen oder Entlastungsvorgänge auftreten, welche nicht mehr im Rahmen einer geometrisch linearen Deformationstheorie beschrieben werden können. In Analogie zum K -Konzept gilt für das J -Konzept, dass unter den definierten Bedingungen der Rissspitzenzustand durch das J -dominierte Gebiet kontrolliert wird.

2.3

Konzepte zur Bewertung der Spaltbruchsicherheit

Dieses Kapitel basiert auf den Kapiteln 2 sowie 5.1 und 5.2 des Forschungsberichts „Lokale probabilistische Konzepte zur Sprödbruchbewertung bei mehrachsiger äußerer Belastung“ (Hohe, Hardenacke et al. [49]).

2.3.1

Makroskopische Konzepte

Der im Bereich der Zähigkeitstieflage und im unteren Übergangsbereich für ferritische Stähle dominierende Versagensmechanismus ist der transkristalline, sich instabil ausbreitende Spaltbruch. Dieser Versagensvorgang wird bruchmechanisch oftmals auf der Basis eines Beanspruchungsparameters in Form des Spannungsintensitätsfaktors K_I oder des J -Integrals beschrieben. Dem Beanspruchungsparameter wird ein entsprechender Werkstoffkennwert K_{Ic} oder J_{Ic} gegenübergestellt. Im Rahmen solcher Konzepte (z.B. ASME-Code [2], ASTM E 399 [4], KTA 3201 [7]) wird aufgrund der ausgeprägten Dehnungsbehinderung in Längsrichtung der Rissfront ein ebener Verzerrungszustand angenommen. Weiterhin darf es in der Rissfrontumgebung in sehr geringem Maße zu plastischer Deformation oder duktiler Risserweiterung kommen. Die Existenz eines ebenen Verzerrungszustands in der Rissfrontumgebung ist jedoch oftmals nur in stark eingeschränktem Maße gegeben, weil die als »Dicken-Constraint« bezeichnete Dehnungsbehinderung bei großen Belastungen und hohen Temperaturen aufgrund der Entstehung ausgedehnter plastischer Zonen (und dem damit verbundenen Auftreten von plastischen Dehnungen längs zur Rissfront) zusammenbricht. Durch den Zusammenbruch des »Dicken-Constraint« verändert sich das in der Rissfrontumgebung vorliegende mechanische Feld von dem bei geringer plastischer Deformation näherungsweise vorliegenden ebenen Verzerrungszustand hin zu einem ebenen Spannungszustand. Diese Änderung des mechanischen Zustandes führt zu einer signifikanten Änderung der Materialbeanspruchung in der Umgebung der Rissfront. Weiterhin zeigen fraktographische Untersuchungen der Spaltbruchursprünge, dass die Spaltbruchinitiierung nicht direkt an der Rissfront, sondern in einer gewissen Entfernung vor der Rissfront stattfindet. In diesem Bereich wird das vorliegende Spannungsfeld jedoch nicht mehr durch den singulären Term der Williamsreihe bzw. des HRR-Felds allein bestimmt, so dass die jeweiligen Intensitäten K_I bzw. J den Belastungszustand am Spaltbruchursprung nicht mehr in eindeutiger Weise charakterisieren. Dieser Effekt wird auch als »ebener Constraint« bezeichnet. Aufgrund der beschriebenen »Constraint-Effekte« kann die bruchmechanische Bewertung auf Grundlage von einparametrischen Spaltbruchkonzepten problematisch sein, da die ermittelten Werkstoffkennwerte oft eine starke Abhängigkeit von der verwendeten Probengeometrie u. -größe aufweisen. Ein naheliegender Ansatz zur Umgehung der aus dem »ebenen Constraint« resultierenden Probleme ist die Erweiterung der einparametrischen Sprödbruchkonzepte durch Berücksichtigung höherer Terme der Reihenentwicklung des elastischen bzw. des elastisch-plastischen Rissspitzenfelds. Für das elastische Nahfeld können die Spannungen in der Umgebung der Rissfront dann durch

$$\sigma_{ij}(r, \varphi) = \frac{K}{\sqrt{2\pi}} r^{-\frac{1}{2}} f_{ij}(\varphi) + T_{stress} r^0 g_{ij}(\varphi) (+ \dots) \quad (25)$$

beschrieben werden, wobei der Parameter T_{stress} die Intensität des regulären Terms beschreibt und neben K einen zweiten Bruchparameter darstellt (vgl. Du und Hancock [32]). Entsprechend kann auch für elastisch-plastische Rissspitzenfelder ein zweiparametrisches Bruchkonzept hergeleitet werden, wobei die Intensität A_2 des zweiten Terms der Reihenentwicklung des HRR-Felds als sekundärer Bruchparameter verwendet wird (Yang et al. [124]). Durch die Verwendung eines sekundären Bruchparameters kann eine verbesserte Charakterisierung der mechanischen Verhältnisse im typischen Bereich

der Spaltbruchursprünge erreicht werden. Bei dem von O'Dowd [89] entwickelten Q -Konzept handelt es sich ebenfalls um ein zweiparametriges Spaltbruchkonzept, welches jedoch neben dem »ebenen Constraint« in gewissem Umfang auch den »Dicken-Constraint« beschreiben kann. Dabei werden die Spannungen im Ligament als durch

$$\sigma_{ij}(r, \varphi) = \sigma_{ij}^{ref}(r, \varphi) + \sigma_0 Q \delta_{ij} \quad (26)$$

beschreibbar angenommen, wobei die Spannungen σ_{ij}^{ref} die Spannungen eines durch die primären Bruchparameter K oder J charakterisierten Referenzfelds darstellen. Die Abweichung der hydrostatischen Spannung des in einer Probe oder einem Bauteil real vorliegenden Spannungszustands vom Spannungszustand des Referenzfelds kann durch den sekundären Bruchparameter Q erfasst werden. Ein verwandtes Konzept ist das auf dem Spannungsmehrachsigkeitskoeffizienten

$$h = \frac{\sigma_h}{\sigma_e} \quad (27)$$

aufbauende Konzept, welches den Quotienten aus hydrostatischer Spannung σ_h und Mises-Vergleichsspannung σ_e als sekundären Bruchparameter verwendet. Die Spannungsmehrachsigkeit stellt ein lokales Maß für die äußere Arbeit dar, welche nicht durch globale plastische Verformung dissipiert wird, sondern für Materialschädigung zur Verfügung steht. Wie beim Q -Konzept wird auch hier die Differenz eines Spannungsmaßes an einem Punkt eines real vorliegenden Felds mit demselben Maß am entsprechenden Punkt eines Referenzfelds verglichen. Somit können Unterschiede zwischen den Spannungsfeldern von Proben und Bauteilen unterschiedlicher Geometrie bei in K bzw. J nominell gleichen Rissspitzenfeldern erfasst werden. Beide Konzepte sind sowohl zur Analyse des »ebenen Constraint« als auch zur Analyse des »Dicken-Constraint« geeignet.

Die bislang genannten Spaltbruchbewertungskonzepte sind rein deterministischer Natur, d.h. es wird angenommen, dass keine Spaltbruchgefahr vorliegt, solange der globale Belastungsparameter den entsprechenden Materialkennwert nicht übersteigt, und dass die Spaltbruchinitiierung zwingend erfolgt, wenn der Materialkennwert überschritten wird. Ein solch einfacher Ansatz steht jedoch nicht in Einklang mit experimentellen Beobachtungen. Da der Spaltbruch seinen Ausgang an stochastisch im Material verteilten Schwachstellen wie Ausscheidungen und Einschlüssen nimmt, kann in Experimenten eine ausgeprägte Streuung der Bruchzähigkeit beobachtet werden. Demnach können deterministische Spaltbruchkonzepte der Natur des Spaltbruchs nicht gerecht werden, da dieser Versagensmechanismus probabilistische Elemente aufweist. Deterministische Spaltbruchkonzepte können lediglich eine einhüllende Versagensgrenzkurve liefern. Um eine physikalisch sinnvollere Spaltbruchbewertungskonzept formulieren zu können, ist eine probabilistische Modellierung erforderlich, welche zumindest die Streuung der Kenngrößen erfasst. Das bekannteste auf makroskopischen Belastungsgrößen basierende probabilistische Konzept ist das von Wallin [120] vorgeschlagene und inzwischen in ASTM E 1921 [5] genormte Mastercurve-Konzept. Dieses beschreibt die Spaltbruchwahrscheinlichkeit ferritischer Stähle auf der Basis des formal aus dem J -Integral ($J=J_{el}+J_{pl}$) berechneten Spannungsintensitätsfaktors

$$K_J = \sqrt{(J_{el} + J_{pl}) \frac{E}{(1 - \nu^2)}} \quad (28)$$

mit den elastischen Konstanten E und ν .

Aufbauend auf dieser Belastungsgröße wird für die Versagenswahrscheinlichkeit eine dreiparametrische Weibull-Verteilung der Form

$$P_f(K_J) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{K_J - K_{min}}{K_0 - K_{min}}\right)^m\right) \quad (29)$$

mit der Konstanten $K_{min} = 20 \text{ MPa}\sqrt{m}$ angenommen.

Die Referenzbruchzähigkeit K_0 wird dabei so bestimmt, dass die Medianbruchzähigkeit $K_{Jc}^{med} = K_{min} + (K_0 - K_{min})(\ln 2)^{1/4}$ eine der Form nach für alle ferritischen Stähle gleiche Temperaturabhängigkeit

$$K_{Jc}^{med}(T) = \left(30 + 70 \exp\left(0.019 \frac{T - T_0}{^\circ\text{C}}\right)\right) \text{MPa}\sqrt{m} \quad (30)$$

aufweist, bei der die von Material, Bearbeitungs- und Bestrahlungszustand abhängige Referenztemperatur T_0 den einzigen verbleibenden Materialkennwert darstellt. Hierbei wird gemäß

$$K_{Jc}^{ref} = K_{min} + (K_{Jc} - K_{min})\left(\frac{B}{B_0}\right)^{\frac{1}{4}} = K_{Jc}^{1T} \quad (31)$$

eine Probendicken- bzw. Rissfrontlängenkorrektur auf eine Referenzdicke von $B_0 = 25 \text{ mm}$ vorgenommen. Die Rissfrontlängenkorrektur ist notwendig, da die Wahrscheinlichkeit, dass eine potenziell Spaltbruch auslösende Schwachstelle in der Rissfrontumgebung vorliegt, mit steigender Länge der Rissfront zunimmt. Zur Berücksichtigung von Mehrachsigkeitseffekten wurde durch Wallin [121] eine linear von der T -Spannung T_{stress} abhängige Mastercurve-Referenztemperatur

$$T_0 = T_0^{ref} + \frac{T_{stress}}{10} \frac{^\circ\text{C}}{\text{MPa}}, \quad T_{stress} \leq 0 \quad (32)$$

eingeführt. Nach der Überprüfung vergleichbare Erweiterungen auf der Basis anderer sekundärer Bruchparameter wurde von Hohe et al. [51] eine Mehrachsichtigkeitskorrektur für die gemessenen Bruchzähigkeiten vorgeschlagen. Eine Vorgehensweise zur Erfassung von Mehrachsigkeitseffekten mittels einer Constraint-Korrelationsfunktion wurde von Gao und Dodds [36] entwickelt. Basierend darauf schlugen Petti und Dodds [92] die Definition einer Constraint-abhängigen Referenztemperatur T_0 vor.

2.3.2

Lokale Konzepte – local approach

Die Erfassung der bei der Spaltbruchinitiierung auf mikromechanischer Ebene real ablaufenden Vorgänge und die Identifikation der dabei relevanten Feldgrößen ermöglicht eine direkte probabilistische Bewertung der Spaltbruchgefahr auf Basis der in der Spaltbruchprozesszone bzw. am potenziellen Bruchursprung lokal vorliegenden mechanischen Feldgrößen. Diese als »local approach« (Mudry [87], Pineau [94]) bezeichnete Vorgehensweise stellt eine Erfolg versprechende Alternative zu den in den Kapitel 2.3.1 vorgestellten makroskopischen, auf dem Spannungsintensitätsfaktor K oder dem J -Integral aufbauenden, bruchmechanischen Bewertungskonzepten dar. Aufgrund der Formulierung eines Bruchkriteriums basierend auf dem im Bereich des Bruchursprungs real vorliegenden physikalischen Zustand erlaubt der »local approach« im Rahmen der bruchmechanischen Bewertung eine inhärente Erfassung aller primären und sekundären Einflussfaktoren inklusive möglicher Wechselwirkungen. Daraus resultiert eine potenziell erhöhte Analysegenauigkeit.

Die bei der Spaltbruchinitiierung ablaufenden Vorgänge werden bereits seit längerer Zeit, vor allem auf experimentellem Weg, untersucht. Es ist weitgehend akzeptiert, dass der Spaltbruch durch die Instabilität von Mikrodefekten ausgelöst wird. Dabei ist die Annahme der Gültigkeit des Griffith-Kriteriums auf mikroskopischer Ebene von großer Bedeutung. Durch dieses Kriterium wird ein Zusammenhang zwischen der Defektgröße und der erforderlichen (kritischen) größten Hauptspannung σ_1 für Defektinstabilität hergestellt (Ritchie et al. [102]). Hinsichtlich der vorliegenden maximalen Hauptspannung σ_1 am Bruchsprung bei Spaltbruchauslösung konnte für gekerbte Proben eine weitgehende Temperaturunabhängigkeit beobachtet werden (Bowen et al. [25]). Teilweise abweichende Beobachtungen bei Bruchmechanikproben (Kantidis et al. [58], Kavishe und Baker [59]) können auf die Aktivierung anderer Bruchmechanismen zurückgeführt werden. Die temperaturunabhängige Spaltbruchspannung deutet darauf hin, dass die Initiierung von Mikrorissen den dominierenden Bruchmechanismus darstellt.

Im Hinblick auf die Entstehung von Mikrorissen kann für ferritisch-bainitische Stähle davon ausgegangen werden, dass diese spaltbruchrelevanten Defekte überwiegend durch den Bruch spröder Partikel (Ausscheidungen und Einschlüsse) entstehen. Der Partikelbruch findet statt, wenn bei plastischer Deformation der umgebenden duktilen Matrix Spannungsumlagerung in die spröden Partikel auftreten. Der grundlegende Zusammenhang zwischen der Entstehung potentiell Spaltbruch auslösender Mikrodefekte und der plastischen Deformation wurde bereits in frühen Arbeiten von Gurland [42], Lindley et al. [75] sowie McMahan und Cohen [85] aufgezeigt. Einen Übersichtsartikel lieferte Hahn [44]. Die experimentellen Untersuchungen zu den mikromechanischen Vorgängen bei der Spaltbruchauslösung in ferritisch-bainitischen Stählen zeigten auch, dass spröde Partikel in über 90% der Fälle die Quelle für Mikrorisse darstellen (Mc Mahon und Cohen [85]), wobei die Partikel sowohl durch Versetzungsaufstauung als auch durch einen Faser-Mechanismus brechen können. Der Partikelbruch durch Versetzungsaufstauung findet dabei im Bereich sehr geringer plastischer Dehnungen der ferritischen Matrix statt, während der Faser-Mechanismus bei größeren plastischen Dehnungen dominiert (Lindley et al. [75]). Auch Gurland [42] sowie Mc Mahon und Cohen [85] kamen zu dem Ergebnis, dass die Partikel nach plastischer Deformation der Matrix brechen und die Anzahl gebrochener Partikel kontinuierlich mit zunehmender plastischer Dehnung ansteigt. Dabei zeigte sich, dass für die Mikrodefektentstehung neben dem mechanischen Zustand des Matrixmaterials auch die vorliegende Partikelkonstellation von Bedeutung ist, was durch das bevorzugte Versagen länglicher, in Lastrichtung orientierter Partikel belegt wurde (Lindley et al. [75], Gurland [42]). Weiterhin wurde deutlich, dass nicht jedes gebrochene Partikel zu einem kritischen Mikrodefekt führt. In vielen Fällen arretiert der Mikroriss bereits in der ersten Phase der Ausbreitung beim Übergang in das umgebende duktile Matrixmaterial (Mc Mahon und Cohen [85], Bowen [25]). Als weitere mögliche Entstehungsmechanismen für Mikrorisse konnten die Bildung von Defekten durch Aufstauung von Versetzungen an Korngrenzen (Kumar et al. [68]), sowie die partielle Ablösung karbidischer Einschlüsse von der umgebenden ferritischen Matrix (Irwin und Zhang [56]) identifiziert werden.

Im Rahmen der Entstehung potentiell kritischer Mikrodefekte stellt die lokale Spannungsmehrachsigkeit $h = \sigma_1 / \sigma_e$ eine bedeutende Einflussgröße dar. Die Spannungsmehrachsigkeit beeinflusst die mögliche Abstumpfung frisch entstehender Mikrorisse, wie durch Chen et al. [29] gezeigt werden konnte. Diese Beobachtung stimmt mit den von Hohe et al. [49] gewonnenen Erkenntnissen überein. Demnach wird die Spaltbruchauslösung im Wesentlichen durch drei voneinander unabhängige lokale Feldgrößen gesteuert: Die maximale Hauptspannung σ_1 , die akkumulierten plastischen Vergleichsdehnung ε_e^{pl} , welche bei einer Proportionalbelastungen mit der Mises-Vergleichsspannung σ_e korreliert, sowie die lokale Spannungsmehrachsigkeit h .

Die »local approach«-Modellierung zur Bestimmung der Spaltbruchwahrscheinlichkeit basiert auf der Betrachtung von materiellen Kontrollvolumen, welche mit den jeweils lokal vorliegenden Feldgrößen beaufschlagt sind. Unter Verwendung der »weakest-link«-Annahme (Mudry [87]) geht man davon aus, dass das Versagen eines Kontrollvolumens das Versagen der gesamten Struktur zur Folge hat. Dieser Ansatz impliziert, dass ein einmal initiiertes Spaltbruch sich instabil ausbreitet ohne zu arretieren. Eine vereinfachte Berücksichtigung der Barrierewirkung der ersten Korngrenze im Frühstadium der Rissausbreitung kann implizit durch die Einführung ergänzender Parameter im Rahmen der Beschreibung der möglichen Mikrorissinstabilität erfolgen. Die aus lokalen Deformationsbehinderungen und möglichen Inkompatibilitäten der bevorzugten Spaltebenen resultierende Barrierewirkung von Korngrenzen nach einer Rissausbreitung über die erste Korngrenze hinweg bleibt jedoch weitgehend unberücksichtigt.

Wie bereits erwähnt, ist es weitgehend akzeptiert, dass der Spaltbruch durch die Instabilität von Mikrodefekten ausgelöst wird. Diese Mikrorisse entstehen in ferritisch-bainitischen Stählen überwiegend durch den Bruch spröder Partikel (z.B. Karbide), wenn es bei plastischer Deformation der umgebenden duktilen ferritischen Matrix zur Spannungsumlagerung in die spröden Partikel und infolgedessen durch Überlastung zum Partikelbruch kommt (siehe Abb. 07).

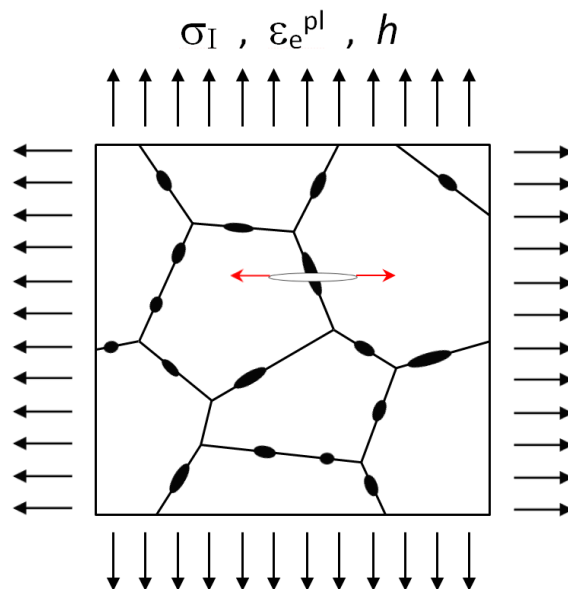


Abb. 07: Schematische Darstellung der Mikromechanik der Spaltbruchauslösung in ferritisch-bainitischen Stählen; Bruch spröder Partikel an Korngrenzen

Aufgrund der stochastischen Verteilung der potenziell spaltbruchauslösenden spröden Partikel im Material, erfolgt die Definition der lokalen Spaltbruchkonzepte auf probabilistischer Basis, und zwar durch Betrachtung eines Kontrollvolumens dV , welches hinsichtlich seiner Abmessungen mehrere Korngrößen umfassen kann.

Im Folgenden werden die wichtigsten, in der Literatur verfügbaren lokalen Spaltbruchmodelle kurz vorgestellt. Einen Überblick gibt auch ein Übersichtsartikel von Pineau [94]. Das älteste und wichtigste Modell dieser Art ist das durch die Beremin-Gruppe vorgeschlagene Modell (Beremin [18]). Im Rahmen dieses Modells wird für die Größenverteilung der spröden Partikel und somit auch der frisch entstehenden Mikrorisse eine Potenzverteilung postuliert, mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p(l_0) = \alpha l_0^{\beta} \tag{33}$$

Daraus folgt die Wahrscheinlichkeit P für das Auftreten eines Mikrorisses (Anmerkung: Streng genommen muss gelten $0 \leq P \leq 1$, auf der Größenebene eines Kontrollvolumens

dV werden jedoch nur kleine Wahrscheinlichkeiten betrachtet, so dass die Bedingung $P \leq 1$ hier nicht relevant ist) der Größe $l > l_0$

$$P(l > l_0) = \frac{\alpha}{\beta - 1} l_0^{1-\beta} \quad (34)$$

Hinsichtlich des Entstehungszeitpunktes der Mikrorisse wird stark vereinfachend angenommen, dass alle Mikrorisse unmittelbar bei Einsetzen der plastischen Deformation entstehen. Ein Kriterium für die Instabilität von Mikrorissen wurde von Griffith [39] eingeführt. Es besagt, dass ein senkrecht durch die Spannung σ_I belasteter Mikroriss der Größe l sich instabil ausbreitet, wenn gilt

$$\sigma_I > \sigma_c = \sqrt{\frac{4\pi E \gamma}{(1 - \nu^2)l}} \quad (35)$$

mit der (effektiven) Oberflächenenergie γ sowie den elastischen Konstanten E und ν . Setzt man nun voraus, dass die mögliche Instabilität der Mikrorisse im Kontrollvolumen durch das Griffith-Kriterium beschreibbar ist (Beremin [18], Faleskog et al. [35], [63]), so ergibt sich durch Umformen von Gleichung (35) nach l und anschließendes Einsetzen in Gleichung (34) die akkumulierte Wahrscheinlichkeit

$$P(\sigma_I) = \left(\frac{\sigma_I}{\sigma_u}\right)^m \quad (36)$$

Für das Versagen des Kontrollvolumens dV , wobei die Größen $m=2\beta-2$ und σ_u Materialparameter darstellen. Im Rahmen des »weakest-link«-Ansatzes (Mudry [87]) wird postuliert, dass das Versagen des Kontrollvolumens dV das instabile Versagen der gesamten Struktur zur Folge hat. Die Versagenswahrscheinlichkeit $P_f=1-P_s$ der Gesamtstruktur erhält man demnach durch das Produkt P_s der Überlebenswahrscheinlichkeiten aller Volumenelemente (siehe Kapitel 5.3 für Details). Damit ergibt sich unter Annahme geringer individueller Versagenswahrscheinlichkeiten der einzelnen Volumenelemente die akkumulierte Ausfallwahrscheinlichkeit

$$P_f(\sigma_W) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma_W}{\sigma_u}\right)^m\right) \quad (37)$$

für die betrachtete Struktur. Hierbei wird die Weibull-Spannung σ_W gemäß

$$\sigma_W = \sqrt[m]{\frac{1}{V_0} \int_{V_{cl}} (\sigma_I)^m dV} \approx \sqrt[m]{\sum_{i=1}^{n_{Vi}} \left[(\sigma_I^{(i)})^m \frac{\Delta V^{(i)}}{V_0} \right]} \quad (38)$$

durch Integration bzw. gewichtete Summation der bis zum betrachteten Zeitpunkt in den Volumenelementen $\Delta V^{(i)}$ auftretenden und mit m potenzierten Maximalwerte der größten Hauptspannung σ_I über das Volumen V_{cl} der als Spaltbruch-Prozesszone definierten plastischen Zone berechnet. Das Bezugsvolumen V_0 ist dabei eine zur Korrektur der Einheiten erforderliche Größe, die in Kombination mit der Bezugsspannung σ_u auftritt und demnach keinen eigenständigen Materialparameter darstellt.

Trotz seiner vergleichsweise einfachen Formulierung erweist sich das Beremin-Modell als fähig, eine Reihe grundsätzlicher Effekte inhärent ohne Einführung weiterer Korrekturfunktionen zumindest qualitativ zu beschreiben. Zu diesen Effekten gehören der Probedicken- bzw. Rissfrontlängeneffekt, die Temperaturabhängigkeit der $K_{Ic}(T)$ -Kurve im unteren Übergangsbereich und der WPS-Effekt (Erhöhung der finalen Bruchlast bei tiefer Temperatur durch Vorbelastung bei hoher Temperatur). Dies belegt die grund-

sätzlich sinnvolle probabilistische (der stochastischen Natur des Spaltbruchs gerecht werdende) Formulierung des Modells.

Andererseits führen die zahlreichen Vereinfachungen bei der Modellformulierung zu einer Reihe von Unzulänglichkeiten. So liefert das Beremin-Modell auch bei sehr geringen äußeren Belastungen bereits eine, wenn auch geringe, Ausfallwahrscheinlichkeit, was der experimentellen Erfahrung widerspricht. Um diesem Problem gerecht zu werden, wurde die Verwendung von Schwellenwerten als zusätzliche Material- bzw. Modellparameter vorgeschlagen. So wurde beispielsweise durch Lin et al. [74] sowie Xia und Shih [123] eine modifizierte Weibull-Spannung

$$\sigma_W = \sigma_u \cdot \sqrt[m]{\frac{1}{V_0} \int_{V_{cl}} \left(\frac{\sigma_I - \sigma_{th}}{\sigma_u - \sigma_{th}} \right)^m dV} \quad (39)$$

eingeführt. Alternativ zu dieser Vorgehensweise schlagen Gao et al. [37] eine Anpassung der Wahrscheinlichkeitsfunktion $P_f(K_j)$ selbst, gemäß

$$P_f(\sigma_W) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma_W - \sigma_{th}}{\sigma_u - \sigma_{th}}\right)^m\right) \quad (40)$$

vor. Der Materialparameter σ_{th} bietet zudem verbesserte Möglichkeiten zur Anpassung der berechneten Spaltbruchwahrscheinlichkeit an experimentelle Ergebnisse.

Das klassische Beremin-Modell gemäß den Gleichungen (37) bis (40) beinhaltet lediglich die Modellierung der Instabilität bestehender Mikrorisse. Hinsichtlich der Mikrorissentstehung wird die stark vereinfachende Annahme getroffen, dass alle derartigen Defekte unmittelbar nach Einsetzen der plastischen Deformation durch Partikelbruch entstehen. Diese Annahme steht im Widerspruch zu experimentellen gewonnenen Erkenntnissen, die belegen, dass die Anzahl der Mikrorisse mit zunehmender plastischer Verformung ansteigt (Gurland [42], Lindley et al. [75], McMahon und Cohen [85]). Auch die Möglichkeit, dass frisch entstandene Mikrorisse durch eine Abstumpfung der Mikrorissfront hinsichtlich einer Spaltbruchauslösung unkritisch werden können, wird durch das Beremin-Modell nicht erfasst. Weiterhin basiert das Beremin-Modell auf der Annahme, dass eine Spaltbruchauslösung nur bei steigender größter Hauptspannung σ_I erfolgen kann. Diese Annahme steht im Widerspruch zu aktuellen Erkenntnissen. Die Spaltbruchauslösung kann sehr wohl in Bereichen stattfinden, die bei ansteigender äußerer Belastung eine absinkende größte Hauptspannung aufweisen, solange dort durch zunehmende plastische Verformung neue Mikrorisse entstehen (Hohe et al. [49], [52]).

Eine Modifikation des originalen Beremin-Modells durch Berücksichtigung der plastischen Deformation am Bruchursprung wurde durch Eisele et al. [33] vorgeschlagen. Dabei wird die Weibull-Spannung σ_w durch eine Funktion der plastischen Vergleichsdehnung ergänzt, so dass der Einfluss der plastischen Deformation auf die Wahrscheinlichkeit der Mikrodefektentstehung näherungsweise erfasst werden kann. Eine andere Unzulänglichkeit des originalen Beremin-Modells ist die weitgehende Beschränkung auf Lastfälle mit monoton steigender Belastung. Um komplexere transiente Belastungsvorgänge besser beschreiben zu können, wurde daher durch Stöckl et al. [113] eine inkrementelle Formulierung des Beremin-Modells entwickelt. Diese definiert den Zuwachs Δp der Versagenswahrscheinlichkeit eines Volumenelements $\Delta V^{(0)}$ während eines Zeitinkrements $\Delta t = t_n - t_{n-1}$ durch

$$\Delta p(t_n) = \frac{\Delta \varepsilon_e^{pl}}{\Delta \varepsilon_{pl}^{(0)}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_e^{pl}(t_{n-0.5})}{\varepsilon_{pl}^{(0)}}\right) \left(\frac{\sigma_I(t_{n-0.5}) - \sigma_{th}}{\sigma_u - \sigma_{th}}\right)^m \quad (41)$$

wobei $\varepsilon_e^{pl}(t_{n-0.5})$ die aktuelle plastische Vergleichsdehnung bezeichnet ($\Delta\varepsilon_e^{pl} = \varepsilon_e^{pl}(t_n) - \varepsilon_e^{pl}(t_{n-1})$), während $\varepsilon_{pl}^{(0)}$, $\Delta\varepsilon_{pl}^{(0)}$ und σ_u sowie σ_{th} Materialparameter darstellen. Innerhalb des Modells beschreiben die ersten beiden Terme die Wahrscheinlichkeit für Mikrodefektentstehung durch Partikelbruch, während der dritte Term die Beschreibung der Wahrscheinlichkeit für eine instabile Ausbreitung der frisch entstandenen Mikrorisse beinhaltet.

Diese Vorgehensweise wurde auch durch Bordet et al. [23] angewendet, wobei mikro-mechanische Betrachtungen einen verstärkten Einfluss auf die Begründung der Modellformulierung hatten. Weiterhin wurde bezüglich des Schwellenwerts der Ansatz von Gao et al. [37] verwendet. Damit erhält man für das Inkrement der Versagenswahrscheinlichkeit

$$\Delta p(t_n) = \frac{\Delta\varepsilon_e^{pl}}{\Delta\varepsilon_{pl}^{(0)}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_e^{pl}(t_{n-0.5})}{\varepsilon_{pl}^{(0)}}\right) \left(\left(\frac{\sigma_I(t_{n-0.5})}{\sigma_u}\right)^m - \left(\frac{\sigma_{th}}{\sigma_u}\right)^m \right) \quad (42)$$

Die Parameter $\varepsilon_{pl}^{(0)}$ und $\Delta\varepsilon_{pl}^{(0)}$ werden als temperatur- und dehnratenabhängig angesehen, wobei diese Abhängigkeiten als Funktionen der Temperatur- und Dehnratenabhängigkeit der Fließspannung dargestellt werden können. Die Parameter σ_u und σ_{th} werden als temperaturunabhängig angenommen. Dieser Ansatz wird durch experimentelle Untersuchungen von Bordet et al. [24] und Keim et al. [61] gestützt.

Den Zuwachs der akkumulierten Ausfallwahrscheinlichkeit der Gesamtstruktur im n -ten Lastschritt (Zeit $t=t_n$) erhält man in beiden Fällen durch Summation der Elementbeiträge gemäß

$$\Delta P_f^{(n)} = \Delta P_f(t_n) = 1 - \exp\left(-\sum_{i=1}^{n_{Vi}} \left[\Delta p^{(i)}(t_n) \frac{V^{(i)}}{V_0} \right]\right) \quad (43)$$

und die Verwendung der Rekursionsformel

$$P_f^{(n)} = P_f^{(n-1)} + \Delta P_f^{(n)} (1 - P_f^{(n-1)}) \quad (44)$$

Neben den hier vorgestellten Erweiterungen des klassischen Beremin-Modells existieren einige weitere Modellvarianten (Pineau [94]), welche an dieser Stelle aber nicht weiter betrachtet werden müssen.

Als Alternative zum Beremin Modell wurde von Faleskog et al. ([35], [63]) ein lokales Spaltbruchmodell entwickelt, welches den Einfluss der plastischen Dehnung auf die Mikrorissentstehung in einfacher Weise berücksichtigt. Zur Herleitung des Modells wird ein Kontrollvolumen dV betrachtet, welches durch die Instabilität eines in diesem Bereich entstehenden Mikrorisses zum Initiierungsort eines Spaltbruchs werden kann. Hinsichtlich der möglichen Instabilität von Mikrorissen wird die Gültigkeit des Griffith-Kriteriums (35) vorausgesetzt. Weiterhin wird die Zunahme der Mikrorissanzahl mit fortschreitender plastischer Deformation durch einen auf experimentellen Beobachtungen basierenden Zusammenhang beschrieben. Die Größenverteilung der spröden Partikel bzw. der daraus entstehenden Mikrorisse wird, basierend auf den experimentellen Ergebnissen von Lin et al. [74], durch eine Exponentialverteilung abgebildet, mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p(l_0) = \frac{1}{\alpha} \exp\left(-\frac{l_0}{\alpha}\right) \quad (45)$$

So folgt die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Mikrorisses der Größe l mit $l_0 < l < l_{max}$

$$P(l) = \exp\left(-\frac{l_0}{\alpha}\right) - \exp\left(-\frac{l_{max}}{\alpha}\right) \quad (46)$$

wobei l_{max} die (angenommene) maximal mögliche Partikelgröße bezeichnet.

Hinsichtlich der Mikrorissentstehung wird, in Anlehnung an die experimentellen Ergebnisse von Gurland [42] sowie McMahon und Cohen [85], ein linearer Einfluss der plastischen Vergleichsdehnung postuliert. Damit kann die akkumulierte Versagenswahrscheinlichkeit der Struktur bis zum Zeitpunkt t_n durch

$$P_f(t_n) = 1 - \exp\left(-\int_{V_{cl}} \frac{1}{V_0} \max_{t_0 \leq t \leq t_n} (g(\sigma_I, \varepsilon_{pl})) dV\right) \quad (47)$$

beschrieben werden, wobei die Funktion g gemäß

$$g(\sigma_I, \varepsilon_{pl}) = c\varepsilon_{pl} \left(\exp\left(-\left(\frac{\eta\sigma_{th}}{\sigma_I}\right)^2\right) - \exp(-\eta^2) \right) \quad (48)$$

definiert wird, mit den Materialparametern c/V_0 , η und σ_{th} .

Die Versagenswahrscheinlichkeit eines Kontrollvolumens dV kann demnach durch die Funktion $g(\sigma_I, \varepsilon_{pl})$ bzw. deren Maximum bis zum betrachteten Zeitpunkt der Lastgeschichte berechnet werden. Der Separationsansatz $g(\sigma_I, \varepsilon_{pl}) = g_1(\varepsilon_{pl})g_2(\sigma_I)$ bedingt, dass die Vorgänge der Mikrorissentstehung und der Mikrorissinstabilität voneinander getrennt betrachtet werden.

Von den aus der Literatur bekannten Spaltbruchmodellen soll an dieser Stelle noch das Prometey-Modell (Margolin et al. [81]) als stark mechanismenbasiertes Modell vorgestellt werden, welches zuerst als ein deterministisches lokales Modell formuliert wurde und später eine probabilistische Erweiterung erfuhr. In der deterministischen Ursprungsform basiert das Prometey-Modell auf zwei Teilkriterien für die Spaltbruchauslösung, welche die Mikrorissentstehung und die Mikrorissinstabilität beschreiben sollen. Der Spaltbruch wird initiiert, wenn diese zwei Teilkriterien

$$\sigma_I + m_T(T) + m_\varepsilon(\varepsilon_e^{pl}) \cdot (\sigma_e - \sigma_{y0}) \geq \sigma_{c,nucd} \quad (49)$$

$$\sigma_I \geq \sigma_{c,prop}(\varepsilon_e^{pl}) \quad (50)$$

an einem Ort gleichzeitig erfüllt sind (Margolin et al. [79], [82]). Das erste Teilkriterium entspricht dabei einer notwendigen Bedingung für die Mikrorissentstehung. Dabei wird postuliert, dass die (makroskopische) größte Hauptspannung σ_I , verstärkt durch eine lokale Spannungsüberhöhung, die für die Mikrorissbildung durch Partikelversagen relevante mechanische Größe darstellt. Für die temperatur- bzw. dehnungsabhängigen Modellparameter $m_T(T)$ und $m_\varepsilon(\varepsilon_e^{pl})$ werden von Margolin et al. [81] geeignete funktionale Zusammenhänge vorgegeben. Die verallgemeinerte Partikel- bzw. Partikel-Ferrit-Interface-Festigkeit $\sigma_{c,nucd}$ stellt einen weiteren Modell- bzw. Materialparameter dar. Das zweite Teilkriterium des Prometey-Modells entspricht einer notwendigen Bedingung für die Mikrorissinstabilität, wobei die größte Hauptspannung σ_I als die in diesem Zusammenhang relevante mechanische Feldgröße angesehen wird. Die größte Hauptspannung muss demnach einen Ausbreitungswiderstand $\sigma_{c,prop}$ überschreiten, für den eine Abhängigkeit von der aktuellen plastischen Vergleichsdehnung postuliert wird (Margo-

lin et al. [82]). Für alle genannten Materialparameter gilt die Annahme der Temperaturunabhängigkeit, sofern eine Temperaturabhängigkeit nicht explizit angegeben ist.

Basierend auf der Annahme, dass die verallgemeinerte Partikelfestigkeit $\sigma_{c,nucl}$ eine Streuung aufweist, wurde durch Margolin et al. [78] eine probabilistische Erweiterung des Modells durchgeführt. Demnach erhält man die Versagenswahrscheinlichkeit der Gesamtstruktur gemäß

$$P_f(t_n) = 1 - \exp \left(- \sum_{i=1}^n \left(\frac{\max_{t_0 \leq t \leq t_n} (\sigma_{nucl}^{(i)}) - \sigma_{th}}{\sigma_u} \right)^m \right) \quad (51)$$

wobei n die Anzahl der Auswertungszellen endlicher Größe bezeichnet und

$$\sigma_{nucl}^{(i)} = \begin{cases} \sigma_I^{(i)} + m_T m_\varepsilon^{(i)} + (\sigma_e^{(i)} - \sigma_{y0}) & \text{für } \sigma_I^{(i)} \geq \sigma_{c,prop}^{(i)} \text{ und } \sigma_{nucl}^{(i)} > \sigma_{th} \\ \sigma_{th} & \text{anderenfalls} \end{cases} \quad (52)$$

analog zum ersten deterministischen Teilkriterium (49) die Neigung zur Mikrorissentstehung beschreibt. Die Größen σ_u , σ_{th} und m stellen weitere Modell- bzw. Materialparameter dar. In einer späteren Arbeit schlugen Margolin et al. [80] vor, die beiden Festigkeiten $\sigma_{c,nucl}$ und $\sigma_{c,prop}$ als weibullverteilte Größen anzusehen. Weiterhin wurde durch Margolin et al. [81] eine Anpassungsprozedur für die Material- bzw. Modellparameter entwickelt. Diese basiert auf der Verwendung gemischter Datensätze aus Rund- und Kerbzug- sowie Bruchmechanikversuchen.

Motiviert durch die Tatsache, dass bei experimentellen Untersuchungen die Spaltbruchauslösung in einer nicht vernachlässigbaren Anzahl an Fällen bei sinkender lokaler Spannung am Bruchursprung stattfindet (Hohe et al. [49], [52]), wurde im Rahmen eines Forschungsvorhabens ein erweitertes lokales Spaltbruchmodell entwickelt (Hohe et al. [49], [50]). Dieses Modell berücksichtigt (neben der größten Hauptspannung und der plastischen Vergleichsdehnung) die lokale Spannungsmehrachsigkeit als zusätzlichen Parameter und erlaubt somit eine bessere Beschreibung der Versagenswahrscheinlichkeit von Standardproben und bauteilähnlichen Proben mit ihren jeweils unterschiedlichen Spannungszuständen.

Um eine geeignete Datenbasis für die Herleitung eines erweiterten Spaltbruchmodells zu schaffen, wurden experimentellen Untersuchungen an Kreuzbiegeproben (biaxiale äußere Belastung) sowie an tief und kurz gerissenen Biegeproben durchgeführt. Anschließend wurden die lokalen, den Spaltbruch auslösenden Bedingungen durch Simulation der Experimente analysiert. Basierend auf den so erhaltenen Ergebnissen wurde ein Zwei-Kriterien-Zugang postuliert, der als hinreichende Bedingung für die Spaltbruchauslösung innerhalb eines Kontrollvolumens die gleichzeitige Erfüllung zweier unabhängiger notwendiger Bedingungen fordert (vgl. Faleskog et al. [35], Hohe et al. [53], Margolin et al. [81]). Das erste Teilkriterium für die Spaltbruchauslösung ist Entstehung potenziell kritischer Mikrorisse innerhalb des Kontrollvolumens, das zweite Teilkriterium ist die Instabilität eines dieser Mikrorisse durch Überlastung.

Als relevanter Mechanismus für die Entstehung von Mikrorissen wird dabei der Bruch spröder Partikel angenommen (Gurland [42], Lindley et al. [75], McMahon und Cohen [85]). Die Partikel brechen aufgrund von Überlastung bei einer plastischer Verformung der sie umgebenden duktilen ferritischen Matrix. So entstehen Mikrorisse, welche hinsichtlich ihrer Größe (Risslänge) in etwa der Partikelgröße entsprechen. Die plastische Deformation der duktilen Matrix führt zu einer Spannungsumlagerung in die spröden Partikel. Gurland [42] sowie McMahon und Cohen [85] ermittelten in uniaxialen Zug-

versuchen, dass für ferritische Stähle die Anzahl der Mikrorisse etwa linear mit der plastischen Dehnung zunimmt.

Der Partikelbruch durch plastische Deformation der duktilen Matrix ist jedoch lediglich eine notwendige Bedingung für die Mikrorissentstehung. Nur wenn die Rissfronten des frisch entstehenden Defekts scharf bleiben, bildet sich ein potenziell kritischer Mikroriss. Kommt es durch plastische Vorgänge zu einer Abstumpfung der Rissfronten, so entsteht eine hinsichtlich Spaltbruchinitiierung zumeist unkritische Pore. Durch Chen et al. [29] konnte gezeigt werden, dass die mögliche Abstumpfung entstehender Mikrorisse hauptsächlich durch die lokale Spannungsmehrachsigkeit h beeinflusst wird.

Basierend auf den vorliegenden Erkenntnissen wurde eine hinreichende Bedingung für die Bildung potenziell kritischer Mikrorisse formuliert. Diese fordert, dass neben einer ausreichenden plastischen Deformation der ferritischen Matrix auch eine ausreichend hohe lokale Spannungsmehrachsigkeit vorliegen muss. Durch die Simulation der Experimente konnte ermittelt werden, dass zwischen dem Logarithmus $\ln \varepsilon_e^{pl}$ der lokalen akkumulierten plastischen Vergleichsdehnung und dem lokalen Spannungsmehrachsigkeitskoeffizienten h am Ort der Spaltbruchinitiierung zum Versagenszeitpunkt eine lineare, durch eine Versagensgrenzkurve beschreibbare Korrelation besteht. Im Laufe der Belastungsgeschichte bewegt sich der Zustandspunkt $\mathbf{Z} = (h, \ln \varepsilon_e^{pl})^T$ entlang eines bei $\ln \varepsilon_e^{pl} = -\infty$ beginnenden Pfades, welcher sich der Versagensgrenzkurve annähert, um dann bei weiterhin zunehmender akkumulierter plastischer Vergleichsdehnung und entsprechend sinkender lokaler Spannungsmehrachsigkeit dieser Grenzkurve zu folgen (siehe Abb. 08). Der Ort der Annäherung an die Grenzkurve ist abhängig von der Probengeometrie.

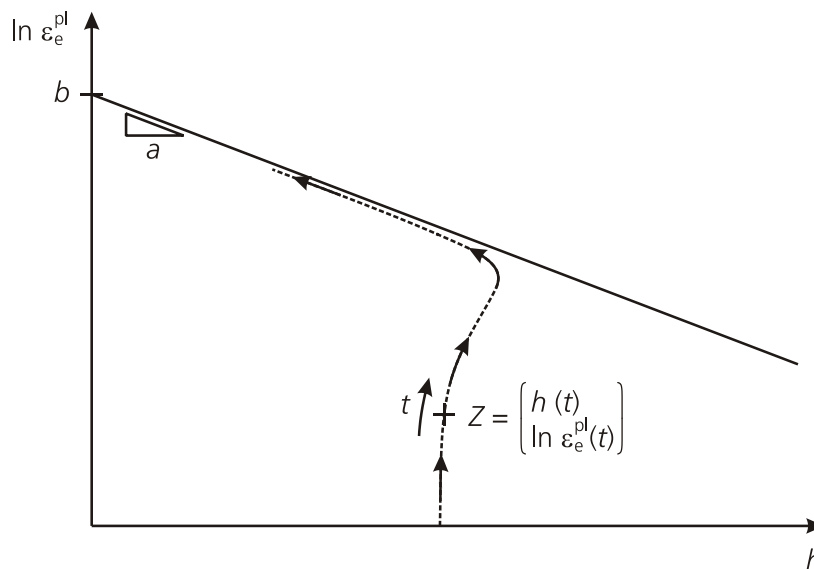


Abb. 08: Korrelation zwischen lokaler akkumulierter plastischer Vergleichsdehnung ε_e^{pl} und lokalem Spannungsmehrachsigkeitskoeffizienten h am Bruchursprung

Im Hinblick auf die Formulierung eines lokalen Spaltbruchmodells erscheint es als sinnvoll, den Abstand des Zustandspunktes Z von der Versagensgrenzkurve als Maß für die Entstehung potenziell kritischer Mikrorisse zu verwenden. Ein abnehmender Abstand zur Versagensgrenzkurve bedeutet in diesem Zusammenhang eine zunehmende Anzahl von Mikrorissen. Eine solche Annahme steht in einem grundsätzlichen Einklang mit den experimentellen Befunden von Gurland [42], McMahon und Cohen [85] sowie Kumar et al. [68].

Im Rahmen des von Hohe et al. ([49], [50]) verfolgten Zwei-Kriterien-Zugangs stellt die Instabilität bzw. instabile Ausbreitung von mindestens einem der bei plastischer Deformation des Werkstoffs vorwiegend durch Partikelbruch entstehenden Mikrorisse die

zweite notwendige Voraussetzung für eine Spaltbruchinitiierung dar. In der Literatur (Beremin [18], Bordet et al. [23], [24], Faleskog et al. [35], [63], Margolin et al. [81]) herrscht ein weitgehender Konsens, dass die Instabilität bestehender Mikrorisse durch ein Griffith-Kriterium [39] beschrieben werden kann. Daher basiert das zweite Teilkriterium für die Spaltbruchauslösung auf dieser geeigneten Beschreibung der Bedingungen für die Instabilität von Mikrorissen. Dabei ist die größten Hauptspannung σ_1 am Ort der möglichen Spaltbruchauslösung die relevante mechanische Feldgröße.

Um die Versagenswahrscheinlichkeit der Gesamtstruktur berechnen zu können, wird auch bei diesem lokalen Spaltbruchmodell das von Mudry [87] postulierte weakest-link-Konzept verwendet. Dieses besagt, dass ein einmal initiiertes Mikroriss nicht vor Auftreten erheblicher Schäden an der Gesamtstruktur zum Arrest kommt. Demnach verursacht das Versagen eines kleinen Kontrollvolumens das Versagen der Gesamtstruktur.

Betrachtet man nun, entsprechend der üblichen Vorgehensweise, ein Kontrollvolumen dV (Abmessungen klein im Vergleich zur Gesamtstruktur, aber größer als die charakteristische Mikrorisslänge), so kann unter Verwendung der oben definierten Teilkriterien für die Spaltbruchauslösung (Zwei-Kriterien-Zugang) ein erweitertes lokales probabilistisches Spaltbruchmodell formuliert werden. Die Wahrscheinlichkeit für das Versagen des i -ten Volumenelements $dV^{(i)}$ unter einem gegebenen Spannungs- und Deformationszustand kann allgemein durch

$$dp_f^{(i)} = \frac{dV^{(i)}}{V_0} f_{nuc}^{(i)}(\varepsilon_e^{pl}, h) f_{inst}^{(i)}(\sigma_1) \quad (53)$$

beschrieben werden. Im Rahmen dieses Separationsansatzes liefert die Funktion $f_{nuc}(\varepsilon_e^{pl}, h)$ die Wahrscheinlichkeit der Entstehung eines potenziell kritischen Mikrorisses, während die Funktion $f_{inst}(\sigma_1)$ die Wahrscheinlichkeit der instabilen Ausbreitung eines Mikrorisses beschreibt. Der Parameter V_0 muss aus Dimensionsgründen eingeführt werden, da die Versagenswahrscheinlichkeit eines Volumenelements direkt proportional zu seinem Volumen $dV^{(i)}$ ist.

Die auf Simulationen von Bruchmechanikexperimenten basierende Analyse der lokalen Belastungsverläufe am jeweiligen Spaltbruchursprung der geprüften Proben führte zu der Annahme, dass die Wahrscheinlichkeit $f_{nuc}(\varepsilon_e^{pl}, h)$ der Entstehung potenziell kritischer Mikrorisse durch eine mit abnehmendem Abstand

$$\kappa = ah + b - \ln \varepsilon_e^{pl} \quad (54)$$

zur Versagensgrenzkurve (siehe Abb. 08) ansteigende Funktion der plastischen Vergleichsdehnung ε_e^{pl} und der Spannungsmehrachsigkeit h dargestellt werden kann. Experimentelle Untersuchungen von Gurland [42] sowie McMahon und Cohen [85] zeigten, dass die Mikrorissanzahl in uniaxialen Zugversuchen (d.h. konstante oder nur schwach veränderliche Spannungsmehrachsigkeit) etwa linear mit der akkumulierten plastischen Vergleichsdehnung zunimmt. Basierend auf dieser Erkenntnis kann eine funktionale Abhängigkeit der Funktion $f_{nuc}(\varepsilon_e^{pl}, h)$ von κ definiert werden. So folgt schließlich

$$f_{nuc}(\varepsilon_e^{pl}, h) = Ce^{-ah} \varepsilon_e^{pl} \quad (55)$$

mit den Materialparametern C und a . Damit erhält man eine linear mit der lokalen akkumulierten plastischen Vergleichsdehnung ε_e^{pl} und exponentiell mit der lokalen Spannungsmehrachsigkeit h zunehmende Wahrscheinlichkeit der Entstehung eines potenziell kritischen Mikrorisses innerhalb des Kontrollvolumens dV .

Nimmt man nun an, dass die Instabilität dieser Mikrorisse durch das Griffith-Kriterium (35) beschrieben wird und dass die Größenverteilung der Mikrorisse näherungsweise

durch eine Exponentialverteilung dargestellt werden kann (Faleskog et al. [35], siehe auch Gl. (45) und (46)), so ergibt sich die Funktion

$$f_{inst}(\sigma_I) = e^{-\left(\frac{\sigma_u}{\sigma_I}\right)^2} - e^{-\left(\frac{\sigma_u}{\sigma_{th}}\right)^2} \quad (56)$$

wobei σ_u und der Schwellenwert σ_{th} Materialparameter sind.

Damit kann die akkumulierte Versagenswahrscheinlichkeit der Struktur bis zum Zeitpunkt t_n durch

$$P_f(t_n) = 1 - \exp\left(-\int_{V_{cl}} \frac{1}{V_0} \max_{t_0 \leq t \leq t_n} (f_{nuc}(\varepsilon_e^{pl}, h) \cdot f_{inst}(\sigma_I)) dV\right) \quad (57)$$

beschrieben werden.

In der in Gleichung (57) angegebenen Formulierung ist dieses erweiterte lokale Spaltbruchmodell, ebenso wie das klassische Beremin-Modell [18] oder das Modell von Faleskog et al. [35], hauptsächlich für isotherme Proportionalbelastungen geeignet. Im Rahmen der Bewertung der Spaltbruchwahrscheinlichkeit von Maschinen- und Anlagenkomponenten spielen jedoch nicht selten transiente thermomechanische Belastungen eine Rolle. Diese Belastungspfade zeichnen sich dadurch aus, dass sie signifikante lokale Temperaturänderungen und stark variierenden lokale Beanspruchungszustände mit komplexen Folgen von Be- und Entlastungssituationen verursachen können. Im Falle derartiger Lastgeschichten sind inkrementell formulierte Spaltbruchmodelle von Vorteil (Stöckl et al. [113], Bordet et al. [23], Keim et al. [61]). Die inkrementellen Modelle erlauben eine genauere Berücksichtigung komplexer Belastungsgeschichten, da die Berechnung der Versagenswahrscheinlichkeit bis zu einem gegebenen Zeitpunkt der Lastgeschichte auf der Basis einer Akkumulation von Inkrementen (Zuwachs an Versagenswahrscheinlichkeit) erfolgt, wobei der Zuwachs an Versagenswahrscheinlichkeit jeweils unter den momentanen Bedingungen (im aktuellen Zeitschritt) berechnet wird. Daher wurde neben der direkten Formulierung (57) des erweiterten lokalen Spaltbruchmodells von Hohe et al. ([49], [50]) auch eine inkrementelle Formulierung dieses Modells vorgeschlagen. Zu Herleitung des inkrementellen Modells wird ein Kontrollvolumen dV betrachtet, welches während eines Zeitinkrements dt versagt, wenn die notwendigen Bedingungen erfüllt sind (1. Entstehung eines potenziell kritischen Mikrorisses der Länge l ; 2. Vorliegen eines Spannungszustandes, der gemäß dem Griffith-Kriterium (35) zur Instabilität des Mikrorisses führt). Damit gilt für die Versagenswahrscheinlichkeit des Volumenelements dV zum Zeitpunkt t (Separationsansatz entsprechend Gl. (53))

$$dp(l_c) = dp_{part} dp_{size} \quad (58)$$

wobei dp_{size} die Wahrscheinlichkeit des Vorhandenseins eines Partikels mit einer effektiven Größe von mindestens l_c darstellt, während dp_{part} die Wahrscheinlichkeit des Bruchs dieses Partikels und der verhinderten sofortigen Abstumpfung des entstehenden Mikrorisses beschreibt. Die Größenverteilung der Partikel wird, analog zur direkten Formulierung des Modells, durch eine Exponentialverteilung (vgl. Faleskog et al. [35], [63]) abgebildet. Daher nimmt dp_{size} die in Gleichung (56) angegebene Form an, d.h. $dp_{size} = f_{inst}(\sigma_I)$. Bezüglich der Wahrscheinlichkeit dp_{part} (Entstehung eines potenziell kritischen Mikrorisses durch Partikelbruch) wird postuliert, dass diese eine Funktion der Annäherung an die Versagensgrenzkurve ist. Dann gilt

$$dp_{part} = f(dc) \quad (59)$$

wobei das Inkrement dc entsprechend Abb. 09 als die Summe derjenigen Komponenten der Inkremente $d\varepsilon_e^{pl}$ und dh der plastischen Vergleichsdehnung und der lokalen Spannungsmehrrachsigkeit definiert ist, die normal auf der durch den aktuellen Zustandspunkt \mathbf{Z} laufenden, durch Skalierung der Grenzkurve bestimmten Zustandskurve stehen.

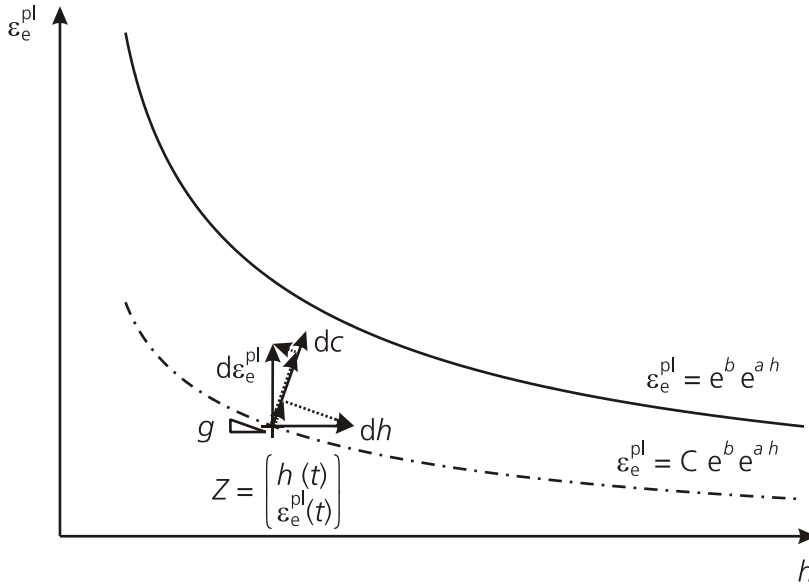


Abb. 09: Inkrement der Annäherung an die Versagensgrenzkurve (Zustandskurve)

Mit der Steigung $g=a\varepsilon_e^{pl}$ der Zustandskurve im aktuellen Zustandspunkt Z (vgl. Abb. 09) gilt dann

$$dc = \frac{1}{(1 + (a\varepsilon_{pl})^2)^{1/2}} (d\varepsilon_e^{pl} - a\varepsilon_e^{pl} dh) \quad (60)$$

Die Definition des funktionalen Zusammenhangs zwischen dp_{part} und dc in Gleichung (60) basiert abermals auf der Erkenntnis, dass bei (nahezu) konstanter lokaler Spannungsmehrrachsigkeit h die Anzahl der Mikrorisse etwa linear mit der akkumulierten plastischen Vergleichsdehnung ε_e^{pl} ansteigt (Gurland [42], McMahon und Cohen [85]). Da für verschiedene, aber jeweils konstante Spannungsmehrrachsigkeiten verschiedene plastische Vergleichsdehnungen bis zur Spaltbruchinitiation akkumuliert werden, muss weiterhin eine Proportionalität von dp_{part} zur Grenzkurve vorliegen.

Damit folgt

$$dp_{part} = \frac{C e^{-ah}}{(1 + (a\varepsilon_{pl})^2)^{1/2}} (d\varepsilon_e^{pl} - a\varepsilon_e^{pl} dh) \quad (61)$$

wobei C eine Proportionalitätskonstante darstellt.

Zusammenfassend erhält man damit die Versagenswahrscheinlichkeit des Volumenelements dV während eines Zeitinkrements von t_{n-1} bis t_n

$$dp(t_n) = \frac{dV}{V_0} f_{nuc}(\varepsilon_e^{pl}, d\varepsilon_e^{pl}, h, dh) f_{inst}(\sigma_I) \quad (62)$$

mit

$$f_{nuc} = \begin{cases} \frac{C e^{-ah} (d\varepsilon_e^{pl} - a\varepsilon_e^{pl} dh)}{(1 + (a\varepsilon_{pl})^2)^{1/2}} & \text{für } d\varepsilon_e^{pl} > 0 \text{ und } \varepsilon_e^{pl} - a\varepsilon_e^{pl} dh > 0 \\ 0 & \text{für } d\varepsilon_e^{pl} = 0 \text{ und } \varepsilon_e^{pl} - a\varepsilon_e^{pl} dh \leq 0 \end{cases} \quad (63)$$

und $f_{inst}(\sigma_1)$ entsprechend Gleichung (56), wobei als aktuelle Werte der Feldgrößen die Werte zum Zeitpunkt $t_{n-0,5}$ betrachtet werden und für die Inkremente der Feldgrößen gilt $d\varepsilon_e^{pl} = \varepsilon_e^{pl}(t_n) - \varepsilon_e^{pl}(t_{n-1})$ bzw. $dh = h(t_n) - h(t_{n-1})$.

Die akkumulierte Ausfallwahrscheinlichkeit der Gesamtstruktur im n -ten Lastschritt erhält man bei Analyse endlicher Zeitschritte Δt mit $\Delta\varepsilon_e^{pl}$ und Δh sowie Volumenelementen $\Delta V^{(i)}$ finiter Abmessungen durch Summation der Elementbeiträge gemäß

$$\Delta P_f(t_n) = 1 - \exp\left(-\sum_{i=1}^{n_{Vi}} \left[f_{nuc}^{(i)}(t_n) \cdot f_{inst}^{(i)}(t_n) \frac{\Delta V^{(i)}}{V_0} \right]\right) \quad (64)$$

und die Verwendung der Rekursionsformel aus Gleichung (44).

Weiterführende Untersuchungen zur Spaltbruchinitiierung wurden auch durch Kroon und Faleskog [64] sowie Wallin und Laukkanen ([118], [119]) durchgeführt. Die experimentellen und numerischen Ergebnisse von Wallin und Laukkanen zeigen, dass für die Partikelbeanspruchung σ_{I-P} (und damit den Partikelbruch und die Mikrodefektentstehung) neben der Matrixdehnung ε_{I-M} auch die Matrixspannung σ_{I-M} von Bedeutung ist:

$$\sigma_{I-P} \approx \sqrt{k E_M \varepsilon_{I-M} \sigma_{I-M}} \quad (65)$$

Die Partikelspannung kann demnach unter gewissen Umständen auf Basis des Produkts von Matrixspannung und Matrixdehnung näherungsweise berechnet werden (Partikel-Formfaktor k). Diese Vorgehensweise wird durch einen Zusammenhang zwischen der Verzerrungsenergiedichte der Matrix und der Verzerrungsenergiedichte des Partikels begründet. Die gewonnenen Erkenntnisse konnten zur Erweiterung eines bestehenden lokalen Spaltbruchmodells (WTS-Modell, Wallin et al. [119]) verwendet werden.

Kroon und Faleskog [64] untersuchten den Rissübergang vom spröden Partikel in die umgebende duktile Matrix. Dazu wurden Simulationsrechnungen für verschiedene Partikelformen und Belastungssituationen durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen weisen auf einen Einfluss der lokalen Spannungsmehrachsigkeit auf den Rissübergang vom Partikel in die umgebende Matrix hin und führen zu einem modifizierten Griffith-Kriterium

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_0} = \left(\frac{\pi E_M \gamma_M}{2(1 - \nu^2) \sigma_0^2 r} \right)^\alpha \cdot f(h) \quad (66)$$

wobei $f(h)$ eine Funktion der Spannungsmehrachsigkeit darstellt und r den Partikelradius bezeichnet.

Weiterhin wurden von verschiedenen Autoren mikromechanische Simulationsrechnungen unter Berücksichtigung der realen polykristallinen Mikrostruktur bainitischer Stähle durchgeführt. Mathieu et al. [83] untersuchten die Spannungsinhomogenitäten in der ferritischen Matrix bei plastischer Deformation im Hinblick auf deren Bedeutung für

lokale Spaltbruchkonzepte. Dazu wurde ein Multiskalenansatz verwendet, wobei zunächst zur Bestimmung der Mean-Field-Materialparameter für das effektive Ferritverhalten ein Volumenelement aus kristallplastisch beschreibbarer Matrix und darin eingelagerten linear-elastischen, kugelförmigen Karbiden betrachtet wurde. Anschließend erfolgten dann Simulationsrechnungen unter Verwendung einer realitätsnahen polykristallinen Mikrostruktur mit mechanischen Eigenschaften der einzelnen Körner (zufällige kristallographische Orientierung) entsprechend dem zuvor bestimmten Mean-Field-Materialgesetz. Dabei wurden die Volumenelemente durch Lastgeschichten mit unterschiedlichen Spannungsmehrachsigkeiten belastet. Deterministische Rechnungen zur Bestimmung des jeweiligen Versagenszeitpunkts (basierend auf dem Griffith-Kriterium) für verschiedene ins Volumenelement projizierte Partikelpopulationen lieferten mit lokalen Spaltbruchmodellen konsistente Wahrscheinlichkeiten für das Versagen eines Kontrollvolumens. Zudem wurde gefolgert, dass der Einfluss der Spannungsmehrachsigkeit die Geometrieabhängigkeit der Spaltbruchwahrscheinlichkeit bei gegebener globaler Last erklären kann. Eine ähnliche Vorgehensweise wählten auch Zhao et al. [125], wobei das mechanische Verhalten der einzelnen Körner im Volumenelement direkt durch ein kristallplastisches Materialmodell beschrieben wurde und die aufgeführten Randbedingungen den mechanischen Bedingungen im inneren einer Rundzugprobe entsprachen. Neben der deterministischen Berechnung der Versagenszeitpunkte des Volumenelements für verschiedene Partikelpopulationen erfolgte auch ein Transfer der Erkenntnisse hinsichtlich der Spannungsverteilung im Volumenelement in ein bestehendes lokales Spaltbruchmodell (Beremin-Modell). Dazu wurde die bis dahin als konstante angenommene Spannung im Kontrollvolumen durch eine Normalverteilung von Spannungen (basierend auf den Simulationsergebnissen) ersetzt. Insgesamt kamen Zhao et al. [125] zu dem Schluss, dass die stochastische Natur des Spaltbruchs durch die Spannungsverteilung auf Kornebene sowie die Verteilung der Partikel (Ort, Größe) charakterisiert werden kann.

Rezaee und Berdin [99] untersuchten die Spannungsverteilung für Karbide in einer polykristallinen Struktur. Die verwendeten 3D-Modelle wurden durch Extrusion von 2D-Mikrostrukturmodellen erzeugt, welche auf regelmäßigen hexagonalen Körnern und an den Korngrenzen positionierten kreisförmigen Karbiden konstanter Größe basierten. Den Körnern, für deren mechanisches Verhalten ein kristallplastisches Materialmodell zum Einsatz kam, wurde eine zufällige kristallographische Orientierungsverteilung zugewiesen, während die Partikel als linear-elastisch und isotrop modelliert wurden. Die Randbedingungen entsprachen plain-strain-Bedingungen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Verteilung der Partikelspannungen durch eine Weibull-Verteilung beschrieben werden kann:

$$F(\sigma_{I-p} \leq \sigma) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma}{\sigma_u(T, \varepsilon_{I-M})}\right)^m\right) \quad (67)$$

wobei der Weibullexponent m unabhängig von Matrixdehnung und Temperatur ist, während der Skalierungsparameter σ_u als Funktion der temperaturabhängigen Fließspannung und der Matrixdehnung darstellbar ist:

$$\sigma_u = \sigma_0(T) + a(T) \cdot (\varepsilon_{I-M})^b \quad (68)$$

Basierend auf der Spannungsverteilung der Karbide wurde ein einfaches lokales Spaltbruchmodell hergeleitet. Außerdem kamen Rezaee und Berdin in einer Vorgängerstudie [98] zu dem allgemeinen Fazit, dass zur Ermittlung einer realitätsnahen Spannungsverteilung der Karbide in einem Kontrollvolumen (zumindest für ferritisch-bainitische Stähle) polykristalline FE-Modelle erforderlich sind.

Ein mikromechanisch motiviertes und formuliertes, aber nicht auf mikromechanischen Simulationen basierendes lokales Spaltbruchmodell wurde von Jikov et al. [57] vorgeschlagen. Das Modell basiert auf einer experimentell ermittelten Defektverteilung (Grö-

Benverteilung beschreibbar durch eine Weibull-Verteilung) und der Annahme, dass die Hautspannungen in einem linear-elastische Partikel mit elastischen Konstanten entsprechend denen der umgebenden elastisch-plastischen Matrix aus den jeweiligen Hauptspannungen und Hauptdehnungen der Matrix (additiver Ansatz) berechnet werden können:

$$\sigma_{\alpha-P} = \sigma_{\alpha-M} + \frac{E_M}{1 + \nu} \varepsilon_{\alpha-M}^{pl} \quad \text{mit } \alpha = I, II, III \quad (69)$$

Das postulierte Kriterium für das Versagen eines Partikels normal zur Richtung der maximalen Hauptspannung basiert auf einer kritischen Verzerrungsenergiedichte, d.h. die Überlebenswahrscheinlichkeit P_s eines Partikels muss mit zunehmender potenziell zur Verfügung stehender Trennungsarbeit abnehmen. Bei der Berechnung von P_s basierend auf der Verzerrungsenergie des Partikels werden implizit die Effekte von plastischer Dehnung und Spannungsmehrsichtigkeit der Matrix berücksichtigt. Im Hinblick auf die effektive Defektgrößenverteilung werden die Defekte in der elastisch-plastischen Matrix durch fiktive Defekte in einer elastischen Matrix ersetzt, wobei eine entsprechende dehnungsabhängige Größenkorrektur stattfindet. Auf diese Weise kann die Reduzierung der Ristriekkraft durch plastische Dissipation berücksichtigt werden. Das Modell liefert ähnliche Ergebnisse wie bestehende Modelle.

2.3.3 Zusammenfassung und Diskussion

Die Bewertung der Spaltbruchgefahr metallischer Werkstoffe kann sowohl mittels makroskopischer (globaler) Konzepte, als auch unter Verwendung mikroskopischer (lokaler) Konzepte erfolgen. Während die erstgenannten Bewertungskonzepte auf einer globalen Belastungsgröße wie K oder J basieren, werden im Rahmen der lokalen Spaltbruchkonzepte die Belastungsgrößen am Ort der Bruchauslösung betrachtet. Sowohl die globalen als auch die lokalen Bewertungskonzepte können entweder deterministischer oder probabilistischer Natur sein. Deterministische Konzepte postulieren eine zwingende Bruchauslösung, sobald die Belastungsgröße einen entsprechenden Materialkennwert überschreitet. Demgegenüber beschreiben probabilistische Konzepte die Wahrscheinlichkeit der Bruchauslösung in Abhängigkeit vom makroskopischen oder mikroskopischen Belastungszustand. Die makroskopischen Konzepte weisen im Einsatz eine hohe numerische Effizienz auf, weil eine detaillierte Analyse des mechanischen Zustands der betrachteten Komponente normalerweise nicht erforderlich ist. Bedenkt man zudem, dass diese Konzepte historisch gesehen die älteren sind, so ist es nachvollziehbar, dass in der bruchmechanischen Bewertungspraxis solche Ansätze häufig verwendet werden. Durch die in entsprechenden Regelwerken (ASME-Code [2], [3], ASTM E 399 [4], E 1921 [5], KTA 3201 [7], etc.) vorgegebene Ermittlung der jeweiligen Materialparameter an Proben mit hoher Dehnungsbehinderung soll dabei die Konservativität der Berechnungsergebnisse sichergestellt werden. Der wesentliche Nachteil makroskopischer Konzepte liegt in der eingeschränkten Übertragbarkeit der Materialparameter auf reale Bauteile unter oft komplexen Beanspruchungszuständen. Diese eingeschränkte Übertragbarkeit führt im Rahmen der praktischen Anwendung oftmals zu deutlichen Überkonservativitäten und damit einer schlechten Ressourcennutzung.

Die lokalen Konzepte ermöglichen aufgrund der dabei stattfindenden Bewertung der Spaltbruchgefahr direkt auf Basis der lokalen mechanischen Feldgrößen am Ort der Spaltbruchauslösung eine im Vergleich zu den makroskopischen Konzepten erhöhte Aussagegenauigkeit. Diese Art der Spaltbruchbewertung hat daher seit der Publikation des Beremin-Modells [18] vor ca. 30 Jahren zunehmend an Bedeutung gewonnen. Die ersten Modelle waren fast ausschließlich auf die Betrachtung der instabilen Ausbreitung vorhandener Mikrorisse beschränkt. Obwohl dies eine starke Vereinfachung im Hinblick auf die bei der Spaltbruchauslösung real ablaufenden Vorgänge darstellt, können solche Modelle grundlegende Effekte, wie z.B. die Temperaturabhängigkeit der

Bruchzähigkeit, zumindest qualitativ beschreiben. Um eine höhere Aussagegenauigkeit zu erreichen, wurden zahlreiche verbesserte Modelle vorgeschlagen (z.B. Faleskog et al. [35], [63]). Diese berücksichtigen auch (in vereinfachter Art und Weise) den Prozess der Mikrorissentstehung aufgrund von Partikelbruch bei plastischer Deformation der ferritischen Matrix. Das von Hohe et al. ([49], [50]) vorgeschlagene erweiterte Spaltbruchmodell erfasst zusätzlich den Einfluss der lokalen Spannungsmehrachsigkeit auf das mögliche Abstumpfen frisch entstandener Mikrorisse. All diese Modelle beruhen jedoch nicht auf detaillierten mikroskopischen Betrachtungen, sodass nur eine vereinfachte Beschreibung der für die Spaltbruchinitiierung relevanten Vorgänge möglich ist. Die Übertragbarkeit bzw. Geometrieunabhängigkeit der anhand von Experimenten an Standard-Bruchmechanikproben ermittelten Material- bzw. Modellparameter auf Proben mit anderer Geometrie und Risstiefe oder reale Bauteile ist oftmals noch eingeschränkt. Demnach existiert für die bestehenden Modelle weiterhin noch Verbesserungspotenzial hinsichtlich der Übertragbarkeit bzw. Geometrieunabhängigkeit der Material- bzw. Modellparameter (Hohe et al. [49]).

Weiterführende Untersuchungen zur Spaltbruchinitiierung liefern die Erkenntnis, dass eine genauere mikromechanische Betrachtung der dabei stattfindenden Vorgänge sinnvoll ist, wenn ein verbessertes lokales Spaltbruchmodell angestrebt wird. Die Ergebnisse von Wallin und Laukkanen ([118], [119]) zeigten, dass für die Partikelbeanspruchung neben der Matrixdehnung auch die Matrixspannung von Bedeutung ist. Kroon und Faleskog [64] untersuchten den Rissübergang vom spröden Partikel in die umgebende duktile Matrix und konnten einen Einfluss der lokalen Spannungsmehrachsigkeit auf den Rissübergang feststellen. Weiterhin wurden von verschiedenen Autoren mikromechanische Simulationsrechnungen unter Berücksichtigung der realen polykristallinen Mikrostruktur bainitischer Stähle durchgeführt. Mathieu et al. [83] untersuchten die Spannungsinhomogenitäten in der ferritischen Matrix bei plastischer Deformation. Es wurde gefolgert, dass der Einfluss der Spannungsmehrachsigkeit die Geometrieabhängigkeit der Spaltbruchwahrscheinlichkeit bei gegebener globaler Last erklären kann. Eine ähnliche Vorgehensweise wählten auch Zhao et al. [125] und kamen zu dem Schluss, dass die stochastische Natur des Spaltbruchs durch die Spannungsverteilung auf Kornebene sowie die Verteilung der Partikel charakterisiert werden kann. Rezaee und Berdin [99] untersuchten die Spannungsverteilung für Karbide in einer polykristallinen Struktur. Die Ergebnisse zeigen, dass die Verteilung der Partikelspannungen durch eine Weibull-Verteilung beschrieben werden kann. Außerdem kamen die Autoren zu dem allgemeinen Fazit, dass zur Ermittlung der Spannungsverteilung der Karbide in einem Kontrollvolumen polykristalline FE-Modelle erforderlich sind [98]. Jikov et al. [57] schlugen vor, die Hauptspannungen in einem Partikel aus den jeweiligen Hauptspannungen und Hauptdehnungen der umgebenden Matrix zu berechnen. Zudem postulierten sie ein Kriterium für das Versagen eines Partikels basierend auf einer kritischen Verzerrungsenergiedichte.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird daher auf der Basis mikromechanischer Untersuchung zur Spaltbruchauslösung ein Vorschlag für ein nochmals erweitertes lokales Spaltbruchmodell erarbeitet und verifiziert. Dieses behandelt die beiden Vorgänge der Entstehung potentiell Spaltbruch auslösender Mikrodefekte und ihre Instabilität getrennt, wobei die Mikrodefektentstehung in zwei Phasen unterteilt wird, den Partikelbruch und den Übergang des durch Partikelbruch entstandenen Mikrorisses in die umgebende duktile ferritische Matrix. Zur Validierung werden das neue lokale Spaltbruchmodell sowie einige der vorgestellten Modelle vergleichend auf eine experimentelle Datenbasis aus bruchmechanischen Experimenten an Standardproben sowie Kreuzbiegeproben geringer Größe, die einen deutlich von den herkömmlichen Bruchmechanikproben abweichenden lokalen Spannungszustand aufweisen, angewendet.

3 Modellwerkstoff

Bei dem im Rahmen der vorliegenden Arbeit betrachteten Werkstoff handelt es sich um einen Druckbehälterstahl bzw. Feinkornbaustahl des Typs 22 NiMoCr 3-7 mit ferritisch-bainitischem Gefüge. Die durchgeführten experimentellen Untersuchungen dienen sowohl der Ermittlung der mechanisch-technologischen und bruchmechanischen Werkstoffeigenschaften, als auch der stochastischen Beschreibung des Aufbaus der Werkstoffmikrostruktur.

Versuche an Rundzugproben (siehe Kap. 3.1.1) liefern die Fließkurven des Werkstoffs im relevanten Temperaturbereich. Diese Fließkurven werden als Eingangsgrößen für die Simulation der Bruchmechanikversuche (siehe Kap. 3.1.2) benötigt. Die Auswertung dieser Simulationsrechnungen ermöglicht die Beschreibung typischer Lastgeschichten (in Form von Spannungs- und Dehnungsverläufen) an den fraktographisch bestimmten Bruchursprüngen (siehe Kap. 3.1.3). Die so ermittelten Lastgeschichten dienen wiederum als Eingangsgrößen (Randbedingungen) für die mikromechanischen Simulationen anhand von Repräsentativen Volumenelementen (RVE) der Werkstoffmikrostruktur. Für eine geeignete Modellierung der RVE ist eine statistische Charakterisierung der Mikrostruktur (Kornstruktur und Partikel) erforderlich. Diese erfolgt durch die Untersuchung von Gefügeschliffen mittels metallographischer Methoden (siehe Kap. 3.2). Mit dem auf Basis der Erkenntnisse aus den RVE-Simulationsrechnungen entwickelten lokalen Spaltbruchmodell kann dann schließlich unter Verwendung der Ergebnisse der Simulationsrechnungen der Bruchmechanikversuche der jeweilige Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit berechnet und mit den entsprechenden experimentellen Ergebnissen (siehe Kap. 3.1.2) verglichen werden.

3.1 Materialcharakterisierung

Dieses Kapitel basiert auf den Kapiteln 3 sowie 4.1.5 und 4.1.6 des Forschungsberichts „Lokale probabilistische Konzepte zur Sprödbruchbewertung bei mehrachsiger äußerer Belastung“ (Hohe, Hardenacke et al. [49]).

Das Material wurde dem zylindrischen Schuss eines Reaktordruckbehälters entnommen (siehe Abb. 11). Dieselbe Werkstoffcharge wurde bereits in zwei Forschungsvorhaben (Hohe et al. [49], [52]) als Modellwerkstoff eingesetzt. Die chemische Zusammensetzung des Materials (untereutektoider Stahl) ist in Abb. 10 angegeben.

	C	Si	Mn	P	S	Ni	Cr	Cu
Max.	0.25	0.20	0.95	0.008	0.009	0.91	0.42	0.04
Min.	0.18	0.17	0.84	0.006	0.005	0.83	0.39	0.03
Mittel	0.22	0.19	0.89	0.007	0.007	0.87	0.40	0.04
	Mo	V	Ta	Co	Al	Sn	As	Sb
Max.	0.59	<0.01	<0.005	0.011	0.027	0.01	0.011	0.002
Min.	0.51	<0.01	<0.005	0.010	0.017	0.005	0.007	0.001
Mittel	0.55	<0.01	<0.005	0.011	0.019	0.008	0.009	0.001

Abb. 10: Chemische Zusammensetzung des Modellwerkstoffs (22 NiMoCr 3-7)

Das Material wurde nach dem Schmieden einer speziellen, mehrstufigen Wärmebehandlung unterzogen. Im ersten Behandlungsschritt erfolgte eine Austenitisierung bei 900°C mit anschließendem Abschrecken in Wasser. Im zweiten Behandlungsschritt wurde das Material bei 650°C über 7.5 Stunden angelassen und dann an Luft abgekühlt.

Modellwerkstoff

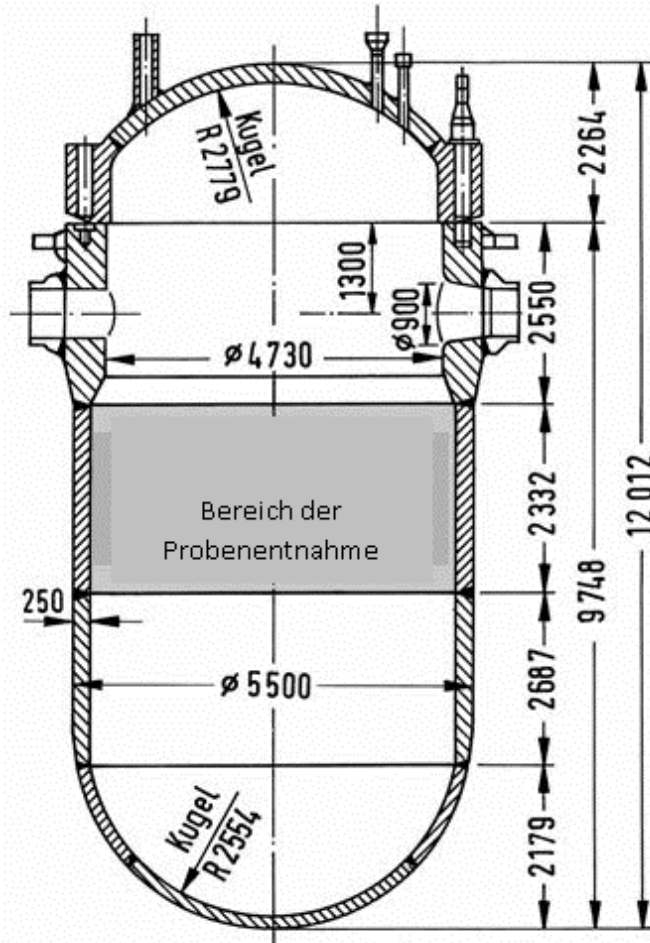


Abb. 11: Entnahme des zur Verfügung stehenden Wandstücks aus dem zylindrischen Schuss des Reaktordruckbehälters (Quelle: MPA Stuttgart).

Im Anschluss an das Plattieren der Innenseite des Druckbehälters wurde dieser einer dem Anlassprozess entsprechenden Wärmebehandlung unterzogen.

3.1.1 Grundcharakterisierung

Im Rahmen eines früheren Forschungsvorhabens (Hohe et al. [52]) erfolgte eine umfangreiche Grundcharakterisierung der mechanischen Eigenschaften des Modellwerkstoffs. Dabei wurden sowohl Mikrostrukturuntersuchungen als auch Glatt- und Kerbzugversuche an Rundproben im Temperaturbereich von $T = -150^\circ\text{C}$ bis $T = 25^\circ\text{C}$ und Kerbschlagversuche durchgeführt. Die Ergebnisse der Rundzugversuche in Form der technologischen Werkstoffdaten nach DIN EN 10002-1 [6] sind in Abb. 12 angegeben. In Abb. 13 sind die logarithmischen Fließkurven für verschiedene Temperaturen dargestellt. Diese stellen eine wichtige Grundlage für die durchzuführenden Finite-Elemente-Simulationsrechnungen dar. Die Dehnratenabhängigkeit des Fließverhaltens wird u.a. von Kucharczyk et al. [66] angegeben und ist in Abb. 14 beispielhaft dargestellt ($T = 20^\circ\text{C}$). Für eine ausführlichere Methoden- und Ergebnisdarstellung hinsichtlich der Grundcharakterisierung des Modellwerkstoffs sei auf die zugehörigen Abschlussberichte der entsprechenden Forschungsvorhaben verwiesen (Hohe et al. [49], [52] und Kucharczyk et al. [66]).

T [°C]	E [GPa]	R _{p0.2} [MPa]	R _m [MPa]	A [%]	Z [%]
+25	226.2	441.1	595.5	21.8	67.3
-10	221.6	457.4	622.8	24.5	66.6
-40	209.5	482.9	655.5	23.6	67.4
-60	220.4	515.4	683.6	23.8	64.7
-100	225.3	594.1	744.0	25.6	63.3
-150	232.6	761.5	851.3	25.1	56.0

Abb. 12: Technologische Werkstoffkennwerte (Mittelwerte aus jeweils vier Versuchen) des Modellwerkstoffs (22 NiMoCr 3-7)

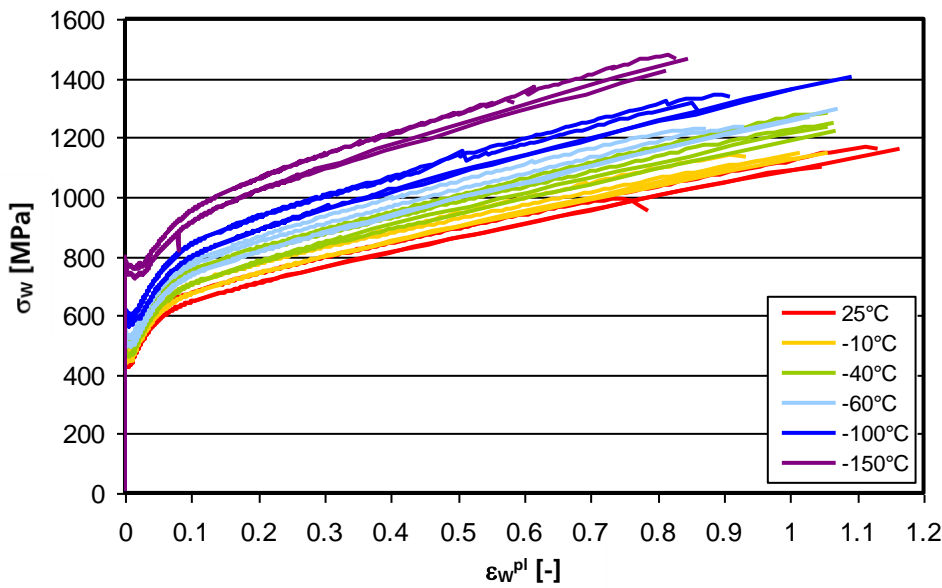


Abb. 13: Fließkurven des Modellwerkstoffs (22 NiMoCr 3-7) für verschiedene Temperaturen

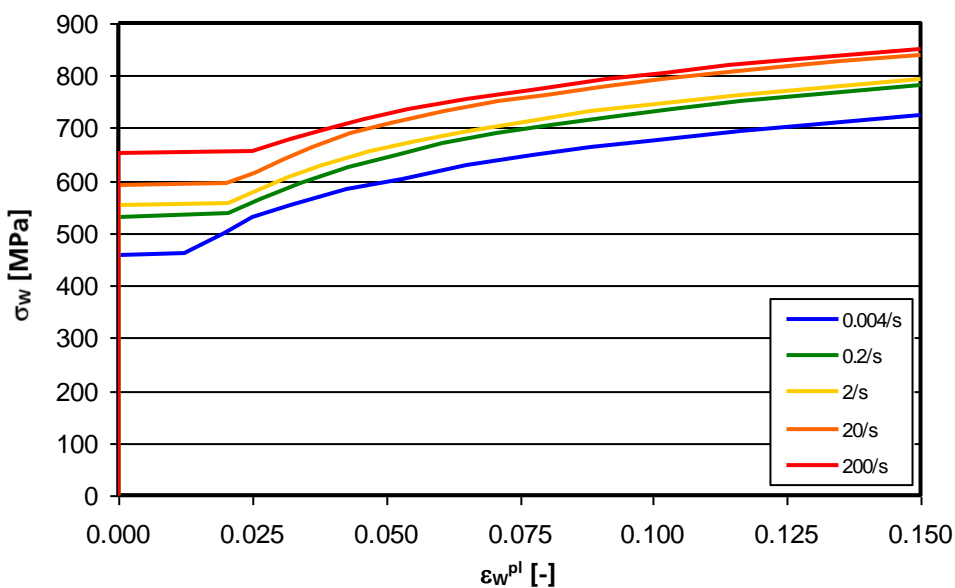


Abb. 14: Fließkurven des Modellwerkstoffs (22 NiMoCr 3-7) für verschiedene Dehnraten, T=20°C

3.1.2 Bruchmechanische Charakterisierung

Im Rahmen der genannten Forschungsvorhaben (Hohe et al. [49], [52]) wurde auch eine umfassende bruchmechanische Charakterisierung des Modellwerkstoffs durchgeführt. Dabei wurden Versuche an C(T) 25- und C(T) 50-Proben, an SE(B) 10x10-Proben mit tiefen (Risstiefenverhältnis $a/W = 0.52$), moderat kurzen ($a/W = 0.18$) und kurzen Rissen ($a/W = 0.13$), sowie an M(T) 100-Proben durchgeführt. Zusätzlich wurden auch überbreite SE(B) 30x10-Proben mit kurzen Rissen geprüft. Zur Erfassung der Effekte einer mehrachsigen äußeren Belastung auf das Spaltbruchverhalten wurden auch Kreuzbiegeproben CR(B) 10x20 mit moderat kurzen ($a/W = 0.15$) und kurzen Rissen ($a/W = 0.08$) geprüft. Der Grundaufbau einer Kreuzbiegeprobe entspricht einer SE(B)-Probe mit zusätzlichen seitlichen Belastungsschenkeln. Diese geometrische Gestaltung erlaubt die Belastung des in der Probenmitte liegenden Prüfbereichs (einseitiger Kurzriss) durch biaxiale Biegung. So entsteht durch die Spannungskomponente längs zur Rissfront ein, im Vergleich zu den Spannungsverhältnissen in Dreipunktbiegeproben, hinsichtlich der Mehrachsigkeit abweichender Spannungszustand. Der resultierende lokale Beanspruchungszustand im Bereich der Rissfront ist vergleichbar mit den Verhältnissen bei Behältern und Rohrleitungen unter Thermoschockbelastung. Bei einer Thermoschockbelastung wird die Rissbeanspruchung hauptsächlich durch die biaxiale Zugbelastungen aufgrund einer behinderten thermischen Schrumpfung verursacht. Die Kreuzbiegeproben erlauben die Einstellung der Beanspruchungsverhältnisse durch eine Variation des Hebelverhältnisses s_1/s_2 . Die verwendeten Probenformen sind in Abb. 15 dargestellt.

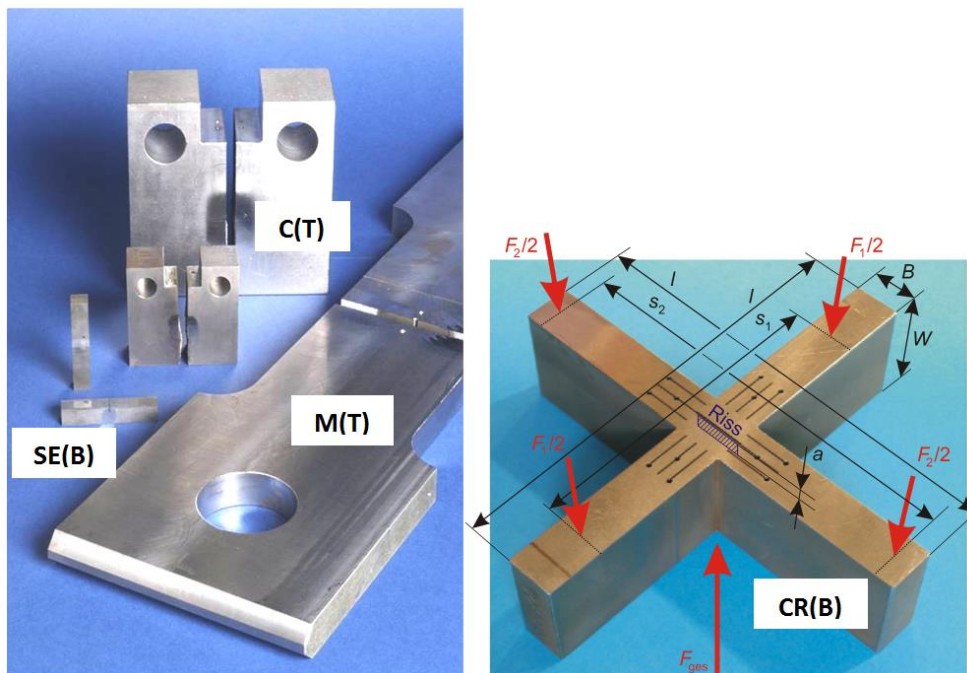


Abb. 15: Verwendete Formen von Bruchmechanikproben

Die Prüfung der Bruchmechanikproben erfolgte für alle normkonformen Probentypen gemäß ASTM E 1921 [5]. Die nicht normkonformen Probentypen (alle Kurzrisssproben und die M(T)-Proben) wurden in Anlehnung an die in dieser Norm festgelegte Vorgehensweise geprüft und ausgewertet. Die Bruchmechanikproben wurden temperaturverteilt im Bereich zwischen $T = -196^\circ\text{C}$ und $T = 0^\circ\text{C}$ geprüft (der Modellwerkstoff ist hinsichtlich seiner Kristallstruktur kubisch raumzentriert und weist daher eine ausgeprägte Temperaturabhängigkeit der Bruchzähigkeit auf, vgl. Kap. 2.2), zum Großteil jedoch im unteren Übergangsbereich zwischen $T = -90^\circ\text{C}$ und $T = -50^\circ\text{C}$. Die genauen Prüfbedingungen und die Einzelergebnisse dieser im Rahmen von früheren Forschungs-

vorhaben durchgeführten Bruchmechanikexperimente sind in den jeweiligen Abschlussberichten (Hohe et al. [49], [52]) dokumentiert. Diese bruchmechanische Datenbasis stellt eine wesentliche Grundlage für die numerischen Untersuchungen zur Herleitung eines verbesserten lokalen probabilistischen Spaltbruchmodells dar. Die auf Basis der Bruchmechanikexperimente bestimmten Bruchzähigkeiten sind in Abb. 16 zusammen mit den 5%-, 50%- und 95%-Bruchwahrscheinlichkeitskurven nach dem Mastercurve-Konzept (ASTM E 1921 [5]) dargestellt. Den Bruchwahrscheinlichkeitskurven liegt dabei eine Referenztemperatur von $T_0 = -65.5^\circ\text{C}$ zu Grunde, welche sich bei einer Auswertung aller an normkonformen Proben (C(T)-Proben und tief gerissene SE(B) 10x10-Proben) ermittelten Bruchzähigkeiten ergibt, die im nach ASTM E 1921 [5] zugelassenen Temperaturbereich $-50^\circ\text{C} < (T - T_0) < 50^\circ\text{C}$ liegen.

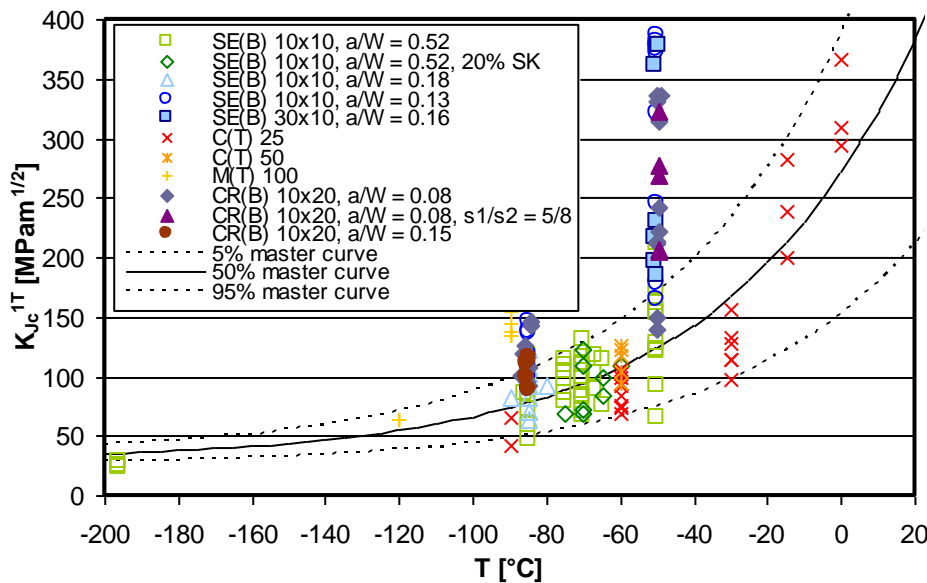


Abb. 16: Bruchmechanische Gesamtdatenbasis, $T_0 = -65.5^\circ\text{C}$ (Quelle: Hohe et al. [49])

Die Ergebnisse zeigen, dass die auf Basis der Versuche an normkonformen Proben typen bestimmten Bruchzähigkeiten überwiegend innerhalb des durch die 5%- und 95%-Fraktile definierten Streubandes liegen, welches 90% aller Messwerte einschließen muss. Demgegenüber liegen die anhand von Versuchen an Kurzrissproben und M(T)-Proben bestimmten Bruchzähigkeiten teilweise deutlich oberhalb des Streubandes, was auf Constraint-Effekte zurückzuführen ist. Diese Constraint-Effekte resultieren aus den unterschiedlichen Probengeometrien und Risstiefen. In Abb. 17 sind die akkumulierten diskreten Versagenswahrscheinlichkeiten P_f der bei $T = -85^\circ\text{C}$ bzw. $T = -90^\circ\text{C}$ geprüften Proben (ohne CR(B) Proben) dargestellt. Weiterhin ist jeweils auch der zugehörige kontinuierliche Verlauf der Versagenswahrscheinlichkeit (für $T = -85^\circ\text{C}$) dargestellt, welcher sich bei Verwendung der individuellen Referenztemperatur (diese erhält man durch eine auf den jeweiligen Probentyp beschränkte Auswertung der Bruchmechanikexperimente) ergibt. Die Referenztemperatur beträgt für die Kurzriss-SE(B)-Proben $T_0 = -76.1^\circ\text{C}$ ($a/W = 0.18$) bzw. $T_0 = -95.9^\circ\text{C}$ ($a/W = 0.13$) und für die M(T)-Proben $T_0 = -105.3^\circ\text{C}$. Betrachtet man die Ergebnisse der SE(B) 10x10-Proben mit verschiedenen Risstiefen, so kann bei einem Risstiefenverhältnis von $a/W = 0.18$ nur ein schwach ausgeprägter Kurzrisseffekt beobachtet werden. Die Proben mit einem Risstiefenverhältnis von $a/W = 0.13$ zeigen jedoch einen deutlichen Kurzrisseffekt, welcher sich durch einen starken Anstieg der gemessenen Bruchzähigkeit K_{Ic} bemerkbar macht. Im Fall der C(T)25-Proben sind aufgrund der für eine stochastische Betrachtung zu geringen Anzahl an experimentellen Ergebnissen (nur zwei Versuche) erkennbare Abweichungen zwischen den experimentell ermittelten und den berechneten Versagenswahrscheinlichkeiten zu beobachten. Auch die Unterschätzung des Anstiegs der Versagenswahrscheinlichkeit für die M(T)-Proben kann so erklärt werden. In diesem Fall wird aber

zumindest der Medianwert der Versagenswahrscheinlichkeit mit guter Genauigkeit wiedergegeben. Insgesamt wird deutlich, dass bei Vorhandensein einer ausreichend großen experimentellen Datenbasis und der Verwendung der jeweiligen individuellen Referenztemperatur die Ergebnisse der Bruchmechanikversuche für die meisten Probentypen gut durch den nach dem Mastercurve-Konzept (ASTM E 1921 [5]) berechneten Verlauf der Versagenswahrscheinlichkeit approximiert werden können. Eine gute Beschreibung des Spaltbruchverhaltens verschiedener Probentypen unter Verwendung einer einheitlichen Referenztemperatur ist jedoch im Allgemeinen nicht möglich.

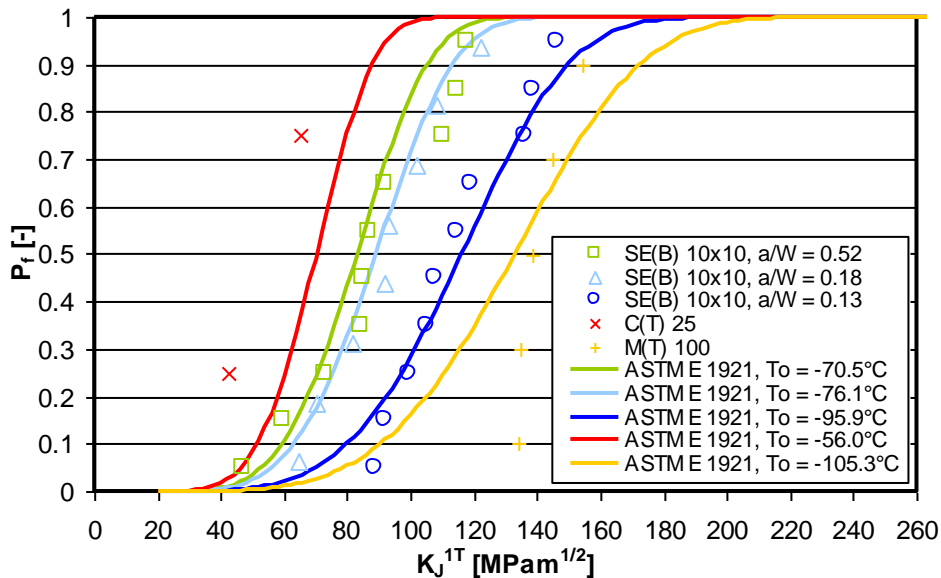


Abb. 17: Bruchwahrscheinlichkeiten der bei $T = -85^\circ C$ und $-90^\circ C$ geprüften Proben (Quelle: Hohe et al. [49])

In Abb. 18 sind die akkumulierten diskreten Versagenswahrscheinlichkeiten der bei $T = -85^\circ C$ geprüften SE(B)- und CR(B)-Proben als Funktion der normierten Referenzbruchzähigkeit K_{Jc}^{1T} dargestellt.

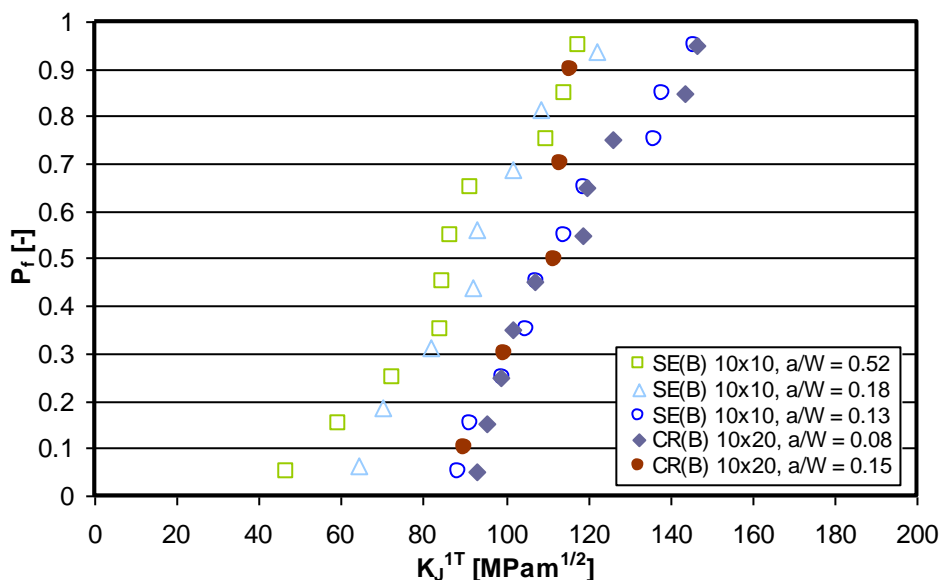


Abb. 18: Akkumulierte Bruchwahrscheinlichkeiten der bei $T = -85^\circ C$ geprüften SE(B)- und CR(B)-Proben (Quelle: Hohe et al. [49])

Die Ergebnisse bezüglich der Kreuzproben zeigen, dass trotz des durch die biaxiale Belastung geänderten Beanspruchungszustands im Rissfrontbereich nur eine leichte Änderung der Bruchzähigkeiten auftritt. Diese Erkenntnis steht in Übereinstimmung mit

experimentellen Ergebnissen von Bass et al. [13]. Hinsichtlich der ermittelten Bruchzähigkeiten besteht zwischen den SE(B) 10x10-Proben mit $a/W \approx 0.13$ und den CR(B) 10x20-Proben mit $a/W \approx 0.08$ eine hohe Übereinstimmung. Gut erkennbar ist jedoch das langsamere Abklingen des Kurzrisseffekts bei den Kreuzproben im Vergleich zu den SE(B)-Proben. Für die SE(B)-Proben liegt bereits bei Kurzrisssproben mit $a/W \approx 0.18$ eine im Vergleich zu tief gerissenen Proben ($a/W \approx 0.52$) ähnliche Bruchzähigkeit vor. Demgegenüber liegen die für Kreuzproben mit $a/W \approx 0.08$ und $a/W \approx 0.15$ ermittelten Bruchzähigkeiten recht nah beieinander.

3.1.3 Fraktographische Untersuchungen

Neben der für jede Probe zur Versuchsauswertung notwendigen Messung der Risslänge erfolgte im Rahmen der früheren Forschungsvorhaben (Hohe et al. [49], [52]) auch die Bestimmung des jeweiligen Bruchursprungs und Bruchmechanismus. Die dazu erforderlichen fraktographischen Untersuchungen der geprüften Proben wurden im Rasterelektronenmikroskop durchgeführt. Zur Lokalisierung des Bruchursprungs wurden dabei die Bruchverlaufslinien bei steigender Vergrößerung zurückverfolgt. Exemplarisch ist dies in Abb. 19 für eine bei $T = -85^\circ\text{C}$ geprüfte Kreuzbiegeprobe mit einer Bruchlast von $K_{Ic} = 145.4 \text{ MPam}^{1/2}$ dargestellt.

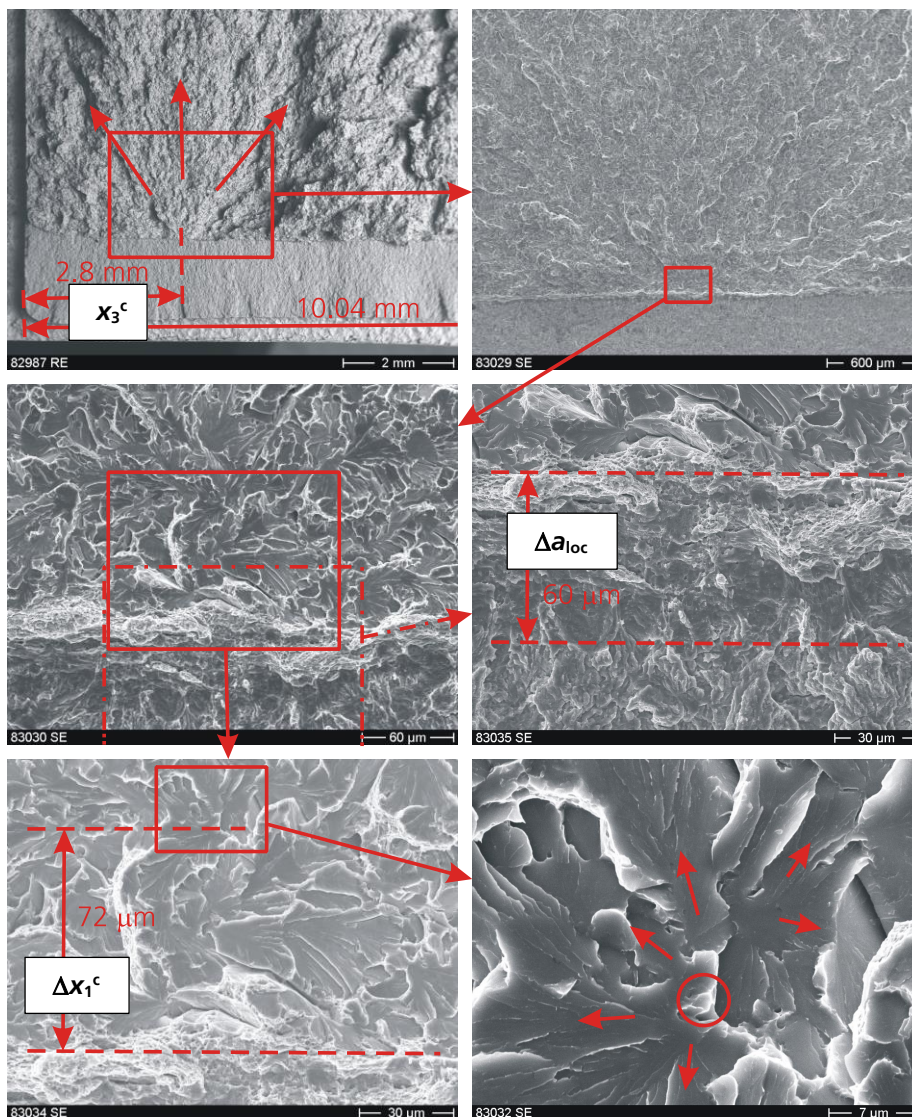


Abb. 19: Fraktographische Untersuchung des Bruchmechanismus und der Lage des Spaltbruchursprungs (RV 39 KX, $T = -85^\circ\text{C}$, $K_{Ic} = 145 \text{ MPam}^{1/2}$)

Zur Festlegung der Position des Bruchursprungs wurden jeweils der Abstand Δx_1^c des Spaltbruchursprungs vom duktilen Saum, der Abstand zur Probenaußenseite (bzw. der sich daraus ergebende Abstand x_3^c zur Symmetrieebene) sowie die lokale Breite Δa_{loc} des duktilen Saums ausgemessen, wobei Δa_{loc} sowohl die Rissfrontabstumpfung („Blunting“) als auch die eigentliche duktile Risserweiterung umfasst.

Das finale Versagen erfolgte in allen Fällen durch reinen transkristallinen Spaltbruch, dem bei höheren Bruchlasten eine duktile Risserweiterung voranging. Der Bruchursprung wurde in den meisten Fällen an Korngrenzen bzw. Korngrenztripelpunkten detektiert. Spröde Partikel direkt am Spaltbruchursprung konnten nicht beobachtet werden, da ein Spaltbruch auslösendes Partikel zumeist nicht auf der Bruchfläche sichtbar ist.

Der Abstand Δx_1^c der Spaltbruchursprünge vom duktilen Saum an der Ermüdungsrissfront ist in Abb. 20 als Funktion der normierten Bruchlast K_{Jc}^{1T} dargestellt. Die individuellen Messwerte sind in [49] angegeben. Erwartungsgemäß kann ein Anstieg des Abstands der Bruchursprünge von der Rissfront mit steigender Bruchlast beobachtet werden.

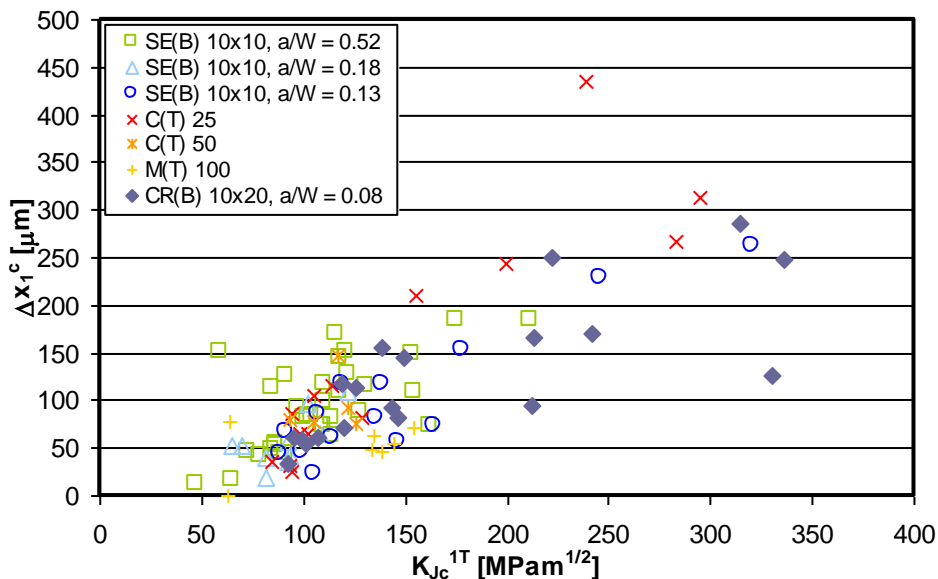


Abb. 20: Abstand der Spaltbruchursprünge von der Rissfront (Quelle: Hohe et al. [49])

Der Betrag $|x_3^c|$ des Abstands der Spaltbruchursprünge von der Symmetrieebene (Probenmitte) ist in Abb. 21 als Funktion der normierten Bruchlast K_{Jc}^{1T} dargestellt bzw. wird in [49] angegeben. Um die Vergleichbarkeit der Messwerte zu garantieren, enthält Abb. 21 nur jene Messwerte, die die Lage der Spaltbruchursprünge der 10 mm dicken Proben beschreiben. Insgesamt ergibt sich ein differenzierteres Bild. Betrachtet man die Werte für tief gerissenen SE(B) 10x10-Proben, so liegen sämtliche Bruchursprünge innerhalb der inneren 80% der Probendicke, d.h. $|x_3^c| < 4$ mm. Im Vergleich dazu beschränkt sich die Lage der Bruchursprünge der Kurzriss-SE(B) 10x10-Proben auf die inneren 60% der Probendicke ($|x_3^c| < 3$ mm).

Hinsichtlich des Einflusses der Bruchlast K_{Jc} kann festgehalten werden, dass bei höheren Bruchlasten die Bruchursprünge tendenziell einen geringeren Abstand zur Probenmitte aufweisen. Dieser Trend ist durch den Zusammenbruch des Dicken-Constraints bei höheren Rissfrontbelastungen K_J erklärbar. Ist die Rissfrontbelastung K_J gering, so liegt für einen weiten Bereich entlang der Rissfront näherungsweise ein ebener Verzerrungszustand vor und der Übergang zum ebenen Spannungszustand auf den seitlichen Probenoberflächen erfolgt in einem vergleichsweise schmalen Bereich. Bei steigender Riss-

frontbelastung und somit auch steigender plastischer Verformung der Probe dehnen sich diese Übergangszonen in Richtung der Probenmitte aus. Dadurch wird der Rissfrontbereich mit dem hinsichtlich der Spaltbruchinitiierung deutlich kritischeren Beanspruchungszustand zunehmend schmaler. Aus diesem Grund weisen die Bruchursprünge der SE(B) 10x10-Proben mit tiefen und kurzen Rissen bei höheren Bruchlasten einen zunehmend geringeren Abstand zur Probenmitte auf.

 Modellwerkstoff

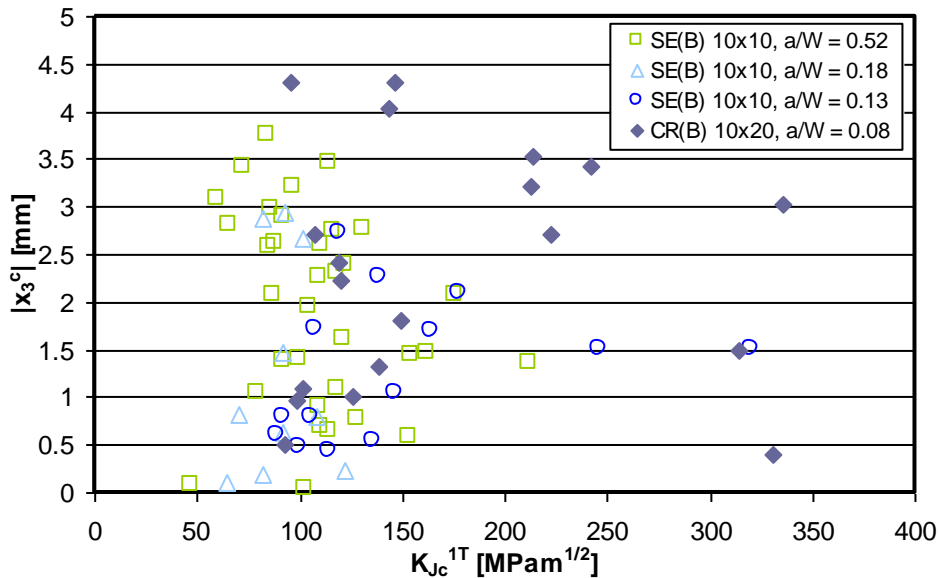


Abb. 21: Abstand der Spaltbruchursprünge von der Probenmitte (Quelle: Hohe et al. [49])

Betrachtet man die Lage der Spaltbruchursprünge der CR(B) 10x20 Kreuzbiegeproben, so fällt auf, dass die Bruchursprünge, über den gesamten Lastbereich gesehen, gleichmäßiger über die Probendicke verteilt sind. Dies ist dadurch zu erklären, dass aufgrund der sekundären Belastungsschenkel während der gesamten Belastungsgeschichte eine hohe Dehnungsbehinderung längs der Rissfront vorliegt. Dadurch wird der dem ebenen Verzerrungszustand ähnliche Zustand auch bei höheren Belastungen über einen weiten Bereich der Rissfront aufrechterhalten.

3.2 Untersuchung der Mikrostruktur

Die innere Struktur von Metalllegierungen ist zumeist mehrphasig (Phasen ggf. selbst inhomogen). In ferritischen Stählen können Zweitphasenteilchen (Partikel) enthalten sein (an den Korngrenzen und in den Körnern). Teilchen, welche bereits in der Schmelze vorhanden sind, nennt man „Einschlüsse“, während Teilchen, die beim Abkühlen der Schmelze durch Diffusion entstehen, als „Ausscheidungen“ bezeichnet werden. Der untersuchte Druckbehälterstahl (22NiMoCr3-7) weist eine ferritisch-bainitische Mikrostruktur auf, bestehend aus Paketen ferritischer Latten, welche in den ehemaligen Austenitkörnern gewachsen sind und nun die neuen Körner darstellen. Besonders an den Korngrenzen befinden sich zahlreiche spröde Partikel, die als potentielle Spaltbruchursprünge agieren. Für eine geeignete Modellierung der Repräsentativen Volumenelemente (RVE) ist eine statistische Charakterisierung der Mikrostruktur (Kornstruktur und Partikel) erforderlich. Daher wurde das Material mittels metallographischer Methoden untersucht.

Rastelektronenmikroskopische (REM) und Electron Backscattering Diffraction (EBSD) Untersuchungen wurden an Schliifproben der T-L-Ebene und der T-S-Ebene durchgeführt (Ebenendefinition siehe Abb. 22).

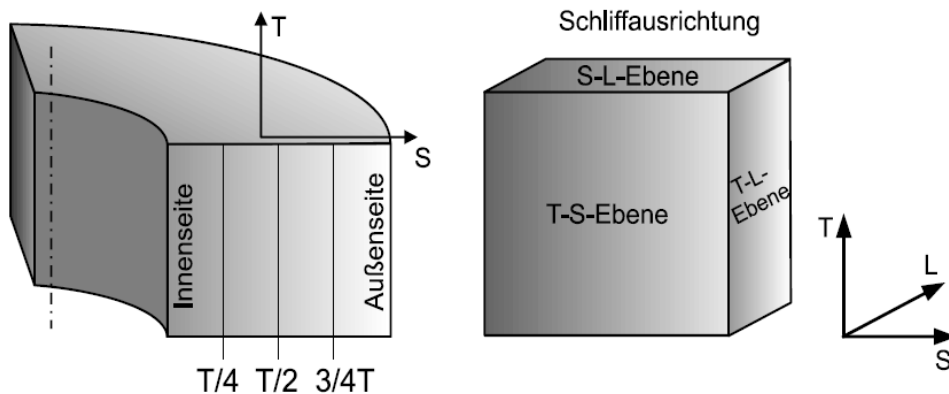


Abb. 22: Ebenendefinition für Schlicffausrichtung (Quelle: Seebich [107])

Die Schlicffproben wurden warm eingebettet. Die mechanische Oberflächenpräparation erfolgte an einer Schleif- und Poliermaschine. Die Proben wurden mit SiC-Papier der Körnung 220 bis Erreichen einer planen Schlicffebenen nass geschliffen. Es folgten Diamantpoliervorgänge mit ölhaltigen Diamantsuspensionen abnehmender Körnung, nämlich $9\mu\text{m}$ (fünf Minuten), $6\mu\text{m}$ (fünf Minuten) und $3\mu\text{m}$ (drei Minuten) auf passenden DP-Dur Tüchern. Für die rasterelektronenmikroskopischen Untersuchungen wurde ein letzter Polierschritt mit einer Diamantsuspension mit $1\mu\text{m}$ Körnung auf einem DP-Plus Tuch durchgeführt. Die Proben wurden schließlich mit dem Ätzmittel Nital geätzt (30 Sekunden). Für die EBSD-Untersuchungen wurden die Schlicffproben ebenfalls mit einer Diamantsuspension mit $1\mu\text{m}$ Körnung auf einem DP-Plus Tuch poliert. Anschließend wurden sie mit kolloidem Siliziumoxid poliert, um eine Oberfläche nahezu verformungsfrei zu erzeugen.

Die rasterelektronenmikroskopischen und EBSD-Untersuchungen wurden mittels eines Feldemissionen-Rasterelektronenmikroskops durchgeführt. Die Proben werden dabei durch einen senkrecht einfallenden Primärelektronenstrahl abgerastert. Die Primärelektronenspannung betrug 20 keV. Durch den Einfall der Primärelektronen auf der Oberfläche werden Sekundärelektronen niedriger Energie erzeugt. Sie werden durch ein schwaches elektrisches Feld an der Oberfläche aufgefangen, durch das Feld der elektrostatischen Linsen beschleunigt und auf dem ringförmigen Sekundärelektronendetektor oberhalb der Objektivlinse fokussiert. Alle Bilder wurden mit gleichen Helligkeits- und Kontrasteinstellungen erzeugt. Die Abb. 23 zeigt eine schematische Darstellung des Aufbaus des EBSD-Detektors und die Anordnung der Probe.

Elektronen, die in der Probe eindringen, werden an jedem Atom im Kristallgitter gebeugt, in allen Richtungen gestreut und treten in Wechselwirkung mit dem Kristallgitter. Die Elektronenwellen, die das Bragg'sche Gesetz erfüllen, werden zurückgestreut. Beim Auftreffen auf einem Phosphorschirm liefern sie ein charakteristisches Beugungsmuster, das Kikuchi-Pattern bezeichnet wird. Zur Kikuchi-Beugung tragen lediglich die Elektronen bei, die einen kurzen Weg im Kristall zurücklegen und daher kaum Energie abgeben, bevor sie rückgestreut werden. Das Untergrundsignal ist hingegen auf die vor ihrer Rückstreuung tiefer eindringenden Elektronen zurückzuführen. Um genügend intensive Kikuchi-Pattern zu erhalten wird bei einer EBSD-Analyse die Probe um 70° gekippt (vgl. Abb. 23) und eine hohe Beschleunigungsspannung des Elektronenstrahls verwendet. Die EBSD-Analyse besteht darin, die Probe durch sukzessive Bewegung des Elektronenstrahls im Punktmodus abzurastern. An jedem Messpunkt werden die entsprechenden Beugungsbilder aufgenommen und ausgewertet. Die jeweiligen Beugungsmuster sind abhängig vom kristallographischen Zustand an der gemessenen Stelle. Die Auswertung der Messung besteht dann in der Bestimmung der Kristallorientierung nach Vorgabe der Kristallsymmetrie und der Gitterparameter. So kann nach

der Messung eine Gefügekarte erstellt werden, da jede Orientierungsänderung lokal das Vorliegen einer Korngrenze bedeutet. Die automatische Auswertung von EBSD-Pattern wird auch als Orientation-Imaging-Microscopy (oder kurz OMI™) bezeichnet.

 Modellwerkstoff

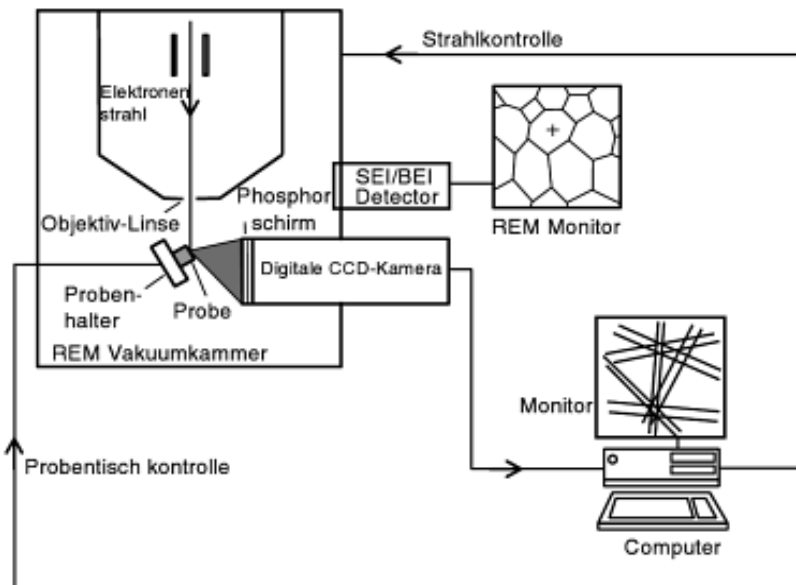


Abb. 23: Schematische Darstellung des Aufbaus des EBSD-Dektors und Anordnung der Probe (Quelle: Gottschein [38])

Die Partikelgröße wurde durch digitale Bildanalyse der am Rasterelektronenmikroskop erzeugten Bilder mit einer dafür geeigneten Bildanalyse-Software ermittelt. Die Bilder wurden binarisiert, wobei die Partikel in weiß erscheinen und die Matrix in schwarz. Durch Erosion und anschließende Dilatation wurden einzelne Partikel mit gemeinsamen Grenzen erkannt (siehe Abb. 24).

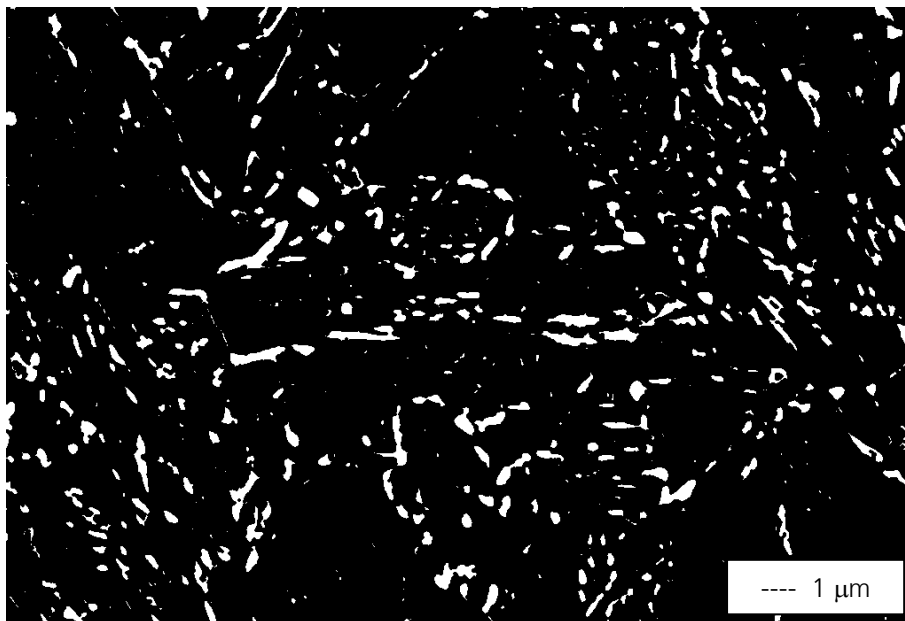


Abb. 24: Digitalisiertes Bild der Mikrostruktur nach Erosion/Dilatation (weißer Kontrast → Partikel)

Die Partikel (weißer Kontrast) wurden im Linienscanverfahren identifiziert. Die Koordinaten der einzelnen Pixel, aus denen jedes Partikel besteht, wurden mit der Bildanalyse-Software automatisch berechnet. Daraus wurden in einem zweiten Schritt die Achsenlängen der an die Partikel angepassten Ellipsen und der äquivalente Kreisdurchmesser

ser der Partikel ermittelt (Details dazu in Kap. 3.2.1 und 3.2.2) und in Form von ASCII-Dateien ausgegeben.

Die anhand von Schlifften ermittelten morphologischen Informationen sind zweidimensionaler Natur. Die reale Mikrostruktur ist jedoch dreidimensional. Das daraus resultierende Problem besteht darin, die geometrischen Zusammenhänge zwischen realer 3D-Struktur und der 2D-Abbildungen dieser Struktur zu bestimmen. Der klassische Zugang zur Lösung dieses Problems sind stereologische Methoden (z.B. Russ and Dehoff [106]), die einen näherungsweise Zusammenhang zwischen zweidimensionalen und dreidimensionalen Strukturmerkmalen herstellen. Da jedoch nicht alle Strukturmerkmale auf diese Weise ermittelt werden können, sind zusätzliche werkstoffspezifische Annahmen erforderlich. Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete Verfahren zur Erzeugung eines realitätsnahen 3D-Modells der Kornstruktur auf Basis der im Folgenden dargestellten Ergebnisse der Schlifffauswertungen wird in Kapitel 4.2.1 vorgestellt.

3.2.1 Stochastische Beschreibung der Kornstruktur

Zur Beschreibung der Kornstruktur müssen zuerst die zusammenhängenden Bereiche gleicher oder sehr ähnlicher kristallographischer Orientierung identifiziert werden, welche die Körner darstellen. Anschließend kann dann eine stochastische Beschreibung der Kornstruktur erfolgen. Im ersten Schritt der metallographischen Untersuchungen wurde daher eine EBSD-Analyse der Mikrostruktur durchgeführt. So konnten Informationen hinsichtlich der Korngrößenverteilung, der Kornform sowie der Kornorientierung (morphologisch und kristallographisch) gewonnen werden. Die Untersuchungen erfolgten an Schlifffproben der T-L-Ebene und der T-S-Ebene (Ebenendefinition siehe Abb. 22) und sind zumeist zusammengefasst dargestellt, da keine wesentlichen Unterschiede bezüglich einzelner Merkmale beobachtet werden konnten.

Während einer EBSD-Analyse wird jedem Rasterpunkt (Pixel) der untersuchten Schlifffoberfläche ein Set von Winkeln zugewiesen (Beschreibung der kristallographischen Orientierung durch die Euler-Winkel $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$; siehe Bunge [27]), welche die kristallographische Orientierung des Pixels im Verhältnis zum globalen Referenzkoordinatensystem definieren. Die Abb. 25 zeigt eine resultierende Inverse Polfigur der typischen Mikrostruktur des betrachteten Materials, in Abb. 26 ist die zugehörige Verteilung der kristallographischen Fehlorientierungen zwischen den einzelnen Strukturbereichen dargestellt. Als Körner werden zusammenhängende Bereiche definiert, die eine kristallographische Fehlorientierungen bis maximal 15° aufweisen (Osipov et al. [91], Mathieu et al. [84]), wobei Bereiche mit weniger als 25 Pixeln auf die Nachbarbereiche aufgeteilt werden können (Groeber et al. [40]). Die kristallographische Fehlorientierung zweier benachbarter Pixel wird dabei definiert (Groeber et al. [40]) durch

$$\theta = \min \left| \cos^{-1} \left\{ \frac{\text{tr}(\mathbf{g}_A \mathbf{g}_B^{-1} \mathbf{O}) - 1}{2} \right\} \right| \quad (70)$$

wobei \mathbf{g}_A und \mathbf{g}_B die Orientierungsmatrizen von Pixel A und Pixel B darstellen, mit

$$\mathbf{g}_i = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & \sin \varphi_2 \sin \Phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & \cos \varphi_2 \sin \Phi \\ \sin \varphi_1 \sin \Phi & -\cos \varphi_1 \sin \Phi & \cos \Phi \end{pmatrix} \quad (71)$$

Die Winkel $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ sind die Euler-Winkel von Pixel i und \mathbf{O} ist der Kristall-Symmetrie-Operator. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass bei kubischer Symmetrie 24 identische Rotationsoperationen existieren, wird als kristallographische Fehlorientierung zweier Kristallgitter der kleinste der möglichen Rotationswinkel gewählt.

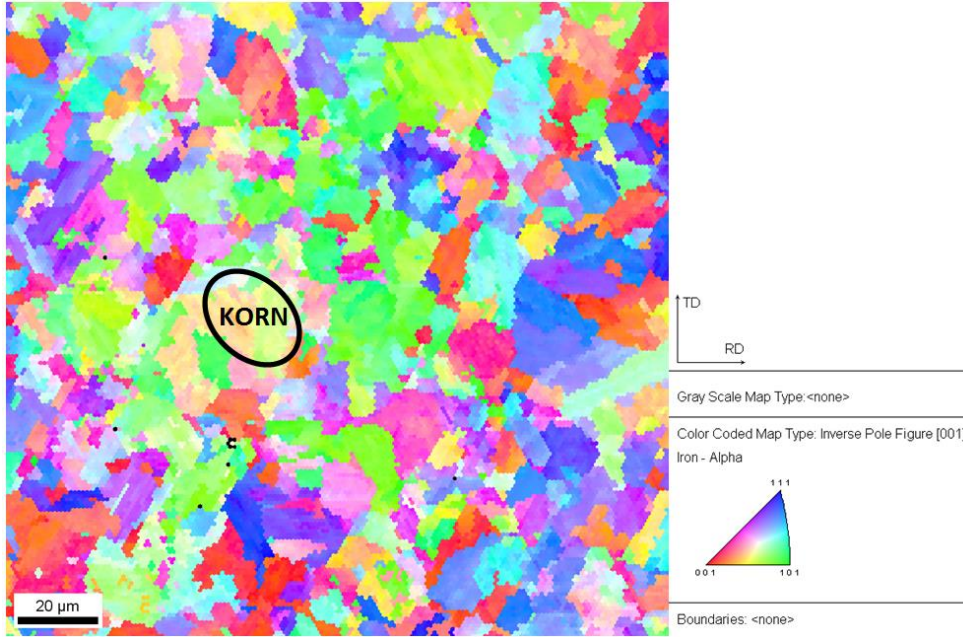


Abb. 25: EBSD-Aufnahme der betrachteten Mikrostruktur, Beispiel für angepasste Ellipse

Die so definierten Körner können anschließend durch in geeigneter Weise angepasste Ellipsen angenähert werden. Diese Vorgehensweise wird von zahlreichen Autoren erfolgreich angewendet (Saylor et al. [107], Brahme et al. [26], Groeber et al. [40], St. Pierre et al. [111]). Es existieren verschiedene Methoden zur Bestimmung solcher Best-Fit-Ellipsen. Im Folgenden wird beispielhaft der least-square-Ansatz von Biggin und Dingley [21] vorgestellt. Die Hauptgleichung bei diesem Ansatz lautet

$$Ax_i^2 + 2Hx_iy_i + By_i^2 + 2Gx_i + 2Fy_i + C = 0 \quad (72)$$

wobei x_i , y_i die Koordinaten der äußeren Eckpunkte der das betrachtete Korn berandenden Pixel darstellen. Das Ziel ist es, den auf den Abständen zwischen der angenommenen Ellipse und allen n Berandungspunkten x_i , y_i basierenden quadrierten Fehler

$$E_S = \sum_{i=1}^n (Ax_i^2 + 2Hx_iy_i + By_i^2 + 2Gx_i + 2Fy_i + C)^2 \quad (73)$$

zu minimieren. Die partiellen Ableitungen von E_S nach den Koeffizienten A , H , B , F und G liefern ein lineares Gleichungssystem zur Berechnung eben dieser Koeffizienten. Mit den bekannten Koeffizienten kann der Winkel α zwischen der lange Halbachse der angepassten Ellipse und der horizontalen Achse (x -Achse) des globalen Auswertungs-koordinatensystems berechnet werden. Es gilt

$$\alpha = \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{2H}{A - B} \quad (74)$$

Die Koordinaten des Mittelpunkts der Ellipse ergeben sich gemäß

$$\bar{x} = \frac{HF - BG}{AB - H^2}, \quad \bar{y} = \frac{GH - AF}{AB - H^2} \quad (75)$$

Um die Längen der Halbachsen a und b zu berechnen, wird zunächst eine Koordinatentransformation in das lokale (durch die Hauptachsen aufgespannte) Koordinatensystem der Ellipse durchgeführt. Mit der Ellipsengleichung $x^2/a^2 + y^2/b^2 = 1$ gilt dann

$$E_H = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{x_i'^2}{a^2} - \frac{y_i'^2}{b^2} \right)^2 \quad (76)$$

Die Bildung der partiellen Ableitungen von E_H nach a^2 und b^2 und anschließendes Nullsetzen dieser Gleichungen liefert ein lineares Gleichungssystem zur Berechnung der Quadrate der Längen der Halbachsen. Ein Beispiel für eine angepasste Ellipse ist in Abb. 25 dargestellt.

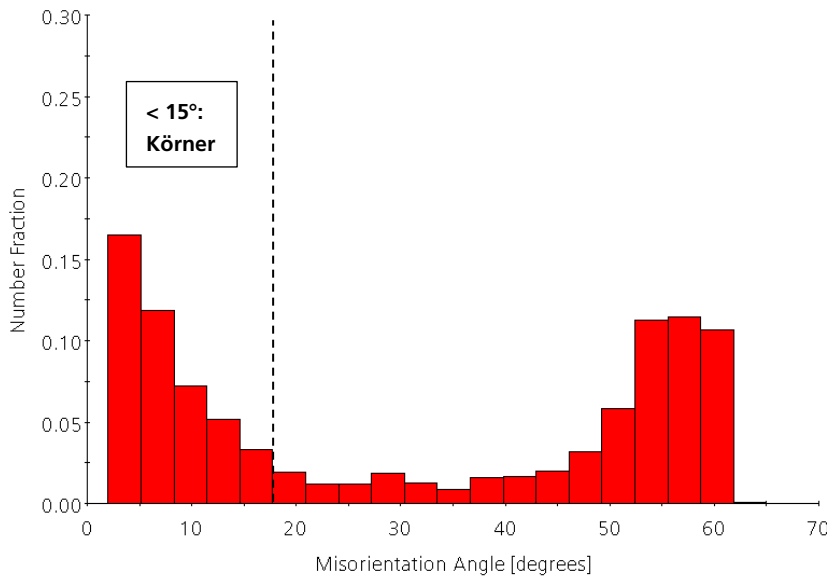


Abb. 26: Verteilung der kristallographischen Fehlorientierung zwischen den Körnern

Basierend auf den morphologischen Informationen in Form von angepassten Ellipsen (lange Halbachse a und kurze Halbachse b) können die Kornorientierungsverteilung, die Korngrößenverteilung sowie die Kornformverteilung (Verhältnis b/a der Halbachsen) der zweidimensionalen Abbildung der Kornstruktur bestimmt werden.

Die Kornorientierung wird durch den Winkel definiert, den die lange Halbachse der angepassten Ellipse mit der x -Achse bzw. y -Achse des Auswertungskoordinatensystems bildet. Die Ergebnisse sind in Abb. 27 dargestellt. Es wird deutlich, dass annähernd eine Gleichverteilung der Orientierungen vorliegt, d.h. die zweidimensionale Orientierungsverteilung deutet darauf hin, dass keine morphologische Vorzugsorientierung innerhalb der Struktur existiert. Diese Beobachtung steht in guter Übereinstimmung mit den Ausführungen von Tanguy [115], der annimmt, dass für den betrachteten Werkstoff aufgrund der Wärmebehandlung weder eine kristallographische noch eine morphologische Textur vorliegt.

Die Korngröße kann durch den der Ellipsenfläche A_E zugeordneten äquivalenten Kreisradius $r_{eq}=(A_E/\pi)^{0.5}$ beschrieben werden. Die Ergebnisse sind in Abb. 28 dargestellt (normiert auf die durchschnittliche Korngröße). Die Korngrößen sind erkennbar nicht normalverteilt, es existiert eine erhöhte Anzahl unterdurchschnittlich großer Körner. Daher lässt sich die Korngrößenverteilung wesentlich besser durch eine logarithmische Normalverteilung mit der Dichtefunktion

$$p(R) = \frac{k}{\sqrt{\pi}R} \exp\left(-k^2 \left(\ln\left(\frac{R}{R_M}\right)\right)^2\right) \quad (77)$$

beschreiben, mit $R=r/r_{eq}$ und $k=1.25$ sowie $R_M=0.80$. Die mittlere Korngröße (Durchmesser $d_{eq}=2r_{eq}$) beträgt $d_{av}\approx 11.2\mu\text{m}$. Die Beschreibung der Korngrößenverteilung durch eine logarithmische Normalverteilung wird auch von Groeber et al. [40] vorgeschlagen.

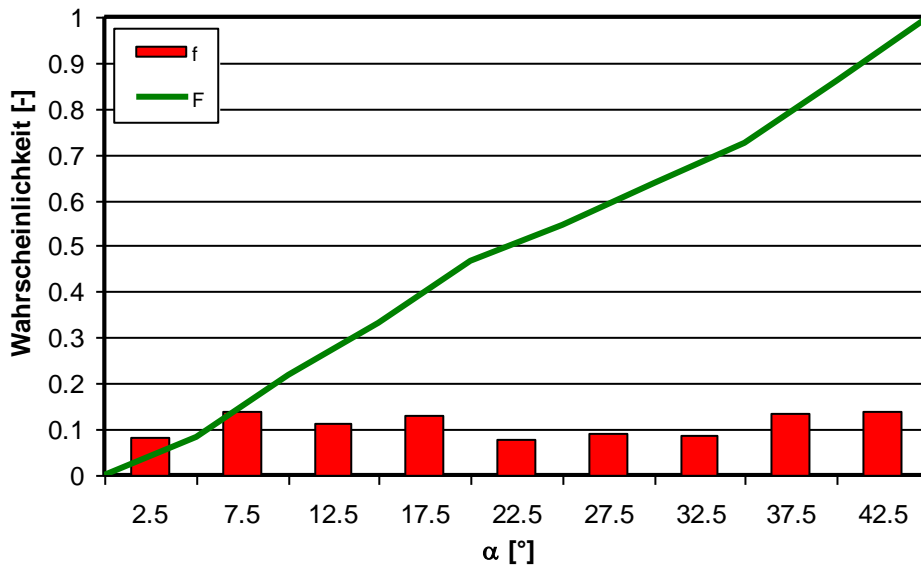


Abb. 27: Morphologische Orientierungsverteilung (Wahrscheinlichkeitsfunktion f und Verteilungsfunktion F) der Körner

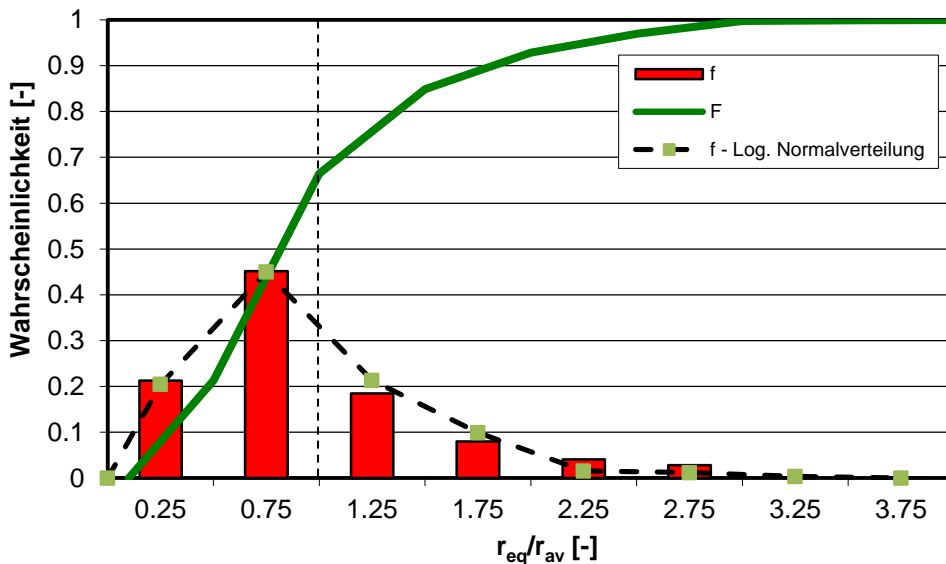


Abb. 28: Größenverteilung (Wahrscheinlichkeitsfunktion f und Verteilungsfunktion F) der Körner; Fit durch Log. Normalverteilung

Die Kornform kann durch das Verhältnis b/a der Halbachsen der angepassten Ellipse in geeigneter Weise beschrieben werden. Die Abb. 29 zeigt die resultierenden Ergebnisse bezüglich der Kornformverteilung. Die Form der Körner erweist sich dabei als relativ kompakt (keine extremen Halbachsenverhältnisse), was durch die Schlibfbilder bestätigt wird. Dennoch liegen praktisch keine kugelförmigen Körner vor. Die typische Kornform wird demnach bei einem Mittelwert von $b/a=0.45$ durch leicht bis mittelstark gestreckte Körner mit Halbachsenverhältnissen von $b/a=0.6$ bis $b/a=0.3$ repräsentiert. Eine Korrelation zwischen Korngröße und Kornform konnte für den untersuchten Werkstoff nicht festgestellt werden.

Die Ergebnisse hinsichtlich Kornorientierung, Korngröße und Kornform stehen in guter Übereinstimmung mit aus der Literatur bekannten Angaben für ähnliche Werkstoffe (Osipov et al. [91], Mathieu et al. [83]).

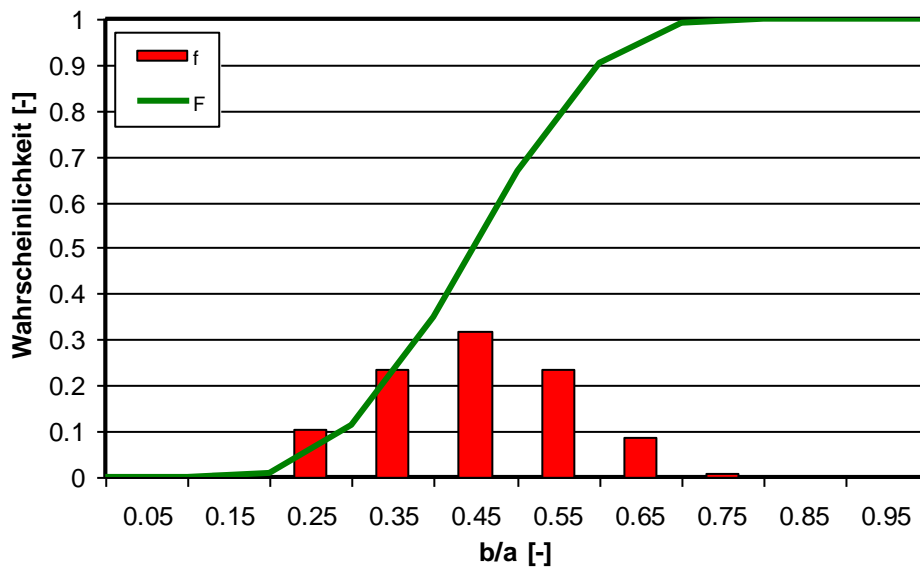


Abb. 29: Formverteilung (Wahrscheinlichkeitsfunktion f und Verteilungsfunktion F) der Körner

Die kristallographischen Informationen einer EBSD-Auswertung liefern die Orientierungsverteilung (Abb. 30) und die Fehlorientierungsverteilung (Abb. 31) der Kornstruktur. Die kristallographische Orientierungsverteilung einer Kornstruktur ist dabei ein Maß für die makroskopische Textur des Materials.

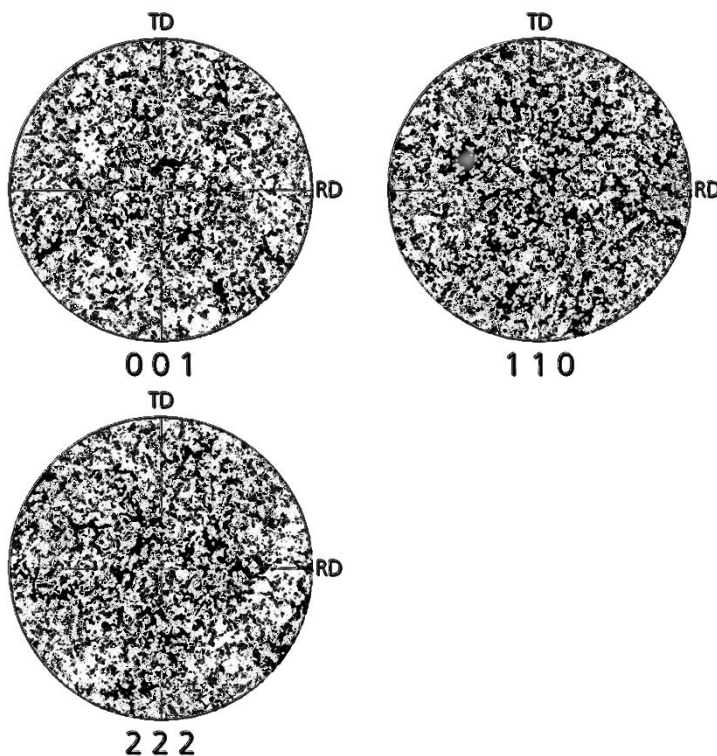


Abb. 30: Kristallographische Orientierungsverteilung der Körner: Polfiguren

Hinsichtlich der kristallographischen Orientierung kann keine eindeutige Vorzugsorientierung festgestellt werden. Dieses Ergebnis deckt sich mit den Erkenntnissen anderer Autoren (Osipov et al. [91], Mathieu et al. [83]) und stützt die Annahme (Tanguy [115]), dass für den betrachteten Werkstoff aufgrund der Wärmebehandlung weder eine kristallographische noch eine morphologische Textur vorliegt.

Die kristallographische Fehlorientierung definiert die Abweichung der kristallographischen Achsen zweier benachbarter Körner gemäß Gleichung (70). Die Fehlorientierungsverteilung beeinflusst demnach die Inhomogenität der Spannungen und Dehnungen innerhalb der Kornstruktur. Zur Bestimmung der Fehlorientierungsverteilung in Abb. 31 werden die einzelnen Fehlorientierungen mit dem jeweils zugehörigen Anteil an der Gesamt-Korngrenzenfläche (bzw. Korngrenzenlänge in 2D) gewichtet.

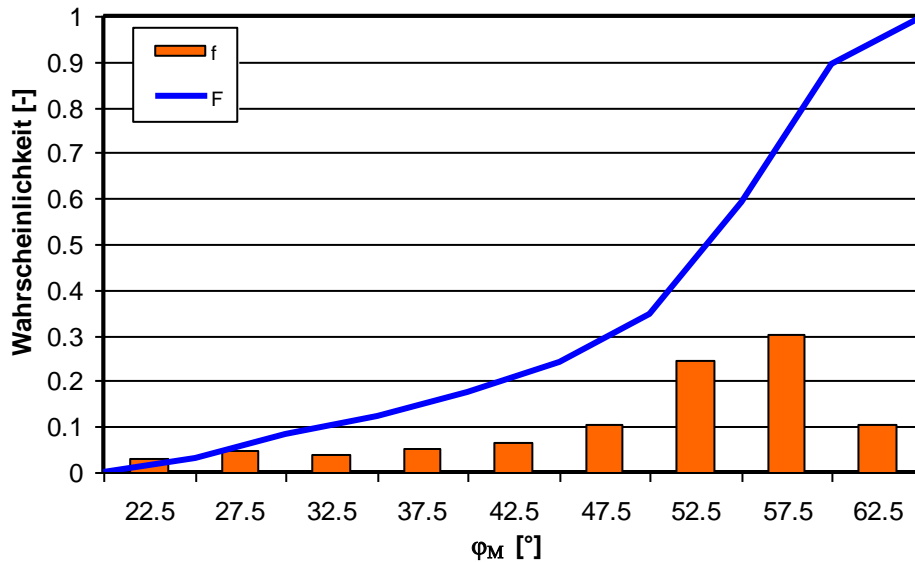


Abb. 31: Fehlorientierungsverteilung (Wahrscheinlichkeitsfunktion f und Verteilungsfunktion F) der Kornstruktur

Es zeigt sich, dass im Wesentlichen Fehlorientierung von 40-62° zwischen den Körnern vorliegen (Fehlorientierungen bis 15° liegen zwischen den ferritischen Latten innerhalb der Körner vor), mit der maximalen Wahrscheinlichkeitsdichte bei ca.60° (nahe der maximalen Fehlorientierung für *krz*-Kristalle). Diese Verteilung ist typisch für Körner mit kubischem Gitter und zufälliger kristallographischer Orientierung (Osipov et al. [91]). Die Fehlorientierungen innerhalb der Kornstruktur sind demnach nicht durch eine Normalverteilung oder gar eine Gleichverteilung beschreibbar. Eine Korrelation zwischen Kornmorphologie und kristallographischer Orientierung kann für den untersuchten Werkstoff nicht festgestellt werden.

3.2.2 Stochastische Beschreibung der Partikel

Bei den im betrachteten Referenzwerkstoff (22NiMoCr3-7) vorhandenen Partikeln handelt es sich hauptsächlich um Einschlüsse aus Mangansulfid (MnS) sowie zwei Arten von Ausscheidungen, Molybdänkarbide (Mo_2C) und Eisenkarbide (Fe_3C). Die Eisenkarbide treten vorwiegend in den bainitischen Bereichen auf, dabei häufig auch an den Korngrenzen. Demgegenüber findet man die Molybdänkarbide vermehrt in ferritischen Bereichen. Hinsichtlich Form und Größe kann für die Eisenkarbide typischerweise eine länglich gestreckte Form bei einem mittleren äquivalenten Kreisdurchmesser in einer Größenordnung von $d_{eq} \approx 0.2 \mu m$ beobachtet werden, während die Molybdänkarbide nadelartig geformt sind, mit $d_{eq} \approx 0.05 \mu m$ (Seebich [108]).

Neben der stochastischen Beschreibung der Kornstruktur müssen auch die innerhalb der Mikrostruktur vorhandenen Partikel möglichst genau beschrieben werden, da nach den bisherigen Erkenntnissen (Bowen et al. [25], Gurland [42], Lindley et al. [75]) die Partikelkonstellation einen wesentlichen Einfluss auf die Mikrodefektentstehung hat.

Daher wurde eine REM-Analyse durchgeführt, um die Partikelgrößenverteilung sowie die Partikelformverteilung zu bestimmen. Die Abb. 32 zeigt eine typische REM-Aufnahme der Mikrostruktur des betrachteten Materials.

Modellwerkstoff

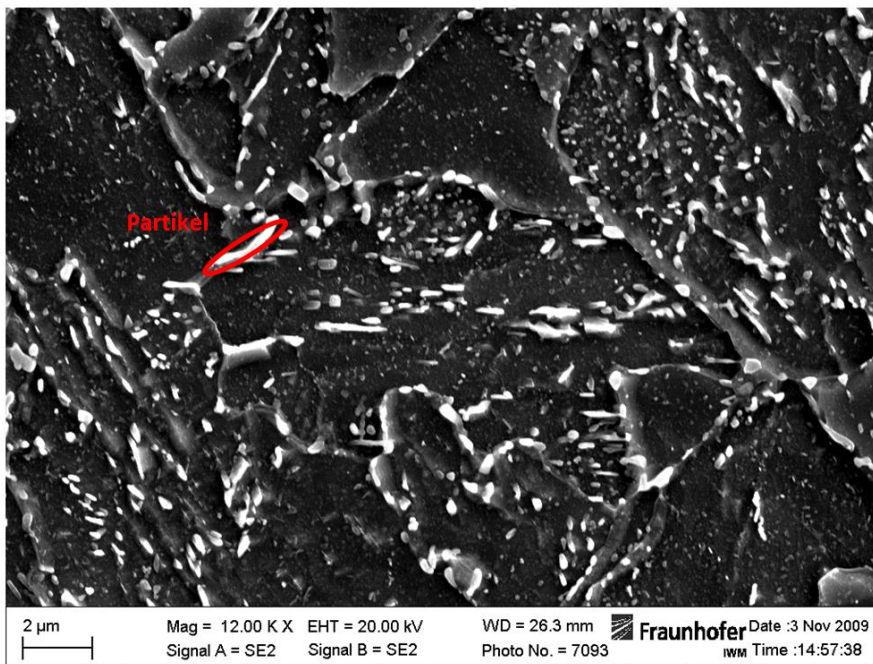


Abb. 32: REM-Aufnahme der betrachteten Mikrostruktur, Beispiel für Partikel und zugehörige Best-Fit-Ellipse

Die Anpassung der Best-Fit-Ellipsen für die Partikel erfolgt mittels eines Achtecks. Dieses sogenannte umschreibende Achteck wird derart über das Partikel gelegt, dass sich Randfragmente des Kornes sowohl außerhalb als auch innerhalb des Achtecks befinden können, wobei ein geeignetes Fehlermaß (Quadratsumme der Abstände zwischen den Randsegmenten von Achteck und Korn) minimiert wird. Anschließend kann eine Ellipse unter erneuter Minimierung eines entsprechenden Fehlermaßes an das Achteck angepasst werden (vgl. Kap. 3.2.1).

Basierend auf den morphologischen Informationen in Form von angepassten Ellipsen (lange Halbachse a und kurze Halbachse b) können die Partikelgrößenverteilung sowie die Partikelformverteilung (Verhältnis b/a der Halbachsen) bestimmt werden (siehe Abb. 33 und Abb. 34). Die Partikelgröße kann durch den der Ellipsenfläche zugeordneten äquivalenten Kreisdurchmesser beschrieben werden. Die Ergebnisse zeigen, dass ein Großteil der Partikel einen äquivalenten Durchmesser von weniger als $0.25\mu\text{m}$ aufweist, es treten jedoch auch einige Partikel mit einer Größe von deutlich über $1\mu\text{m}$ auf (siehe Größenverteilung in Abb. 33). Die mittlere Partikelgröße beträgt $d_{eq}\approx 0.18\mu\text{m}$. Dieser Wert steht in guter Übereinstimmung mit aus der Literatur bekannten Angaben für einen ähnlichen Werkstoff (Ortner et al. [90], Seebich [108]). Die Verteilung der Partikelgröße kann mit guter Genauigkeit durch eine Weibull-Verteilung abgebildet werden. Die zugehörige Verteilungsfunktion ist gegeben durch

$$F(d_{eq}) = 1 - \exp\left(-(\alpha \cdot d_{eq})^\beta\right) \quad (78)$$

mit den Parametern $\alpha=5.10$ und $\beta=0.92$. Es sei angemerkt, dass die Weibullverteilung für $\beta=1$ in die Exponentialverteilung übergeht, welche von Faleskog et al. [35] zur Beschreibung der Partikel- bzw. Defektgrößenverteilung vorgeschlagen wird. In diesem Fall gilt $\alpha=5.62$, die Anpassungsqualität ist jedoch etwas schlechter. Grundsätzlich besteht ein Einfluss der minimalen erfassbaren Partikelgröße auf die Parameter der Größenverteilung, die sehr kleinen ($d_{eq}<0.020\mu\text{m}$) und daher im Rahmen dieser Studie nicht erfassten Partikel sind jedoch für die Spaltbruchinitiierung nicht relevant.

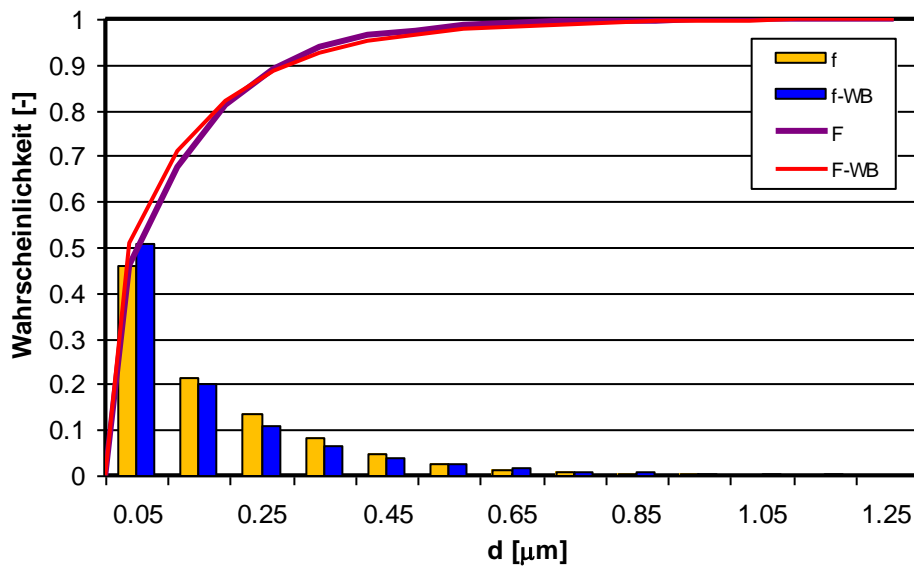


Abb. 33: Größenverteilung (Wahrscheinlichkeitsfunktion f und Verteilungsfunktion F , Fit durch Weibull-Verteilung) der Partikel

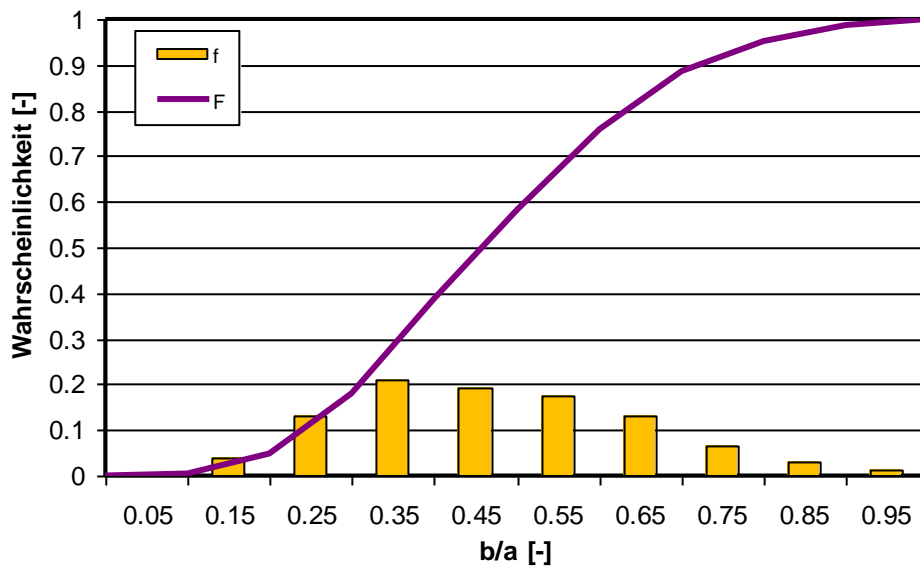


Abb. 34: Formverteilung (Wahrscheinlichkeitsfunktion f und Verteilungsfunktion F) der Partikel

Die Partikelform wird durch das Verhältnis b/a der Halbachsen der angepassten Ellipse in geeigneter Weise beschrieben. Abb. 34 zeigt die resultierenden Ergebnisse bezüglich der Partikelformverteilung. Es liegen hauptsächlich erkennbar gestreckte Partikel vor, nahezu kugelförmige Partikel sind selten. Die Spanne der Partikelformen wird im Wesentlichen durch leicht bis stark gestreckte Partikel mit Halbachsenverhältnissen von $b/a=0.85$ bis $b/a=0.15$ repräsentiert, bei einem Mittelwert von $b/a=0.47$. Hinsichtlich der Partikelorientierung konnte keine Vorzugsorientierung festgestellt werden.

3.3

Zusammenfassung und Diskussion

Die durchgeführten experimentellen und metallographischen Untersuchungen liefern sowohl die mechanisch-technologischen und bruchmechanischen Werkstoffeigenschaften, als auch die erforderlichen Informationen zur stochastischen Beschreibung des Aufbaus der Werkstoffmikrostruktur.

Die Fließkurven des Werkstoffs werden als Eingangsgrößen für die Simulation der Bruchmechanikversuche verwendet (siehe Kap. 4.1). Die Auswertung dieser Simulationsrechnungen ermöglicht die Beschreibung typischer Spannungs- und Dehnungsverläufe an den fraktographisch bestimmten Bruchursprüngen. Die so ermittelten Lastgeschichten dienen als Grundlage zur detaillierten Ermittlung und stochastische Beschreibung der zur Spaltbruchauslösung führenden Belastungs- und Deformationssituationen, welche wichtige Eingangsgrößen (Randbedingungen) für die mikromechanischen Simulationen anhand von Repräsentativen Volumenelementen (RVE) der Werkstoffmikrostruktur (siehe Kap. 4.2) darstellen.

Die EBSD-Analyse liefert sowohl morphologische als auch kristallographische Informationen bezüglich der Kornstruktur. Die Körner weisen eine erkennbare Streckung auf, so dass zur genauen Beschreibung der Kornstruktur neben der Größenverteilung auch die Formverteilung der Körner berücksichtigt werden sollte. Hinsichtlich der Größenverteilung ist zu beachten, dass die Korngrößen eindeutig nicht normalverteilt sind. Es existiert eine erhöhte Anzahl von Körnern, die kleiner sind als die mittlere Korngröße, was z.B. durch eine log. Normalverteilung abgebildet werden kann. Im Hinblick auf die kristallographischen Eigenschaften der Kornstruktur muss besonders der Fehlorientierung zwischen den einzelnen Körnern Beachtung geschenkt werden. Eine realitätsnahe Fehlorientierungsverteilung erlaubt lediglich eine geringe Bandbreite häufig auftretender Werte. Die aus der REM-Analyse erhaltenen morphologischen Informationen bezüglich der Partikel machen deutlich, dass die oftmals im Rahmen von local-approach Formulierungen angenommenen kugelförmigen Partikel im betrachteten Werkstoff nur sehr selten auftreten. Daher sollten die Partikel auf der Basis von Ellipsen mit verschiedenen Halbachsenverhältnissen modelliert werden. Für die Approximation der Größenverteilung der Partikel kann eine Weibullverteilung verwendet werden. Die stochastischen Informationen hinsichtlich des Mikrostrukturaufbaus liefern die Eingangsgrößen für die Erzeugung der Mikrostrukturmodelle (RVE), wobei die zweidimensionalen Morphologiedaten noch in dreidimensionale Informationen umgewandelt werden müssen. Ein dazu geeignetes Verfahren wird in Kapitel 4.2.1 vorgestellt.

4 Finite-Elemente-Simulationsrechnungen

Die Finite-Elemente-Simulationsrechnungen ermöglichen die Ermittlung von mehrachsig-igen lokalen Lastgeschichten, die nachweislich zur Bruchauslösung geführt haben. Die Analyse des Einflusses dieser lokalen Lastgeschichten auf Verhalten der Mikrostruktur (auf Basis von RVE-Rechnungen) dient der Herleitung eines local-approach-Modells. Die durchgeführten Finite-Elemente-Simulationsrechnungen umfassen demnach sowohl die makroskopische (Bruchmechanikexperimente, siehe Kap. 4.1) als auch die mikroskopische (RVE der Werkstoffmikrostruktur, siehe Kap. 4.2) Größenskala.

Die Auswertung der Simulationsrechnungen der Bruchmechanikexperimente ermöglicht die Beschreibung typischer Lastgeschichten (in Form von Spannungs- und Dehnungsverläufen) an Orten innerhalb des Bereichs der im Rahmen der experimentellen Untersuchungen (siehe Kap. 3) fraktographisch bestimmten Bruchursprünge. Die auf diese Weise ermittelten lokalen Lastgeschichten dienen als Randbedingungen für die mikromechanischen Simulationsrechnungen auf Basis von Repräsentativen Volumenelementen der Werkstoffmikrostruktur. Das Ziel dieser mikromechanischen Simulationsrechnungen ist ein erweitertes Verständnis der bei der Spaltbruchauslösung stattfindenden Vorgänge. Dazu werden sowohl die erforderlichen Bedingungen für den Partikelbruch, als auch die Voraussetzungen für einen erfolgreichen Übergang des durch Partikelbruch entstandenen Mikrorisses in die umgebende duktile Matrix unter Verwendung einer FE-Submodelltechnik untersucht. Zusammen mit der aus den RVE-Simulationsrechnungen bekannten Streuung der Feldgrößen an den Korngrenzen bei gegebenem effektiven Beanspruchungszustand (Lokale Lastgeschichte) kann auf diese Weise die Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch und erfolgreichen Rissübergang in die Matrix näherungsweise berechnet werden. Auf der Basis dieser Erkenntnisse wird anschließend in Kapitel 5 ein erweitertes, mikromechanisch basiertes Spaltbruchmodell formuliert.

4.1 Numerische Analyse der Bruchmechanikexperimente

Die Ergebnisse der Versuche an Bruchmechanikproben mit kurzen und tiefen Rissen bilden eine umfangreiche experimentelle Datenbasis (Hohe et al. [49], [52]). Diese Datenbasis ermöglicht die Ermittlung verschiedener statistisch repräsentativer Szenarien für die im Rahmen der mikromechanischen Simulationsrechnungen zu betrachtenden Belastungssituationen des repräsentativen Volumenelements (RVE) der Mikrostruktur des Werkstoffs.

Die Finite-Elemente-Simulationen der Bruchmechanikexperimente werden durchgeführt, um die lokalen Beanspruchungs- und Deformationszustände an potenziellen Spaltbruchinitiierungsorten zu ermitteln. Die Simulationsergebnisse liefern somit Informationen bezüglich der bei den verschiedenen Probentypen zur Spaltbruchinitiierung führenden lokalen Belastungssituationen. Durch die Betrachtung von verschiedenen Standardproben und Kreuzbiegeproben wird eine umfangreiche Datenbasis an nachweislich zur Spaltbruchauslösung führenden lokalen Belastungsgeschichten in Form der zeitlichen Entwicklung aller Komponenten des Spannungstensors und des Dehnungstensors verfügbar. Die Kreuzbiegeproben stellen dabei eine wichtige Ergänzung der experimentell-numerischen Datenbasis dar, da im Ligament dieser Proben deutlich andere Verhältnisse vorliegen als bei bruchmechanischen Standardproben (Hohe et al. [49]).

4.1.1 Finite-Elemente-Modelle

Um eine Auswertung der Bruchmechanikexperimente im Hinblick auf die lokalen Beanspruchungs- und Deformationszustände sowie die jeweils zugehörige Entwicklung der relevanten Feldgrößen am Bruchursprung zu ermöglichen, müssen alle Versuche numerisch mittels der Methode der Finiten Elemente simuliert werden (Programmcode: ABAQUS [1]). Im Rahmen der FE-Simulationen werden die Bruchmechanikproben unter Ausnutzung der geometrischen Symmetrien durch voll integrierte 8-Knoten-Volumenelemente mit tri-linearem Verschiebungsansatz diskretisiert (ABAQUS-Elementtyp C3D8). Dabei werden entlang der Symmetrieebenen die Verschiebungen normal zur jeweiligen Ebene auf Null gesetzt. Als Beispiel ist in Abb. 35 das FE-Modell einer C(T)25-Probe dargestellt.

Finite-Elemente-
Simulationsrechnungen

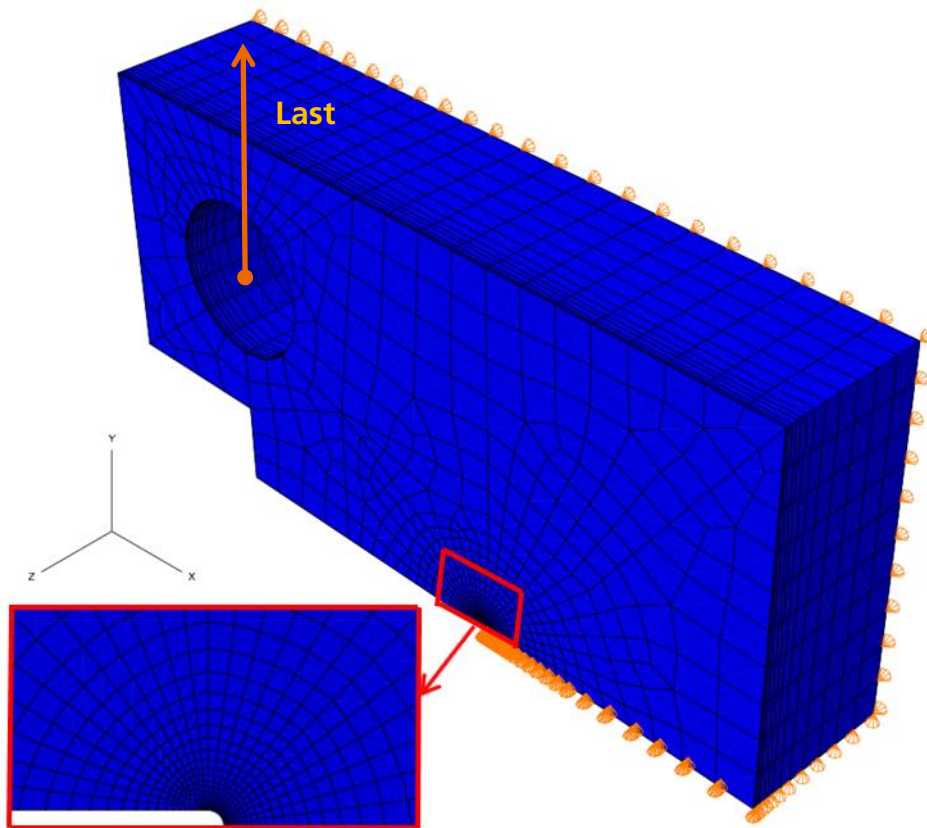


Abb. 35: FE-Modell einer C(T)25-Probe; Detail: FE-Netz in der Umgebung der Rissfront

Der Rissfrontbereich muss extrem fein vernetzt werden, damit die in diesem Bereich vorliegenden steilen Spannungs- und Dehnungsgradienten mit guter Genauigkeit abgebildet werden können. Jenseits der direkten Rissfrontumgebung kann eine deutlich gröbere Diskretisierung erfolgen. Eine solche Vernetzung kann durch radiales, rissfrontfokussiertes Netz realisiert werden, wobei aus Gründen der numerischen Stabilität die Rissfront nicht als scharfe Rissfront, sondern ausgerundet als Kerbe mit einem Kerbradius von $5\mu\text{m}$ modelliert wird. Die Rissfrontvernetzung ist als Detail in Abb. 35 dargestellt. Um der für jede Probe spezifischen Risskonfiguration (Risstiefe und Rissfrontkrümmung) gerecht zu werden, müssen die Proben dabei mit dem jeweils im Rahmen der fraktographischen Untersuchungen ausgemessenen Verlauf der Rissfront modelliert werden. Die Berücksichtigung der Rissfrontkrümmung erfolgt durch Variation der Knotenpositionen ausgehend von einem Basisnetz, so dass die Netztopologie in allen Fällen identisch ist.

Das Materialverhalten der Proben wird als elastisch-plastisch modelliert, wobei für den elastischen Anteil das Hooke'sche Gesetz und für den plastischen Anteil das v. Mises'sche Fließmodell mit isotroper Verfestigung verwendet wird. Die erforderlichen Materialparameter können auf Basis der Ergebnisse der Rundzugversuche, welche im Rahmen der Grundcharakterisierung des Materials durchgeführt wurden, ermittelt werden (siehe Abb. 12 und Abb. 13 in Kap. 3.1.1). Dabei erfolgt eine leichte Glättung der Messwerte hinsichtlich des Temperatureffekts. Ein dem Spaltbruch vorausgehendes duktilen Risswachstum wird im Rahmen der FE-Modellierung durch ein sukzessives Lösen der Randbedingungen für die Knoten im Ligament entsprechend der experimentellen Risswiderstandskurve (Abb. 36) realisiert (relevant für die bei $T = -50^{\circ}\text{C}$ geprüften Proben, für die bei $T = -85^{\circ}\text{C}$ geprüften Proben tritt nur sehr geringes duktilen Risswachstum auf). Die gegebenenfalls (für Biegeproben) erforderliche Lagerung sowie die verschiebungsgesteuerte Belastung der FE-Modelle der Bruchmechanikproben wird durch als Starrkörper modellierte Zylinder umgesetzt. Die Wechselwirkung zwischen Starrkörper und Bruchmechanikprobe wird dabei mittels eines bilateralen Kontaktmodells (Penalty-Verfahren) modelliert. Der Kontakt wird mit einem Reibungskoeffizienten von $\mu = 0.001$ als nahezu reibungsfrei angenommen. Die Analysen werden als geometrisch nichtlineare Simulationsrechnungen unter Berücksichtigung großer Deformationen durchgeführt.

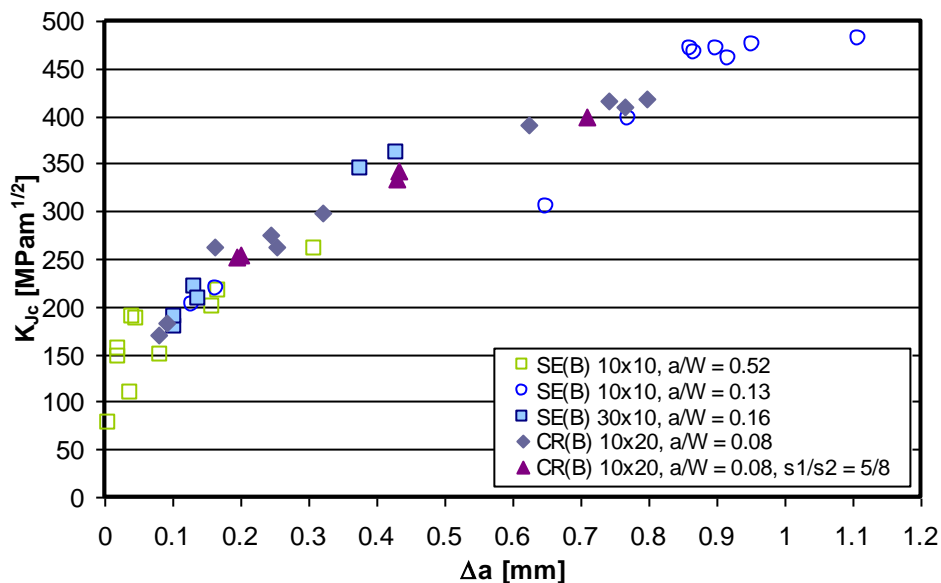


Abb. 36: Risswiderstandskurve des Referenzwerkstoffs (22NiMoCr3-7) bei $T = -50^{\circ}\text{C}$ (Quelle: Hohe et al. [49])

4.1.2 Lokale Lastgeschichten

Die fraktographischen Analysen der vorhandenen Bruchmechanikproben (siehe Kap. 3.1.3) und die Ergebnisse der FE-Simulationen der zugehörigen Bruchmechanikexperimente (siehe Kap. 4.1.1) ermöglichen eine detaillierte Bestimmung und stochastischen Beschreibung der zur Spaltbruchinitiierung führenden lokalen (makroskopischen) Belastungs- und Deformationssituationen. In Rahmen dieser Untersuchungen erfolgt für alle Simulationsrechnungen eine Auswertung der Entwicklung sämtlicher Spannungs- und Dehnungskomponenten an den anhand der Bruchmechanikproben auf Basis der fraktographischen Untersuchungen ermittelten repräsentativen Orten für die Spaltbruchinitiierung. Zur Erfassung der erforderlichen Daten aus den Ergebnissen der FE-Simulationsrechnungen und die Interpolation auf die relevanten Orte und Zeitpunkte kommt eine geeignete Auswertungsroutine zum Einsatz, welche eine zeitlich lineare und örtlich bi-lineare Interpolation entsprechend der Element-Formfunktion durchführt. Basierend auf den so gewonnen Erkenntnissen können verschiedene statistisch reprä-

sentative Szenarien für die im Rahmen der mikromechanischen Simulationsrechnungen (siehe Kap.4.2) zu betrachtenden Belastungssituationen bestimmt werden.

 Finite-Elemente-
 Simulationsrechnungen

Um den verschiedenen lokalen Belastungs- und Deformationssituationen, im Folgenden Lastgeschichten genannt, eine Auftrittswahrscheinlichkeit zuweisen zu können, wird eine statistische Auswertung der Ergebnisse der fraktographischen Untersuchungen zur Lage der Bruchsprünge durchgeführt. Dazu werden zunächst alle Bruchsprungspunkte auf die jeweilige Probenmittelebene projiziert. Diese Vereinfachung führt hinsichtlich der Lastgeschichten nur zu geringen Beeinträchtigungen, da die Bruchsprünge im Wesentlichen in den inneren 80% der Probenbreite liegen (siehe Abb. 21) und in diesem Bereich die Gradienten der Feldgrößen in Probendickenrichtung sehr gering sind (Hohe et al. [49]). Anschließend werden die Bruchsprünge entsprechend der jeweils zugehörigen Bruchlast K_j in Klassen eingeteilt. Jede der Klassen entspricht dabei einem geeignet zu wählenden K_j -Intervall und wird durch den jeweiligen Intervallmittelwert bezeichnet. Für die vorliegende Datenbasis werden fünf Klassen definiert (zwischen $K_j=50\text{MPam}^{1/2}$ und $K_j=300\text{MPam}^{1/2}$). Innerhalb der Klassen erfolgte eine aufsteigende Sortierung der Bruchsprünge entsprechend ihrem jeweils bekannten Abstand Δx_1 zur Rissfront (siehe Abb. 20:), dann werden die zugehörigen akkumulierten Wahrscheinlichkeiten bestimmt: $F_i=(i-0.5)/n$ mit $i=1\dots n$ und $n=\text{Anzahl der Bruchsprünge im Intervall}$.

Anschließend wird für die so bestimmten Datensätze jeweils eine angepasste analytische Verteilungsfunktion in Form einer Weibull-Verteilung (siehe Gleichung (78)) ermittelt. Die Ergebnisse sind in Abb. 37 dargestellt.

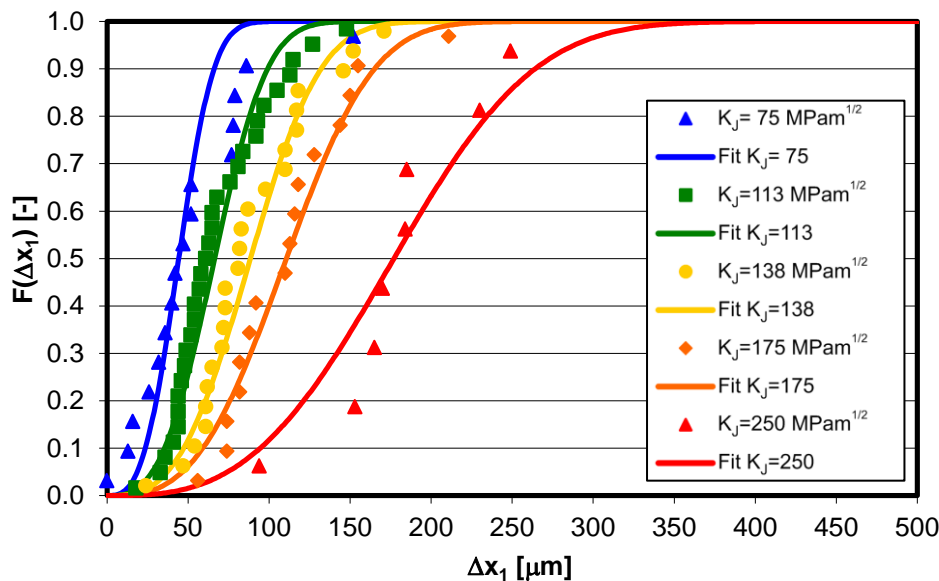


Abb. 37: Verteilungsfunktionen der Abstände der Spaltbruchsprünge von der Rissfront für verschiedene Bruchlasten K_j (Anmerkung: Jeder Datenpunkt stellt einen Rissprung einer Probe dar, alle Probenformen und Temperaturen wurden berücksichtigt)

Unter Verwendung der somit bekannten Verteilungsfunktionen der Abstände der Spaltbruchsprünge von der Rissfront für verschiedene K_j können Wahrscheinlichkeitsbereiche für diese Abstände bestimmt werden, siehe Abb. 38.

Die Wahrscheinlichkeitsbereiche werden dabei durch entsprechende Grenzkurven der akkumulierten Wahrscheinlichkeit dargestellt. Zur Bestimmung einer solchen Grenzkurve müssen zunächst die zur betrachteten Wahrscheinlichkeit gehörenden Werte von Δx_1 für die verschiedenen Bruchlastklassen (hier: fünf Klassen mit den Mittelwerten $K_j=75\text{MPam}^{1/2}=K_1$, $K_j=112.5\text{MPam}^{1/2}=K_2$, $K_j=137.5\text{MPam}^{1/2}=K_3$, $K_j=175\text{MPam}^{1/2}=K_4$, $K_j=250\text{MPam}^{1/2}=K_5$) entsprechend der jeweiligen Verteilungsfunktion (Abb. 37) berechnet werden. Im vorliegenden Fall sollen drei Grenzkurven (10%, 50% und 90%)

bestimmt werden. Daher werden die Werte $\Delta x_1(F=0.10)$, $\Delta x_1(F=0.50)$ und $\Delta x_1(F=0.90)$ jeweils für die fünf Bruchlastklassen berechnet. Die Grenzkurve für XX% erhält man durch Wahl einer geeigneten Ausgleichsfunktion für die Datenpunkte $\Delta x_1(F=0.XX, K_I)$ mit $i=1, \dots, 5$. Für den betrachteten Datensatz wird ein stückweise linearer Ansatz gewählt. In Abb. 38 sind die Grenzkurven für 10%, 50% und 90% akkumulierte Wahrscheinlichkeit dargestellt, wobei im Bereich hoher Bruchlasten ($K_I > 250 \text{ MPam}^{1/2}$) aufgrund der geringen Datenbasis nur eine Abschätzung des Verlaufs der Grenzkurven erfolgen kann. Insgesamt zeigt sich, dass tatsächlich etwa 80% der Bruchsprünge (EXP) im durch die angegebenen Grenzkurven vorhergesagten Streuband liegen. Damit kann für jede Bruchlast die Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Abstand des Bruchsprungs von der Rissfront mit ausreichender Genauigkeit bestimmt werden.

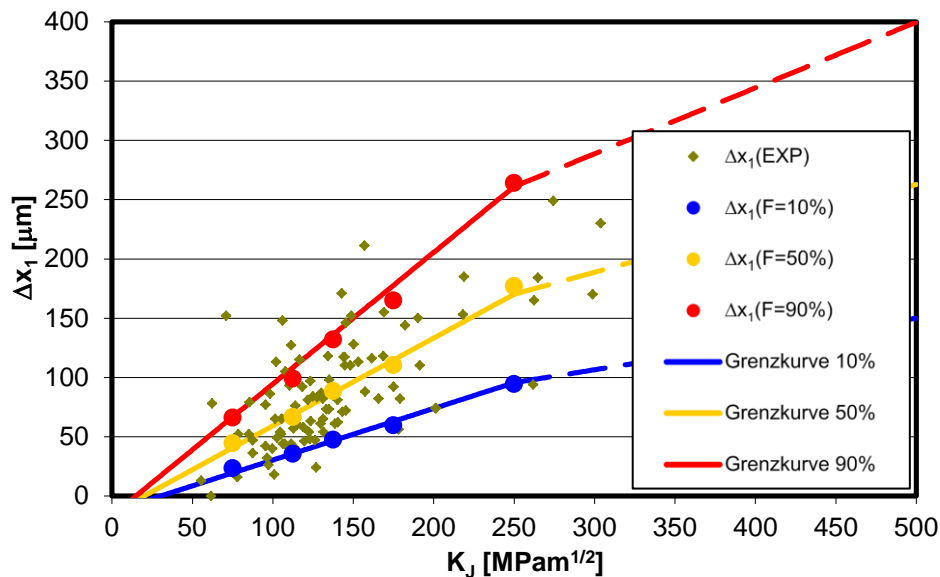


Abb. 38: Wahrscheinlichkeitsbereiche der Abstände der Spaltbruchsprünge von der Rissfront in Abhängigkeit von der Bruchlast K_I

Basierend auf diesen Erkenntnissen können repräsentative Auswertungspunkte für die lokalen Lastgeschichten festgelegt werden. Dazu werden die Abstände Δx_1 entsprechend 10%, 50% und 90% akkumulierter Wahrscheinlichkeit verwendet, jeweils für ein Bruchlast K_{Ic} mit 10%, 50% und 90% akkumulierter Auftretswahrscheinlichkeit gemäß den experimentellen Ergebnissen für den betrachteten Probentyp. Die Untersuchungen (9 Lastgeschichten je Probentyp, 5 Probentypen) wurden für jeweils zwei Temperaturen [$T=-85$ (bzw. -90) $^{\circ}\text{C}$ und $T=-50$ (bzw. -60) $^{\circ}\text{C}$, M(T)-Proben nur $T=-90$ $^{\circ}\text{C}$] durchgeführt, die qualitativen Aussagen sind jedoch vergleichbar. Daher werden nur ausgewählte, exemplarische Ergebnisse dargestellt. Abb. 39 und Abb. 40 zeigen die Feldgrößenverläufe für eine SE(B)-Probe mit $a/W=0.52$ für $K_I(90\%)$ und $\Delta x_1(50\%)$.

In den Abb. 39 und Abb. 40 sind die Verläufe (bis zur Bruchlast $K_I(90\%)$) der wesentlichen Komponenten des Spannungs- und des Dehnungstensors sowie die Mises-Vergleichsspannung σ_e , die hydrostatische Spannung σ_h und die plastische Vergleichsdehnung ε_e^{pl} dargestellt. Die x - bzw. x_1 -Richtung entspricht dabei der Richtung normal zur Rissfront, die y - bzw. x_2 -Richtung der Richtung senkrecht zur Rissebene (Lastrichtung) und die z - bzw. x_3 -Richtung der Probendickenrichtung (vgl. Abb. 35).

Es zeigt sich, dass der lokale Spannungszustand erwartungsgemäß eine hohe Spannungsmehrachsigkeit $h=\sigma_1/\sigma_e$ aufweist (typischerweise $1.5 < h < 3.0$). Aufgrund der hohen Mehrachsigkeit des Spannungszustands erreicht die maximale Hauptspannung σ_1 im Laufe der Lastgeschichte Werte von mehr als 1500MPa. Es sei angemerkt, dass die Spannungskomponente σ_{22} hier weitgehend der maximalen Hauptspannung entspricht. Hinsichtlich der Dehnungen (dargestellt sind die Gesamtdehnungen ε_{ij}) ist ins-

besondere die Komponente in Lastrichtung, ε_{22} , welche bezüglich Verlauf und Betrag die plastische Vergleichsdehnung ε_e^{pl} im Bereich der für die Bruchauslösung relevanten Dehnungen wesentlich beeinflusst, von Bedeutung.

 Finite-Elemente-
 Simulationsrechnungen

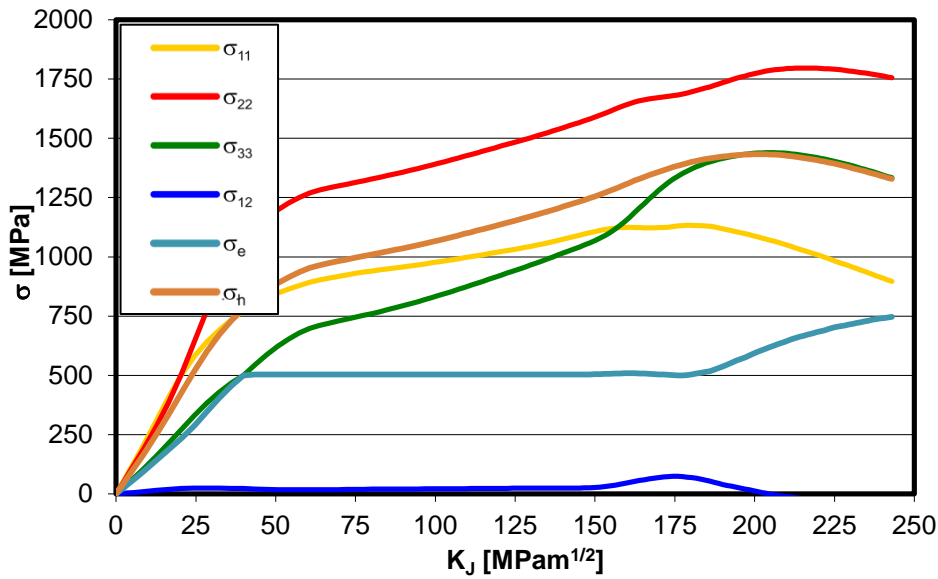


Abb. 39: Verlauf der Spannungen am Bruchsprung für $K_I(90\%)$ und $\Delta x_1(50\%)$ für den Probentyp SE(B) $a/W=0.5$, $T = -50^\circ\text{C}$

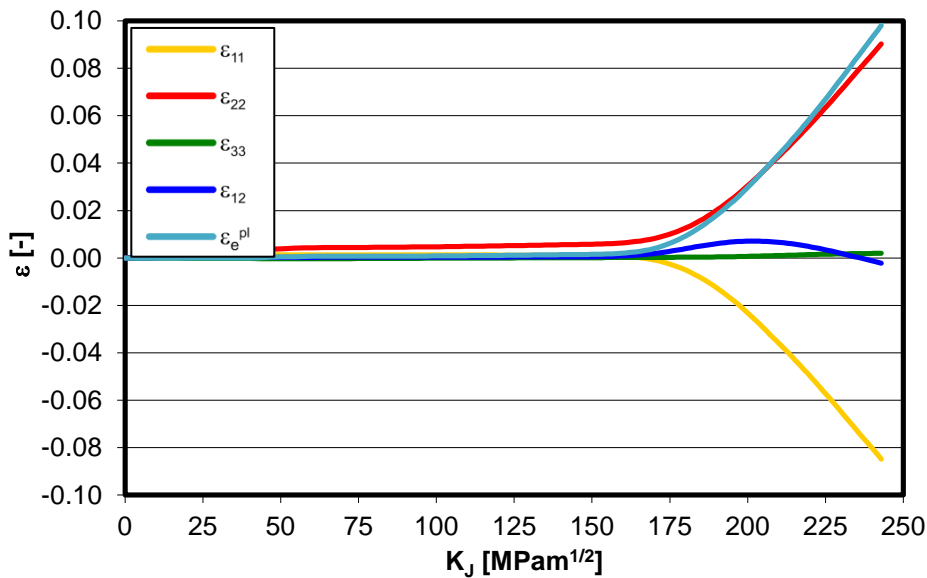


Abb. 40: Verlauf der Dehnungen am Bruchsprung für $K_I(90\%)$ und $\Delta x_1(50\%)$ für den Probentyp SE(B) $a/W=0.5$, $T = -50^\circ\text{C}$

Im Folgenden werden als nachweislich für die Spaltbruchauslösung relevante Feldgrößen die maximale Hauptspannung σ_1 , die Spannungsmehrachsigkeit $h=\sigma_1/\sigma_e$ sowie die plastische Vergleichsdehnung ε_e^{pl} betrachtet (vgl. Kapitel 2.3).

Vergleicht man die lokalen Lastgeschichten der verschiedenen Probentypen, jeweils für $K_I(50\%)$ des betrachteten Probentyps und $\Delta x_1(50\%)$, so ergeben sich erwartungsgemäß erkennbare Unterschiede hinsichtlich der Spannungs- und Dehnungsverläufe. In Abb. 41 sind die Verläufe der maximalen Hauptspannung σ_1 dargestellt. Es wird deutlich, dass das Spannungsniveau am Ort der späteren Spaltbruchauslösung für die Proben mit tiefen Rissen zu Beginn der Belastung deutlich höher ist als das für die Proben mit kurzen Rissen. Erst bei höheren Lasten K_I wird das Spannungsniveau der Proben mit

tiefen Rissen erreicht, so dass zum Bruchzeitpunkt für alle Probentypen eine vergleichbare Spannung vorliegt (vgl. Kapitel 2.3).

 Finite-Elemente-
 Simulationsrechnungen

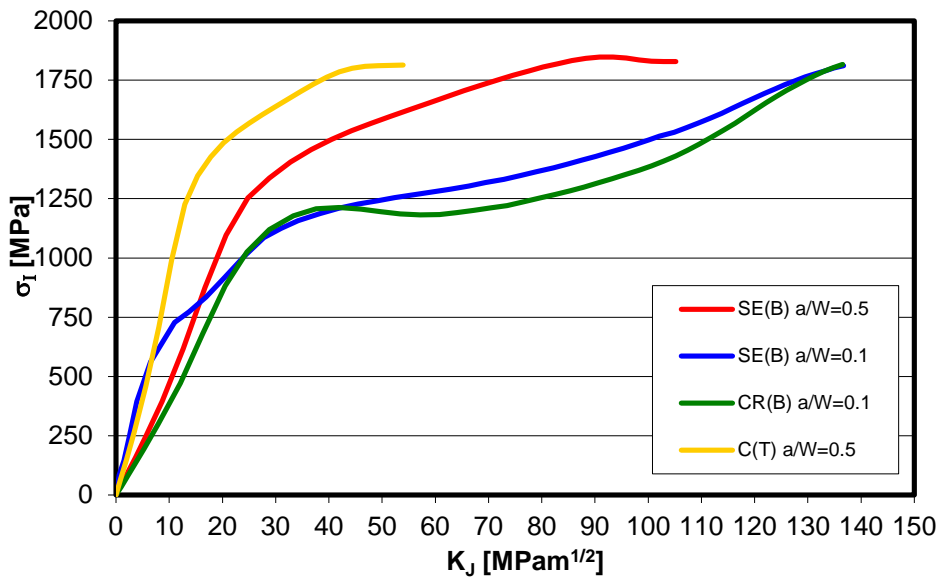


Abb. 41: Verlauf der Spannung σ_I am Bruchersprung für $K_I(50\%)$ und $\Delta x_1(50\%)$ für verschiedene Probentypen, $T = -85^\circ\text{C}$

Hinsichtlich der plastischen Vergleichsdehnung und der Spannungsmehrachsigkeit, die in Abb. 42 und Abb. 43 dargestellt sind, ergeben sich ebenfalls deutliche Unterschiede zwischen den verschiedenen Probentypen. Die Dehnung ϵ_e^{pl} zum Bruchzeitpunkt ist am Ort der späteren Spaltbruchauslösung für die Proben mit tiefen Rissen deutlich geringer als für die Proben mit kurzen Rissen. Der steilere Anstieg der Dehnung am Bruchersprung der C(T)25-Probe resultiert aus dem aufgrund der geringen Bruchlast sehr kleinen Abstand des Bruchersprungs zur Rissfront. Erwartungsgemäß zeigen sich auch für die Spannungsmehrachsigkeit teilweise signifikante Unterschiede zwischen den Probentypen.

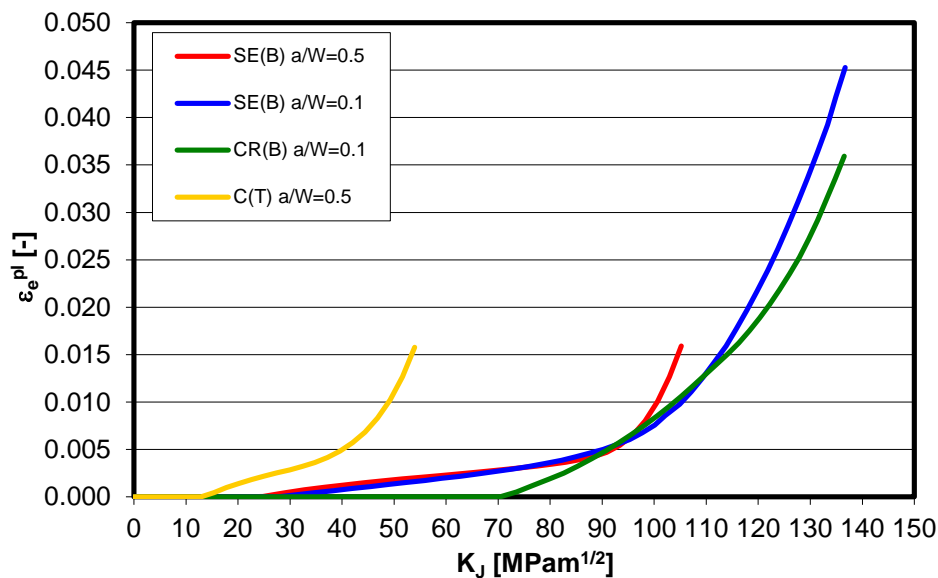


Abb. 42: Verlauf der Dehnung ϵ_e^{pl} am Bruchersprung für $K_I(50\%)$ und $\Delta x_1(50\%)$ für verschiedene Probentypen, $T = -85^\circ\text{C}$

Während die tief gerissenen Proben am Ort der späteren Spaltbruchauslösung zu Beginn der Lastgeschichte Spannungsmehrachsigkeiten in der Größenordnung $h \approx 2$ aufweisen, die bis zum Bruchzeitpunkt auf $h \approx 2.5$ ansteigen (hoher Constraint), erreicht die

SE(B)-Kurzrisssprobe etwa 20-25% geringere Werte für die lokale Spannungsmehrachsigkeit (geringer Constraint). Demgegenüber weist die Kreuzprobe zu Beginn der Lastgeschichte eine extrem hohe Spannungsmehrachsigkeit auf ($h > 3$), die jedoch mit einsetzender Plastizierung rasch bis auf $h \approx 1.75$ abfällt, um dann im Verlauf der weiteren Lastgeschichte wieder anzusteigen, so dass zum Bruchzeitpunkt eine Spannungsmehrachsigkeit ähnlich dem Niveau für die SE(B)-Kurzrisssprobe vorliegt. Insgesamt ergibt sich demnach ein sehr differenziertes Bild hinsichtlich der lokalen, zur Spaltbruchauslösung führenden Lastgeschichten für die verschiedenen Probentypen.

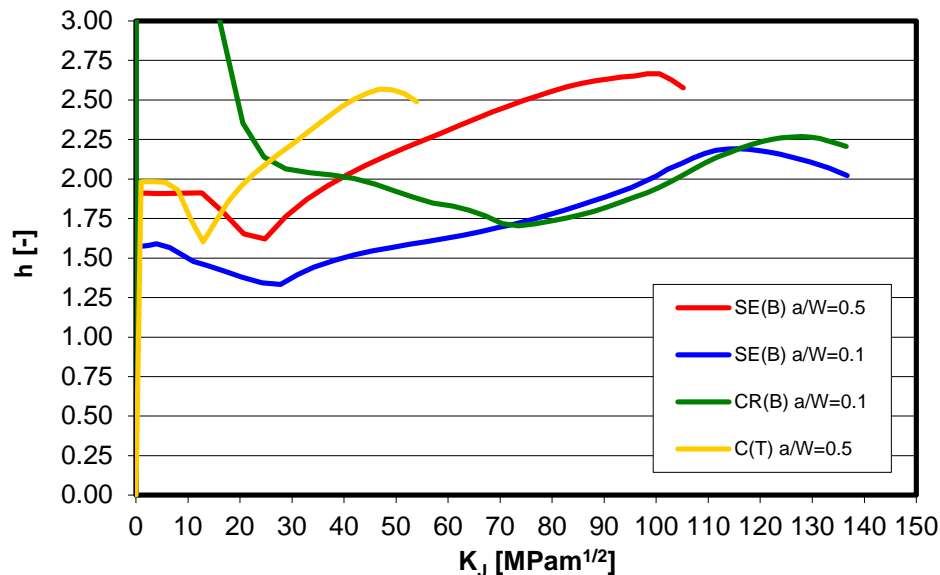


Abb. 43: Verlauf der Spannungsmehrachsigkeit h am Bruchsprung für $K_I(50\%)$ und $\Delta x_1(50\%)$ für verschiedene Probentypen, $T = -85^\circ\text{C}$

Im Folgenden sollen nun noch die Auswirkungen des Abstands zur Rissfront auf die lokale Lastgeschichte betrachtet werden. Dies geschieht exemplarisch anhand der entsprechenden Lastgeschichten für eine SE(B)-Probe mit $a/W=0.5$. Die Abstände ergeben sich dabei gemäß der in Abb. 38 dargestellten Zusammenhänge aus der zur jeweils betrachteten Bruchwahrscheinlichkeit gehörenden Bruchlast K_I sowie der betrachteten Wahrscheinlichkeit für Δx_1 . In Abb. 44 und Abb. 45 sind die Verläufe der maximalen Hauptspannung σ_1 sowie der Dehnung ϵ_e^{pl} und der Spannungsmehrachsigkeit h für verschiedene Wahrscheinlichkeiten von Δx_1 bei der zu 50% Versagenswahrscheinlichkeit gehörenden Bruchlast $K_I(50\%)$ dargestellt.

Es wird deutlich, dass durch den betrachteten Wahrscheinlichkeitsbereich von 10% bis 90% akkumulierter Wahrscheinlichkeit für den Abstand des Bruchsprungs von der Rissfront ein sehr breites Spektrum an möglichen Spannungsverläufen (Abb. 44) sowie jeweils zugehörigen Dehnungs- und Spannungsmehrachsigkeitsverläufen (Abb. 45) abgedeckt wird. Auch bei Betrachtung der lokalen Lastgeschichten für verschiedene K_I und den jeweils zugehörigen Abstand $\Delta x_1(50\%)$ zeigen sich erkennbare Unterschiede, vor allem im Bereich hoher Bruchlasten (siehe Abb. 46 und Abb. 47).

Zusammenfassend bleibt festzustellen, dass die verfügbare experimentell-numerische Datenbasis in geeigneter Weise aufbereitet werden konnte, so dass statistisch repräsentative Belastungsgeschichten als Szenarien für die mikromechanischen Simulationsrechnungen zur Verfügung stehen. Für die einzelnen Probentypen wurden dabei verschiedene zur Bruchauslösung führende charakteristische lokale Belastungsgeschichten identifiziert. Die typischen Belastungsgeschichten weisen für die verschiedenen Probentypen erwartungsgemäß erkennbare Unterschiede auf. Für die mikromechanischen Simulationsrechnungen sollen aufgrund dieser Ergebnisse jeweils die Belastungsgeschichten mit 10%, 50% und 90% akkumulierter Auftretswahrscheinlichkeit von

Bruchlast und Abstand des Bruchsprungs zur Rissfront verwendet werden, da so der wesentliche Teil des lokalen Belastungsspektrums mit vertretbarem Aufwand abgedeckt wird (9 Lastgeschichten je Probentyp und Temperatur, 5 Probentypen bei je 2 Temperaturen (Ausnahme M(T)-Proben), d.h. insgesamt 81 Lastgeschichten).

 Finite-Elemente-
 Simulationsrechnungen

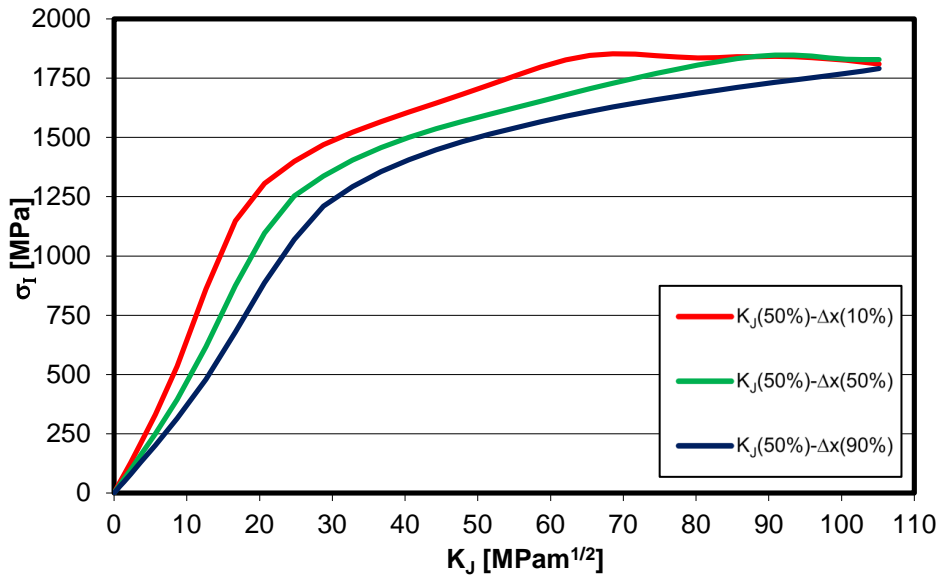


Abb. 44: Verlauf der Spannung σ_t am Bruchsprung für $K_J(50\%)$ und verschiedene Wahrscheinlichkeiten von Δx_1 für den Probentyp SE(B) $a/W=0.5, T = -85^\circ\text{C}$

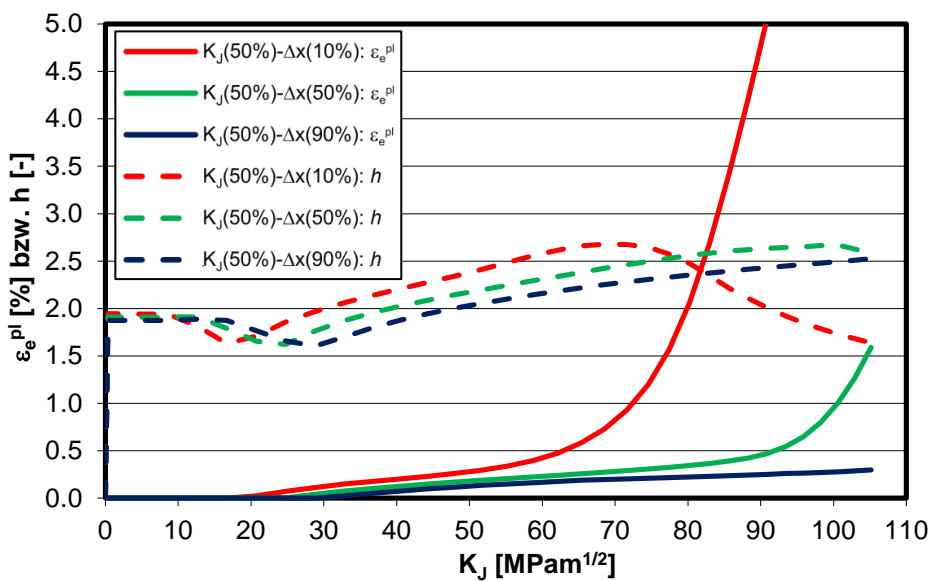


Abb. 45: Verlauf der Dehnung ϵ_e^{pl} und der Spannungsmehrachsigkeit h am Bruchsprung für $K_J(50\%)$ und verschiedene Wahrscheinlichkeiten von Δx_1 für den Probentyp SE(B) $a/W=0.5, T = -85^\circ\text{C}$

Aufgrund der höheren numerischen Stabilität der Simulationsrechnungen bei Verwendung von Verschiebungsrandbedingungen wurden die effektiven Dehnungen als vorgegebene Belastung für die Mikrostrukturmodelle gewählt. Somit kann unter Verwendung der verschiedenen lokalen Lastgeschichten eine systematische Analyse des Einflusses der variierenden Feldgrößen auf den Vorgang der Spaltbruchinitiierung erfolgen. Es bleibt anzumerken, dass dabei die jeweils an einem Punkt extrahierten Lastgeschichten als effektive Feldgrößen über einen gewissen Bereich (Element- bzw. RVE-Größe) interpretiert werden, d.h. eventuell vorliegende lokale Spannungsgradienten werden vernachlässigt. Diese Vorgehensweise ist im Rahmen von local-approach Berechnung üblich (Beremin [18]).

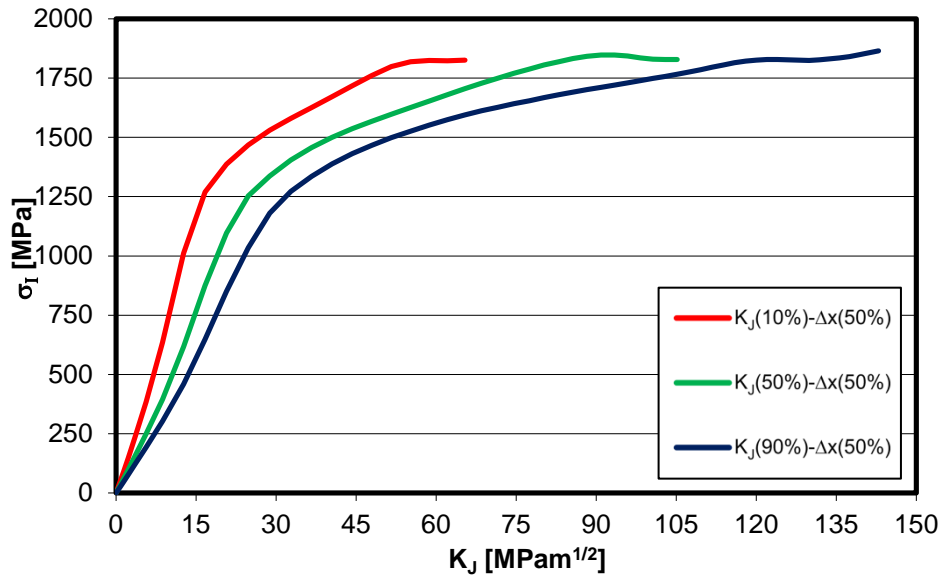


Abb. 46: Verlauf der Spannung σ_I am Bruchsprung für verschiedene K_I und den jeweils zugehörigen Abstand $\Delta x_1(50\%)$ für den Probentyp SE(B) $a/W=0.5$, $T = -85^\circ\text{C}$

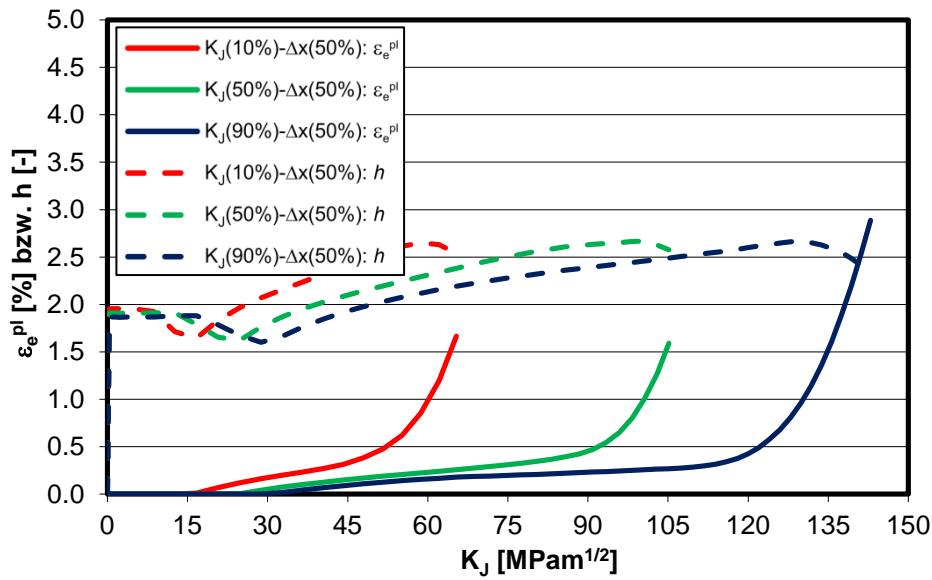


Abb. 47: Verlauf der Dehnung ϵ_e^{pl} und der Spannungsmehrachsichtigkeit h am Bruchsprung für verschiedene K_I und den jeweils zugehörigen Abstand $\Delta x_1(50\%)$ für den Probentyp SE(B) $a/W=0.5$, $T = -85^\circ\text{C}$

4.2 Mikromechanische Simulationsrechnungen

Die Vorgänge bei der Spaltbruchinitiierung in ferritischen Stählen sind bereits seit längerer Zeit Gegenstand der Forschung. In einem Übersichtsartikel von Odette et al. [88] wird der Spaltbruch auf verschiedenen Größenskalen betrachtet. Hinsichtlich der mikromechanischen Vorgänge beim Spaltbruch wird festgestellt, dass die Nukleierung von Mikrodefekten sehr häufig durch den Bruch großer Korngrenzenkarbide stattfindet. Die so entstehenden Mikrorisse arretieren jedoch oftmals am Interface zwischen dem spröden Partikel und der umgebenden Matrix bzw. kurz nach Überschreiten des Interfaces, wobei ein geringer Risspitzenconstraint den frühzeitigen Rissarrest begünstigt. Der Partikelbruch erfolgt im Übergangsbereich der Spaltbruchzähigkeit bevorzugt durch einen Fasermechanismus, d.h. durch Umlagerung von Spannungen aus der sich plastisch verformenden Matrix in das spröde Partikel (Kroon et al. [64], [65]).

Um alle für die Spaltbruchinitiierung wesentlichen Vorgänge auf der mikrostrukturellen Ebene mit der erforderlichen Genauigkeit untersuchen zu können, müssen entsprechende Modelle der Mikrostruktur bzw. relevanter Ausschnitte der Mikrostruktur erstellt und für die FEM-Auswertung (Programmcode: ABAQUS [1]) aufbereitet werden (siehe Kap. 4.2.1). Die resultierenden FE-Modelle erlauben die Bestimmung der Verteilung der Feldgrößen an den Korngrenzen im RVE bei gegebener effektiver Belastung (Kap. 4.2.2), sowie die Untersuchung der erforderlichen Bedingungen für den Partikelbruch (Kap. 4.2.3) und der Voraussetzungen für einen erfolgreichen Übergang des durch Partikelbruch entstandenen Mikrorisses in die umgebende duktile Matrix (Kap. 4.2.4). Basierend auf den so gewonnen Informationen wird in Kapitel 5 eine mikromechanisch basiertes Spaltbruchmodell hergeleitet.

4.2.1 Modellierung der Mikrostruktur

Zunächst soll die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Modellierungsstrategie vorgestellt werden, welche auf der Verwendung von Repräsentativen Volumenelementen der Kornstruktur sowie (Korngrenzen-) Submodellen zur Einbringung der Partikel in diese Kornstruktur beruht. Die Submodelltechnik bietet sich an, da so die numerische Effizienz erheblich gesteigert werden kann. Eine direkte Modellierung der im Verhältnis zu den Körnern sehr kleinen Partikel (siehe Kap. 3.2) innerhalb der Kornstruktur führt zu einer extrem hohen Elementanzahl und entsprechend hohen, nicht akzeptablen Rechenzeiten. Weiterhin erlaubt die Kombination von RVE und Submodell die Realisierung zahlreicher Partikelkonstellationen mit nur wenigen Basismodellen, wobei die RVE-Simulationsrechnung für jede Lastgeschichte (vgl. Kap. 4.1.2) nur einmal durchgeführt werden muss.

RVE der Kornstruktur

Statistisch repräsentative Volumenelemente der Kornstruktur (RVE) stellen die Grundlage der mikromechanischen Simulationsrechnungen dar. Sie dienen sowohl der Untersuchung der Feldgrößen an den Korngrenzen bei gegebener effektiver Belastung, als auch der Bereitstellung der Globalmodelle für die (Korngrenzen-) Submodelle. Die Generierung realitätsnaher Mikrostrukturmodelle erfordert die Berücksichtigung der morphologischen Gegebenheiten wie Kornorientierung, Kornform und -größe sowie der kristallographischen Mikrostruktureigenschaften in Form von Orientierungs- und Fehlorientierungsverteilung, wobei grundsätzlich auch Korrelationen zwischen den verschiedenen Größen bestehen können (Groeber et al. [40], Saylor et al. [107]).

Die RVE müssen demnach basierend auf den statistischen Informationen aus der Mikrostrukturcharakterisierung (siehe Kap. 3.2) erzeugt werden. Dazu ist es jedoch zunächst erforderlich, die bezüglich der Kornmorphologie erhaltenen zweidimensionalen Informationen in Form von angepassten Ellipsen in dreidimensionale Informationen in Form von Ellipsoiden umzuwandeln. Es existieren verschiedene Verfahren, die dies ermöglichen (z.B. Saylor et al. [107] oder St. Pierre et al. [111]). Alle Verfahren beruhen auf vereinfachenden Annahmen, da die von den Oberflächen gewonnenen Informationen keinen eindeutigen Rückschluss auf den räumlichen Strukturaufbau zulassen. Man erhält demnach bei Anwendung dieser Verfahren im Allgemeinen lediglich eine Näherung des realen Strukturaufbaus. Um eine hinreichend genau Abbildung der betrachteten realen Mikrostruktur zu erreichen, sollte demnach ein Verfahren gewählt werden, dessen getroffene Annahmen den Eigenschaften des vorliegenden Mikrostrukturtyps möglichst weitgehend entsprechen. Während das Verfahren von Saylor et al. [107] auf die Modellierung von gewalzten Strukturen mit vorwiegend achsenparallel ausgerichteten Körnern zielt, ist das Verfahren von St. Pierre et al. [111] besonders für Strukturen mit zufällig orientierten Körnern geeignet. Da für das im Rahmen dieses Projekts betrachtete Material mit bainitischer Mikrostruktur, die nach dem Schmieden bei der Wärmebehandlung durch Wachstum der finalen Körner darstellenden Bainitpakete entsteht, keine vorwiegend achsenparallel ausgerichteten Körner zu erwarten sind, wurde das Verfahren von St. Pierre et al. [111] als Basis verwendet.

Bei diesem Verfahren werden die aus der Mikrostrukturcharakterisierung mittels EBSD bekannten angepassten Ellipsen als mögliche Schnitte durch näherungsweise ellipsoidförmige Körner angesehen. So können für jede der Ellipsen mögliche zugehörige Ellipsoide bestimmt werden (siehe Abb. 48).

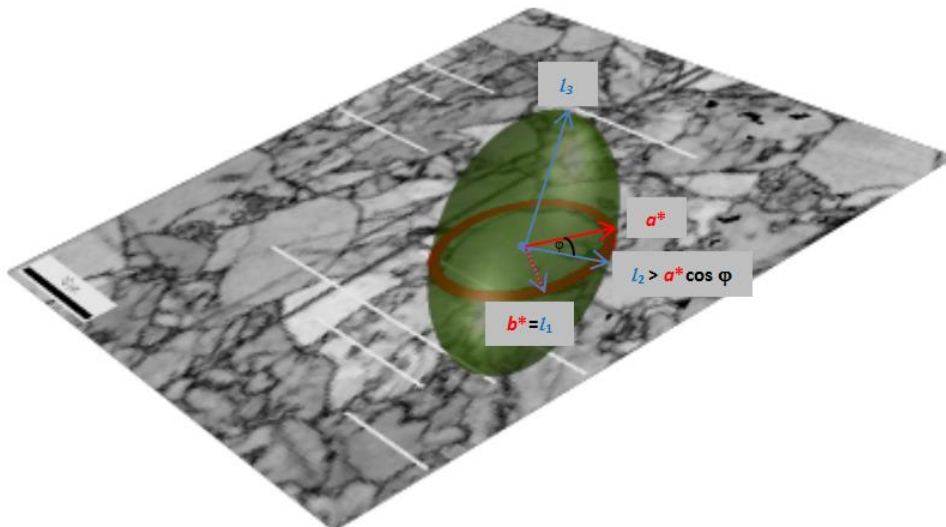


Abb. 48: Angepasste Ellipse (rot) und mögliches zugehöriges Ellipsoid (grün)

Das Verfahren zur Erzeugung der entsprechenden Ellipsoide basiert auf drei Annahmen:

1. Der Mittelpunkt der angepassten Ellipse und der Mittelpunkt des geschnittenen Ellipsoids haben dieselben Koordinaten.
2. Eine der drei Halbachsen des Ellipsoids stimmt mit einer der zwei Halbachsen der Ellipse überein.
3. Beide Formfaktoren des generierten Ellipsoids (b/a und c/b , wobei a , b und c die Halbachsen des Ellipsoids bezeichnen, von der längsten zur kürzesten) sind ähnlich zu denen der angepassten Ellipsen (Halbachsen a^* und b^*).

Durch die ersten beiden Bedingungen werden die Länge $l_1=a^*$ oder $l_1=b^*$ und die Orientierung einer der drei Halbachsen des Ellipsoids definiert. Anschließend kann die Orientierung der zwei anderen Halbachsen durch einen zufällig gewählten Rotationswinkel $\varphi < 90^\circ$ (Rotation um die von Ellipse und Ellipsoid geteilte Halbachse) festgelegt werden. Diese zwei Halbachsen definieren in einer Ebene senkrecht zur Mikrostrukturoberfläche ein Koordinatensystem. Unter Betrachtung dieses Koordinatensystem und der Ellipse auf der Mikrostrukturoberfläche kann, nachdem die Länge l_2 einer der zwei Halbachsen zufällig generiert wurde ($l_1^* \cos \varphi < l_2 < l_{\max}$ mit $l_{\max} = l_{RVE}/3$), die noch fehlende Länge l_3 der dritten Halbachse berechnet werden:

$$l_3 = l_2 \tan \varphi \sqrt{\frac{1}{1 - \left(\frac{l_1^* \cos \varphi}{l_2}\right)^2}} \quad (79)$$

mit $l_1^* = a^*$ für $l_1 = b^*$ und $l_1^* = b^*$ für $l_1 = a^*$.

Die dritte Bedingung hat den Zweck, die Erzeugung unrealistisch geformter Ellipsoide zu unterbinden. Dazu wird die Formverteilung (siehe Abb. 29) der angepassten Ellipsen (siehe Abb. 49) verwendet. Diese liefert die Wahrscheinlichkeit $P(S_f)$ für das Auftreten einer Ellipse mit dem Formfaktor S_f . Ein generiertes Ellipsoid wird akzeptiert, wenn beide Formfaktoren (b/a und c/b) zwischen dem Minimalwert und dem Maximalwert des Halbachsenverhältnisses der angepassten Ellipsen liegen und für zwei Zufallszahlen z_1 und z_2 gilt: $z_1 < P(b/a)$ und $z_2 < P(c/b)$.

So können den angepassten Ellipsen (siehe Abb. 49) jeweils verschiedene Ellipsoide zugeordnet werden und man erhält eine Ellipsoidpopulation, welche hinsichtlich der vorliegenden Größenverteilung und der vorliegenden Formverteilung den realen Körnern entspricht.

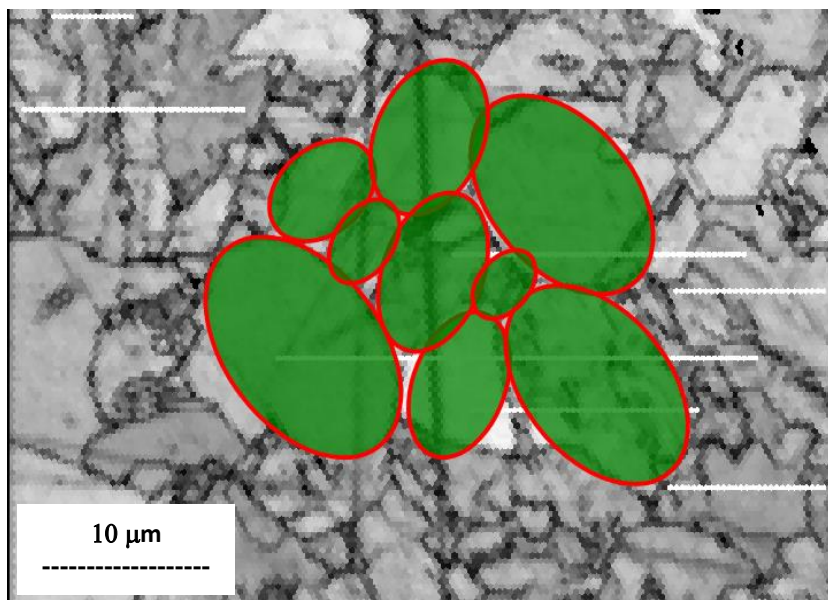


Abb. 49: Beispiele für an die kristallographisch bestimmten Körner angepasste Ellipsen

Auf Basis der so erzeugten Ellipsoidpopulation können repräsentative Volumenelemente der Kornstruktur (RVE) generiert werden. Die erforderliche Anzahl von Körnern im RVE für ein aus mechanischer Sicht repräsentatives Verhalten (isotropes Effektivverhalten entsprechend den makroskopischen Materialeigenschaften) ist grundsätzlich abhängig von den spezifischen Eigenschaften der Mikrostruktur, oftmals sind jedoch etwa 200 Körner ausreichend (Barbe et al. [11], [12], Cailletaud et al. [28]). Die RVE des im

Rahmen dieser Arbeit betrachteten Werkstoffs enthalten daher $6 \times 6 \times 6 = 216$ Körner. Um neben dem korrekten Effektivverhalten auch die Streuung der Feldgrößen innerhalb des RVE möglichst realistisch wiederzugeben, muss jedes Korn eine ausreichend große Anzahl von Integrationspunkten aufweisen. Diard et al. [31] nennen in diesem Zusammenhang eine Anzahl von durchschnittlich 400 Integrationspunkten pro Korn als Richtwert, Barbe et al. ([11], [12]) verwenden FE-Modelle mit durchschnittlich etwa 660 Integrationspunkten pro Korn.

Zur Generierung eines RVE muss zunächst aus der auf Basis der experimentellen Ergebnisse erzeugten Ellipsoidpopulation (mehrere tausend Ellipsoide, genaue Anzahl abhängig von der Zahl der pro Ellipse generierten möglichen zugehörigen Ellipsoide) eine Teilpopulation extrahiert werden, die hinsichtlich der Größen- und Formverteilung repräsentativ für die Gesamtpopulation ist. Dies geschieht durch eine zunächst zufällige Auswahl von n_K Ellipsoiden (n_K bezeichnet die Anzahl der Körner im RVE) und eine darauf folgende einfache Optimierungsprozedur. Im Rahmen dieser Prozedur wird schrittweise ein zufällig ausgewähltes Ellipsoid der Teilpopulation durch ein zufällig ausgewähltes Ellipsoid der Gesamtpopulation ersetzt. Reduziert sich dadurch die Fehlerquadratsumme, welche die Abweichung zwischen den Größen- und Formverteilungen der Teilpopulation und der Gesamtpopulation beschreibt, so wird der Tausch immer akzeptiert, ansonsten mit einer durch den Anwender vorgegebenen geringen Wahrscheinlichkeit. Dieses Vorgehen wird solange wiederholt, bis die gewünschte Genauigkeit erreicht ist (wird nach einer gewissen Anzahl von Schritten keine zufriedenstellende Verbesserung erreicht, so kann eine neue Startpopulation erzeugt werden).

Anschließend werden im ersten Schritt der eigentlichen RVE-Generierung die Ellipsoide mittels eines iterativen Verfahrens so dicht wie möglich in einem kubischen Volumen (Box) der gewünschten Größe ($60 \mu\text{m}$ Kantenlänge bei 216 Körnern für die hier betrachtete Mikrostruktur) angeordnet. Anschließend müssen im zweiten Schritt die durch die Ellipsoide repräsentierten Körner zu einer raumfüllenden Struktur zusammenwachsen. Beide Schritte basieren auf einer gevoxelten Darstellung der Mikrostruktur (Brahme et al. [26], Lewis et al. [72], Saylor et al. [107]), wobei die einzelnen Voxel den späteren Finiten Elementen entsprechen (voll integrierte 8-Knoten-Volumenelemente mit tri-linearem Verschiebungsansatz, ABAQUS-Elementtyp C3D8). Die räumliche Auflösung beträgt dabei 40 Voxel bzw. Elemente pro Kante, d.h. 64000 Voxel bzw. Elemente insgesamt. Daraus resultiert eine Anzahl von durchschnittlich ca. 2370 Integrationspunkten pro Korn. Aufgrund der später aufzubringenden periodischen Randbedingungen wird die Mikrostruktur als periodische Struktur erzeugt, d.h. neben dem eigentlichen RVE muss während der Generierung auch dessen direkte Nachbarschaft, welche aus den 26 umgebenden Volumenelementen gleicher Abmessung besteht, in die Betrachtungen einbezogen werden (siehe Abb. 50).

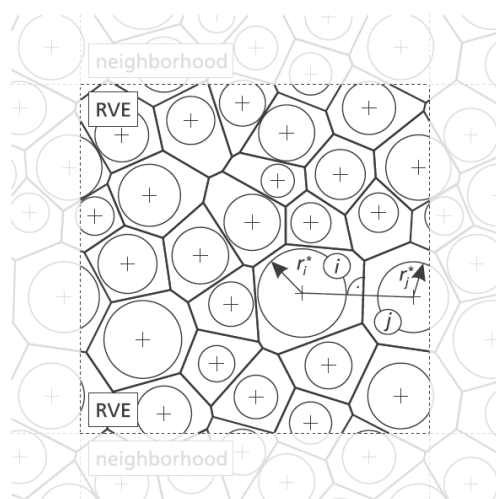


Abb. 50: RVE und Nachbarschaft; Visualisierung des Kugelpackungsverfahrens (Quelle: Hardenacke et al. [45])

Um die Ellipsoide möglichst dicht zu packen, werden zunächst einem Teil der größten Ellipsoide (entsprechend 66% des Gesamtvolumens, wobei das Volumen aller Ellipsoide vorher auf 75% des Ausgangswertes skaliert wird, um ein effizientes Packen zu ermöglichen) volumengleiche Kugeln zugeordnet, die dann mittels eines Kugelpackungsverfahrens (z.B. Hardenacke et al. [45], siehe Abb. 50) ohne Überlappung in der kubischen Box angeordnet werden. Dabei muss gelten

$$r_i^* + r_j^* \leq r(p_i, p_j), \quad i \neq j \quad (80)$$

wobei r_i^* den Radius der dem i -ten Ellipsoid volumengleichen Kugel bezeichnet (äquivalenter Kugelradius). Der Abstand $r(p_i, p_j)$ zwischen zwei Kugelmittelpunkten mit den Koordinaten x_i, y_i, z_i und x_j, y_j, z_j ist im dreidimensionalen Fall gegeben durch

$$r(p_i, p_j) = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} \quad (81)$$

Die so ermittelten Koordinaten der Kugelmittelpunkte dienen als Startwerte für die Mittelpunktkoordinaten der größten Ellipsoide.

Anschließend werden diese Ellipsoide nacheinander, von groß nach klein, in die kubische Box eingefügt. Dazu wird dem einzufügenden Ellipsoid eine zufällige Orientierung (da gemäß den Ergebnissen der Mikrostrukturcharakterisierung keine morphologische Vorzugsorientierung feststellbar ist, vgl. Kapitel 3.2.1) zugewiesen und die zum Ellipsoid gehörenden Voxel werden bestimmt. Die Orientierung wird durch zufällige Euler-Winkel für die Abweichung des lokalen, durch die Halbachsen a, b, c des Ellipsoids definierten $x'-y'-z'$ -Koordinatensystems vom festen $x-y-z$ -Referenzkoordinatensystem beschrieben. Ein Voxel wird dem gerade betrachteten Ellipsoid zugeordnet, wenn für die Mittelpunktkoordinaten i, j, k des Voxels im lokalen Koordinatensystem gilt

$$E = \left(\frac{i'}{a}\right)^2 + \left(\frac{j'}{b}\right)^2 + \left(\frac{k'}{c}\right)^2 \leq 1 \quad (82)$$

Nach der Zuordnung der Voxel wird durch Abgleich mit den Voxeln der bereits vorhandenen Ellipsoide der Prozentsatz der Voxel im aktuell betrachteten Ellipsoid berechnet, die keinem der zuvor platzierten Ellipsoide zugewiesen sind. Überschreitet dieser den vorgegebenen Minimalwert R , werden Mittelpunktlage und Orientierung akzeptiert:

$$\frac{\sum_{i=1}^N \delta_i^1 \delta_i^2}{\sum_{i=1}^N \delta_i^1} \geq R \quad (83)$$

mit der Gesamtanzahl N der Voxel und $\delta^1=1$ für Voxel innerhalb des gerade platzierten Ellipsoids, $\delta^1=0$ für Voxel außerhalb sowie $\delta^2=1$ für nicht bereits einem anderen Ellipsoid zugewiesene Voxel und $\delta^2=0$ anderenfalls.

Ansonsten wird die Orientierung und ggf. auch Mittelpunktlage (in vorgegebenen Grenzen) variiert, bis die Überlappung einen akzeptablen Wert annimmt. Auf diese Weise können die größten Ellipsoide (entsprechend 66% des Gesamtvolumens) mit geringer Überlappung in der kubischen Box platziert werden. Um die restlichen Ellipsoide einzufügen, wird der zum aktuellen Zeitpunkt am schwächsten besetzte Bereiche ermittelt (Bestimmung des Anteils der noch freien Voxel für $5 \times 5 \times 5$ Subbereiche im RVE) und der Ellipsoidmittelpunkt wird im Zentrum dieses Bereichs platziert. Das weitere Vorgehen entspricht dem für die größten Ellipsoide. Nachdem alle Ellipsoide im RVE platziert sind, kann eine Optimierung erfolgen (in Anlehnung an Saylor et al. [107]). Dazu wird auf Basis der Ellipsoidgleichung (82) ein skalares Maß für die Überlappung in Form von Systemkosten definiert. Weil im Hinblick auf eine raumfüllende Struktur eine leichte Überlappung der Ellipsoide akzeptabel ist, liefern Durchdringungspunkte nahe

der Ellipsoidoberfläche einen geringen Kostenvorteil, während Durchdringungspunkte tief im Ellipsoidinneren einen hohen Kostennachteil verursachen. Betrachtet man einen Punkt (Voxelmittelpunkt) der nicht nur im gerade betrachteten Ellipsoid, sondern in mindestens einem weiteren Ellipsoid enthalten ist, so ergibt sich ein Beitrag zu den Systemkosten:

$$\alpha = \frac{-\omega}{1 - 1/\beta^2} \left(1 - \frac{E^2}{\beta^2} \right) \quad (84)$$

mit der Ellipsoidfunktion E entsprechend Gleichung (82).

Mit den Parametern $\omega=1$ und $\beta=0.95$ variiert der Kostenbeitrag quadratisch zwischen einem Kostenvorteil von $\alpha=-1$ für $E=1$ und einem Kostennachteil von $\alpha \approx 9.3$ für $E=0$. Die Gesamt-Systemkosten erhält man als Summe der Kostenbeiträge aller in mindestens zwei Ellipsoiden enthaltenen Voxelmittelpunkte. Da die Kostenbeiträge jeweils aus der Sicht eines einzelnen Ellipsoids berechnet werden, erzeugt ein solcher Voxelmittelpunkte eine Anzahl an Kostenbeiträgen entsprechend der Anzahl an Ellipsoiden, in denen er enthalten ist, d.h. mindestens zwei Kostenbeiträge.

Die Optimierung (Minimierung der Systemkosten) erfolgt durch eine Serie von zufällig gewählten Transformationen. Die möglichen Transformationsaktionen umfassen dabei die Positions- oder Orientierungsänderung eines Ellipsoids, den Positionstausch zweier Ellipsoide sowie den Austausch eines Ellipsoids der RVE-Population durch ein Ellipsoid aus der Gesamtpopulation (unter Beachtung einer zulässigen Änderung der Fehlerquadratsumme, welche die Abweichung zwischen den Größen- und Formverteilungen der Ellipsoide der RVE-Population und der Ellipsoide der Gesamtpopulation beschreibt). Eine Aktion wird bei Kostenreduzierung immer und mit gewisser Wahrscheinlichkeit auch bei geringer Kostenerhöhung akzeptiert (diese Wahrscheinlichkeit und die zulässige Kostenerhöhung sind vorgegebene Verfahrensparameter). Auf diese Weise wird nach einigen zehntausend Transformationsaktionen ein Raumfüllungsgrad von über 70% erreicht, so dass der Überlappungsgrad der Ellipsoide zumeist weniger als 5% beträgt. Ein exemplarisches Ergebnis des Gesamtverfahrens ist in Abb. 51 dargestellt.

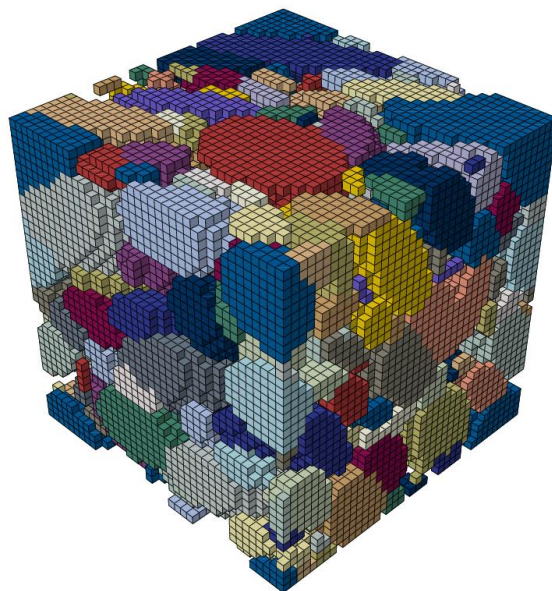


Abb. 51: Gevoxelte Ellipsoidpopulation, 216 Ellipsoide, 72% Raumfüllung

Anschließend müssen im zweiten Schritt der RVE-Generierung die durch die gevoxelten Ellipsoide repräsentierten Körner zu einer raumfüllenden Struktur zusammenwachsen. Dazu werden den Ellipsoiden sukzessive in mehreren Wachstumsschritten jeweils die sie

direkt umgebenden freien Voxel zugewiesen, so dass die Kornform- und die Korngrößenverteilung mit guter Genauigkeit erhalten bleiben. Hinsichtlich der Zuordnungsvorschrift für die noch freien Voxel existieren verschiedene Ansätze.

Groeber et al. [40] schlagen einen Pseudo-Kornvergrößerungsprozess vor, bei dem zu Beginn eines jeden Wachstumsschritts zunächst eine Prüfung erfolgt, welche der noch freien Voxel Oberfläche mit den aktuellen Körnern teilen. Anschließend wird jedes dieser Voxel jeweils dem Korn zugewiesen, mit dem es die größte Oberfläche teilt. Haben mehrere Körner gleichen Anteil, wird das Voxel dem Korn zugeordnet, dessen aktuelles Volumen am deutlichsten unterhalb der jeweiligen Zielgröße (Volumen des zugehörigen analytischen, unskalierten Ellipsoids) liegt.

Eine andere Möglichkeit besteht in der Verwendung einer Wachstumsstrategie basierend auf dem Wachstum der den gevoxelten Ellipsoiden zugrunde liegenden analytischen Ellipsoide (die zu Beginn des Packvorgangs auf 75% ihres Ausgangsvolumens $V_0 = 4/3\pi a_0 b_0 c_0$ herunterskaliert werden). Die Wachstumsgeschwindigkeiten (für alle Halbachsenrichtungen) werden dabei für jedes Ellipsoid $i=1, \dots, n_k$ so festgelegt, dass zum Zeitpunkt $t=1$ (Startzeitpunkt $t=0$) das jeweilige Ausgangsvolumen $V_0^{(i)}$ erreicht wird, d.h. $\Delta l^{(i)} = (1 - 0.75^{1/3}) l_0^{(i)} \Delta t$ mit $l=a, b, c$. Anschließend erfolgt in jedem Wachstumsschritt (Zeitschrittweite Δt) die Zuordnung der bislang noch freien, im aktuellen Schritt von den wachsenden Ellipsoiden erfassten Voxel zu den jeweiligen Körnern.

Beide genannten Zuordnungsverfahren liefern vergleichbare Ergebnisse. Ein exemplarisches Beispiel für die entstehende raumfüllende Kornstruktur ist in Abb. 52 dargestellt.



Abb. 52: Fertiges RVE der Kornstruktur, 216 Körner (Anmerkung: basiert nicht auf der Ellipsoidpopulation aus Abb. 51)

Nach Fertigstellung der raumfüllenden Kornstruktur kann geprüft werden, ob die erzeugte Kornmorphologie hinreichend realitätsnah ist. Dazu werden die RVE-Oberflächen und Schnitte durch das RVE senkrecht zu den drei Achsen x, y und z betrachtet und für jede Schnittfläche werden die best-fit-Ellipsen der Körner entsprechend der in Kapitel 3.2.1 beschriebenen Vorgehensweise bestimmt. Die auf Basis dieser Auswertungen erhaltenen Informationen, die Größen- und die Formverteilung der Schnittellipsen, können anschließend mit den entsprechenden metallographischen Untersuchungsergebnissen verglichen werden. In Abb. 53 ist der Vergleich der Größenverteilungen dargestellt, während Abb. 54 den Vergleich der Formverteilungen zeigt. Es wird deutlich, dass sowohl hinsichtlich der Größenverteilungen als auch bezüglich der Formverteilungen eine hinreichend gute qualitative und quantitative Übereinstimmung

zwischen den jeweiligen Ergebnissen für die reale und die generierte Mikrostruktur vorliegt. Weiterhin kann für die generierte Mikrostruktur keine morphologische Vorzugsorientierung der Ellipsen bzw. Körner festgestellt werden, was in Einklang mit den Ergebnissen der metallographischen Untersuchungen steht. Der mittlere äquivalente Kreisdurchmesser der Schnittellipsen beträgt $d_{av} \approx 11.2 \mu\text{m}$ für die reale und $d_{av} \approx 11.4 \mu\text{m}$ für die generierte Mikrostruktur (zum Vergleich: der mittlere äquivalente Kugeldurchmesser der auf Basis der experimentellen Schnittellipsen erzeugten Ellipsoidpopulation für die RVE-Generierung und somit auch der mittlere äquivalente Kugeldurchmesser der Körner beträgt ca. $12.4 \mu\text{m}$). Neben den bislang genannten Größen kann auch die mittlere Anzahl n_N der nächsten Nachbarn pro Korn als Kontrollgröße herangezogen werden (Groeber et al. [40]). Sie beträgt für die generierte Mikrostruktur $n_N \approx 11.8$, der in der Literatur angegebene Wert für polykristallines Eisen ist $n_N \approx 12.1$.

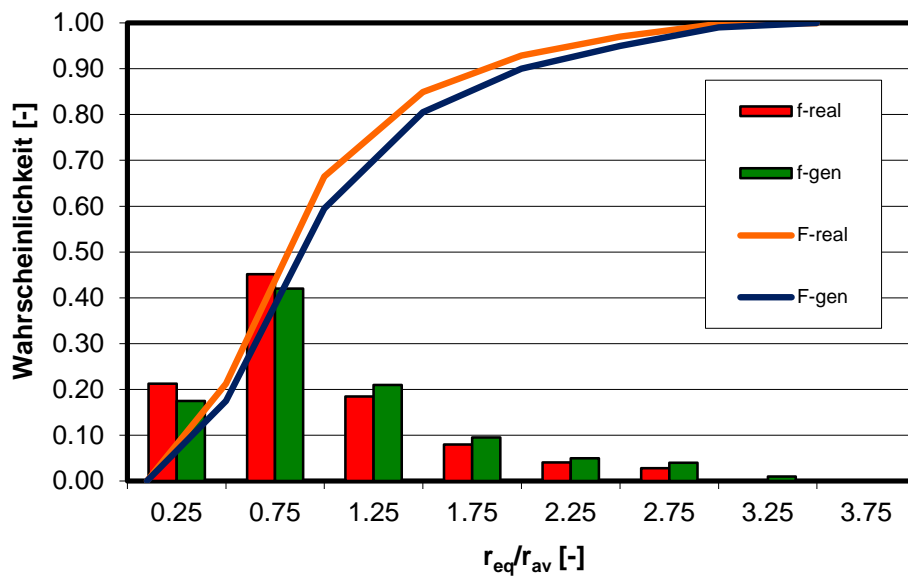


Abb. 53: Größenverteilung (Wahrscheinlichkeitsfunktion f und Verteilungsfunktion F) der Körner; Vergleich zwischen realer und generierter Mikrostruktur

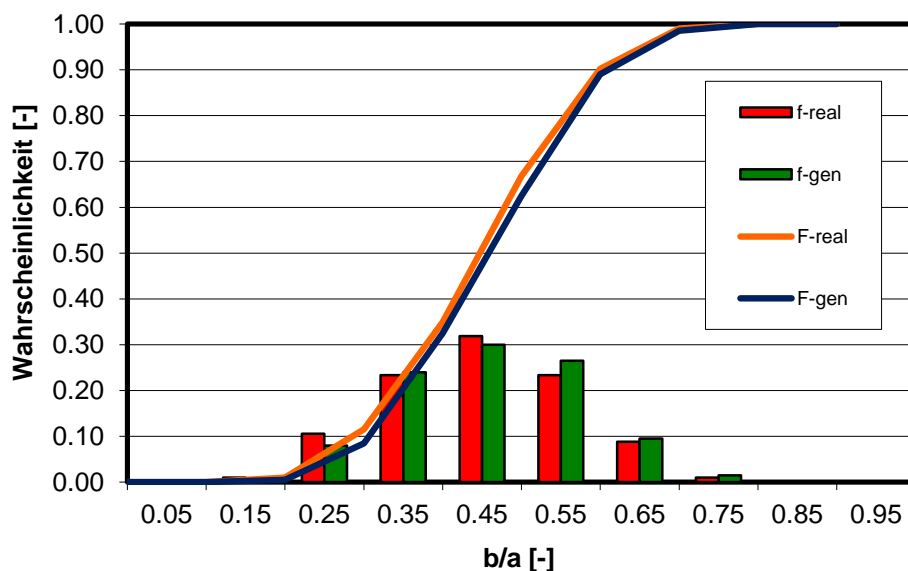


Abb. 54: Formverteilung (Wahrscheinlichkeitsfunktion f und Verteilungsfunktion F) der Körner; Vergleich zwischen realer und generierter Mikrostruktur

Basierend auf den Ergebnissen der Mikrostrukturuntersuchung (siehe Kapitel 3.2.1) gilt die Annahme, dass keine Korrelation zwischen Kornmorphologie und kristallographischer Orientierung existiert und dass die Anisotropie im Polykristall durch die kristallo-

graphische Orientierungs- und Fehlorientierungsverteilung charakterisiert werden kann. Nachdem die Morphologie der Kornstruktur definiert ist, muss daher den einzelnen Körnern jeweils eine kristallographische Orientierung zugewiesen werden, und zwar so, dass sowohl die Orientierungsverteilung als auch die Fehlorientierungsverteilung mit guter Genauigkeit den experimentellen Daten entspricht. Um dies zu erreichen, wird ein Optimierungsverfahren verwendet, dass auf dem Algorithmus von Miodownik et al. [86] und dessen Erweiterungen (z.B. Saylor et al. [107], Brahme et al. [26]) beruht.

Zunächst erfolgt die Erfassung der Topologie der generierten Mikrostruktur (Kornvolumen, Kornnachbarschaften und zugehörige Korngrenzenflächen). Diese Daten sind erforderlich für Gewichtung der einzelnen Orientierungen (Gewichtung mit zugehörigem Kornvolumen) und Fehlorientierungen (Gewichtung mit zug. Korngrenzenfläche) bei der Berechnung der jeweiligen Wahrscheinlichkeits- und Verteilungsfunktionen.

Im nächsten Schritt werden die Zielfunktionen für die Orientierungsverteilung und die Fehlorientierungsverteilung auf Basis der Ergebnisse der Mikrostrukturuntersuchungen erzeugt. Die kristallographische Orientierung wird dabei durch die drei Euler-Winkel $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ beschrieben, die das feste Referenzkoordinatensystem und das Kristallachsensystem in Einklang bringen (Bunge [27]). Demgegenüber wird die Fehlorientierung durch den Winkel φ_M beschrieben, der der minimalen Rotation entspricht, die erforderlich ist, um die verschiedenen kristallographischen Orientierungen zweier benachbarter Körner in Einklang zu bringen (siehe Kapitel 3.2.1, Gleichungen (70) und (71)). Die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Wahrscheinlichkeits- und Verteilungsfunktionen basieren auf einer Diskretisierung des Orientierungs- bzw. Fehlorientierungsraums (bei Beschreibung der Fehlorientierung durch einen Winkel ist der Fehlorientierungsraum natürlich nur eindimensional). Dazu erfolgt eine Unterteilung des Orientierungs- bzw. Fehlorientierungsraums in diskrete Voxel bzw. Abschnitte („bins“), die jeweils durch die Werte bzw. den Wert am Mittelpunkt bezeichnet werden. Den einzelnen bins werden anschließend die summierten Kornvolumen- bzw. Korngrenzenflächenanteile des jeweils zugehörigen Orientierungs- bzw. Fehlorientierungsintervalls zugewiesen. Die so erhaltenen Wahrscheinlichkeitsfunktionen werden später in analoger Weise auch für die generierte Mikrostruktur erzeugt. Damit ergibt sich die zu minimierende Funktion

$$M = g_{ORI}FQS_{ORI} + g_{MIO}FQS_{MIO} \quad (85)$$

mit der Fehlerquadratsumme für die Abweichungen zwischen den Wahrscheinlichkeitsfunktionen für die kristallographischen Orientierungen in der realen und der generierten Mikrostruktur

$$FQS_{ORI} = \frac{1}{n_1 n_2 n_3} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \sum_{k=1}^{n_3} \left(\frac{f^{gen}(\varphi_1^{(i)}, \Phi^{(j)}, \varphi_2^{(k)})}{f^{real}(\varphi_1^{(i)}, \Phi^{(j)}, \varphi_2^{(k)})} - 1 \right)^2 \quad (86)$$

und der Fehlerquadratsumme für die Abweichungen zwischen den Wahrscheinlichkeitsfunktionen für die kristallographischen Fehlorientierungen in der realen und der generierten Mikrostruktur

$$FQS_{MIO} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left(\frac{f^{gen}(\varphi_M^{(i)})}{f^{real}(\varphi_M^{(i)})} - 1 \right)^2 \quad (87)$$

wobei n_1 die Anzahl der Unterteilungen des Orientierungsraums in φ_1 -Richtung, n_2 die Anzahl in Φ -Richtung, n_3 die Anzahl in φ_2 -Richtung und m die Anzahl der Unterteilungen des Fehlorientierungsraums in φ_M -Richtung bezeichnet. Weiterhin ist $f(\varphi_1^{(i)}, \Phi^{(j)}, \varphi_2^{(k)})$ die Auftrittswahrscheinlichkeit für kristallographische Orientierungen mit Euler-Winkeln $\varphi_1^{(i)} - \Delta\varphi_1/2 \leq \varphi_1 < \varphi_1^{(i)} + \Delta\varphi_1/2$, $\Phi^{(j)} - \Delta\Phi/2 \leq \Phi < \Phi^{(j)} + \Delta\Phi/2$, $\varphi_2^{(k)} - \Delta\varphi_2/2 \leq \varphi_2 < \varphi_2^{(k)} + \Delta\varphi_2/2$ und $f(\varphi_M^{(i)})$

die Auftretswahrscheinlichkeit für kristallographische Fehlorientierungen mit einem Winkel $\varphi_M^{(0)} - \Delta\varphi_M/2 \leq \varphi_M < \varphi_M^{(0)} + \Delta\varphi_M/2$.

Die Faktoren g_{ORI} und g_{MIO} in Gleichung (85) stellen individuelle Gewichtungsfaktoren für die zu minimierenden Teilfunktionen FQS_{ORI} und FQS_{MIO} dar. Die im Rahmen der Optimierung zu minimierende Funktion ist demnach die durch eine kombinierte Fehlerquadratsumme beschriebene Abweichung zwischen den aus den realen und den generierten Mikrostrukturdaten erzeugten Wahrscheinlichkeitsfunktionen für die kristallographischen Orientierungen und die kristallographischen Fehlorientierungen. Es sei angemerkt, dass bei einer geringen Kornanzahl im RVE ein mechanisch isotropes Verhalten schwieriger zu erreichen ist. Um diesem Problem entgegenzuwirken ist es daher gegebenenfalls sinnvoll, bei der Optimierung ein zusätzliches Kriterium zu berücksichtigen. So ist es z.B. möglich, die zu minimierende Funktion um einen Term zu erweitern, der den Abstand (bzw. dessen Kehrwert) der Orientierungen im Orientierungsraum berücksichtigt, so dass dieser Abstand gegebenenfalls erhöht wird (Bertram et al. [20]). Grundsätzlich erscheint es als sinnvoll, mehrere gemäß der zu minimierende Funktion günstige kristallographische Orientierungskonstellationen zu erzeugen und anschließend die hinsichtlich der geforderten Isotropie beste Variante auszuwählen.

Zu Beginn der Optimierungsprozedur wird zunächst jedem Korn eine zufällige kristallographische Orientierung zugewiesen. Die Minimierung der Zielfunktion M erfolgt anschließend durch sukzessive Variation der Orientierung einzelner Körner. Dabei sind zwei Operationen zulässig: (1) Die Orientierung eines zufällig gewählten Kornes wird durch eine zufällige Orientierung ersetzt oder (2) Eine zufällige Auswahl zweier Körner und Tausch der Orientierungen. Eine solche Operation wird immer akzeptiert, wenn M abnimmt, wenn M zunimmt gilt $P(\Delta M) = \exp(-\Delta M / T)$ für die Akzeptanzwahrscheinlichkeit P , wobei T ein vorzugebender Parameter ist, der mit zunehmender Anzahl an erfolgreichen Operationen reduziert wird. Um die Effizienz zu steigern, können die bins nach Rang sortiert werden, basierend auf der jeweiligen Abweichung $f^{\text{gen.}} - f^{\text{real}}$ (hohe Priorität bei großer Abweichung). Anschließend wird jedem Korn ein Rang R^K zugewiesen (Summe über die Ränge R^{bin} der Fehlorientierungen mit den Nachbarkörnern): $R_i^K = \sum_{j=1}^n R^{\text{bin}}(N_{ij})$ mit der Fehlorientierung N_{ij} zwischen Körnern i und j (n =Anzahl der nächsten Nachbarn von Korn i). Bei Anwendung der oben genannten Operationen kann dann eine bevorzugte Änderung der kristallographischen Orientierung hochrangiger Körner erfolgen (Groeber et al. [40]).

Führt das Verfahren nach einer gewissen Anzahl von Schritten nicht zu einer vorgegebenen Verbesserung, so wird eine neue Startkonstellation der kristallographischen Orientierungen generiert. Diese Vorgehensweise führt bei vertretbarem numerischem Aufwand zu guten Ergebnissen.

Ein Vergleich der experimentell ermittelten Fehlorientierungsverteilung und der numerisch erzeugten Fehlorientierungsverteilung ist in Abb. 55 dargestellt. Es ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Wahrscheinlichkeitsfunktionen. Zum Vergleich ist in Abb. 55 auch eine aus zufälliger, unbeeinflusster kristallographischer Orientierung (entspricht einer Startkonstellation für das Optimierungsverfahren) resultierende Fehlorientierungsverteilung dargestellt. Man erkennt deutlich, dass ohne Optimierung die für ein realitätsnahes mechanisches Verhalten der Kornstruktur wichtige realitätsnahe Fehlorientierungsverteilung (Osipov et al. [91]) nicht erreicht werden kann.

Das Materialverhalten der Körner kann durch ein kristallplastisches Materialmodell beschrieben werden, welches später vorgestellt wird.

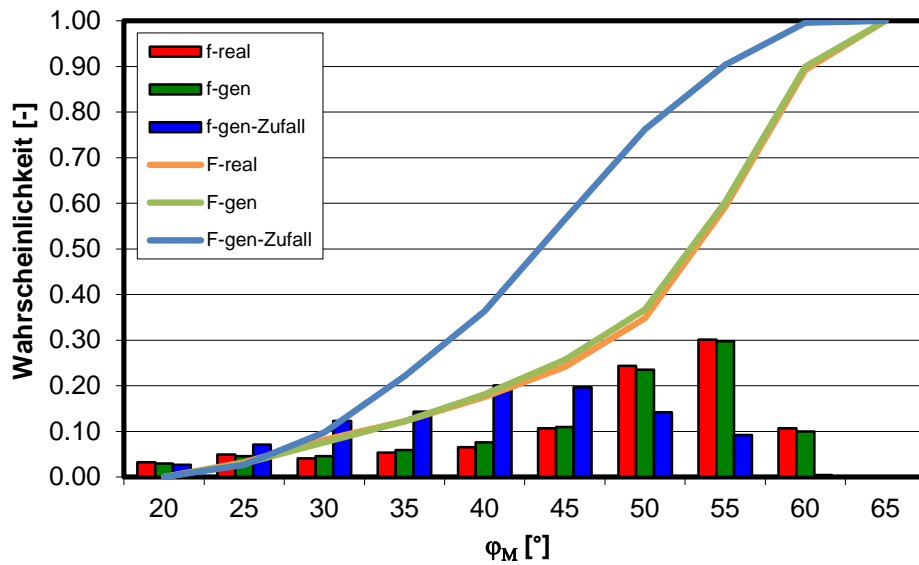


Abb. 55: Kristallographische Fehlorientierungsverteilung (Wahrscheinlichkeitsfunktion f und Verteilungsfunktion F) im RVE; Vergleich zwischen realer und generierter Mikrostruktur

Nachdem sowohl die Morphologie als auch die Kristallographie der Kornstruktur (RVE) festgelegt ist, müssen noch Randbedingungen für das RVE definiert werden, damit bei den späteren Simulationsrechnungen die gewünschten mechanischen Belastungen in Form der effektiven Dehnungen (Lokale Lastgeschichten, vgl. Kapitel 4.1.2) aufgebracht werden können. Es existieren verschiedene Möglichkeiten, solche Randbedingungen (RBD) zu realisieren, z.B. homogene RBD (alle Verschiebungskomponenten auf den Oberflächen vorgegeben) oder periodische RBD. Die periodischen RBD haben den Vorteil, dass sie den Versteifungseffekt homogener RBD vermeiden (Bertram et al. [20]). Daher werden periodische Randbedingungen verwendet. Diese verlangen, dass die mikroskopischen Verschiebungsgradienten entlang gegenüberliegender Oberflächen des RVE gleich sein müssen. So wird sichergestellt, dass sich benachbarte Volumenelemente auch im deformierten Zustand lückenlos aneinanderfügen lassen. Dies ist schematisch in Abb. 56 dargestellt.

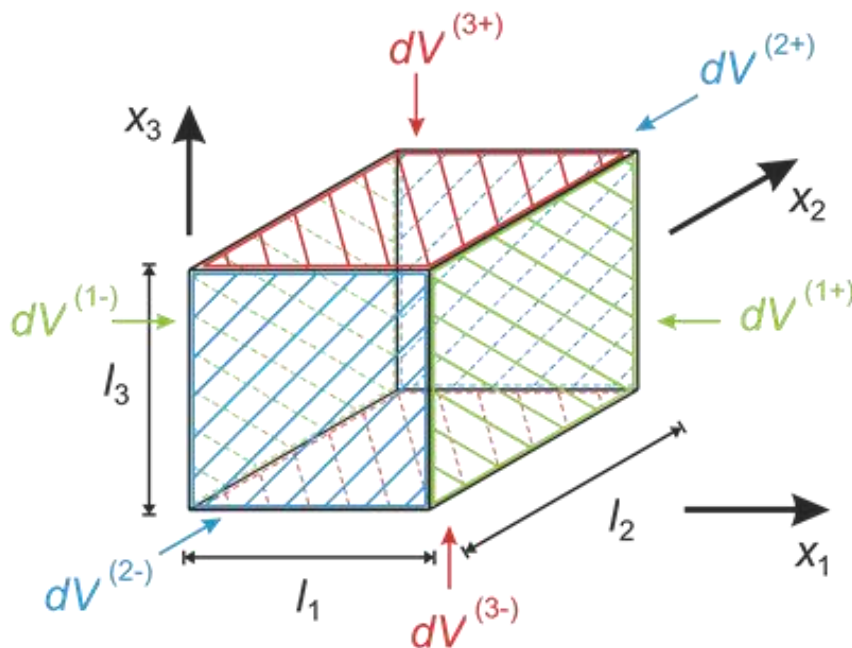


Abb. 56: Periodische Randbedingungen für das RVE

Führt man die effektiven Deformation als direkte Freiheitsgrade ins Finite-Elemente-Modell ein, so muss gelten

Finite-Elemente-
Simulationsrechnungen

$$\begin{aligned} u_1^{(1+)} - u_1^{(1-)} - l_1(\bar{F}_{11} - 1) &= 0 \\ u_2^{(1+)} - u_2^{(1-)} - l_1\bar{F}_{12} &= 0 \\ u_3^{(1+)} - u_3^{(1-)} - l_1\bar{F}_{13} &= 0 \end{aligned} \quad \text{auf } dV^{(1)} \quad (88)$$

$$\begin{aligned} u_1^{(2+)} - u_1^{(2-)} - l_2\bar{F}_{12} &= 0 \\ u_2^{(2+)} - u_2^{(2-)} - l_2(\bar{F}_{22} - 1) &= 0 \\ u_3^{(2+)} - u_3^{(2-)} - l_2\bar{F}_{23} &= 0 \end{aligned} \quad \text{auf } dV^{(2)} \quad (89)$$

$$\begin{aligned} u_1^{(3+)} - u_1^{(3-)} - l_3\bar{F}_{13} &= 0 \\ u_2^{(3+)} - u_2^{(3-)} - l_3\bar{F}_{23} &= 0 \\ u_3^{(3+)} - u_3^{(3-)} - l_3(\bar{F}_{33} - 1) &= 0 \end{aligned} \quad \text{auf } dV^{(3)} \quad (90)$$

mit den Komponenten \bar{F}_{ij} des effektiven Deformationsgradienten.

Damit sind periodische RBD mit der Philosophie des RVE-Konzepts, welches die Mikrostruktur durch ein periodisches Stückwerk beschreibt, konsistent.

Im Falle periodischer RBD ist die Vorgabe der Verschiebungen der drei Eckknoten K_1 , K_2 und K_3 (normierte Koordinaten: $x_1=1, x_2=0, x_3=0$ und $x_1=0, x_2=1, x_3=0$ und $x_1=0, x_2=0, x_3=1$) bei Fixierung des Eckknotens K_0 mit den Koordinaten $x_1=x_2=x_3=0$ ausreichend für Erzeugung des gewünschten effektiven Deformationszustandes. Somit verbleiben 9 Verschiebungen, von denen nur 6 unabhängig sind (wegen der Symmetrie des Deformationsgradienten bei nicht vorhandener Starrkörperrotation).

Die Berechnung dieser Verschiebungen für jedes Inkrement der vorzugebenden Lastgeschichte (in Form des im Rahmen des FE-Codes ABAQUS [1] verwendeten logarithmischen Dehnungstensors $\boldsymbol{\epsilon}$) erfolgt dabei jeweils durch Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems. Um das jeweilige nichtlineare Gleichungssystem zu erhalten, wird zunächst eine Hauptachsentransformation von $\boldsymbol{\epsilon}$ durchgeführt, welche die Eigenwerte $\epsilon_I, \epsilon_{II}, \epsilon_{III}$ und die Eigenvektoren $\mathbf{n}_I^{\epsilon}, \mathbf{n}_{II}^{\epsilon}, \mathbf{n}_{III}^{\epsilon}$ liefert. Da keine Starrkörperrotation vorliegt, ist der Deformationsgradient symmetrisch, d.h. $\mathbf{F}=\mathbf{F}^T$ und für den Rechts-Cauchy-Green-Tensor gilt $\mathbf{C}=\mathbf{F}\mathbf{F}$. So erhält man die Komponenten c_{ij} des Rechts-Cauchy-Green-Tensors unter Verwendung des effektiven Deformationsgradienten:

$$\bar{\mathbf{F}} = \begin{bmatrix} \frac{u_{x_1}^{(1)}}{l_1} + 1 & \frac{u_{x_2}^{(1)}}{l_1} & \frac{u_{x_3}^{(1)}}{l_1} \\ & \frac{u_{x_2}^{(2)}}{l_2} + 1 & \frac{u_{x_3}^{(2)}}{l_2} \\ \text{sym.} & & \frac{u_{x_3}^{(3)}}{l_3} + 1 \end{bmatrix} \rightarrow c_{11} = (\bar{F}_{11})^2 + (\bar{F}_{12})^2 + (\bar{F}_{13})^2 \quad \text{usw.} \quad (91)$$

wobei $u_{x_j}^{(i)}$ die Verschiebung des Knotens K_i in x_j -Richtung bezeichnet.

Die Eigenwerte c_i ($i=I, II, III$) von \mathbf{C} entsprechen den Quadraten der Hauptstreckungen (die Streckung $\lambda=l/l_0$ bezeichnet dabei die aktuelle Länge eines Linienelements bezogen

auf dessen Ausgangslänge). Damit folgt für die logarithmischen Hauptdehnungen $\varepsilon_i = \ln\sqrt{c_i}$ und somit auch $c_i = \exp(2\varepsilon_i)$. Weiterhin gilt $\mathbf{n}_i^\varepsilon = \mathbf{n}_i^c$ für die (normierten) Eigenvektoren des logarithmischen Dehnungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}$ und des Rechts-Cauchy-Green-Tensors \mathbf{C} . Außerdem muss gelten (Einheitstensor \mathbf{I})

$$\begin{aligned} (\mathbf{C} - c_I \mathbf{I}) \mathbf{n}_I &= \mathbf{0} \\ (\mathbf{C} - c_{II} \mathbf{I}) \mathbf{n}_{II} &= \mathbf{0} \quad \text{mit } c_i = \exp(2\varepsilon_i), \quad i = I, II, III \\ (\mathbf{C} - c_{III} \mathbf{I}) \mathbf{n}_{III} &= \mathbf{0} \end{aligned} \tag{92}$$

Die Eigenwerte ε_i und die Eigenvektoren \mathbf{n}_i ($i=I, II, III$) sind aus der Hauptachsentransformation des logarithmischen Dehnungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}$ bekannt. Damit existiert ein nichtlineares Gleichungssystem zur Bestimmung der erforderlichen Knotenverschiebungen (9 Gleichungen für 9 (bzw. 6) Unbekannte) zur Realisierung des gewünschten effektiven Deformationszustands im gerade betrachteten Lastinkrement. Die Lösung dieses nichtlinearen Gleichungssystems kann mittels des NEWTON-Verfahrens (siehe z.B. Törnig und Spellucci [116]) erfolgen.

Dazu müssen lediglich noch die Ableitungen $\partial c_{kl} / \partial u_{x_j}^{(i)}$ der Komponenten c_{kl} von \mathbf{C} nach den Knotenverschiebungen $u_{x_j}^{(i)}$ berechnet werden.

So erhält man schließlich die erforderlichen Knotenverschiebungen für jedes Lastinkrement. Die RVE-Simulationsrechnungen werden geometrisch nichtlinear durchgeführt.

Submodelle zur Untersuchung des Partikelverhaltens

Die im Rahmen von FE-Simulationen durchführbaren Submodellrechnungen ermöglichen die genauere Untersuchung eines lokalen Bereichs des Globalmodells (im Rahmen dieser Arbeit ist dies das RVE) mit feinerer Vernetzung und ggf. zusätzlichen Details (z.B. Partikel). Die Belastung der Submodelle erfolgt dabei basierend auf einer Interpolation der Lösung des relativ grob vernetzten Globalmodells im Bereich der Submodelloberfläche. Die Verwendung der Submodelltechnik ist demnach sinnvoll, wenn eine genauere Lösung für eine lokale Region des Globalmodells benötigt wird und die detaillierte Modellierung dieser lokalen Region einen vernachlässigbaren Effekt auf die Gesamt- bzw. Globallösung hat. Die zur Belastung der Submodelle benötigte globale Lösung (in der Umgebung der Submodelloberfläche) kann dabei sowohl in Form der Knotenverschiebungen als auch in Form der Elementspannungen verwendet werden. Weitere Informationen zur Submodelltechnik finden sich in der Begleitliteratur des FE-Programms ABAQUS [1].

Um das Verhalten der spröden Partikel innerhalb der betrachteten Kornstruktur genauer untersuchen zu können, wurden daher verschiedene Submodelle erstellt. Diese Submodelle beinhalten ein Partikel sowie die unmittelbare Partikelumgebung, bestehend aus dem duktilen Matrixmaterial. Sie werden entsprechend der aus den RVE-Simulationsrechnungen bekannten Lastgeschichten an den Korngrenzen (siehe Kapitel 4.2.2) belastet (alle Rechnungen werden geometrisch nichtlinear durchgeführt).

Zur realitätsnahen Modellierung der Partikel können dabei die im Rahmen der Mikrostrukturanalyse gewonnenen Daten (vgl. Kapitel 3.2.2) genutzt werden. Basierend auf den mittels der REM-Analyse erhaltenen zweidimensionalen Morphologiedaten (Größenverteilung, Formverteilung) kann unter Verwendung des im Zusammenhang mit der RVE-Generierung vorgestellten Verfahrens zur Erzeugung von Ellipsoiden aus angepasst-

ten Ellipsen (St. Pierre et al. [111]) eine Ellipsoidpopulation generiert werden, die hinsichtlich Größenverteilung und Formverteilung der realen Partikelpopulation zumindest ähnelt. Die resultierende Größenverteilung entspricht qualitativ und auch quantitativ weitgehend der aus den experimentellen Daten erhaltenen Verteilungsfunktion und kann demnach gut durch eine Weibull-Verteilung (entsprechend Gleichung (78), mit den Parametern $\alpha=4.65$ und $\beta=0.92$) approximiert werden. Die mittlere Partikelgröße beträgt $d_{eq}\approx 0.20\mu\text{m}$, es treten jedoch auch Partikel mit einem äquivalenten Durchmesser von deutlich mehr als $1\mu\text{m}$ auf. Es sei angemerkt, dass diese Werte direkt für die generierte Ellipsoidpopulation und nicht für Schnittellipsen der Ellipsoide ermittelt wurden. Hinsichtlich der Partikelform wird die vereinfachende Annahme getroffen, dass die Partikel durch Rotationsellipsoide dargestellt werden können (Umwandlung der generierten Ellipsoide in volumengleiche Rotationsellipsoide). Auch wenn dies nicht den realen Gegebenheiten entspricht (erkennbar abgeplattete Rotationsellipsoide), ist die Annahme sinnvoll, da bei stark vereinfachter Modellierung dennoch alle wesentlichen mikrostrukturellen Einflussfaktoren wie Form (Streckung, vgl. Lindley et al. [75]: Partikelfilm als Scheibe mit Durchmesser d und Dicke a : $\sigma_{\text{Partikel}}=d/a\tau$), Orientierung und Größe untersucht werden können. Das mittlere Halbachsenverhältnis b/a beträgt etwa 0.3, wobei ein Großteil der Halbachsenverhältnisse im Bereich $0.1 < b/a < 0.7$ liegt, d.h. die oft (im Rahmen der Formulierung von local-approach-Spaltbruchmodellen) angenommenen kugelförmigen Partikel treten zumindest für den betrachteten Werkstoff extrem selten auf.

Basierend auf diesen Informationen bezüglich Form und Größe der Partikel können geeignete Submodelle zur Untersuchung des Partikelverhaltens erstellt werden. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden zwei verschiedenen Arten von Submodellen verwendet, die im Folgenden beschrieben werden.

Den ersten Submodelltyp stellen die vereinfachten Submodelle dar (vgl. Kroon et al. [64]). Hierbei erfolgt eine Modellierung der das Partikel umgebenden Matrix ohne direkte Berücksichtigung der Korngrenze. So können diese Submodelle unter Verwendung von axialsymmetrischen Elementen erstellt werden, was aufgrund des deutlich geringeren numerischen Aufwands im Vergleich zu 3D-Modellen im Hinblick auf die zahlreichen durchzuführenden Simulationsrechnungen sehr vorteilhaft ist. Der Nachteil ist, neben der notwendigen Vernachlässigung der Korngrenze, dass die aus den RVE-Simulationsrechnungen erhaltenen allgemeinen lokalen Belastungszustände im Bereich der Korngrenzen zu bezüglich der relevanten Feldgrößen ähnlichen axialsymmetrischen Belastungszuständen vereinfacht werden müssen. Für den axialsymmetrischen Belastungszustand gilt

$$\sigma_e = \sigma_I - \sigma_{II} \quad (93)$$

und

$$h = \frac{\sigma_I + 2\sigma_{II}}{3(\sigma_I - \sigma_{II})} \quad (94)$$

Bei gegebenem Belastungszustand σ_I , σ_e (korreliert mit ε_e^{pl}), h liefern die Gleichungen (93) und (94) im Allgemeinen verschiedene Werte für σ_{II} . Daher kann entweder der Mittelwert beider Lösungen verwendet werden, oder die Berechnung von σ_{II} erfolgt unter Verwendung nur einer der Gleichungen, wobei im Falle einer gewünschten Erhaltung von σ_I und σ_e Gleichung (93) und im Falle einer gewünschten Erhaltung von σ_I und h Gleichung (94) benutzt wird. Die geeignete Wahl der Berechnungsmethode für σ_{II} hängt demnach von den im Zusammenhang mit dem untersuchten Vorgang relevanten Feldgrößen ab, welche zunächst durch Simulationsrechnungen mit realitätsnahen Submodellen identifiziert werden müssen.

Die vereinfachten Submodelle werden unter Verwendung von axialsymmetrischen 4-Knoten-Elementen (ABAQUS CAX4) erstellt, wobei eine sehr feine Vernetzung im Bereich der Grenzfläche von Partikel und Matrix sowie im Bereich der möglichen Rissausbreitung erfolgt. Weiterhin werden in der Rissausbreitungsebene Kohäsivzonenelemente (ABAQUS COHAX4) eingefügt. Ein resultierendes FE-Modell mit etwa 8000 Elementen ist in Abb. 57 dargestellt. Die Belastung kann wahlweise durch Aufbringen von Verschiebungen oder Spannungen auf die freien Ränder erfolgen (im Rahmen dieser Arbeit werden Spannungsrandbedingungen ($\sigma_y = \sigma_I$, $\sigma_x = \sigma_{II}$) verwendet).

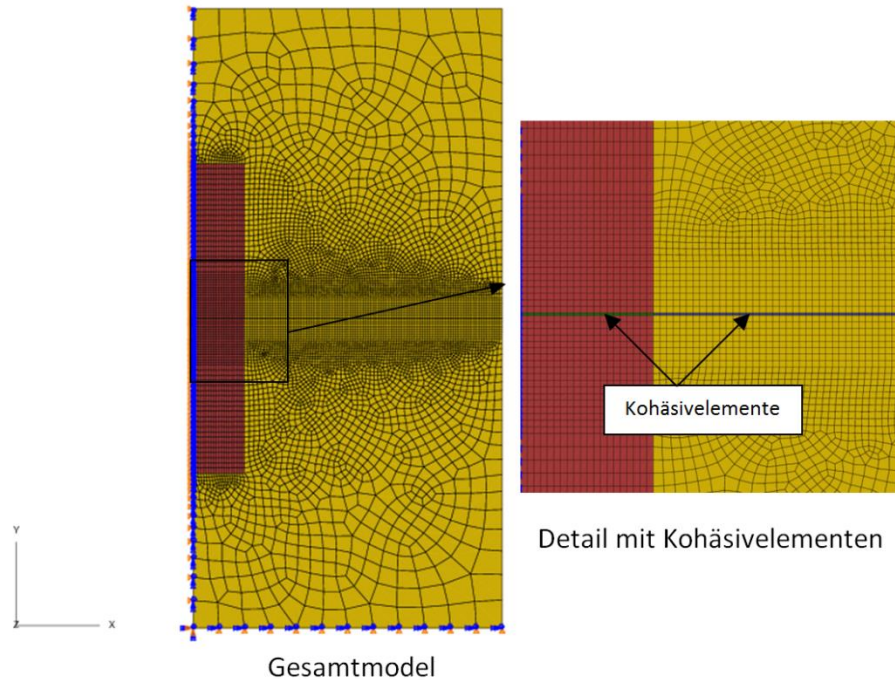


Abb. 57: Vereinfachtes Submodell (Matrix gelb, Partikel rot), axialsymmetrisch; Partikel vereinfachend als Zylinder modelliert (wesentliche Vorgänge finden im Bereich der Partikelmitte statt)

Das für das Matrixmaterial der vereinfachten Submodelle verwendete Materialmodell ist ein elastisch-plastisches Material (elastischer Anteil: Hooke'sche Gesetz; plastischer Anteil: v. Mises Fließmodell mit isotroper Verfestigung) mit temperatur- und dehnrateabhängiger Plastizität, so dass für die Fließspannung σ_0 gilt (T in Kelvin)

$$\sigma_0(\varepsilon_e^{pl}, T, \dot{\varepsilon}) = \sigma_0^{ref}(\varepsilon_e^{pl}) \cdot (a_1 \exp(-a_2 T) + a_3) \cdot (b_1 \ln(\dot{\varepsilon}) + b_2) \quad (95)$$

Mit der Referenzfließspannung $\sigma_0^{ref}(\varepsilon_e^{pl}=0) \approx 450 \text{ MPa}$ bei Raumtemperatur und quasistatischer Belastung und den zusätzlichen Parametern $a_1 \approx 3.3$, $a_2 \approx 0.014$, $a_3 \approx 0.94$, $b_1 \approx 0.013$, $b_3 \approx 1.09$. Diese Materialparameter resultieren aus der Anpassung an die während der Materialcharakterisierung ermittelten Fließkurven (siehe Kapitel 3.1.1). Das Partikel wird jeweils als rein elastisch modelliert, mit elastischen Konstanten entsprechend denen der Matrix: $E(T) = 212 \text{ GPa} - 0.055 \text{ GPa}/^\circ\text{C} \cdot T$ und $\nu = 0.3$.

Den zweiten Submodelltyp stellen die realitätsnahen Submodelle dar. Hierbei erfolgt eine Modellierung der das Partikel umgebenden Matrix unter direkter Berücksichtigung der Korngrenze. Diese Submodelle sind kugelförmig und bestehen aus dem Material zweier benachbarter Körner (Kristallplastisches Materialmodell, welches auch für die RVE verwendet wird; jeweils mit der entsprechenden kristallographischen Orientierung) mit einem an der Grenzfläche eingelagerten spröden Partikel von variabler Form, Größe und Orientierung. Die Vernetzung erfolgte unter Verwendung von 10-Knoten-Tetraederelementen (ABAQUS C3D10) für Partikel und Matrix, sowie gegebenenfalls 8-Knoten-Kohäsivzonenelementen (ABAQUS COH3D8) in der Rissausbreitungsebene. Die Verbindung der unterschiedlichen Elementtypen kann durch eine entsprechende

Zwangsbedingung für die Knotenverschiebungen realisiert werden. Die Anzahl der Elemente ist abhängig von der Partikelgröße und dem Anwendungsfall (mit oder ohne Rissausbreitung) und liegt typischerweise im Bereich von 30000 bis 60000 Elementen. Ein Beispiel für ein realitätsnahes Submodell ist in Abb. 58 und Abb. 59 dargestellt. Die realitätsnahen Submodelle erlauben grundsätzlich auch die Betrachtung der möglichen Wechselwirkungen mehrerer nah beieinander liegender Partikel (Partikelcluster).

Die Belastung der realitätsnahen Submodelle erfolgt auf Basis der Verschiebungen oder der Spannungen die im Bereich der betrachteten Korngrenze, an der das Submodell virtuell platziert wurde, vorliegen. Dazu werden die entsprechenden Daten aus den Ergebnissen der globalen Simulationsrechnung (RVE-Simulationsrechnung) extrahiert und anschließend können dann die im relevanten Bereich vorliegenden Verschiebungen oder Spannungen auf die Submodelloberfläche aufgebracht werden. Aufgrund der höheren numerischen Stabilität wird im Rahmen dieses Vorhabens zumeist die verschiebungsbasierte Lastaufbringung verwendet.

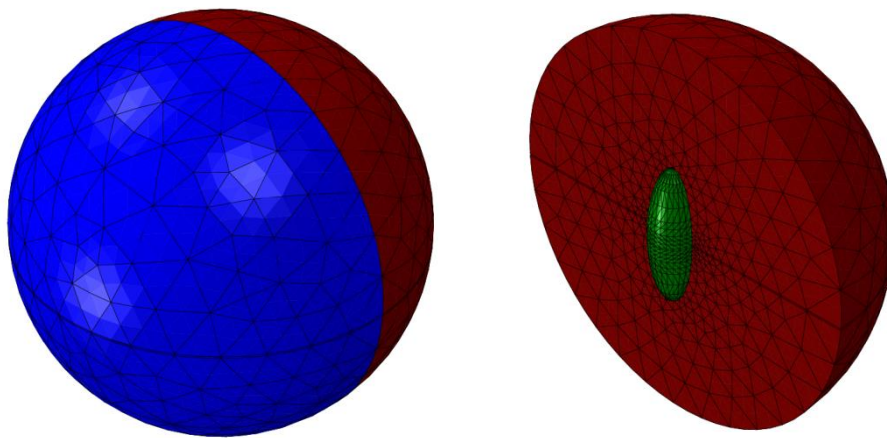


Abb. 58: Realitätsnahes Submodell (Korn 1 blau, Korn 2 rot, Partikel grün)

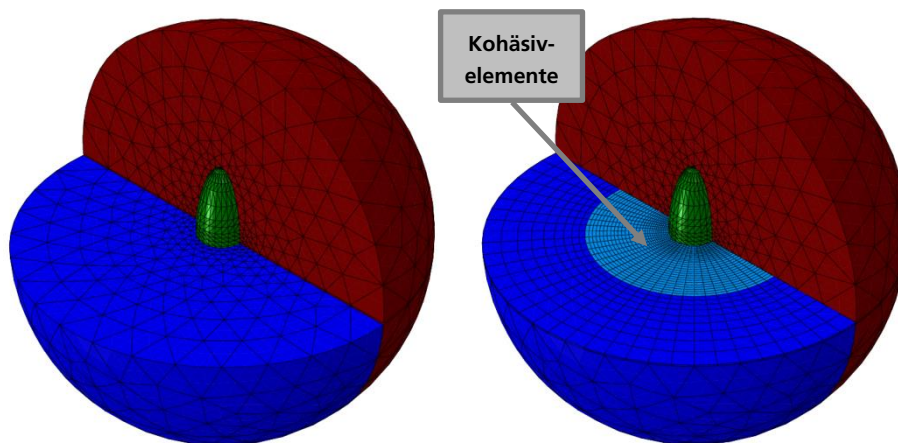


Abb. 59: Realitätsnahes Submodell, ohne (links) und mit (rechts) Kohäsivelementen

Die typische Größe (Durchmesse bzw. Höhe) der für die Simulationsrechnungen verwendeten vereinfachten und realitätsnahen Submodelle beträgt etwa 6 μm . Demgegenüber weisen die hier verwendeten RVE eine typische Kantenlänge von etwa 60 μm auf. Damit wird deutlich, dass eine direkte Modellierung der Partikel im RVE aufgrund der dann erforderlichen extrem hohen Elementanzahl nicht sinnvoll ist.

Die in beiden Submodelltypen verwendeten Kohäsivzonelemente weisen ein zunächst linear-elastisches Verhalten, dem die Initiierung und Entwicklung einer Schädigung

gung folgt, auf. Das elastische Verhalten wird dabei durch eine konstitutive elastische Matrix beschrieben, welche die nominellen Spannungen und die nominellen Dehnungen im Interface verknüpft. Die nominellen Spannungen (tractions) entsprechen den auf die Ausgangsfläche bezogenen Kraftkomponenten an den Integrationspunkten, während die auf die Ausgangsdicke bezogenen Verschiebungen (separations) an den Integrationspunkten die nominellen Dehnungen darstellen.

Der nominelle Spannungsvektor \mathbf{t} besitzt im allgemeinen Fall drei Komponenten (t_n , t_s , t_t), welche den Normalzug und den Scherzug repräsentieren. Die zugehörigen Separationen werden mit δ_n , δ_s und δ_t bezeichnet. Mit der Ausgangsdicke D_0 des Kohäsivelements können die nominellen Dehnungen definiert werden

$$\varepsilon_n = \frac{\delta_n}{D_0}, \quad \varepsilon_s = \frac{\delta_s}{D_0}, \quad \varepsilon_t = \frac{\delta_t}{D_0} \quad (96)$$

Damit ergibt sich das elastische Verhalten gemäß

$$\mathbf{t} = \begin{pmatrix} t_n \\ t_s \\ t_t \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} K_{nn} & K_{ns} & K_{nt} \\ K_{ns} & K_{ss} & K_{st} \\ K_{nt} & K_{st} & K_{tt} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_n \\ \varepsilon_s \\ \varepsilon_t \end{pmatrix} = \mathbf{K}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (97)$$

Die elastische Matrix \mathbf{K} liefert in allgemeinen Fall ein vollständig gekoppeltes Verhalten zwischen allen Komponenten des Spannungs- und des Dehnungsvektors, oftmals (so auch im Rahmen dieser Arbeit) werden nur die Diagonalelemente von \mathbf{K} definiert. Dabei gilt $K_{nn}=E/D_0$, $K_{ss}=K_{tt}=G/D_0$ (mit dem Elastizitätsmodul E und dem Schubmodul G).

Die Initiierung der Schädigung erfolgt, sobald ein vorgegebenes Spannungs- oder Dehnungskriterium erfüllt ist. Das Kriterium der maximalen nominellen Spannung

$$\max \left\{ \frac{\langle t_n \rangle}{t_n^0}, \frac{t_s}{t_s^0}, \frac{t_t}{t_t^0} \right\} = 1 \quad (98)$$

wurde im Rahmen dieser Arbeit verwendet.

Die Maximalwerte der nominellen Spannungen für Normalbeanspruchung und Schubbeanspruchung (t_n^0 , t_s^0 , t_t^0) stellen die vorzugebenden Materialparameter für die Schädigungsinitiierung dar. Die Macaulay-Klammern $\langle \cdot \rangle$ in Gleichung (98) symbolisieren, dass bei einer Druckbeanspruchung keine Schädigungsinitiierung erfolgen kann.

Nach der Initiierung der Schädigung folgt eine Abnahme der Materialsteifigkeit. Diese Abnahme kann durch eine skalare Schädigungsvariable S beschrieben werden, die die kombinierten Effekte aller aktiven Mechanismen erfasst. Der Wert von S nimmt dabei monoton zu. Für die Spannungskomponenten gilt dann

$$\begin{aligned} t_n &= \begin{cases} (1-S)\bar{t}_n, & \bar{t}_n \geq 0 \\ \bar{t}_n, & \text{anderenfalls} \end{cases} \\ t_s &= (1-S)\bar{t}_s \\ t_t &= (1-S)\bar{t}_t \end{aligned} \quad (99)$$

wobei \bar{t}_n , \bar{t}_s und \bar{t}_t die durch das elastische Verhalten für die vorliegenden Dehnungen ohne Schädigung vorhergesagten Spannungskomponenten darstellen. Um die Schädigungsentwicklung unter kombinierter Normal- und Schubbeanspruchung zu beschreiben, ist es sinnvoll, eine effektive Verschiebung einzuführen:

$$\delta_m = \sqrt{(\delta_n)^2 + (\delta_s)^2 + (\delta_t)^2} \quad (100)$$

Die Definition der Schädigungsvariablen S bestimmt den Schädigungsverlauf. Im Rahmen dieser Arbeit wird ein linearer Schädigungsverlauf verwendet. Dabei gilt

$$S = \frac{\delta_m^f (\delta_m^{\max} - \delta_m^0)}{\delta_m^{\max} (\delta_m^f - \delta_m^0)} \quad (101)$$

mit dem Maximalwert bis zum aktuellen Zeitpunkt der Lastgeschichte δ_m^{\max} und dem Wert bei Versagen δ_m^f für die effektive Verschiebung. Das resultierende Verhalten eines Kohäsivelements ist in Abb. 60 dargestellt.

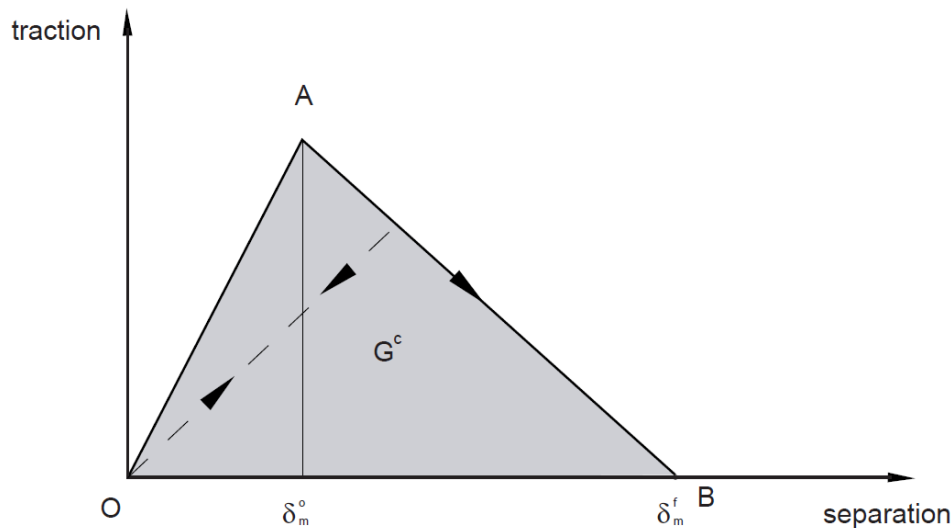


Abb. 60: Traction-separation-Verhalten eines Kohäsivelements, linearer Schädigungsverlauf (Quelle: ABAQUS [1])

Die Fläche G^c unter der Kurve 0-A-B entspricht der Trennarbeit, d.h. die effektive Verschiebung bei Versagen δ_m^f sollte so vorgegeben werden, dass diese Arbeit der effektiven Oberflächenenergie γ_{eff} des betrachteten Materials entspricht.

Weitere Informationen zu den Kohäsivzonelementen finden sich in der Begleitliteratur des FE-Programms ABAQUS [1].

Kristallplastisches Materialmodell

Das Materialverhalten der einzelnen Körner im RVE bzw. im Submodell muss mit einem Modell der klassischen Einkristallplastizität beschrieben werden. Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete kristallplastische Materialmodell basiert auf den Ausführungen von Asaro und Rice [9] bzw. Asaro [10] und liegt in Form einer Materialroutine für das Finite-Elemente-Programmsystem ABAQUS (Huang [54]) vor. Im Hinblick auf die Modellformulierung werden die Annahmen getroffen, dass die plastische Deformation allein durch Versetzungs-Gleitung erfolgt (keine Berücksichtigung von Diffusion, Zwillingsbildung und Korngrenzengleiten) und die Schmid-Spannung in den Gleitsystemen die treibende Kraft für diese Gleitung darstellt.

Die Kinematik des Modells basiert auf der multiplikativen Dekomposition des Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \quad (102)$$

mit dem durch elastische Gitterstreckungen und Gitterrotation verursachten Anteil \mathbf{F}^e sowie dem aus der Gleitung in den Gleitsystemen resultierenden Anteil \mathbf{F}^p . Die elastischen Eigenschaften werden als unabhängig von der plastischen Scherung angenommen.

men. Die Änderungsrate von \mathbf{F}^P ist abhängig von den Gleitraten $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ in den Gleitsystemen gemäß

$$\dot{\mathbf{F}}^P (\mathbf{F}^P)^{-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad (103)$$

wobei die Einheitsvektoren $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ und $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ die Gleitrichtung und die Normale zur Gleit-eben in der Referenzkonfiguration bezeichnen (Summation über alle aktiven Gleitsys-teme). In der deformierten Konfiguration gilt $\mathbf{s}^{e(\alpha)} = \mathbf{F}^e \mathbf{s}^{(\alpha)}$ und $\mathbf{m}^{e(\alpha)} = \mathbf{m}^{(\alpha)} (\mathbf{F}^e)^{-1}$. Weiterhin gilt

$$\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{D} + \mathbf{\Omega}, \quad \mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^P, \quad \mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega}^e + \mathbf{\Omega}^P \quad (104)$$

mit

$$\mathbf{D}^e + \mathbf{\Omega}^e = \dot{\mathbf{F}}^e (\mathbf{F}^e)^{-1}, \quad \mathbf{D}^P + \mathbf{\Omega}^P = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{e(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{e(\alpha)} \quad (105)$$

Die Existenz eines elastischen Potenzials $\Phi = \Phi(\mathbf{F}^e)$ (Hill und Rice [48], Rice [101]) garan-tiert, dass die Beziehung zwischen \mathbf{D}^e und der Jaumann-Rate $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^*$ (oder mitrotierenden Spannungsrate auf Achsen, die mit dem Kristallgitter rotieren) des CAUCHY-Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$ durch

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^* + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{I} : \mathbf{D}^e) = \mathbf{L} : \mathbf{D}^e \quad \text{mit} \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}}^* = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{\Omega}^e \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{\Omega}^e \quad (106)$$

gegeben ist, wobei \mathbf{I} den Einheitstensor zweiter Ordnung und \mathbf{L} den Elastizitätstensor mit $L_{ijkl} = L_{jikl} = L_{ijlk} = L_{klij}$ bezeichnet (Hill und Rice [48]).

Es wird angenommen, dass die kristalline Gleitung dem Schmid-Gesetz folgt, d.h. die Gleitrate $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ in jedem Gleitsystem α hängt vom aktuellen $\boldsymbol{\sigma}$ nur durch die sog. Schmid-Spannung $\tau^{(\alpha)}$ ab. Die Schmid-Spannung entspricht dem „resolved shear stress“, wenn die elastischen Gitterverformungen vernachlässigbar sind. Es existieren viele Verallgemeinerungen für finite elastische Deformationen, hier wird die Version basierend auf Rice’s konjugierter Spannung zur Gleitung genutzt, damit gilt

$$\tau^{(\alpha)} = \mathbf{m}^{e(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{s}^{e(\alpha)} \quad (107)$$

Die Änderungsrate dieser Schmid-Spannung ist gegeben durch

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \mathbf{m}^{e(\alpha)} \cdot [\hat{\boldsymbol{\sigma}}^* + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{I} : \mathbf{D}^e) - \mathbf{D}^e \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{D}^e] \cdot \mathbf{s}^{e(\alpha)} \quad (108)$$

Für das hier vorgestellte elastisch-viskoplastische Modell wird angenommen, dass die inelastische Deformation eines Einkristalls ausschließlich durch kristalline Gleitung ver-ursacht wird. Basierend auf dem Schmid-Kriterium kann die Gleitrate $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ des Gleitsys-tems α bei wirkender Schubspannung $\tau^{(\alpha)}$ berechnet werden:

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right)^m \quad (109)$$

mit der konstanten Referenzdehnrates $\dot{a}^{(\alpha)}$, der aktuellen Festigkeit $g^{(\alpha)}$ sowie dem Dehnratesensitivitätsexponent m .

In dieser Formulierung gibt es keinen expliziten Schubspannungsgrenzwert für kristalli-ne Gleitung, d.h. für $\tau^{(\alpha)} > 0$ tritt plastische Deformation auf. Für Dehnratesensitivitäts-exponenten $m > 50$ wird eine Gleitrate von praktisch relevanter Größenordnung jedoch erst dann erreicht, wenn sich die Schubspannung einem bestimmten Wert (τ_0) nähert (Huang [54]).

Die Verfestigung wird durch die Entwicklung von $g^{(\alpha)}$ mittels einer inkrementellen Beziehung beschrieben:

Finite-Elemente-
Simulationsrechnungen

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (110)$$

wobei $h_{\alpha\beta}$ die Verfestigungsmoduli darstellen, die Summe reicht über alle aktiven Gleitsysteme. Dabei bezeichnen $h_{\alpha\alpha}$ (keine Summe über α) und $h_{\alpha\beta}$ die Moduli für Selbstverfestigung bzw. latente Verfestigung.

Hinsichtlich der Selbstverfestigung gilt

$$h_{\alpha\alpha} = h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{(\tau_S - \tau_0)} \right| \quad (111)$$

mit dem Startwert h_0 des Verfestigungsmoduls, der Schubspannung τ_0 , welche dem Startwert (für $\gamma=0$) der aktuellen Festigkeit $g^{(\alpha)}$ entspricht, der Durchbruchspannung τ_S für großes plastisches Fließen, sowie der akkumulierten Taylor-Schubverzerrung γ aller Gleitsysteme, für die gilt

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^{t_1} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (112)$$

Die Moduli der latenten Verfestigung sind gegeben durch

$$h_{\alpha\beta} = q \cdot h(\gamma) \quad \text{für } \alpha \neq \beta \quad (113)$$

wobei q eine Konstante ist.

Die bei der numerischen Implementierung dieses Modells verwendete Zeitintegrationsmethode ist die Tangentenmodul-Methode für ratenabhängiges Materialverhalten nach Peirce, Shih und Needleman ([92]). Dabei wird das Inkrement der Schubverzerrung γ^α im Gleitsystem α innerhalb des Zeitinkrements Δt durch

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \gamma_{t+\Delta t}^{(\alpha)} - \gamma_t^{(\alpha)} \quad (114)$$

definiert. Eine lineare Interpolation innerhalb Δt liefert dann

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} \cong \Delta t \left[(1 - \theta) \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \theta \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(\alpha)} \right] \quad (115)$$

wobei der Parameter θ Werte von 0 bis 1 annehmen kann. Für $\theta=0$ ergibt sich das explizite Euler-Zeitintegrationsverfahren. Im vorliegenden Fall wurde $\theta=0.5$ gewählt. Die Gleitrate $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ ist im Allgemeinen eine Funktion der Schubspannung $\tau^{(\alpha)}$ und der aktuellen Festigkeit $g^{(\alpha)}$. Die Taylor-Reihenentwicklung der Gleitrate liefert

$$\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(\alpha)} \cong \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \Delta \tau^{(\alpha)} + \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \Delta g^{(\alpha)} \quad (\text{Abbruch nach linearem Glied}) \quad (116)$$

wobei $\Delta \tau^{(\alpha)}$ und $\Delta g^{(\alpha)}$ die Inkremente der Schubspannung und der aktuellen Festigkeit im Gleitsystem α innerhalb des Zeitinkrements Δt darstellen. Somit folgt schließlich

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} \cong \Delta t \left[\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \Delta \tau^{(\alpha)} + \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \Delta g^{(\alpha)} \right) \right] \quad \text{für } \theta = 0.5 \quad (117)$$

Hinsichtlich weiterführender Informationen bezüglich der numerischen Umsetzung des Zeitintegrationsverfahrens für das verwendete Materialmodell sei auf die Ausführungen von Huang [54] verwiesen.

Die wesentlichen zu bestimmenden Materialparameter in dem hier vorgestellten Materialmodell sind der Dehnratensensitivitätsexponent m , die Schubspannung τ_0 und der Verfestigungsmodul h_0 , welche für alle aktiven Familien von Gleitsystemen ermittelt werden müssen. Für das hier betrachtete Material wird, in Anlehnung an das Vorgehen in bekannten Studien (Osipov et al. [91], Mathieu et al. [83]), von zwei aktiven Familien von Gleitsystemen ($\langle 110 \rangle \{111\}$ und $\langle 112 \rangle \{111\}$, insgesamt 24 Gleitsysteme) ausgegangen.

Die Anpassung der Materialparameter für das kristallplastische Materialmodell wird in einem mehrstufigen Verfahren durchgeführt. Dabei besteht die Anpassungsprozedur aus einem Fit der effektiven Spannungs-Dehnungs-Kurve eines Volumenelementes mit polykristalliner Mikrostruktur an die Spannungs-Dehnungs-Kurve eines Volumenelementes aus dem quasi-homogenen effektiven Material, wobei die Dehnungen vorgegeben werden. Für die elastischen Konstanten werden die aus der Materialcharakterisierung (siehe Kapitel 3.1.1) verfügbaren Werte für den betrachteten Werkstoff (E und ν , elastisch isotropes Materialverhalten) bzw. Literaturwerte (elastisch anisotropes Materialverhalten mit $C_{11}=L_{1111}$, $C_{12}=L_{1122}$ und $C_{44}=L_{1212}$, vgl. Mathieu et al. [83]) verwendet. Zur Steigerung der numerischen Effizienz erfolgt im ersten Schritt eine Grobanpassung der Parameter unter Verwendung vereinfachter Volumenelemente mit idealisierter Mikrostruktur (würfelförmige Körner). Die Feinanpassung der Modellparameter wird anschließend mittels der realitätsnahen statistisch repräsentativen Volumenelemente (RVE) durchgeführt. Basierend auf der bekannten Dehnratenabhängigkeit des effektiven Materials wird für den Dehnratensensitivitätsexponent ein Wert von $m=55$ abgeschätzt. Weiterhin wird die Konstante $q=1$ gesetzt und $\tau_s \approx 1.7\tau_0$ angenommen. Demnach müssen lediglich die Schubspannung τ_0 und der Verfestigungsmodul h_0 für beide aktiven Familien von Gleitsystemen (GSF) angepasst werden. Die Ergebnisse in Form der Spannungs-Dehnungs-Kurven (für verschiedene Temperaturen) sind in Abb. 61 dargestellt.

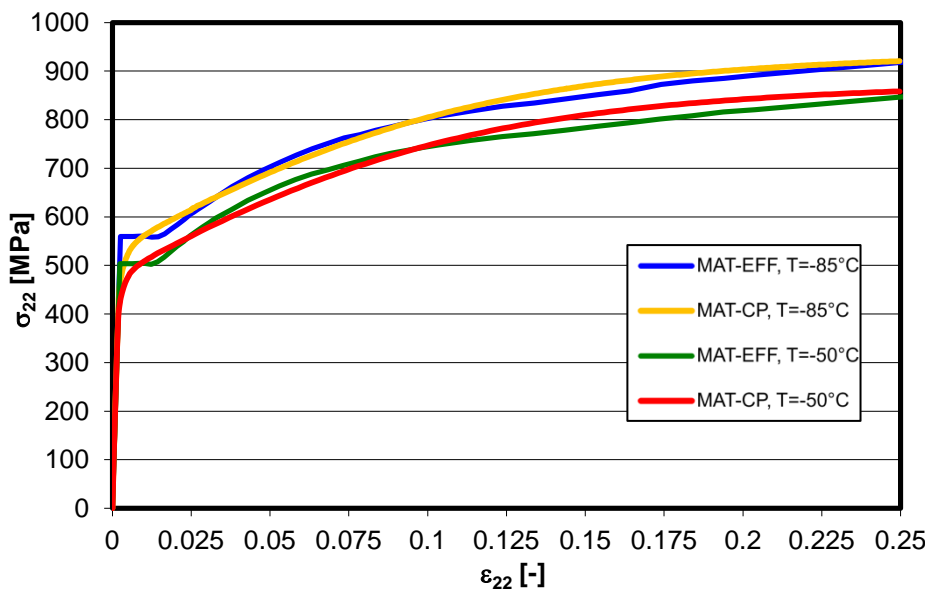


Abb. 61: Angepasste effektive Spannungs – Dehnungskurven für das polykristalline RVE (MAT-CP) bei einachsiger Belastung, verschiedene Temperaturen

Wie man erkennt, kann eine sehr gute Übereinstimmung für beide betrachteten Temperaturen erzielt werden. Die zugehörigen Parameter für $T = -85^\circ\text{C}$ sind $\tau_0=210\text{MPa}$ und $h_0=475\text{MPa}$ (1. GSF) bzw. $\tau_0=230\text{MPa}$ und $h_0=575\text{MPa}$ (2. GSF). Für $T = -50^\circ\text{C}$ erhält man $\tau_0=190\text{MPa}$ und $h_0=470\text{MPa}$ (1. GSF) bzw. $\tau_0=210\text{MPa}$ und $h_0=570\text{MPa}$ (2. GSF).

GSF). Es sei angemerkt, dass die Parameterbestimmung auf der Basis von Makro-Experimenten streng genommen nicht eindeutig ist, daher ist ein Abgleich mit aus mikromechanischen Experimenten bestimmten oder theoretisch hergeleiteten Parametern für ähnliche Werkstoffe sinnvoll (z.B. Keh und Nakada [60]). Die mittels der beschriebenen Vorgehensweise ermittelten Materialparameter zeigen auch eine gute Übereinstimmung mit Parametersätzen vergleichbarer Materialien aus bekannten Studien (Osipov et al. [91], Mathieu et al. [83]).

Bei hinreichender Isotropie der polykristallinen RVE sollten die Spannungs-Dehnungs-Kurven für verschiedene Belastungsrichtungen mit guter Genauigkeit übereinstimmen. Dies ist für die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten RVE der Fall.

Die Berücksichtigung der verfestigenden Wirkung der Karbide innerhalb der Körner erfolgt implizit durch die Anpassung der Verfestigungsparameter des kristallplastischen Materials. Das für das quasi-homogenen effektive Material auftretende Lüders-Plateau kann mit dem hier verwendeten kristallplastischen Modell nicht abgebildet werden.

Nach Ermittlung der Parameter auf der Basis einer einachsigen Belastung wird zusätzlich überprüft, ob auch bei komplexeren mehrachsigen Belastungszuständen eine ähnlich gute Übereinstimmung der resultierenden Spannungen für effektives Material (MAT-EFF) und polykristallines RVE (MAT-CP) bei vorgegebenem Dehnungszustand vorliegt. Dazu wird eine typische Lastgeschichte aus dem Ligament einer tief gerissenen SE(B)-Probe aufgebracht. Die Ergebnisse sind in Abb. 62 und Abb. 63 dargestellt.

Wie man erkennt, liegt auch im Falle mehrachsiger Belastung eine gute Übereinstimmung aller wesentlichen Spannungskomponenten (siehe Abb. 62) vor. Entsprechend ergibt sich auch bezüglich der hydrostatischen Spannung σ_h sowie der Mises-Vergleichsspannung σ_e eine gute Übereinstimmung. Da die Spannungsmehrachsigkeit $h = \sigma_h / \sigma_e$ direkt aus hydrostatischer Spannung und Mises-Vergleichsspannung berechnet wird, wird auch deren Verlauf korrekt wiedergegeben. Berücksichtigt man, dass für Proportionalbelastungen die plastische Vergleichsdehnung ϵ_e^{pl} mit der Mises-Vergleichsspannung σ_e korreliert, so wird klar, dass auch die Entwicklung der plastischen Vergleichsdehnung mit guter Genauigkeit wiedergegeben wird. Die ermittelten Parametersätze sind demnach zur Durchführung der RVE-Simulationsrechnungen für mehrachsige Belastungszustände geeignet.

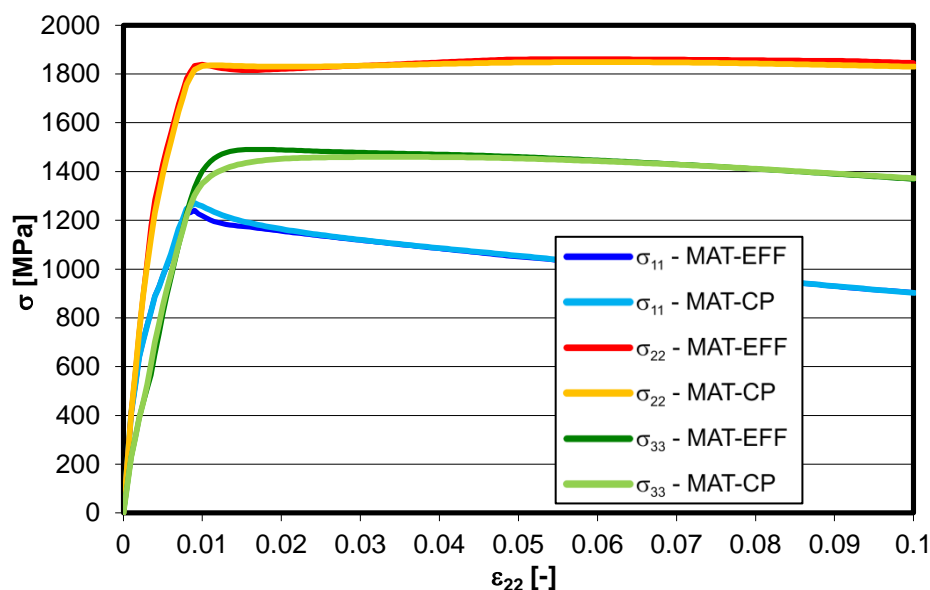


Abb. 62: Normalspannungen bei mehrachsiger Belastung, $T = -85^\circ\text{C}$

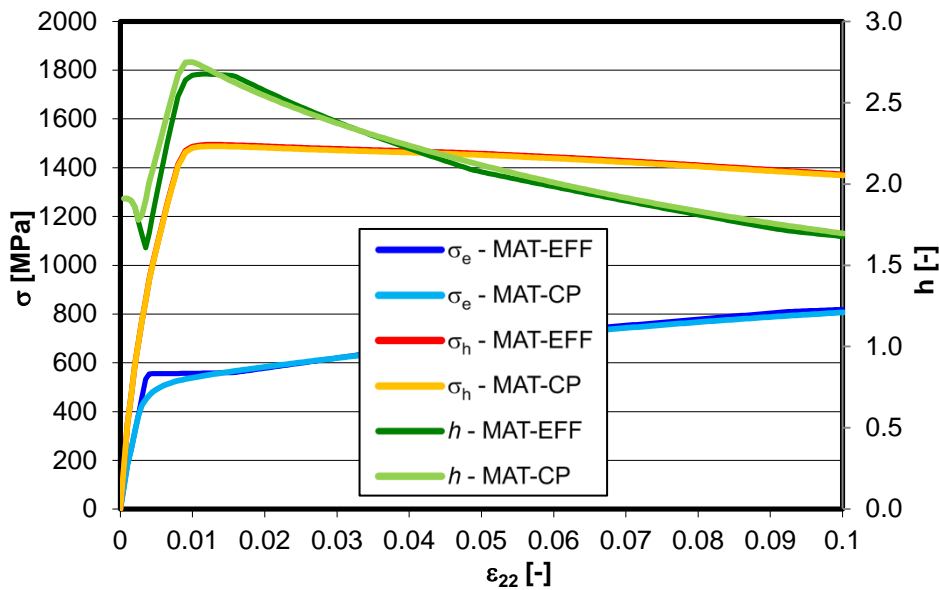


Abb. 63: Vergleichsspannung, hydrost. Spannung und Spannungsmehrachsigkeit bei mehrachsiger Belastung, $T=85^{\circ}\text{C}$

Es existieren auch Materialmodelle mit versetzungsdichtebasiertem Verfestigungsgesetz (Größeneinfluss), aber für viele Lastgeschichten werden vergleichbare Ergebnisse hinsichtlich der lokalen Feldgrößen erzielt (Mathieu et al. [83]), der phänomenologische Ansatz für das Verfestigungsgesetz ist daher im Rahmen dieser Arbeit ausreichend.

4.2.2 Feldgrößen an den Korngrenzen

In ferritisch-bainitischen Stählen stellen die Bainitpakete die Körner dar. Durch lokale Deformationsinkompatibilitäten (kristallographische Fehlorientierungen) zwischen den Körnern entstehen im Bereich der Korngrenzen Spannungs- und Dehnungsinhomogenitäten (siehe z.B. Diard et al. [31], Barbe et al. [12]).

Im Hinblick auf ein mikromechanisch fundiertes lokales Spaltbruchmodell ist es von wesentlichem Interesse, bei gegebener RVE-Effektivbelastung (Lokale Lastgeschichten aus Kapitel 4.1.2) die Streuung der relevanten Feldgrößen an den Korngrenzen mit guter Genauigkeit beschreiben zu können. Anhand der RVE-Simulationsrechnungen kann diese Streuung der Feldgrößen an den Korngrenzen bestimmt werden. Anschließend können die erhaltenen Ergebnisse statistisch ausgewertet und somit einer mathematischen Beschreibung zugänglich gemacht werden.

Die FE-Diskretisierung von Korngrenzen kann zu lokalen Artefakten (z.B. in Form von unrealistischen Spannungsüberhöhungen) führen. Da im Zusammenhang mit den Mikromechanismen der Spaltbruchauslösung die Forderung einer charakteristischen Länge, über die ein Kriterium erfüllt sein muss, üblich ist, erscheint eine Mittelung der entsprechenden Feldgrößen über ein gewisses Volumen als sinnvoll (Mathieu et al. [83], Osipov et al. [91]). Durch die Betrachtung von solchen effektiven lokalen Feldgrößen anstelle von punktuellen Größen wird das eventuelle Auftreten von lokalen Artefakten unproblematisch. Im Rahmen dieser Studie erfolgt daher eine volumetrische Mittelung der Feldgrößen über einen gewissen Bereich in der Umgebung der gerade betrachteten Korngrenze. Dieser Bereich wird, in Anlehnung an die Submodellgröße, auf zwei Elementlagen um die Korngrenze herum festgelegt. Da die Flächen der einzelnen Korngrenzen erkennbare Unterschiede aufweisen, werden größere Korngrenzen (Fläche $A_{KG} > 1.5A_{KG-ref}$, Referenzfläche $A_{KG-ref} \approx 30\mu\text{m}^2$, basierend auf durchschnittlicher Submodellgröße) nicht als Ganzes, sondern in Form von mehreren (überlappenden) Ausschnitten ausgewertet.

Das Hauptaugenmerk liegt im Rahmen dieser Studie auf der Identifikation von geeigneten Verteilungsfunktionen für die im Hinblick auf die Spaltbruchauslösung relevanten Feldgrößen. Die Auswertungen werden für die verschiedenen Lasten und Lastgeschichten durchgeführt, da die ermittelten qualitativen Zusammenhänge jedoch sehr ähnlich sind, wird die Darstellung der Ergebnisse auf die Auswertung eines RVE mit einem Belastungszustand entsprechend dem Zustand im Ligament (mittlerer Rissfrontabstand) einer tief gerissenen SE(B)-Probe mit 50% akkumulierter Versagenswahrscheinlichkeit ($T = -85^{\circ}\text{C}$) beschränkt. Als zu betrachtende Feldgrößen werden, basierend auf den Ergebnissen der Untersuchungen zum Partikelbruch (siehe Kapitel 4.2.3) und zum Rissübergang vom Partikel in die umgebende Matrix (siehe Kapitel 4.2.4), die maximale Hauptdehnung ϵ_1 , die maximale Hauptspannung σ_1 sowie die Spannungsmehrachsigkeit h ausgewählt.

Die Abb. 64 zeigt die Verteilung der maximalen Hauptdehnung im RVE. Es wird deutlich, dass hinsichtlich der Dehnung eine recht große Streuung vorliegt. Während der minimale auftretende Wert der Hauptdehnung weniger als 40% des effektiven Wertes (=volumetrischer Mittelwert für das RVE) beträgt, liegt der Maximalwert der Dehnung bei etwa 170% des Mittelwertes. Auch für die maximale Hauptspannung kann eine erkennbare Streuung innerhalb des RVE beobachtet werden (siehe Abb. 65). Die Streubreite ist jedoch im Vergleich zur maximalen Hauptdehnung deutlich geringer. Minimalwert und Maximalwert liegen im Bereich von 85% bzw. 115% des effektiven Wertes bzw. Mittelwertes (Die Richtung entspricht zumeist annähernd der globalen Hauptlasttrichtung). Erwartungsgemäß zeigt sich auch für die Spannungsmehrachsigkeit eine entsprechende Streuung (siehe Abb. 66). Hier liegen Minimalwert und Maximalwert im Bereich von 67% bzw. 137% des effektiven Wertes.

Durch eine genauere, nicht auf Minimal- und Maximalwerte beschränkte, Auswertung der Ergebnisse für die (effektiven) Feldgrößen in den Bereichen in der Umgebung der Korngrenzen können auch die Verteilungsfunktionen der betrachteten Feldgrößen bestimmt werden. Dabei werden die effektiven Feldgrößenwerte der einzelnen Korngrenzenbereiche jeweils mit ihrem Anteil an der RVE-Gesamtkorngrenzenfläche gewichtet. Die resultierenden Verteilungsfunktionen sind in Abb. 67 dargestellt.

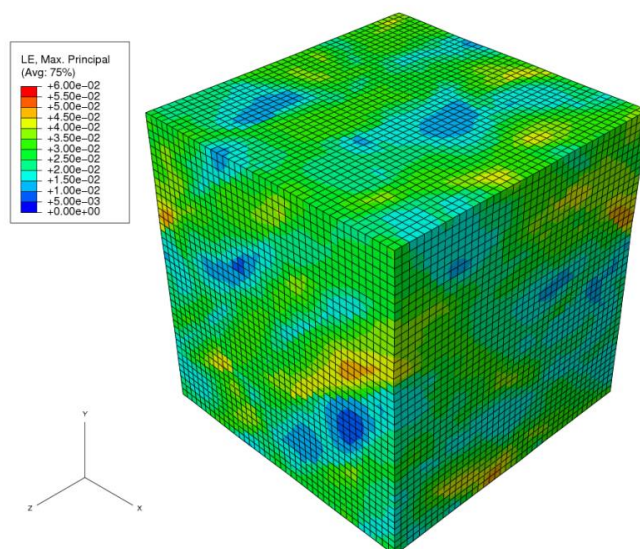


Abb. 64: Verteilung der max. Hauptdehnung im RVE

Abb. 65: Verteilung der max. Hauptspannung im RVE

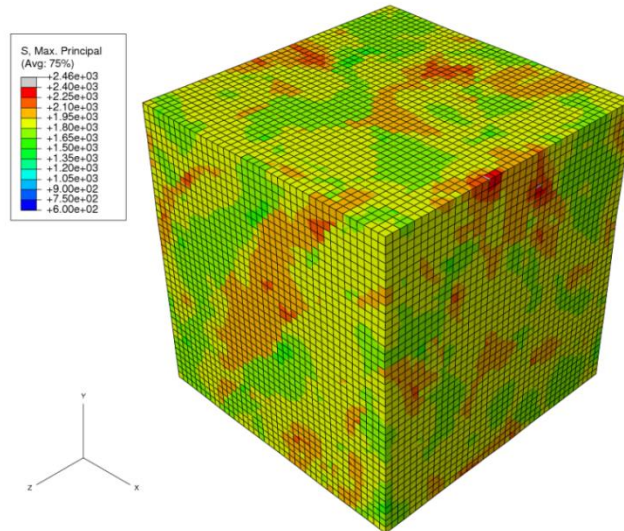
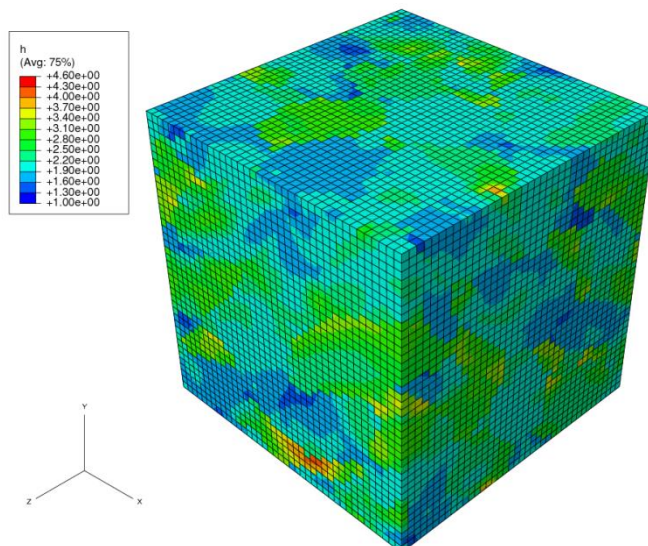


Abb. 66: Verteilung der Spannungsmehrachsigkeit im RVE



Für alle betrachteten Feldgrößen kann die jeweilige Verteilungsfunktion mit guter Genauigkeit durch eine Normalverteilung angenähert werden. Die größte Streuung liegt dabei für die maximale Hauptdehnung ε_1 vor, mit einer Standardabweichung in der Größenordnung von 20% des Erwartungswertes. Demgegenüber weist die Spannungsmehrachsigkeit h eine Standardabweichung von etwa 10% des Erwartungswertes auf, hinsichtlich der maximalen Hauptspannung σ_1 kann ein entsprechender Wert in der Größenordnung von 5% ermittelt werden. Diese Werte stehen hinsichtlich ihrer Größenordnung in guter Übereinstimmung mit der von Osipov et al. [91] für einen ähnlichen Werkstoff berechneten Standardabweichung von 10-15% für die Mises-Vergleichsspannung σ_e . Es bleibt anzumerken, dass die Streuung der Feldgrößen im RVE in gewissem Maße von der effektiven RVE-Dehnung ε_e^{pl} abhängig ist (steigende Streuung mit steigender Dehnung), was auch von anderen Autoren bestätigt wird (Zhao et al. [125], Osipov et al. [91]). Diese Gegebenheit wird jedoch im Rahmen dieser Arbeit vereinfachend nicht weiter berücksichtigt (wie auch der geringe Unterschied zwischen dem Mittelwert für das gesamte RVE und dem für die gesamte Korngrenzenumgebung im RVE). Zwar kann dies zu einer gewissen Ungenauigkeit bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeiten für Partikelbruch und Rissübergang in die Matrix im RVE (Kapitel 5.2) führen. Da jedoch die Gleichungen zur Berechnung der Partikelspan-

nung (siehe Kapitel 4.2.3) und des kritischen Partikeldurchmessers (siehe Kapitel 4.2.4), in die die Feldgrößen einfließen, ihrerseits nur eine begrenzte Genauigkeit aufweisen und die daraus resultierenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen ebenfalls approximiert werden, ist dies hinnehmbar, zumal so die Parameteranzahl reduziert wird. Hinsichtlich der Beträge der Streuungen der Feldgrößen im RVE kann noch angemerkt werden, dass diese im finalen Spaltbruchmodell implizit durch die entsprechenden Modellparameter beeinflussbar sind.

 Finite-Elemente-
 Simulationsrechnungen

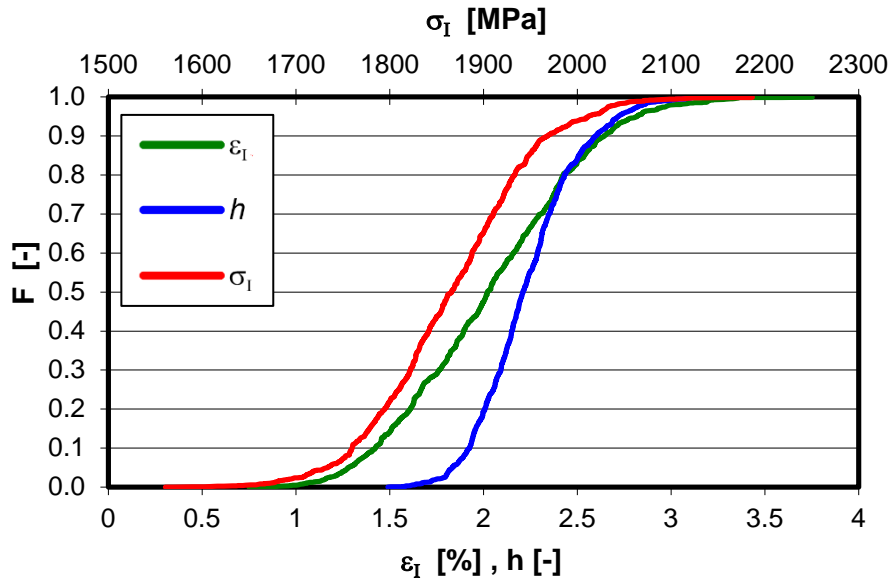


Abb. 67: Verteilungsfunktionen der betrachteten Feldgrößen σ_I , ε_I und h im RVE (Korngrenzen)

Im Hinblick auf ein mikromechanisch fundiertes lokales Spaltbruchmodell ist es wichtig, nicht nur die eindimensionalen Verteilungsfunktionen der einzelnen Feldgrößen zu kennen, sondern auch die mehrdimensionalen Verteilungen für zusammengehörige Werte der verschiedenen Feldgrößen, weil die durch entsprechende Terme zu beschreibenden Einzelvorgänge bei der Spaltbruchinitiierung im Allgemeinen von mehreren Feldgrößen abhängig sind. Da die Ergebnisse der Untersuchungen zum Partikelbruch (siehe Kapitel 4.2.3) und zum Rissübergang in die Matrix (siehe Kapitel 4.2.4) belegen, dass die Einzelvorgänge bei der Spaltbruchinitiierung jeweils durch nicht mehr als zwei der betrachteten Feldgrößen zu beschreiben sind, können zweidimensionale Verteilungsfunktionen verwendet werden. In Abb. 68 sind die an den Korngrenzen im RVE vorliegende ε_I - σ_I -Zustände aufgetragen, während die an den Korngrenzen im RVE vorliegenden h - σ_I -Zustände in Abb. 69 dargestellt sind.

Da alle Einzelverteilungen mit guter Genauigkeit durch eine Normalverteilung approximiert werden können, wird auch für die zweidimensionalen Verteilungsfunktionen eine Normalverteilung angenommen. Deren Dichtefunktion ist gegeben durch

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left(-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left[\frac{(x-\mu_1)^2}{\sigma_1^2} + \frac{(y-\mu_2)^2}{\sigma_2^2} - \frac{2\rho(x-\mu_1)(y-\mu_2)}{\sigma_1\sigma_2}\right]\right) \quad (118)$$

mit den Erwartungswerten μ_1 und μ_2 sowie den Standardabweichungen σ_1 und σ_2 der jeweils betrachteten Größen x und y .

Der Korrelationskoeffizient

$$\rho_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu_1)(y_i - \mu_2)}{\sigma_1\sigma_2} \quad (119)$$

beschreibt eine mögliche Korrelation der Feldgrößen untereinander. Im vorliegenden Fall gilt $\rho_{\varepsilon\sigma}=0.0000013$ und $\rho_{h\sigma}=0.0000059$, d.h. es liegt keine relevante Korrelation zwischen den einzelnen Feldgrößen vor. Die resultierenden zweidimensionalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für die maximale Hauptdehnung ε_1 und die maximale Hauptspannung σ_1 sowie die Spannungsmehrachsigkeit h und die maximale Hauptspannung σ_1 sind in Abb. 70 und in Abb. 71 dargestellt.

 Finite-Elemente-
 Simulationsrechnungen

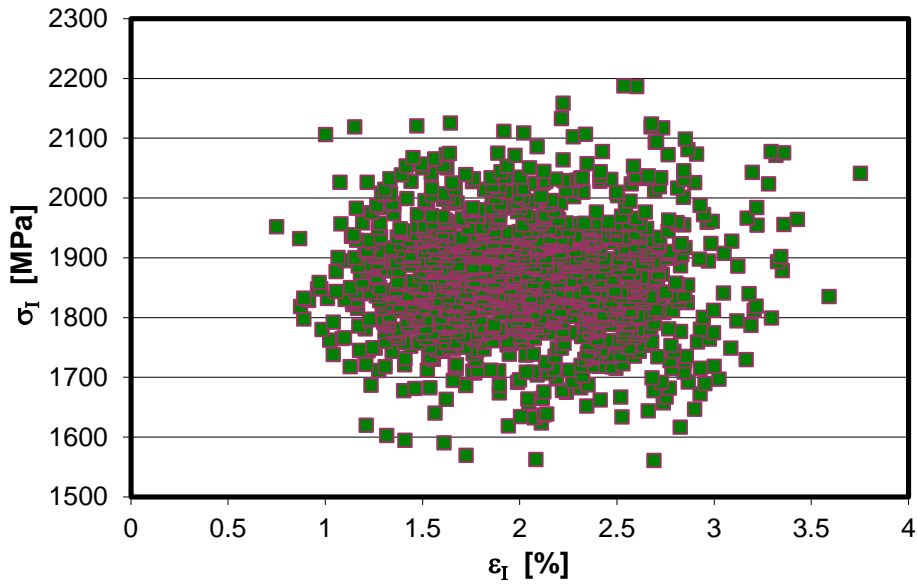


Abb. 68: An den Korngrenzen im RVE vorliegende ε_1 - σ_1 -Zustände

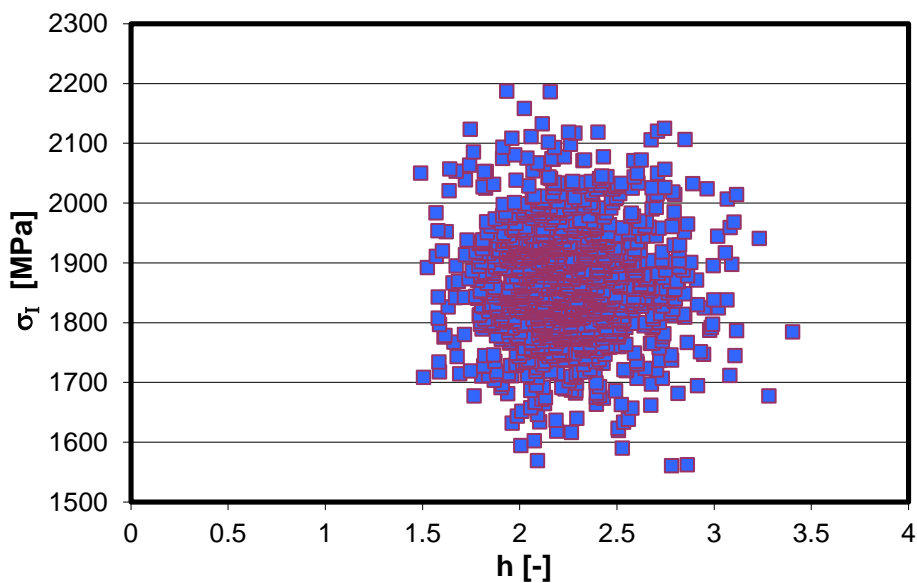


Abb. 69: An den Korngrenzen im RVE vorliegende h - σ_1 -Zustände

Damit stehen die erforderlichen grundsätzlichen Informationen hinsichtlich der Streuung der Feldgrößen an den Korngrenzen in RVE, die zur Herleitung eines mikromechanisch fundierten lokalen Spaltbruchmodells benötigt werden, zur Verfügung.

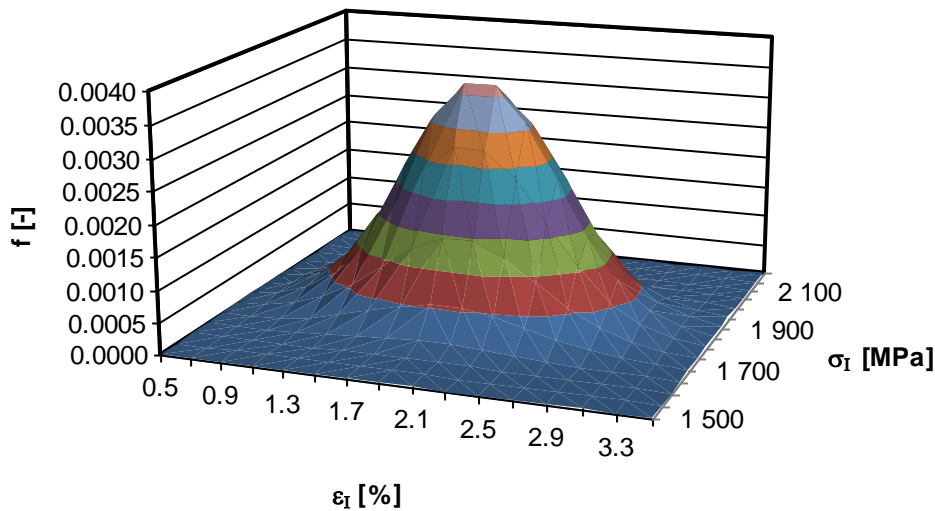


Abb. 70: Beschreibung der Verteilung der Korngrenzenzustände (ϵ_I - σ_I) im RVE durch zweidimensionale Normalverteilung, keine Korrelation der Größen: $\mu_\epsilon=0.02$, $\sigma_\epsilon=0.0048$; $\mu_\sigma=1865\text{MPa}$, $\sigma_\sigma=84\text{MPa}$

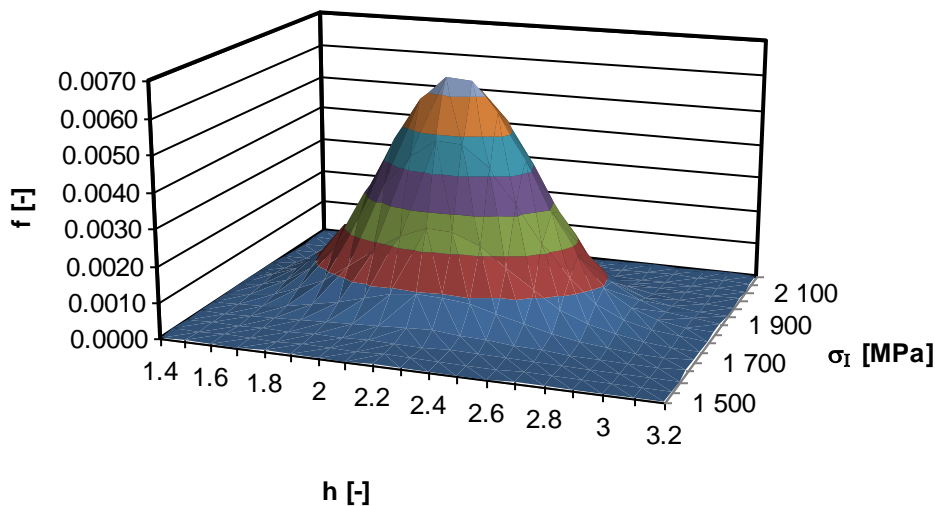


Abb. 71: Beschreibung der Verteilung der Korngrenzenzustände (h - σ_I) im RVE durch zweidimensionale Normalverteilung, keine Korrelation der Größen: $\mu_h=2.26$, $\sigma_h=0.277$; $\mu_\sigma=1865\text{MPa}$, $\sigma_\sigma=84\text{MPa}$

4.2.3 Untersuchungen zum Partikelbruch - Partikelbeanspruchung

In experimentellen Untersuchungen stellten McMahon und Cohen [85] fest, dass beim Spaltbruch ferritisch-bainitischer Stähle im unteren Übergangsbereich der Bruchzähigkeit (Korngrenzen-)Karbide in etwa 90% der Fälle als Spaltbruchauslöser agieren, wobei der Partikelbruch (als erste Phase der Spaltbruchinitiierung) nach plastischer Deformation der duktilen ferritischen Matrix erfolgt. Der den Partikelbruch steuernde Mechanismus in diesem praxisrelevanten Bereich der Bruchzähigkeit mit relativ hohen Matrixdehnungen ($\epsilon > 0.5\%$) ist ein Fasermechanismus, während der Partikelbruch durch Versetzungsaufstauung für den betrachteten Werkstoff nur bei sehr geringen Matrixdehnungen eine wichtige Rolle spielt (Lindley et al. [75]). Im Rahmen dieser Arbeit wird daher nur der Partikelbruch bzw. die Partikelbeanspruchung durch den Fasermechanismus untersucht.

Im Hinblick auf den Partikelbruch stellt sich zunächst die Frage, welche Kenngröße der Partikelbeanspruchung mit einer entsprechenden Kenngröße für die Partikelbeanspruchbarkeit zu vergleichen ist, um hinreichend genaue Aussagen über ein mögliches Partikelversagen treffen zu können. Jikov et al. [57] schlagen die im Partikel gespeicherte Verzerrungsenergie als Kriterium vor. Ein Partikel bricht demnach, wenn ein kritischer Wert der Verzerrungsenergie erreicht wird. Dieser Ansatz wird damit begründet, dass Gurland et al. [42] in Experimenten den bevorzugten Bruch großer Partikel (mehr Verzerrungsenergie bei gegebenem Spannungszustand) beobachteten. Bei Verwendung dieses Kriteriums müssen jedoch alle Hauptspannungen für das betrachtete Partikel berechnet werden. Daher wird im Rahmen dieser Arbeit angenommen, dass der Partikelbruch erfolgt, wenn die effektive maximale Hauptspannung im Partikel einen kritischen Wert, die Partikelfestigkeit, übersteigt. Ein sehr ähnlicher Ansatz wird z.B. von Rezaee et al. [98] verwendet (Karbidspannung als volumetrisches Mittel der Karbid-Zugspannung in makroskopischer Lastrichtung). Dabei ist grundsätzlich auch eine (vereinfachte) Berücksichtigung der Beobachtungen von Gurland et al. [42] möglich, und zwar indem eine entsprechend geringere Festigkeit für größere Partikel angesetzt wird.

Gurland et al. [42] beobachteten in den Experimenten auch einen bevorzugten Bruch länglicher, in Lastrichtung orientierter Partikel (Bruchebene zumeist etwa senkrecht zur Hauptlastrichtung, d.h. zur Richtung der maximalen Zugspannung). Diese Beobachtungen belegen den Einfluss von Partikelform und Partikelorientierung auf die Partikelbeanspruchung und somit auch auf die Wahrscheinlichkeit für den Partikelbruch. Lindley et al. [75] schlagen eine einfache Formel zur Berechnung der maximalen Spannung innerhalb eines Partikels vor, wobei das Partikel als Scheibe idealisiert wird, mit dem Durchmesser d und der Dicke a . Dann ergibt sich $\sigma_{\max} = d/a \cdot \tau$, mit der Schubspannung τ am Matrix-Partikel-Interface, wobei σ_{\max} in der Partikelmittle vorliegt. Der Einfluss der Partikelform auf die Partikelspannung wird demnach in diesem Ansatz zur Berechnung der Partikelspannung durch einen einfachen Geometriefaktor, welcher die Kompaktheit bzw. die Streckung des Partikels charakterisiert, berücksichtigt. Da im Hinblick auf eine sinnvolle Begrenzung der zu betrachtenden Einflussparameter auch im Rahmen dieser Arbeit gewisse Vereinfachungen bzw. Idealisierungen erforderlich sind, werden die eigentlich als allgemeine Ellipsoide mit Halbachsenlängen $a \neq b \neq c$ identifizierten Partikel (siehe Kapitel 4.2.1) in volumengleiche Rotationsellipsoide (Halbachsenlängen a und b') umgewandelt. Die Partikelform kann dann durch einen einzigen Formparameter, die Streckung s , beschrieben werden, mit

$$s = \frac{a}{b'} - 1 \quad \text{mit} \quad b' = \sqrt{b \cdot c} \quad (120)$$

Neben der Partikelform muss auch die Drehlage bzw. Orientierung der Partikel in geeigneter Weise beschrieben werden. Die Beschreibung der Drehlage eines allgemeinen Ellipsoids (Ausgangslage: a liegt auf der z -Achse, b auf der y -Achse, c auf der x -Achse) erfordert die Bestimmung von drei Drehwinkeln (ϕ , φ , θ), während für ein Rotationsellipsoid zwei Winkel (ϕ , φ) ausreichend sind (siehe Abb. 72 (a)). Bringt man die y -Achse mit der globalen bzw. der RVE-Hauptlastrichtung (Richtung der effektiven maximalen Hauptspannung) in Einklang und geht in erster Näherung davon aus, dass die Partikelbeanspruchung im Wesentlichen durch den Winkel zwischen der Hauptlastrichtung \mathbf{y} und der Richtung \mathbf{a} der langen Halbachse des Rotationsellipsoids beeinflusst wird (siehe Abb. 72 (b)), so reicht zur Beschreibung der Partikelorientierung ein Winkel α aus, für den gilt

$$\alpha = \frac{\mathbf{y} \cdot \mathbf{a}}{|\mathbf{y}| \cdot |\mathbf{a}|} = \frac{\mathbf{y} \cdot \mathbf{a}}{y \cdot a} \quad (121)$$

Die im Folgenden dargestellten Ergebnisse werden zeigen, dass die Beschreibung der Partikelorientierung durch nur einen Winkel im betrachteten Fall ausreichend ist.

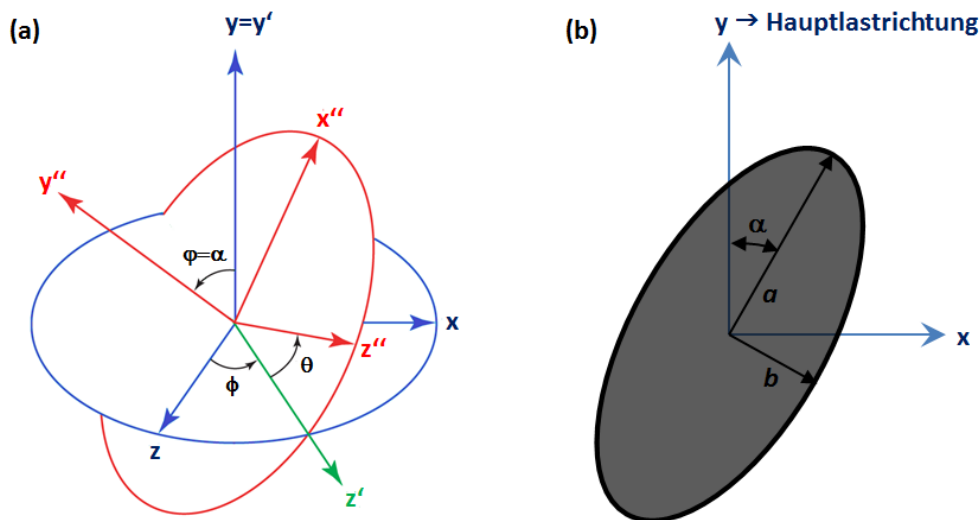


Abb. 72: (a) Definition der Drehwinkel
(b) Schnitt durch ein Rotationsellipsoid mit den Halbachsenlängen a und b : Definition des Orientierungswinkels α

Die bereits mehrfach erwähnten effektiven Feldgrößen sind definiert als der jeweilige volumetrische Mittelwert der betrachteten Feldgröße für einen bestimmten Bereich (RVE, Submodell (nur Matrixmaterial), Partikel). So gilt z.B. für die effektive maximale Hauptspannung eines Partikels

$$\sigma_P = \langle \sigma_{I-P} \rangle = \frac{1}{V_P} \int_{V_P} \sigma_{I-P} dV \approx \frac{1}{V_P} \sum_{i=1}^n \sigma_{I-P}^{(i)} V^{(i)} \quad (122)$$

mit der maximalen Hauptspannung $\sigma_{I-P}^{(i)}$ am i -ten Auswertungspunkt (z.B. Element-Integrationspunkt) und dem Auswertungspunktvolumen $V^{(i)}$.

Die Verwendung effektiver Feldgrößen ist im Zusammenhang mit den Vorgängen bei der Spaltbruchinitiierung sinnvoll, wenn man davon ausgeht, dass die Feldgrößen über einen gewissen Bereich wirken müssen, damit ein Vorgang erfolgreich und vollständig stattfinden kann. Weiterhin besteht auch ein praktisches Argument für die Verwendung von Effektivwerten. Die auf Basis der Simulationsrechnungen hergeleiteten Zusammenhänge, wie z.B. eine Gleichung zur Berechnung der Partikelspannung, sind aufgrund der unvermeidlichen Idealisierungen sowie der erforderlichen Verallgemeinerungen bzw. Mittelungen naturgemäß Näherungen mit begrenzter (für die hier verfolgten Ziele jedoch ausreichender) Genauigkeit. Die Berechnung lokaler Werte innerhalb eines Kontrollvolumens (z.B. Partikel) erscheint daher wenig sinnvoll.

Mit Hilfe der bereitgestellten Finite-Elemente-Modelle können die erforderlichen Submodellrechnungen zur Bestimmung der Partikelbeanspruchung (effektive Partikelspannung σ_P) unter Berücksichtigung verschiedener Lastgeschichten und Partikelkonstellationen durchgeführt werden. Dabei werden insbesondere die Einflüsse von Form, Größe und Orientierung der Partikel auf die Partikelspannung bei realitätsnaher Mikrostruktur untersucht. Der Einfluss der Lastgeschichte wird für gegebene Partikelkonstellationen unter Berücksichtigung aller relevanten mechanischen Feldgrößen systematisch analysiert. Die Ergebnisse der RVE-Simulationsrechnungen (vgl. auch Kapitel 4.2.2) dienen dabei als Eingangsdaten für alle nachfolgenden Submodellrechnungen zur Untersuchung der Mikrodefektentstehung. Die RVE-Belastungsgeschichten entsprechen den zuvor an den Spaltbruchsprüngen verschiedener Bruchmechanikproben (SE(B)-Proben mit tiefen und kurzen Rissen, C(T)-Proben, M(T)-Proben sowie CR(B)-Proben aus einem abgeschlossenen Vorhaben [49]) ermittelten lokalen Spannungs- und Dehnungsgeschichten (siehe Kapitel 4.1.2). Für die realitätsnahen Submodelle wird das in Kapitel

4.2.1 vorgestellte kristallplastische Materialmodell verwendet, während für die vereinfachten Submodelle ein elastisch-plastisches Material (elastischer Anteil: Hooke'sche Gesetz ; plastischer Anteil: v. Mises Fließmodell mit isotroper Verfestigung) mit dehnratenabhängiger Plastizität zum Einsatz kommt. Das Partikel wird als rein elastisch modelliert (Spröd-elastische Partikel mit elastischen Konstanten entsprechen denen der Matrix, vgl. Jikov et al. [57], Mathieu et al. [84]). Alle Rechnungen werden geometrisch nichtlinear durchgeführt.

Einfluss der Feldgrößen

Die Untersuchungen zur Ermittlung der relevanten mechanischer Feldgrößen basieren auf der Betrachtung eines ellipsoidförmigen Partikels (Orientierung in Lastrichtung: $\alpha=0^\circ$, Streckung $s=a/b-1=2.3$, sofern nicht anders angegeben) an einer jeweils festgelegten Korngrenze für verschiedene RVE-Lastgeschichten. Die Feldgrößen werden dabei in Form ihrer jeweiligen Effektivwerte (Definition der effektiven Feldgrößen: Mittelung über Submodell bzw. Partikel, siehe Gleichung (129)) für das im Submodell enthaltene Matrixmaterial und das Partikel betrachtet. Im ersten Schritt wird der Einfluss der Matrixdehnung auf die Partikelspannung σ_P untersucht. Die Abb. 73 zeigt den typischen Verlauf der Partikelspannung (Partikel mit $s=0$) in Abhängigkeit von verschiedenen möglichen Dehnungsgrößen. Es wird deutlich, dass die Beschreibung der Partikelspannung als Funktion der Matrixdehnung für alle betrachteten Dehnungsgrößen nahezu gleichwertig ist. Im Rahmen der vorliegenden Studie wurde aufgrund der direkten Verfügbarkeit für alle Materialmodelle die maximale Hauptdehnung ε_1 verwendet.

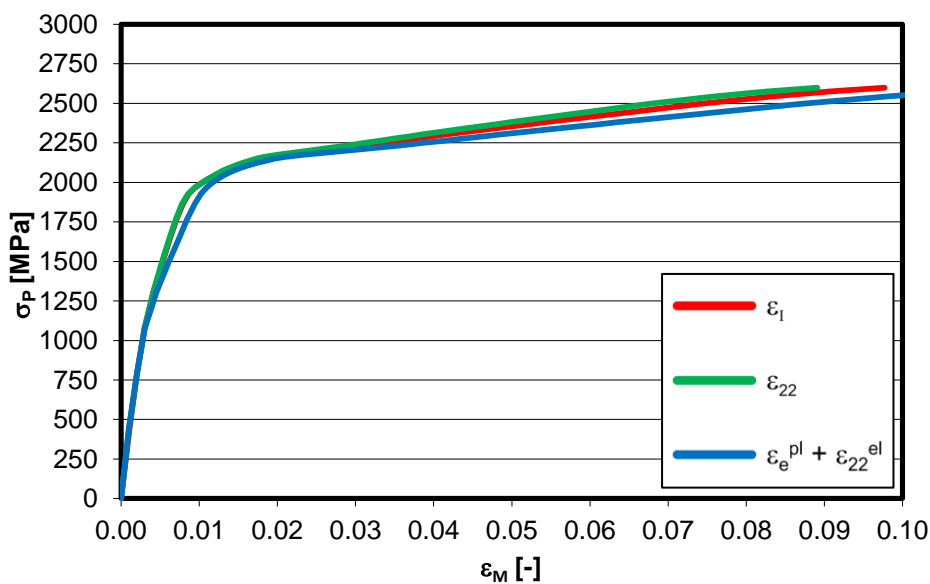


Abb. 73: Partikelspannung σ_P in Abhängigkeit von der Matrixdehnung ε_M , verschiedene Dehnungsgrößen (max. Hauptdehnung ε_1 , Gesamtdéhnung in Lastrichtung ε_{22} und plast. Vergleichsdehnung ε_e^{pl})

Um den Einfluss der Matrixdehnung auf die Partikelspannung weitergehend zu untersuchen, werden die Matrix-Feldgrößenverläufe und die zugehörigen Verläufe der Partikelspannung für die verschiedene Lastgeschichten genauer betrachtet. In Abb. 74 und Abb. 75 sind die Ergebnisse für drei verschiedene RVE-Lastgeschichten (bei unveränderter Korngrenzenposition des Submodells) dargestellt.

Es wird deutlich, dass die Matrixdehnung ε_{I-M} einen wesentlichen Einfluss auf die Partikelspannung σ_P besitzt, da auch im Bereich nicht weiter ansteigender Matrixhauptspannung σ_{I-M} ein weiterer Anstieg der Partikelspannung beobachtet werden kann.

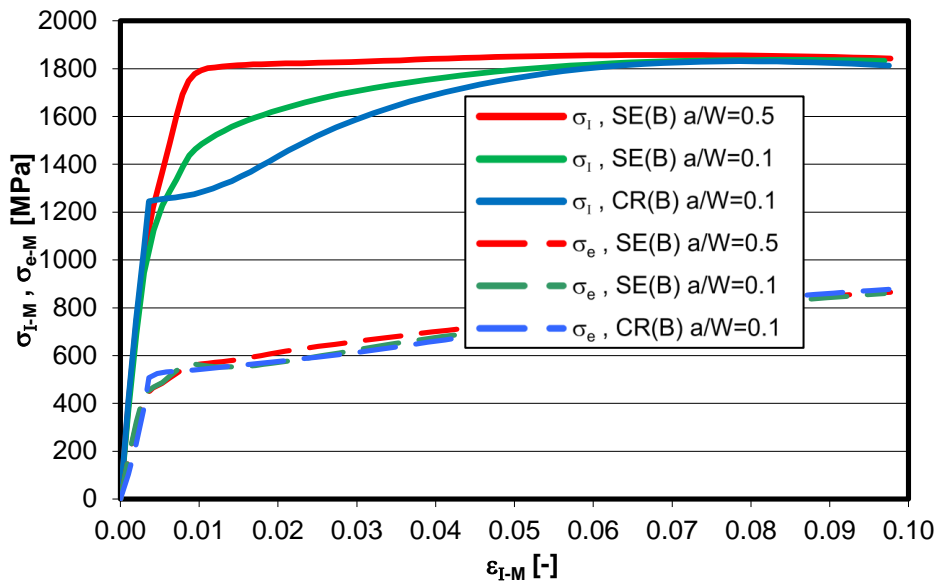


Abb. 74: Verlauf der effektiven Feldgrößen der Matrix für verschiedenen Lastgeschichten [jeweils $K_I(50\%)$, $\Delta x_I(10\%)$]

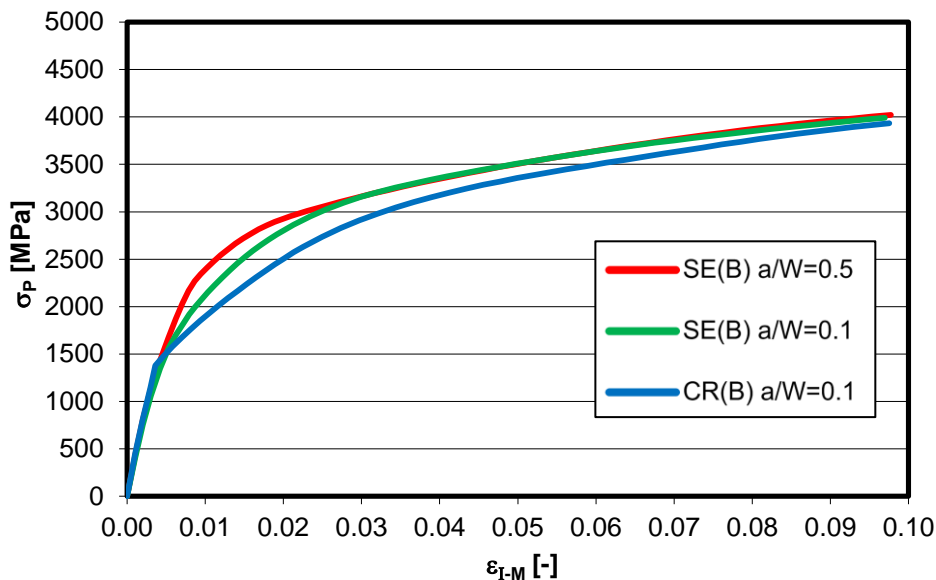


Abb. 75: Verlauf der Partikelspannung σ_P in Abhängigkeit von der Matrixdehnung ε_{I-M} für die verschiedenen Lastgeschichten aus Abb. 74

Weiterhin wird jedoch auch klar, dass eine Beschreibung der Partikelspannung allein durch die Matrixdehnung ε_{I-M} recht ungenau ist. Für die betrachteten Lastgeschichten zeigt sich vor allem im Bereich der bei der Spaltbruchauslösung häufig auftretenden Dehnungen ($1\% < \varepsilon_I < 4\%$) ein erkennbar unterschiedlicher Verlauf der Partikelspannung. Vergleicht man den Verlauf der Matrixhauptspannung σ_{I-M} für die verschiedenen Lastgeschichten (Abb. 74) mit dem Verlauf der jeweils zugehörigen Partikelspannung (siehe Abb. 75), so fällt auf, dass der Bereich des abweichenden Verlaufs der Partikelspannung mit entsprechenden Abweichungen hinsichtlich des Verlaufs der größten Matrixhauptspannung korreliert, während die Vergleichsspannung σ_{e-M} für alle Lastgeschichten einen ähnlichen Verlauf aufweist. Bei vergleichbarer Matrixdehnung ε_{I-M} resultiert aus einer höheren Matrixspannung σ_{I-M} demnach eine höhere Partikelspannung. Diese Beobachtungen bestätigen sich auch bei Betrachtung anderer Lastgeschichten (andere Probentypen, Ligamentpositionen und Lasten, andere Korngrenzen im RVE). Beispielhaft sind in Abb. 76 und Abb. 77 die Verläufe der effektiven Matrixfeldgrößen und der zugehörigen Partikelspannungen bei geänderter Ligamentposition (größerer Rissfrontabstand) und Korngrenzenlage (andere Korngrenze) dargestellt.

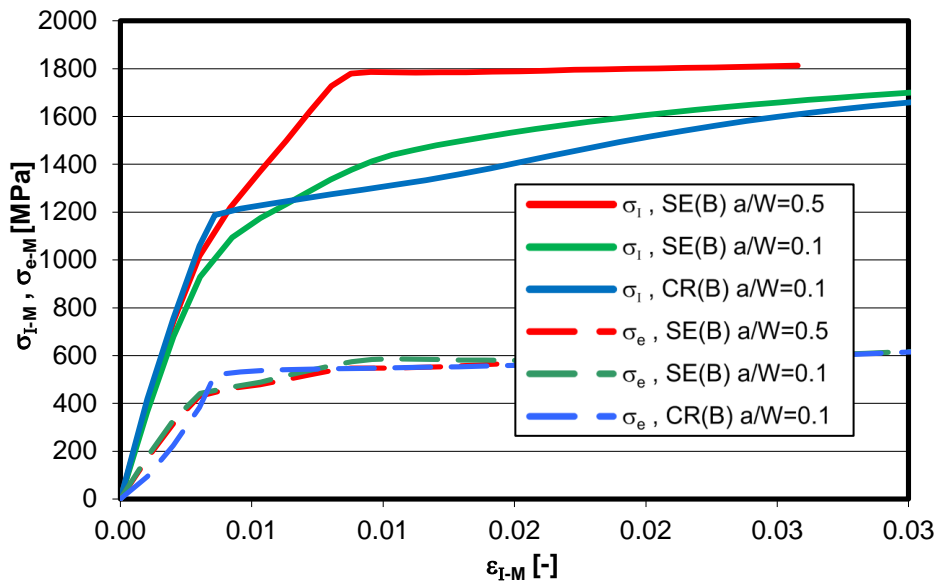


Abb. 76: Verlauf der effektiven Feldgrößen der Matrix für verschiedene Lastgeschichten [jeweils $K_I(50\%)$, $\Delta x_I(50\%)$]

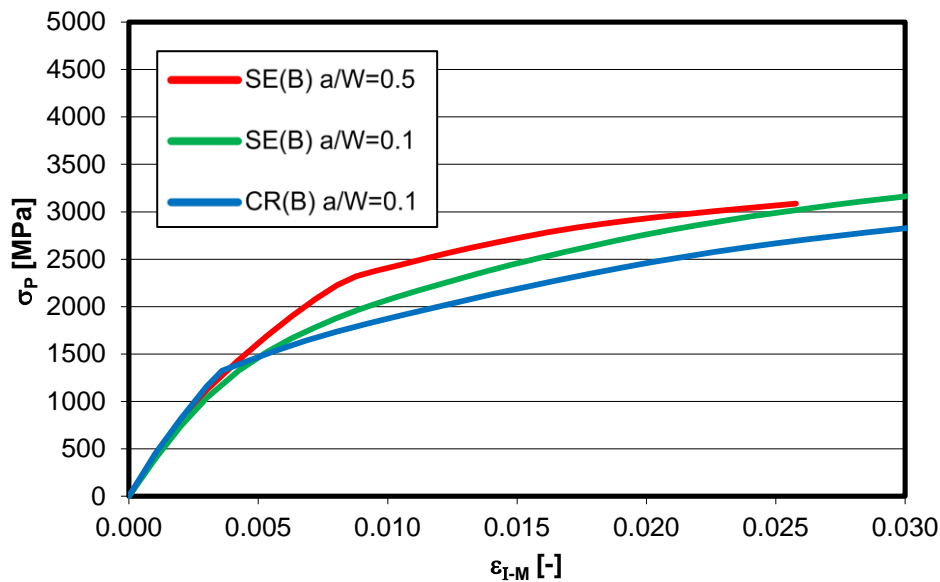


Abb. 77: Verlauf der Partikelspannung σ_P in Abhängigkeit von der Matrixdehnung ε_{I-M} für die verschiedenen Lastgeschichten aus Abb. 76

Aufgrund dieser Ergebnisse erscheint es daher insgesamt sinnvoll, zur Beschreibung der Partikelspannung neben der Matrixdehnung ε_{I-M} auch die Matrixhauptspannung σ_{I-M} heranzuziehen. Ein Einfluss der Matrix-Spannungsmehrachsigkeit h_M auf die Partikelspannung σ_P kann nicht festgestellt werden.

Nachdem der Einfluss der Matrix-Feldgrößen auf die Partikelspannung σ_P bekannt ist, müssen weiterhin die möglichen Einflüsse der Partikelkonstellation und der Matrix-Materialeigenschaften untersucht werden.

Einfluss von Partikelkonstellation und Material

Neben dem Einfluss der Matrix-Feldgrößen werden die Einflüsse von Partikelkonstellation und Matrix-Materialeigenschaften untersucht. Die Beschreibung der Partikelkonstellation erfolgt dabei durch die Partikelorientierung α [siehe Gl. (128)] und die Partikelform bzw. Streckung s [siehe Gl.(122)] sowie die Partikelgröße (äquivalenter Kugeldurchmesser) D_{eq} . Zur Identifikation des Einflusses der vorliegenden Partikelkonstellation auf die Partikelspannung σ_P wird das Verhalten einzelner Partikel von unterschiedlicher Form, Größe und Orientierung für verschieden RVE-Lastgeschichten und Korngrenzenpositionen untersucht. Im Folgenden sind exemplarisch die Ergebnisse für die Lastgeschichte SE(B) $a/W=0.5$ [$K_1(50\%); \Delta x_1(10\%), T=-85^\circ\text{C}$] dargestellt.

Im ersten Schritt wird der Einfluss der Partikelgröße D_{eq} auf die Partikelspannung untersucht. Die Abb. 78 zeigt den Verlauf der Partikelspannung σ_P für drei ellipsoidförmige Partikel gleicher Form (Streckung $s=2.3$, entspricht dem Mittelwert der Partikelstreckung, vgl. Kapitel 4.2.1), aber unterschiedlicher Größe (äquivalenter Durchmesser) D_{eq} . Die Ergebnisse der Untersuchungen zur Bestimmung des Effekts der Partikelgröße (genauer: des Größenverhältnisses Partikel-Korngrenze) zeigen, dass nur ein sehr geringer Größen- bzw. Größenverhältniseinfluss (kleinere Partikel erreichen höhere Spannung σ_P) vorliegt, der mit steigender Matrixdehnung ε_{I-M} leicht zunimmt. Ein möglicher Grund hierfür ist jedoch auch die Definition der effektiven Feldgrößen (Mittelung über das Submodell konstanter Größe), da man davon ausgehen kann, dass der tatsächliche Einflussbereich für kleine Partikel kleiner ist, d.h. diese werden stärker von Feldgrößen-Inhomogenitäten (Spannungs- und Dehnungsüberhöhungen) an der Korngrenze beeinflusst. Im für die Spaltbruchauslösung relevanten Dehnungsbereich kann der Einfluss der Partikelgröße auf die Partikelspannung jedoch vernachlässigt werden.

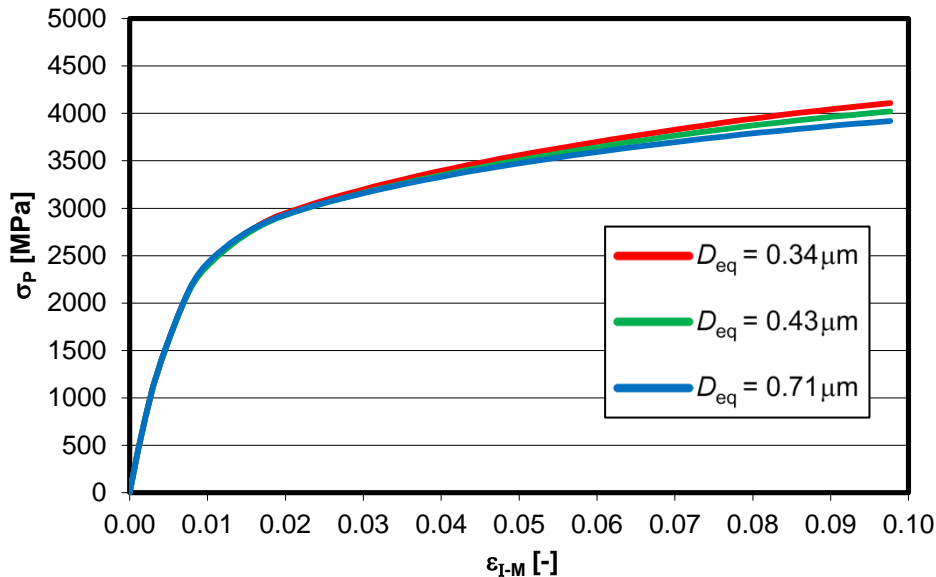


Abb. 78: Verlauf der Partikelspannung σ_P in Abhängigkeit von der Matrixdehnung ε_{I-M} für verschiedene Partikelgrößen

Demgegenüber hat die Partikelform (Streckung $s=b/a-1$) einen wesentlichen Einfluss auf die bei gegebenem Matrixzustand resultierende Partikelspannung. Die Abb. 79 zeigt exemplarische Simulationsergebnisse für drei Partikel gleicher Größe D_{eq} und Orientierung α (Orientierung der langen Halbachse in Hauptlastrichtung (Richtung der effektiven maximalen RVE-Hauptspannung), d.h. $\alpha=0^\circ$), aber unterschiedlicher Form (Kugel mit $s=0$, Rotationsellipsoide mit $s=0.7$ und $s=2.3$). Die zugehörigen Verläufe der Partikelspannung σ_P sind in Abb. 80 dargestellt (zusätzlich auch die Verläufe für Partikel größerer Streckung).

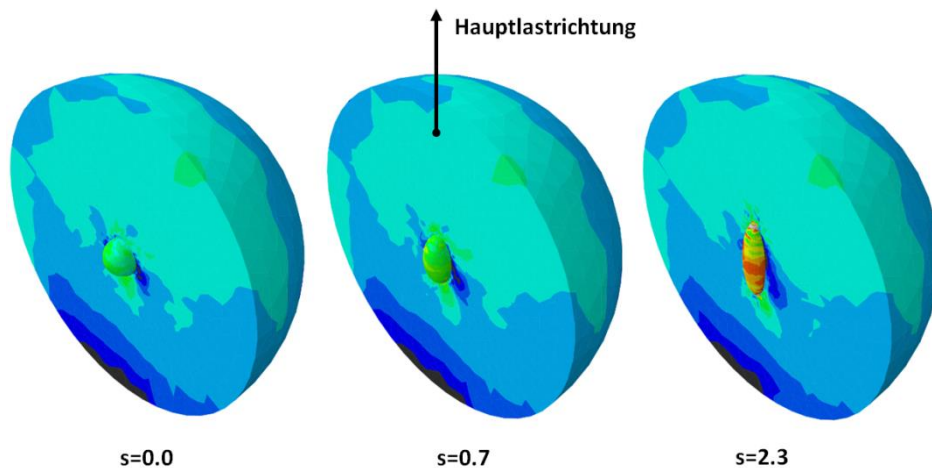


Abb. 79: Größte Hauptspannungen (Matrix und Partikel) im Submodell für verschiedene Partikelformen, gleicher effektiver Matrixzustand; Legende siehe Abb. 81:

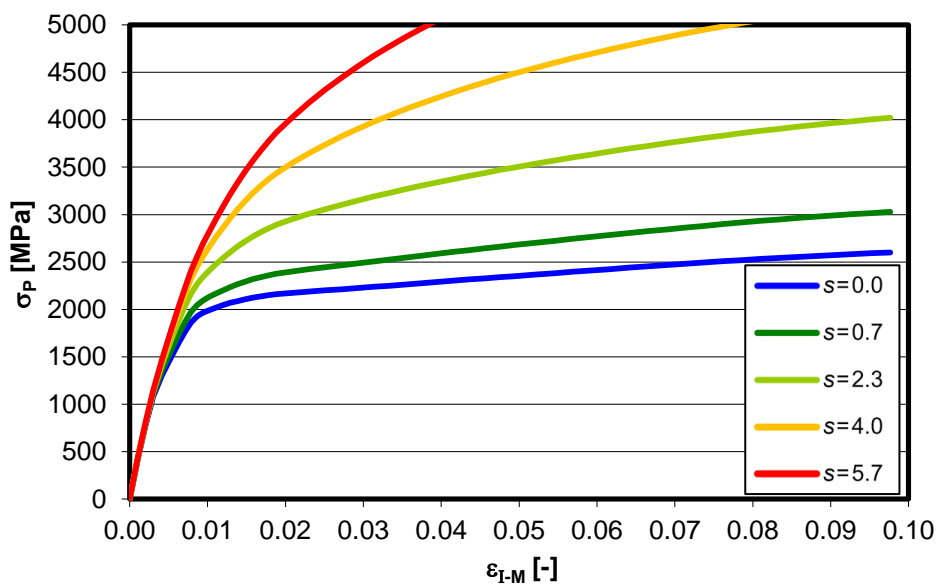


Abb. 80: Verlauf der Partikelspannung σ_P in Abhängigkeit von der Matrixdehnung ϵ_{I-M} für verschiedene Partikelformen (Streckung s), $\alpha=0^\circ$

Es wird deutlich, dass hinsichtlich der Partikelbeanspruchung ein sehr ausgeprägter Einfluss der Partikelform vorliegt. Je größer das Halbachsenverhältnis des Partikels ist, desto stärker steigt die Spannung mit einsetzender plastischer Dehnung an. Die Partikelform (beschrieben durch die Streckung s) muss demnach bei der Berechnung der Partikelspannung σ_P für einen gegebenen Matrixzustand entsprechend berücksichtigt werden.

Neben dem Einfluss der Partikelform (Streckung s) wird auch der Einfluss der Partikelorientierung α auf die Partikelspannung σ_P untersucht. Dazu werden verschiedene Orientierungen des Partikels zur Hauptlastrichtung (Richtung der effektiven maximalen Hauptspannung im RVE; diese Richtung entspricht auch weitgehend der globalen bzw. makroskopischen Hauptlastrichtung, siehe Kapitel 4.1.2) betrachtet ($\alpha=0^\circ$ bis 90° , in 15° -Schritten). Die Abb. 81 zeigt die Simulationsergebnisse für fünf Partikel gleicher Größe D_{eq} und Form (Streckung $s=2.3$), aber unterschiedlicher Orientierung ($\alpha=0^\circ$, $\alpha=15^\circ$, $\alpha=30^\circ$, $\alpha=45^\circ$ und $\alpha=90^\circ$). Die zugehörigen Verläufe der Partikelspannung sind in Abb. 82 dargestellt (zusätzlich auch die Verläufe für Partikel mit Orientierungen zwischen $\alpha=45^\circ$ und $\alpha=90^\circ$). Wenn die Ausrichtung der langen Halbachse nicht mit der Hauptlastrichtung übereinstimmt, zeigt sich ein ausgeprägter Orientierungseinfluss.

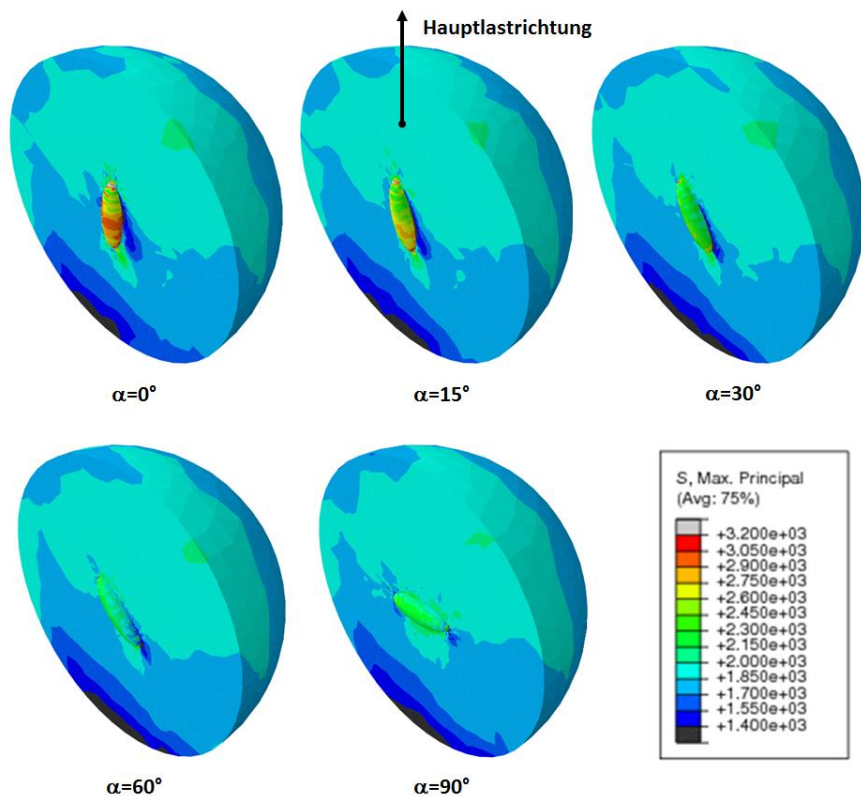


Abb. 81: Größte Hauptspannungen (Matrix und Partikel) im Submodell für verschiedene Partikelorientierungen α , gleicher effektiver Matrixzustand

Bis zu einem Winkel α von etwa 45° zwischen langer Halbachse und Hauptlastrichtung nimmt die Spannung σ_p im Partikel (im Vergleich zum Partikel mit Lastwinkel $\alpha=0^\circ$) deutlich ab, bleibt dann jedoch für Lastwinkel bis $\alpha=90^\circ$ annähernd konstant. Auch die Partikelorientierung muss demnach bei der Berechnung der Partikelspannung σ_p für einen gegebenen Matrixzustand berücksichtigt werden.

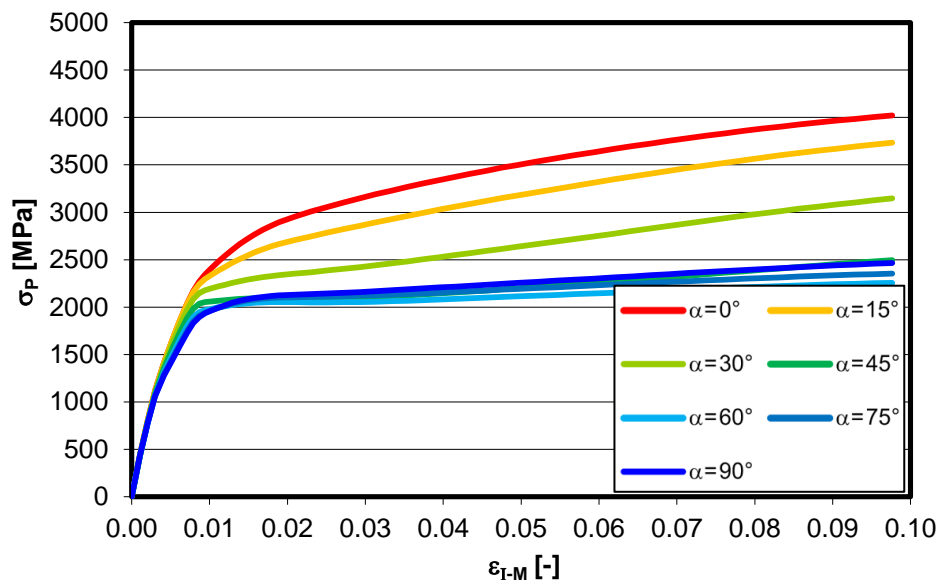


Abb. 82: Verlauf der Partikelspannung σ_p in Abhängigkeit von der Matrixdehnung ϵ_{I-M} für verschiedene Partikelorientierungen α , $s=2.3$

Zusammenfassend lässt sich somit feststellen, dass die Partikelform (beschrieben durch die Streckung s [siehe Gl. (121)]) und die Partikelorientierung (beschrieben durch den Winkel α [siehe Gl. (122)] zwischen der langen Halbachse des Partikels und der Hauptlastrichtung) einen entscheidenden Einfluss auf die Partikelbeanspruchung σ_p aufwei-

sen, während die Partikelgröße D_{eq} lediglich eine untergeordnete Rolle spielt und vernachlässigt werden kann. Untersucht man nun für die verschiedenen Lastgeschichten (verschiedene Probentypen, Ligamentpositionen und Lasten (vgl. Kapitel 4.1.2); verschiedene Korngrenzen im RVE) jeweils die Partikelspannung für verschiedene Partikelkonfigurationen (Streckung s und Orientierung α), so ergibt sich bei jeweils gegebenem Matrixzustand (gegebenem Zeitpunkt innerhalb der gerade betrachteten Lastgeschichte) der in Abb. 83 dargestellte charakteristische Verlauf der (zum betrachteten Zeitpunkt) vorliegenden Partikelspannung σ_P . Es wird deutlich, dass die Einflüsse der Partikelorientierung α und der Partikelform s auf die Partikelspannung σ_P eine starke Korrelation aufweisen.

Finite-Elemente-
Simulationsrechnungen

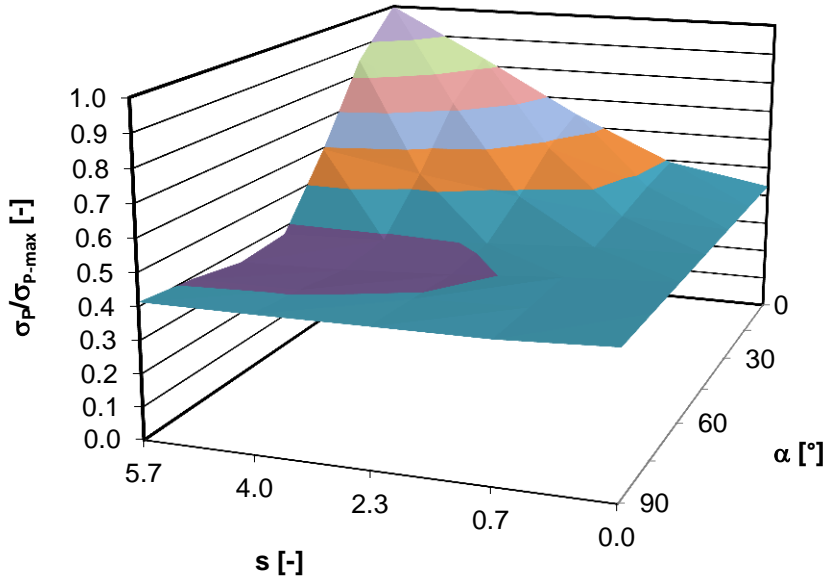


Abb. 83: Charakteristischer Verlauf der bei gegebenem Matrixzustand vorliegenden Partikelspannung σ_P für verschiedene Partikelkonfigurationen (Streckung s und Orientierung α)

Neben dem Einfluss der vorliegenden Partikelkonfiguration wird auch der Einfluss der Eigenschaften des Matrixmaterials auf die resultierende Partikelspannung bei gegebenem Matrixzustand untersucht. Dazu werden die vereinfachten Submodelle verwendet. Die Abb. 84 zeigt exemplarische Simulationsergebnisse in Form der resultierenden Partikelspannungsverläufe bei gegebener Partikelkonfiguration und Lastgeschichte für verschiedene Eigenschaften des Matrixmaterials.

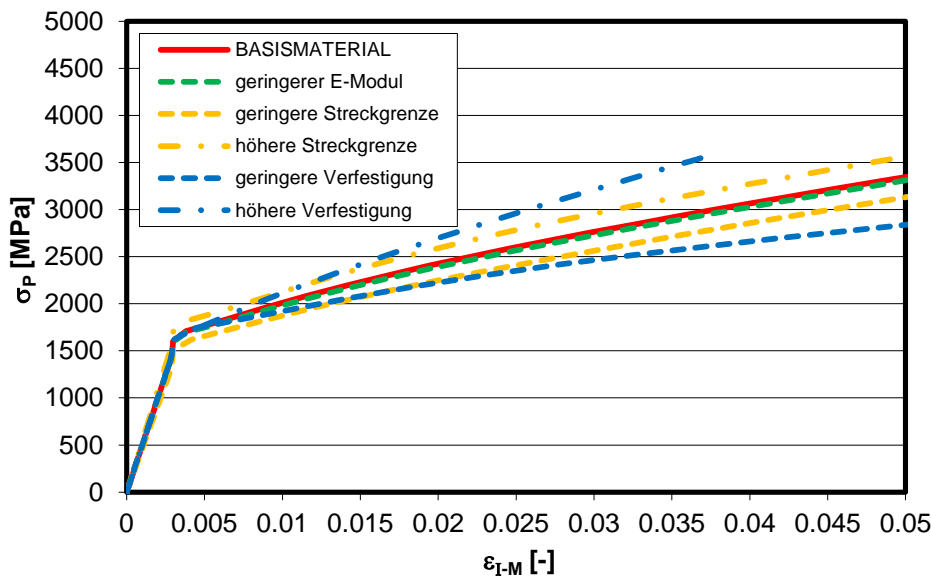


Abb. 84: Verlauf der Partikelspannung σ_P in Abhängigkeit von der Matrixdehnung ϵ_{I-M} für verschiedene Matrix-Materialeigenschaften

Variiert werden E -Modul, Streckgrenze und Verfestigung. Dabei beträgt die Variation des E -Modul sowie der Streckgrenze ca. 20%, während die Verfestigung um etwa 50% variiert wird. Es wird deutlich, dass eine Änderung des E -Moduls (im realistischen Rahmen) keinen relevanten Einfluss auf die Partikelbeanspruchung hat und demnach vernachlässigt werden kann. Demgegenüber besitzen Streckgrenze und Verfestigung einen erkennbaren, qualitativ gleichen, Einfluss auf die resultierende Partikelspannung. Eine Erhöhung bzw. Reduzierung von Streckgrenze und Verfestigung führt zu einer Erhöhung bzw. Reduzierung der Partikelspannung. Die Materialeigenschaften der Matrix in Form der Streckgrenze und der Verfestigung müssen demnach bei der Berechnung der Partikelspannung σ_P für einen gegebenen Matrixzustand entsprechend berücksichtigt werden.

Im Rahmen dieser Studie werden auch verschiedene Konstellationen nah benachbarter Partikel (Partikelcluster als bevorzugte Initiierungsorte, Odette et al. [88]) untersucht. Insgesamt zeigen die Ergebnisse der Simulationsrechnungen für Partikelcluster, dass Clusterbildung durchaus einen gewissen Einfluss auf die Partikelbeanspruchung haben kann, eine systematische Beschreibung dieses Einflusses ist aufgrund der Vielzahl der möglichen Clusterkonstellationen jedoch extrem aufwändig. Bedenkt man zudem, dass bereits die für Einzelpartikel berechneten Beanspruchungen aufgrund unvermeidlicher Idealisierung lediglich eine Abschätzung der real vorliegenden Partikelbeanspruchung darstellen, so erscheint im Rahmen der Formulierung des letztendlich makroskopisch definierten Spaltbruchmodells eine Vernachlässigung des Clustereffekts als sinnvoll.

Im Hinblick auf die Richtung der effektiven maximalen Hauptspannung im Partikel sei noch angemerkt, dass diese zumeist nur geringfügig von der Richtung der effektiven maximalen Hauptspannung im RVE und damit auch von der globalen Hauptlastrichtung abweicht. Das Spannungsmaximum innerhalb des Partikels liegt zumeist in der Partikelmitte vor, was durch andere Autoren bestätigt wird (Lindley et al. [75], Sun et al. [114] und Beremin et al. [17]). Dabei gilt oft $\sigma_{I-\max} \approx 1.1 \dots 1.3 \sigma_P$.

Berechnung der Partikelspannung

Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen zeigen, dass die Partikelbeanspruchung durch einen kombinierten Ansatz aus Matrixdehnung und Matrixspannung beschrieben werden kann. Dabei müssen in dem Term Parameter auftreten, die sowohl von der Partikelkonstellation (Form, Orientierung) als auch vom Verhalten des duktilen Matrixmaterials (Fließgrenze, Verfestigung) abhängig sind. Basierend auf diesen Erkenntnissen wird die folgende Formulierung zur näherungsweise Berechnung der effektiven maximalen Hauptspannung eines Partikels verwendet:

$$\sigma_P = c_{M1} c_1 \cdot \sigma_{I-M} + c_{M2} c_2 \cdot (\varepsilon_{I-M})^{c_{M3} c_3} \quad (123)$$

mit den effektiven Feldgrößen ε_{I-M} und σ_{I-M} der Matrix in der Partikelumgebung sowie den partikelkonfigurationsabhängigen Parametern $c_i = c_i(s, \alpha)$ und den Materialparametern c_{Mi} ($i=1,2,3$), wobei zwischen c_i und c_{Mi} keine Korrelation vorliegt.

Die Beschreibung der Partikelspannung durch einen additiven Ausdruck, mit einem Spannungsanteil resultierend aus der Matrixspannung und einem Spannungsanteil resultierend aus der Deformationsinkompatibilität zwischen Partikel und Matrix („Inkompatibilitätsspannung“, ergibt sich aus der Anwendung von Eshelbys Ansatz [34] auf plastische Matrix) wird auch von Beremin et al. [17] und Jikov et al. [57] verwendet:

$$\sigma_{I-P} = \sigma_{I-M} + k \cdot \varepsilon_{e-M}^{pl} \quad (124)$$

Die partikelkonfigurationsabhängigen Parameter werden bei jeweils gegebenem Materialverhalten ($c_{MI}=1$ für Basismaterial) für verschiedene Zustände in der s - α -Ebene (d.h. Partikelkonfigurationen) durch Anpassung des aus Gleichung (123) resultierenden Partikelspannungsverlaufs an den jeweiligen aus der Simulation erhaltenen Spannungsverlauf bestimmt. Dieses Vorgehen wird für verschiedene lokale Lastgeschichten (verschiedene Probentypen, Ligamentpositionen und Lasten (vgl. Kapitel 4.1.2); verschiedene Korngrenzen im RVE) durchgeführt. In Abb. 85 sind exemplarische die Anpassungsergebnisse für drei Partikelkonfigurationen bei gegebener Lastgeschichte dargestellt.

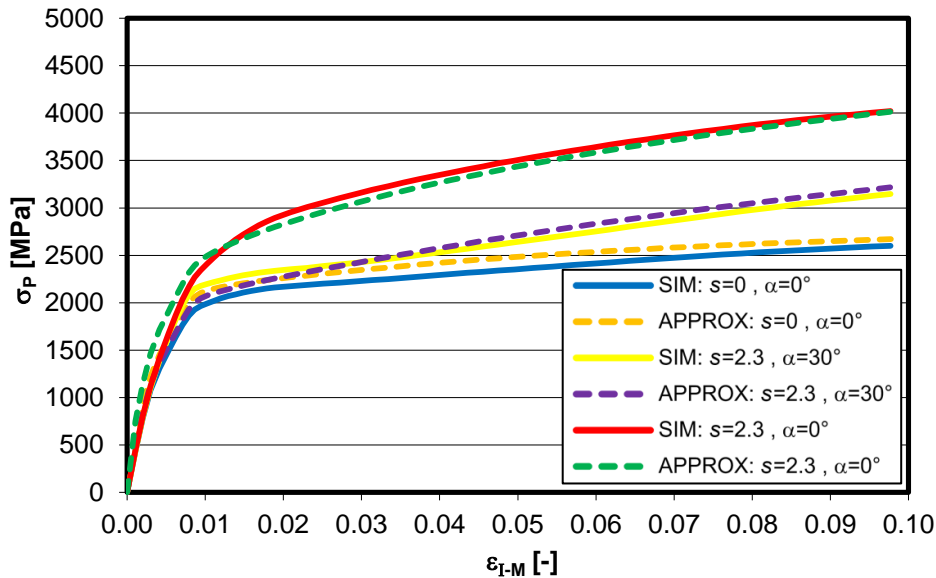


Abb. 85: Approximation der Partikelspannung σ_p für verschiedene Partikelkonfigurationen bei gegebener Lastgeschichte, Vergleich mit Simulationsergebnissen; Basismaterial

Die Anpassung gelingt in allen Fällen mit ausreichender Genauigkeit. Zwischen den so ermittelten Werten (5x5 Stützstellen in der s - α -Ebene pro Lastgeschichte bzw. Last) für die partikelkonfigurationsabhängigen Parameter wird anschließend bi-linear interpoliert. Die resultierenden Parameterverläufe (Stützstellenwerte gemittelt über alle Lastgeschichten) sind in Abb. 86, Abb. 87 und Abb. 88 dargestellt.

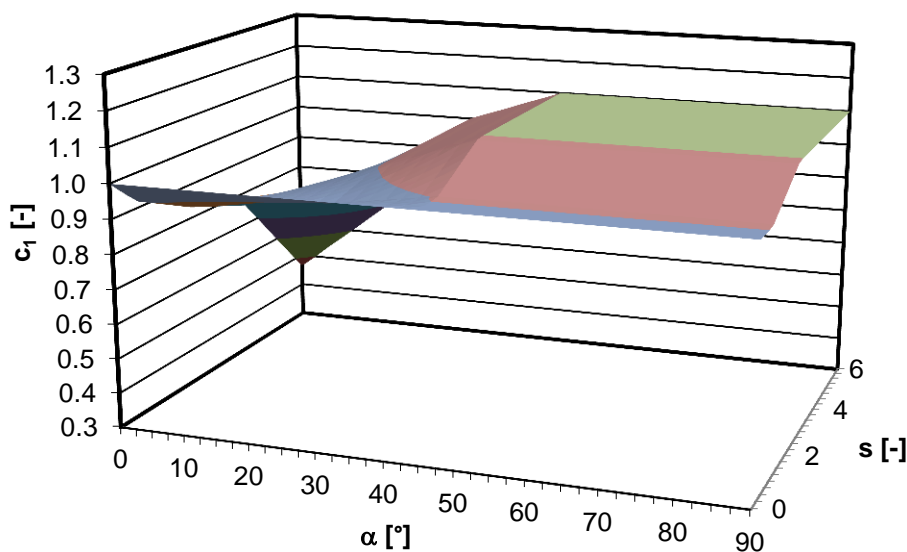


Abb. 86: Approximierter Verlauf des Parameters α für verschiedene Partikelkonfigurationen s - α

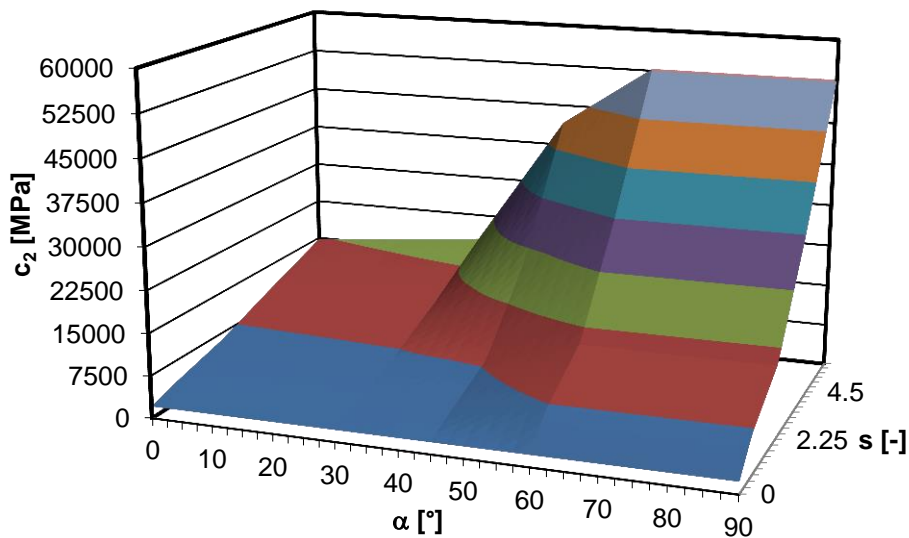


Abb. 87: Approximierter Verlauf des Parameters c_2 für verschiedene Partikelkonfigurationen s - α

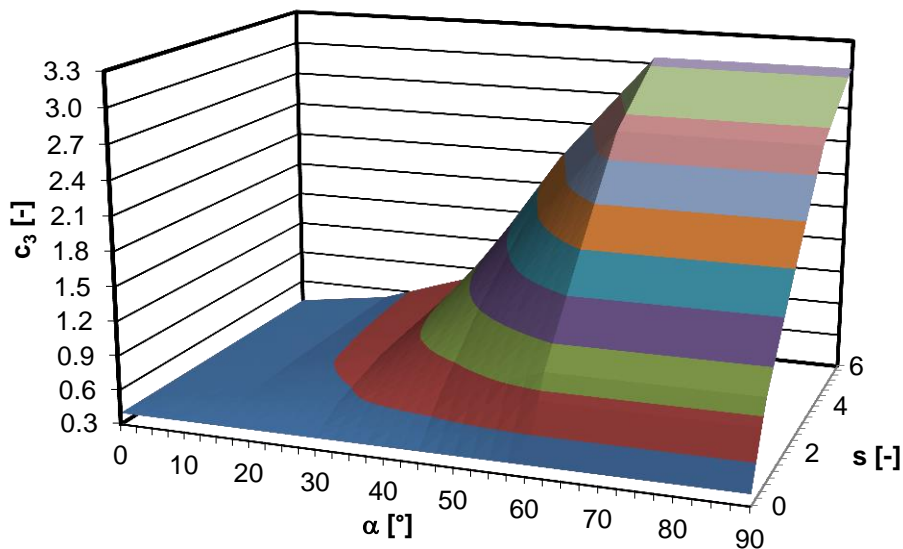


Abb. 88: Approximierter Verlauf des Parameters c_3 für verschiedene Partikelkonfigurationen s - α

Die materialabhängigen Parameter werden durch Variationen des Materialverhaltens (des Basismaterials) hinsichtlich Streckgrenze und Verfestigung bestimmt. Dieses Vorgehen wird für verschiedene Lastgeschichten und Partikelkonfigurationen durchgeführt. Dazu werden die vereinfachten Submodelle verwendet. In Abb. 89 sind exemplarische Anpassungsergebnisse bei Variation von Streckgrenze und Verfestigung dargestellt.

Die Anpassungsergebnisse insgesamt zeigen, dass mit guter Genauigkeit $c_{M1} = c_{M3} = 1$ angenommen werden kann. Damit verbleibt lediglich ein Materialparameter $c_M = c_{M2}$, der den Einfluss von Streckgrenze und Verfestigung des Matrixmaterials beschreibt, wobei jeweils eine lineare Abhängigkeit des Parameters c_M von Streckgrenze und Verfestigung vorliegt. Für das hier betrachtete Basismaterial (Material mit Eigenschaften entsprechend den bei der Materialcharakterisierung (Kapitel 3.1.1) ermittelten Werten, für $T = -85^\circ\text{C}$) gilt aufgrund der Vorgehensweise bei der Bestimmung der Parameter für Gleichung (123) $c_M = 1$.

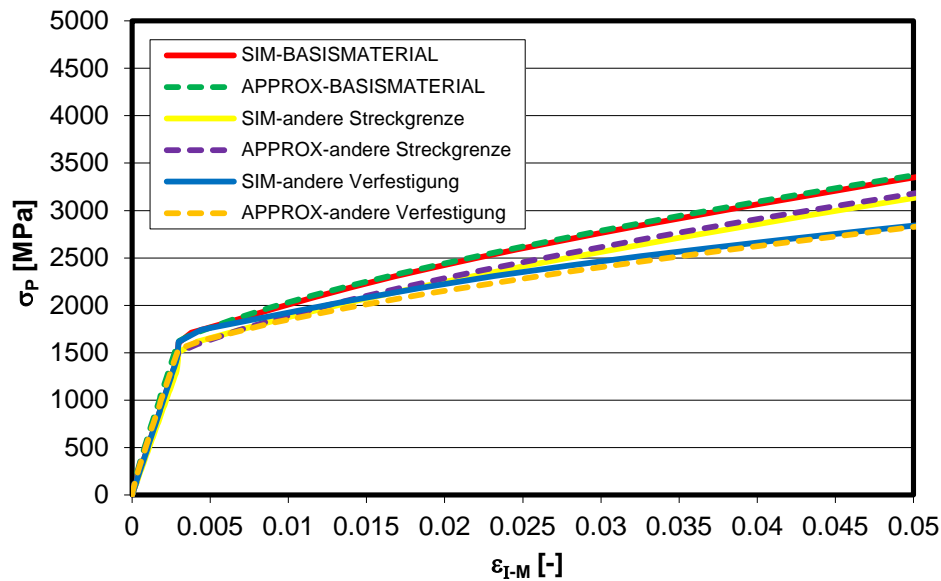


Abb. 89: Approximation der Partikelspannung σ_p für verschiedene Materialeigenschaften; gegebene Lastgeschichte und Partikelkonfiguration, Vergleich mit Simulationsergebnissen

4.2.4

Untersuchungen zum Rissübergang in die Matrix

Der Rissübergang vom spröden Partikel in die duktile Matrix stellt die zweite Phase der Spaltbruchinitiierung dar. Experimentelle Untersuchungen von McMahon und Cohen [85] und Simulationsrechnungen von Kroon und Faleskog [64] zeigen, dass eine Abstumpfung bzw. ein Arrest des durch den Partikelbruch entstandenen Mikrorisses am Partikel-Matrix-Interface oder in der Nähe dieser Übergangszone möglich ist, wobei die Wahrscheinlichkeit für einen erfolgreichen Übergang des Mikrorisses vom spröden Partikel in die umgebende duktile Matrix mit zunehmender Partikelgröße (bei gegebenem Matrixzustand) ansteigt. Es existiert demnach eine vom Matrixzustand abhängige kritische Partikelgröße D_k , die vorliegen muss, damit der durch den Partikelbruch entstandene Mikroriss eine Spaltbruchinitiierung verursachen kann.

Mit Hilfe der bereitgestellten Finite-Elemente-Modelle können die erforderlichen Submodellrechnungen zur Bestimmung dieser kritischen Partikelgröße D_k unter Berücksichtigung verschiedener Lastgeschichten bzw. Matrixzustände und Partikelkonstellationen durchgeführt werden. Die Ergebnisse der RVE-Simulationsrechnungen (siehe Kapitel 4.2.2) dienen dabei als Eingangsdaten für alle nachfolgenden Submodellrechnungen. Die RVE-Belastungsgeschichten entsprechen den zuvor an den Spaltbruchsprüngen verschiedener Bruchmechanikproben ermittelten lokalen Spannungs- und Dehnungsgeschichten (siehe Kapitel 4.1.2). Für die realitätsnahen Submodelle wird das in Kapitel 4.2.1 vorgestellte kristallplastische Materialmodell verwendet, während für die vereinfachten Submodelle ein elastisch-plastisches Material mit dehnratenabhängiger Plastizität zum Einsatz kommt (vgl. Kroon und Faleskog [64]). Das Partikel wird als rein elastisch modelliert (mit elastischen Konstanten entsprechen denen der Matrix, vgl. Jikov et al. [57], Mathieu et al. [84]). Alle Rechnungen werden geometrisch nichtlinear durchgeführt. Zur Ermöglichung der Rissausbreitung wird eine Kohäsivzone in die Submodelle eingefügt (siehe Kapitel 4.2.1). Die (durch die Kohäsivelemente vorgegeben) Rissausbreitungsrichtung liegt dabei senkrecht zur Hauptbelastungsrichtung (Richtung der effektiven maximalen Hauptspannung im RVE). Diese vereinfachende Annahme ist akzeptabel, da die Rissausbreitung im frühen Stadium nicht unbedingt auf den bevorzugten Spaltbrüchebenen (100-Ebenen) erfolgt. Dies wird durch die in Experimenten beobachteten, zumeist etwa senkrecht zur Hauptlastrichtung orientierten Oberflächenspuren der durch Karbidbruch entstandenen Mikrorisse bestätigt (McMahon et al. [85]),

Gurland et al. [42]). Die Abmessungen und die Parameter der Kohäsivelemente sind abhängig von der angenommenen Oberflächenenergie (Kroon und Faleskog [64]). Die Oberflächenenergie wird dabei als effektive Oberflächenenergie interpretiert (Berücksichtigung plastischer Effekte). Curry und Knott [30] schlagen in diesem Zusammenhang für die duktile ferritische Matrix eine Oberflächenenergie von $\gamma_f=14\text{N/m}$ und für das Karbid einen Wert von $\gamma_c=0.5 \cdot \gamma_f$ vor. Im Hinblick auf den Rissübergang in die Matrix ist der Einfluss von γ_c jedoch sehr gering (Kroon und Faleskog [64]). Bei einer ertragbaren Spannung (Schädigungsbeginn bei Erreichen dieser kritischen Spannung) von $\sigma_{\max}=2.4\text{GPa}$ erhält man für die angegebenen effektiven Oberflächenenergien kritische Verschiebungen (Elementversagen) von $\delta_{m-f}^f \approx 3.1\text{nm}$ (Ferrit) und $\delta_{m-c}^f \approx 2.7\text{nm}$ (Karbid). Hinsichtlich der Elementkantenlänge L_e (in Rissausbreitungsrichtung) geben Kroon und Faleskog [64] für lineare Elemente einen Richtwert von $L_e \approx 15 \cdot \delta_m^f$ an, damit folgt im betrachteten Fall $L_{e-f} \approx 0.047\mu\text{m}$ und $L_{e-c} \approx 0.040\mu\text{m}$.

Die Simulationsrechnungen werden in zwei Phasen unterteilt. Das Aufbringen des gewünschten Belastungszustands bei Partikelbruch als erste Phase der Simulation erfolgt in Form einer statischen Rechnung. Anschließend wird durch eine Knotenlöstechnik im Partikel ein Anfangsdefekt erzeugt. Diese Rissinitiierung durch Knotenlösen findet in der Partikelmitte statt. Die Annahme, dass der Versagensursprung in der Partikelmitte liegt, wird sowohl durch experimentelle Beobachtungen (Lindley et al. [75]: Versagensort im Karbid ist nicht rein zufällig, bevorzugtes Versagen in der Mitte) als auch (indirekt) durch Simulationsergebnisse gestützt (Sun et al. [114], Beremin et al. [17], Ergebnisse aus Kapitel 4.2.3: maximale Spannung in der Partikelmitte). Die Größe des Startdefekts hat auf die nachfolgenden Vorgänge nur einen sehr geringen Einfluss, solange eine gewisse Größe (etwa 70% des Partikeldurchmessers) nicht überschritten wird (Kroon und Faleskog [64]). In der mit der Rissinitiierung beginnenden zweiten Simulationsphase kann sich der Riss im Rahmen einer dynamischen Rechnung ausbreiten. Dabei muss darauf geachtet werden, dass der Modelldurchmesser groß genug ist, um Effekte von Wellenreflexionen an den Grenzflächen während der relevanten Simulationszeit zu vermeiden.

Einfluss der Feldgrößen

Die Untersuchungen zur Ermittlung der relevanten mechanischer Feldgrößen basieren auf der Betrachtung eines Partikels an einer jeweils festgelegten Korngrenze für verschiedene RVE-Lastgeschichten. Die Feldgrößen werden dabei in Form ihrer jeweiligen Effektivwerte (Definition siehe Gleichung (129)) für das im Submodell enthaltene Matrixmaterial und das Partikel betrachtet.

Im ersten Schritt der Untersuchungen werden die realitätsnahen Submodelle betrachtet. Dabei wird ein kugelförmiges Partikel konstanter Größe verwendet. Ein kugelförmiges Partikel bietet den Vorteil, dass die Partikelspannung σ_p nur schwach von der Matrixdehnung ε_{I-M} abhängt (siehe Kapitel 4.2.3). Damit liegen für verschiedene zu betrachtende Lastgeschichten vergleichbare Partikelspannungen vor. So ist es möglich, den alleinigen Einfluss des Matrixzustandes auf die Rissausbreitung zu untersuchen.

Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen zeigen, dass hinsichtlich der effektiven Matrixdehnung ε_{I-M} kein direkter Einfluss auf die Rissausbreitung vorliegt. Demgegenüber zeigt sich bei der Betrachtung von Belastungszuständen mit gleicher Dehnung, aber unterschiedlicher größter Hauptspannung σ_{I-M} und Spannungsmehrachsigkeit h_M ein erkennbarer Einfluss auf das Rissausbreitungsverhalten. In Abb. 90 sind exemplarisch die Simulationsergebnisse für zwei hinsichtlich der effektiven Matrixdehnung ähnlicher, aber hinsichtlich des Spannungszustandes erkennbar voneinander abweichender Belastungszustände dargestellt.

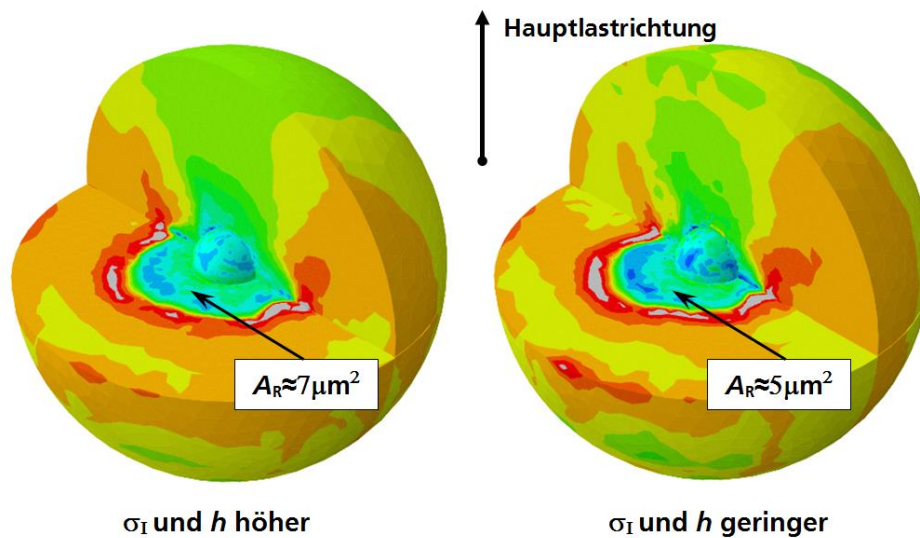


Abb. 90: Rissausbreitung in die Matrix für verschiedene Belastungszustände (ähnliches $\varepsilon_{I-M} \approx 0.03$; σ_{I-M} und h_M unterschiedlich, σ_{I-M} dargestellt), Zeitpunkt $t = 5 \cdot 10^{-9}$ s: (links) $\sigma_{I-M} \approx 1850 \text{ MPa}$, $h_M \approx 2.5$ (rechts) $\sigma_{I-M} \approx 1680 \text{ MPa}$, $h_M \approx 2.2$

Bei dem Belastungszustand mit höherer Matrixspannung σ_{I-M} und Spannungsmehrachsigkeit h_M hat sich der Riss zu einem gegebenen Zeitpunkt der dynamischen Phase (hier $t \approx 5 \cdot 10^{-9}$ s) insgesamt weiter ausgebreitet (Rissfläche $A_R \approx 7 \mu\text{m}^2$) und setzt seine Ausbreitung mit steigender Geschwindigkeit fort, während der Riss bei dem Belastungszustand mit geringerer effektiver Matrixspannung σ_{I-M} und Spannungsmehrachsigkeit h_M (Rissfläche $A_R \approx 5 \mu\text{m}^2$) kurze Zeit später zum Stillstand kommt. Somit wird deutlich, dass höhere Werte der effektiven maximalen Matrix-Hauptspannung σ_{I-M} und der effektiven Matrix-Spannungsmehrachsigkeit h_M die Rissausbreitung in die Matrix begünstigen.

Zur Quantifizierung des Einflusses des Matrix-Belastungszustandes auf den Rissübergang vom spröden Partikel in die duktile Matrix bietet sich eine Beschreibung durch den kritischen Partikeldurchmesser an. Dabei wird der kritische Partikeldurchmesser D_k als der Durchmesser definiert, der mindestens vorliegen muss, damit der im Partikel entstandene Riss bei gegebenem σ_{I-M} - h_M -Zustand beim Übergang in die Matrix nicht arretiert und dadurch hinsichtlich der Spaltbruchinitiierung unkritisch wird. Abweichend von der üblichen Definition der Partikelgröße (äquivalenter Kugeldurchmesser D_{eq}) wird der kritische Partikeldurchmesser D_k als der Durchmesser des Partikels in der Bruchebene ermittelt. Im Hinblick auf eine spätere Gegenüberstellung (siehe Kapitel 5.2.2) der berechneten Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser mit der experimentell bestimmten Größenverteilung der Partikel erscheint diese Größendefinition auf den ersten Blick als problematisch. Bedenkt man jedoch, dass die Simulationsrechnungen in erster Linie der Identifikation der qualitativen Zusammenhänge beim Rissübergang dienen (zur Festlegung der mathematischen Struktur einer Näherungsgleichung für D_k) und die experimentelle Partikelgrößenverteilung zumeist in Form einer anhand von Schlifften (d.h. auch Schnitte durch die Partikel) ermittelten Größenverteilung vorliegt, so wird klar, dass die hier verwendete Größendefinition für D_k sinnvoll ist.

Die Bestimmung des kritischen Durchmessers D_k erfolgt auf Basis der Simulationsrechnungen durch eine schrittweise Erhöhung des Partikeldurchmessers D bei jeweils gegebenem Partikel-Versagenszeitpunkt innerhalb der gerade betrachteten Lastgeschichte, d.h. bei gegebenem effektiven σ_{I-M} - h_M -Zustand der Matrix zum Zeitpunkt des Partikelversagens.

Da bei Verwendung der realitätsnahen Submodelle eine systematische Variation der Einflussparameter (jeweils für verschiedenen Partikelgrößen) praktisch kaum durchführbar ist (Zeitaufwand), werden alle weiteren Untersuchungen (Einfluss von Feldgrößen, Partikelkonstellation und Materialeigenschaften auf den kritischen Partikeldurchmesser D_k) unter Verwendung der vereinfachten Submodelle durchgeführt.

Um die Abhängigkeit des kritischen Partikeldurchmessers D_k von der größten Hauptspannung und der Spannungsmehrachsigkeit zu ermitteln, wird D_k für verschiedene effektive Matrixzustände (verschiedene Partikel-Versagenszeitpunkt t_i für verschiedene RVE-Lastgeschichten und Korngrenzenpositionen) bestimmt. In Abb. 91 links ist exemplarisch das Rissausbreitungsverhalten (drei Zeitpunkte t_i ($i=1, 2, 3$) innerhalb der dynamischen Rissausbreitungsphase, mit $t_1 < t_2 < t_3$) bei gegebenem $\sigma_{I-M} - h_M$ -Zustand für ein Partikel mit $D < D_k$ dargestellt, während Abb. 91 rechts das Rissausbreitungsverhalten für ein Partikel mit $D > D_k$ zeigt (Zeitpunkte identisch zu Abb. 91 links).

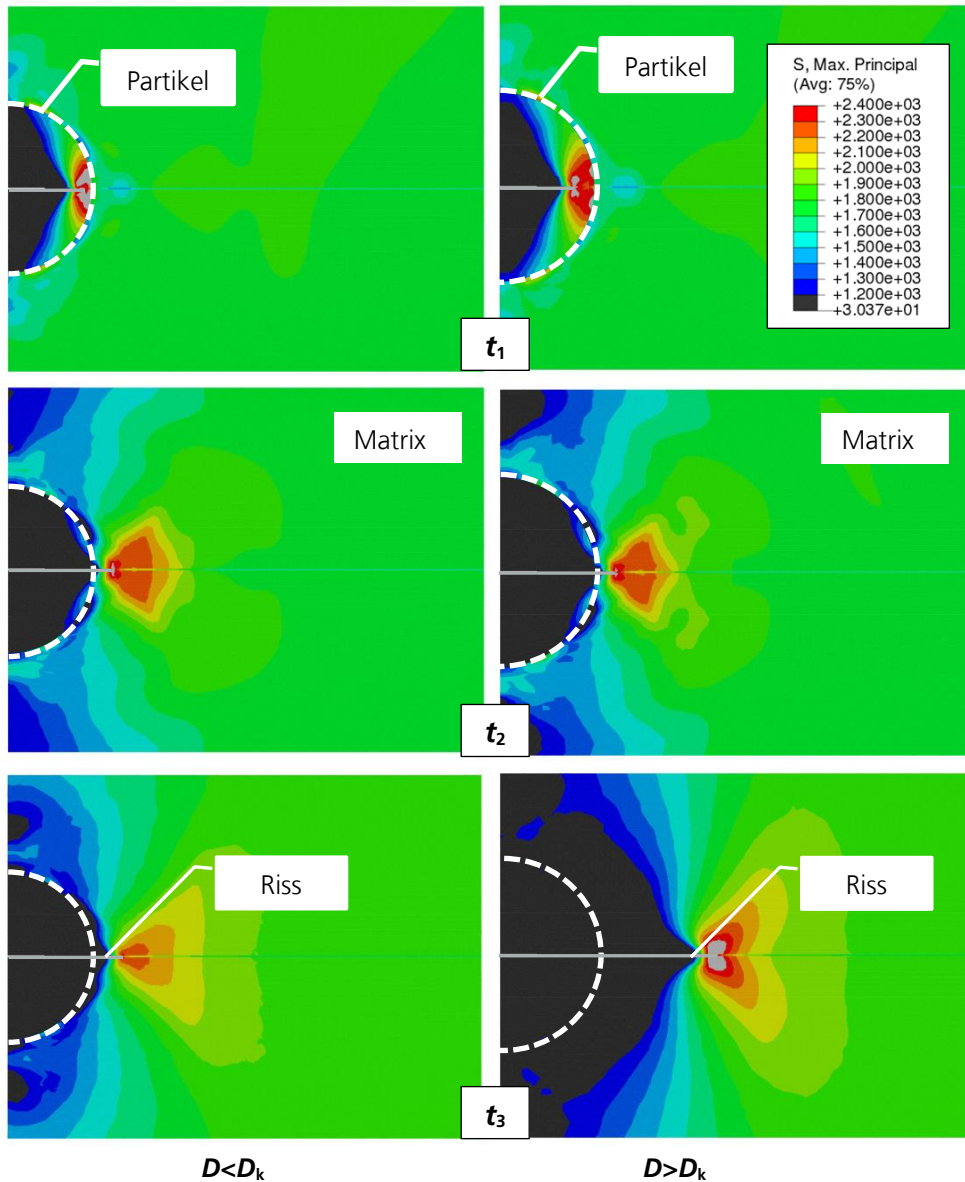


Abb. 91: Rissausbreitung in die Matrix für ein Partikel mit $D < D_k$ (links) und $D > D_k$ (rechts) bei gegebenem $\sigma_{I-M} - h_M$ -Zustand (Dargestellte Feldgröße: σ_I); Zeitpunkte $t_1 < t_2 < t_3$

In der frühen Phase (Position t_1 und Position t_2 in Abb. 91) der Rissausbreitung sind nur relativ geringe Unterschiede zwischen dem Submodell mit einem Partikel von unterkritischer Größe und dem Submodell mit einem Partikel von kritischer Größe erkennbar. In beiden Fällen wird das Interface Partikel-Matrix überwunden und der Riss beginnt, sich im duktilen Matrixmaterial auszubreiten. Die Überwindung des Interface Partikel-Matrix gelingt bei unterkritischer Partikelgröße nicht in allen Fällen, oftmals arretiert der Riss bereits an dieser Stelle. Betrachtet man die spätere Phase der Rissausbreitung (Position t_3 in Abb. 91), so werden deutliche Unterschiede zwischen dem Submodell mit einem Partikel von unterkritischer Größe und dem Submodell mit einem Partikel von kritischer

Größe sichtbar. Während sich der Riss im Submodell mit einem Partikel von unterkritischer Größe nicht mehr wesentlich weiter ausbreiten kann und das Spannungsniveau an der Risspitze kontinuierlich abnimmt, wächst der Riss im Submodell mit einem Partikel von kritischer Größe bei kontinuierlich steigendem Spannungsniveau an der Risspitze mit zunehmender Geschwindigkeit (vgl. Abb. 92).

 Finite-Elemente-
 Simulationsrechnungen

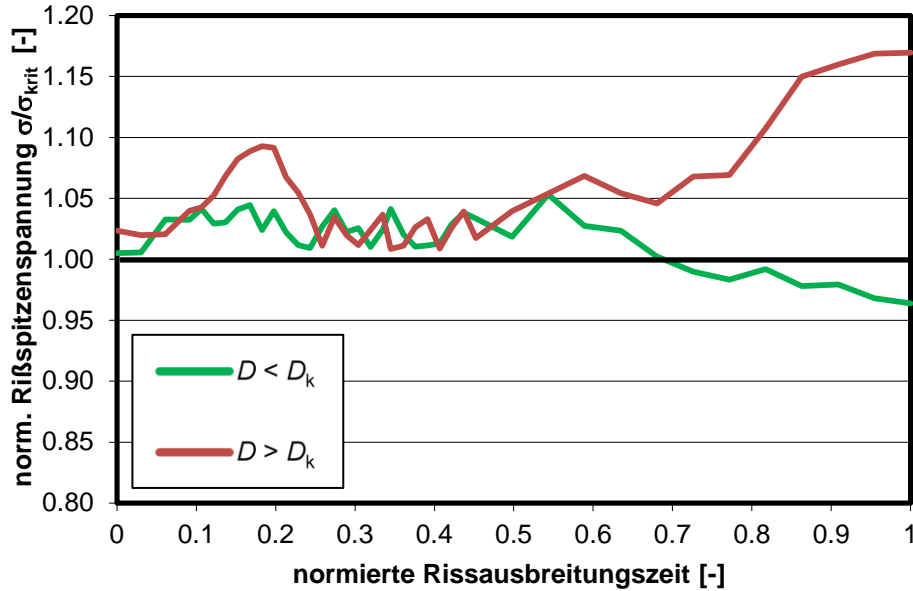


Abb. 92: Entwicklung der Spannung an der Rissfront für ein Partikel mit $D < D_k$ und $D > D_k$ bei gegebenem effektiven σ_{I-M} - h_M -Zustand

Letztendlich kommt es demnach bei einer für den betrachteten Matrixzustand unterkritischen Partikelgröße zum frühen Rissarrest, erst bei Vorliegen einer kritischen Partikelgröße $D \geq D_k$ können potenziell kritische Mikrodefekte entstehen.

Die Ergebnisse hinsichtlich der Abhängigkeit des kritischen Partikeldurchmessers D_k von der größten Hauptspannung und der Spannungsmehrachsigkeit sind in Abb. 93 und Abb. 94 dargestellt, wobei die aus den Simulationsergebnissen resultierenden Datenpunkte jeweils Mittelwerte für ein σ_{I-M} bzw. h_M -Intervall sind (beispielhaft dargestellt in Abb. 94 für den Datenpunkt mit $h_M=2.3$ und $D_k=0.8\mu m$).

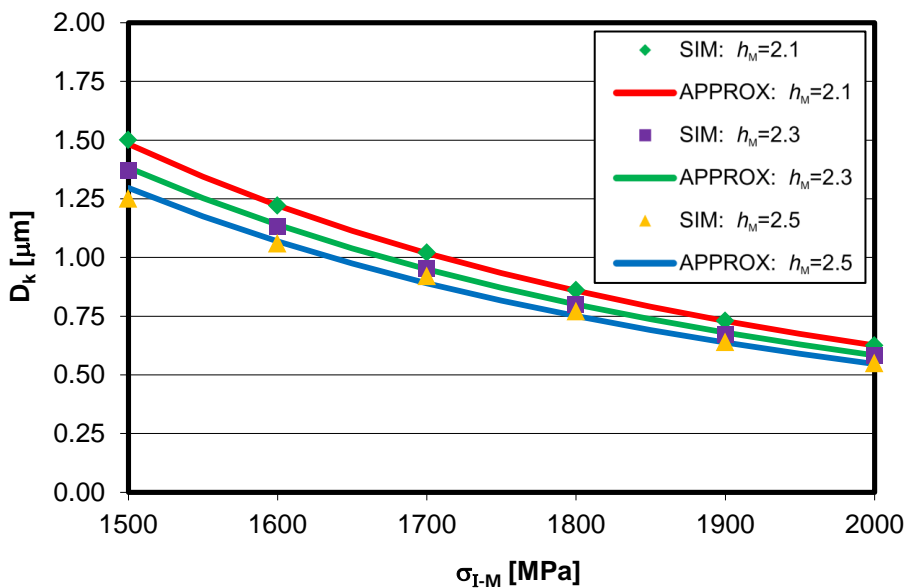


Abb. 93: Kritischer Partikeldurchmesser in Abhängigkeit von σ_{I-M} für verschiedene h_M , Datenpunkte aus Simulationsergebnissen und Approximation dieser Datenpunkte durch nichtlineare Funktionen

Es wird deutlich, dass sowohl hinsichtlich des Einflusses der größten Hauptspannung als auch bezüglich des Einflusses der Spannungsmehrachsigkeit nichtlineare Zusammenhänge vorliegen. Daher erfolgt eine Approximation durch nichtlineare Funktionen der allgemeinen Form $f(x)=c_1x^{c_2}$.

Die Ergebnisse zeigen, dass der kritische Partikeldurchmesser D_k mit guter Genauigkeit als Funktion der effektiven Matrix-Hauptspannung σ_{I-M} und der effektiven Matrix-Spannungsmehrachsigkeit h_M (zum Zeitpunkt des Partikelversagens) beschrieben werden kann.

 Finite-Elemente-
 Simulationsrechnungen

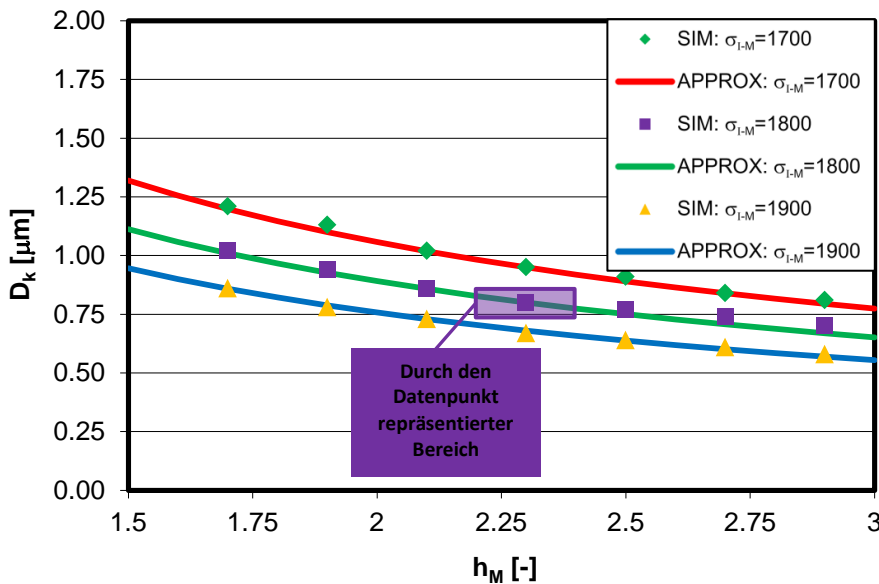


Abb. 94: Kritischer Partikeldurchmesser in Abhängigkeit von h_M für verschiedene σ_{I-M} , Datenpunkte aus Simulationsergebnissen und Approximation dieser Datenpunkte durch nichtlineare Funktionen

Im Rahmen dieser Studie wurden auch verschiedene Konstellationen nah benachbarter Partikel (Cluster) untersucht. Insgesamt zeigen die Ergebnisse der Simulationsrechnungen bezüglich der Partikelcluster, dass Clusterbildung durchaus einen gewissen Einfluss auf den Matrixzustand im Bereich des Interface Partikel-Matrix haben kann, eine systematische Beschreibung dieses Einflusses ist aufgrund der Vielzahl der möglichen Clusterkonstellationen jedoch extrem aufwändig. Bedenkt man zudem, dass bereits die für Einzelpartikel berechneten kritischen Defektgrößen aufgrund unvermeidlicher Idealisierung lediglich eine Abschätzung der real vorliegenden Werte darstellen, so erscheint im Rahmen der Formulierung des letztendlich makroskopisch definierten Spaltbruchmodells eine Vernachlässigung des Clustereffekts als sinnvoll.

Einfluss von Partikelkonstellation und Material

Neben dem Einfluss der Feldgrößen werden auch die Einflüsse von Partikelkonstellation, Matrix-Materialeigenschaften und Oberflächenenergie auf D_k untersucht. Hinsichtlich der Partikelkonstellation wird dabei vereinfachend angenommen, dass diese allein durch die vorliegende Partikelspannung σ_P mit hinreichender Genauigkeit beschreibbar ist. Im ersten Schritt wird daher der Einfluss der (bei Partikelversagen vorliegenden) Partikelspannung σ_P auf den kritischen Partikeldurchmesser D_k untersucht.

Um bei jeweils gegebener Lastgeschichte (verschiedene RVE-Lastgeschichten und Korngrößenpositionen) unterschiedliche Partikelspannungen erhalten zu können, werden die Partikel als zylinderförmig modelliert. So kann bei gegebenem Partikeldurchmesser durch Variation der Partikellänge (Änderung der Streckung, vgl. Kapitel 4.2.3) die gewünschte Partikelspannung eingestellt werden (Die Verwendung eines Zylinders statt eines Rotationsellipsoids vereinfacht die Generierung der FE-Modelle).

Die Untersuchungen werden für verschiedene Belastungssituationen bzw. verschiedene effektive Matrixzustände (verschiedene Partikel-Versagenszeitpunkt t_i für verschiedene RVE-Lastgeschichten und Korngrenzenpositionen) durchgeführt. Ein repräsentatives Beispiel für den Einfluss der Partikelspannung auf den kritischen Partikeldurchmesser D_k ist in Abb. 95 dargestellt, während Abb. 96 und Abb. 97 die Gesamtergebnisse zeigen. In Abb. 95 links ist exemplarisch das Rissausbreitungsverhalten (drei Zeitpunkte t_i ($i=1, 2, 3$) innerhalb der dynamischen Rissausbreitungsphase, mit $t_1 < t_2 < t_3$) bei gegebenem σ_{I-M} - h_M -Zustand für ein Partikel mit $\sigma_p=2500$ MPa dargestellt, während Abb. 95 rechts das Rissausbreitungsverhalten für ein Partikel mit $\sigma_p=3000$ MPa zeigt (Zeitpunkte identisch zu Abb. 95 links).

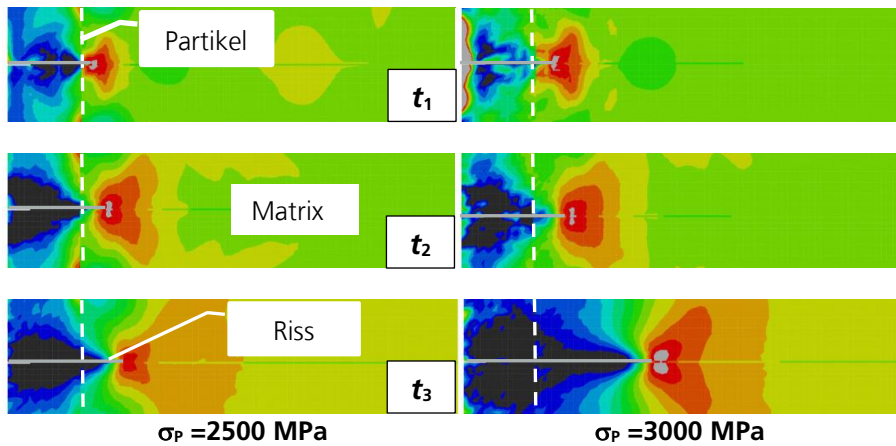


Abb. 95: Rissausbreitung in die Matrix für ein Partikel mit $\sigma_p=2500$ MPa (links) und $\sigma_p=3000$ MPa (rechts) bei gegebenem σ_{I-M} - h_M -Zustand (Dargestellte Feldgröße: σ_I); Zeitpunkte $t_1 < t_2 < t_3$

In der frühen Phase der Rissausbreitung sind nur relativ geringe Unterschiede zwischen dem Submodell mit einem Partikel mit $\sigma_p=2500$ MPa und dem Submodell mit einem Partikel mit $\sigma_p=3000$ MPa erkennbar. In beiden Fällen wird das Interface Partikel-Matrix überwunden und der Riss beginnt, sich im duktilen Matrixmaterial auszubreiten. Betrachtet man die spätere Phase der Rissausbreitung (t_3), so werden Unterschiede sichtbar. Während sich der Riss bei $\sigma_p=2500$ MPa nicht mehr weiter ausbreiten kann und das Spannungsniveau an der Risspitze kontinuierlich abnimmt, wächst der Riss bei $\sigma_p=3000$ MPa mit kontinuierlich steigendem Spannungsniveau an der Rissfront.

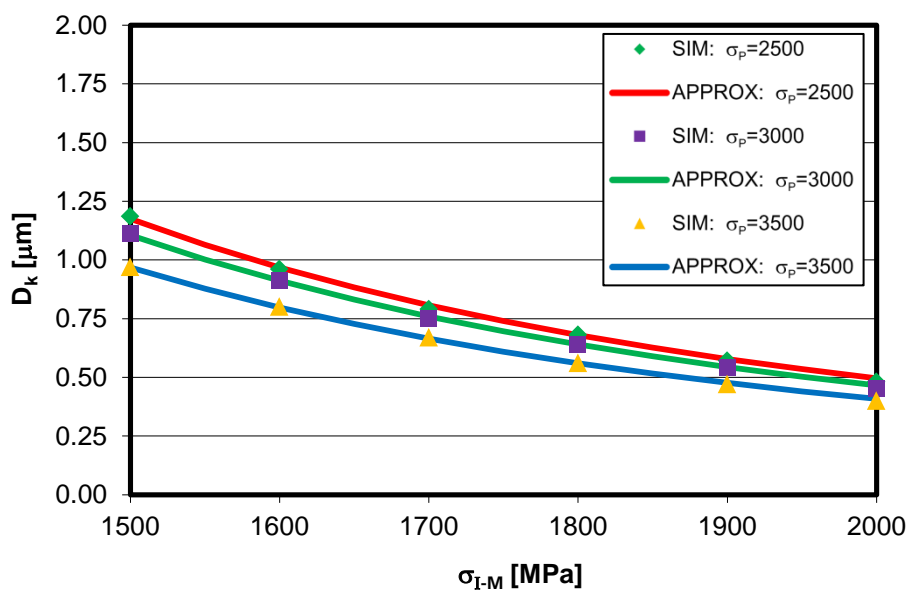


Abb. 96: Kritischer Partikeldurchmesser in Abhängigkeit von σ_{I-M} für verschiedene Partikelspannungen σ_p , Datenpunkte aus Simulationsergebnissen und Approximation dieser Datenpunkte durch nichtlineare Funktionen

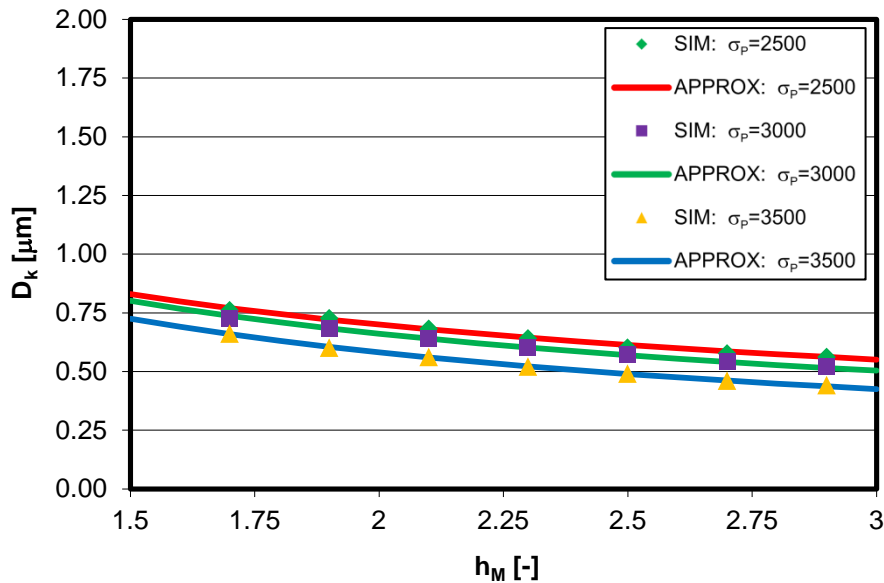


Abb. 97: Kritischer Partikeldurchmesser in Abhängigkeit von h_M für verschiedene Partikelspannungen σ_p , Datenpunkte aus Simulationsergebnissen und Approximation dieser Datenpunkte durch nichtlineare Funktionen

Somit wird deutlich, dass die Partikelspannung σ_p (zum Zeitpunkt des Partikelversagens) einen wesentlichen Einfluss auf den kritischen Partikeldurchmesser D_k besitzt und demnach bei dessen Berechnung in geeigneter Weise berücksichtigt werden muss.

Hinsichtlich der Einflüsse der effektiven Matrix-Materialeigenschaften und der Oberflächenenergie erhält man im Vergleich zum Einfluss der Partikelspannung qualitativ ähnliche Ergebnisse. Die Ergebnisse der Untersuchungen bezüglich der Einflüsse von Matrix- E -Modul, Streckgrenze σ_0 und Verfestigung $VF=d\sigma/d\varepsilon_{pl}$ (Mittelwert: $0 \leq \varepsilon_{pl} \leq 0.2$) sowie der effektiven Oberflächenenergie $OFE=\gamma_{eff}$ sind in Abb. 98 und Abb. 99 dargestellt (Referenzmaterial mit Eigenschaften wie in Kapitel 3.1.1 für $T=-85^\circ\text{C}$ bestimmt).

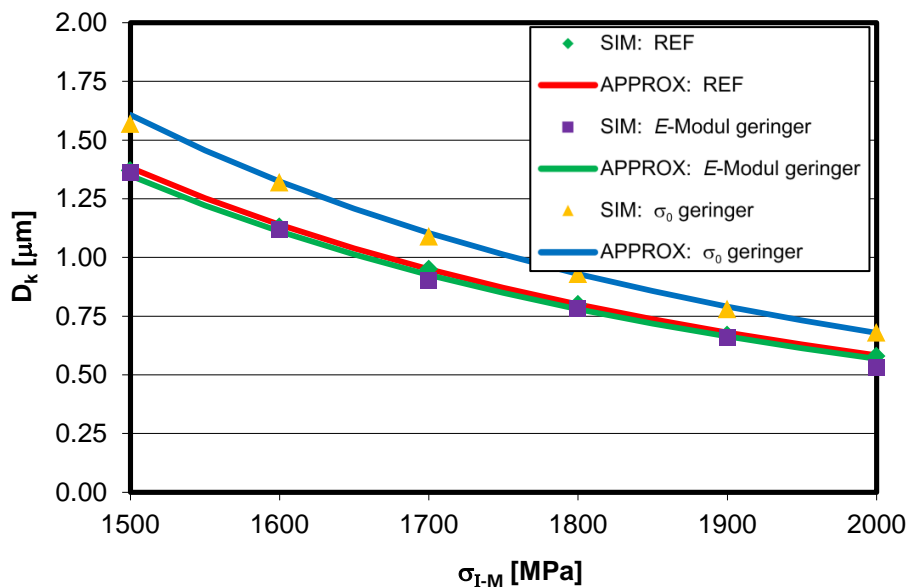


Abb. 98: Kritischer Partikeldurchmesser in Abhängigkeit von σ_{I-M} für verschiedene Materialeigenschaften (E -Modul und Streckgrenze σ_0), Datenpunkte aus Simulationsergebnissen und Approximation dieser Datenpunkte durch nichtlineare Funktionen

Während die Variation des E -Moduls (in realistische Grenzen) einen vernachlässigbaren Einfluss auf den kritischen Partikeldurchmesser hat, führt eine Änderung der Streckgrenze des Matrixmaterials auch zu einer deutlichen Änderung des kritischen Partikeldurchmessers (siehe Abb. 98), eine Reduzierung der Streckgrenze verursacht eine Erhöhung von D_k . Vergleichbare Auswirkungen haben die Variation der Verfestigung (VF) sowie der angenommenen Oberflächenenergie (OFE). Hinsichtlich der Verfestigung

führt eine Reduzierung zur Erhöhung von D_k , während eine Reduzierung der angenommenen Oberflächenenergie erwartungsgemäß eine Reduzierung des kritischen Partikeldurchmessers verursacht (siehe Abb. 99).

Finite-Elemente-
Simulationsrechnungen

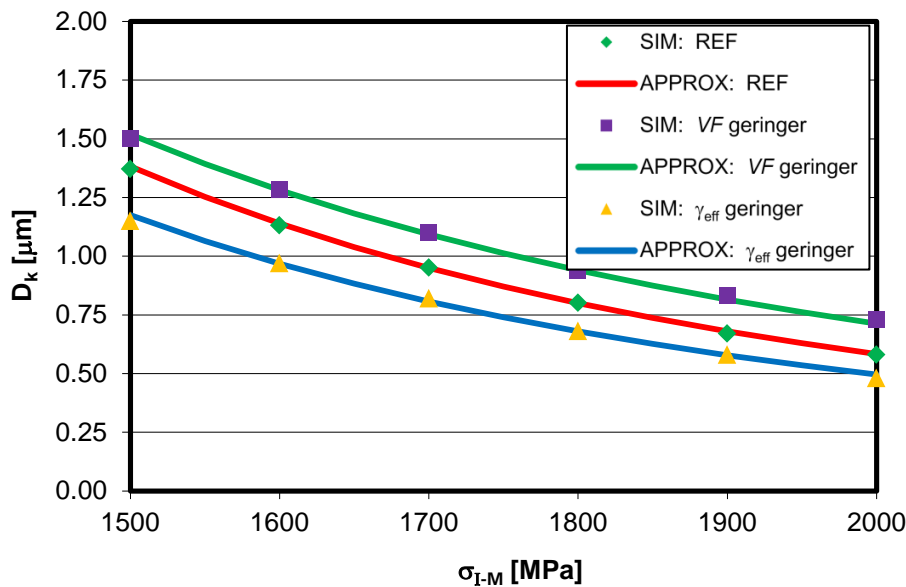


Abb. 99: Kritischer Partikeldurchmesser in Abhängigkeit von σ_{I-M} für verschiedene Materialeigenschaften (Verfestigung VF und Oberflächenenergie γ_{eff}), Datenpunkte aus Simulationsergebnissen und Approximation dieser Datenpunkte durch nichtlineare Funktionen

Insgesamt kann demnach festgehalten werden, dass neben der Partikelspannung σ_p auch die Matrix-Fließkurve (Fließspannung, Verfestigung) sowie die Oberflächenenergie γ_{eff} einen relevanten Einfluss auf den kritischen Partikeldurchmesser D_k haben und daher bei dessen Berechnung in geeigneter Weise berücksichtigt werden müssen.

Berechnung des kritischen Partikeldurchmessers

Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen zeigen, dass der kritische Partikeldurchmesser durch einen kombinierten Term aus Matrixspannung und Matrixspannungsmehrfachigkeit beschrieben werden kann. Dabei müssen in dem Term Parameter auftreten, die sowohl von der Partikelkonstellation (vereinfachend beschreibbar durch die Partikelspannung σ_p zum Zeitpunkt des Partikelversagens) als auch vom Verhalten des duktilen Matrixmaterials (Fließgrenze σ_0 , Verfestigung VF) und der effektiven Oberflächenenergie γ_{eff} abhängig sind. Basierend auf diesen Erkenntnissen wird die folgende Formulierung zur näherungsweisen Berechnung des kritischen Partikeldurchmessers verwendet:

$$D_k = c_1(\sigma_p) \cdot c_2(\gamma_{\text{eff}}) \cdot c_3(\sigma_0, VF) \cdot (\sigma_{I-M})^{\frac{-1}{c_4(VF)}} \cdot (h_M)^{\frac{-1}{c_5(VF)}} \cdot c_{\text{ref}} \quad (125)$$

mit den effektiven Feldgrößen σ_{I-M} und h_M der Matrix in der Partikelumgebung sowie dem partikelkonfigurationsabhängigen Parameter $c_1=c_1(\sigma_p)$ und den Materialparametern $c_2=c_2(\gamma_{\text{eff}})$, $c_3=c_3(\sigma_0, VF)$, $c_4=c_4(VF)$ und $c_5=c_5(VF)$, wobei zwischen c_1 und c_2 bis c_5 keine Korrelation vorliegt. Im Rahmen dieser Studie wird im Folgenden keine Variation der Oberflächenenergie durchgeführt, daher wird $c_2=c_2(\gamma_{\text{eff}}=\text{konst.})=1$ gesetzt. Für c_{ref} gilt: $c_{\text{ref}}=\sigma_{\text{ref}}^{1/C_4} h_{\text{ref}}^{1/C_5} D_{\text{ref}}$ mit $\sigma_{\text{ref}}=1800\text{MPa}$ und $h_{\text{ref}}=2.10$ sowie $D_{\text{ref}}=1\mu\text{m}$ (frei gewählte Werte im Rahmen dieser Studie).

Die Parameter c_3 , c_4 und c_5 werden bei gegebener Partikelspannung ($\sigma_{p-\text{ref}}=2500\text{MPa}$, $c_1(\sigma_{p-\text{ref}})=1$) für verschiedene lokale Lastgeschichten durch Anpassung der aus Gleichung (125) resultierenden kritischen Partikeldurchmesser an die jeweiligen aus der Simulation erhaltenen Partikeldurchmesser bestimmt (vgl. Abb. 93 und Abb. 94). Dieses Vorgehen

wird für verschiedene Materialeigenschaften durchgeführt (vgl. Abb. 98 und Abb. 99). Anschließend kann mit einem entsprechenden Vorgehen bei gegebenen Materialeigenschaften durch Variation der Partikelspannung der Verlauf von $c_1=c_1(\sigma_p)$ ermittelt werden (vgl. Abb. 96 und Abb. 97).

In Abb. 100 und Abb. 101 sind die Ergebnisse zusammenfassend dargestellt. Dabei werden die Fließkurveneigenschaften vereinfachend durch den dimensionslosen Kennwert $k_3=W_1 \cdot \sigma_0/\sigma_{ref}+W_2 \cdot VF/VF_{ref}$ (Referenzmaterial: $k_3=1$; Erhöhung von σ_0 , VF : $k_3>1$; Reduzierung von σ_0 , VF : $k_3<1$) beschrieben. Weiterhin wird σ_p skaliert, so dass gilt $c_1=c_1(k_1)$ mit $k_1=\sigma_p/\sigma_{p-ref}$. Die Ergebnisse zeigen, dass die Abhängigkeit der Parameter c_4 und c_5 von der Verfestigung jeweils durch eine lineare Funktion approximiert werden kann. Demgegenüber müssen für die Beschreibung des Verlaufes der Parameter c_1 und c_3 nichtlineare Funktionen gewählt werden. In allen Fällen gelingt die oben beschriebene Anpassung und nachfolgende Approximation der erhaltenen Datenpunkte mit guter Genauigkeit.

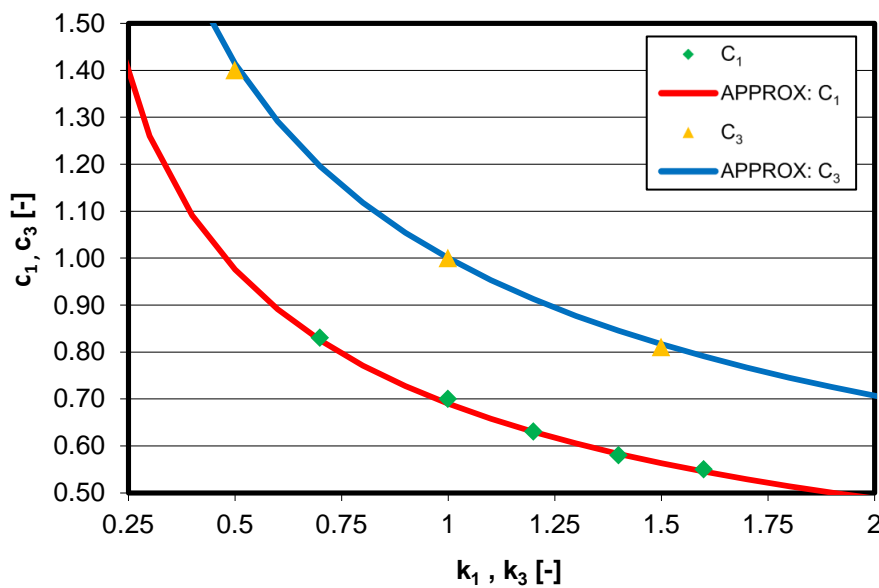


Abb. 100:
Parameter c_1 und c_3 , Datenpunkte aus Anpassung an Simulationsergebnisse und Approximation dieser Datenpunkte durch nichtlineare Funktionen

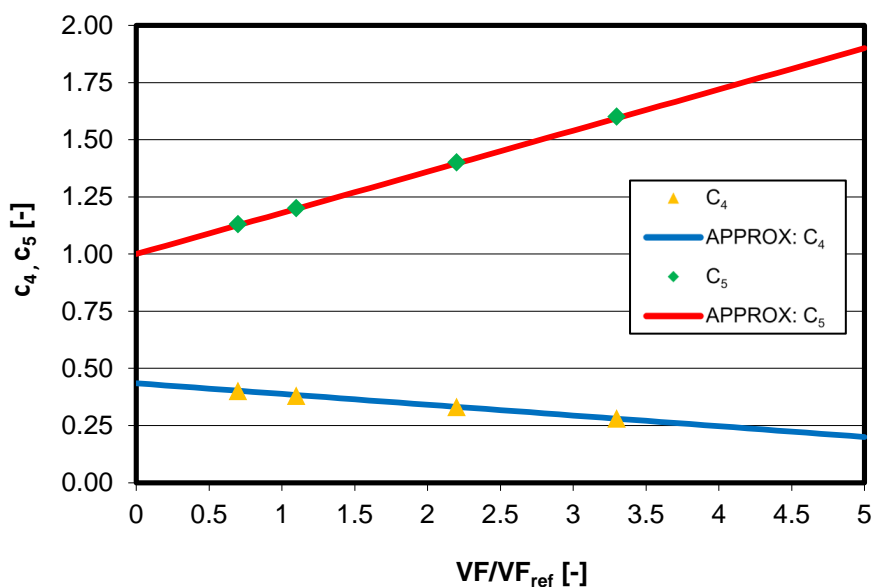


Abb. 101:
Parameter c_4 und c_5 , Datenpunkte aus Anpassung an Simulationsergebnisse und Approximation dieser Datenpunkte durch lineare Funktionen

Basierend auf den hergeleiteten Zusammenhängen kann der vom Matrixzustand abhängige kritische Partikeldurchmesser $D_k = D_k(\sigma_{I-M}, h_M)$ für das jeweils vorliegende Materialverhalten und die vorliegende Partikelspannung σ_P näherungsweise berechnet werden. Exemplarisch ist in Abb. 102 der Verlauf des kritischen Partikeldurchmessers für das Referenzmaterial und eine Partikelspannung von 2500MPa dargestellt.

 Finite-Elemente-
 Simulationsrechnungen

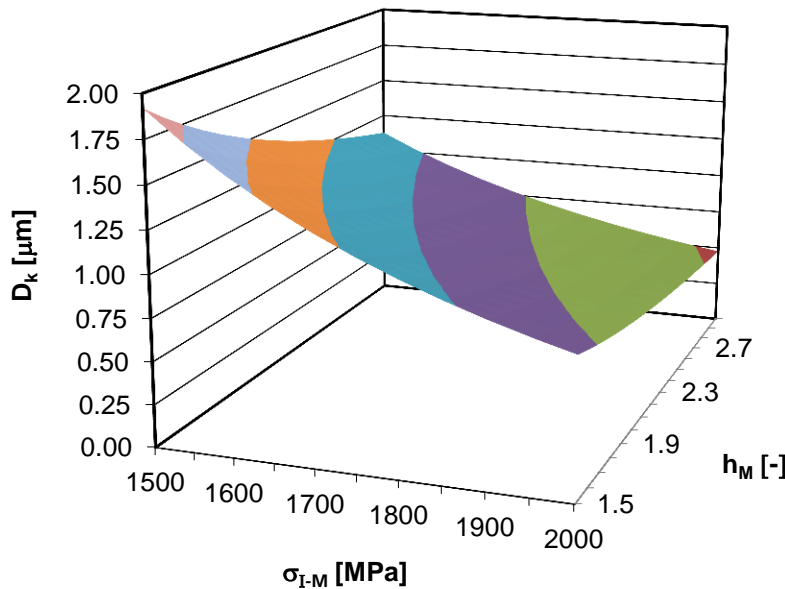


Abb. 102:
Kritische Partikeldurchmesser
 $D_k = D_k(\sigma_{I-M}, h_M)$ für das Referenzmaterial und $\sigma_P = 2500 \text{ MPa}$

4.3 Zusammenfassung und Diskussion

Basierend auf den Ergebnissen der Mikrostrukturcharakterisierung können realitätsnahe Modelle der Mikrostruktur erstellt werden, die sowohl die Eigenschaften der Kornstruktur als auch die der Partikel berücksichtigen. Die Modellierung der Kornstruktur erfolgt in Form repräsentativer Volumenelemente (RVE) mit realitätsnaher Kornmorphologie und Kristallographie. Die Partikel werden dabei unter Verwendung einer Submodelltechnik in die Kornstruktur eingefügt. Die RVE werden mit den verschiedenen im Ligament unterschiedlicher Typen von Bruchmechanikproben auftretenden Lastgeschichten beaufschlagt (siehe Kapitel 4.1.2). So können zunächst die Verteilungen der für die Spaltbruchinitiierung relevanten mechanischen Feldgrößen (σ_I , ε_I , h) in der Umgebung der Korngrenzen im RVE bestimmt werden. Dabei zeigt sich für alle betrachteten Feldgrößen eine erkennbare Streuung um den jeweiligen Mittelwert (RVE-Effektivwert). Die stärkste Streuung liegt für die Hauptdehnung ε_I vor, Spannungsmehrachsigkeit h und größte Hauptspannung σ_I weisen geringere relative Standardabweichungen auf. Insgesamt bleibt festzuhalten, dass bei der Berechnung der Versagenswahrscheinlichkeit eines Kontrollvolumens (hier: RVE) die Streuung der Feldgrößen berücksichtigt werden sollte (Beschreibung durch Normalverteilungen).

Die Untersuchungen zur Mikrodefektentstehung (Partikelbruch und anschließender Rissübergang in die Matrix; notwendige Bedingung für die Spaltbruchinitiierung) wurden in zwei Schritten durchgeführt. Im ersten Schritt wurde der Partikelbruch betrachtet. Unter der Annahme, dass der Partikelbruch eintritt, wenn die effektive größte Hauptspannung im Partikel die vorliegende Festigkeit übersteigt, kann die Entwicklung der Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch anhand der Entwicklung dieser Partikelspannung σ_P beschrieben werden. Dabei wird davon ausgegangen, dass in dem betrachte-

ten Temperaturbereich (unterer Übergangsbereich der Bruchzähigkeit) die Partikelbeanspruchung im Wesentlichen aus einem Fasermechanismus resultiert und Versetzungsaufstauungen nur eine untergeordnete Rolle spielen (vgl. Lindley et al. [75]).

Die Ergebnisse zeigen, dass hinsichtlich der Feldgrößen neben der Matrixdehnung ε_{I-M} auch die Matrixspannung (größte Hauptspannung) σ_{I-M} einen gewissen Einfluss auf die Partikelspannung σ_p besitzt. Weiterhin sind die Partikelform (Streckung s , siehe Gleichung (120)) sowie die Partikelorientierung α (Abweichung der Richtung der langen Halbachse des Partikels von der Richtung der effektiven maximalen Hauptspannung im RVE, siehe Gleichung (121)) von großer Bedeutung. Während eine größere Streckung zu einer deutlich höheren Partikelspannung führt, folgt aus einer größeren Orientierungsabweichung zur Hauptlastrichtung eine starke Reduzierung der Partikelspannung (Übereinstimmung mit experimentellen Beobachtungen von Gurland et al. [42]: bevorzugter Bruch länglicher, in Lastrichtung orientierter Partikel). Alle diese Aspekte werden, neben dem Einfluss der Eigenschaften des Matrixmaterials, bei der Berechnung der Partikelspannung (siehe Gleichung (123)) bzw. der Verteilung der Partikelspannungen im RVE (Kapitel 5.2.1) in geeigneter Weise berücksichtigt.

Die im Rahmen dieser Arbeit hergeleitete Beschreibung der effektiven maximalen Partikelspannung durch einen additiven Ausdruck, mit einem Spannungsanteil resultierend aus der Matrixspannung und einem Spannungsanteil resultierend aus der Deformationsinkompatibilität zwischen Partikel und Matrix wird auch von Beremin et al. [17] (siehe Gleichung (124)) und Jikov et al. [57] (siehe Gleichung (69)) verwendet. Die von Beremin et al. und Jikov et al. verwendete lineare Formulierung der „Inkompatibilitäts-
spannung“ folgt aus der Anwendung von Eshelbys Ansatz zum Einschlussproblem [34] auf eine plastische Matrix. Dazu muss angemerkt werden, dass der Ansatz von Eshelby gut für eine elastische Matrix funktioniert, die Anwendung auf eine plastische Matrix jedoch problematisch ist. Daher ersetzen die genannten Autoren bei der Anwendung auf plastische Probleme den E -Modul durch einen äquivalenten plastischen (dehnungsabhängigen) Modul. Einen alternativen, multiplikativen Ansatz schlagen Wallin et al. [119] (siehe Gleichung (65)) vor. Auch dieser Ansatz beinhaltet neben Material- und Partikelformparametern die Matrixdehnung und die Matrixspannung als relevante Feldgrößen. Die Einflüsse von Entlastung und anschließender Wiederbelastung sowie von thermisch transienten Lastgeschichten auf die Partikelspannung sollen in zukünftigen Studien untersucht werden.

Im zweiten Schritt der Untersuchungen zur Mikrodefektentstehung wurde der Rissübergang des im spröden Partikel entstandenen Mikrorisses in die umgebende duktile Matrix mittels dynamischer Simulationsrechnungen untersucht. Typischerweise wird der Riss nach der Entstehung im spröden Partikel beschleunigt und dann am Interface Partikel-Matrix stark abgebremst, gegebenenfalls bis zum Stillstand (vgl. McMahon und Cohen [85]). Arretiert der Riss nicht am Interface, so wird er zunächst wieder beschleunigt und anschließend (abhängig von den vorliegenden Bedingungen) entweder bis zum Stillstand bzw. Arrest abgebremst oder weiter durch die Matrix getrieben (Kroon und Faleskog [64]). Der gesamte Risswiderstand im Ferrit beinhaltet dabei die Summe der Beiträge von plastischer Dissipation und Kohäsivenergie (vgl. Tvergaard, Hutchinson [117] sowie Landis et al. [69]). Mehr Dissipation im Ferrit bedeutet, dass weniger der freigesetzten Verzerrungsenergie zur Überwindung der Bruchzähigkeit zur Verfügung steht.

Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen machen deutlich, dass der erfolgreiche Rissübergang (d.h. kein sofortiges Arretieren des im Partikel entstandenen Risses nach Überwindung des Interface Partikel-Matrix) einen kritischen Partikelmindestdurchmesser D_k erfordert, der vom zum Zeitpunkt des Partikelversagens vorliegenden Matrixzustand abhängig ist. Die relevanten Feldgrößen sind hierbei die größte Matrixhauptspannung σ_{I-M} sowie die Matrixspannungsmehrachsigkeit h_M . Sowohl eine

hohe Matrixspannung σ_{I-M} als auch eine hohe Matrixspannungsmehrachsigkeit h_M erleichtern den erfolgreichen Rissübergang vom Partikel in die Matrix. Der Einfluss von h_M kann dadurch erklärt werden, dass eine hohe Spannungsmehrachsigkeit die plastische Deformation (und somit auch die plastische Dissipation) erschwert. Auch der Einfluss der Fließspannung und der Verfestigung des Matrixmaterials auf den kritischen Partikeldurchmesser D_k (bei gegebenem Spannungszustand der Matrix führt eine erhöhte Fließspannung und/oder Verfestigung zu einer reduzierten kritischen Partikelgröße) kann so erklärt werden (vgl. Odette et al. [88]). Der Einfluss der Matrixmaterialeigenschaften auf D_k steht in guter Übereinstimmung mit experimentellen Beobachtungen (Temperaturabhängigkeit und Dehnratenabhängigkeit der Spaltbruchzähigkeit).

Weiterhin ist auch die jeweils vorliegende Partikelspannung σ_P von großer Bedeutung. Eine Erhöhung der Partikelspannung führt zu einer erkennbaren Reduzierung des kritischen Partikeldurchmessers. Ein möglicher Grund für diesen Effekt ist die Zunahme der frei werdenden elastischen Verzerrungsenergie bei Partikelbruch (Lindley et al. [75]). Wenn die Partikelgröße abnimmt, reduziert sich auch die im Partikel gespeicherte Verzerrungsenergie, so dass für sehr große Streckungen bzw. dünne Partikel gegebenenfalls ein Grenzwert für D_k erreicht wird.

Die genannten Aspekte werden bei dem Ansatz zur Berechnung des kritischen Partikelmindestdurchmessers D_k (siehe Gleichung (125)) bzw. der Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser im RVE (Kapitel 5.2.2) in geeigneter Weise berücksichtigt. Die im Rahmen dieser Arbeit hergeleitete Formulierung zur Berechnung des kritischen Partikelmindestdurchmessers D_k zeigt hinsichtlich der berücksichtigten Feldgrößen und Materialparameter eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Beobachtungen von Lindley et al. [75]. Deren Beobachtungen belegen sowohl den Einfluss von Fließspannung und Verfestigung auf den erfolgreichen Rissübergang (je höher Fließspannung und Verfestigung, desto wahrscheinlicher ist ein erfolgreicher Rissübergang), als auch die Notwendigkeit hinreichend hoher lokaler Werte von σ_I und h . Auch die zunächst zu den bisherigen Erkenntnissen widersprüchlich erscheinende Beobachtung von Kroon und Faleskog [64], dass eine Reduzierung der Spannungsmehrachsigkeit (bei gegebener Spannung σ_I in Hauptlastrichtung) den Rissübergang in die Matrix begünstigen kann, lässt sich basierend auf den im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen Erkenntnissen leicht erklären. Eine Reduzierung von h erleichtert die plastische Deformation der Matrix, was zunächst ungünstig hinsichtlich eines erfolgreichen Rissübergangs vom Partikel in die Matrix ist. Mit zunehmender Deformation der Matrix steigt jedoch auch die Partikelspannung σ_P (Betrag der Zunahme abhängig von der Partikelstreckung s) und dieses erhöhte σ_P kann den ungünstigeren Matrixzustand (bei hinreichend großer Partikelstreckung) kompensieren. Es bleibt anzumerken, dass der mittels Gleichung (125) berechnete kritischen Partikelmindestdurchmesser D_k den erforderlichen Durchmesser für die Entstehung eines potenziell kritischen Mikrodefekts (Mikroriss statt Pore) darstellt, der zum Spaltbruchversagen führen kann, wenn die dazu erforderlichen Bedingungen über einen größeren Bereich (RVE statt Submodell) vorliegen. Als Kriterium für die erforderlichen Bedingungen für die finale Defektinstabilität (Spaltbruchinitiierung und Ausbreitung) kann das Griffith-Kriterium [39] verwendet werden.

Kroon et al. [65] untersuchen auch die Vorgänge im Interface Partikel-Matrix. Dort treten hohe Schubspannungen auf und eine plastische Zone wandert am Partikel entlang. Die somit mögliche Defektentstehung (meist Porenbildung, vgl. Bernauer et al. [19]) durch eine Ablösung der Matrix vom Partikel wird im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt, soll aber in zukünftigen Studien untersucht werden. Gleiches gilt für die Weiterbelastung eines arretierten Risses.

Mit den Ergebnissen der Simulationsrechnungen stehen die erforderlichen Informationen für die Herleitung eines erweiterten, mikromechanisch basierten Spaltbruchmodells zur Verfügung. Basierend auf den Ergebnissen aus den Kapiteln 4.2.2 und 4.2.3 kann

die Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch im RVE bestimmt werden (siehe Kapitel 5.2.1), während die Ergebnisse aus den Kapiteln 4.2.2 und 4.2.4 die Berechnung der Wahrscheinlichkeit für erfolgreichen Rissübergang vom Partikel in die Matrix im RVE erlauben (siehe Kapitel 5.2.2).

.....
Finite-Elemente-
Simulationsrechnungen
.....

Die Auswertung der Ergebnisse der mikromechanischen Simulationsrechnungen (Kapitel 4.2) ermöglicht ein erweitertes Verständnis der bei der Spaltbruchauslösung stattfindenden Vorgänge. Dabei werden sowohl die erforderlichen Bedingungen für den Partikelbruch (Kapitel 4.2.3), als auch die Voraussetzungen für einen erfolgreichen Übergang des durch Partikelbruch entstandenen Mikrorisses in die umgebende duktile Matrix (Kapitel 4.2.4) erfasst. Zusammen mit der aus den RVE- Simulationsrechnungen bekannten Streuung der Feldgrößen in der Umgebung der Korngrenzen (Kapitel 4.2.2) bei gegebenem effektiven Beanspruchungszustand (Lokale Lastgeschichten, siehe Kapitel 4.1.2) und den Ergebnisse der Mikrostrukturuntersuchungen (Kapitel 3.2) kann für das RVE sowohl die Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch (Kapitel 5.2.1) als auch die Wahrscheinlichkeit für den anschließenden (erfolgreichen) Rissübergang vom Partikel in die Matrix (Kapitel 5.2.2) näherungsweise berechnet werden. Die Verwendung des Griffith-Kriteriums [39] ermöglicht zudem die Bestimmung der Wahrscheinlichkeit für eine mögliche Instabilität der so entstandenen Mikrodefekte (Kapitel 5.2.3). Auf der Basis dieser Erkenntnisse wird anschließend in Kapitel 5.3 ein erweitertes, mikromechanisch basiertes Spaltbruchmodell formuliert, welches anschließend auf die experimentelle Datenbasis angewendet wird (Kapitel 6).

5.1

Bedingungen für die Spaltbruchauslösung

Der Vorgang der Spaltbruchauslösung beinhaltet mehrere Einzelereignisse (siehe Kapitel 2.2.1 und 2.3.2). Die Mikrodefektentstehung (Partikelbruch und Übergang des so entstandenen Mikrorisses vom spröden Partikel in die umgebende duktile Matrix) stellt das erste (notwendige) Ereignis dar. Anschließend erfolgt, sofern die erforderlichen Bedingungen vorliegen, die weitere Ausbreitung des Mikrorisses in die Matrix, wobei mikromechanische Barrieren wie z.B. Korngrenzen überwunden werden müssen (im betrachteten Werkstoff liegt bei den betrachteten Temperaturen keine nennenswerte Barrierewirkung der Korngrenzen vor (Mathieu et al. [83])). Dieser nicht mehr zum Stillstand kommende Riss führt dann letztendlich zum Spaltbruchversagen.

Die Mikrodefektentstehung wird durch zahlreiche Einflussgrößen gesteuert. Der Partikelbruch als erste Phase der Mikrodefektentstehung wird maßgeblich durch die Matrixdehnung und die Matrixspannung gesteuert, während der erfolgreiche Rissübergang vom Partikel in die Matrix (Mikroriss bleibt scharf und wird nicht zu einer hinsichtlich der Spaltbruchinitiierung unkritischen Pore) durch die Matrixspannung und die Matrixspannungsmehrachsigkeit beeinflusst wird. Bei beiden Phasen der Mikrodefektentstehung spielen auch die Eigenschaften des Matrixmaterials (die wiederum abhängig von Temperatur und Dehnrates sind) sowie die vorliegende Partikelkonfiguration (Form, Orientierung usw.) eine wichtige Rolle.

Ein Aussage hinsichtlich der möglichen Instabilität der frisch entstandenen, potenziell kritischen Mikrodefekte kann durch einen Vergleich des lokalen Spannungsfelds (maximale Hauptspannung) mit der vorliegenden Defektgrößenverteilung (ableitbar aus der Partikelgrößenverteilung) auf Basis des Griffith-Kriteriums [39] (Zusammenhang zwischen Defektgröße und zugehöriger kritischer maximaler Hauptspannung) erfolgen.

Im Rahmen der vorliegenden Studie wurde eine Literaturrecherche hinsichtlich der bestehenden lokalen Spaltbruchmodelle durchgeführt. Deren mathematische Formulierungen und die zu Grunde liegenden physikalischen Überlegungen und Annahmen

wurden analysiert und im Hinblick auf mögliche Erweiterungen ausgewertet (vgl. Kapitel 2.3.2).

Im Wesentlichen lässt sich aus allen Modellen sowohl ein Term extrahieren, welcher die mögliche Instabilität von Mikrodefekten beschreibt, als auch ein Term, der die Mikrodefekentstehung berücksichtigt. Bezüglich der Instabilität wird üblicherweise das Griffith-Kriterium [39] verwendet, welches einen Zusammenhang zwischen Defektgröße und kritischer größter Hauptspannung liefert, während hinsichtlich der Mikrodefekentstehung hauptsächlich die plastische Vergleichsdehnung berücksichtigt wird. Ein erweitertes Modell von Hohe et al. [50] bezieht zusätzlich die Spannungsmehrachsigkeit mit ein. Die dabei jeweils getroffenen idealisierenden Annahmen hinsichtlich der mikromechanischen Vorgänge bildeten die Ansatzpunkte für die durchgeführten Simulationsrechnungen (siehe Kapitel 4.2), mit dem Ziel, diese idealisierten Vorgänge realistischer zu beschreiben und so ein verbessertes Spaltbruchmodell formulieren zu können. Eine Anwendung der bestehenden lokalen Spaltbruchmodelle auf Bruchmechanikexperimente an Standard- und Spezialproben zeigt die Auswirkungen der jeweiligen Modellformulierung (Hohe et al. [49]). Dabei wird deutlich, dass eine möglichst realistische Berücksichtigung des Prozesses der Mikrodefekentstehung von großer Bedeutung ist.

In den meisten Fällen liefern die gegenüber dem klassischen Beremin-Modell [18] um die plastische Vergleichsdehnung und ggf. die Spannungsmehrachsigkeit erweiterten Modelle erkennbar bessere Ergebnisse hinsichtlich der Übertragbarkeit der Modellparameter auf verschiedene Probengeometrien. Diese Übertragbarkeit der Modellparameter ist die Grundvoraussetzung für die Sinnhaftigkeit eines Modells als Materialversagensmodell, d.h. das Versagen ist nur von den Materialeigenschaften und der lokalen Belastung abhängig.

5.2

Wahrscheinlichkeiten im RVE

Auf der Basis der Ergebnisse der RVE- und Submodellanalysen (siehe Kapitel 4.2) zur Entstehung und Ausbreitung von Mikrodefekten kann die mathematische Grundstruktur eines mikromechanisch motivierten, jedoch auf der makroskopischen Ebene definierten probabilistischen Spaltbruchmodells festgelegt werden (siehe Kapitel 5.3). Dieses berücksichtigt die zwei Phasen der Mikrodefekentstehung (Partikelbruch, mögliche Abstumpfung bzw. Arrest des entstandenen Mikrorisses beim Übertritt in die ferritische Matrix) und die mögliche anschließende Instabilität des Mikrodefekts durch drei auf Basis der mikromechanischen Erkenntnisse herzuleitende Terme. Dabei wird angenommen, dass keine globale Interaktion der Mikrodefekte vorliegt (Wallin et al. [119]).

Durch die Analyse der an den Korngrenzen des RVE vorliegenden mechanischen Feldgrößen wird deutlich, dass sowohl hinsichtlich der Spannungen als auch hinsichtlich der Dehnungen eine erkennbare Streuung um die jeweiligen Effektivwerte der Größen für das betrachtete RVE auftritt. Weiterhin weisen die Korngrenzen eine zufällige Orientierung auf, die zusammen mit der Orientierung des Partikels auf der Korngrenze die Orientierung des Partikels zur Hauptlastrichtung (Richtung der effektiven maximalen Hauptspannung im RVE) bestimmt. Demnach ergeben sich bei Betrachtung einer realitätsnahen Mikrostruktur zahlreiche mögliche Partikelkonstellationen sowie oftmals von der RVE-Lastgeschichte abweichende lokale Korngrenzen-Lastgeschichten. Die stochastische Natur des Spaltbruchs wird somit durch die Verteilung der Feldgrößen auf Korngrenzebene und die Verteilung der Partikel charakterisiert (vgl. Zhao et al. [125]). Dies muss bei der Herleitung der Terme für die Wahrscheinlichkeit von Partikelbruch und Rissübergang in die Matrix jeweils in geeigneter Weise berücksichtigt werden.

**5.2.1
Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch**

Der erste Term beinhaltet die Beschreibung der Verteilung der Partikelbeanspruchung σ_p im RVE als Funktion der relevanten Feldgrößen (größte Hauptdehnung ϵ_{I-M} , größte Hauptspannung σ_{I-M}) sowie einiger Materialparameter, welche eine Berücksichtigung des Einflusses der Matrix-Materialeigenschaften sowie der Einflüsse der Form- und Orientierungsverteilung der Partikelpopulation ermöglichen. Durch die Gegenüberstellung der Verteilung der Partikelbeanspruchung und der Verteilung der Partikelfestigkeit erhält man schließlich die Wahrscheinlichkeit für den Partikelbruch. Zur Herleitung des ersten Terms wird zunächst die im RVE vorliegenden Verteilungen der Einflussgrößen betrachtet. Hinsichtlich der Feldgrößen wird gemäß den Ergebnissen aus Kapitel 4.2.2 angenommen, dass jeweils eine Normalverteilung vorliegt. Auch für den in der Gleichung zur Berechnung der Partikelspannung (Gleichung (123)) auftretenden Parameter c_M , welcher die lokalen Matrix-Materialeigenschaften (in der Umgebung der Korngrenzen) beschreibt, wird eine Normalverteilung angenommen. Weiterhin müssen zur Berechnung der in Gleichung (123) auftretenden partikelkonfigurationsabhängigen Parameter c_1 , c_2 und c_3 , die Verteilungen von Partikelform (Streckung s , siehe Gleichung (120)) und Partikelorientierung α (siehe Gleichung (121)) bekannt sein. Die im Rahmen der Mikrostrukturcharakterisierung bzw. Mikrostrukturgenerierung (vgl. Kapitel 3.2.2 und 4.2.1) ermittelte Partikelformverteilung kann dabei durch eine logarithmische Normalverteilung approximiert werden ($\mu_s=0.94$ und $\sigma_s=0.34$):

$$f(s) = \frac{1}{\sigma_s \sqrt{2\pi} s} \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{\ln(s) - \mu_s}{\sigma_s}\right]^2\right) \tag{126}$$

Da bezüglich der Partikelorientierungsverteilung keine experimentellen Ergebnisse vorliegen (räumliche Partikelanordnung nicht aus den REM-Aufnahmen herleitbar), werden ausgehend von einer Gleichverteilung verschiedene mögliche Orientierungsverteilungen betrachtet, mit einer Verteilungsfunktion der Form

$$F(\alpha) = \left(\frac{\alpha}{90^\circ}\right)^{C_{ori}} \tag{127}$$

In Abb. 103 sind die resultierenden Verteilungsfunktionen für verschiedene Partikelorientierungsparameter C_{ori} dargestellt.

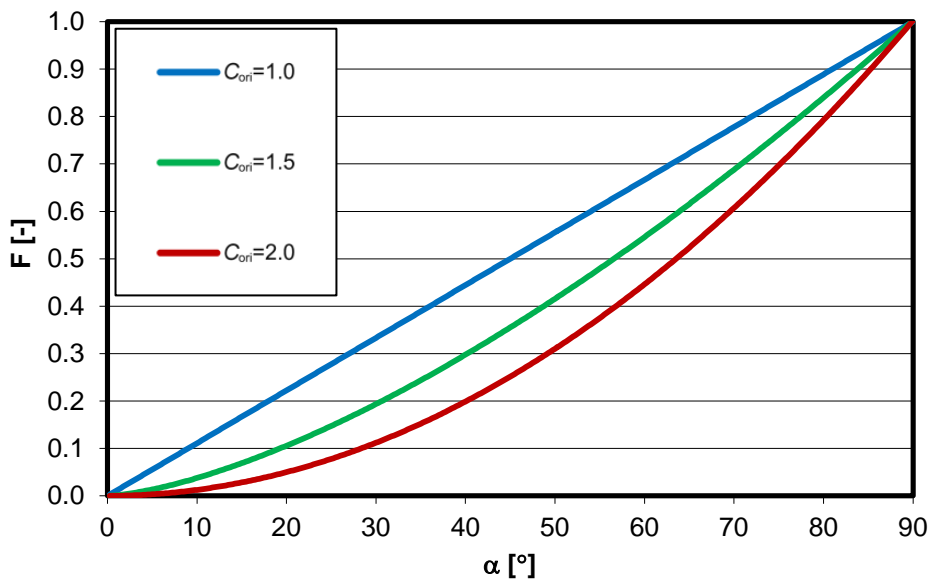


Abb. 103:
Angenommene mögliche
Verteilungsfunktionen für die
Partikelorientierung α

Die gewählten Verteilungsfunktionen für die Partikelorientierung α im RVE basieren auf der Überlegung, dass bei Gleichverteilung der Korngrenzenorientierung und zufälliger Orientierung der Partikel innerhalb der Korngrenzebene die Wahrscheinlichkeit für eine Orientierung des Partikels nah zur Hauptlastriichtung gegenüber einer Gleichverteilung reduziert ist. Mit Gleichung (123) und den bekannten Verteilungsfunktionen der Einflussgrößen kann die Partikelspannungsverteilung im RVE berechnet werden. In Abb. 104 sind die resultierenden Verteilungen für verschiedene effektive (RVE-) Matrixzustände (ε_{I-RVE} und σ_{I-RVE} , diese Größen entsprechen den Erwartungswerten von ε_{I-M} und σ_{I-M}) dargestellt, wobei eine Partikelorientierungsverteilung mit $C_{ori}=1$ verwendet wird. Die Ergebnisse zeigen, dass die Matrixdehnung ε_{I-M} sowohl die Form als auch die Lage der Verteilungsfunktion der Partikelspannung σ_p im RVE beeinflusst. Demgegenüber besitzt die Matrixspannung σ_{I-M} lediglich einen Einfluss bezüglich der Lage der Verteilungsfunktion. In allen Fällen kann die jeweils resultierend Partikelspannungsverteilung mit guter Genauigkeit durch eine Weibull-Verteilung approximiert werden. Dies ist exemplarisch in Abb. 105 anhand von drei Verteilungsfunktionen dargestellt.

Mikromechanisch basiertes
Spaltbruchmodell

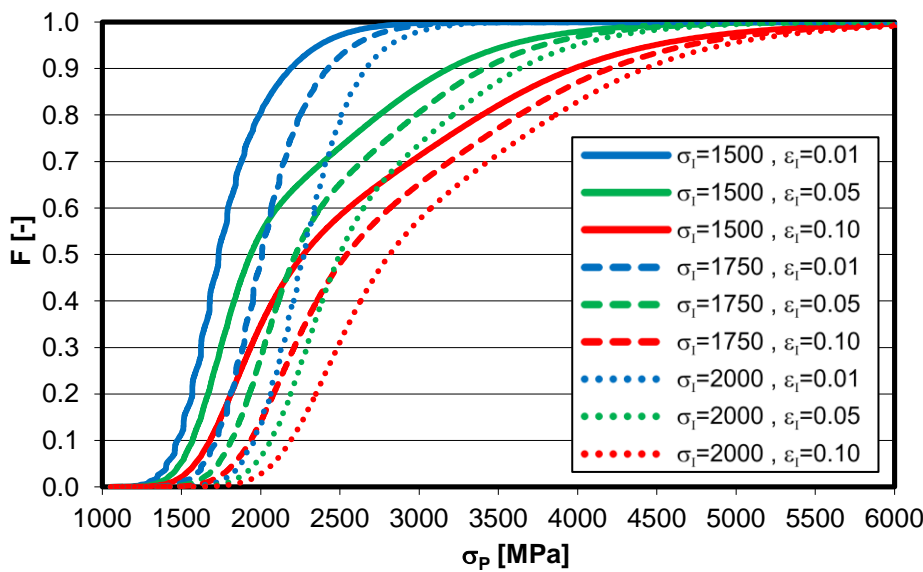


Abb. 104:
Verteilung der Partikelspannung σ_p im RVE, verschiedene Matrixzustände (ε_{I-RVE} u. σ_{I-RVE})

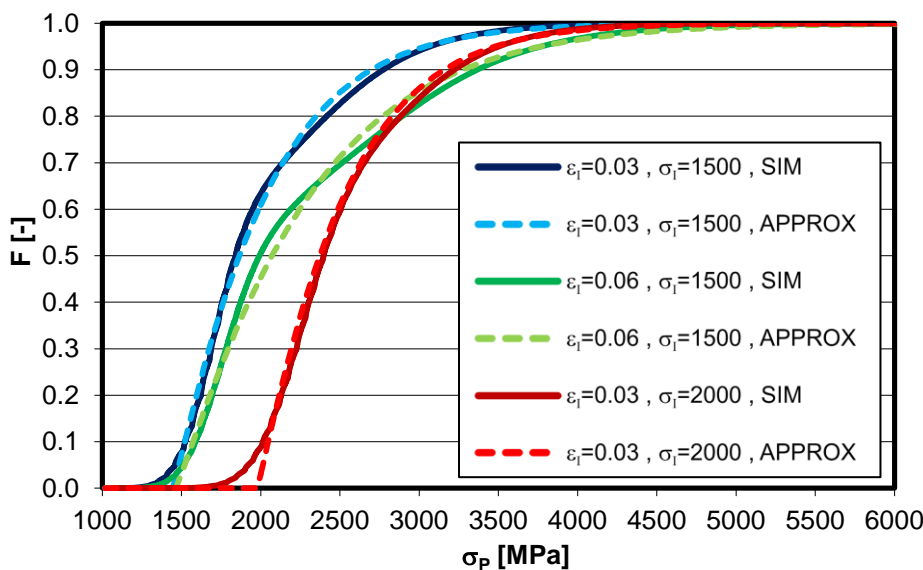


Abb. 105:
Verteilung der Partikelspannung im RVE, verschiedene Matrixzustände, Approximation durch Weibull-Verteilungen

Ändert man die Partikelorientierungsverteilung, so ändert sich im Wesentlichen die Steigung der Verteilungsfunktion. In Abb. 106 sind die resultierenden Partikelspannungsverteilungen für verschiedene C_{ori} dargestellt. Da die Partikelspannungen bei zunehmender Abweichung der Partikelorientierung von der Hauptlastrichtung ($C_{ori} > 1$) sinken, erhöht sich erwartungsgemäß die Steigung der zugehörigen Verteilungsfunktion der Partikelspannungen im RVE.

 Mikromechanisch basiertes
 Spaltbruchmodell

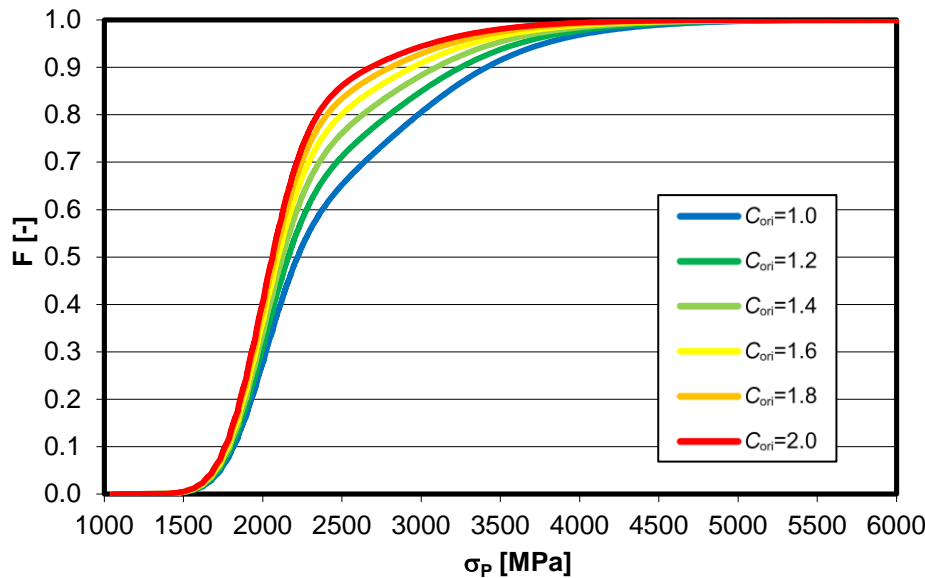


Abb. 106:
 Verteilung der Partikelspannung im RVE, verschiedene Partikelorientierungsverteilungen ($C_{ori}=1\dots2$)

Eine weiterer möglicher Material- bzw. Mikrostruktureinfluss auf die Partikelspannungsverteilung resultiert aus einer Änderung der Partikelformverteilung. Um diesen Einfluss zu untersuchen, wird der Erwartungswert der Partikelstreckung variiert (das Verhältnis Standardabweichung zu Erwartungswert wird dabei als konstant angenommen, mit einem Wert entsprechend den experimentellen Ergebnissen). In Abb. 107 und Abb. 108 sind die resultierenden Partikelspannungsverteilungen für verschiedene Erwartungswerte der Partikelstreckung s dargestellt.

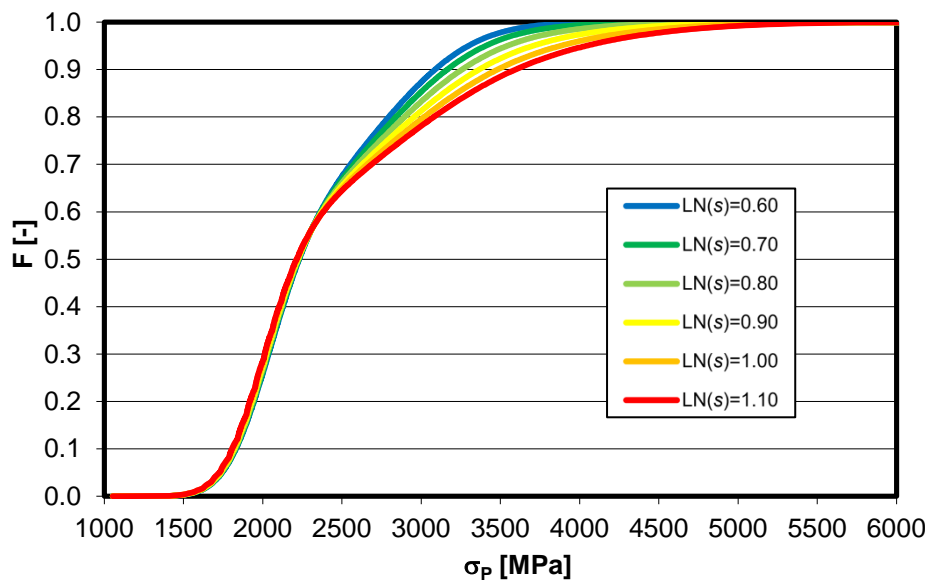


Abb. 107:
 Verteilung der Partikelspannung im RVE, verschiedene Erwartungswerte der Partikelstreckung s , $C_{ori}=1.0$

Die Ergebnisse zeigen, dass eine Änderung des Erwartungswertes der Partikelstreckung einen Einfluss auf die Partikelspannungsverteilung besitzt, welcher quantitativ stark von

der angenommenen Partikelorientierungsverteilung abhängt (je größer Wahrscheinlichkeit für Partikelori. in Hauptlastrichtung, desto stärker der Einfluss der Partikelstreckung).

 Mikromechanisch basiertes
 Spaltbruchmodell

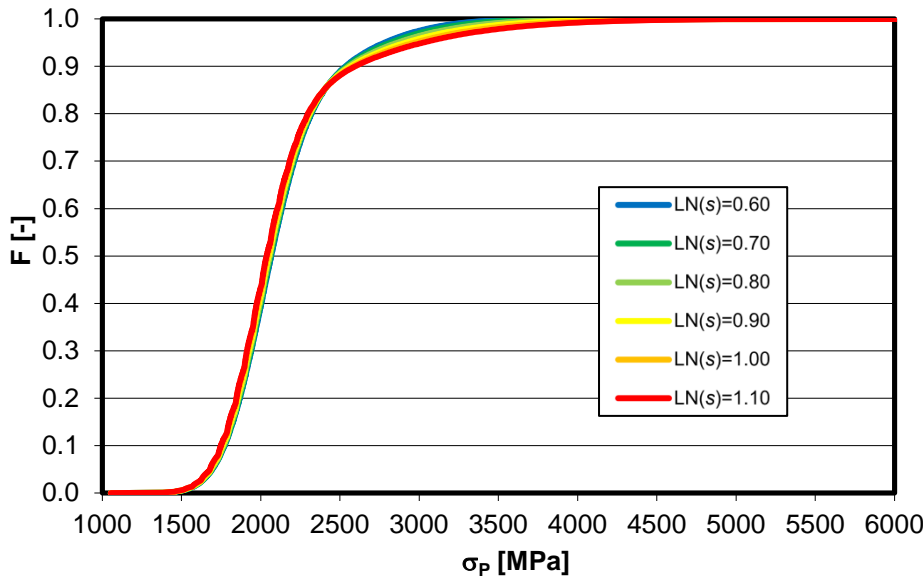


Abb. 108:
 Verteilung der Partikelspannung im RVE, verschiedene Erwartungswerte der Partikelstreckung s , $C_{ori}=2.0$

Neben dem Einfluss der Partikelstreckung wird auch der Einfluss der Matrix-Materialeigenschaften, die in Gleichung (123) durch den Parameter c_M berücksichtigt werden, auf die Partikelspannungsverteilung im RVE untersucht. Die Ergebnisse sind in Abb. 109 dargestellt. Es wird deutlich, dass eine Änderung der Matrix-Materialeigenschaften (Streckgrenze, Verfestigung) im Wesentlichen die Steigung der Verteilungsfunktion der Partikelspannung beeinflusst.

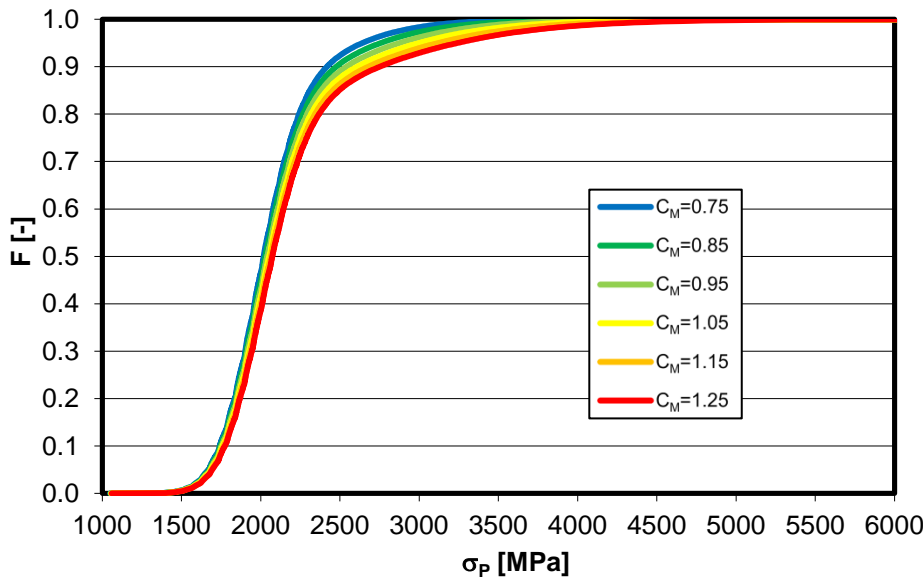


Abb. 109:
 Verteilung der Partikelspannung im RVE, verschiedene Matrix-Materialeigenschaften (verschiedene Erwartungswert $EW(c_M)$, Standardabweichung jeweils $0.1 \cdot EW$), $C_{ori}=2.0$

Um die gewonnenen Erkenntnisse für das mikromechanisch basierte erweiterte lokale Spaltbruchmodell nutzbar zu machen, werden die berechneten Partikelspannungsverteilungen jeweils durch eine dreiparametrische Weibullverteilung approximiert (vgl. Abb. 105). Die Verteilungsfunktion der Weibullverteilung ist dabei gegeben durch

$$F_{\sigma_P} = 1 - \exp(-a_s(\sigma_P - \sigma_{P0}))^{b_s} \quad \text{für } \sigma_P \geq \sigma_{P0} \quad (128)$$

wobei die Parameter a_s , b_s und σ_{p0} sowohl vom effektiven Matrixzustand (ε_{I-RVE} , σ_{I-RVE}) als auch von den Material- bzw. Mikrostruktureigenschaften (Matrixmaterialeigenschaften, Partikeleigenschaften) abhängen können. Um die dabei vorliegenden Zusammenhänge beschreiben zu können, wird eine Anpassung der Verteilungsparameter für verschiedene berechnete Partikelspannungsverteilungen durchgeführt. Dabei ist zu beachten, dass a_s und b_s sich gegenseitig stark beeinflussen. Im Hinblick auf eine funktionale Beschreibung der Verteilungsparameter durch die Feldgrößen und Materialparameter ist dies sehr ungünstig. Daher wird, basierend auf den Ergebnissen der ersten Anpassungen, $b_s = \text{konst} = 1.1$ gesetzt.

 Mikromechanisch basiertes
 Spaltbruchmodell

In Abb. 110 und Abb. 111 sind die Anpassungsergebnisse für das Referenzmaterial ($T = -85^\circ\text{C}$) mit einer Partikelpopulation entsprechend den experimentellen Ergebnissen der Mikrostrukturcharakterisierung (siehe Kapitel 3.2.2 und 4.2.1) dargestellt.

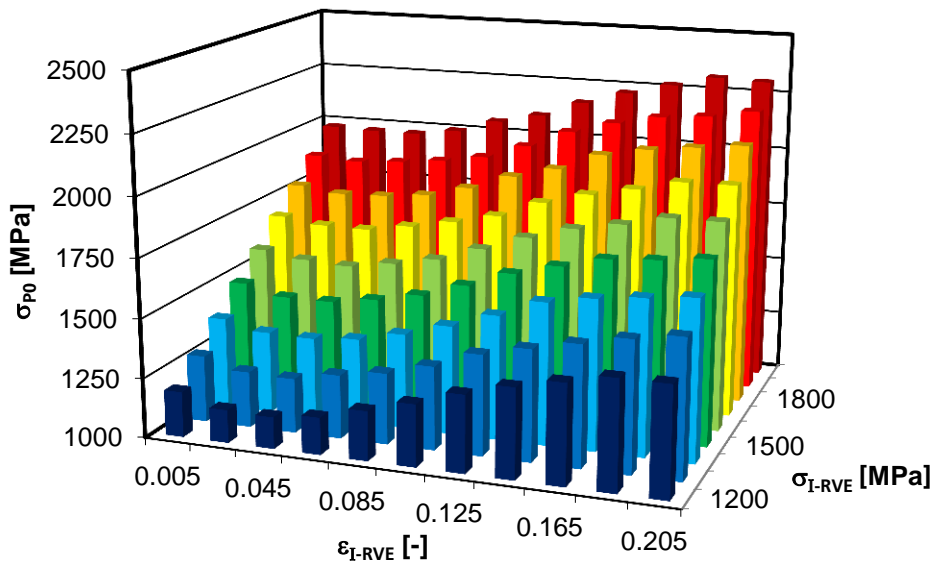


Abb. 110:
 Weibull-Parameter σ_{p0} in Abhängigkeit von den Matrix-Feldgrößen; Referenzmaterial und experimentell ermittelte Partikelpopulation

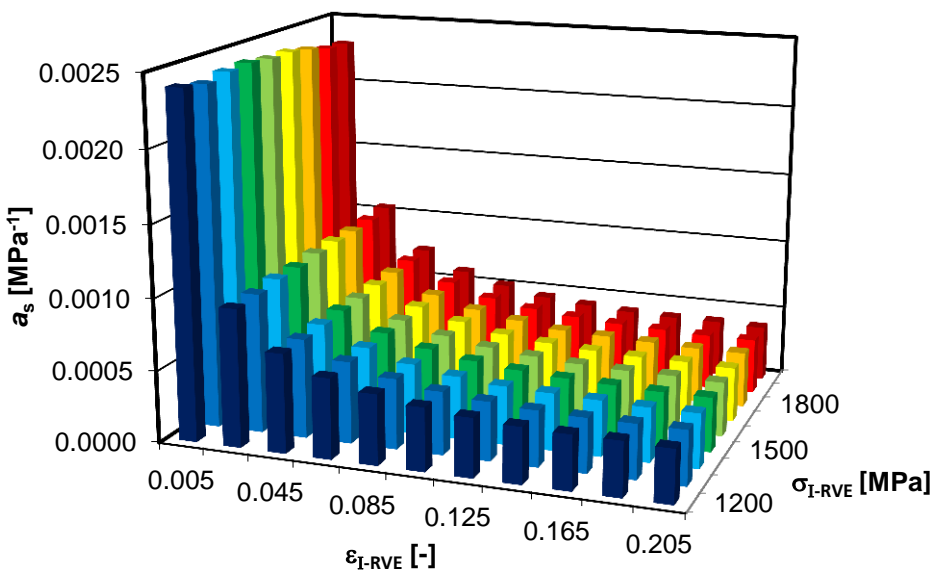


Abb. 111:
 Weibull-Parameter a_s in Abhängigkeit von den Matrix-Feldgrößen, Referenzmaterial und experimentell ermittelte Partikelpopulation

Für den Parameter σ_{p0} kann hinsichtlich der Matrixdehnung ε_{I-RVE} eine nichtlineare Abhängigkeit beobachtet werden. Bezüglich der Matrixspannung σ_{I-RVE} liegt eine näherungsweise lineare Abhängigkeit vor (siehe Abb. 110). Demgegenüber kann der Para-

meter a_s durch eine nichtlineare Funktion beschrieben, welche nur von der Matrixdehnung ε_{I-RVE} abhängig ist (siehe Abb. 111). Die Parameteranpassung wird zusätzlich für verschiedene Material- bzw. Mikrostruktureigenschaften (Matrixmaterialeigenschaften, Partikeleigenschaften) durchgeführt, um mögliche Auswirkungen zu identifizieren. Die Untersuchungen umfassen dabei sowohl Variationen der Partikelpopulation (Form, Orientierung), als auch Variationen des Matrix-Materialverhaltens. In allen Fällen kann keine Änderung der qualitativen Zusammenhänge beobachtet werden, es ergeben sich lediglich quantitative Änderungen. Exemplarisch sind in Abb. 112 und Abb. 113 die Anpassungsergebnisse für ein geändertes Matrix-Materialverhalten dargestellt.

Mikromechanisch basiertes
Spaltbruchmodell

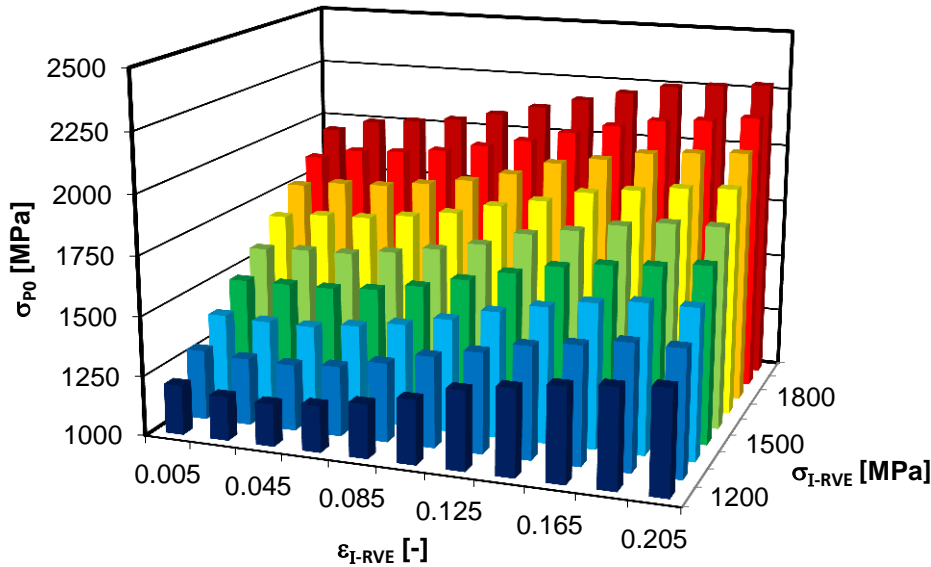


Abb. 112:
Weibull-Parameter σ_{P0} in Abhängigkeit von den Matrix-Feldgrößen, geändertes Matrix-Materialverhalten ($c_M=0.75$)

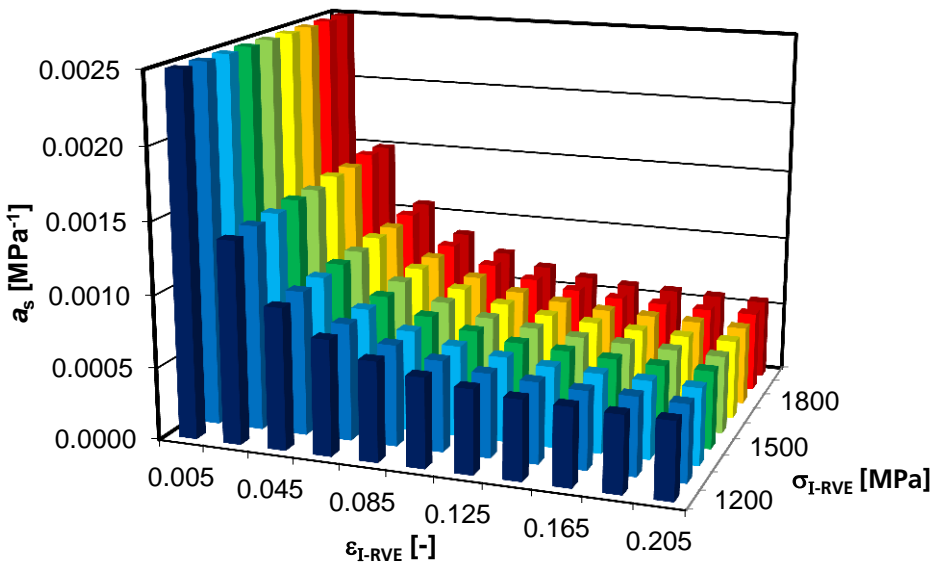


Abb. 113:
Weibull-Parameter a_s in Abhängigkeit von den Matrix-Feldgrößen, geändertes Matrix-Materialverhalten

Basierend auf diesen Erkenntnissen können funktionale Zusammenhänge zur Bestimmung der Weibull-Parameter in Abhängigkeit von den Matrix-Feldgrößen sowie den Material- bzw. Mikrostruktureigenschaften hergeleitet werden. Die Berechnung des Weibull-Parameters σ_{P0} kann durch die Funktion

$$\sigma_{P0} = c_1 \cdot (\varepsilon_{I-RVE})^{c_2} + c_3 \cdot \sigma_{I-RVE} \quad (129)$$

erfolgen, mit den Matrix-Feldgrößen ϵ_{I-RVE} und σ_{I-RVE} sowie den Materialparametern c_1 bis c_3 . Für den Weibull-Parameter a_5 gilt

$$a_5 = c_4 \cdot (\epsilon_{I-RVE})^{c_5}$$

mit den Materialparametern c_4 und c_5 . Dabei erweisen sich die Parameter c_2 , c_3 und c_5 als in erster Näherung unabhängig vom Materialverhalten. Im Rahmen dieser Studie werden sie daher als konstant angenommen, mit $c_2=1.25$, $c_3=0.98$ und $c_5=-0.50$. Damit verbleiben lediglich zwei anzupassende Materialparameter. Die Parameter erfassen implizit die Änderung der Materialeigenschaften (Matrixmaterial, Partikelpopulation).

In Abb. 114 und Abb. 115 sind die resultierenden Funktionsverläufe für das Referenzmaterial ($T=-85^\circ\text{C}$) mit einer Partikelpopulation entsprechend der experimentellen Ergebnisse der Mikrostrukturcharakterisierung dargestellt.

Mikromechanisch basiertes
Spaltbruchmodell

(130)

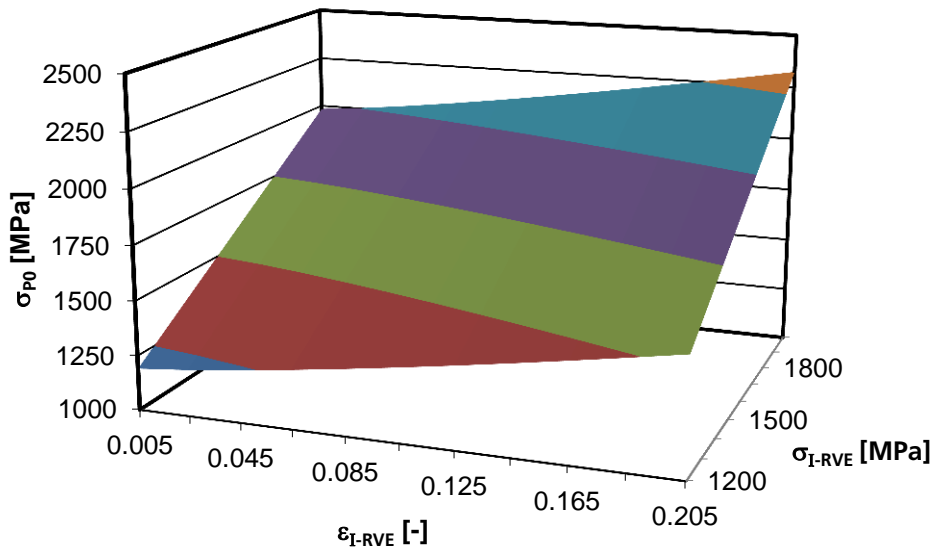


Abb. 114:
Weibull-Parameter σ_{p0} in Abhängigkeit von den Matrix-Feldgrößen, Approximation

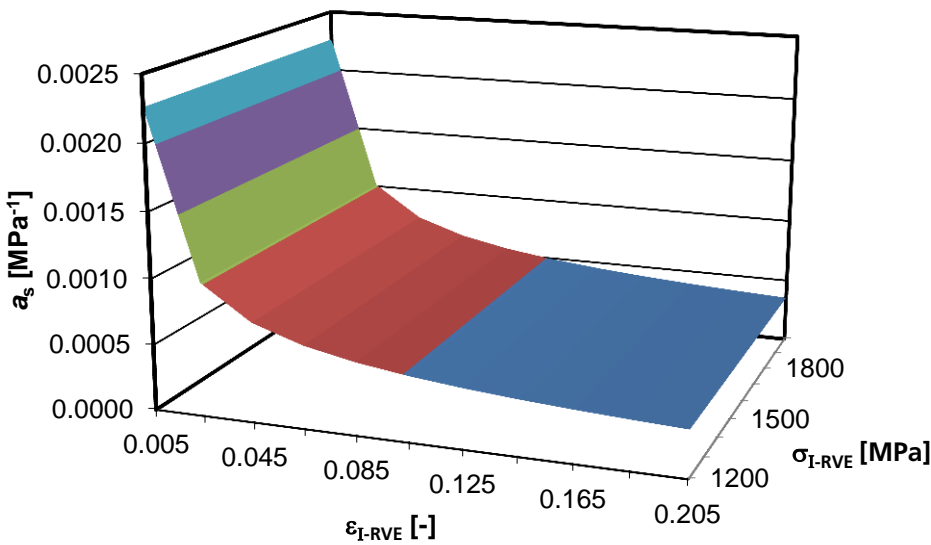


Abb. 115:
Weibull-Parameter a_5 in Abhängigkeit von den Matrix-Feldgrößen, Approximation

Mit der nach Bestimmung der Weibull-Parameter a_5 und σ_{P0} bekannten Verteilungsfunktion für die Partikelspannung σ_P im RVE kann die Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch berechnet werden. Dazu muss zunächst die Verteilung der Partikelfestigkeit σ^{krit} betrachtet werden. In der Literatur findet man verschiedene Werte für die Partikelfestigkeit (Karbide in ferritisch bainitischen Stählen). Wallin und Laukkanen [119] geben einen einzelnen Wert von 6000MPa an, während Lindley et al. [75] auf experimentellem Weg für die Partikelfestigkeit einen Bereich von 1400MPa bis 7000MPa identifizieren. Eine solche Streuung der Partikelfestigkeit wird auch im Rahmen dieser Studie angenommen. Teilt man die vorliegenden Partikelfestigkeitsklassen σ_i^{krit} ($i=1, \dots, n_{wk}$) mit der jeweiligen Auftretswahrscheinlichkeit w_i^{krit} ein (wobei diese Gewichtungsfaktoren die Art der Verteilung bestimmen), so erhält man die akkumulierte Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch im RVE bis zum gerade betrachteten Zeitpunkt der Lastgeschichte gemäß

$$P_{fr} = \sum_{i=1}^{n_{wk}} w_i^{krit} \exp \left[-a_5 (\sigma_i^{krit} - \sigma_{P0})^{b_5} \right] \quad \text{für } \sigma_i^{krit} \geq \sigma_{P0} \quad (131)$$

Weiterhin kann noch die Verteilung der Bruchspannung der gerade gebrochenen Partikel bestimmt werden

$$F_{br}(\sigma_k^{krit}) = \frac{\sum_{j=1}^k w_j^{krit} f_{\sigma_P}(\sigma_P = \sigma_j^{krit})}{\sum_{i=1}^n w_i^{krit} f_{\sigma_P}(\sigma_P = \sigma_i^{krit})} \quad (132)$$

mit $k \leq n_{wk}$, wobei k die Nummer der betrachteten Festigkeitsklasse bzw. Bruchspannung bezeichnet und f_{σ_P} die zu der in Gleichung (127) definierten Verteilungsfunktion der Partikelspannung gehörende Wahrscheinlichkeitsfunktion darstellt.

Die Verteilungsfunktion der Spannung der gerade gebrochenen Partikel kann als Eingangsgröße bei der Berechnung der Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser bzw. der Wahrscheinlichkeit für den Rissübergang vom Partikel in die Matrix verwendet werden. Da keine genauen Informationen bezüglich der Festigkeitsverteilung der Partikel vorliegen, wird im Rahmen dieser Studie eine Gleichverteilung der Partikelfestigkeit angenommen. In diesem Fall entspricht die Verteilung der Bruchspannung der gebrochenen Partikel der Verteilung der Partikelspannung im RVE und kann demnach durch die entsprechende Weibull-Verteilung beschrieben werden (mit $\sigma_{P0g} = \max[\sigma_{P0}, \sigma_{min}^{krit}]$).

5.2.2 Wahrscheinlichkeit für Rissübergang in die Matrix

Der zweite für die Definition des erweiterten lokalen Spaltbruchmodells erforderliche Term beinhaltet die Beschreibung der Verteilung des kritischen Partikeldurchmessers D_k im RVE als Funktion der relevanten Feldgrößen (größte Hauptspannung σ_{I-M} , Spannungsmehrachsigkeit h_M) sowie einiger Materialparameter, welche eine Berücksichtigung des Einflusses der Matrix-Materialeigenschaften sowie des Einflusses der Verteilung der Partikelspannung (Bruchspannung der im aktuellen Lastinkrement gebrochenen Partikel bekannt durch dem ersten Term, siehe Gl. (132)) auf den Rissübergang in die Matrix (vgl. Kapitel 4.2.4) ermöglichen. Durch Gegenüberstellung der Verteilung des kritischen Partikeldurchmessers D_k und der Verteilung der Partikelgröße (Kapitel 3.2.2) erhält man schließlich die Wahrscheinlichkeit für den Rissübergang in die Matrix. Zur Herleitung des zweiten Terms werden zunächst die im RVE vorliegenden Verteilungen der Einflussgrößen betrachtet. Hinsichtlich der Feldgrößen liegt gemäß den Ergebnissen aus Kapitel 4.2.2 eine Normalverteilung vor. Weiterhin müssen zur Berechnung der in Gleichung (125) auftretenden materialabhängigen Parameter die Verteilungen der lokalen Matrixeigenschaften bekannt sein. Für den dimensionslosen Kenn-

wert zur Beschreibung der lokalen Fließkurveneigenschaften (Abb. 100) sowie die Verfestigung wird dabei eine Normalverteilung angenommen. Daneben müssen zur Berechnung des partikelkonfigurationsabhängigen Parameters die Verteilungen der Spannung der gebrochenen Partikel (siehe oben) vorliegen. Diese ist als eines der Ergebnisse des ersten Terms bekannt und kann durch eine entsprechende Weibull-Verteilung beschrieben werden. In Abb. 116 sind exemplarisch Partikelspannungsverteilungen für drei unterschiedliche Lasten (Matrixdehnungen ε_{I-RVE} , Spannung σ_{I-RVE} konstant) dargestellt.

 Mikromechanisch basiertes
 Spaltbruchmodell

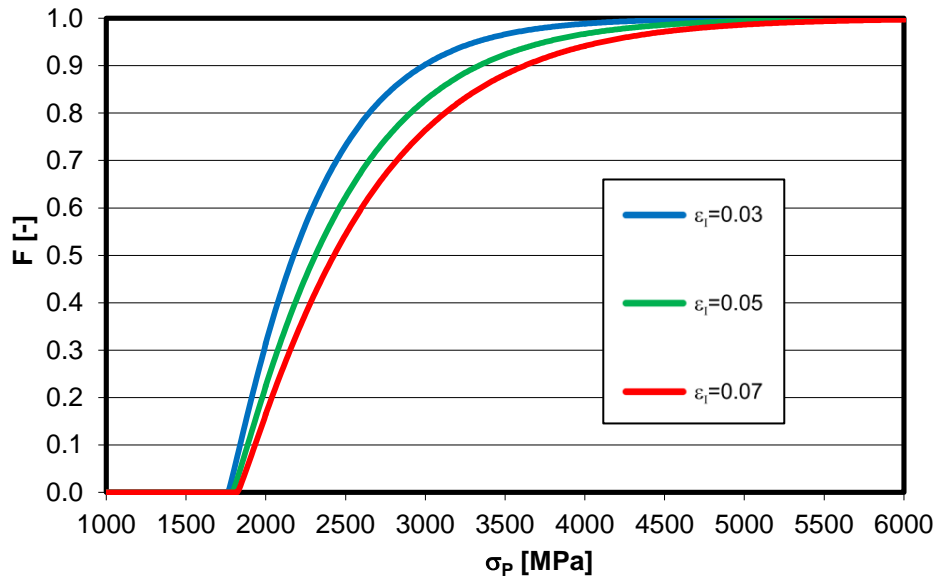


Abb. 116:
 Mögliche Verteilungsfunktion für die Partikelspannung (Matrixdehnungen ε_{I-RVE} , Spannung σ_{I-RVE} konstant)

Mit Gleichung (125) und den bekannten Verteilungsfunktionen der Einflussgrößen kann die Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser D_k im RVE berechnet werden. In Abb. 117 sind die resultierenden Verteilungen für verschiedene effektive (RVE-)Matrixzustände (h_{RVE} und σ_{I-RVE} , diese Größen entsprechen den Erwartungswerten von h_M und σ_{I-M}) dargestellt (bei gegebener Spannungsverteilung der Partikel und gegebenen Matrix-Materialeigenschaften).

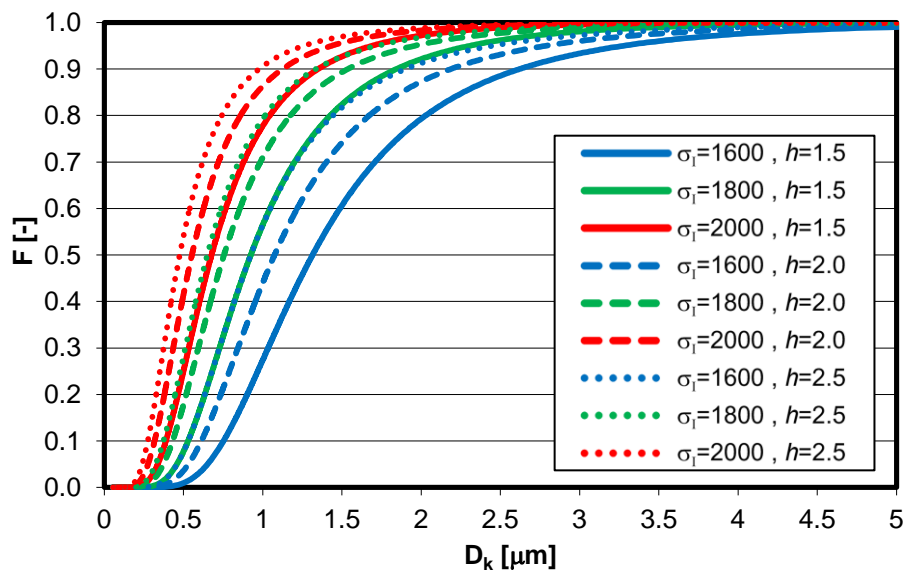


Abb. 117:
 Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser D_k im RVE, verschiedene Matrixzustände (h_{RVE} u. σ_{I-RVE})

Die Ergebnisse zeigen, dass die Matrixspannung σ_{I-RVE} sowohl die Form als auch die Lage der Verteilungsfunktion der kritischen Partikeldurchmesser D_k im RVE beeinflusst. Auch für die Matrixspannungsmehrachsigkeit h_M kann ein Einfluss auf Form und Lage der Verteilungsfunktion beobachtet werden. In allen Fällen kann die jeweils resultierende Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser D_k mit guter Genauigkeit durch eine Weibull-Verteilung approximiert werden. Dies ist exemplarisch in Abb. 118 anhand von drei Verteilungsfunktionen dargestellt.

 Mikromechanisch basiertes
 Spaltbruchmodell

Ändert man die Matrix-Materialeigenschaften, so hat dies einen Einfluss auf Form (Steigung) und Lage der Verteilungsfunktion. In Abb. 119 sind die resultierenden Verteilungen des kritischen Partikeldurchmessers für verschiedene $C_M=C_3$ (Gleichung (125)) dargestellt. Ein weiterer möglicher Mikrostruktureinfluss auf die Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser resultiert aus einer Änderung der Verteilung der Spannung der gebrochenen Partikel. Um diesen Einfluss zu untersuchen, wurden die Parameter a_s (Formparameter) und σ_{P0g} (Lageparameter) der zugehörigen Weibull-Verteilung variiert.

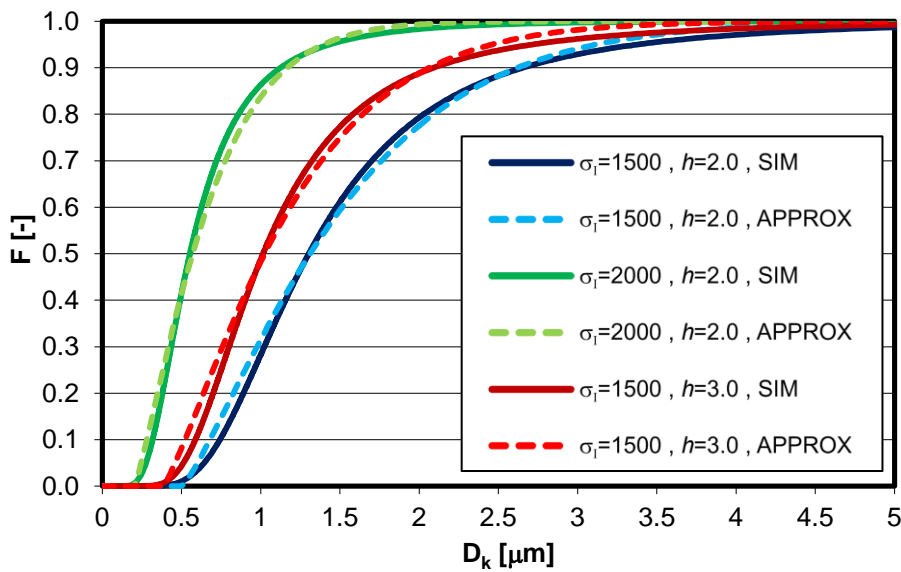


Abb. 118:
 Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser D_k im RVE, verschiedene Matrixzustände, Approximation durch Weibull-Verteilung

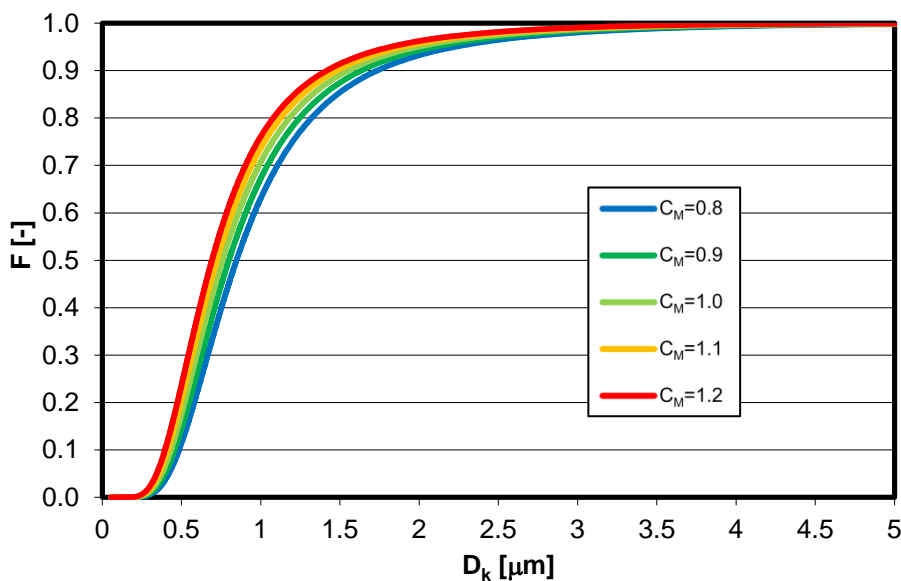


Abb. 119:
 Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser D_k im RVE, verschiedene Matrixmaterial-eigenschaften (verschiedene Erwartungswert $EW(C_M)$)

In Abb. 120 sind die resultierenden Verteilungen des kritischen Partikeldurchmessers für verschiedene Lageparameter $\sigma_{p0}=\sigma_{p0g}$ dargestellt. Die Abb. 121 zeigt die resultierenden Verteilungen für verschiedene Formparameter a_s . Es wird deutlich, dass eine Änderung des Lageparameters σ_{p0} im Wesentlichen zu einer Änderung der Steigung der Verteilungsfunktion des kritischen Partikeldurchmessers führt (siehe Abb. 120). Bei einer Änderung des Formparameters a_s werden sowohl die Lage als auch die Steigung der Verteilungsfunktion des kritischen Partikeldurchmessers beeinflusst (siehe Abb. 121). Dabei nimmt der Einfluss des Formparameters a_s der Partikelspannungsverteilung auf die Lage der Verteilungsfunktion des kritischen Partikeldurchmessers D_k mit zunehmendem a_s erkennbar ab. Die Auswirkungen des Formparameters a_s bezüglich der Steigung sind sehr schwach ausgeprägt.

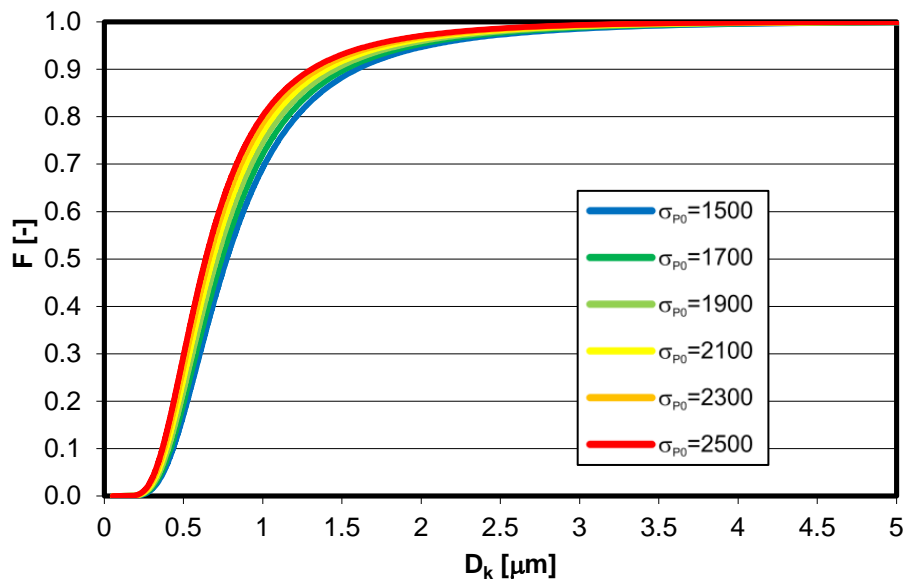


Abb. 120:
Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser D_k im RVE, verschiedene Lageparameter σ_{p0} der Partikelspannungsverteilung

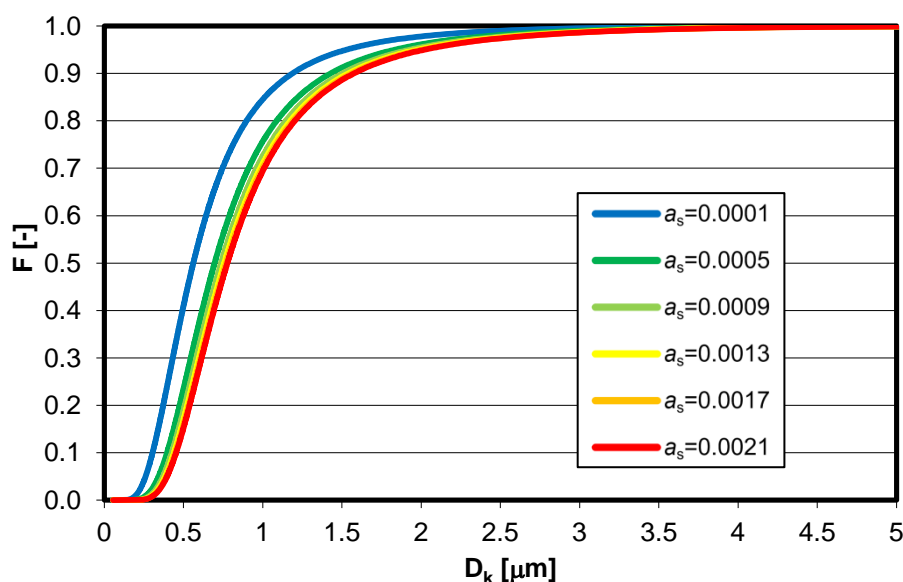


Abb. 121:
Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser D_k im RVE, verschiedene Formparameter a_s der Partikelspannungsverteilung

Um die gewonnenen Erkenntnisse für das mikromechanisch basierte erweiterte lokale Spaltbruchmodell nutzbar zu machen, werden die berechneten Verteilungsfunktionen des kritischen Partikeldurchmessers D_k jeweils durch eine dreiparametrische Weibullverteilung

lung approximiert (vgl. Abb. 118). Die Verteilungsfunktion der dreiparametrischen Weibullverteilung ist dabei gegeben durch

$$F_{D_k} = 1 - \exp(-a_{tr}(D_k - D_0))^{b_{tr}} \quad \text{für } D_k \geq D_0 \quad (133)$$

wobei die Parameter a_{tr} , b_{tr} und D_0 sowohl vom effektiven Matrixzustand (σ_{I-RVE} , h_{RVE}) als auch von den Material- bzw. Mikrostruktureigenschaften (Matrixmaterialeigenschaften, Partikelspannungsverteilung, Oberflächenenergie) abhängen können. Um die dabei vorliegenden Zusammenhänge beschreiben zu können, wird eine Anpassung der Verteilungsparameter für verschiedene berechnete Verteilungsfunktionen des kritischen Partikeldurchmessers D_k durchgeführt. Dabei ist zu beachten, dass a_{tr} und b_{tr} sich gegenseitig stark beeinflussen. Im Hinblick auf eine funktionale Beschreibung der Verteilungsparameter durch die Feldgrößen und Materialparameter ist dies sehr ungünstig. Daher wird, basierend auf den Ergebnissen der ersten Anpassungen, $b_{tr} = \text{konst} = 1.25$ gesetzt. In Abb. 122 und Abb. 123 sind die Anpassungsergebnisse für das Referenzmaterial ($T = -85^\circ\text{C}$) und eine Partikelspannungsverteilung mit den Weibull-Parametern $a_S = 0.0007$ und $\sigma_{P0} = 2200\text{MPa}$ dargestellt.

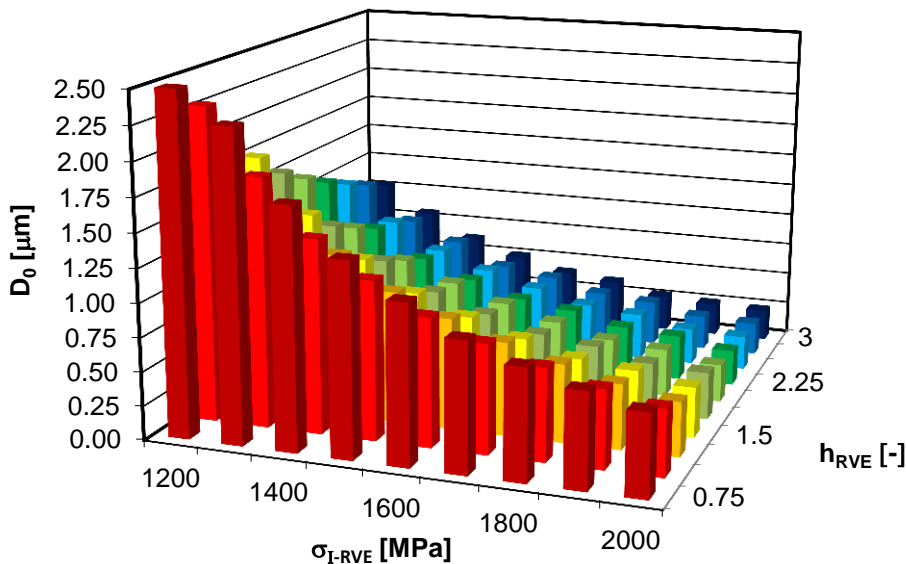


Abb. 122:
Weibull-Parameter D_0 in Abhängigkeit von den Matrixfeldgrößen, Referenzmaterial und gegebene Partikelspannungsverteilung

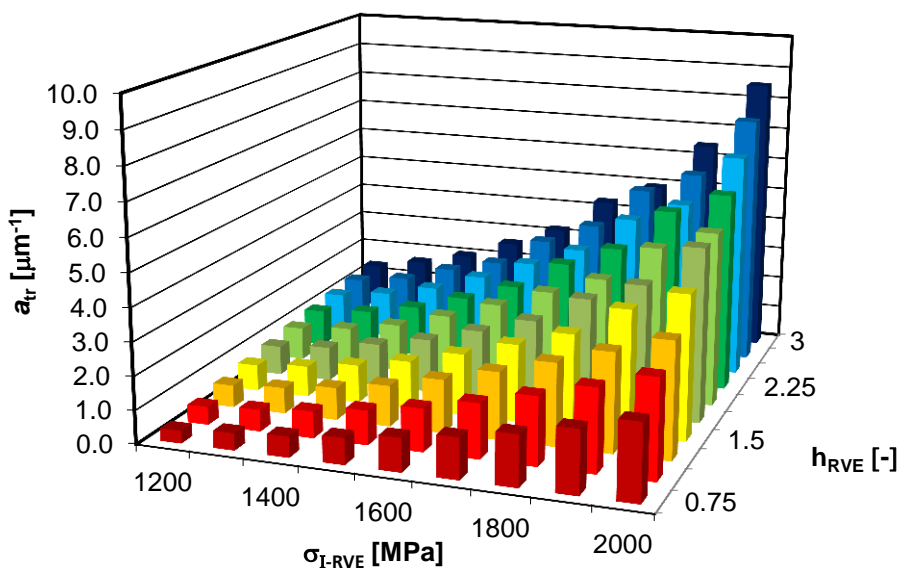


Abb. 123:
Weibull-Parameter a_{tr} in Abhängigkeit von den Matrixfeldgrößen, Referenzmaterial und gegebene Partikelspannungsverteilung

Für den Parameter D_0 kann sowohl hinsichtlich der Matrixspannung als auch hinsichtlich der Spannungsmehrachsigkeit eine nichtlineare Abhängigkeit beobachtet werden (siehe Abb. 122). Demgegenüber liegt für den Parameter a_{tr} hinsichtlich der Matrixspannung eine nichtlineare Abhängigkeit vor, während bezüglich der Spannungsmehrachsigkeit eine näherungsweise lineare Abhängigkeit angenommen werden kann (siehe Abb. 123). Die Parameteranpassung wird zusätzlich für verschiedene Material- bzw. Mikrostruktureigenschaften durchgeführt, um mögliche Auswirkungen zu identifizieren. Die Untersuchungen umfassen dabei sowohl Variationen der Partikelspannungsverteilung (Parameter σ_{p0} und a_s), als auch Variationen des Matrixmaterialverhaltens. In allen Fällen kann keine Änderung der qualitativen Zusammenhänge beobachtet werden, es ergeben sich lediglich quantitative Änderungen. Exemplarisch sind in Abb. 124 und Abb. 125 sind die Anpassungsergebnisse für eine geänderte Partikelspannungsverteilung ($a_s=0.0003$) dargestellt.

 Mikromechanisch basiertes
 Spaltbruchmodell

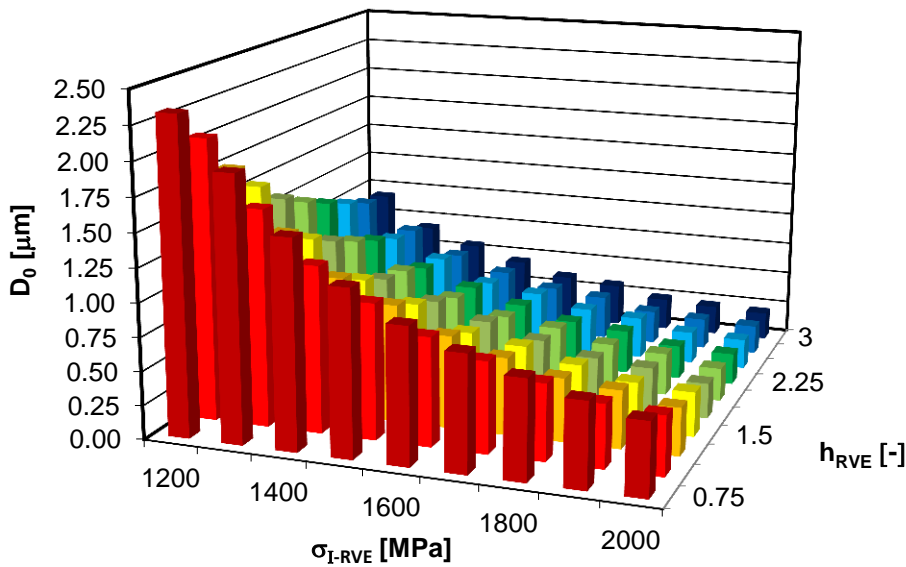


Abb. 124:
 Weibull-Parameter D_0 in Abhängigkeit von den Matrix-Feldgrößen, geänderte Partikelspannungsverteilung

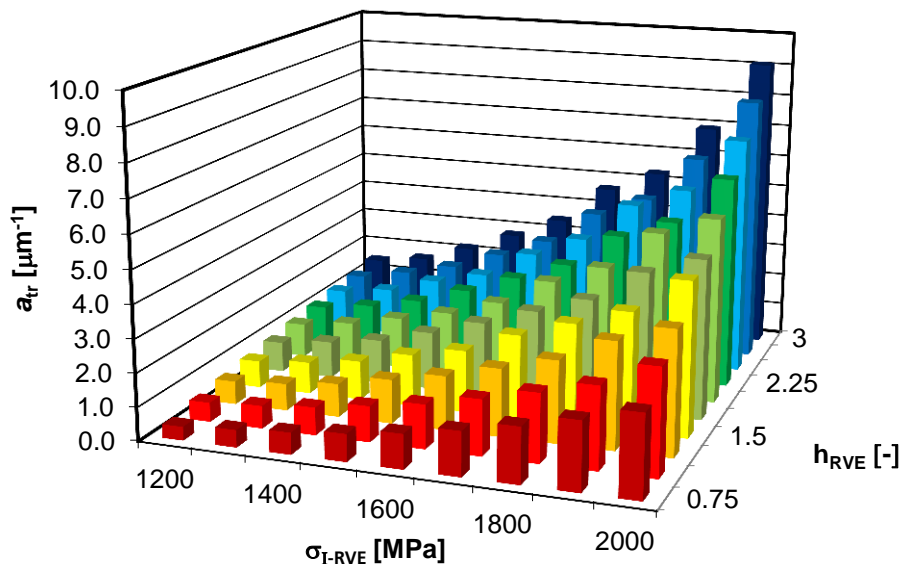


Abb. 125:
 Weibull-Parameter a_{tr} in Abhängigkeit von den Matrix-Feldgrößen, geänderte Partikelspannungsverteilung

Basierend auf diesen Erkenntnissen können funktionale Zusammenhänge zur Bestimmung der Weibull-Parameter in Abhängigkeit von den Feldgrößen sowie von den Ma-

terial- bzw. Mikrostruktureigenschaften hergeleitet werden. Die Berechnung des Parameters D_0 kann durch die Funktion

$$D_0 = c_1 a_s^{c_2} \cdot (h_{RVE})^{c_3} \cdot (\sigma_{I-RVE})^{c_4} \quad (134)$$

erfolgen (Matrix-Feldgrößen σ_{I-RVE} und h_{RVE} , Materialparameter c_1 bis c_4). Für a_{tr} gilt

$$a_{tr} = [c_5(\sigma_{P0} - \sigma_{min}) \exp(-ka_s) + c_6 h_{RVE}] \cdot (\sigma_{I-RVE})^{c_7} \quad \text{für } \sigma_{P0} > \sigma_{min} \quad (135)$$

mit den Materialparametern c_5 bis c_7 sowie $\sigma_{min}=1600\text{MPa}$ und $k=2000$. Dabei erweisen sich die Parameter c_2 , c_3 , c_4 , c_6 und c_7 als in erster Näherung unabhängig vom Materialverhalten. Im Rahmen dieser Studie werden sie daher als konstant angenommen, mit den Werten $c_2=0.15$, $c_3=-0.75$, $c_4=-2.75$, $c_6=0.22$ und $c_7=3.60$. Damit verbleiben lediglich zwei anzupassende Materialparameter. In Abb. 126 und Abb. 127 sind die resultierenden Funktionsverläufe für das Referenzmaterial ($T=-85^\circ\text{C}$) und eine Partikelspannungsverteilung mit den Parametern $a_s=0.0007$ und $\sigma_{P0}=2000\text{MPa}$ dargestellt.

Mikromechanisch basiertes
Spaltbruchmodell

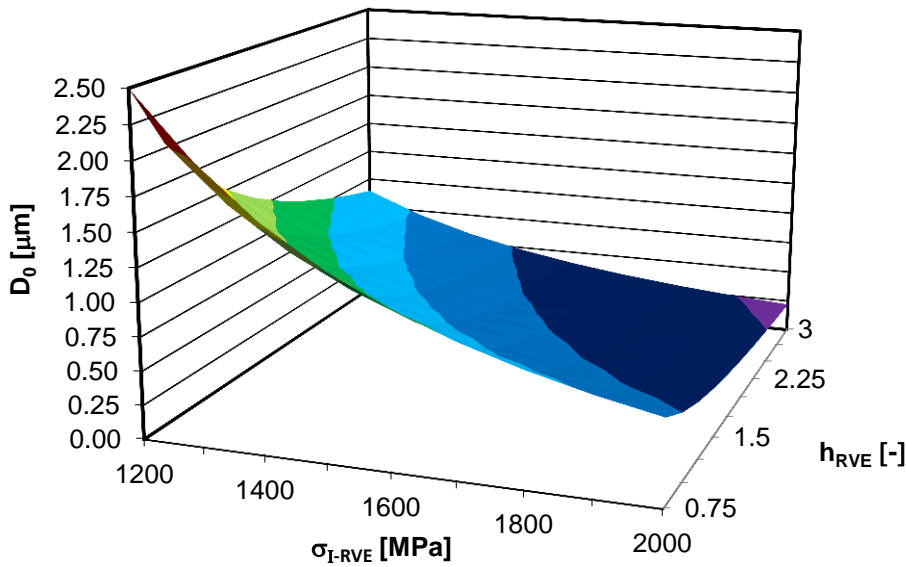


Abb. 126:
Weibull-Parameter D_0 in Abhängigkeit von den Matrixfeldgrößen, Approximation

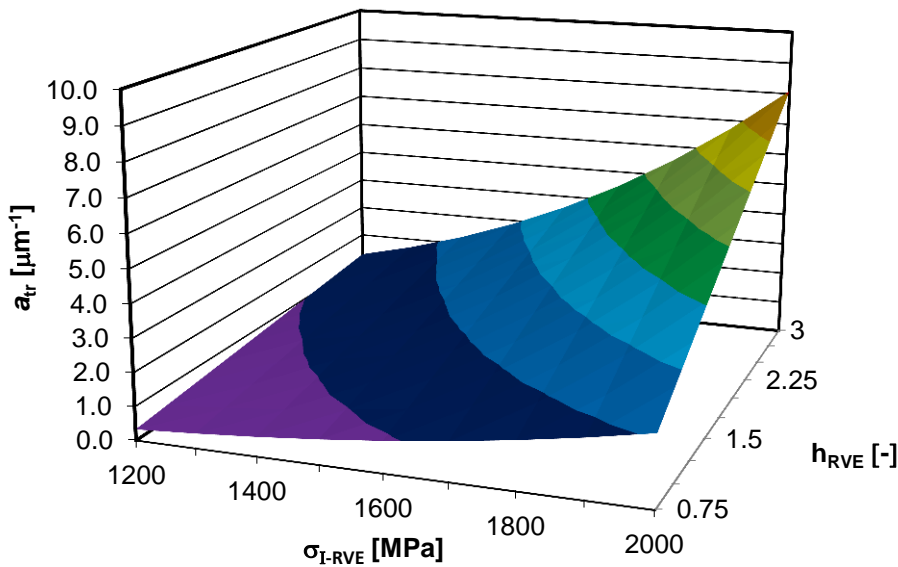


Abb. 127:
Weibull-Parameter a_{tr} in Abhängigkeit von den Matrixfeldgrößen, Approximation

Die Materialparameter in den Gleichungen (134) und (135) erfassen implizit alle Änderung der Materialeigenschaften (Matrixmaterial, Oberflächenenergie).

Mit der nach Bestimmung der Weibull-Parameter a_{tr} und D_0 bekannten Verteilungsfunktion für die Verteilung der kritischen Partikeldurchmesser D_k im RVE kann die Wahrscheinlichkeit für den Rissübergang in die Matrix berechnet werden. Dazu muss zunächst die Verteilung der effektiven Partikelgröße D^{eff} (experimentelle, für die Schlitze (entspricht Schnitten durch die Partikel) ermittelte Partikelgrößenverteilung, vgl. Kapitel 3.2.2 und 4.2.4) betrachtet werden. Teilt man die vorliegenden Partikelgrößen in n_{we} Größenklassen D_i^{eff} ($i=1, \dots, n_{we}$) ein, mit der jeweiligen Auftretswahrscheinlichkeit w_i^{eff} (wobei diese Gewichtungsfaktoren die Art der Verteilung bestimmen, im betrachteten Fall liegt eine Weibullverteilung vor, vgl. Kapitel 3.2.2, Abb. 33), so erhält man die Wahrscheinlichkeit für den Rissübergang in die Matrix im RVE zum aktuellen Zeitpunkt gemäß

$$P_{tr} = \sum_{i=1}^{n_{we}} w_i^{eff} \left(1 - \exp \left[-a_{tr} (D_i^{eff} - D_0)^{b_{tr}} \right] \right) \quad \text{für } D_i^{eff} > D_0 \quad (136)$$

Weiterhin kann noch die Größenverteilung der gerade entstandenen Mikrodefekte bestimmt werden (streng genommen wird die Größenverteilung der Bruchflächen der Partikel ermittelt, die Defekte sind etwas größer, da der Rissübergang in die Matrix stattgefunden hat; diese Abweichung kann im Instabilitätsterm berücksichtigt werden):

$$F_{def}(D_k^{eff}) = \frac{1}{P_{tr}} \sum_{j=1}^k w_j^{eff} \left(1 - \exp \left[-a_{tr} (D_j^{eff} - D_0)^{b_{tr}} \right] \right) \quad (137)$$

mit $k \leq n_{we}$, wobei k die Nummer der betrachteten Größenklasse bzw. Defektgröße bezeichnet. Mit der aus der Mikrostrukturcharakterisierung bekannten Verteilung der effektiven Partikelgrößen (siehe Kapitel 3.2.2, Abb. 33) erhält man schließlich die Größenverteilung der gerade entstandenen Mikrodefekte. Exemplarisch sind in Abb. 128 drei solcher Größenverteilungen jeweils zusammen mit der zugehörigen Verteilungsfunktion des kritischen Partikeldurchmessers gemäß Gleichung (133) dargestellt.

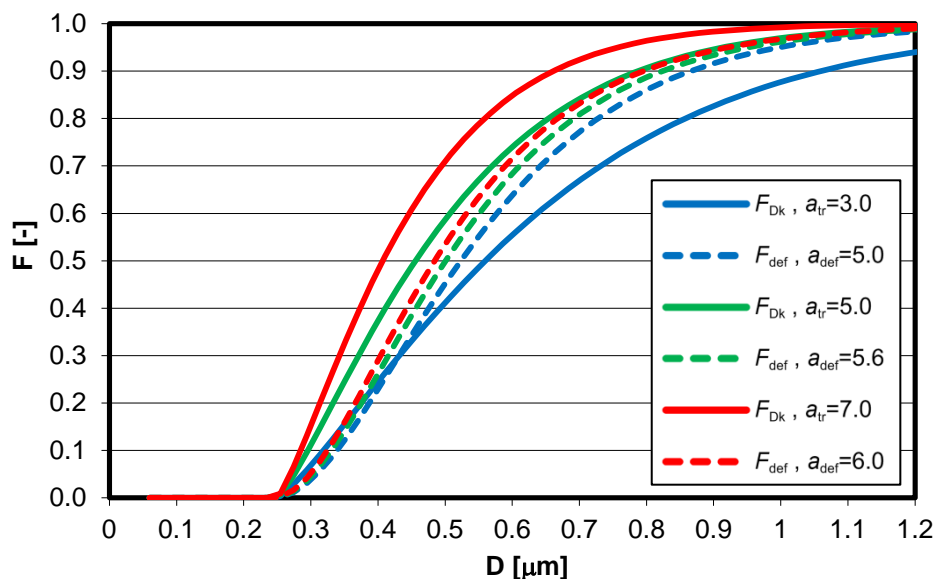


Abb. 128:
Größenverteilung F_{def} der gerade entstandenen Mikrodefekt für verschiedene Verteilungsfunktionen F_{Dk} des kritischen Partikeldurchmessers

Auch die Größenverteilung der gerade entstandenen Mikrodefekte kann durch eine Weibullverteilung (Parameter a_{def} , b_{def} , D_{0-def}) approximiert werden, wobei zwischen den

Formparametern von F_{D_k} und F_{def} der in Abb. 129 dargestellte Zusammenhang besteht (Annahme: $b_{def} \approx konst = 1.50$). Der Lageparameter D_{0-def} der Größenverteilung F_{def} der gerade entstandenen Mikrodefekte entspricht dabei dem Lageparameter D_0 der Verteilungsfunktion F_{D_k} des kritischen Partikeldurchmessers D_k . Dabei gilt $a_{def} \approx 4.6 a_{tr}^{0.165}$.

 Mikromechanisch basiertes
 Spaltbruchmodell

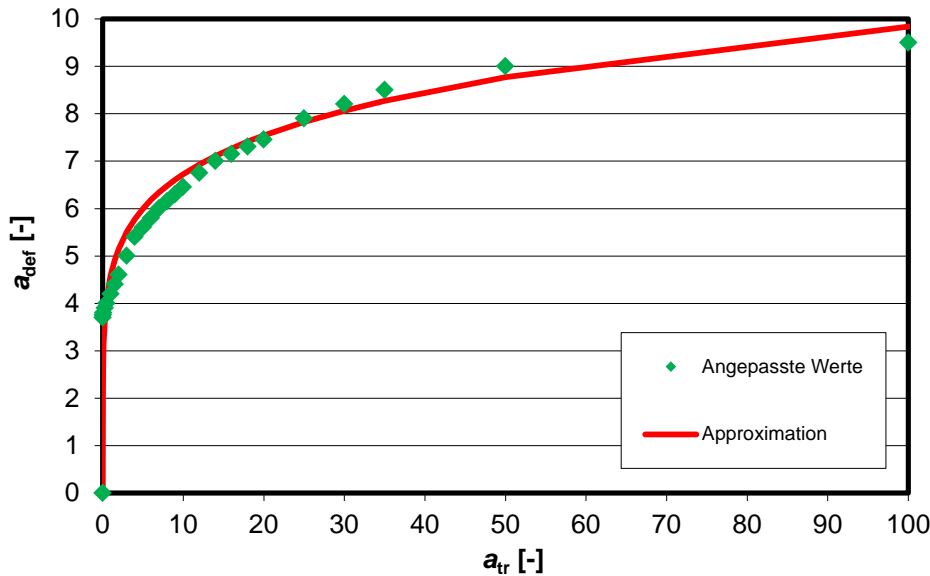


Abb. 129:
 Formparameter a_{def} der Größenverteilung der gerade entstandenen Mikrodefekte als Funktion des Formparameters a_{tr}

Die Größenverteilung der gerade entstandenen Mikrodefekte kann als Eingangsgröße bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeit für die Defektinstabilität (dritter Term) verwendet werden.

5.2.3 Wahrscheinlichkeit für Defektinstabilität

Der dritte für die Definition des erweiterten lokalen Spaltbruchmodells erforderliche Term beschreibt die Wahrscheinlichkeit der möglichen Instabilität der gerade entstandenen Mikrodefekte basierend auf dem Griffith-Kriterium [39]. Die dazu erforderliche Verteilungsfunktion für die Mikrodefektgröße ist als eines der Ergebnisse des zweiten Terms bekannt. Das Griffith-Kriterium (vgl. Kapitel 2.3.2, Gleichung (35)) liefert einen Zusammenhang zwischen der anliegenden größten Hauptspannung und dem erforderlichen Mindestdefektdurchmesser D_c für instabile Rissausbreitung:

$$D_c \geq \frac{k^2}{\sigma_I^2} \tag{138}$$

mit dem Materialparameter k , der den Einfluss verschiedener Materialeigenschaften (Oberflächenenergie usw.) beinhaltet. Bei bekannter Größenverteilung der Mikrodefekte (Weibull-Verteilung, s.o.) kann somit die Wahrscheinlichkeit für Defektinstabilität als Funktion der effektiven größten Hauptspannung im RVE, der Weibull-Parameter sowie zweier Materialparameter berechnet werden [$P_{inst} = F_{def}(D=D_{max}) - F_{def}(D=D_c(\sigma_I))$]

$$P_{inst} = \exp \left[-a_{def} \left(\frac{\sigma_u^2}{(\sigma_{I-RVE})^2} - D_0 \right)^{b_{def}} \right] - \exp \left[-a_{def} \left(\frac{\sigma_u^2}{\sigma_{th}^2} - D_0 \right)^{b_{def}} \right] \tag{139}$$

mit den Parametern D_0 , a_{def} und b_{def} der Weibull-Verteilung sowie den Materialparametern $\sigma_u=k$ und σ_{th} , wobei letzterer aus der Annahme einer maximalen möglichen Partikel- bzw. Defektgröße D_{max} resultiert (daher muss gelten $\sigma_{I-RVE} > \sigma_{th}$).

5.3

Formulierung eines mikromechanisch basierten lokalen Spaltbruchmodells

Basierend auf den Ergebnissen für die drei Einzelterme kann nun ein erweitertes lokales Spaltbruchmodell definiert werden. Dazu wird zunächst ein Volumenelement dV entsprechend Abb. 130 als Kontrollvolumen betrachtet. Das Volumenelement muss gegenüber den Abmessungen der Gesamtstruktur klein, jedoch größer als die charakteristische Mikrodefektgröße sein (daher z.B. Volumenelement von RVE-Größe). Der Belastungs- und Deformationszustand des Elements dV wird durch die Werte der (makroskopischen bzw. effektiven) mechanischen Felder ε_i , σ_i und h am Ort des Volumenelements beschrieben. Es wird davon ausgegangen, dass diese Volumenelement während eines Zeitinkrements dt versagt, wenn dieses zu dieser Zeit einen potentiell kritischen Mikrodefekt der Größe D enthält und gleichzeitig ein Spannungszustand vorliegt, bei dem der Mikrodefekt nach dem Griffith-Kriterium gemäß Gleichung (138) überlastet wird.

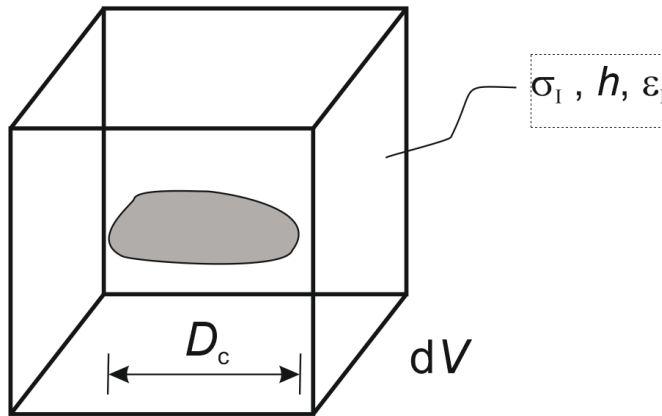


Abb. 130:
Volumenelement dV als Kontrollvolumen

Von einem Versagen des Volumenelements dV ist während des Zeitinkrements somit auszugehen, wenn bei einer gegebenen größten Hauptspannung σ_i innerhalb von dV ein kritischer Mikrodefekt der Größe $D \geq D_c(\sigma_i)$ vorhanden ist. Damit gilt für die Ausfallwahrscheinlichkeit des Elements dV während eines Zeitinkrements Δt_n von t_{n-1} bis t_n

$$dp_f(\Delta t_n) = dp(D_c)dV \quad (140)$$

wobei $dp(D_c)$ die Wahrscheinlichkeit des Auftretens eines kritischen Mikrodefekts mit einer Größe von mindestens D_c ist. Geht man davon aus, dass die Bildung potentiell kritischer Mikrodefekte durch den Bruch spröder Partikel in der ferritischen Matrix stattfindet, so lässt sich die Wahrscheinlichkeit des Auftretens eines kritischen Mikrodefekts mit einer Größe von mindestens D_c durch den Separationsansatz

$$dp(D_c) = \frac{C_0}{V_0} \cdot [P_{fr}(t_n) - P_{fr}(t_{n-1})] \cdot P_{tr}(t_{n-0.5}) \cdot P_{inst}(t_{n-0.5}) \quad (141)$$

beschreiben. Dabei stellt $\Delta P_{fr} = P_{fr}(t_n) - P_{fr}(t_{n-1})$ die Wahrscheinlichkeit für Partikelversagen während des Zeitinkrements Δt_n und P_{tr} die Wahrscheinlichkeit des erfolgreichen Übergangs eines bei Partikelbruch entstehenden Mikrorisses vom Partikel in die Matrix dar, während P_{inst} die Wahrscheinlichkeit für die Instabilität eines Defekts ist. Demnach kann die Ausfallwahrscheinlichkeit des Volumenelements dV zum Zeitpunkt t_n mittels der drei durch die Gleichungen (131), (136) und (139) definierten Terme $P_{fr}(\varepsilon_i, \sigma_i)$, $P_{tr}(h, \sigma_i)$ und $P_{inst}(\sigma_i)$ berechnet werden.

Dabei wird davon ausgegangen, dass die Wahrscheinlichkeit für die Überwindung der ersten Korngrenze nur temperaturabhängig ist (hinsichtlich der Spaltbruchausbreitung ist die Relevanz von Korngrenzen für diesen Werkstoff eher gering, siehe Kapitel 5.1). Diese Wahrscheinlichkeit kann durch den Parameter C_0 , der auch die Partikelanzahl im Bezugsvolumen erfasst, berücksichtigt werden (d.h. C_0 ist das Produkt aus der (nur temperaturabhängigen) Wahrscheinlichkeit für die Überwindung der ersten Korngrenze und der Partikelanzahl im Bezugsvolumen). V_0 stellt das Bezugsvolumen dar.

Die Versagenswahrscheinlichkeit der Gesamtstruktur ist gegeben durch $P_f=1-P_s$, mit der Überlebenswahrscheinlichkeit P_s . Unter Verwendung der weakest-link-Annahme (Mudry [87]), dass der Ausfall des ersten Volumelements den Ausfall der Gesamtstruktur zur Folge hat, erhält man den Zuwachs der akkumulierten Versagenswahrscheinlichkeit der Gesamtstruktur im n -ten Lastschritt [Analyse von Volumelementen $\Delta V^{(i)}$ mit finiter Abmessung ($dV \rightarrow \Delta V$)] gemäß

$$\Delta P_f(t_n) = 1 - \prod_{i=1}^{n_{Vi}} [1 - \Delta p_f^{(i)}(t_n)] \quad (142)$$

wobei n_{Vi} die Anzahl der Volumelemente innerhalb der Gesamtstruktur bezeichnet. Logarithmiert man nun Gleichung (142)

$$\ln(1 - \Delta P_f) = \ln \left(\prod_{i=1}^{n_{Vi}} [1 - \Delta p_f^{(i)}] \right) = \sum_{i=1}^{n_{Vi}} [\ln(1 - \Delta p_f^{(i)})] \quad (143)$$

und setzt voraus, dass die Einzelbeiträge $\Delta p_f^{(i)}$ klein sind, so folgt mit $\ln(1-x) \approx -x$ (für kleine x ; Entwicklung der Funktion in eine Potenzreihe und Abbruch nach dem linearen Glied):

$$\Delta P_f(t_n) \approx 1 - \exp \left(- \frac{C_0}{V_0} \sum_{i=1}^{n_{Vi}} [\Delta P_{fr}^{(i)}(\varepsilon_I, \sigma_I) \cdot P_{tr}^{(i)}(h, \sigma_I) \cdot P_{inst}^{(i)}(\sigma_I) \cdot \Delta V^{(i)}] \right) \quad (144)$$

Für die Berechnung der Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch innerhalb eines Lastinkrements wird die Differenz $\Delta P_{fr}=P_{fr}(t_n)-P_{fr}(t_{n-1})$ der akkumulierten Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch (gemäß Gleichung (131)) am Ende und zu Beginn des jeweils betrachteten Lastinkrements verwendet (daher Verwendung der Feldgrößen zum Zeitpunkt t_n und t_{n-1} ; für die anderen Terme werden die Feldgrößen zum Zeitpunkt $t_{n-0.5}$ verwendet). Da Gleichung (131) für isotherme Lastgeschichten hergeleitet wurde, erfolgt im Fall thermisch transienter Lastgeschichten eine leichte Überschätzung (sinkende Temperatur) bzw. Unterschätzung (steigende Temperatur) der Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch innerhalb eines Lastinkrements. Für die praktisch relevanten Lastgeschichten mit sinkender Temperatur (Thermoschock) erhält man somit hinsichtlich der berechneten Ausfallwahrscheinlichkeit konservativere Ergebnisse.

Die akkumulierten Versagenswahrscheinlichkeit $P_f(t_n)$ der Gesamtstruktur am Ende des n -ten Lastschritts erhält man durch die Anwendung einer Rekursionsformel [siehe Gleichung (44)].

Das vorgeschlagene mikromechanisch basierte erweiterte lokale Spaltbruchmodell enthält zahlreiche variierbare Parameter. Hinsichtlich des Terms zur Berechnung der Partikelbruchwahrscheinlichkeit sind dies u.a. die Parameter c_1 und c_4 aus Gleichung (129) bzw. (130) (im Folgenden c_{tr1} und c_{tr2} genannt) und hinsichtlich des Terms zur Berechnung der Wahrscheinlichkeit für Rissübergang in die Matrix u.a. die Parameter c_1 und c_5 aus Gleichung (134) bzw. (135) (im Folgenden c_{tr1} und c_{tr2} genannt). Weiterhin können die Parameter σ_u und σ_{th} aus Gleichung (138) sowie C_0 aus Gleichung (141)

($V_0=0.000125$) variiert werden. Für alle anderen Parameter (z.B. Partikelfestigkeit) werden im Rahmen dieser Arbeit die jeweils im Zusammenhang mit der Herleitung der einzelnen Terme genannten Werte verwendet.

5.4 Zusammenfassung und Diskussion

Das mikromechanisch basierte (jedoch auf der makroskopischen Ebene definierte) erweiterte Spaltbruchmodell basiert auf drei Termen, die die verschiedenen Phasen der Spaltbruchauslösung in ferritisch-bainitischen Stählen (Partikelbruch, Übergang des durch Partikelbruch entstandenen Mikrorisses vom Partikel in die umgebende duktile Matrix, Instabilität des so entstandenen Mikrodefekts) erfassen. Dabei werden neben den für die Spaltbruchauslösung relevanten mikrostrukturellen Eigenschaften (Matrixmaterialverhalten, vorliegende Partikelpopulation) auch die lokalen Streuungen der Feldgrößen (in der Umgebung der Korngrenzen) bei jeweils gegebener Effektivbelastung der betrachteten Kontrollvolumenelemente berücksichtigt. Ein Ablaufdiagramm, welches die Bewertung mittels des mikromechanisch basierten Spaltbruchmodells beschreibt, ist in Abb. 131 dargestellt.

Der erste Term beinhaltet die Beschreibung der Verteilung der Partikelbeanspruchung als Funktion der Matrixdehnung und der Matrixspannung sowie einiger Materialparameter, welche den Einfluss der Verteilungen der lokalen Partikel- und Materialkonstellationen auf die Partikelbeanspruchung beschreiben. Durch Gegenüberstellung der Verteilung der Partikelbeanspruchung und der Verteilung der Partikelfestigkeit erhält man damit die Wahrscheinlichkeit für den Partikelbruch. Die zusätzlich Berücksichtigung der Matrixspannung sowie der im Allgemeinen nichtlineare Einfluss der Matrixdehnung führen zusammen mit den sowohl das Matrixmaterialverhalten als auch die Partikelpopulation beschreibenden Materialparametern zu einer im Vergleich zu den bestehenden Modellen deutlich komplexeren Beschreibung der ersten Phase der Mikrodefektentstehung. Die erzielten Ergebnisse hinsichtlich der Partikelbeanspruchung stehen in guter qualitativer Übereinstimmung mit der von Rezaee et al. [99] ermittelten Beschreibung der Partikelspannung durch eine Weibull-Verteilung, wobei der Weibullexponent unabhängig von Dehnung und Temperatur ist, während der Skalierungsparameter von der temperaturabhängigen Fließspannung (linear) und der Dehnung (nichtlinear, multipliziert mit temperaturabhängigen Faktor) abhängt.

Der Übergang des Mikrodefekts vom gebrochenen Partikel in die umgebende Matrix stellt die zweite Phase der Mikrodefektentstehung dar. Der entsprechende Term beinhaltet die Beschreibung der Verteilung der kritischen Partikelgröße als Funktion der Matrixspannung und der Spannungsmehrachsigkeit sowie weiterer Materialparameter, welche den Einfluss der Verteilungen der Partikelspannung sowie der lokalen Materialeigenschaften auf den Rissübergang beschreiben. Durch Gegenüberstellung der Verteilung der kritischen Partikelgröße und der vorhandenen Partikelgrößenverteilung erhält man damit die Wahrscheinlichkeit für den Rissübergang in die ferritische Matrix. Der Rissübergang in die Matrix wird in keinem der bestehenden Modelle explizit durch einen eigenständigen Term berücksichtigt.

Der dritte Term des mikromechanisch basierten Spaltbruchmodells beschreibt schließlich die Wahrscheinlichkeit der Instabilität des entstandenen Mikrodefekts basierend auf dem Griffith-Kriterium [39]. Die erforderliche Verteilungsfunktion für die Mikrodefektgröße kann dabei durch eine Weibull-Verteilung dargestellt werden. Deren Parameter sind abhängig von den Ergebnissen des zweiten Terms. Demgegenüber sind bei den bestehenden Modellen die Parameter der angenommenen Verteilungsfunktion feste Bestandteile der Materialparameter. Die explizite Berücksichtigung des Rissübergangs in die Matrix erlaubt einen differenzierteren Einfluss der Lastgeschichte.

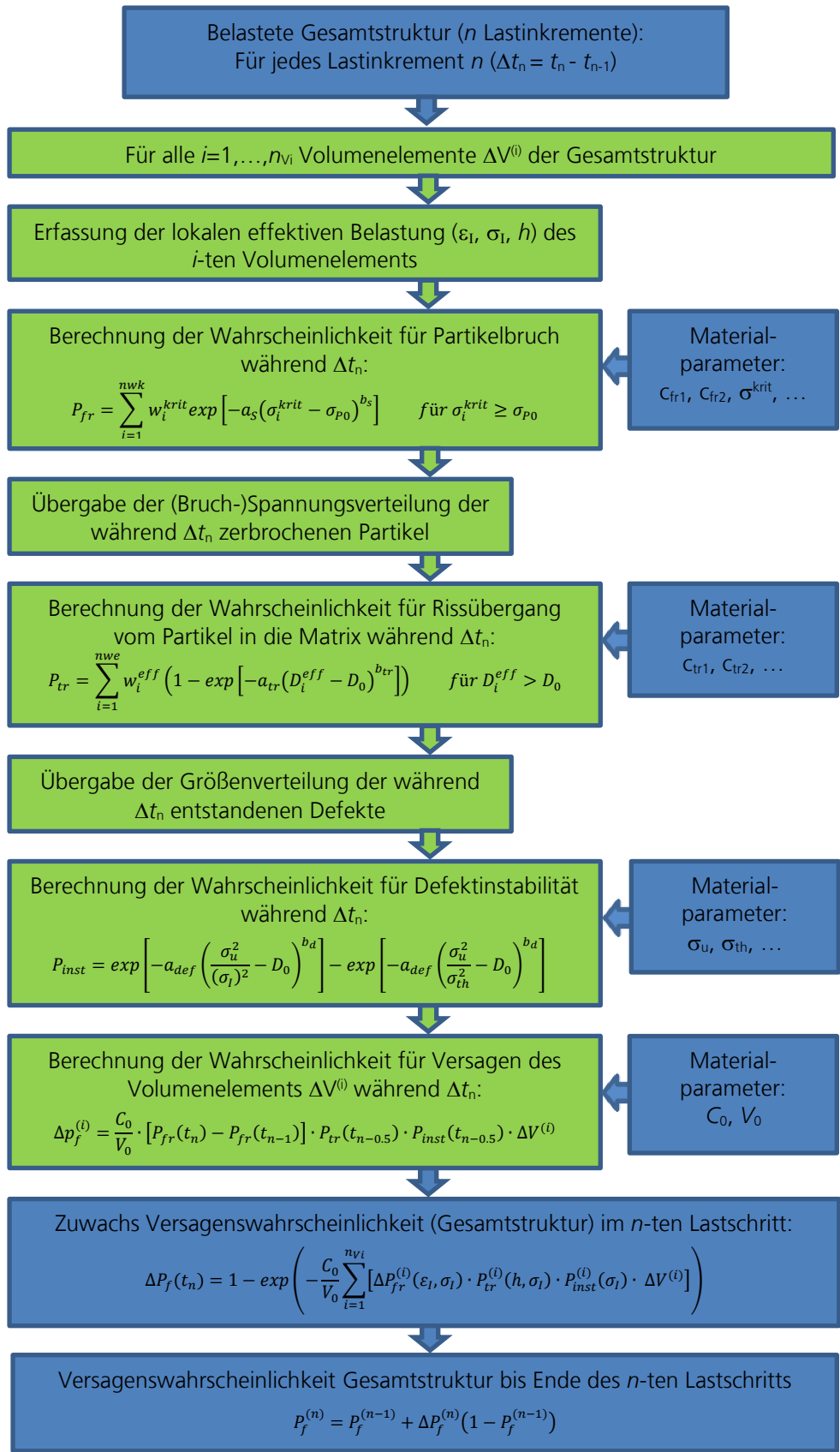


Abb. 131:
Ablaufdiagramm der Bewertung mit dem mikromechanisch basierten Spaltbruchmodell

Im Hinblick auf die mögliche Defektinstabilität bleibt anzumerken, dass das hier verwendete Griffith-Kriterium [39] die vereinfachende Annahme kreisförmiger, senkrecht zur Hauptlastrichtung orientierter Defekte impliziert. Ein erweiterter Ansatz für nicht kreisförmige Defekte soll daher für zukünftige Modellformulierungen geprüft werden. Gleiches gilt für eine „Dehnungskorrektur“ des Griffith-Kriteriums, wie sie z.B. von Beremin [17] oder Jikov et al. [57] vorgeschlagen wird. Dabei wird ein Defekt mit dem Radius r in der elastisch-plastischen Matrix durch einen fiktivem Defekt mit einem Radius $r_f(\epsilon_e^{pl}) < r$ in einer elastischen Matrix ersetzt. So kann die Reduzierung der Risstriebkraft durch plastische Dissipation näherungsweise berücksichtigt werden.

Weitere offene Punkte für zukünftige Studien sind die Einflüsse von Entlastung und Wiederbelastung sowie thermisch transienten Lastgeschichten auf die Partikelbeanspruchung. Auch das Verhalten arretierter (Mikro-) Risse bei Weiterbelastung (immer Porenbildung?) kann noch genauer untersucht werden. Zudem ist der Widerstand von Korngrenzen auf die Rissausbreitung seit längerem Gegenstand der Forschung (siehe z.B. Qiao und Argon [95], [96]). Die Ergebnisse solcher Studien könnten bei zukünftigen Modellformulierungen berücksichtigt werden.

Bei größeren plastischen Dehnungen ist u.U. die Unabhängigkeit einzelner Fehlerereignisse nicht mehr gegeben (Jikov et al. [57]). Es kann zur Interaktion von Defekten (bei hinreichend geringem Abstand) kommen: bestehende Defekte beeinflussen das Bruchverhalten von Partikeln in ihrer Nähe oder das Ausbreitungsverhalten von gerade entstehenden Defekten in ihrer Umgebung. Ähnliches gilt im Falle des Vorhandenseins von Partikelclustern. Die Berücksichtigung solcher Effekte in einem Spaltbruchmodell erfordert weitere umfangreiche Studien.

Grundsätzlich bleibt anzumerken, dass auf Basis der im Rahmen dieser Arbeit erzielten Ergebnisse hinsichtlich der mikromechanischen Vorgänge bei der Spaltbruchauslösung auch andere Modellformulierungen als die in Kapitel 5.3 vorgeschlagene möglich sind.

Zur Validierung des vorgeschlagenen mikromechanisch basierten lokalen Spaltbruchmodells (Kapitel 5.3) und zum Vergleich mit anderen lokalen Spaltbruchmodellen wird das Modell auf die zur Verfügung stehende experimentelle Datenbasis an bruchmechanischen Standardproben und Kreuzbiegeproben (Hohe et al. [49], [52]) angewendet.

6.1

Bestimmung der Materialparameter

Die Bestimmung der Modellparameter mit Ausnahme der jeweils vorgegebenen Größen kann durch numerische Simulation eines oder mehrerer Experimente an Bruchmechanikproben erfolgen. Die jeweiligen freien Modellparameter werden dann, wie in Abb. 132 dargestellt, mit Hilfe einer Optimierungsstrategie so angepasst, dass die mit der Anzahl der für die betrachteten Probengeometrien verfügbaren experimentellen Ergebnisse gewichtete Fehlerquadratsumme

$$e = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (e_i^{(1)})^2 + \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (e_j^{(2)})^2 \quad (145)$$

minimal wird. Die Einzelfehler sind dabei als die Abweichungen

$$\begin{aligned} e_i^{(1)} &= K_{J(i)}^{\text{num1}} - K_{J(i)}^{\text{exp1}} \\ e_j^{(2)} &= K_{J(j)}^{\text{num2}} - K_{J(j)}^{\text{exp2}} \end{aligned} \quad (146)$$

der mit einer bestimmten Bruchwahrscheinlichkeit korrespondierenden experimentell ermittelten Bruchzähigkeiten K_J^{exp} vom zugehörigen numerisch ermittelten Wert K_J^{num} definiert (vgl. Abb. 132).

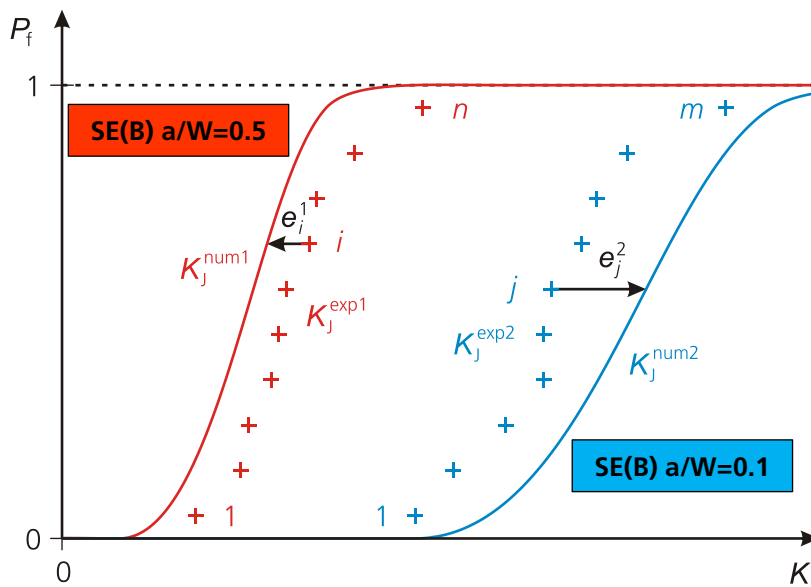


Abb. 132:
Strategie für die Parameteranpassung; Definition der Einzelfehler e_i bzw. e_j (Anpassung an experimentelle Ergebnisse für zwei Typen von Bruchmechanikproben: Tief gerissene Proben und Kurzrisssproben)

Die Gewichtung der Einzelfehler in Gleichung (145) ist dabei erforderlich, um auch eine Anpassung an mehrere Scharen experimenteller Ergebnisse mit unterschiedlichen An-

zahlen an Datenpunkten vornehmen zu können, da sonst diejenige Schar mit der größeren Zahl an experimentellen Datenpunkten stärker gewichtet würde.

Validierung und vergleichende Anwendung

Im Rahmen dieser Studie erfolgt die Anpassung der Parameter durch numerische Simulation der Experimente (Kürzel EXP) an Bruchmechanikproben vom Typ SE(B) mit $a/W=0.52$ und $a/W=0.13$ (unterschiedliche Beanspruchungszustände im Rissfrontbereich bei gleicher globaler Last K_j). Dadurch soll sichergestellt werden, dass der so bestimmte optimale Parametersatz ein breites Spektrum möglicher Risskonfigurationen mit guter Genauigkeit abdeckt.

6.2 Validierung des vorgeschlagenen Modells

Das vorgeschlagene mikromechanisch basierte erweiterte lokale Spaltbruchmodell (Kürzel MB) enthält zahlreiche variierbare Parameter. Entsprechend der Ergebnisse aus Kapitel 5 wird jedoch im Rahmen dieser Arbeit nur ein Teil der Parameter variiert. Hinsichtlich des Terms zur Berechnung der Partikelbruchwahrscheinlichkeit sind dies die Parameter c_1 und c_4 aus Gleichung (129) bzw. (130) (im Folgenden c_{fr1} und c_{fr2} genannt) und hinsichtlich des Terms zur Berechnung der Wahrscheinlichkeit für Rissübergang in die Matrix die Parameter c_1 und c_5 aus Gleichung (134) bzw. (135) (im Folgenden c_{tr1} und c_{tr2} genannt). Weiterhin können die Parameter σ_u und σ_{th} aus Gleichung (138) sowie C_0 aus Gleichung (141) ($V_0=0.000125mm^3$) variiert werden. Für alle anderen Parameter werden die jeweils im Zusammenhang mit der Herleitung der einzelnen Terme genannten Werte verwendet.

In Abb. 133 sind die Ergebnisse der Parameteranpassung dargestellt. Zusätzlich sind die Bruchwahrscheinlichkeitskurven nach dem Mastercurve-Konzept nach ASTM E 1921 [5] (Kürzel MC) auf der Basis derjenigen Referenztemperatur T_0 dargestellt, die sich bei ausschließlicher Berücksichtigung dieser Probengeometrie ($T_0^{SE(B)0.5} \approx -71^\circ C$, $T_0^{SE(B)0.1} \approx -96^\circ C$, $T_0^{CR(B)0.1} \approx -92^\circ C$, $T_0^{M(T)0.5} \approx -105^\circ C$,) aus der Gesamtdatenbasis ergibt. Hierdurch lässt sich abschätzen, in wie weit die für $T=-85^\circ C$ ermittelten Bruchfähigkeitswerte für die Gesamtheit der geprüften Proben der jeweiligen Geometrie repräsentativ sind.

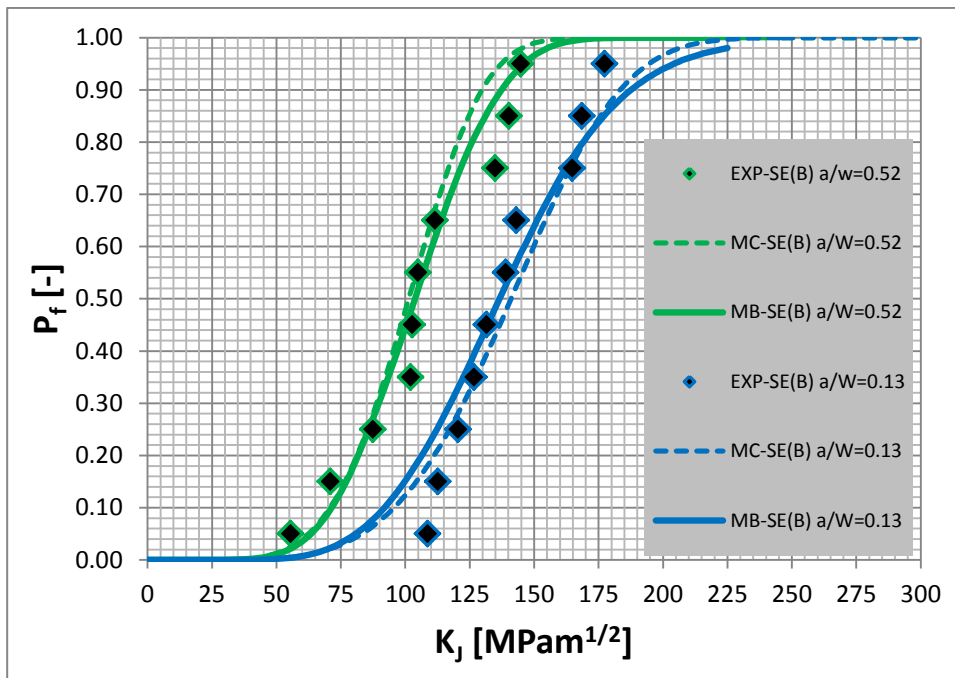


Abb. 133: Berechneter Verlauf (MB) der Spaltbruchwahrscheinlichkeit für die ermittelten Modell- bzw. Materialparameter ($C_0=18$, $c_{fr1}=45000$, $c_{fr2}=0.0009$, $c_{tr1}=1.2$, $c_{tr2}=0.0001$, $\sigma_u=2000$, $\sigma_{th}=1500$), Vergleich mit den experimentellen Datenpunkten (EXP) und dem für den jeweiligen Probentyp gemäß dem Mastercurve-Konzept (MC) mit individueller T_0 berechneten Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit, $T=-85^\circ C$, Anpassung

Die Ergebnisse der Parameteranpassung zeigen, dass das mikromechanisch basierte erweiterte Spaltbruchmodell in der Lage ist, sowohl die Versagenswahrscheinlichkeit der tief gerissenen SE(B)10x10-Proben ($a/W=0.52$), als auch die Spaltbruchwahrscheinlichkeit der Kurzriss- SE(B)10x10-Proben ($a/W=0.13$) mit einem Parametersatz im gesamten Lastbereich sehr gut zu beschreiben. Dies ist ein klarer Hinweis darauf, dass für das mikromechanisch basierte Modell eine gute Übertragbarkeit (d.h. geringe Probengeometrieabhängigkeit) der Material- bzw. Modellparameter vorliegt. Wendet man nun das Modell mit dem oben ermittelten Parametersatz zur Berechnung der Versagenswahrscheinlichkeit von M(T)100-Proben und CR(B)10x20-Proben an, so ergeben sich die in Abb. 134 dargestellten Ergebnisse.

Validierung und vergleichende Anwendung

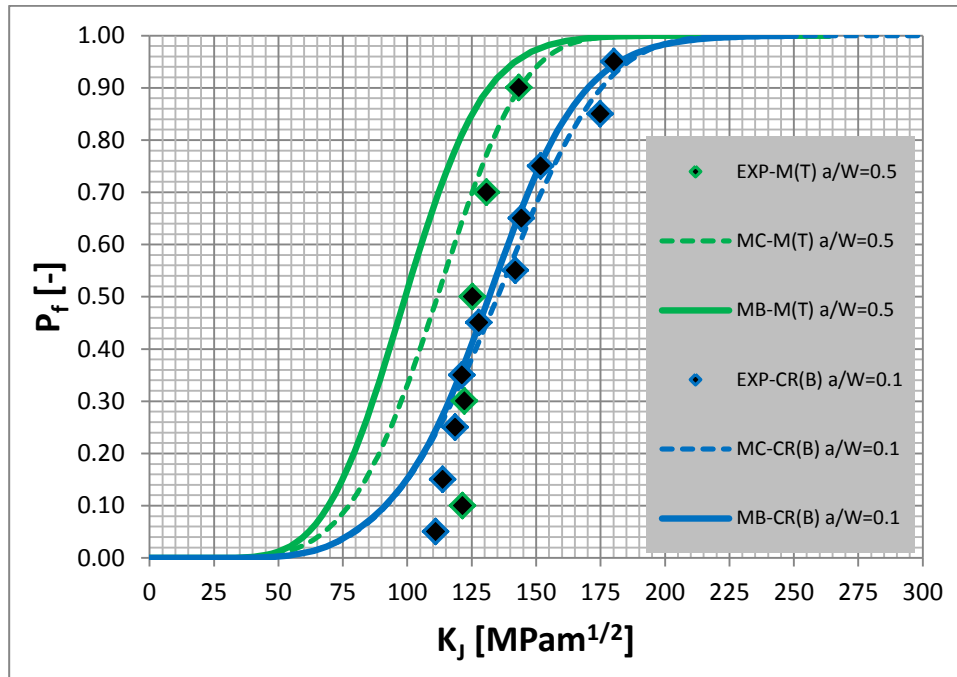


Abb. 134: Berechneter Verlauf (MB) der Spaltbruchwahrscheinlichkeit für die ermittelten Modell- bzw. Materialparameter ($G_0=18$, $\alpha_{r1}=45000$, $\alpha_{r2}=0.0009$, $\alpha_{r1}=1.2$, $\alpha_{r2}=0.0001$, $\sigma_u=2000$, $\sigma_{th}=1500$), Vergleich mit den experimentellen Datenpunkten (EXP) und dem für den jeweiligen Probentyp gemäß dem Mastercurve-Konzept (MC) mit individueller T_0 berechneten Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit, $T=-85$ bzw. -90°C , Anwendung

Es wird deutlich, dass der Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit der CR(B)-Proben durch das mikromechanisch basierte Modell im gesamten Lastbereich mit sehr guter Genauigkeit wiedergegeben wird. Demgegenüber wird die Versagenswahrscheinlichkeit der M(T)-Proben überschätzt. Im betrachteten Fall ist jedoch davon auszugehen, dass die reale Bruchwahrscheinlichkeitskurve für die M(T)-Proben eher durch den gemäß dem Mastercurve-Konzept (mit der ausschliesslich für diesen Probentyp bestimmten Referenztemperatur T_0) berechneten Wahrscheinlichkeitsverlauf abgebildet wird als durch die (nur fünf) experimentellen Datenpunkte. In diesem Zusammenhang muss auch erwähnt werden, dass die Materialeigenschaften an den zwei Rissfronten der M(T)-Proben nicht vollkommen einheitlich waren, während im zugehörigen FE-Modell einheitliche Materialeigenschaften angenommen wurden. Bedenkt man zudem, dass die Material- bzw. Modellparameter für $T=-85^\circ\text{C}$ ermittelt wurden, die M(T)-Proben jedoch bei $T=-90^\circ\text{C}$ getestet wurden, so relativiert sich die vorliegende Überschätzung der Spaltbruchwahrscheinlichkeit.

Insgesamt kann demnach festgehalten werden, dass das mikromechanisch basierte erweiterte Spaltbruchmodell eine für praktische Anwendungen ausreichend genaue (ggf. leicht konservative) Berechnung der Versagenswahrscheinlichkeiten verschiedenster Typen von Bruchmechanikproben (mit unterschiedliche Beanspruchungszuständen im Rissfrontbereich bei gleicher globaler Last K_j) mit einem einzigen Materialparametersatz ermöglicht. Die angestrebte Übertragbarkeit (Geometrieunabhängigkeit) der Material- bzw. Modellparameter kann somit als in ausreichendem Maße gegeben betrachtet werden. Es bleibt anzumerken, dass im Rahmen dieser Studie nur einige der vorhande-

nen Parameter angepasst wurden, d.h. es besteht grundsätzlich weiteres Optimierungspotenzial. Eine umfangreiche Parameterstudie und die Entwicklung einer auf das Modell abgestimmten Anpassungsstrategie für die Material- bzw. Modellparameter sowie die Anwendung auf weitere Probentypen und Bauteile sollen im Rahmen zukünftiger Studien erfolgen.

Validierung und vergleichende Anwendung

6.3 Vergleich mit anderen Modellen

Abschließend wird ein Vergleich der Vorhersagen des in Abschnitt 5.3 vorgeschlagenen mikromechanisch basierten erweiterten lokalen Spaltbruchmodells mit bestehenden Ansätzen vorgenommen. Dazu wird zunächst für alle betrachteten Modelle eine Parameteranpassung basierend auf der numerische Simulation der Experimente an Bruchmechanikproben vom Typ SE(B) mit $a/W=0.52$ und $a/W=0.13$ ($T=-85^\circ\text{C}$) durchgeführt. Anschließend erfolgt eine vergleichende Anwendung der Modelle durch numerische Simulation der Experimente an Bruchmechanikproben vom Typ CR(B) mit $a/W=0.10$ ($T=-85^\circ\text{C}$) und M(T) mit $a/W=0.50$ ($T=-90^\circ\text{C}$), wobei die zuvor angepassten Parameter verwendet werden (vgl. Kapitel 6.2). Zum Vergleich herangezogen werden dabei das dreiparametrische Beremin-Modell (Beremin [18], Gao et al. [37]), sowie das erweiterte Spaltbruchmodell von Hohe et al. ([49], [50]) in der direkten Formulierung. Details zu den Modellformulierungen finden sich in Kapitel 2.3.2.

In Abb. 135 und Abb. 136 sowie Abb. 137 sind die Ergebnisse der Anpassungen und der Anwendungen dargestellt (EXP=Experimente, MC=Mastercurve-Konzept [mit jeweils individuell angepasster T_0], BER=Beremin-Modell, EW=erweitertes Spaltbruchmodell, MB=mikromechanisch basiertes erweitertes Spaltbruchmodell).

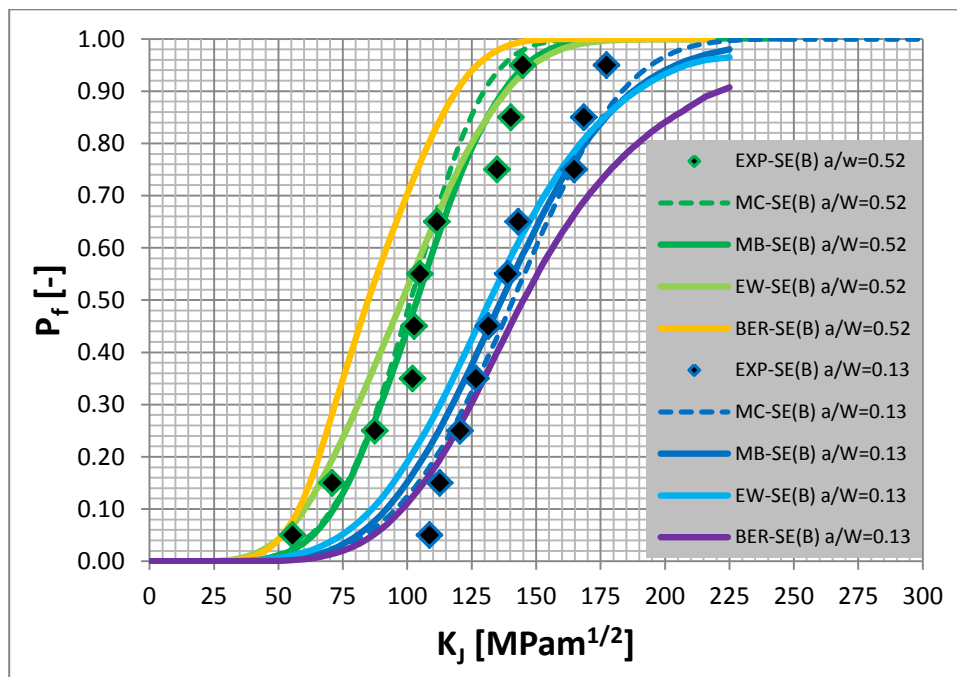


Abb. 135: Berechneter Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit für die ermittelten Modell- bzw. Materialparameter (MB: siehe Kap. 6.2; BER: $m=31$, $\sigma_u=3730$, $\sigma_{th}=1500$; EW: $C=0.012$, $a_n=1.2$, $\sigma_u=1500$, $\sigma_{th}=1500$), Vergleich mit den experimentellen Datenpunkten (EXP) und dem für den jeweiligen Probentyp gemäß dem Mastercurve-Konzept (MC) mit individueller T_0 berechneten Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit, $T=-85^\circ\text{C}$, Anpassung

Aus Abb. 135 wird ersichtlich, dass das erweiterte Modell [50] die Versagenswahrscheinlichkeit der tief gerissenen SE(B)10x10-Proben ($a/W=0.52$) und auch der Kurzris-SE(B)10x10-Proben ($a/W=0.13$) mit guter Genauigkeit beschreibt. Demgegenüber liefert das Beremin-Modell [37] Ergebnisse, die den jeweiligen Verlauf der Versagenswahrscheinlichkeit für beide Probentypen mit insgesamt mäßiger Genauigkeit beschreiben (Überschätzung der Spaltbruchwahrscheinlichkeit für die tief gerissenen Pro-

ben im gesamtem Lastbereich und Unterschätzung der Spaltbruchwahrscheinlichkeit im mittleren und oberen Lastbereich für die Kurzrisssproben). Das mikromechanisch basierte erweiterte Spaltbruchmodell ermöglicht eine im Vergleich zu den Ergebnissen des erweiterten Modells [50] nochmals verbesserte Beschreibung der Bruchwahrscheinlichkeitsverläufe der SE(B)10x10-Proben mit tiefen und kurzen Rissen. Für beide Probentypen wird im jeweiligen unteren und mittleren Versagenslastbereich eine Vorhersage der Spaltbruchwahrscheinlichkeit mit geringerer Konservativität erreicht, wobei im Falle der tief gerissenen SE(B)10x10-Proben ($a/W=0.52$) die gemäß dem etablierten Mastercurve-Konzept [5] für diesen Probentyp (d.h. mit individueller T_0) vorhergesagte Versagenswahrscheinlichkeit nahezu perfekt wiedergegeben wird.

Validierung und vergleichende Anwendung

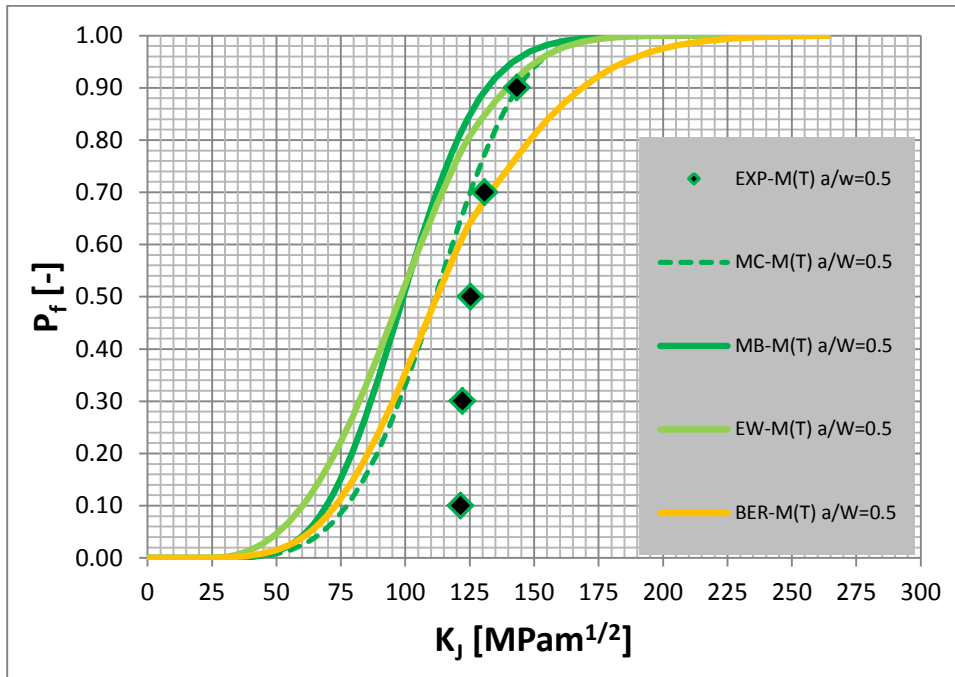


Abb. 136: Berechneter Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit für die ermittelten Modell- bzw. Materialparameter (MB: siehe Kap. 6.2; BER: $m=31$, $\sigma_u=3730$, $\sigma_{th}=1500$; EW: $C=0.012$, $a_n=1.2$, $\sigma_u=1500$, $\sigma_{th}=1500$), Vergleich mit den experimentellen Datenpunkten (EXP) und dem für den jeweiligen Probentyp gemäß dem Mastercurve-Konzept (MC) mit individueller T_0 berechneten Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit, $T=-90^\circ\text{C}$, Anwendung 1

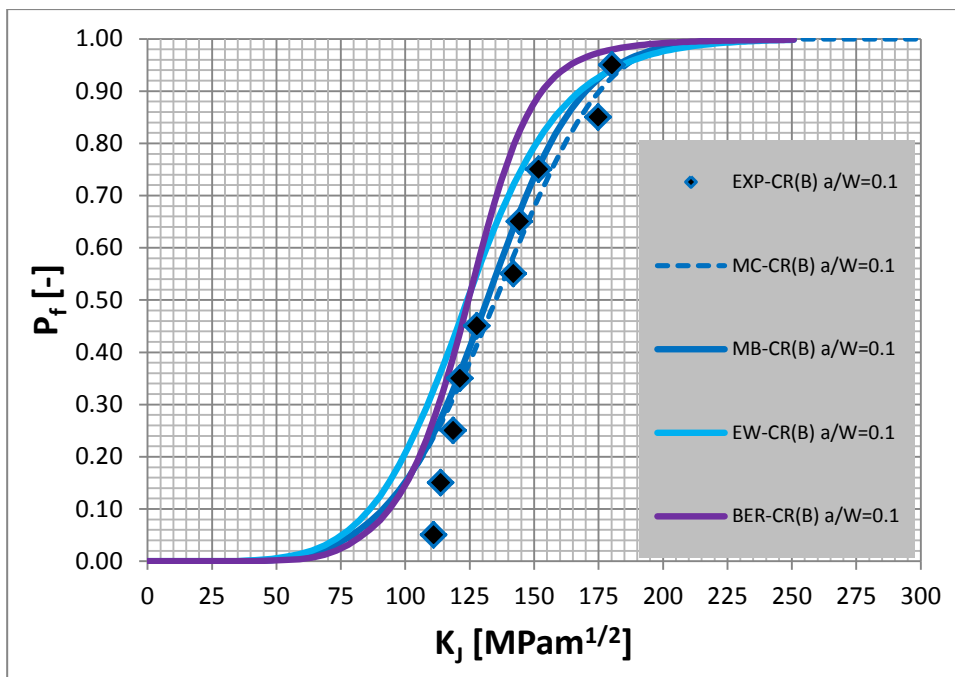


Abb. 137: Berechneter Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit für die ermittelten Modell- bzw. Materialparameter (MB: siehe Kap. 6.2; BER: $m=31$, $\sigma_u=3730$, $\sigma_{th}=1500$; EW: $C=0.012$, $a_n=1.2$, $\sigma_u=1500$, $\sigma_{th}=1500$), Vergleich mit den experimentellen Datenpunkten (EXP) und dem für den jeweiligen Probentyp gemäß dem Mastercurve-Konzept (MC) mit individueller T_0 berechneten Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit, $T=-85^\circ\text{C}$, Anwendung 2

Bei der Anwendung der Modelle mit den für die SE(B)-Proben mit $a/W=0.52$ und $a/W=0.13$ angepassten Parametern auf andere Probentypen zeigen sich erkennbare Unterschiede hinsichtlich der vorhergesagten Bruchwahrscheinlichkeiten.

Validierung und vergleichende
Anwendung

Bei der Anwendung auf M(T)-Proben (siehe Abb. 136) liefern das erweiterte Modell [50] und das mikromechanisch basierte erweiterte Modell Ergebnisse, welche die Versagenswahrscheinlichkeit der M(T)-Proben überschätzen. Dabei ist (wie bereits in Kapitel 6.2 erwähnt) davon auszugehen, dass die reale Bruchwahrscheinlichkeitskurve für die M(T)-Proben eher durch den gemäß dem Mastercurve-Konzept [5] mit individueller T_0 berechneten Wahrscheinlichkeitsverlauf abgebildet wird als durch die experimentellen Datenpunkte. Weiterhin wurden die Material- bzw. Modellparameter für $T=-85^\circ\text{C}$ ermittelt, die M(T)-Proben jedoch bei $T=-90^\circ\text{C}$ getestet, d.h. die Abweichungen liegen im akzeptablen Bereich. Das Beremin-Modell [37] hingegen gibt die gemäß dem Mastercurve-Konzept für diesen Probentyp vorhergesagte Versagenswahrscheinlichkeit im unteren und mittleren Lastbereich mit guter Genauigkeit wieder, unterschätzt die Spaltbruchwahrscheinlichkeit im oberen Lastbereich jedoch deutlich.

Wendet man die betrachteten Modelle auf die CR(B)-Proben an (siehe Abb. 137), so überschätzt das Beremin-Modell [37] den Anstieg der Bruchwahrscheinlichkeit mit steigender Last, während das erweiterte Modell [50] den Anstieg mit verbesserter Genauigkeit wiedergibt, jedoch im unteren Lastbereich konservativere Vorhersagen liefert. Demgegenüber beschreibt das mikromechanisch basierte Modell den Verlauf der Spaltbruchwahrscheinlichkeit der CR(B)-Proben im gesamten Lastbereich mit sehr guter Genauigkeit.

Insgesamt zeigt sich für die erweiterten Modelle ein im Vergleich zum Beremin-Modell [37] reduzierte Probengeometrieabhängigkeit der Material- bzw. Modellparameter, wobei das mikromechanisch basierte erweiterte Modell gegenüber dem erweiterten Modell [50] nochmals verbesserte Ergebnisse liefert.

In Abb. 138 sind die verwendeten Material- bzw. Modellparameter der betrachteten lokalen Spaltbruchmodelle angegeben.

	C, C_0 [-]	C_{fr1} [MPa]	C_{fr2} [MPa ⁻¹]	C_{tr1} [μmMPa ^{2.9}]	C_{tr2} [μm ⁻¹ MPa ^{-4.6}]	a_n [-]	m [-]	σ_u [MPa]	σ_{th} [MPa]
BER	-	-	-	-	-	-	31	3730	1500
EW	0.012	-	-	-	-	1.2	-	1500	1500
MB	18	45000	0.0009	1.2	0.0001	-	-	2000	1500

Abb. 138:
Verwendete Modell- bzw.
Materialparameter der be-
trachteten Spaltbruchmodelle

6.4 Zusammenfassung und Diskussion

Die Ergebnisse der Anwendung des in dieser Arbeit vorgeschlagenen mikromechanisch basierten erweiterten Spaltbruchmodells auf verschiedene Bruchmechanikexperimente an Standard- und Spezialproben zeigen das vorhandene Potenzial des Modells. Das mikromechanisch basierte Spaltbruchmodell erlaubt eine für praktische Anwendungen ausreichend genaue (ggf. leicht konservative) Berechnung der Versagenswahrscheinlichkeiten verschiedenster Typen von Bruchmechanikproben mit einem einzigen Parametersatz, wobei im Rahmen dieser Studie nicht alle vorhandenen Parameter angepasst wurden, d.h. es besteht grundsätzlich weiteres Optimierungspotenzial. Die angestrebte Übertragbarkeit (Geometrieunabhängigkeit) der Material- bzw. Modellparameter wird demnach erreicht. Eine umfangreiche Parameterstudie und die Entwicklung einer auf das Modell abgestimmten Anpassungsstrategie für die Material- bzw. Modellparameter

sowie die Anwendung auf weitere Probentypen und Bauteile sollen im Rahmen zukünftiger Studien erfolgen.

Validierung und vergleichende
Anwendung

Abschließend wurde ein Vergleich des mikromechanisch basierten erweiterten Spaltbruchmodells mit bestehenden Ansätzen vorgenommen. Zum Vergleich herangezogen wurden dabei das dreiparametrische Beremin-Modell (Beremin [18], Gao et al. [37]), sowie das erweiterte Spaltbruchmodell von Hohe et al. ([49], [50]) in der direkten Formulierung. Insgesamt wird mit den erweiterten Modellen bei gleichzeitiger Anpassung der Material- bzw. Modellparameter an die Bruchwahrscheinlichkeitskurven von tief gerissenen SE(B)-Proben ($a/W=0.52$) und Kurzriss-SE(B)-Proben ($a/W=0.13$) eine im Vergleich zum Beremin-Modell verbesserte Anpassungsqualität erreicht. Dies ist ein klarer Hinweis darauf, dass für die erweiterten Modelle eine bessere Übertragbarkeit der Material- bzw. Modellparameter vorliegt. Genauere Untersuchungen hinsichtlich der Geometrieunabhängigkeit der Material- bzw. Modellparameter durch die anschließende Übertragung der ermittelten Parametersätze auf andere Arten von Bruchmechanikproben (CR(B)-Proben und M(T)-Proben) bestätigen diese Beobachtung. Dabei erzielt das mikromechanisch basierte erweiterte Modell gegenüber dem erweiterten Modell nochmals verbesserte Ergebnisse.

Es bleibt anzumerken, dass eine Parameteranpassung unter Verwendung von zwei Probentypen mit unterschiedlichen Spannungszuständen im Rissfrontbereich (Spannungsmehrachsigkeit) durchaus auch für das mikromechanisch basierte erweiterte Modell sinnvoll ist, zumeist ist jedoch die Anpassung an einen Probentyp (z.B. SE(B) $a/W=0.5$) ausreichend (z.B. bei Anwendung der Parameter für die Berechnung der Versagenswahrscheinlichkeit für Körper mit kurzen Rissen, wie sie oft in Bauteilen vorliegen).

Abschließend noch ein Anmerkung hinsichtlich der Problematik der Streuung der Feldgrößen für ein Volumenelement von RVE-Größe im Vergleich zu der Streuung der Feldgrößen für ein Volumenelement entsprechend der FE-Elementgröße: Wenn die Elemente im Rissfrontbereich eine Größe besitzen, die von der RVE-Größe abweicht, kann eine Skalierung über die Modellparameter erfolgen, d.h. auch, dass streng genommen die Parameter elementgrößenabhängig sein müssten (praktisch nicht umsetzbar). Die Anwendung des Modells zeigt jedoch, dass die Bestimmung eines Parametersatzes ausreicht. Die Parameter sind dann als Parameter für eine mittlere bzw. effektive Elementgröße interpretierbar. Eine Möglichkeit zur Umgehung der Größenproblematik bezüglich des Kontrollvolumenelements ist die Verwendung eines nichtlokalen Spannungsmaßes, d.h. die Feldgrößen werden über mehrere FE-Elemente gemittelt, so dass das jeweils betrachtete Kontrollvolumen eine konstante Größe aufweist.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird auf der Basis mikromechanischer Untersuchung zur Spaltbruchauslösung ein Vorschlag für ein erweitertes lokales Spaltbruchmodell zur Bewertung der Bruchwahrscheinlichkeit von Anlagenkomponenten aus ferritisch-bainitischen Werkstoffen unter Berücksichtigung komplexer mehraxialer Spannungszustände erarbeitet und verifiziert. Das Modell behandelt die beiden Vorgänge der Entstehung potentiell Spaltbruch auslösender Mikrorisse und deren Instabilität getrennt, wobei die Mikrorissentstehung in zwei Phasen unterteilt wird, den Partikelbruch und den Übergang des durch Partikelbruch entstandenen Mikrorisses in die umgebende ferritische Matrix.

Die durchgeführten experimentellen Untersuchungen dienten sowohl der Ermittlung der mechanischen Eigenschaften als auch der stochastischen Beschreibung des Aufbaus der Mikrostruktur des Werkstoffs. Versuche an Rundzugroben lieferten die Fließkurven des Werkstoffs. Diese Fließkurven wurden als Eingangsgrößen für die Simulation der Bruchmechanikversuche benötigt. Für eine geeignete Modellierung von Repräsentativen Volumenelementen (RVE) der Werkstoffmikrostruktur war eine statistische Charakterisierung der Mikrostruktur (Kornstruktur und Partikel) erforderlich. Diese erfolgte durch die Untersuchung von Gefügeschliffen mittels metallographischer Methoden. Die EBSD-Analyse lieferte sowohl morphologische als auch kristallographische Informationen bezüglich der Kornstruktur. Die Körner weisen eine erkennbare Streckung auf, so dass zur genauen Beschreibung der Kornstruktur neben der Größenverteilung auch die Formverteilung der Körner berücksichtigt werden sollte. Hinsichtlich der Größenverteilung ist zu beachten, dass die Korngrößen nicht normalverteilt sind. Die Größenverteilung kann durch eine logarithmische Normalverteilung abgebildet werden. Im Hinblick auf die kristallographischen Eigenschaften der Kornstruktur muss besonders der Fehlorientierung zwischen den einzelnen Körnern Beachtung geschenkt werden. Eine realitätsnahe Fehlorientierungsverteilung erlaubt lediglich eine geringe Bandbreite häufig auftretender Werte. Die aus der REM-Analyse erhaltenen morphologischen Informationen bezüglich der Partikel machen deutlich, dass die oftmals im Rahmen von local approach Formulierungen angenommenen kugelförmigen Partikel im betrachteten Werkstoff nur sehr selten auftreten. Daher sollten die Partikel als Ellipsoide modelliert werden. Für die Approximation der Größenverteilung der Partikel kann eine Weibullverteilung verwendet werden.

Die durchgeführten Finite-Elemente-Simulationsrechnungen umfassen sowohl die makroskopische (Bruchmechanikexperimente) als auch die mikroskopische (RVE der Werkstoffmikrostruktur) Größenskala. Die Auswertung der Simulationen der Bruchmechanikexperimente lieferte typische Lastgeschichten (in Form von Spannungs- und Dehnungsverläufen) an Orten innerhalb des Bereichs der im Rahmen der experimentellen Untersuchungen fraktographisch bestimmten Bruchursprünge. Diese lokalen Lastgeschichten konnten anschließend als Randbedingungen für die mikromechanischen Simulationsrechnungen auf Basis von RVE der Werkstoffmikrostruktur verwendet werden. Das Ziel dieser mikromechanischen Simulationsrechnungen war ein erweitertes Verständnis der bei der Spaltbruchauslösung stattfindenden Vorgänge. Dazu wurden sowohl die erforderlichen Bedingungen für den Partikelbruch als auch die Voraussetzungen für einen erfolgreichen Übergang des durch Partikelbruch entstandenen Mikrorisses in die umgebende duktile Matrix unter Verwendung einer FE-Submodelltechnik untersucht. Zusammen mit der aus den RVE-Simulationsrechnungen bekannten Streuung der Feldgrößen an den Korngrenzen bei gegebenem effektiven Beanspruchungszustand (Lokale Lastgeschichte) kann auf diese Weise die Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch und erfolgreichen Rissübergang in die Matrix (in Abhängigkeit von den vorlie-

genden Feldgrößen und den Materialeigenschaften) näherungsweise berechnet werden. Die Verwendung des Griffith-Kriteriums ermöglicht zudem die Bestimmung der Wahrscheinlichkeit für eine mögliche Instabilität der so entstandenen Mikrorisse.

Hinsichtlich der Streuung der Feldgrößen an den Korngrenzen zeigt sich für alle betrachteten Feldgrößen eine erkennbare Streuung (beschreibbar durch Normalverteilungen) um den jeweiligen Mittelwert (RVE-Effektivwert). Die stärkste Streuung liegt für die Hauptdehnung ε_1 vor, Spannungsmehrachsigkeit h und größte Hauptspannung σ_1 weisen geringere relative Standardabweichungen auf. Insgesamt bleibt festzuhalten, dass bei der Berechnung der Versagenswahrscheinlichkeit eines Kontrollvolumens die Streuung der Feldgrößen berücksichtigt werden sollte.

Die Untersuchungen zur Mikrorissentstehung (Partikelbruch und anschließender Rissübergang in die Matrix als notwendige Bedingung für die Spaltbruchinitiierung) wurden in zwei Schritten durchgeführt. Im ersten Schritt wurde der Partikelbruch betrachtet. Unter der Annahme, dass der Partikelbruch eintritt, wenn die effektive größte Hauptspannung im Partikel die vorliegende Festigkeit übersteigt, kann die Entwicklung der Wahrscheinlichkeit für Partikelbruch anhand der Entwicklung dieser Partikelspannung σ_P beschrieben werden. Dabei wurde davon ausgegangen, dass in dem im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Temperaturbereich (unterer Übergangsbereich der Bruchzähigkeit) die Partikelbeanspruchung im Wesentlichen aus einem Fasermechanismus resultiert und Versetzungsaufstauungen nur eine untergeordnete Rolle spielen. Die Ergebnisse zeigen, dass hinsichtlich der Feldgrößen neben der Matrixdehnung ε_{I-M} auch die Matrixspannung (größte Hauptspannung) σ_{I-M} einen gewissen Einfluss auf die Partikelspannung σ_P besitzt. Weiterhin sind im realitätsnahen Fall nicht kugelförmiger Partikel die Partikelform (Streckung s) sowie die Partikelorientierung α (Abweichung der Richtung der langen Halbachse des Partikels von der Richtung der effektiven maximalen Hauptspannung im RVE) von großer Bedeutung. Während eine größere Streckung zu einer deutlich höheren Partikelspannung führt, folgt aus einer größeren Orientierungsabweichung zur Hauptlastichtung eine starke Reduzierung der Partikelspannung.

Im zweiten Schritt der Untersuchungen zur Mikrodefektentstehung wurde der Rissübergang des im spröden Partikel entstandenen Mikrorisses in die umgebende duktile Matrix mittels dynamischer Simulationsrechnungen untersucht. Typischerweise wird der Riss nach der Entstehung im Karbid beschleunigt und dann am Interface Partikel-Matrix stark abgebremst, gegebenenfalls bis zum Stillstand. Arretiert der Riss nicht am Interface, so wird er zunächst wieder beschleunigt und anschließend (abhängig von den vorliegenden Bedingungen) entweder bis zum Stillstand bzw. Arrest abgebremst oder weiter durch die Matrix getrieben. Der gesamte Risswiderstand im Ferrit beinhaltet dabei die Beiträge von plastischer Dissipation und Kohäsivenergie. Mehr Dissipation im Ferrit bedeutet, dass weniger der freigesetzten Verzerrungsenergie zur Überwindung der Bruchzähigkeit zur Verfügung steht. Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen machen deutlich, dass der erfolgreiche Rissübergang (d.h. kein sofortiges Abstumpfen bzw. Arretieren des im Partikel entstandenen Risses nach Überwindung des Interface Partikel-Matrix) einen kritischen Partikelmindestdurchmesser D_k erfordert, der vom zum Zeitpunkt des Partikelversagens vorliegenden Matrixzustand abhängig ist. Die relevanten Feldgrößen sind hierbei die größte Matrixhauptspannung σ_{I-M} sowie die Matrixspannungsmehrachsigkeit h_M . Sowohl eine hohe Matrixspannung σ_{I-M} als auch eine hohe Matrixspannungsmehrachsigkeit h_M erleichtern den erfolgreichen Rissübergang vom Partikel in die Matrix. Der Einfluss von h_M kann dadurch erklärt werden, dass eine hohe Spannungsmehrachsigkeit die plastische Deformation (und somit auch die plastische Dissipation) erschwert. Auch der Einfluss der Fließspannung und der Verfestigung des Matrixmaterials auf den kritischen Partikeldurchmesser D_k (bei gegebenem Spannungszustand der Matrix führt eine erhöhte Fließspannung und/oder Verfestigung zu einer reduzierten kritischen Partikelgröße) kann so erklärt werden. Weiterhin ist auch die jeweils vorliegende Partikelspannung σ_P von großer Bedeutung. Eine Erhöhung der

Partikelspannung führt zu einer erkennbaren Reduzierung des kritischen Partikel-durchmessers. Ein möglicher Grund für diesen Effekt ist die Zunahme der frei werden- den elastischen Verzerrungsenergie bei Partikelbruch. Wenn die Partikelgröße ab- nimmt, reduziert sich auch die im Partikel gespeicherte Verzerrungsenergie, so dass für sehr große Streckungen bzw. dünne Partikel gegebenenfalls ein Grenzwert für D_k er- reicht wird. Es bleibt anzumerken, dass der hier berechnete kritischen Partikelmindest- durchmesser D_k denn erforderlichen Durchmesser für die Entstehung eines potenziell kritischen Mikrodefekts (Mikroriss statt Pore) darstellt, der zum Spaltbruchversagen führen kann, wenn die dazu erforderlichen Bedingungen über einen größeren Bereich (RVE statt Submodell) vorliegen. Als Kriterium für die erforderlichen Bedingungen für die finale Defektinstabilität (Spaltbruchinitiierung und Ausbreitung) kann das Griffith- Kriterium verwendet werden.

Auf der Basis dieser Erkenntnisse wurde ein erweitertes, mikromechanisch basiertes Spaltbruchmodell formuliert. Dieses mikromechanisch fundierte (jedoch auf der makro- skopischen Ebene definierte) erweiterte Spaltbruchmodell basiert auf drei Termen, die die verschiedene Phasen der Spaltbruchauslösung in ferritisch-bainitischen Stählen (Par- tikelbruch, Übergang des durch Partikelbruch entstandenen Mikrorisses vom Partikel in die umgebende duktile Matrix, Instabilität des so entstandenen Mikrodefekts) erfassen. Dabei werden neben den für die Spaltbruchauslösung relevanten mikrostrukturellen Eigenschaften (Matrixmaterialverhalten, vorliegende Partikelpopulation) auch die loka- len Streuungen der Feldgrößen (in der Umgebung der Korngrenzen) bei jeweils gege- bener Effektivbelastung der betrachteten Kontrollvolumenelemente berücksichtigt.

Der erste Term beinhaltet die Beschreibung der Verteilung der Partikelbeanspruchung als Funktion der Matrixdehnung und der Matrixspannung sowie einiger Materialpara- meter, welche den Einfluss der Verteilungen der lokalen Partikel- und Materialkonstella- tionen auf die Partikelbeanspruchung beschreiben. Durch Gegenüberstellung der Ver- teilung der Partikelbeanspruchung und der Verteilung der Partikelfestigkeit erhält man damit die Wahrscheinlichkeit für den Partikelbruch. Die zusätzlich Berücksichtigung der Matrixspannung sowie der im Allgemeinen nichtlineare Einfluss der Matrixdehnung führen zusammen mit den sowohl das Matrixmaterialverhalten als auch die Partikelpo- pulation beschreibenden Materialparametern zu einer im Vergleich zu den bestehen- den Modellen deutlich komplexeren Beschreibung der ersten Phase der Mikrodefek- tentstehung. Der Übergang des Mikrodefekts vom gebrochenen Partikel in die umge- bende Matrix stellt die zweite Phase der Mikrodefektentstehung dar. Der entsprechen- de Term beinhaltet die Beschreibung der Verteilung der kritischen Partikelgröße als Funktion der Matrixspannung und der Spannungsmehrsachsigkeit sowie weiterer Mate- rialparameter, welche den Einfluss der Verteilungen der Partikelspannung sowie der lokalen Materialeigenschaften auf den Rissübergang beschreiben. Durch Gegenüber- stellung der Verteilung der kritischen Partikelgröße und der vorhandenen Partikelgrö- ßenverteilung erhält man damit die Wahrscheinlichkeit für den Rissübergang in die ferritische Matrix. Der Rissübergang in die Matrix wird in keinem der bestehenden Mo- delle explizit durch einen eigenständigen Term berücksichtigt. Der dritte Term des mik- romechanisch basierten Spaltbruchmodells beschreibt schließlich die mögliche Instabili- tät des entstandenen Mikrodefekts basierend auf dem Griffith-Kriterium. Die erforderli- che Verteilungsfunktion für die Mikrodefektgröße kann dabei durch eine Weibull- Verteilung dargestellt werden. Deren Parameter sind abhängig von den Ergebnissen des zweiten Terms. Demgegenüber sind bei den bestehenden Modellen die Parameter der angenommenen Verteilungsfunktion feste Bestandteile der Materialparameter. Die explizite Berücksichtigung des Rissübergangs in die Matrix erlaubt einen differenzierte- ren Einfluss der Lastgeschichte.

Zur Validierung des vorgeschlagenen mikromechanisch basierten lokalen Spaltbruch- modells und zum Vergleich mit anderen lokalen Spaltbruchmodellen wurde das Modell auf die zur Verfügung stehende experimentelle Datenbasis an bruchmechanischen

Standardproben und Kreuzbiegeproben angewendet. Die Ergebnisse der Anwendung des im Rahmen dieser Arbeit vorgeschlagenen mikromechanisch basierten erweiterten Spaltbruchmodells auf verschiedenen Bruchmechanikexperimenten an Standard- und Spezialproben zeigen das vorhandene Potenzial des Modells. Das mikromechanisch basierte Spaltbruchmodell erlaubt eine für praktische Anwendungen ausreichend genaue (ggf. leicht konservative) Berechnung der Versagenswahrscheinlichkeiten verschiedenster Typen von Bruchmechanikproben mit einem einzigen Materialparameter, wobei im Rahmen dieser Studie nicht alle vorhandenen Parameter angepasst wurden, d.h. es besteht grundsätzlich weiteres Optimierungspotenzial. Die angestrebte Übertragbarkeit (Geometrieunabhängigkeit) der Material- bzw. Modellparameter wird demnach erreicht.

Abschließend wurde ein Vergleich des mikromechanisch basierten erweiterten Spaltbruchmodells mit bestehenden Ansätzen vorgenommen. Zum Vergleich herangezogen wurden dabei das dreiparametrische Beremin-Modell [37], sowie das erweiterte Spaltbruchmodell von Hohe et al. [50] in der direkten Formulierung. Insgesamt wird mit den erweiterten Modellen bei gleichzeitiger Anpassung der Material- bzw. Modellparameter an die Bruchwahrscheinlichkeitskurven von tief gerissenen SE(B)-Proben ($a/W=0.52$) und Kurzriss-SE(B)-Proben ($a/W=0.13$) eine im Vergleich zum Beremin-Modell verbesserte Anpassungsqualität erreicht. Dies ist ein klarer Hinweis darauf, dass für die erweiterten Modelle eine bessere Übertragbarkeit der Material- bzw. Modellparameter vorliegt. Genauere Untersuchungen hinsichtlich der Geometrieunabhängigkeit der Material- bzw. Modellparameter durch die anschließende Übertragung der ermittelten Parametersätze auf andere Arten von Bruchmechanikproben (CR(B)-Proben und M(T)-Proben) bestätigen diese Beobachtung. Dabei erzielt das mikromechanisch basierte erweiterte Modell gegenüber dem erweiterten Modell nochmals verbesserte Ergebnisse. Es bleibt anzumerken, dass eine Parameteranpassung unter Verwendung von zwei Probentypen mit unterschiedlichen Spannungszuständen im Rissfrontbereich (Spannungsmehrachsigkeit) durchaus auch für das mikromechanisch basierte erweiterte Modell sinnvoll ist, zumeist ist jedoch die Anpassung an einen Probentyp (z.B. SE(B) $a/W=0.5$) ausreichend (z.B. bei Anwendung der Parameter für die Berechnung der Versagenswahrscheinlichkeit für Körper mit kurzen Rissen, wie sie oft in Bauteilen vorliegen).

Grundsätzlich bleibt anzumerken, dass auf Basis der im Rahmen dieser Arbeit erzielten Ergebnisse hinsichtlich der mikromechanischen Vorgänge bei der Spaltbruchauslösung auch andere Modellformulierungen als die hier vorgeschlagene möglich sind.

Offene Punkte für zukünftige Studien sind die Einflüsse von Entlastung und Wiederbelastung sowie thermisch transienten Lastgeschichten auf die Partikelbeanspruchung. Auch das Verhalten arretierter Mikrorisse bei Weiterbelastung kann noch genauer untersucht werden. Zudem ist der Widerstand von Korngrenzen auf die Rissausbreitung seit längerem Gegenstand der Forschung. Weiterhin treten im Interface Partikel-Matrix hohe Schubspannungen auf und eine plastische Zone wandert am Partikel entlang. Die somit mögliche Defektentstehung durch eine Ablösung der Matrix vom Partikel wird im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt, soll aber in zukünftigen Studien untersucht werden. Im Hinblick auf die mögliche Defektinstabilität bleibt anzumerken, dass das hier verwendete Griffith-Kriterium die vereinfachende Annahme kreisförmiger, senkrecht zur Hauptlastrichtung orientierter Defekte impliziert. Ein erweiterter Ansatz für nicht kreisförmige Defekte soll daher für zukünftige Modellformulierungen geprüft werden. Gleiches gilt für eine „Dehnungskorrektur“ des Griffith-Kriteriums. Dabei wird ein Defekt mit dem Radius r in der elastisch-plastischen Matrix durch einen fiktiven Defekt mit einem Radius $r_f(\epsilon_e^{pl}) < r$ in einer elastischen Matrix ersetzt. So kann die Reduzierung der Risstriebskraft durch plastische Dissipation näherungsweise berücksichtigt werden. Bei größeren plastischen Dehnungen ist u.U. die Unabhängigkeit einzelner Fehlerereignisse nicht mehr gegeben. Es kann zur Interaktion von Defekten (bei hinrei-

chend geringem Abstand) kommen: bestehende Defekte beeinflussen das Bruchverhalten von Partikeln in ihrer Nähe oder das Ausbreitungsverhalten von gerade entstehenden Defekten in ihrer Umgebung. Ähnliches gilt im Falle des Vorhandenseins von Partikelclustern. Die Berücksichtigung solcher Effekte in einem Spaltbruchmodell erfordert weitere Studien.

.....
Zusammenfassung und Ausblick
.....

Eine umfangreiche Parameterstudie und die Entwicklung einer auf das Modell abgestimmten Anpassungsstrategie für die Material- bzw. Modellparameter sowie die Anwendung auf weitere Probentypen und Bauteile sollen im Rahmen zukünftiger Arbeiten erfolgen. Weiterer Forschungsbedarf besteht hinsichtlich der Anwendung des Modells auf Belastungssituationen, bei denen dem finalen Sprödbrechereignis eine signifikante duktile Risserweiterung oder eine exzessive globale Plastifizierung der betrachteten Komponente vorangeht.

Literaturverzeichnis

- [1] ABAQUS Manuals, *Version 6.10*, Dassault Systems Simulia Corp., Providence, Rhode Island, 2010.
- [2] ASME Boiler and Pressure Vessel Code, *Sec. III, Article NB 2300*, American Society of Mechanical Engineers, New York 1995.
- [3] ASME Boiler and Pressure Vessel Code, *Sec. XI, Article A 4000, Material properties*, American Society of Mechanical Engineers, New York 1995.
- [4] ASTM Standard E 399-96: *Standard test method for plane strain fracture toughness of metallic materials*, Annual Book of ASTM Standards, American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1996.
- [5] ASTM Standard E 1921-05: *Standard test method for determination of reference temperature T_0 for ferritic steels in the transition range*, American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 2005.
- [6] DIN EN 10 002-1: *Metallische Werkstoffe - Zugversuch - Teil 1: Prüfverfahren bei Raumtemperatur*, Beuth Verlag, Berlin 2001.
- [7] KTA 3201-2: *Komponenten des Primärkreises von Leichtwasserreaktoren, Teil 2*, Kerntechnischer Ausschuss, Bonn 1997.
- [8] Anderson, T. L.: *Fracture Mechanics – Fundamentals and Application*, CRC Press, Boca Raton, 2005.
- [9] Asaro, R. and Rice, J.R.: *Strain localization in ductile single crystals*, J. Mech. Phys. Sol. **25** (1977) 309-338.
- [10] Asaro, R.: *Micromechanics in Crystals and Polycrystals*, Adv. Appl. Mech. **23** (1983) 1-115.
- [11] Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D., Cailletaud, G.: *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. modell*, Int. J. Plast. **17** (2001) 513-536.
- [12] Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D., Cailletaud, G.: *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2: Results*, Int. J. Plast. **17** (2001) 537-563.
- [13] Bass, B.R., Wintle, J., Hurst, R.C. and Taylor, N.: *NESC-I Project Overview*, European Commission, JRC Petten 2001.
- [14] Bathe, K. J.: *Finite-Elemente-Methoden*, Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- [15] Becker, E. und Bürger, W.: *Kontinuumsmechanik*, Teubner-Verlag, Leipzig, 1975.
- [16] Berdin, C., Besson, J., Bugat, S., Desmorat, R., Feyel, F., Forest, S., Lorentz, É., Maire, É, Pardoën, T., Pineau, A., Tanguy, B.: *Local approach to fracture*, Les Presses de l'École des Mines, Paris 2004.
- [17] Beremin, F.M.: *Cavity formation from inclusions in ductile fracture of A508 steel*, Met. Trans. **12A** (1981) 723-731.
- [18] Beremin, F.M.: *A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel*, Met. Trans. **14A** (1983) 2277-2287.
- [19] Bernauer, G., Brocks, W., Schmitt, W.: *Modifications of the Beremin model for cleavage fracture in the transition region of a ferritic steel*, Eng. Frac. Mech. **64** (1999) 305–325.

- [20] Bertram, A., Böhlke, T., Kraska, M.: *Numerical simulation of deformation induced anisotropy of polycrystals*, *Comp. Mat. Sci.* **9** (1997) 158-167.
- [21] Biggin, S. and Dingley, D.J.: *A general method for locating the x-ray source in Kossel diffraction*, *J. Appl. Cryst.* **10** (1977) 376-385.
- [22] Blumenauer, H. und Pusch, G.: *Technische Bruchmechanik*, Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1993.
- [23] Bordet, S.R., Karstensen, A.D., Knowles, D.M. and Wiesner, C.S.: *A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part I: Model presentation*, *Eng. Frac. Mech.* **72** (2005) 435-452.
- [24] Bordet, S.R., Karstensen, A.D., Knowles, D.M. and Wiesner, C.S.: *A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part II: Application to an offshore structural steel*, *Eng. Frac. Mech.* **72** (2005) 453-474.
- [25] Bowen, P., Druce, S.G. and Knott, J.F.: *Effects of microstructure on cleavage fracture in pressure vessel steel*, *Acta Metall.* **34** (1986) 1121-1131.
- [26] Brahme, A., Alvi, M.H., Saylor, D., Fridy, J., Rollet, A.D.: *3D reconstruction of microstructure in a commercial purity aluminum*, *Scrip. Mat.* **55** (2006) 75-80.
- [27] Bunge, H. J.: *Texture Analysis in Material Sciences*, 2nd edn., Butterworth Publisher, London 1982.
- [28] Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Mounoury, V., Quilici, S.: *Some elements of microstructural mechanics*, *Comp. Mat. Sci.* **27** (2003) 351-374.
- [29] Chen, J.H., Wang, Q., Wang, G.Z. and Li, Z.: *Fracture behaviour at a crack tip – a new framework for cleavage mechanism of steel*, *Acta Mat.* **51** (2003) 1841-1855.
- [30] Curry, D.A. and Knott, J.F.: *Effects of microstructure on cleavage fracture stress in steel*, *Metal. Sci.* **12** (1978) 511-514.
- [31] Diard, O., Leclercq, S., Rousselier, G., Cailletaud, G.: *Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity - Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries*, *Int. J. Plast.* **21** (2005) 691-722.
- [32] Du, Z.Z. and Hancock, J.W.: *The effect of non-singular stresses on crack-tip constraint*, *J. Mech. Phys. Solids* **39** (1991) 555-567.
- [33] Eisele, U., Alsmann, U., Elsäßer, K. und Seidenfuss, M.: *Untersuchungen zum WarmPrestress Effekt*, Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben VGB Nr. SA AT 9/96, MPA Stuttgart, Stuttgart 1996.
- [34] Eshelby, J. D.: *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems*, *Proceedings of the Royal Society* **A241** (1957) 376-396.
- [35] Faleskog, J., Kroon, M. and Öberg, H.: *A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale – parameter estimation and predictions of stationary crack experiments*, *Eng. Frac. Mech.* **71** (2004) 57-79.
- [36] Gao, X. and Dodds, R.H.: *Constraint effects on the ductile-to-brittle transition temperature of ferritic steels: A Weibull stress model*, *Int. J. Frac.* **102** (2001) 43-69.
- [37] Gao, X., Dodds, R.H., Tregoning, R.L., Joyce, J.A. and Link, R.E.: *A Weibull stress model to predict cleavage fracture in plates containing surface cracks*, *Fatigue Frac. Eng. Mat. Struct.* **22** (1999) 481-493.
- [38] Gottscheine, G.: *Physikalische Grundlagen der Metallkunde*, 3. Auflage, Springer Verlag Berlin, Heidelberg 2007.
- [39] Griffith, A.A.: *The phenomena of rupture and flow in solids*, *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **A221** (1921) 163-198.

- [40] Groeber, M., Ghosh, S., Uchic, M., Dimiduk, D.: *A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 2: Synthetic structure generation*, Acta Mat. **56** (2008) 1274-1287.
- [41] Gross, D. und Seelig, T.: *Bruchmechanik: Mit einer Einführung in die Mikromechanik*, Springer-Verlag, Berlin, 2007.
- [42] Gurland, J.: *Observations on the fracture of cementite particles in a spheroidized 1.05% C steel deformed at room temperature*, Acta Metall. **20** (1972) 735-741.
- [43] Gurson, A.L.: *Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth. Part I – Yield criteria and flow rules for porous ductile media*, J. Eng. Mat. Tech. **99** (1997) 2-15.
- [44] Hahn, G.T.: *The influence of microstructure on brittle fracture toughness*, Metall. Trans. **15A** (1984) 947-959.
- [45] Hardenacke, V. and Hohe, J.: *Assessment of space division strategies for generation of adequate computational models for solid foams*, Int. J. Mech. Sci. **52** (2010) 1772-1782.
- [46] Hebel, J., Hohe, J., Friedmann, V. and Siegele, D.: *Experimental and numerical analysis of in-plane and out-of-plane crack tip constraint characterization by secondary fracture parameters*, Int. J. Frac. **146** (2007) 173-188.
- [47] Hertzberg, R. W.: *Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials*, John Wiley and Sons Inc., New York, 1996.
- [48] Hill, R. and Rice, J.R.: *Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain*, J. Mech. Phys. Sol. **20** (1972) 401-413.
- [49] Hohe, J., Hardenacke, V., Friedmann, V., Sguaizer, Y., Burdack, M., Möser, M., Luckow, S. und Siegele, D.: *Lokale probabilistische Konzepte zur Sprödbruchbewertung bei mehrachsiger äußerer Belastung*, Abschlussbericht zum BMWi-Vorhaben 1501320, Bericht S9/2009, Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg 2009.
- [50] Hohe, J., Hardenacke, V., Luckow, S. and Siegele, D.: *An enhanced probabilistic model for cleavage fracture assessment accounting for local constraint effects*, Eng. Frac. Mech. **77** (2010) 3573-3591.
- [51] Hohe, J., Hebel, J., Friedmann, V. and Siegele, D.: *Probabilistic failure assessment of ferritic steels using the master curve approach including constraint effects*, Eng. Frac. Mech. **74** (2007) 1274-1292.
- [52] Hohe, J., Tanguy, B., Friedmann, V., Stöckl, H., Böhme, W., Varfolomeyeva, V., Hebel, J., Burdack, M., Fehrenbach, C., Schüler, J., Sguaizer, Y. und Siegele, D.: *Kritische Überprüfung des Mastercurve-Ansatzes im Hinblick auf die Anwendung bei deutschen Kernkraftwerken*, Abschlussbericht zum BMWi-Vorhaben 1501239, Bericht S8/2004, Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg 2005.
- [53] Hohe, J., Wenck, J., Friedmann, V. and Siegele, D.: *Assessment of the role of micro defect nucleation in probabilistic modeling of cleavage fracture*, Eng. Frac. Mech. **75** (2008) 3306-3327.
- [54] Huang, Y.: *A User-Material Subroutine Incorporating Single Crystal Plasticity in ABAQUS*, Harvard University, Cambridge, 1991.
- [55] Hutchinson, J.W.: *Singular behavior at the end of a tensile crack in a hardening material*, J. Mech. Phys. Sol. **16** (1968), 13-31.
- [56] Irwin, G.R. and Zhang, X.J.: *Cleavage behavior in structural steels*, J. Mech. Phys. Solids **32** (1995) 2447-2456.

- [57] Jikov, A., Lidbury, D. and James, P.: *Assessment of Local approach methods for predicting end-of-life toughness of RPV steels*, Proc. of ASME 2011 PVP Conference (Baltimore, 2011).
- [58] Kantidis, E., Marini, B. and Pineau, A.: *A criterion for intergranular brittle fracture of a low alloy steel*, Fatigue Frac. Eng. Mat. Struct. **17** (1994) 619-633.
- [59] Kavishe, F.P.L. and Baker, T.J.: *Cleavage fracture in an eutectoid and hypoeutectoid steel*, Fracture Control of Engineering Structures (van Elst, H.C. and Bakker, A. eds.), Proc. 6th Europ. Conf. Fracture (Amsterdam 1986) 1721-1735.
- [60] Keh, A. S. and Nakada, Y.: *Plasticity of iron single crystals*, Can. J. Phys. **45** (1967) 1101-1120.
- [61] Keim, E., Hümmer, M., Hoffmann, H., Nagel, G., Küster, K., König, G., Ilg, U., Wiedera, M. und Rebsamen, D.: Ergebnisse von Kleinproben und Anwendung von Modellansätzen zur bruchmechanischen Bewertung der RDB-Integrität, Tagungsband 34. MPA-Seminar "Werkstoff- & Bauteilverhalten in der Energie- & Anlagentechnik" (Stuttgart, 09./10.10.2008), 53.1-53-23.
- [62] Knott, J. F.: *Micromechanisms of Fracture and the Fracture Toughness of Engineering Alloys*. Proc. Of 4th International Conference on Fracture, ICF4 (Waterloo, 1977).
- [63] Kroon, M. and Faleskog, J.: *A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale - influence of material parameters and constraint*, Int. J. Frac. **118** (2002) 99-118.
- [64] Kroon, M. and Faleskog, J.: *Micromechanics of cleavage fracture initiation in ferritic steels by carbide cracking*, J. Mech. Phys. Solids **53** (2005) 171-196.
- [65] Kroon, M. and Faleskog, J.: *Influence of crack deflection into the carbide/ferrite interface on cleavage fracture initiation in ferritic steels*, Mech. Mat. **40** (2008) 695-707.
- [66] Kucharczyk, P. et al.: *Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Bewertungskonzepten zum Versagensverhalten ferritischer Stähle im Übergangsbereich - Teilvorhaben: Entwicklung eines dehnungsbasierten Kriteriums zur Versagensvorhersage im oberen Übergangsbereich und in der Hochlage*, Abschlussbericht RS 1501390A, Institut für Eisenhüttenkunde Aachen, IEHK Aachen, 2013.
- [67] Kumar, V., German, M. and Shih, C.: *An Engineering Approach for Elastic-Plastic Fracture Analysis*, EPRI-NP-1931, Electric Power Research Institute, 1981.
- [68] Kumar, A., Roberts, S.G. and Wilkinson, A.J.: *Low-temperature fracture mechanisms in a spheroidised reactor pressure vessel steel*, Int. J. Frac. **144** (2007) 121-129.
- [69] Landis, C. M., Pardo, T., Hutchinson, J. W.: *Crack velocity dependent toughness in rate dependent materials*, Mech. Mat. **32** (2000) 663-678.
- [70] Laukkanen, A. and Wallin, K.: *Finite element analysis of continuum fields for cleavage fracture evaluation*, VTT Report BTUO 72-051372, 2005.
- [71] Lemaitre, J. and Chaboche J. L.: *Mechanics of Solid Materials*, Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- [72] Lewis, A.C., Suh, C., Stukowski, M., Geltmacher, A.B., Rajan, K., Spanos, G.: *Tracking correlation between mechanical response and microstructure in three dimensional reconstructions of a commercial stainless steel*, Scrip. Mat. **55** (2006) 81-85.
- [73] Lewis, A.C. and Geltmacher, A.B.: *Image-based modeling of the response of experimental 3D microstructure to mechanical loading*, Scrip. Mat. **58** (2008) 575-578.

- [74] Lin, T., Evans, A.G. and Ritchie, R.O.: *A statistical model of brittle fracture by transgranular cleavage*, J. Mech. Phys. Solids **34** (1986) 477-497.
- [75] Lindley, T.C., Oates, G. and Richards, G.E.: *A critical appraisal of carbide cracking mechanisms in ferrite/carbide aggregates*, Acta Metall. **18** (1970) 1127- 1136.
- [76] Link, R.E. Joyce, J.A. and Roe, C.: *An experimental investigation of the effect of biaxial loading on the master curve transition temperature in RPV steels*, Eng. Frac. Mech. **74** (2007) 2824-2843.
- [77] Luckow, S.: *Gestaltung von Kreuzbiegeproben zur Quantifizierung von Spannungsmehrachsigkeitseffekten auf die Bruchzähigkeit*, Bachelorarbeit in Kooperation mit der Fachhochschule Bonn-Rhein-Sieg, Bericht S13/2007, Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg 2007.
- [78] Margolin, B.Z., Gulenko, A.G. and Shvetsova, V.A.: *Probabilistic model for fracture toughness prediction based on the new local fracture criteria*, Int. J. Pres. Ves. Piping **75** (1998) 307-320.
- [79] Margolin, B.Z., Karzov, G.P. and Shvetsova, V.A.: *Brittle fracture of nuclear pressure vessel steels – II. Prediction of fracture toughness*, Int. J. Pres. Ves. Piping **72** (1997) 89-96.
- [80] Margolin, B.Z., Shvetsova, V.A., Gulenko, A.G. and Kostylev, V.I.: *Development of Prometey local approach and analysis of physical and mechanical aspects of brittle fracture of RPV steels*, Int. J. Pres. Ves. Piping. **84** (2007) 320-336.
- [81] Margolin, B.Z., Shvetsova, V.A., Gulenko, A.G. and Kostylev, V.I.: *Prometey local approach to brittle fracture: Development and application*, Eng. Frac. Mech. **75** (2008) 3483-3498.
- [82] Margolin, B.Z., Shvetsova, V.A. and Karzov, G.P.: *Brittle fracture of nuclear pressure vessel steels – I. Local criterion for cleavage fracture*, Int. J. Pres. Ves. Piping **72** (1997) 73-87.
- [83] Matheiu, J., Berveiller, S., Inal, K., Diard, O.: *Microscale modelling of cleavage fracture at low temperatures: influence of heterogeneities at the granular scale*, Fat. Fract. Eng. Mat. Struc. **29** (2006), 725-737.
- [84] Matheiu, J., Diard, O., Inal, K., Berveiller, S.: *A micromechanical interpretation of the temperature dependence of Beremin model parameters for french RPV steel*, J. Nucl. Mat. **406** (2010) 97-112.
- [85] McMahon, C.J. and Cohen, M.: *Initiation of cleavage in polycrystalline iron*, Acta Metall. **13** (1965) 591-604.
- [86] Miodownik, M., Godfrey, A.W., Holm E.A., Hughes, D.A.: *On boundary misorientation distribution functions and how to incorporate them into three-dimensional models of microstructural evolution*, Avt. Mat. **47** (1999) 2661-2668.
- [87] Mudry, F.: *A local approach to cleavage fracture*, Nucl. Eng. Des. **105** (1987) 65-76.
- [88] Odette, G.R., Yamamoto, T., Rathbun, H., He, M., Hribernik, M., Rensman, J.: *Cleavage fracture and irradiation embrittlement of fusion reactor alloys: mechanisms, multiscale models, toughness measurements and implications to structural integrity assessment*, J. Nucl. Mat. **303** (2003) 313-340.
- [89] O'Dowd, N.P.: *Applications of two-parameter approaches in elastic-plastic fracture mechanics*, Eng. Frac. Mech. **52** (1995) 445-465.
- [90] Ortner S., Duff J., Beardsmore D.: *Characterisation of Euro 'A' reference steel for application of EOH model of brittle fracture*, Serco Assurance report SAVEIG/15234, 2005.

- [91] Osipov, N., Gourgues-Lorenzon, A., Cailletaud, G., Diard, O., Marini, B.: *Numerical generation and study of synthetic bainitic microstructures*, Proc. 11th Conf. Matériaux (Dijon 2006) CD-ROM.
- [92] Peirce, D., Shih, C.F. and Needleman, A.: *A tangent modulus method for rate dependent solids*, Comp. Struct. **18** (1984) 875-887.
- [93] Petti, J.P. and Dodds, R.H.: *Coupling of the Weibull stress model and macroscale models to predict cleavage fracture*, Eng. Frac. Mech. **71** (2004) 2079-2103.
- [94] Pineau, A.: *Development of the local approach to fracture over the past 25 years: theory and applications*, Int. J. Frac. **138** (2006) 139-166.
- [95] Qiao, Y. and Argon, A.S.: *Cleavage crack-growth-resistance of grain boundaries in polycrystalline Fe-2%Si alloy: experiments and modeling*, Mech. Mat. **35** (2003) 129-154.
- [96] Qiao, Y. and Argon, A.S.: *Cleavage cracking resistance of high angle grain boundaries in Fe-3%S alloy*, Mech. Mat. **35** (2003) 313-331.
- [97] Rensman, J.: *Fracture toughness and tensile properties data of irradiated oscillating wire cladding and strip wire cladding*, JRC Petten 2002.
- [98] Rezaee, S. and Berdin, C.: *Stress distribution in carbides of spheroidised steel using polycrystalline modeling*, Proc. of 12th International Conference on Fracture, ICF12 (Ottawa, 2009).
- [99] Rezaee, S. and Berdin, C.: *Prediction of temperature dependence on cleavage fracture of steels with polycrystalline approach*, Proc. of 18th European Conference on Fracture, ECF18 (Dresden, 2010).
- [100] Rice, J.R. and Rosengren, G.F.: *Plane strain deformation near a crack tip in a power-law hardening material*, J. Mech. Phys. Sol. **16** (1968) 1-12.
- [101] Rice, J.R.: *Inelastic constitutive relations for solids: An internal-variable and its application to metal plasticity*, J. Mech. Phys. Sol. **19** (1971) 433-455.
- [102] Ritchie, R.O., Knott, J.F. and Rice, J.R.: *On the relationship between critical tensile stress and fracture toughness in mild steel*, J. Mech. Phys. Solids **21** (1973) 395-410.
- [103] Roos, E., Schuler, F., Eisele, U., Udoh, A.: *Kennwerte der Bruchmechanik - kritisch bewertet*, Materialprüfung 1-2, 2005.
- [104] Roos, E., Eisele, U., Lammert, R., Restemeyer, D., Schuler, F., Seebich, H., Seidenfuß, M., Silcher, H., Stumpfrock, L.: *Kritische Überprüfung des Masterkurve-Ansatzes im Hinblick auf die Anwendung bei deutschen Kernkraftwerken*, Abschlussbericht RS 150 1240, MPA Stuttgart, Stuttgart, 2006.
- [105] Ruggieri, C., Gao, X. and Dodds, R.H.: *Transferability of elastic plastic fracture toughness using the Weibull stress approach: significance of parameter calibration*, Eng. Frac. Mech. **67** (2000) 101-117.
- [106] Russ, J.C. and Dehoff, R.T.: *Practical stereology*, Kluwer Academic Plenum, New York 2001.
- [107] Saylor, D., Fridy, J., El-Dasher, B., Jung, K., Rollett, A.: *Statistically representative three-dimensional microstructures based on orthogonal observation sections*, Metall. Mat. Trans. **35A** (2004) 1969-1979.
- [108] Seebich, H.P.: *Mikromechanisch basierte Schädigungsmodelle zur Beschreibung des Versagensablaufs ferritischer Bauteile*, Dissertation, Universität Stuttgart, 2007.
- [109] Siegele, D. und Varfolomeev, I.: *Analyse und Bewertung von Thermoschock-Versuchen an Zylindern mit Oberflächen- und Unterplattierungsfehlern*, Tagungs.

34. Tagung DVM Arbeitskreis Bruchvorgänge (Freiberg, 19./20.02.2002), Deutscher Verband für Materialprüfung, Berlin 2002, 235-244.
- [110] Smith, E., Barnby, J.: *Nucleation of Grain-Boundary Cavities during High Temperature Creep*, Met. Sci. J. **1** (1967) 1-4.
- [111] St. Pierre, L., Heripre, E., Dexet, M., Crepin, J., Bertolino, G., Bilger, N.: *3D simulations of microstructure and comparison with experimental microstructure coming from O.I.M analys*, Int. J. Plast. **24** (2008) 1516-1532
- [112] Stumpfrock, L., Swan, D.I., Siegele, D., Taylor, N.G., Nilsson, K.F. and Minnebo, P.: *NESC-II Final Report – Brittle Crack Initiation, Propagation and Arrest of Shallow Cracks in a Clad Vessel under PTS Loading*, European Commission, Report EUR 20696 EN, JRC Petten 2003.
- [113] Stöckl, H., Bösch, R., Schmitt, W., Varfolomeyev, I. and Chen, J.H.: *Quantification of the warm prestressing effect in a shape welded 10 MnMoNi 5-5 material*, Eng. Frac. Mech. **67** (2000) 119-137.
- [114] Sun, J., Deng, Z., Li, Z., Tu, M.: *Fracture strength of spheroidal carbide particle*, Int. J. Frac. **42** (1990) R39-R42.
- [115] Tanguy, B.: *Modelisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*, PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Paris 2001.
- [116] Törnig, W. und Spellucci, P.: *Numerische Methoden der Algebra* Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [117] Tvergaard, V. and Hutchinson, J. W.: *The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids*, J. Mech. Phys. Sol. **40** (1992) 1377-1397.
- [118] Wallin, K. and Laukkanen, A.: *Aspects of cleavage fracture initiation – relative influence of stress and strain*, Fat. Frac. Eng. Mat. Struc. **29** (2006) 1-11.
- [119] Wallin, K. and Laukkanen, A.: *New developments of the Wallin, Saario, Törrönen cleavage fracture model*, Eng. Frac. Mech. **75** (2008) 3367-3377.
- [120] Wallin, K.: *Statistical modelling of fracture in the ductile-to-brittle transition range*, Defect Assessment in Components, Fundamentals and Applications (Blauel, J.G. and Schwalbe, K.H. eds.), Mechanical Engineering Publications, London 1991, 415-445.
- [121] Wallin, K.: *Quantifying T-stress controlled constraint by the master curve transition temperature T_0* , Eng. Frac. Mech. **68** (2001) 303-328.
- [122] Wriggers, P.: *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*, Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [123] Xia, L. and Shih, C.F.: *Ductile crack growth – III. Transition to cleavage fracture incorporating statistics*, J. Mech. Phys. Solids **44** (1996) 603-639.
- [124] Yang, S., Chao, Y.J. and Sutton, M.A.: *Higher order asymptotic crack tip fields in a power-law hardening material*, Eng. Frac. Mech. **45** (1993) 1-20.
- [125] Zhao, X., Quinta da Fonseca, J., Sherry, A., Lidbury, D.: *Grain-scale heterogeneity effect on mechanical modeling of cleavage fracture of ferritic RPV steel forging material*, Proc. of ASME 2008 PVP Conference (Chicago, 2008).

Anhang

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Volker Hardenacke
 Geburtsdatum und Ort: 15.01.1980 in Olpe
 Familienstand: ledig

Schulische Ausbildung

1986 – 1990 Grundschule Drolshagen
 1990 – 1999 St. Franziskus-Gymnasium Olpe

Grundwehrdienst

07/1999 – 04/2000 Wehrpflichtiger, Tätigkeit als Militärkraftfahrer in Westerb-
 urg

Hochschulausbildung

10/2000 – 03/2007 Maschinenbaustudium an der Universität Siegen (Dipl. Ing.)

Beruflicher Werdegang

02/2006 – 05/2007 Tätigkeit als wissenschaftliche Hilfskraft am Fraunhofer-
 Institut für Werkstoffmechanik IWM in Freiburg
 06/2007 – 02/2008 Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fraunhofer-
 Institut für Werkstoffmechanik IWM in Freiburg
 03/2008 – 02/2011 Projektbedingter Wechsel zum IZBS des KIT (Dienstort: Frei-
 burg)
 03/2011 – heute Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fraunhofer-
 Institut für Werkstoffmechanik IWM in Freiburg

Veröffentlichungen zum Thema „local approach“

- 2009 Hardenacke, V.; Luckow, S.; Siegele, D.; Hohe, J.: **Ein erweitertes Modell zur probabilistischen Sprödbruchbewertung basierend auf lokalen Feldgrößen**, 41. Tagung des DVM-Arbeitskreises Bruchvorgänge 2009 (DVM-Bericht 241), S.89-98
- 2009 Hohe, J.; Hardenacke, V.; Luckow, S.; Siegele, D.: **An enhanced model for probabilistic cleavage fracture assessment considering local constraint effects**, Proceedings of the 12th International Conference on Fracture, Ottawa, 2009, CD-ROM

- 2009 Hohe, J.; Hardenacke, V.; Friedmann, V.; Sguaizer, I.; Burdak, M.; Möser, M.; Luckow, S.; Siegele, D.: **Lokale probabilistische Konzepte zur Spröbruchbewertung bei mehrachsiger äußerer Belastung**, Abschlussbericht zum BMWi-Vorhaben 1501320, Bericht S9/2009, Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg 2009
- 2009 Hohe, J.; Hardenacke, V.; Siegele, D.: **Constraint corrected cleavage fracture assessment based on tests of standard and small scale cruciform specimens**, Proceedings of the ASME Pressure Vessels and Piping Conference, Prag, 2009, Vol. 3, S.343-350
- 2010 Hardenacke, V.; Hohe, J.; Friedmann, V.; Siegele, D.: **Enhancement of local approach models for the assessment of cleavage fracture based on micro mechanical investigations**, Proceedings of the 18th European Conference on Fracture, Dresden, 2010, CD-ROM
- 2010 Siegele, D.; Varfolomeev, I.; Hohe, J.; Hardenacke, V.; Nagel, G.: **Integrity assessment of a German PWR RPV considering loss of constraint**, Proceedings of the ASME Pressure Vessels and Piping Conference, Bellevue, 2010, Vol. 6, Part A, S.153-160
- 2010 Hardenacke, V.; Hohe, J.; Luckow, S.; Siegele, D.: **An enhanced model for probabilistic cleavage fracture assessment considering local constraint effects**, Proceedings in applied mathematics and mechanics. PAMM 10 (2010), Nr.1, S.115-116
- 2010 Hohe, J.; Hardenacke, V.; Luckow, S.; Siegele, D.: **An enhanced model for probabilistic cleavage fracture assessment accounting for local constraint effects**, Eng. Frac. Mech. 77 (2010), Nr.18, S. 3573-3591
- 2011 Hardenacke, V.; Hohe, J.; Friedmann, V.; Siegele, D.: **Verbesserung lokaler Spaltbruchmodelle unter Berücksichtigung mikromechanischer Vorgänge**, 43. Tagung des DVM-Arbeitskreises Bruchvorgänge 2011(DVM-Bericht 243), S.133-142
- 2011 Hardenacke, V.; Hohe, J.; Friedmann, V.; Siegele, D.: **An enhanced local approach model for the assessment of brittle fracture based on micro mechanical investigations**, Key engineering materials 465 (2011), S.539-542
- 2011 Hohe, J.; Luckow, S.; Hardenacke, V.; Sguaizer, Y.; Siegele, D.: **Enhanced fracture assessment under biaxial external loads using small scale cruciform bending specimens**, Eng. Frac. Mech. 78 (2011), Nr.9, S.1876-1894
- 2011 Hardenacke, V.; Hohe, J.; Friedmann, V.; Siegele, D.: **Verbesserung lokaler Spaltbruchmodelle unter Berücksichtigung mikromechanischer Vorgänge**, Abschlussbericht zum BMWi-Vorhaben 1501354, Bericht W14/2011, Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg 2011
- 2012 Hardenacke, V.; Hohe, J.; Friedmann, V.; Siegele, D.: **Enhancement of the micro mechanical basis for local approach cleavage models**, Proceedings in applied mathematics and mechanics. PAMM 12 (2012), Nr.1, S.143-144

- 2012 Hardenacke, V.; Hohe, J.; Friedmann, V.; Siegele, D.: **Enhancement of local approach models for assessment of cleavage fracture considering micro mechanical aspects**, Proceedings of the 19th European Conference on Fracture, Kazan, 2012, CD-ROM
- 2013 Hardenacke, V.; Hohe, J.; Heierli, J.; Siegele, D.: **Weiterentwicklung von Bewertungskonzepten zum Versagensverhalten ferritischer Stähle im Übergangsbereich**, Abschlussbericht zum BMWi-Vorhaben 1501390C, Bericht 979/2013, Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg 2013
- 2014 Hardenacke, V.; Hohe, J.: **Improved numerical determination of the effective stress within the framework of local approach cleavage models**, Proc. Mat. Sci. 3 (2014), S.378-384

Veröffentlichungen zum anderen Themen

- 2007 Hohe, J.; Hardenacke, V.: **Numerical analysis of uncertainties in the effective material behaviour of disordered structural foams**, Proceedings in applied mathematics and mechanics. PAMM 7 (2007), Nr.1, S.4080013-4080014
- 2007 Hardenacke, V.; Hohe J.: **Local stochastic analysis of the effective material response of disordered two-dimensional model foam**, Proceedings in applied mathematics and mechanics. PAMM 7 (2007), Nr.1, S.4080001-4080002
- 2009 Hardenacke V.; Hohe J.: **Local probabilistic homogenization of two-dimensional model foams accounting for micro structural disorder**, Int. J. Sol. Str. 46 (2009), Nr.5, S. 989–1006
- 2010 Hardenacke, V.; Hohe, J.: **Assessment of space division strategies for generation of adequate computational models for solid foams**, Int. J. Mech. Sci. 52 (2010), Nr. 12, S.1772-1782
- 2012 Hohe, J.; Hardenacke, V.; Fascio, V.; Girard, Y.; Baumeister, J.; Stöbener, K.; Weise, J.; Lehmus, D.; Pattofatto, S.; Zeng, H.; Zhao, H.; Calbucci, V.; Rustichelli, F.; Fiori, F.: **Numerical and experimental design of graded cellular sandwich cores for multi-functional aerospace applications**, Materials and design 39 (2012), S.20-32
- 2012 Hohe, J.; Hardenacke, V.: **Analysis of uncertainty effects due to microstructural disorder in cellular or porous materials**, Int. J. Sol. Str. 49 (2012), Nr.7-8, S.1009-1021
- 2014 Hardenacke, V.; Farajian, M.; Siegele, D.: **Simulation of the High Frequency Hammer Peening Process for Improving the Fatigue Performance of Welded Joints**, Proceedings of ICSP-12, Goslar, 2014
- 2014 Hardenacke, V.; Farajian, M.; Siegele, D.: **Modelling and Simulation of the High Frequency Mechanical Impact (HFMI) Treatment of Welded Joints**, IIW Document XIII-2533-14, Seoul, 2014