

Abschlussbericht / Final Report

Reaktorsicherheitsforschung – Vorhaben-Nr. /
Reactor Safety Research – Project No.:

1501 390B

Weiterentwicklung von Bewertungskonzepten zum Versagensverhalten ferritischer Stähle im Übergangsbereich

**Teilprojekt: Weiterentwicklung und Validierung eines nichtlokalen
Schädigungsmodells zur Vorhersage der Bruchzähigkeit im
oberen Übergangsgebiet**

Development of safety assessment concepts for the failure behaviour of ferritic steels in the brittle-to-ductile region

**Subproject: Further development and validation of a non local damage
model to predict fracture toughness in the upper transition
regime**

Juni 2013

Gefördert durch:



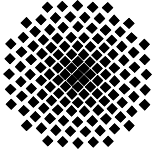
**aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages**

Hinweis:

Die diesem Bericht zugrunde liegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen 1501390B gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt jedoch allein bei den Autoren.

Der Auftraggeber behält sich alle Rechte vor. Insbesondere darf dieser Bericht nur mit Zustimmung des Auftraggebers zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt bzw. Dritten zugänglich gemacht werden.

Die Materialprüfungsanstalt Universität Stuttgart übernimmt keine Haftung für Schäden die aufgrund von weiterführenden oder fehlerhaften Anwendungen der in diesem Bericht dargestellten Ergebnisse auftreten.



Abschlussbericht / Final Report

**Reaktorsicherheitsforschung – Vorhaben-Nr. /
Reactor Safety Research – Project No.:**

1501 390B

Weiterentwicklung von Bewertungskonzepten zum Versagensverhalten ferritischer Stähle im Übergangsbereich

**Teilprojekt: Weiterentwicklung und Validierung eines nichtlokalen
Schädigungsmodells zur Vorhersage der Bruchzähigkeit im
oberen Übergangsgebiet**

Development of safety assessment concepts for the failure behaviour of ferritic steels in the brittle-to-ductile region

**Subproject: Further development and validation of a non local damage
model to predict fracture toughness in the upper transition
regime**

Projektleiter: Dr.-Ing. Ludwig Stumpfrock

Autoren / Authors: Dipl.-Ing. Sarah Gehrlicher
Dr.-Ing. Michael Seidenfuß

**Dienststelle des Autors / Perfor-
ming Organisation:** Materialprüfungsanstalt Universität Stuttgart
(MPA) Universität Stuttgart

**Berichtsdatum /
Publication Date:** 06 / 2013

Berichts –Nr. / Report – No: 8417 000 000

Kurzfassung

In der Kerntechnik ist bei Bauteilen mit hoher sicherheitstechnischer Bedeutung Versagen mit Sicherheit auszuschließen. Derzeit erfolgen die Sicherheitsnachweise hauptsächlich mit bruchmechanischen Methoden. Speziell im Übergangsbereich der Bruchzähigkeit, in dem ein begrenztes stabiles Risswachstum vor dem Versagen durch Spaltbruch auftreten kann stößt diese derzeit eingesetzte Methode oft an ihre Grenzen.

Im Rahmen des BMWi-Verbundvorhabens der RWTH Aachen, des IWM Freiburg und der MPA Universität Stuttgart erfolgt die Weiterentwicklung von Bewertungskonzepten zur Sicherheitsanalyse von mechanisch beanspruchten Bauteilen. Hierbei werden schädigungsmechanische Ansätze für den Gleitbruch und local-approach-Konzepten für den Spaltbruch eingesetzt um sowohl die Hochlage als auch das Übergangsbereich der Zähigkeit zu beschreiben. Mikromechanisch basierte Modelle zur Beschreibung der duktilen Rissinitiierung und des daran anschließenden duktilen Risswachstums bis hin zur Spaltbruchinstabilität werden weiter entwickelt und verifiziert.

Im BMWi-Teilvorhaben 1501 390B der MPA Universität Stuttgart wird die zähe Rissinitiierung und das sich daran anschließende stabile Risswachstum im oberen Übergangsbereich mit einem Schädigungsmodell berechnet. Bei den derzeit verwendeten lokalen Schädigungsmodellen ist die Lösung elementgrößenabhängig. Dieser Nachteil kann umgangen werden, indem die Elementgröße direkt an die Mikrostruktur gekoppelt wird. Bei großen Spannungsgradienten und kleinen Risswachstumsumträgen, wie im Übergangsbereich der Zähigkeit, werden jedoch sehr kleine Elemente benötigt. Dies steht im Konflikt zu einer aus der Mikrostruktur abgeleiteten Elementgröße. Abhilfe schaffen hier sogenannte nichtlokale Schädigungsmodelle. Der Gradient der Schädigung geht hierbei als zusätzlicher Freiheitsgrad in die Berechnung ein und die Ergebnisse werden dadurch unabhängig von der Elementgröße.

In diesem Teilvorhaben werden schädigungsmechanische Bewertungen mit dem nichtlokalen Rousselier Modell zur Bestimmung der Zähigkeitshochlage durchgeführt. Für diese Berechnungen wird ein vorliegendes benutzerdefiniertes Element in ein kommerzielles Finite Elemente Programm implementiert. Anhand einfacher Beispielrechnungen wird die korrekte Implementierung für zwei und drei Dimensionen verifiziert. Nichtlokale schädigungsmechanische Berechnungen erhöhen im Vergleich mit lokalen Modellen die Rechenzeiten um ein Vielfaches. Um diese Rechenzeiten zu reduzieren werden unterschiedliche Ansätze für die Berechnung des Tangentenmoduls untersucht, wobei eine Reduzierung der Rechenzeit von 5 % erzielt werden kann. Für die Vorhersage der Bruchzähigkeit von der Hochlage bis zur Tieflage wird das nichtlokale Rousselier Modell mit dem Beremin Modell gekoppelt. Dadurch kann sowohl duktilen Risswachstum als auch Versagen durch Spaltbruch parallel beschrieben werden.

Zur Verifizierung des Konzepts werden vorliegende Ergebnisse von Bruchmechanikproben aus dem Werkstoff 22NiMoCr3-7 herangezogen. Numerische Untersuchungen dieser Bruchmechanikproben (C(T)-Proben und SE(B)-Proben mit und ohne Seitenkerben) zeigen sehr gute Übereinstimmungen zu den experimentellen Ergebnissen. Das Kraft-Verformungsverhalten sowie die sich ausbildende Rissfronten können von der Hochlage bis zur Tieflage mit dem gekoppelten nichtlokalen Modell sehr gut beschrieben werden. Die mit dem gekoppelten nichtlokalen Modell berechnete Spaltbruchinstabilität in Abhängigkeit der Temperatur kann die Streuung der experimentellen Ergebnisse gut abbilden.

In Zusammenarbeit mit dem BMWi-Vorhaben 1501 390A der RWTH Aachen wird der Vorgang der Rissentstehung näher untersucht. Zum einen werden sogenannte Rissinitiierungskurven mit dem Rousselier Modell für verschiedene Temperaturen erstellt. Die mit dem Rousselier Modell bestimmten Initiierungswerte stimmen mit experimentellen Daten aus [Schlüter, 1997] gut überein und beschreiben den Beginn eines makroskopischen Anrisses.

In einem weiteren Schritt werden Untersuchungen der Bruchflächen von gekerbten Flachzugproben und metallographischen Schlifflinien an Rundzugproben mit unterschiedlichem plastischem Deformationsgrad. Diese Proben wurden im Rahmen des BMWi-Vorhabens 1501 390A an der RWTH Aachen geprüft und an der MPA Universität Stuttgart metallographisch untersucht, um den mikromechanischen Schädigungsablauf zu ermitteln. Der Beginn der Schädigung (Hohlrauminitiierung) kann sehr gut mit der Gleichstrompotentialmethode an der RWTH Aachen bestimmt werden. Die gemessenen Initiierungswerte entsprechen nach den Untersuchungen der MPA Universität Stuttgart dem Zeitpunkt erster Ablösungen der Einschlüsse von der Matrix und liegen weit unter dem Zeitpunkt der makroskopischen Rissinitiierung. Die von der RWTH Aachen erstellte Kurve kann folglich als Schädigungsinitiierungskurve bezeichnet werden.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass mit dem gekoppelten nichtlokalen Schädigungsmodell gute Ergebnisse für die hier untersuchten Proben im Übergangsbereich und in der Hochlage der Zähigkeit erzielt werden können. Das Vorhabensziel wurde erreicht.

Abstract

In nuclear power engineering failure has to be excluded for components with high safety relevance. Currently, safety proofs mainly use fracture mechanics concepts. Especially in the transition area of fracture toughness where limited stable crack propagation may appear before cleavage failure the currently applied methods are limited.

Within the nuclear safety research program of the Federal Ministry of Economics and Technology (BMWi) the joint project of RWTH Aachen, IWM Freiburg and MPA Universität Stuttgart deals with the development and verification of concepts for safety assessment of mechanical loaded components. These concepts should be developed in order to model the ductile to brittle transition behavior as well as the ductile behavior of ferritic steels. Local-approach concepts for the brittle fracture and damage mechanics models of ductile fracture will be used.

In the project 1501 390B of MPA Universität Stuttgart ductile crack initiation and subsequent stable crack growth in the upper transition area should be calculated using a damage mechanics model. The results of currently used local damage mechanics models depend on the element size of the numerical model. This disadvantage can be avoided using an element size depending on microstructure. With high stress gradients and small crack growth rates small elements are required. This is in conflict with an element size depending on microstructure. With so-called nonlocal damage models this is no longer a problem. By including the damage gradient as an additional degree of freedom the results depend no longer at the element size.

In the project damage mechanics computations with the nonlocal Rousselier model are carried out for the evaluation of the upper transition area. An existing user element will be implemented in a commercial FEM program. The correct implementation is verified with simple sample calculations for two and three dimensions. Nonlocal damage calculations multiply the computing time. In order to reduce the computing time different approaches for the tangent module are investigated and 5 % of the computing time can be saved. For the prediction of fracture toughness from the ductile to brittle transition area the nonlocal Rousselier model is combined with the Beremin model. Thus ductile crack growth and failure by brittle fracture can be described in parallel.

For the verification of the calculation model available results of fracture toughness specimens from the research project BMWi 1501 240 with the RPV steel 22NiMoCr3-7 are used. Numerical investigations of these fracture toughness specimens (C(T)-specimens and SE(B)-specimens with and without side grooves) are in compliance with experimental results. The load displacement behavior of the specimens and the developed crack front from the ductile to brittle transition area can be well calculated with the nonlocal damage model. The instabil-

ity in relation to temperature calculated with the coupled damage mechanics model represents the variations of the experimental results very well.

In cooperation with the research project BMWi 1501 390A of RWTH Aachen the process of crack initiation is further examined. Crack initiation curves are calculated for different temperatures with the Rousselier model. The calculated initiation values with the Rousselier model and the initiation values determined by experiments [Schlüter, 1997] are highly coincident and describe the beginning of a macroscopic crack.

Further investigations of the fracture surfaces of notched flat tensile specimens and metallographic cuts of round tensile specimens with different plastic degree of deformation are carried out. These specimens were tested at RWTH Aachen and analyzed metallographically at the MPA Universität Stuttgart to determine the micromechanical damage process. The begin of damage (void initiation) can be predicted very well with the potential drop method used by RWTH Aachen. According to the microscopic investigations by MPA Universität Stuttgart this measured values correspond to the stage when the first dissolution of the inclusions from the matrix starts. This stage is much earlier than the stage of macroscopic crack initiation. Therefore the curve created by RWTH Aachen can be designated as a damage initiation curve.

In summary, the results of the coupled nonlocal damage model for the specimens in the transition and the upper regime of fracture toughness are very good. The aim of the project was achieved.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|-------|--|----|
| 1 | Zielsetzung und Aufgabenstellung..... | 1 |
| 1.1 | Ausgangssituation..... | 1 |
| 1.2 | Zielsetzung und Aufgabestellung im Verbundprojekt..... | 2 |
| 1.3 | Zielsetzung und Aufgabestellung im Teilprojekt der MPA..... | 4 |
| 1.4 | Arbeitspakete im Teilprojekt der MPA..... | 5 |
| 2 | Theorie..... | 7 |
| 2.1 | Stand der Technik..... | 7 |
| 2.2 | Versagensverhalten ferritischer Stähle..... | 8 |
| 2.2.1 | Mikroskopische Bruchformen – Spalt und Wabenbruch..... | 9 |
| 2.2.2 | Makroskopische Bruchformen – Spröd und Zähbruch..... | 13 |
| 2.3 | Masterkurve Konzept nach ASTM E 1921..... | 15 |
| 2.3.1 | Grundlagen des Konzeptes..... | 15 |
| 2.3.2 | Darstellung der Spaltbruchinstabilität in Abhängigkeit der Temperatur..... | 19 |
| 3 | Werkstoffcharakterisierung, RDB-Stahl 22NiMoCr3-7 (Biblis C)..... | 21 |
| 3.1 | Chemische Zusammensetzung..... | 21 |
| 3.2 | Gefügebau..... | 21 |
| 3.3 | Festigkeitskennwerte und Fließkurven..... | 23 |
| 3.4 | Kerbschlagarbeits-Temperatur-Kurve..... | 24 |
| 3.5 | Fraktographische Untersuchungen..... | 25 |
| 4 | Schädigungsmechanik..... | 27 |
| 4.1 | Simulation der Zähigkeitshochlage – das lokale Rousselier Modell..... | 27 |
| 4.2 | Simulation der Zähigkeitstieflage – das Beremin Modell..... | 31 |
| 4.3 | Simulation des Übergangsgebietes – das gekoppelte Modell..... | 32 |
| 5 | Das nichtlokale Rousselier Modell..... | 35 |
| 5.1 | Nichtlokale Erweiterung des lokalen Rousselier Modells..... | 35 |
| 5.1.1 | Schädigungsevolution..... | 35 |
| 5.1.2 | Integralansätze..... | 36 |
| 5.1.3 | Gradientenabhängige Formulierung..... | 37 |
| 5.2 | Schwache Form der Schädigungsentwicklung..... | 38 |

| | | |
|-------|--|----|
| 6 | Implementierung des User-Elements in ANSYS | 41 |
| 6.1 | Verifizierung der Implementierung | 42 |
| 6.1.1 | Verifizierung für 2D Berechnungen | 42 |
| 6.1.2 | Verifizierung für 3D Berechnungen | 43 |
| 6.2 | Verifizierung der Netzunabhängigkeit | 44 |
| 6.2.1 | 2D Vergleichsrechnungen | 44 |
| 6.2.2 | 3D Vergleichsrechnungen | 47 |
| 6.3 | Verbesserung des Konvergenzverhaltens | 48 |
| 6.3.1 | Optimierung der Konvergenz für 2D Berechnungen | 48 |
| 6.3.2 | Optimierung der Konvergenz für 3D Berechnungen | 49 |
| 6.4 | Verifizierung der Tangentensteifigkeitsmatrix | 50 |
| 6.5 | Bestimmung der schädigungsmechanischen Parameter | 56 |
| 6.5.1 | Parameterbestimmung für das Rousselier Modell | 56 |
| 6.5.2 | Parameterbestimmung für das Beremin Modell | 57 |
| 7 | Numerische Untersuchungen mit dem gekoppelten nichtlokalen Schädigungsmodell ... | 61 |
| 7.1 | Berechnung von Kompaktzugproben | 61 |
| 7.1.1 | Vergleich der Rissfront | 65 |
| 7.1.2 | Bestimmung der Rissinitiierungskennwerte | 67 |
| 7.1.3 | Berechnung des temperaturabhängigen Last-Verformungsverhaltens | 68 |
| 7.1.4 | Berechnung der Spaltbruchinstabilität in Abhängigkeit der Temperatur | 69 |
| 7.2 | Berechnung von 3-Punkt Biegeproben | 70 |
| 7.2.1 | Vergleich der Rissfront | 73 |
| 7.2.2 | Berechnung des temperaturabhängigen Last-Verformungsverhaltens | 74 |
| 7.2.3 | Berechnung der Spaltbruchinstabilität in Abhängigkeit der Temperatur | 74 |
| 8 | Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Rissinitiierung | 77 |
| 8.1 | Berechnung des mikroskopischen und makroskopischen Schädigungsbeginns | 77 |
| 8.2 | Untersuchungen am Grundwerkstoff | 78 |
| 8.3 | Fraktographische Untersuchungen an Rundzugproben | 81 |
| 9 | Veröffentlichungen innerhalb des Forschungsvorhabens | 87 |
| 10 | Voraussetzungen zur Durchführung dieses Vorhabens | 89 |
| 11 | Zusammenfassung | 91 |

| | | |
|------|----------------------------|-----|
| 12 | Literaturverzeichnis | 93 |
| 13 | Anhang..... | 101 |
| 13.1 | Anhang zu Kapitel 7 | 101 |

Nomenklatur

Abkürzungen

| | |
|-------|---|
| ASME | American Society of Mechanical Engineers |
| ASTM | American Society of Testing and Materials |
| BMWi | Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie |
| C(T) | Compact Tension (Kompakt-Zugprobe) |
| DIN | Deutsches Institut für Normung |
| FEM | Finite Elemente Methode |
| IMWF | Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre |
| KTA | Kerntechnischer Ausschuss |
| LIMI | Lichtmikroskop |
| MPA | Materialprüfungsanstalt |
| RDB | Reaktordruckbehälter |
| REM | Rasterelektronenmikroskop |
| SE(B) | Single Edge Bend (Dreipunkt-Biegeprobe) |
| TEM | Transmissionselektronenmikroskop |

Formelzeichen

| | | |
|----------------|--------|--|
| a_0 | [mm] | Anfangsriszlänge der C(T)-Probe |
| b_0 | [mm] | Restquerschnittslänge im Ligament |
| \mathbf{B} | [-] | Transformationsmatrix |
| B_0 | [mm] | Probendicke (Referenzdicke $B_0 = 25 \text{ mm} = 1T$ nach ASTM E1921) |
| \mathbf{B}_d | [-] | Matrix der Ansatzfunktionen von \mathbf{N}_d |
| \mathbf{B}_u | [-] | Matrix der Ansatzfunktionen von \mathbf{N}_u |

| | | |
|----------------------|---------|--|
| B_x | [mm] | Probendicke |
| C_{ep} | [MPa] | Anteil der konsistenten Materialsteifigkeitsmatrix |
| C_{ed} | [MPa] | Anteil der konsistenten Materialsteifigkeitsmatrix |
| C_{de} | [MPa] | Anteil der konsistenten Materialsteifigkeitsmatrix |
| C_{dd} | [MPa] | Anteil der konsistenten Materialsteifigkeitsmatrix |
| C_{length} | [mm] | Längenparameter des Rousselier Modells |
| d | [-] | nichtlokaler Schädigungsparameter |
| \dot{d} | [-] | nichtlokaler Schädigungszuwachs an einem speziellen Punkt |
| \hat{d} | [-] | nichtlokaler Schädigungszuwachs an den Knoten im Element |
| d^* | [-] | effektive nichtlokale Schädigung |
| D | [-] | Rousselier Parameter |
| \mathbf{D} | [-] | Tangentenmodul |
| f | [-] | aktuelles Hohlraumvolumen |
| $f^*(f)$ | [-] | effektiver Hohlraumvolumenanteil |
| \dot{f} | [-] | lokale Schädigungsevolution |
| f_0 | [-] | Anfangshohlraumvolumen |
| f_c | [-] | kritisches Hohlraumvolumen |
| f_u | [-] | ultimatives Hohlraumvolumen |
| f_f | [-] | Hohlraumvolumen bei Werkstoffversagen, Dichtefunktion |
| \mathbf{f}_m^{ext} | [N] | Vektor der Reaktionskräfte aus externen Lasten |
| \mathbf{f}_m^{int} | [N] | Vektor der Reaktionskräfte aus inneren Spannungen |
| \mathbf{f}_d^{int} | [N] | Vektor der Kräfte zur Ursache der Delokalisierung der Schädigung |
| \mathbf{F} | [N] | Kraftvektor |

| | | |
|-------------------|--------------------|---|
| h^α | [-] | Ableitung der inneren Variable H^α |
| H^α | [-] | innere Variable |
| \mathbf{I} | [-] | Identitätstensor |
| \mathbf{J} | [-] | Fundamentaltensor 4. Stufe |
| J_c | [MPa] | J-Integralwert bei Spaltbuchinstabilität |
| \mathbf{K} | [MPa] | Gesamtsteifigkeitsmatrix |
| K_0 | [MPa \sqrt{m}] | Skalierungsparameter der Weibull-Verteilung nach ASTM E1921 |
| K_{Jc} | [MPa \sqrt{m}] | Kennwert der Spaltbruchinstabilität nach ASTM E1921 |
| K_{Ic} | [MPa \sqrt{m}] | Sprödbbruchkennwert nach ASTM E399 |
| K_{min} | [MPa \sqrt{m}] | Verschiebungsparameter der Weibull-Verteilung nach ASTM E1921 |
| \mathbf{K}_{uu} | [MPa] | Anteil der Elementsteifigkeitsmatrix |
| \mathbf{K}_{ud} | [MPa] | Anteil der Elementsteifigkeitsmatrix |
| \mathbf{K}_{du} | [MPa] | Anteil der Elementsteifigkeitsmatrix |
| \mathbf{K}_{dd} | [MPa] | Anteil der Elementsteifigkeitsmatrix |
| l_c | [mm] | charakteristische Länge |
| L | [-] | Maximum Likelihood Funktion |
| m | [-] | Weibullmodul |
| \mathbf{N}_d | [-] | Ansatzfunktion der Schädigungswachstumsrate |
| \mathbf{N}_u | [-] | Ansatzfunktion der Verschiebung |
| p | [MPa] | Werkstoffverfestigung |
| P_f | [-] | Versagenswahrscheinlichkeit |
| R_e | [MPa] | Streckgrenze |
| R_m | [MPa] | Zugfestigkeit |
| T_0 | [°C] | Übergangstemperatur nach ASTM E1921 |
| \mathbf{u} | [mm] | Verschiebungsvektor |

| | | |
|---------------------------------------|---------------------|---|
| V_0 | [mm ³] | Einheitsvolumen |
| V_{pl} | [mm ³] | plastifiziertes Volumen |
| W | [mm] | Probenweite |
| $\boldsymbol{\varepsilon}$ | [-] | Verzerrungstensor |
| $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ | [-] | elastische Dehnung |
| $\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}$ | [-] | plastische Dehnung |
| $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl}$ | [-] | plastische Vergleichsdehnung |
| $\Delta\varepsilon_q$ | [-] | Inkrement der deviatorischen plastischen Vergleichsdehnung |
| $\Delta\varepsilon_p$ | [-] | Inkrement der hydrostatischen plastischen Vergleichsdehnung |
| μ, λ | [-] | Lamé-Konstanten |
| $\Delta\Lambda$ | [-] | positiver Proportionalitätsfaktor |
| $\boldsymbol{\sigma}$ | [MPa] | Spannungstensor |
| σ_w | [MPa] | Weibullspannung |
| $\sigma_{v, q}$ | [MPa] | deviatorischer Spannungsanteil |
| $\sigma_{m, p}$ | [MPa] | hydrostatischer Spannungsanteil |
| σ_y | [MPa] | aktuelle Fließspannung |
| σ_u | [MPa] | Materialkonstante im Beremin Modell |
| σ_k | [MPa] | Versagensspannung im Rousselier Modell |
| Φ | [MPa] | Fließfunktion, plastisches Potential |
| φ | [-] | thermodynamisches Potential |
| $\Psi(x)$ | [-] | Gaußsche Wichtungsfunktion |
| ν | [-] | Querkontraktionszahl |
| $d\Omega$ | [mm ³] | infinitesimales Volumenelement |

1 Zielsetzung und Aufgabenstellung

1.1 Ausgangssituation

Die Auslegung von Bauteilen mit hoher sicherheitstechnischer Bedeutung beruht auf den bruchmechanischen Nachweisen, die in der Regel durch die bruchmechanischen Kennwerte ausgedrückt werden. In der Tieflage der Bruchzähigkeit erfolgt die Beurteilung der Risse in der Regel auf der Basis des Spannungsintensitätsfaktors K . In der Hochlage, wenn nennenswerte plastische Verformungen auftreten und ein stabiles Risswachstum beobachtet wird, wird das J-Integral für eine Bewertung herangezogen. Mit abnehmender Temperatur kann insbesondere bei den ferritischen Stählen ein ausgeprägter Übergangsbereich der Bruchzähigkeit von der Hochlage in die Tieflage definiert werden. In diesem Bereich neigen die Werkstoffe zum Spröbruchversagen, wobei sehr oft eine vorangehende duktile Initiierung von Rissen auftritt. Die Eintrittswahrscheinlichkeit beider Ereignisse hängt neben der Temperatur von der Belastungshöhe und dem vorliegenden Spannungszustand ab. Der entsprechende Nachweis wird in der derzeitigen industriellen Bewertungspraxis meist auf der Basis makroskopischer bruchmechanischer Bewertungskonzepte geführt, bei denen einer globalen Belastungsgröße K oder J auf der Beanspruchungsseite eine entsprechende deterministische oder probabilistische Bruchzähigkeitskurve auf der Materialseite gegenübergestellt wird. Das wichtigste der im kerntechnischen Regelwerk genormten Bewertungskonzepte ist das K_{Ic} -Konzept (ASME-Code [ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sec. III, 1995] [ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sec. XI, 1995], KTA 3201 [KTA 3201.2, 1997]), welches den elastischen, ggf. durch eine plastische Korrektur erweiterten, Spannungsintensitätsfaktor K_I als Belastungsgröße verwendet. Auf der Materialseite wird eine deterministische Bruchzähigkeitskurve angenommen, die als untere Einhüllende einer großen Zahl an experimentellen Datenpunkten definiert wurde. Als Alternative, die der probabilistischen Natur des Spaltbruchs besser gerecht wird, wird in jüngerer Zeit zunehmend auf das auf Wallin [Wallin, London, 1991] zurückgehende Masterkurve-Konzept zurückgegriffen. Dieses beschreibt die Belastung in Form des aus dem J-Integral berechneten Spannungsintensitätsfaktors K_J und verwendet auf der Materialseite eine probabilistische Bruchzähigkeitskurve zur Bestimmung der Ausfallwahrscheinlichkeit bei einer gegebenen Belastung. Das Konzept hat in Form von ASTM E1921 [ASTM E1921-02, 2002] Eingang in das einschlägige Regelwerk gefunden.

Diese makroskopischen Konzepte erfassen jedoch nicht den realen, in der Prozesszone vorliegenden mechanischen Beanspruchungszustand. Somit ist eine direkte Berücksichtigung der auf der mikromechanischen Ebene erfolgenden Spaltbruchauslösung und der diese steuernden Größen nicht möglich. Dies gilt insbesondere bezüglich des Effekts komplexer, mehraxialer Spannungs- und Dehnungszustände, die in Bauteilen vorliegen können, sich aber mit den üblichen Bruchmechanikproben nicht realisieren lassen. Eine der Folgen ist die

eingeschränkte Übertragbarkeit der gemessenen Bruchzähigkeiten zwischen Laborproben verschiedener Geometrie bzw. zwischen Laborproben und Bauteilen, die auch durch mehrparametrische Erweiterungen nur bedingt zu beheben sind.

Als Alternative zu den makroskopischen, auf integralen Beanspruchungsgrößen basierenden Bewertungskonzepten bieten sich daher die in den letzten Jahren zunehmend vorgeschlagenen schädigungsmechanische Ansätze. Diese haben den Vorteil, dass die Mehrachsigkeit des Spannungszustandes und dessen Einfluss auf Rissinitiierung und Instabilität implizit enthalten sind und somit die Problematik der Übertragbarkeit auf das Bauteil ohne weitere Zwischenschritte gegeben ist. Wissenschaftliche Arbeiten [Tanguy, et al., 2005] haben gezeigt, dass durch Kopplung von Schädigungsmodellen für den Gleitbruch und local-approach-Konzepten für den Spaltbruch auch eine numerische Beschreibung des spröduktilen Übergangsverhaltens erfolgen kann.

Die Anwendung dieser Modelle bei der Auslegung von Bauteilen und Komponenten setzt allerdings voraus, dass die bei der Entwicklung der gekoppelten Modelle aufgetretenen Probleme behoben werden. So wird beispielsweise bei lokal formulierten duktilen Schädigungsmodellen die Elementgröße mit dem Abstand der primären Hohlräume korreliert, um die Breite der Zone zu berücksichtigen, in der sich die Dehnungen lokalisieren. Dies bedeutet zunächst, dass die Elementgröße im Bereich des Risswachstums konstant gehalten wird, was wiederum bei sehr kleinen Proben zu einer relativ groben Elementierung führt. Außerdem können Risswachstumsträge, die kleiner als die Elementgröße sind, nicht zuverlässig vorhergesagt werden. Darüber hinaus ergibt sich jedoch auch das Problem, dass für die Anwendung eines Versagensmodells für Spaltbruchvorgänge eine wesentlich feinere Elementierung zu wählen ist, um lokale Spannungsgradienten zu berechnen, die wesentlich die Spaltbruchauslösung beeinflussen. Diese Schwachpunkte der gekoppelten schädigungsmechanischen Modellierung sollen im hier durchgeführten Verbundprojekt untersucht und behoben werden. Darüber hinaus ist eine Validierung der Berechnungsergebnisse an Proben vorgesehen, bei denen ein breites Spektrum unterschiedlicher Spannungszustände an der Rissspitze vorliegt.

1.2 Zielsetzung und Aufgabestellung im Verbundprojekt

Das BMWi-Verbundvorhabens 150 1390 wird von drei Forschungseinrichtungen durchgeführt:

- Institut für Eisenhüttenkunde der RWTH Aachen (IEHK) – Teilprojekt 150 1390 A
- Materialprüfungsanstalt der Universität Stuttgart (MPA) – Teilprojekt 150 1390 B
- Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik (IWM) Freiburg – Teilprojekt 150 1390 C

Dieses Verbundvorhabens hat zum Ziel, mit Hilfe von gekoppelten schädigungsmechanischen Ansätzen für den Gleitbruch und local-approach-Konzepten für den Spaltbruch Me-

Methoden zur Sicherheitsbewertung von mechanisch beanspruchten Bauteilen bereitzustellen, die sowohl im Übergangsbereich als auch in der Hochlage der Zähigkeit eingesetzt werden können. Hierzu sollen Modelle zur Beschreibung der duktilen Risseinleitung und des daran anschließenden duktilen Risswachstums bis hin zur Spaltbruchinstabilität weiterentwickelt und verifiziert werden. Als wesentlicher nutzbarer Zugewinn dieser neuen Methoden ergibt sich die Berücksichtigung des Einflusses des Spannungszustands gleichermaßen bei Gleit- und Spaltbruchvorgängen. Letztendlich bewirkt dies, dass die bislang eingesetzten aufwendigen Methoden, die auf bruchmechanischen Überlegungen beruhen und nachgeschaltete Betrachtungen zur Bewertung des Spröbruchrisikos im Übergangsbereich erfordern, zukünftig durch werkstoffmechanisch begründete und zuverlässigere Modelle abgelöst werden können. Die Hauptziele der Projektpartner können wie folgt zusammengefasst werden:

- Entwicklung eines dehnungsbasierten Kriteriums zur Versagensvorhersage im oberen Übergangsbereich und in der Hochlage (IEHK),
- Weiterentwicklung und Anwendung eines nichtlokalen Schädigungsmodells zur Versagensvorhersage im oberen Übergangsbereich und in der Hochlage (MPA),
- Weiterentwicklung und Bereitstellung eines numerisch robusten Modells zur Beschreibung von Spaltbruchvorgängen bei unterschiedlichen Spannungszuständen (IWM),
- Validierung der Modelle durch Vergleich untereinander und mit den vorliegenden Experimenten (alle Partner).

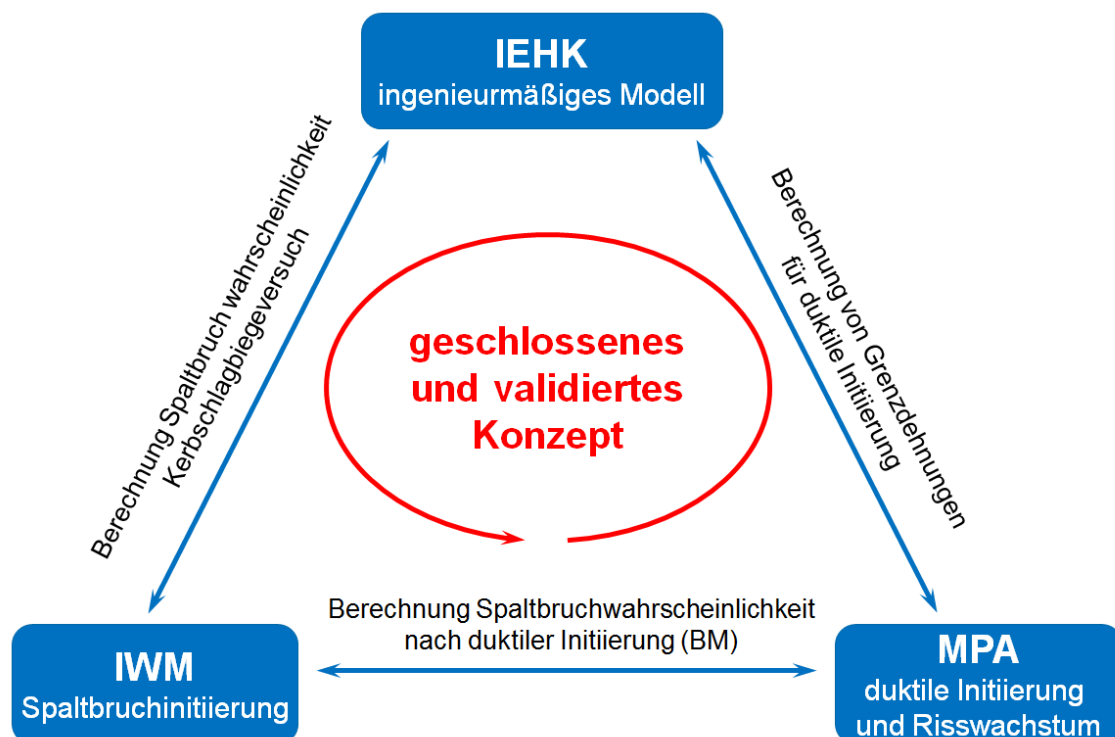


Abbildung 1: Vernetzung der drei Teilprojekte im Verbundprojekt

Am IEHK wird ein grenzdehnungsbasiertes Ingenieurmodell für den duktilen Versagensfall entwickelt, welches sowohl bei gekerbten als auch bei angerissenen Bauteilen auf einfache Weise Anwendung finden kann und deswegen für die Umsetzung in der industriellen Praxis besonders relevant ist. Im Weiteren ist dieses Modell auch in der Lage, Zähigkeitseigenschaften aus dem Kerbschlagbiegeversuch zu quantifizieren. Gleichzeitig erfolgen an der MPA schädigungsmechanische Berechnungen für den Gleitbruchmechanismus wo ein weitgehend netzgrößenunabhängiges nichtlokales Schädigungsmodell entwickelt wird. Am Fraunhofer IWM wird schwerpunktmäßig ein local-approach Konzept für den Spaltbruch weiterentwickelt, welches im Rahmen eines post-processing an numerische schädigungsmechanische Berechnungen zur Beschreibung des duktilen Versagensverhaltens nach dem Gleitbruchmechanismus angehängt wird, um die Konkurrenz der Bruchmechanismen im Übergangsbereich beschreiben zu können. Im Rahmen der Zusammenarbeit soll ein geschlossenes und validiertes Konzept entwickelt werden. Die Vernetzung der drei Teilprojekte kann Abbildung 1 entnommen werden.

1.3 Zielsetzung und Aufgabestellung im Teilprojekt der MPA

Die numerische Beschreibung des Versagensverhaltens im Übergangsbereich macht es erforderlich, das Zusammenwirken der beiden Bruchmechanismen Spaltbruch und Wabenbruch zu berücksichtigen. Charakteristisch für den Übergangsbereich ist, dass sich einem mehr oder weniger ausgeprägten stabilen zähen Risswachstum ein sprödes Versagen anschließt. Untersuchungen haben gezeigt, dass auch kleine Risswachstumsbeträge den Spannungszustand stark beeinflussen [Roos & Seebich, 2006] und somit bei einer Simulation des Versagensverhaltens ebenso simuliert werden müssen.

Dies kann gelingen, indem empirische Kriterien oder mikromechanische Modelle für beide Mechanismen in Bauteilsimulationen hinterlegt werden, die den kritischen Grenzzustand der Rissinitiierung separat für jeden Mechanismus beschreiben. Die Umsetzung dieser Idee ist jedoch in der Vergangenheit an Grenzen gestoßen. Dies lag daran, dass die jeweiligen Kriterien bislang aufgrund des ingenieurmäßigen Umgangs mit der Netzgrößenabhängigkeit an festgelegte Elementgrößen in den FE-Simulationen gebunden waren, was bei einer Kopplung von Modellen zum Problem wurde, da nur eine Netzgröße gewählt werden konnte. Außerdem werden zur Modellierung des Spaltbruchs üblicherweise spannungsbasierte Kriterien eingesetzt, jedoch gestattet die für den Gleitbruchmechanismus eingesetzte vergleichsweise grobe Vernetzung nicht die Beschreibung von starken Spannungsgradienten, was zwangsläufig zu ungenauen Prognosen des Spaltbruchkriteriums führt.

Die beschriebenen Probleme gelten insbesondere bei der Anwendung von mikromechanischen Schädigungsmodellen wie beispielsweise dem lokalen Rousselier Modell. Aus diesem Grund bietet sich als Lösungsmöglichkeit die Entwicklung von nichtlokalen mikromechanischen Modellen an, bei welchen keine Netzgrößenabhängigkeit beobachtet wird. Zusätzlich

muss ein Kriterium für den Spaltbruch ergänzt werden, um das Übergangsverhalten beschreiben zu können. Als wesentliche offene wissenschaftliche Fragestellungen sind die Erfassung des Spannungszustands unter Berücksichtigung einer duktilen Rissverlängerung, die eindeutige Bestimmung der Modellparameter und die Bereitstellung einer numerisch robusten Auswerteprozedur der Weibull-Spannung zu nennen.

In diesem Verbundvorhaben soll im Beitrag der MPA Universität Stuttgart die zähe Rissinitiierung und das sich daran anschließende stabile Risswachstum im oberen Übergangsgebiet mit einem nichtlokalen Schädigungsmodell berechnet werden.

Im Rahmen des Forschungsvorhabens soll eine Vorgehensweise entwickelt werden, die es erlaubt, Rissinitiierung im Übergangsgebiet der Bruchzähigkeit zuverlässig vorherzusagen. Mit einer solchen Vorgehensweise könnte die Rissinitiierung in Bauteilen unabhängig von bruchmechanischen Ansätzen direkt berechnet werden. Ebenso erlaubt diese Vorgehensweise die Vorhersage von bruchmechanischen Kennwerten mit dem Vorteil, dass die bisherigen bruchmechanischen Konzepte darauf aufbauend verwendet werden können. An der MPA Universität Stuttgart soll dieses Ziel mit Hilfe eines nichtlokalen Schädigungsmodells auf der Basis des Rousselier Modells erreicht werden. Dieses am IMWF im Rahmen einer Dissertation [Samal, 2007] entwickelte nichtlokale Schädigungsmodell soll zu diesem Zweck in ein kommerzielle Finite Elemente Programm als 'User defined Element' implementiert werden.

Die Ziele im Einzelnen sind:

- Implementierung des nichtlokalen Rousselier Modells in das kommerzielle Finite Elemente Programm ANSYS.
- Bestimmung der für das nichtlokale Schädigungsmodell nach Rousselier benötigten Parameter für den zu untersuchenden Werkstoff.
- Vorhersage der duktilen Rissinitiierung im oberen Übergangsgebiet der Bruchzähigkeit.
- Vergleich mit experimentell gemessenen bruchmechanischen Kennwerten.
- Beurteilung der neuen Methodik anhand der erzielten Ergebnisse.

1.4 Arbeitspakete im Teilprojekt der MPA

Um die in Kapitel 1.3 aufgeführten Ziele zu erreichen sind folgende Arbeitspakete für das Teilprojekt der MPA vorgesehen:

- Implementierung des nichtlokalen Rousselier Modells in das kommerzielle Finite Elemente Programm ANSYS.
- Validierung des Programms mit einfachen Beispielrechnungen und Optimierung des Konvergenzverhaltens.

- Bestimmung der schädigungsmechanischen Parameter durch numerische Anpassung an Ergebnisse von Kerbzugversuchen.
- Simulation des Last-Verformungsverhaltens von Bruchmechanikproben. Bestimmung von Rissinitiiierungswerten.
- Abgleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten. Evaluierung des nichtlokalen Rousselier Modells

2 Theorie

2.1 Stand der Technik

Bei kerntechnischen Komponenten wird insbesondere im bestrahlten Bereich der Corenaht häufig ein Versagensverhalten im spröd-duktilen Übergangsbereich beobachtet. Je nach Temperatur, Belastungshöhe und Spannungszustand kann es dabei nach begrenzter duktiler Rissinitiierung zu einem Umschlag in den instabilen Sprödbbruch kommen. Der entsprechende Nachweis wird in der derzeitigen Bewertungspraxis meist auf der Basis makroskopischer bruchmechanischer Bewertungskonzepte geführt, bei denen einer globalen Belastungsgröße K oder J auf der Beanspruchungsseite eine entsprechende deterministische oder probabilistische Bruchzähigkeitskurve auf der Materialseite gegenübergestellt wird. Das wichtigste der im kerntechnischen Regelwerk genormten Bewertungskonzepte ist das K_{Ic} -Konzept ([ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sec. III, 1995] [ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sec. XI, 1995] [KTA 3201.2, 1997]), welches den elastischen, ggf. durch eine plastische Korrektur erweiterten, Spannungsintensitätsfaktor K_I als Belastungsgröße verwendet. Auf der Materialseite wird eine deterministische Bruchzähigkeitskurve angenommen, die als untere Einhüllende einer großen Zahl an experimentellen Datenpunkten definiert wurde. Als Alternative, die der probabilistischen Natur des Spaltbruchs besser gerecht wird, wird in jüngerer Zeit zunehmend das auf Wallin [Wallin, London, 1991] zurückgehende Master Curve – Konzept verwendet. Dieses beschreibt die Belastung in Form des aus dem J-Integral berechneten Spannungsintensitätsfaktors K_J und verwendet auf der Materialseite eine probabilistische Bruchzähigkeitskurve zur Bestimmung der Ausfallwahrscheinlichkeit bei einer gegebenen Belastung. Das Konzept hat in ASTM Standard E 1921 [ASTM E1921-02, 2002] Eingang in das einschlägige Regelwerk gefunden. Diese makroskopischen Konzepte erfassen jedoch nicht den realen, in der Prozesszone vorliegenden mechanischen Beanspruchungszustand. Somit ist eine direkte Berücksichtigung der auf mikromechanischer Ebene erfolgenden Spaltbruchauslösung nicht möglich.

Ein alternatives Bewertungskonzept beruht auf sogenannten Schädigungsmodellen. Die Modelle der Schädigungsmechanik ermöglichen es, den Einfluss des mikroskopischen Versagensablaufes auf das makroskopische Verformungs- und Versagensverhalten abzubilden [Seidenfuß, 2004]. Daraus leitet sich der Anspruch ab, dass schädigungsmechanische Modelle in der Lage sein müssen, geometrieunabhängig das Versagen zu beschreiben.

Zur Beschreibung von Gleitbruchvorgängen können schädigungsmechanische Konzepte, wie das Rousselier Modell [Rousselier, 1987], herangezogen werden. Die durch die mechanische Beanspruchung hervorgerufenen Schädigungsentwicklung wird hierbei durch ein Poirevolutionsgesetz beschrieben. Der Einfluss der Schädigung auf das Fließverhalten wird durch eine modifizierte Fließfunktion berücksichtigt. Schädigungsmodelle wie das Rousselier

Modell können das Verformungs- und Versagensverhalten duktiler Werkstoffe mit hoher Genauigkeit vorhersagen. Modelle, bei denen die Schädigungsentwicklung ausschließlich vom lokalen Spannungs- und Dehnungszustand abhängen, werden als lokale Schädigungsmodelle bezeichnet. Ein großer Nachteil dieser Modelle ist die an die Mikrostruktur des Werkstoffes gekoppelte Elementgröße. Um diese Elementgrößenabhängigkeit der Finite Elemente (FE) Lösung zu beseitigen, wurden beispielsweise von [Feucht, 1998], [Reusch, 2003] oder [Samal, 2007] nichtlokale Formulierungen u. A. für das Rousselier Modell entwickelt. Während bei den lokalen Schädigungsmodellen die Dehnungen in nur einer Elementschicht lokalisieren, wird dies in der nichtlokalen Erweiterung verhindert, indem die Schädigung als zusätzlicher Freiheitsgrad eingeführt wird. Somit ist es möglich, die Breite der Dehnungslokalisierungszone zu steuern und ein elementgrößenunabhängiges Ergebnis zu erhalten.

Da die potenziell spaltbruchauslösenden spröden Partikel stochastisch im Material verteilt sind, sollte die Definition lokaler Spaltbruchkonzepte auf probabilistischer Basis erfolgen. Ein wichtiges Modell dieser Art ist das durch die Beremin-Gruppe [Beremin, 1983] vorgeschlagene Modell. 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 Größeneffekt, der Probendicken- bzw. Rissfrontlängeneffekt, die Temperaturabhängigkeit der $K_{Jc}(T)$ -Kurve im unteren Übergangsbereich und den WPS-Effekt.

In einem gemeinsamen BMWi-Forschungsvorhaben [Roos & Seebich, 2006] des IWM Freiburg und der MPA Universität Stuttgart wurde für den RDB-Stahl 22NiMoCr3-7 der Anlage Biblis C eine Vielzahl bruchmechanischer Experimente durchgeführt. Es wurden rund 200 Proben unterschiedlicher Form und Größe in dem für die Zähigkeit relevanten Temperaturbereich geprüft. Auf diese Datenbasis sowie auf die umfangreichen Ergebnisse der Werkstoffcharakterisierung kann im Rahmen dieses Forschungsvorhabens zurückgegriffen und weiter aufgebaut werden.

2.2 Versagensverhalten ferritischer Stähle

Das Versagen eines Bauteils in Form eines Bruches erfolgt linear-elastisch oder nach unterschiedlich stark ausgeprägter plastischer Deformation. Das Werkstoffverhalten ist hierbei u. A. von der Temperatur, der vorherrschenden Spannung sowie inneren Einflussgrößen wie der Gefügestruktur und der Korngröße abhängig.

Im Allgemeinen wird der Bruch bei spröden Werkstoffen durch Normalspannungen und bei duktilen Werkstoffen durch Schubspannungen ausgelöst. Dabei kann zwischen dem Verhalten auf makroskopischer und mikroskopischer Ebene unterschieden werden. Ferritische Stähle zeigen hierbei abhängig von der Temperatur unterschiedliches Bruchverhalten.

2.2.1 Mikroskopische Bruchformen – Spalt und Wabenbruch

Zur Identifikation des mikroskopischen Bruchmechanismus liefern metallographische und fraktographische Untersuchungen Aufschluss über die unterschiedlichen Phasen und Erscheinungsformen des Werkstoffversagens [Seebich, 2007, p. 16].

Auf mikroskopischer Ebene kann zwischen einem Spaltbruch und einem Wabenbruch unterschieden werden. Welcher Bruchmechanismus tatsächlich auftritt hängt vom Vorhandensein von aktiven Gleitsystemen ab. Hierbei zeigen kubisch-flächenzentrierter (kfz), hexagonaler (hex) und kubisch-raumzentrierter (krz) Stähle ein unterschiedliches Verhalten. Ferritische Stähle mit krz Gitterstruktur besitzen ein temperaturabhängiges Bruchverhalten. Mit sinkender Temperatur steigt bei solchen Stählen die Spaltbruchneigung.

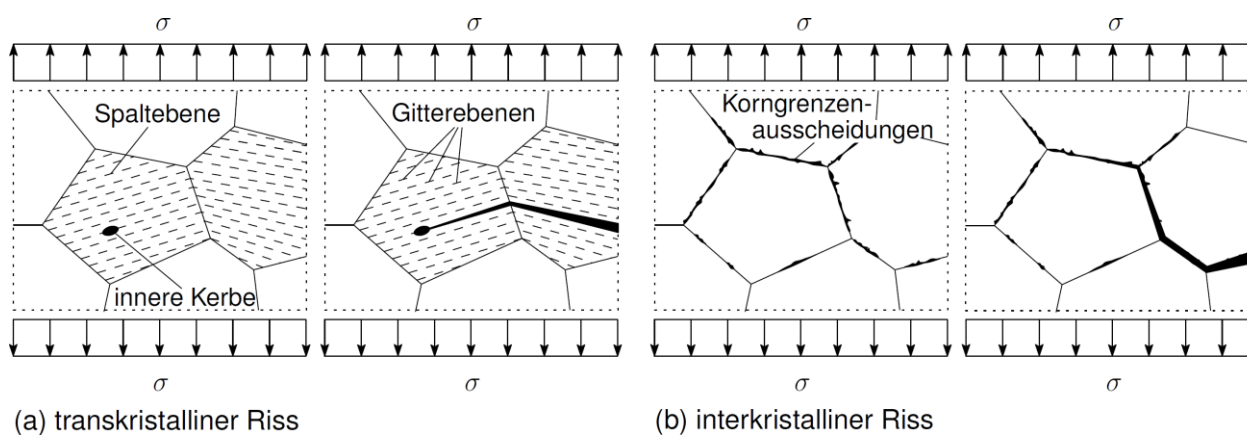


Abbildung 2: Auftreten des Spaltbruchs (a) transkristallin und (b) interkristallin, schematische Darstellung in Anlehnung an [Roos, 2011, p. 117]

Die Rissausbreitung des **Spaltbruchs** kann entweder transkristallin oder interkristallin erfolgen, Abbildung 2. Transkristallin wächst der Riss entlang von Kristallebenen niedrigster Packungsdichte durch Überwinden der atomaren Kohäsionskräfte [Liessem, 1996, p. 4]. Infolge lokaler Versetzungsbewegungen bilden sich im mikroskopischen Bereich Gitterstörungen aus, welche zu Ausgangspunkten von Mikrorissen werden [Cottrell, 1958]. Dies ist bei Stählen mit krz Gitterstruktur nach Miller'schen Indizes die $\{100\}$ -Ebene. Ausgangsstellen für den Spaltbruch sind Versetzungsstauungen bzw. Gleithindernisse wie Korngrenzen, Subkorngrenzen oder Fremdpartikel [Müller, 2001, p. 8]. Der Spaltbruch verläuft in der Regel instabil und der Energieverbrauch während des Rissfortschrittes ist sehr gering. Interkristallin wächst der Riss infolge von Korngrenzenschwächungen, z.B. durch Ausscheidungen, entlang der Korngrenzen.

Abbildung 3 (a) zeigt die rasterelektronenmikroskopische Aufnahme (REM) einer typischen Spaltbruchfläche. Die sichtbaren linienförmigen Strukturen, auch als river patterns bezeichnet, entstehen beim Überschreiten der Korngrenzen durch den Orientierungsunterschied der günstigsten Spaltflächen der einzelnen Körner zueinander [Neidel, et al., 2012]. Dadurch entstehen unterschiedlich orientierte Teil-Spaltebenen. Da die Rissausbreitung auf nur einer

Spaltebene am wenigsten Energie verbraucht, vereinigen sich diese Teilflächen zu nur einer Spaltebene [Andersen, 2005]. Hierbei muss die lokale Rissfortschrittsrichtung nicht zwangsweise mit der globalen Richtung des Rissfortschritts übereinstimmen [Merkert, 2002, p. 39]. Untersuchungen am ferritischen Stahl 22NiMoCr3-7 [Seebich, 2007, p. 49] zeigen diesen Orientierungswechsel beim Übergang von einem Ferritkorn zum nächsten, siehe Abbildung 3 (b).

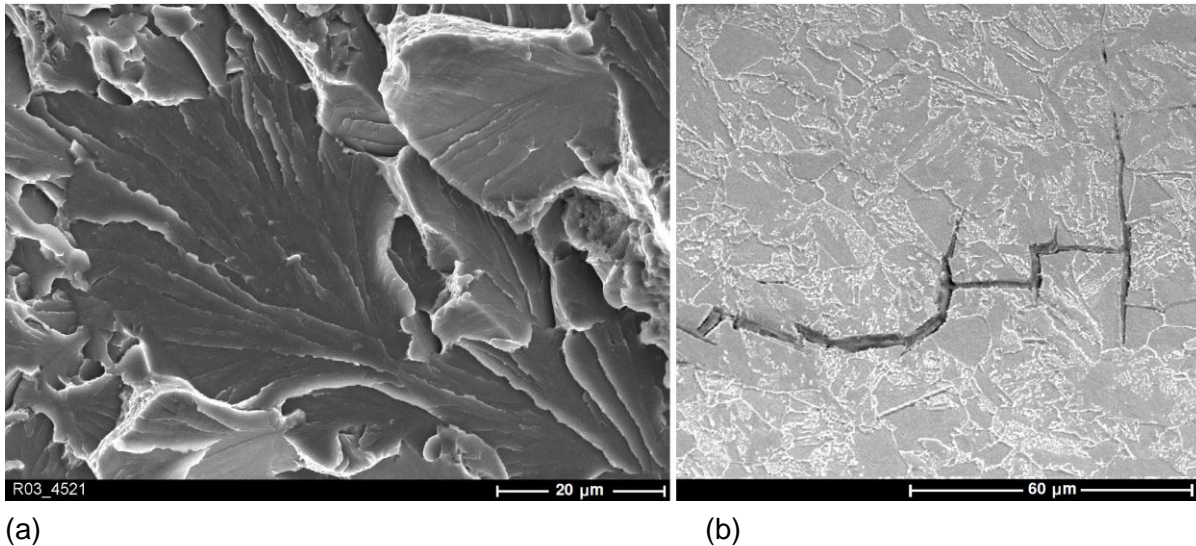


Abbildung 3: REM Aufnahmen des Werkstoffs 22NiMoCr3-7: (a) transkristalline Spaltbruchfläche [Seebich, 2007, p. 17] und (b) transkristalline Rissausbreitung entlang kristallographischer Ebenen mit niedrigster Spaltenergie [Seebich, 2007, p. 50]

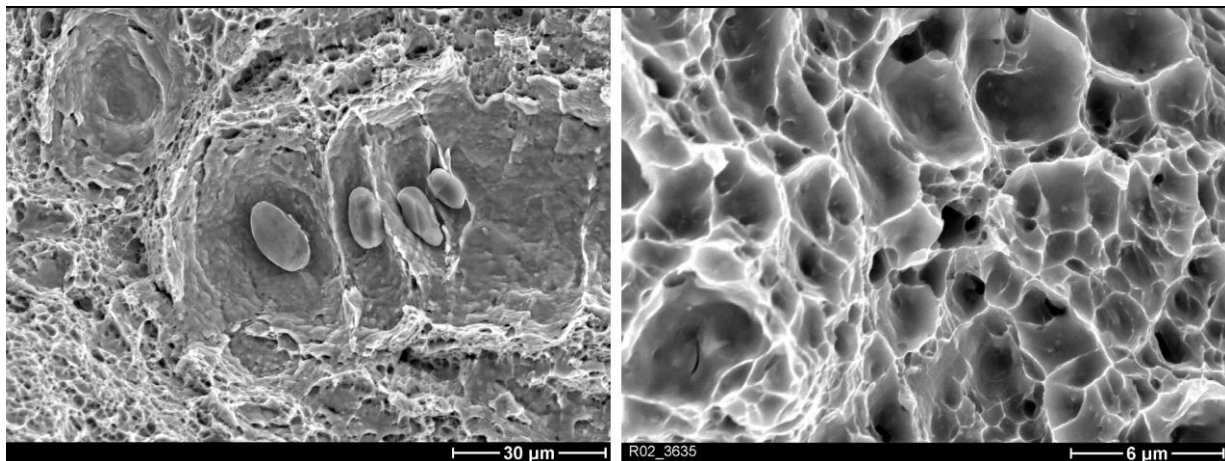


Abbildung 4: REM Aufnahme einer Wabenbruchfläche in unterschiedlichen Vergrößerungen, Werkstoff 22NiMoCr3-7 [Roos & Seebich, 2006]

Im Unterschied zum Spaltbruch ist der **Wabenbruch** durch große plastische, lokale Verformungen vor und während der Phase des Risswachstums gekennzeichnet. Abbildung 4 zeigt eine REM Aufnahme einer typischen Wabenbruchfläche mit stark verformten Waben. Auf dem Grund dieser Waben sind hier noch teilweise die Fremdphasen- oder Ausscheidungsteilchen zu erkennen, an deren Grenzfläche zur Matrix die Hohlraumbildung eingesetzt hat. Hierbei hängt die Größe und Form der Waben vom Spannungszustand und der Teil-

chengröße bzw. dem Verteilungsverhalten in der Matrix ab. Je tiefer die Waben sich ausbilden, desto duktiler ist die Matrix [Blumenauer & Pusch, 1993, p. 25].

Der Wabenbruch verläuft im Gegensatz zum Spaltbruch meist stabil und nur unter andauernder Energiezufuhr. Der Prozess des Wabenbruchs lässt sich in die drei Phasen:

- Entstehung der Hohlräume,
- Wachstum der Hohlräume und
- Koaleszenz der Hohlräume

einteilen.

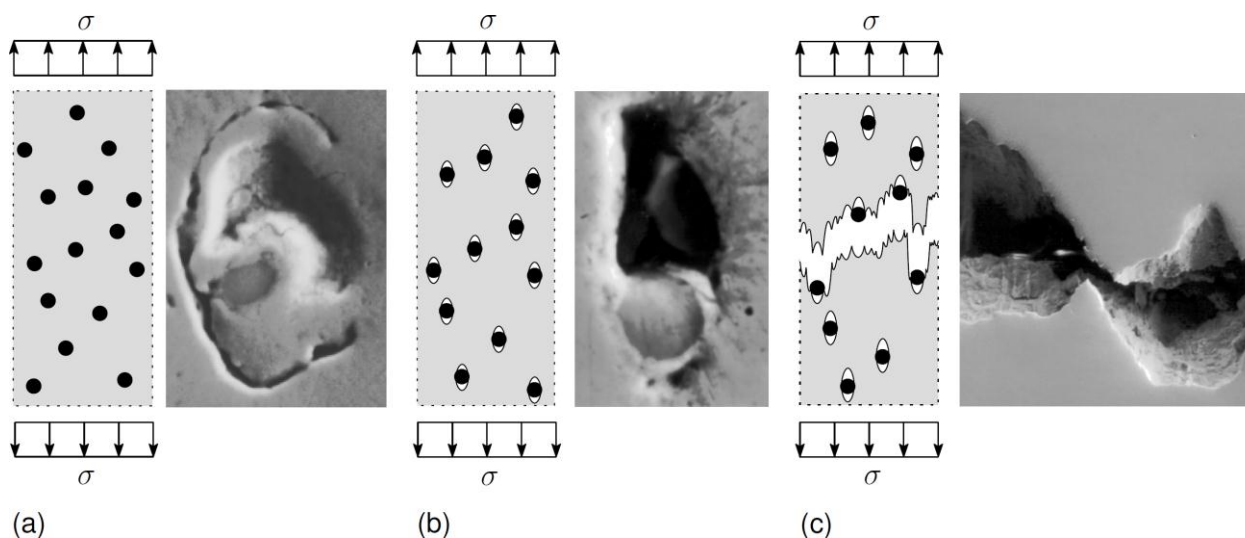


Abbildung 5: Drei Phasen des Wabenbruchs, schematische Darstellung und REM Aufnahme (polierter Schliff) eines Mangansulfidteilchens, Werkstoff 20MnMoNi5 5, in Anlehnung an [Seidenfuß, 1992, p. 45]: (a) Hohlräuminitiiierung, (b) Hohlraumwachstum und (c) Hohlraumkoaleszenz

Auf dem Grund der Waben einer Bruchfläche sind oft Partikel vorzufinden. An diesen Partikeln findet in der Regel die Initiierung der Hohlräume statt. In fast allen Metallen oder Metalllegierungen sind neben dem Grundwerkstoff weitere Partikel vorzufinden. Liegen diese sogenannten Zweitphasenteilchen bereits in der Schmelze vor, werden diese als Einschlüsse bezeichnet. Werden diese Zweitphasenteilchen erst während des Abkühlvorgangs durch Diffusionsprozesse gebildet, werden diese Ausscheidungen genannt.

Durch Versetzungsbewegungen infolge einer Belastung lösen sich Einschlüsse bzw. Ausscheidungen von der Matrix und es kommt zur Hohlräumbildung [Blumenauer & Pusch, 1993, p. 25]. Außerdem kann es durch Inkompatibilitäten der Verformungen von Teilchen und Matrix bei plastischen Deformationen zum Bruch von Teilchen kommen. Dies ist insbesondere bei langgestreckten oder verzweigten Partikeln der Fall.

Weiteren Einfluss auf die Hohlräuminitiiierung haben die Partikelgröße und -menge sowie die chemische Zusammensetzung und Verteilung der Partikel. Bei dem in diesem Forschungs-

vorhaben zu untersuchenden RDB-Stahl 22NiMoCr3-7 kommt bei gleichzeitigem Vorhandensein von großen und kleinen Partikeln letzteren eine untergeordnete Rolle für die Hohlraumentstehung zu [Roos & Seebich, 2006]. Partikel unterhalb einer gewissen Größe können für die Bildung der primären großen Hohlräumen sogar vollständig vernachlässigt werden [Seidenfuß, 1992, p. 85].

Durch ansteigende plastische Verformung wachsen die Hohlräume an. Das Ausmaß des Hohlraumwachstums hängt im Wesentlichen von der Verteilung und Form der Hohlräume sowie von der vorherrschenden Spannungsmehrachsigkeit ab. Bei ansteigender Größe der Hohlräume entsteht eine Abhängigkeit der plastischen Verformung vom hydrostatischen Spannungszustand. Dies ist darin begründet, dass an der freien Oberfläche im Innern der Hohlräume maximal ein zweiachsiger Spannungszustand herrscht, bei dem sich das Material plastisch verformen und Fließen auftreten kann. Besonders stark wachsen die Hohlräume bei einem hydrostatischen Spannungszustand im Zugbereich. Aus diesem Grund wird bei hohen Mehrachsigkeiten makroskopisch ein annähernd sprödes Werkstoffverhalten beobachtet wobei mikroskopisch plastisch verformte Waben zu beobachten sind. Bei einem ein-dimensionalen Spannungszustand werden die Hohlräume lediglich in die Länge gezogen, was nur zu einem geringen Volumenzuwachs führt. Die plastischen Verformungen bis zum Bruch sind hierbei wesentlich größer als bei mehrachsigen Spannungszuständen [Seidenfuß, 1992, p. 11], [Seidenfuß, 2004, p. 101].

Die plastische Verformbarkeit des Werkstoffes ist nicht beliebig groß. Im Allgemeinen ist die Trennung des Werkstoffes durch einen sprunghaften Anstieg des Hohlraumvolumens gekennzeichnet. Das erforderliche Hohlraumvolumen, das zu dieser sogenannten Koaleszenz der Hohlräume führt, ist hierbei abhängig von der Spannungsmehrachsigkeit. Laut [Hancock & Mackenzie, 1976, p. 162] nimmt der für die Koaleszenz erforderliche Hohlraumvolumenanteil bei kleiner Spannungsmehrachsigkeit zu. Das Zusammenwachsen der Hohlräume kann durch unterschiedliche Mechanismen erfolgen, Abbildung 6. Hierbei wird der Mechanismus vom Abstand der größeren Hohlräume stark beeinflusst [Becker, et al., 1988, p. 342]. Grundsätzlich können folgenden Mechanismen unterschieden werden [Hancock & Mackenzie, 1976]:

- Lokales Einschnüren der verbleibenden Werkstoffbrücken zwischen den Hohlräumen bzw. Zusammenwachsen der Hohlräume aufgrund großer plastischer Verformungen,
- Bildung kleiner Sekundärhohlräume an kleinen Partikeln bei ansteigendem Hohlraumabstand,
- Ausbildung von Scherbändern,
- Kombination aus der Bildung von Sekundärhohlräumen und Ausbildung von Scherbändern.

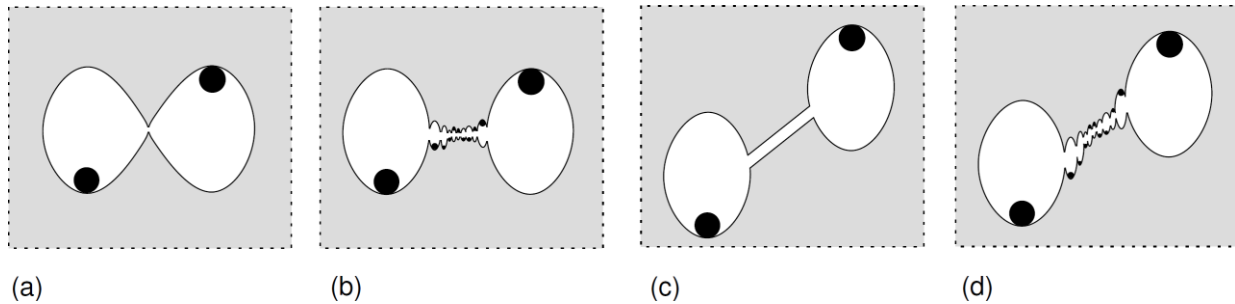


Abbildung 6: Hohlraumkoaleszenz durch (a) lokales Einschnüren der Werkstoffbrücken, (b) die Bildung von Sekundärhohlräumen (c) die Entstehung von Scherbändern, und (d) eine Kombination aus (b) und (c), in Anlehnung an [Seidenfuß, 1992, p. 17]

Die Vereinigung einzelner Hohlräume verläuft an mehreren Stellen im Gefüge meist gleichzeitig ab. Es entstehen Mikrorisse, die sich an der Stelle mit der höchsten Beanspruchung zu einem makroskopischen Riss vereinigen [Becker, et al., 1988, p. 342]. Die Hohlraumkoaleszenz findet in der Regel sprunghaft, gekennzeichnet durch einen plötzlichen Anstieg des Hohlraumvolumens, statt [Seidenfuß, 1992, p. 17].

2.2.2 Makroskopische Bruchformen – Spröd und Zähbruch

Auf makroskopischer Ebene wird nach dem Grad der plastischen Verformung zwischen einem Sprödbruch und einem Zähbruch unterschieden.

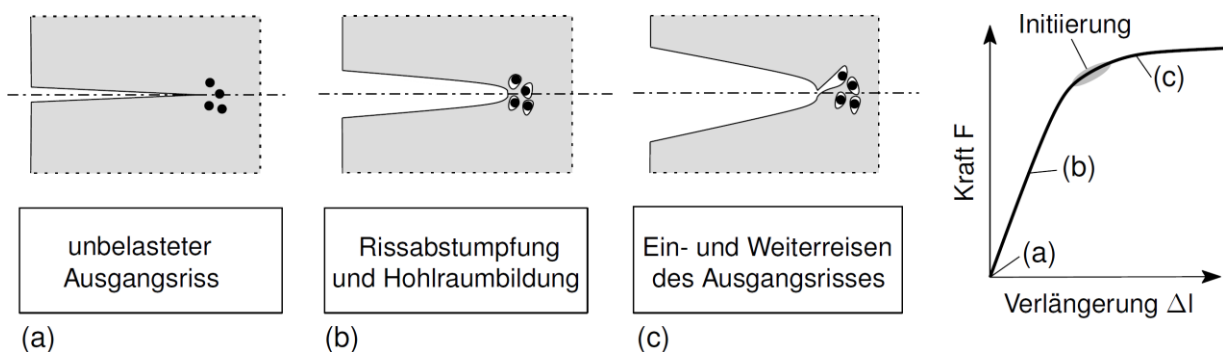


Abbildung 7: Makroskopische Phasen des Zähbruches, nach [Roos, 2011, p. 123]

Der Sprödbruch weist bis zum Versagen makroskopisch nur sehr geringe, lokal angesiedelte plastische Verformungen auf und die Gesamtverformung ist vorwiegend elastisch. Der Energieverbrauch von der von Beginn der Verformung bis zum Versagen ist gering. Die Bruchfläche weist makroskopisch eine glatte, glänzende Oberfläche auf und das Risswachstum ist instabil. Die Risswachstumsgeschwindigkeit in Stahl kann bis zu 1000 m/s erreichen [Roos & Seidenfuß, 2010]. Sprödbruchbegünstigend wirken u. A. mehrachsige Spannungszustände, tiefe Temperaturen und eine hohe Geschwindigkeit der wirkenden Beanspruchung [Roos, 2011, p. 177]. Hierbei breitet sich der Riss in der Regel senkrecht zur größten Zugbeanspruchung aus. Eine genaue Zuordnung der mikroskopischen zu den makroskopischen Bruchvorgängen ist jedoch nicht möglich [Blumenauer & Pusch, 1993, p. 25]

Das Erscheinungsbild des Zähbruches ist hingegen durch große makroskopische plastische Verformungen gekennzeichnet. In der Regel verläuft der Zähbruch stabil, d.h. nur unter weiterer Energiezufuhr. Bei angerissenen Bauteilen können hierbei die drei Phasen Anriss, Abstumpfung der Rissspitze und Weiterreisen unterschieden werden, Abbildung 7.

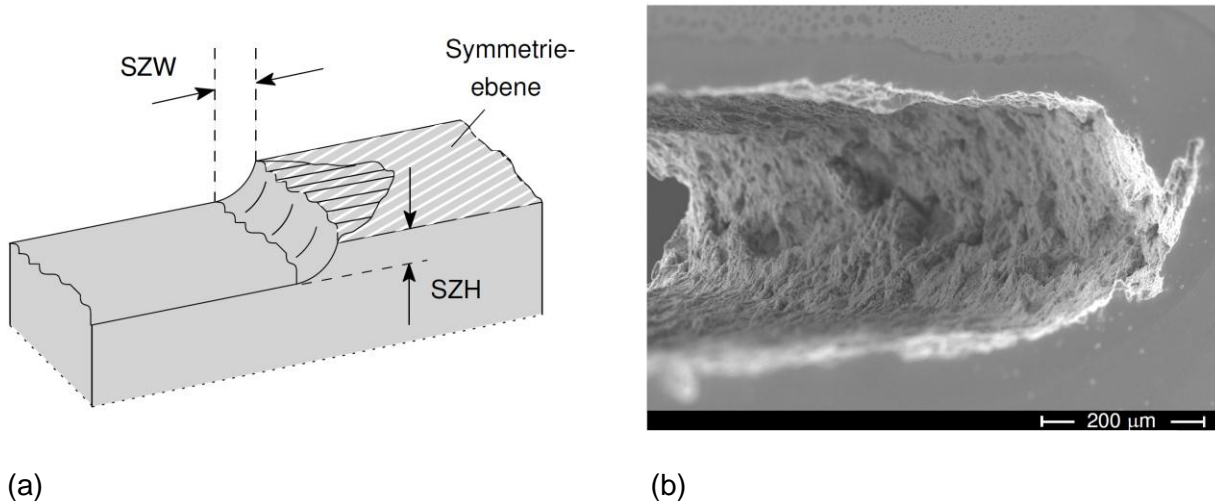


Abbildung 8: Darstellung der Stretched Zone mit Blunting: (a) schematische Darstellung einer getrennten Probe nach [Holland, 1992, p. 42] und (b) Blunting und Beginn der duktilen Risserweiterung einer C(T)25-Probe, Werkstoff 22NiMoCr3-7 [Seebich, 2007, p. 20]

Die Abstumpfung der Rissspitze resultiert aus Plastifizierungen infolge steigender Belastung und wird auch als „Blunting“ bezeichnet. Die Größe der abgestumpften Zone an der Rissfront bis zur Rissinitiierung wird durch die „Stretched Zone Width“ (SZW) definiert, Abbildung 8. Während des Bluntings bilden sich aufgrund des hohen mehrachsigen Spannungszustandes Hohlräume hinter der Rissfront aus, die auf mikroskopischer Ebene zu einem Wabenbruch führen können [Seebich, 2007, p. 20]. Bei metallischen Werkstoffen weist die Bruchoberfläche des Zähbruches ein mattes, faseriges Aussehen auf [Blumenauer & Pusch, 1993, p. 23].

Ferritische Stähle zeigen ein temperaturabhängiges Versagensverhalten. Dies zeigen beispielsweise die experimentellen Kraft-Rissöffnungsverläufe von C(T)25-Proben unterschiedlicher Prüftemperaturen aus dem BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 der MPA [Roos & Seebich, 2006, p. 199]. Mit zunehmender Temperatur nimmt die maximal aufnehmbare Kraft F sowie die Rissöffnungsverschiebung COD (crack opening displacement) zu, siehe Abbildung 9. Das Experiment bei -100 °C ist durch einen makroskopischen Sprödbbruch gekennzeichnet. Auch mikroskopisch ist fast ausschließlich ein Spaltbruch auf den Bruchoberflächen zu erkennen. Dies zeigt sich in einer kaum sichtbaren Stretched Zone und somit kaum plastischen Verformungen. Der Kraft-Rissöffnungsverlauf zeigt ein nahezu linear-elastisches Verhalten bis zum Bruch.

Für die Experimente bei $T = -60\text{ °C}$ und $T = -20\text{ °C}$ existieren nichtlineare Bereiche im Kraft-Rissöffnungsverhalten. Dies ist durch plastische Verformungen an der Rissspitze zu erklä-

ren. Mikroskopisch ist bei diesen Proben eine deutliche Stretched Zone mit Waben zu erkennen. Mikroskopisch folgt auf ein anfängliches Risswachstum durch Wabenbruch ein Versagen durch Spaltbruch. Im Unterschied zum Experiment bei -100 °C bildet sich bei -60 °C eine deutliche plastische Zone aus. Das endgültige Versagen ist jedoch ein instabiler Spaltbruch.

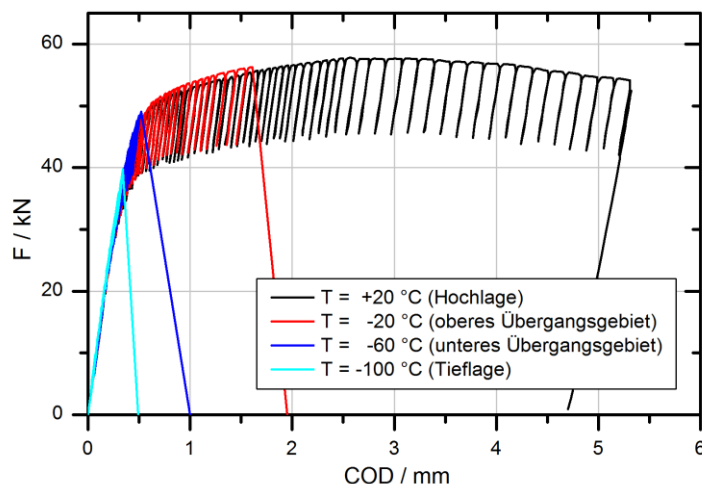


Abbildung 9: Darstellung des temperaturabhängigen Kraft-Rissöffnungsverhaltens von C(T)25-Proben, Werkstoff 22NiMoCr3-7 [Seebich, 2007, p. 21]

Steigt die Temperatur noch weiter an, nehmen die plastischen Anteile am mikroskopischen sowie makroskopischen Versagen weiter zu, bis nur noch stabiles Risswachstum auftritt. Kennzeichnend hierfür ist ein ausgeprägtes elastisch-plastisches Kraft-Rissöffnungsverhalten, welches die Probe bei $T = +20\text{ °C}$, Abbildung 9, aufweist. Mikroskopisch ist bei dieser Probe eine ausgeprägte Stretched Zone mit lang gestreckten Waben sowie eine regelmäßige Wabenstruktur des ausschließlich stabilen Rissfortschrittes zu erkennen.

2.3 Masterkurve Konzept nach ASTM E1921

2.3.1 Grundlagen des Konzeptes

In der Literatur finden sich verschiedene Konzepte zur Abschätzung der Bruchmechanikennwerte von der Tieflage über das Übergangsgebiet bis zur Hochlage. Mögliche Bewertungskurven sind u. A. das Modell mit Sanz-Korrelation nach AFNOR NF A 36-010 [NF A 36-010, 1980], die K_{Ic} -Kurve nach KTA [KTA 3201.2, 1997] oder ASME Code Case N629 und N631 [ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sec. III, 1995], die K_{Jc} -Kurve aus dem Stahlbau nach Eurocode 3 [DIN EN 1993-1-10:2005, 2010] basierend auf der DAST 009 [DAST-Richtlinie 009, 2005] und die aus zwei Teilen zusammengesetzte, zweistufige Kurve nach SINTAP [Zerbst, et al., 1999]. Eine weitere zweistufige Bewertungskurve wurde in einem Forschungsvorhaben an der MPA Universität Stuttgart [Roos & Seebich, 2006] entwickelt.

Diese beruht in der Tieflage und im unteren Übergangsbereich auf Instabilitätswerten und im oberen Übergangsbereich sowie in der Hochlage auf Initiierungswerten.

Im Folgenden wird die K_{Jc} -Kurve nach ASTM E1921 [ASTM E1921-02, 2002], die sogenannte Master Curve, als Bewertungskriterium herangezogen. Im Gegensatz zu den deterministischen Methoden nach [KTA 3201.2, 1997] und [ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sec. III, 1995] beruht dieses Konzept auf einem probabilistischen Ansatz. Bei diesem auf Wallin [Wallin, London, 1991] [Wallin, 1998] zurückgehenden Vorgehen besteht die Möglichkeit, mit nur wenigen Proben eine statistische Bruchkennwerteverteilung zu ermitteln.

Die Master Curve wird ausgehend von einem K_{Jc} -Wert, der aus dem J-Integralwert J_c beim Bruch der Probe ermittelt wird, bestimmt.

$$K_{Jc} = \sqrt{\frac{J_c \cdot E}{1 - \nu^2}} \quad (1)$$

Der K_{Jc} -Wert beschreibt das instabile Versagen der Probe auch nach vorangehender plastischer Verformung und duktilem Risswachstum. Gültige Werte im Sinne der ASTM E1921 müssen die Bedingungen:

- $K_{Jc} \leq K_{Jc(\text{limit})}$ und
- Restbruch durch Spaltbruch

erfüllen. Der maximale K_{Jc} -Wert berechnet sich zu:

$$K_{Jc(\text{limit})} = \sqrt{\frac{E \cdot b_0 \cdot R_e}{30(1 - \nu^2)}} \quad \text{mit:} \quad b_0 = W - a_0 \quad (2)$$

Die Grenze $K_{Jc(\text{limit})}$ ist hierbei durch den E-Modul E und die Streckgrenze R_e von der Temperatur abhängig. Werte $K_{Jc} \leq K_{Jc(\text{limit})}$ gelten als ungültig, dürfen aber nicht vernachlässigt werden. Im Folgenden wird deshalb das Censoring-Verfahren, durch welches diese Werte in der Auswertung Berücksichtigung finden, kurz vorgestellt.

Censoring: Allgemein wird bei diesem Verfahren ein endlicher Zeitraum T_{limit} betrachtet. Tritt bei gleichen Prüfbedingungen bei einer Probe Versagen nicht im Zeitraum $t < T_{\text{limit}}$ ein, so kann keine Aussage darüber gemacht werden, wann Versagen eintreten wird. Diese Probe darf jedoch nicht vernachlässigt werden, um das Ergebnis der Versagensanalyse nicht zu verfälschen. Experimente ohne Versagen innerhalb des Zeitraums T_{limit} werden durch das sogenannte Censoring im Rahmen der Maximum Likelihood Methode berücksichtigt. Die Maximum Likelihood Funktion ohne Censoring lautet:

$$L = f_f(t_1) \cdot \dots \cdot f_f(t_n) \quad (3)$$

Hierbei beschreiben t_1 bis t_n die Versagenszeitpunkte der verwendeten Proben. Die Maximum Likelihood Funktion mit Censoring für R Proben und $(N-R)$ Proben mit $t > T_{\text{limit}}$, d. h. ohne Versagen im Zeitraum T_{limit} , ergibt sich damit zu:

$$L = f_f(t_1) \cdot \dots \cdot f_f(t_R) (1 - F(T))^{(N-R)} \quad (4)$$

Die Bruchwahrscheinlichkeit nach ASTM E1921 wird durch eine dreiparametrischen Weibull-Verteilung beschrieben. Diese Verteilung wurde von Weibull [Weibull, 1939] 1939 auf der Basis elementarer Wahrscheinlichkeitsgesetze abgeleitet [Erben, 1994, p. 9]. Laut Böhm [Böhm, 1980, p. 21], [Böhm & Heckel, 1982, p. 122] ist dies die einzige Verteilungsfunktion mit werkstoffphysikalischem Hintergrund. Zwei der drei Parameter werden in der ASTM E1921 bereits vorgegeben mit $m = 4$ und $K_{\min} = 20 \text{ MPa} (m)^{1/2}$. Der Parameter K_{\min} wurde experimentell bestimmt und gilt als untere Schranke für das Eintreten eines Sprödbruchereignisses. Dieser ist für ferritische Stähle mit einer Streckgrenze zwischen 275 MPa und 825 MPa gültig. Das Konzept ist demnach nur für diese Stahlklasse anwendbar.

Die Größe P_f beschreibt die Versagenswahrscheinlichkeit für Werte gleich oder kleiner K_{Jc} . Hierzu sind sechs oder mehr Proben erforderlich, um den einzigen noch freien Parameter K_0 zu bestimmen.

$$P_f = 1 - \exp \left[- \left(\frac{K_{Jc} - K_{\min}}{K_0 - K_{\min}} \right)^m \right] \quad (5)$$

Werden alle Proben bei einer Temperatur geprüft, so muss der Parameter K_0 durch die Maximum Likelihood Methode angepasst werden. Hierbei gilt $K_0 = K_{Jc}$ für eine Versagenswahrscheinlichkeit von $P_f = 0,632$. Durch Ableiten von Gleichung (3) nach K_{Jc} erhält man die Dichtefunktion $f_f(K_{Jc})$, vgl. [Roos & Seebich, 2006, p. 62]:

$$f_f(K_{Jc}) = \frac{dP_f(K_{Jc})}{dK_{Jc}} = \frac{4(K_{Jc} - K_{\min})^3}{(K_0 - K_{\min})^4} \exp \left[- \left(\frac{K_{Jc} - K_{\min}}{K_0 - K_{\min}} \right)^4 \right] \quad (6)$$

Die Maximum Likelihood Funktion mit Censoring ergibt sich damit zu:

$$L = \prod_{i=1}^R \frac{4(K_{Jc}^i - K_{\min})^3}{(K_0 - K_{\min})^4} \cdot \prod_{i=1}^N \exp \left[- \left(\frac{K_{Jc}^i - K_{\min}}{K_0 - K_{\min}} \right)^4 \right] = 0 \quad (7)$$

Für einen K_{Jc}^i -Wert einer gebrochenen Probe wird in Gleichung (7) der Wert $f_f(K_{Jc}^i)$, für Werte mit Censoring wird $1 - P_f(K_{Jc}^i)$ eingesetzt.

Es empfiehlt sich, statt der Likelihood Funktion L die logarithmische Likelihood Funktion $\log L$ zu verwenden [Kreyszig, 1979].

$$\log L = \sum_{i=1}^R \log \frac{4(K_{Jc}^i - K_{\min})^3}{(K_0 - K_{\min})^4} - \sum_{i=1}^N \left[\left(\frac{K_{Jc}^i - K_{\min}}{K_0 - K_{\min}} \right)^4 \right] \quad (8)$$

Die Transformation mit Hilfe des Logarithmierens ist eine streng monoton wachsende Transformation. Deshalb hat $\log L$ genau dort ein Maximum, wo auch L ein Maximum hat [Grachyova & Müller, 2003].

$$\frac{d \log L}{dK_0} = \sum_{i=1}^R \frac{(K_0 - K_{\min})^4}{4(K_{Jc}^i - K_{\min})^3} \left[-\frac{4(K_{Jc}^i - K_{\min})^3}{4(K_0 - K_{\min})^5} \right] - \sum_{i=1}^N \left[-\frac{(K_{Jc}^i - K_{\min})^4}{4(K_0 - K_{\min})^5} \right] = 0 \quad (9)$$

Durch Auflösen erhält man die Bestimmungsgleichung für den Parameter K_0 nach ASTM E1921:

$$K_0 = \left[\sum_{i=1}^N \frac{(K_{Jc}^i - K_{\min})^4}{R} \right]^{\frac{1}{4}} + K_{\min} \quad (10)$$

Der Parameter K_0 ist dabei temperaturabhängig. Werden die Proben bei mehreren Temperaturen geprüft, kann die Referenztemperatur T_0 direkt, ohne Bestimmung von K_0 , mit Hilfe der Maximum Likelihood Methode bestimmt werden, siehe Gleichung (17). Um den Größeneffekt zu berücksichtigen wird dem Konzept der weakest-link Ansatz (Prinzip des schwächsten Gliedes) zugrunde gelegt. Dieser besagt, dass Versagen der kompletten Struktur einsetzt, sobald auch nur die kleinste Stelle versagt. Nach dem weakest-link Ansatz ist für den Werkstoff eine gleichmäßige Verteilung der Fehlstellen im Volumen anzunehmen, vgl. [Böhm, 1980, p. 18]. Größere Rissfronten unterliegen somit einer größeren Bruchwahrscheinlichkeit. Um dies zu berücksichtigen können unterschiedlich dicke Proben in ASTM E1921 durch Einführung einer Dickenkorrektur in die Berechnung von K_{Jc} mit einbezogen werden.

$$K_{Jc(x)} = K_{\min} + (K_{Jc(0)} - K_{\min}) \cdot \left[\frac{B_0}{B_x} \right]^{\frac{1}{4}} \quad (11)$$

Hierbei wird die Bruchzähigkeit $K_{Jc(x)}$ auf die Referenzdicke $B_0 = 25 \text{ mm} = 1T$ bezogen.

Der ermittelte K_0 Wert nach Gleichung (10) gehört, wie oben erwähnt, zu einer 63 % Versagenswahrscheinlichkeit der Probe. Der K_{Jc} -Wert der 50 % Versagenswahrscheinlichkeit $K_{Jc(50\%)}$ kann durch folgende Gleichung unter Verwendung von K_0 berechnet werden.

$$K_{Jc(50\%)} = K_{\min} + (K_0 - K_{\min}) \cdot [\ln(2)]^{\frac{1}{4}} \quad (12)$$

Die Bezeichnung $K_{Jc(50\%)}$ wurde hier abweichend von der Norm gewählt, um Verwechslungen mit der Gleichung der kompletten Master Curve zu vermeiden. Die Referenztemperatur T_0 für geprüfte Proben nur einer Temperatur berechnet sich zu:

$$T_0 = T - \left(\frac{1}{0,019} \right) \ln \left[\frac{K_{Jc(50\%)} - 30}{70} \right] \quad (13)$$

Die Form der 50 %-Master Curve $K_{Jc(\text{med})}$ (Median Bruchzähigkeitskurve) für einen Probekörper der Dicke 1T ergibt sich nach Wallin [Wallin, 1998] zu:

$$K_{Jc(\text{med})} = 30 + 70 \cdot \exp[0,0019 (T - T_0)] \quad (14)$$

Gleichung (14) beschreibt eine einheitliche Kurvenform, welche nur von der Referenztemperatur T_0 abhängig ist. T_0 gibt den Schnittpunkt der 50 % -Master Curve $K_{Jc(\text{med})}$ mit der Spaltbruchinstabilität $K_{Jc} = 100 \text{ MPa (m)}^{1/2}$ an.

Zur Berechnung der Referenztemperatur T_0 können Proben, die bei Temperaturen von $T_0 \pm 50$ °C geprüft wurden, mit einbezogen werden. Bei der Bestimmung von T_0 aus geprüften Proben unterschiedlichen Temperaturbereichs wird ausgegangen von dem Medianwert $P_f(K_{Jc(\text{med})}) = 50$ % aus Gleichung (2) folgende Beziehung hergeleitet [Roos & Seebich, 2006, p. 63]:

$$K_0(T_i) - K_{\min} = \frac{1}{(\ln 2)^{1/4}} (10 + 70 \cdot \exp[0,0019 (T_i - T_0)]) \quad (15)$$

$$K_0(T_i) - K_{\min} = 11 + 77 \cdot \exp[0,0019 (T_i - T_0)]$$

Hierbei wird mit $K_0(T_i)$ der temperaturabhängige Wert von K_0 bezeichnet. Durch Logarithmieren von Gleichung (15) erhält man:

$$\log L = \sum_{i=1}^R \log \frac{4(K_{Jc}^i - K_{\min})^3}{(K_0(T_i) - K_{\min})^4} - \sum_{i=1}^N \left(\frac{K_{Jc}^i - K_{\min}}{K_0(T_i) - K_{\min}} \right)^4 \quad (16)$$

mit: $(K_0(T_i) - K_{\min})^4 = (11 + 77 \cdot \exp[0,0019 (T_i - T_0)])^4$

Die Größe T_0 erhält man, in Analogie zu Gleichung (7), durch Auffinden des Maximums von Gleichung (17):

$$\frac{d \log L}{dT_0} = \sum_{i=1}^N \delta_i \frac{\exp[0,0019 (T_i - T_0)]}{11 + 77 \cdot \exp[0,0019 (T_i - T_0)]} - \sum_{i=1}^N \frac{(K_{Jc}^i - K_{\min})^4 \exp[0,0019 (T_i - T_0)]}{(11 + 77 \cdot \exp[0,0019 (T_i - T_0)])^5} = 0 \quad (17)$$

Dies ist die Bestimmungsgleichung für T_0 nach ASTM E1921. δ_i ist ein Censoring-Parameter, mit $\delta_i = 0$ für zensierte Probenwerte und $\delta_i = 1$ für alle anderen Probenwerte.

2.3.2 Darstellung der Spaltbruchinstabilität in Abhängigkeit der Temperatur

In Kapitel 2.3.1 wurden die zugrunde liegenden Gleichungen des Master Curve Konzeptes nach ASTM E1921 vorgestellt. Bei der Anwendung des Konzeptes und zur Überprüfung der Gültigkeit ist zudem die Master Curve für die Versagenswahrscheinlichkeit von 5 % und 95 % von Bedeutung. Allgemein kann jede Master Curve beliebiger Versagenswahrscheinlichkeit XX berechnet werden mit:

$$K_{Jc(0,XX)} = 20 + \left[\ln \left(\frac{1}{1 - 0,XX} \right) \right]^{1/4} (11 + 77 \cdot \exp[0,0019 (T - T_0)]) \quad (18)$$

Die 5 %- und 95 %-Master Curve mit $0,XX = 0,05$ und $0,XX = 0,95$ ergeben sich zu:

$$K_{Jc(0,05)} = 25,5 + 36,6 \cdot \exp[0,0019 (T - T_0)]$$

$$K_{Jc(0,95)} = 34,5 + 101,3 \cdot \exp[0,0019 (T - T_0)] \quad (19)$$

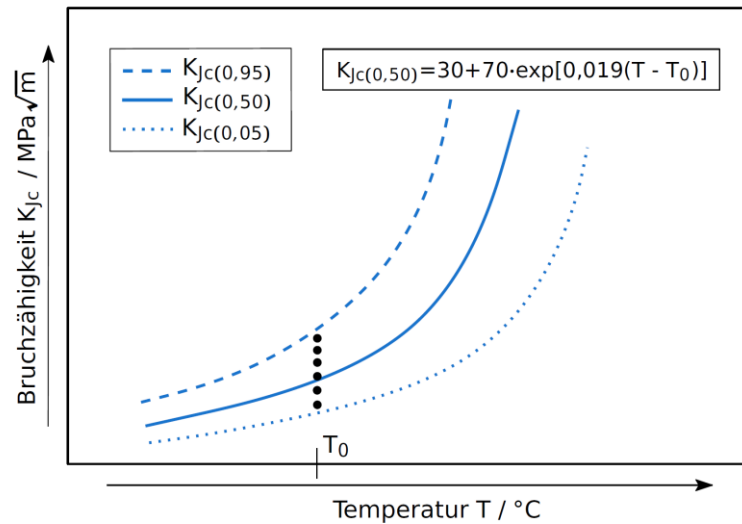


Abbildung 10: Master Curve mit 5 % - und 95 % -Versagensstreuband und Referenztemperatur T_0 , schematische Darstellung in Anlehnung an ASTM E1921

In Abbildung 10 ist schematisch die Master Curve in Abhängigkeit der Referenztemperatur T_0 für 5 %, 50 % und 95 % Versagenswahrscheinlichkeit abgebildet. Eine Versagenswahrscheinlichkeit von 5 % könnte für sicherheitsrelevante Bauteile als kritischer Wert angenommen werden [Zerbst, et al., 1999, p. 65]. Genaue Angaben hierzu werden in ASTM E1921-11 nicht gemacht. Die 5 % Master Curve entspricht in etwa der K_{Jc} -Kurve nach ASME Code Case [ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sec. XI, 1995].

3 Werkstoffcharakterisierung, RDB-Stahl 22NiMoCr3-7 (Biblis C)

Im Rahmen des BMWi-Forschungsvorhabens 1501 240 der MPA Universität Stuttgart [Roos & Seebich, 2006] wurden umfangreiche experimentelle Untersuchungen am originalen RDB-Stahl 22NiMoCr3-7 durchgeführt. Die Proben wurden einem zylindrischen Schuss nach Abbildung 40 entnommen. Die Probenentnahme erfolgte nach KTA 3201.1 [KTA 3201.1, 1998] und mit einer Rissausbreitung in Wanddickenrichtung.

Auf diese experimentellen Ergebnisse an Bruchmechanikproben wird in diesem Vorhaben zurückgegriffen. Im Folgenden sollen daher kurz die wichtigsten Kennwerte der Werkstoffcharakterisierung vorgestellt werden. Für eine detailliertere Beschreibung sei auf [Roos & Seebich, 2006] verwiesen.

3.1 Chemische Zusammensetzung

Die chemische Zusammensetzung des o. g. Werkstoffes ist in Tabelle 1 gegeben. Bei diesem Werkstoff handelt es sich um einen untereutektoiden Stahl mit rund 0,22 % Kohlenstoff, dem Nickel, Molybdän und Chrom zulegiert wurde. Die Schmelzanalyse wurde vom Hersteller JAPAN STEEL WORKS durchgeführt. Die Vorgabewerte der Schmelzanalyse sind dem Abnahmeprüfzeugnis des TÜV Bayern [TÜV Bayern, 1976] entnommen. Die Stückanalyse wurde an der MPA an einer C(T)25-Probe durchgeführt.

Tabelle 1: Chemische Zusammensetzung des Werkstoffes 22NiMoCr3-7 [Roos & Seebich, 2006]

| Chem. Element | C | Si | Mn | P | S | Cu | Sn | Al |
|----------------|------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Vorgabe, Min. | 0,17 | 0,10 | 0,50 | | | | | |
| Vorgabe, Max. | 0,25 | 0,35 | 1,00 | 0,012 | 0,015 | 0,10 | | 0,05 |
| Schmelzanalyse | 0,21 | 0,20 | 0,86 | 0,006 | 0,006 | 0,03 | 0,007 | 0,023 |
| Stückanalyse | 0,21 | 0,20 | 0,88 | 0,006 | 0,002 | 0,039 | 0,007 | 0,016 |

| Chem. Element | Cr | Mo | Ni | V | Ta | Co | As | Sb |
|----------------|------|------|------|-------|--------|-------|-------|--------|
| Vorgabe, Min. | 0,25 | 0,50 | 0,60 | | | | | |
| Vorgabe, Max. | 0,50 | 0,75 | 1,00 | 0,05 | 0,03 | 0,03 | | |
| Schmelzanalyse | 0,41 | 0,56 | 0,85 | <0,01 | <0,005 | 0,011 | 0,009 | 0,0016 |
| Stückanalyse | 0,40 | 0,53 | 0,83 | 0,007 | <0,003 | 0,011 | 0,005 | <0,002 |

3.2 Gefügeaufbau

Für eine spätere Beurteilung der Ergebnisse ist eine Kenntnis über die Werkstoffhomogenität von besonderem Interesse. Zwei Gefügeschliffe aus dem Wanddickenbereich T/2 sind bei-

spielhaft in Abbildung 11 dargestellt. Das Gefüge zeigt ein ferritisch-bainitisches Gefüge mit sehr feinen bis leicht groben Körnern. Die Zeilen sind typisch für einen geschmiedeten Werkstoff.

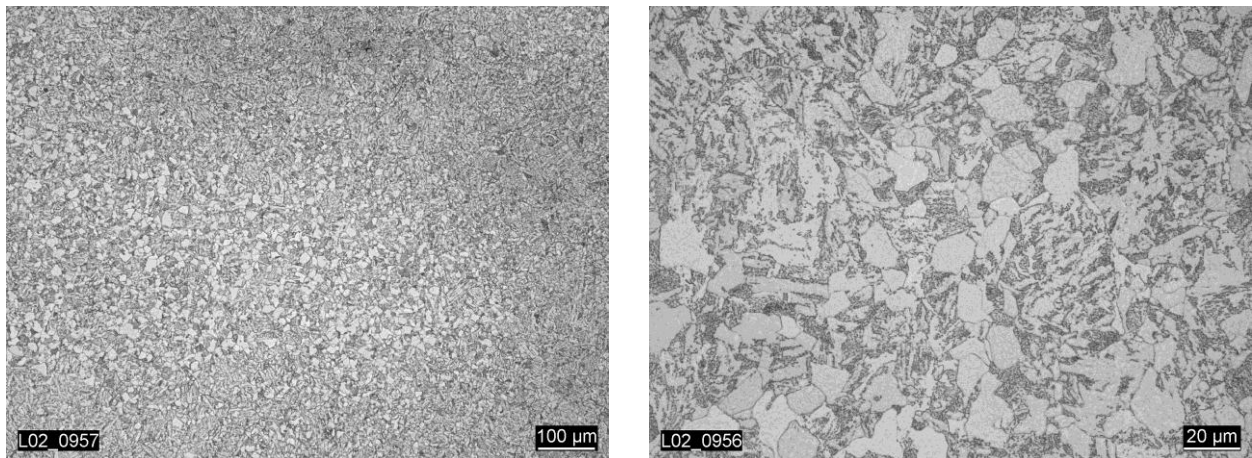


Abbildung 11: Lichtmikroskopische Aufnahmen der Gefügeschliffe, Werkstoff 22NiMoCr3-7, Betrachtungsebene T-S, Entnahmeposition T/2 [Roos & Seebich, 2006, p. 204]

Die Rasterelektronenmikroskopischen (REM) Untersuchungen zeigen eine Streckung der Einschlüsse vorzugsweise in die L-Richtung. Die Einschlüsse bestehen meist aus Mangansulfiden und Verbindungen mit Aluminium, Zirkonium, Schwefel und Magnesium.

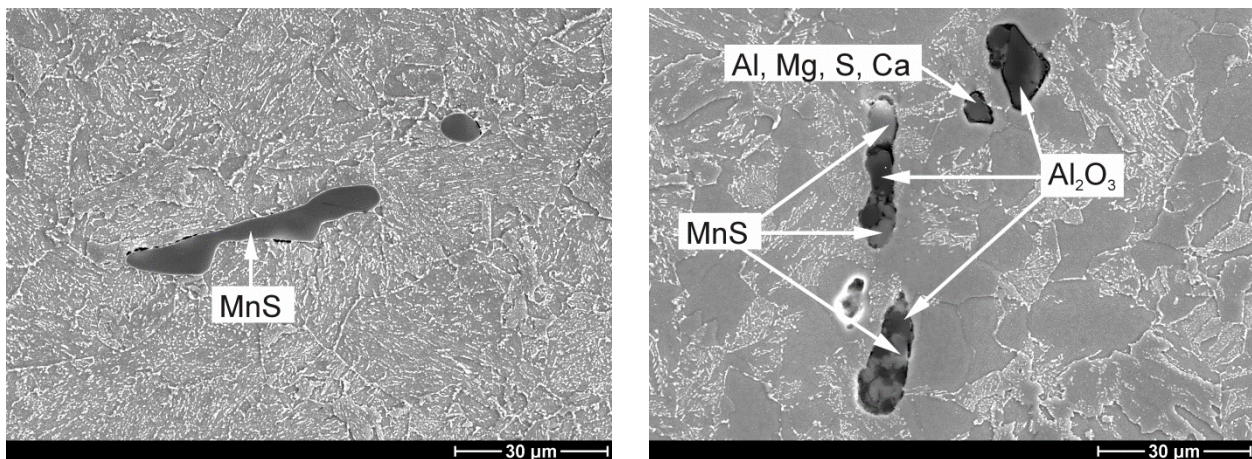


Abbildung 12: Rasterelektronenmikroskopische (REM) Aufnahme, Werkstoff 22NiMoCr3-7, Entnahmeposition T/2, Betrachtungsebene T-L (links) und Betrachtungsebene S-L (rechts) [Roos & Seebich, 2006, p. 206]

Untersuchungen am selben Segment des RDB-Stahls im Rahmen des Forschungsvorhabens LISSAC [Krieg & Seidenfuß, 2003] bestätigen dieses Ergebnis. Basierend auf den Härtemessungen und den Untersuchungen in [Roos & Seebich, 2006] und [Krieg & Seidenfuß, 2003] kann der Werkstoff als Isotrop bezeichnet werden.

3.3 Festigkeitskennwerte und Fließkurven

Zur Bestimmung der Fließkurven werden Rundzugproben nach DIN 50125 [DIN 50125:2004-01, 2009] verwendet. Die ermittelten Kennwerte der Entnahmeposition T/2 zeigt Tabelle 2.

Tabelle 2: Festigkeits- und Verformungskennwerte aus Zugversuchen, Entnahmepos. T/2 [Roos & Seebich, 2006]

| Proben-bez. | Prüf-temp. [°C] | Proben-lage | Proben-typ | Messl. L_{e0} [mm] | R_m [MPa] | R_{eH} [MPa] | A [%] | A_g [%] | Z [%] |
|-------------|-----------------|-------------|------------|----------------------|-------------|----------------|-------|-----------|-------|
| BIB Z11 | 20 | T/2 | B10*50 | 50 | 584 | 445 | 23,0 | 10,7 | 68 |
| BIB Z12 | -10 | T/2 | B10*50 | 20 | 605 | 454 | 23,5 | 12,6 | 68 |
| BIB Z13 | -40 | T/2 | B10*50 | 20 | 636 | 471 | 25,5 | 13,1 | 68 |
| BIB Z14 | -60 | T/2 | B10*50 | 20 | 657 | 501 | 26,5 | 13,2 | 65 |
| BIB Z15 | -100 | T/2 | B10*50 | 20 | 717 | 575 | 27,0 | 15,6 | 63 |
| BIB Z16 | -150 | T/2 | B10*50 | 20 | 823 | 758 | 27,0 | 15,4 | 57 |

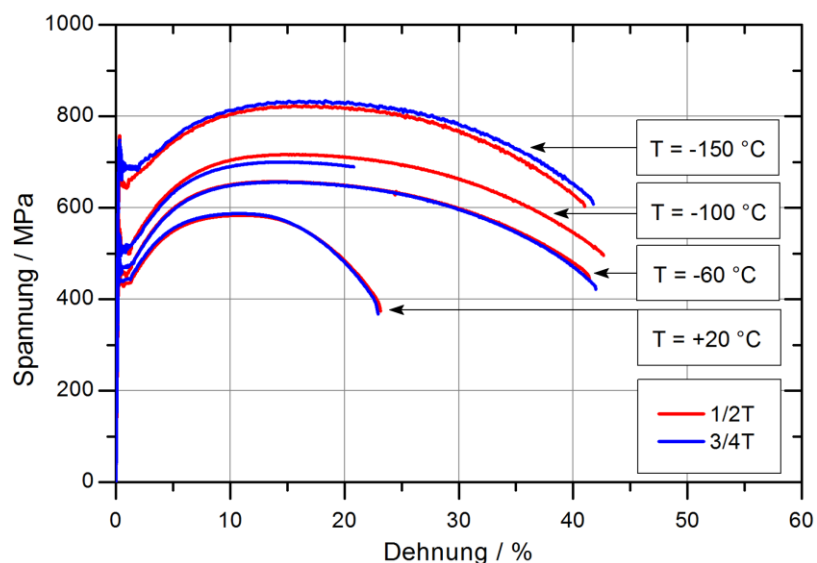


Abbildung 13: Technische Fließkurven für verschiedene Temperaturen und Entnahmepositionen, Werkstoff 22NiMoCr3-7 [Roos & Seebich, 2006]

Abbildung 15 zeigt die technischen Fließkurven des Werkstoffs 22NiMoCr3-7. Der Werkstoff besitzt eine ausgeprägte von der Temperatur abhängige Streckgrenze.

Mit Hilfe eines numerischen Anpassungsverfahrens wurden in [Roos & Seebich, 2006] die wahren Fließkurven bestimmt, Abbildung 14, welche die Grundlage der in diesem Vorhaben durchgeführten numerischen Berechnungen bildet.

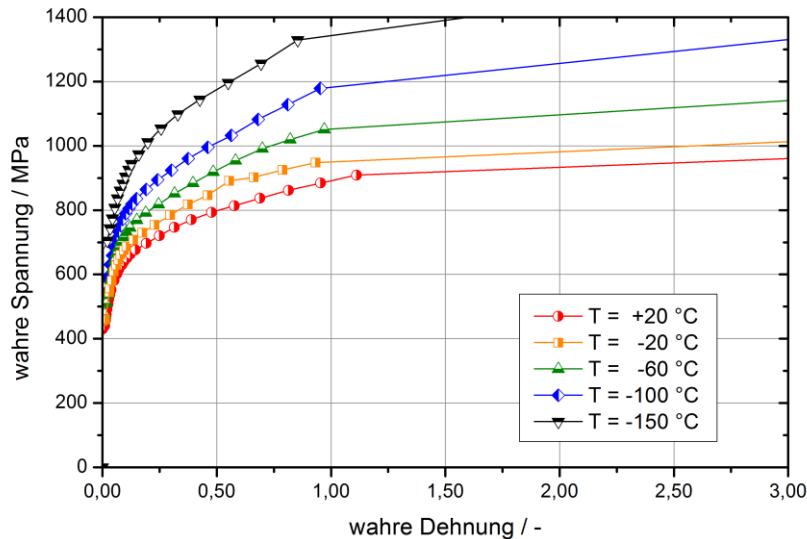


Abbildung 14: Wahre Fließkurven für verschiedene Temperaturen, Werkstoff 22NiMoCr3-7 [Roos & Seebich, 2006]

3.4 Kerbschlagarbeits-Temperatur-Kurve

Mit Hilfe des Kerbschlagbiegeversuches kann das temperaturabhängige Verformungsverhalten von Werkstoffen bei dynamischer Beanspruchung untersucht werden.

Aus dem Behältersegment wurden Charpy-V-Proben nach DIN EN ISO 14556 [DIN EN ISO 14556:2000-09, 2006] entnommen und am instrumentierten Kerbschlagbiegeversuch geprüft. Hierbei wurde ein 300 J Pendelschlagwerk verwendet.

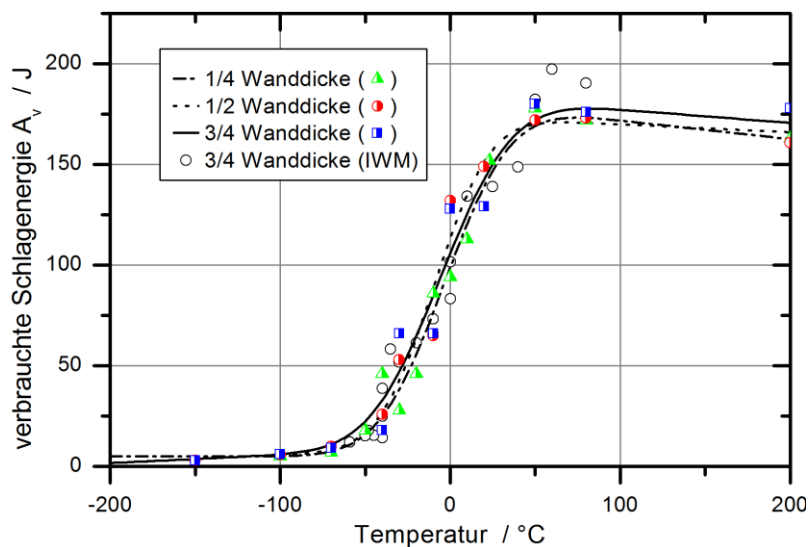


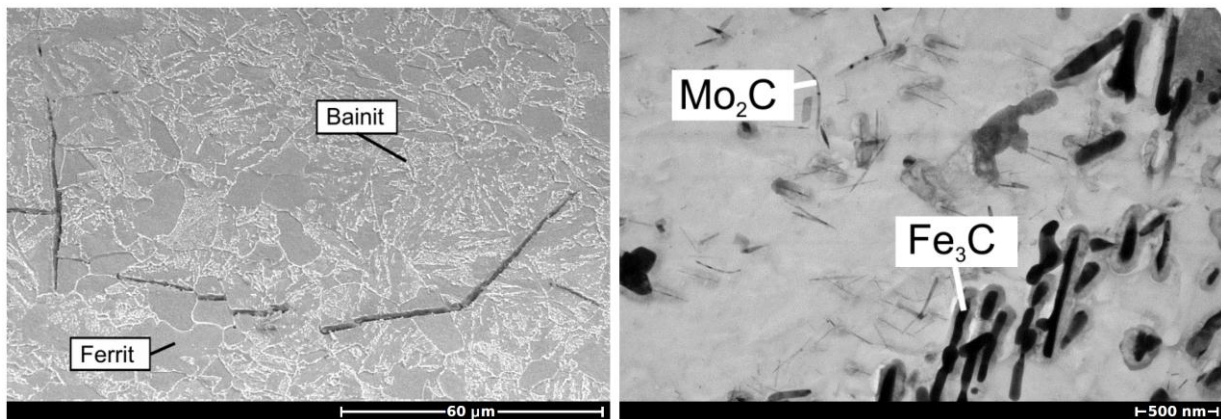
Abbildung 15: Kerbschlagarbeits-Temperaturkurve, Werkstoff 22NiMoCr3-7 [Seebich, 2007, p. 48]

Die Kerbschlagarbeits-Temperatur-Kurve der durchgeführten Versuche ist in Abbildung 15 dargestellt. Hierbei zeigt sich kaum ein Einfluss der Entnahmepositionen $T/4$, $T/2$ und $3/4 T$. Die eingezeichnete Kurve wurde nach [Hofer, et al., 1977] approximiert. Die Hochlagenenergie

gie beträgt 175 J und wird bei einer Temperatur von 50 °C erreicht. Diese Ergebnisse bestätigen die Annahme, dass dieser Werkstoff als homogen angesehen werden kann.

3.5 Fraktographische Untersuchungen

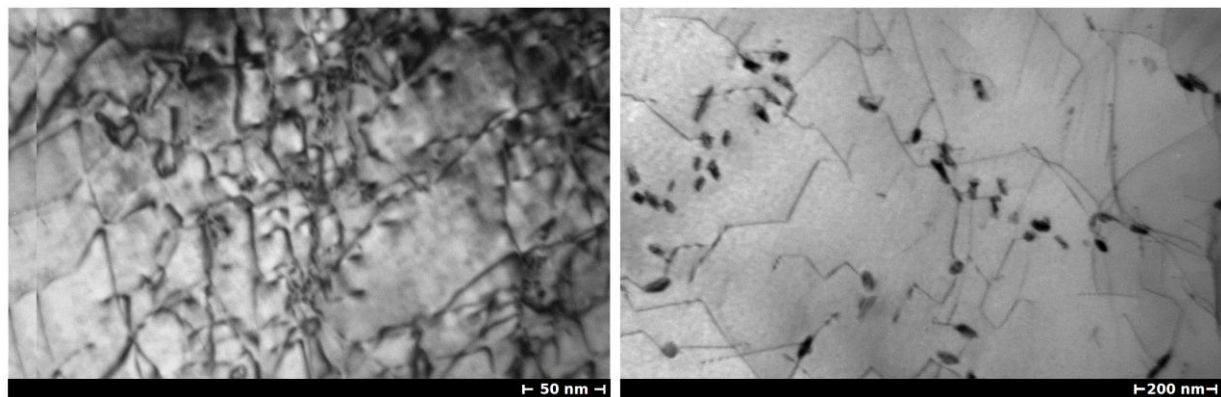
Zur Identifikation des auftretenden Bruchmechanismus werden in [Roos & Seebich, 2006] fraktographische Untersuchungen durchgeführt. Hierbei wird die Spaltbruchausgangsstelle sowie -ausbreitung und die stabile Rissinitiierung vor dem Eintreten eines Spaltbuches untersucht.



(a)

(b)

Abbildung 16: (a) Transkristalline Spaltbruchausbreitung, REM, 22NiMoCr3-7 [Seebich, 2007, p. 50] und (b) Ausscheidungsformen, Extraktionsreplika, 22NiMoCr3-7 [Seebich, 2007, p. 51]



(a)

(b)

Abbildung 17: (a) Ansammlung von Versetzungen, TEM, Metallfolie, 22NiMoCr3-7 und (b) Versetzungen, festgehalten an Ausscheidungen, TEM, Metallfolie, 22NiMoCr3-7 [Seebich, 2007, p. 52]

Abbildung 16 (a) zeigt das transkristalline Risswachstum durch die Ferritkörner (grauer Bereich) sowie eine Umlenkung der Rissausbreitungsrichtung im Bainit. Spröde Partikel sowie Versetzungsaufstauungen an Korngrenzcentripeln bilden meist die Ausgangsstelle für den Spaltbruch. Mit Hilfe von TEM Untersuchungen an Extraktionsreplika und Metallfolien können Gitterstörungen sowie Versetzungen abgebildet werden. Abbildung 17 (a) zeigt eine starke Versetzungsansammlung im Bereich der Bruchfläche.

Ausscheidungen treten in Form von Eisenkarbiden (Fe_3C) im bainitischen Bereich und Molybdänkarbiden (Mo_2C) im ferritischen Bereich auf, Abbildung 16 (b). Ebenso kann der Bruch von spröden Partikeln wie Karbiden zum Spaltbruch führen. Bei sehr hoher Auflösung sind diese Karbide auf der Spaltbruchfläche zu erkennen, Abbildung 18.

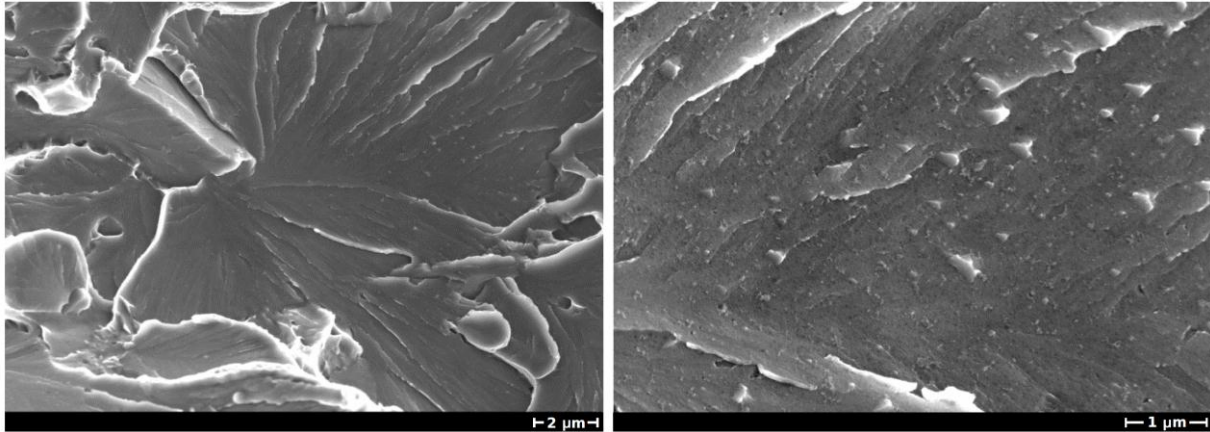


Abbildung 18: Spaltbruchfläche mit Karbiden, REM, Aufnahmen Max-Planck-Institut [Seebich, 2007, p. 53]

Für detailliertere Angaben bezüglich Versagensverhalten und Versagensort der Proben in Abhängigkeit der Temperatur sei auf [Roos & Seebich, 2006] verwiesen.

4 Schädigungsmechanik

Schädigungsmodelle sind in der Lage die auf mikroskopischer Ebene ablaufenden Versagensprozesse abzubilden und zu beschreiben. Im Rahmen der Bruchmechanik werden hingegen lediglich die auf makroskopischer Ebene auftretenden Versagensabläufe mit einbezogen. Ebenso ist die Anwendung auf angerissene Strukturen beschränkt.

Im Folgenden werden die in diesem Forschungsvorhaben eingesetzten schädigungsmechanischen Konzepte zur Beschreibung des Wabenbruchs und des Spaltbruchs näher erläutert.

4.1 Simulation der Zähigkeitshochlage – das lokale Rousselier Modell

Für die Beschreibung des Zähbruchs müssen die in Kapitel 2.2.1 beschriebenen drei Phasen der Wabenbruchentstehung mit kontinuumsmechanischen Ansätzen beschrieben werden.

Modelle zur Beschreibung der Hohlrauminitiierung. In der Literatur findet sich eine Vielzahl an mikromechanisch basierten Modellen zur Beschreibung der Hohlrauminitiierung. Die Modelle lassen sich in spannungsbasierte Ansätze [Argon, et al., 1975] [Beremin, 1981], dehnungsbasierte Ansätze [Goods & Brown, 1979] und Energiekriterien [Tanaka, et al., 1970] unterteilen. Ebenso kann die Initiierung spontan oder kontinuierlich [Chu & Needleman, 1980] beschrieben werden. Für den untersuchten Werkstoff 22NiMoCr3-7 haben die experimentellen Untersuchungen aus dem BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 [Roos & Seebich, 2006] gezeigt, dass die primären Hohlräume überwiegend an Mangansulfiden und Teilchen aus Verbindungen mit Aluminium, Zirkon, Schwefel und Magnesium entstehen. Weitere Untersuchungen der MPA Universität Stuttgart [Seidenfuß, 1992] sowie [Benzerga, et al., 2004] zeigen, dass bei solchen Teilchen eine nur sehr kleine Dehnung für die Hohlrauminitiierung benötigt wird. Bei den in diesem Forschungsvorhaben durchgeführten Berechnungen wird deshalb vereinfachend angenommen, dass die Hohlrauminitiierung beim Überschreiten der Streckgrenze R_e stattfindet.

Modelle zur Beschreibung des Hohlraumwachstums. Die schädigungsmechanischen Konzepte zur Beschreibung des Hohlraumwachstums können in zwei Gruppen eingeteilt werden:

- Nicht gekoppelte Modelle, bei denen das Hohlraumwachstum keinen Einfluss auf das Werkstoffverhalten hat. Typische Vertreter sind beispielsweise das McClintock [McClintock, 1968] oder das Rice & Tracey [Rice & Tracey, 1969] Modell.
- Gekoppelte Modelle hingegen beschreiben das Werkstoffverhalten mit einer speziellen Fließfunktion, wobei das Hohlraumwachstum zu einer Entfestigung des Werkstoffes führt. Typische Vertreter sind das Gurson Modell [Gurson, 1972] [Gurson, 1975], das von Tvergaard modifizierte Gurson Modell (GTN-Modell) [Tvergaard, 1981] und das Rousselier Modell [Rousselier, 1987] [Rousselier, 2001].

In diesem Forschungsvorhaben erfolgt die Simulation des Hohlraumwachstums mit dem Rousselier Modell [Rousselier, 2001]. Die MPA Universität Stuttgart verfügt über langjährige Erfahrung bei der Anwendung des Rousselier Modells, vgl. Kapitel 10. Bei diesem Modell werden die Hohlräume nicht explizit dargestellt. Das Verhalten eines porösen Werkstoffes wird anhand eines homogenen Volumenelements mit kontinuumsmechanischen und thermodynamischen Gesetzen beschrieben. Für eine detaillierte Beschreibung der weiteren Schädigungsmodelle sei auf [Seidenfuß, 2013 (in press)] verwiesen.

Die Grundlage des Rousselier Modells liegt in einem allgemein formulierten thermomechanischen Ansatz. Das Verhalten eines plastisch verformbaren Werkstoffes kann durch die folgenden zwei Potentiale beschrieben werden:

- Das thermodynamische Potential φ
- Das plastische Potential Φ

Das thermodynamische Potential und das plastische Potential haben die Form:

$$\varphi = \varphi_{el}(\varepsilon_{el}) + \varphi_p(p) + \varphi_f(f) \quad (20)$$

$$\Phi = \Phi_1\left(\frac{\sigma_v}{1-f}, P(p)\right) + \Phi_2\left(\frac{\sigma_m}{1-f}, B(f)\right) \quad (21)$$

Darin sind: B : Funktion von f zur Beschreibung der Werkstoffentfestigung
 P : Funktion von p zur Beschreibung der Fließgrenze
 f : aktuelles Hohlraumvolumen
 p : Werkstoffverfestigung

Rousselier geht von isotropem Materialverhalten aus, d.h. p und f sind skalare Größen. Eine weitere Grundlage ist die Erfüllung der Normalitätsbedingung, d.h. der Vektor des plastischen Dehnungsincrementes liegt auf der Normalen der Fläche, welche durch die Fließbedingung beschrieben wird. Die so hergeleitete Fließfunktion von Rousselier lautet wie folgt:

$$\Phi = \frac{\sigma_v}{1-f} + \sigma_k \cdot 2 \cdot D \cdot \exp\left[\frac{\sigma_m}{(1-f) \cdot \sigma_k}\right] - \sigma_y = 0 \quad (22)$$

Darin sind: Φ : Fließfunktion
 σ_v : deviatorischer Spannungsanteil
 σ_m : hydrostatischer Spannungsanteil
 σ_k, D : Werkstoffkonstanten
 σ_y : aktuelle Fließgrenze

Die Fließfunktion beschreibt die Ver- und Entfestigung des Werkstoffs bedingt durch das Hohlraumvolumen f . Die Fließgrenzfläche ist im Gegensatz zu der Fließgrenzfläche nach von Mises in Richtung der hydrostatischen Achse begrenzt und somit vom hydrostatischen Spannungszustand abhängig, Abbildung 19.

Das zunehmende lokale Porenwachstum führt zu lokaler Werkstoffschädigung. Durch die porenbedingte Entfestigung kommt es zu einer Lokalisierung der Dehnungen [Chakrabarti & Spretnak, 1975]. Das Schädigungsmodell muss demnach ebenso in der Lage sein, diese endliche Zone darzustellen. Dies geschieht durch Einführung eines zusätzlichen werkstoffabhängigen Parameters, der charakteristischen Länge l_c [Rousselier, 2001]. In der Simulation wird dieser Parameter so berücksichtigt, dass die Elementgröße im schädigungsrelevanten Bereich an l_c angepasst wird. Dadurch entstehen jedoch netzabhängige Ergebnisse, da die Schädigung stets in einer Elementschicht lokalisiert. Abhilfe schaffen hierbei sogenannte nichtlokale Schädigungsmodelle. In Kapitel 5 wird die nichtlokale Formulierung des Rousselier Modells vorgestellt, welche in diesem Forschungsvorhaben zum Einsatz kommt.

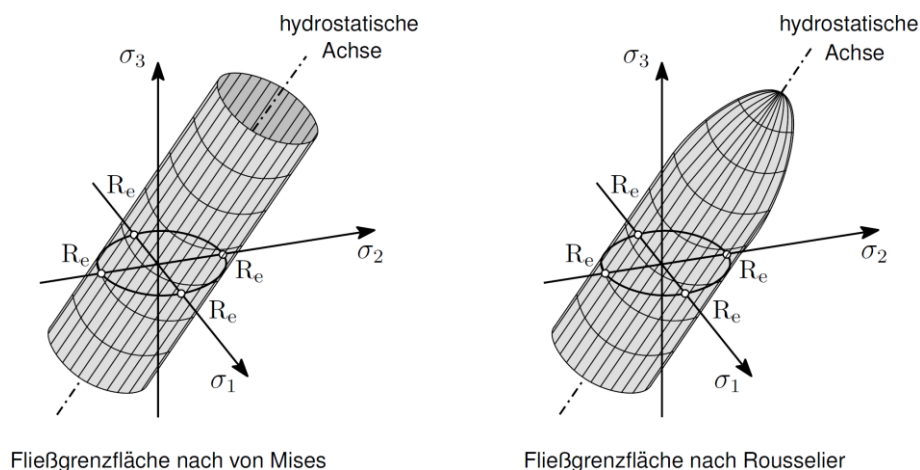


Abbildung 19: Fließgrenzfläche nach von Mises und nach Rousselier

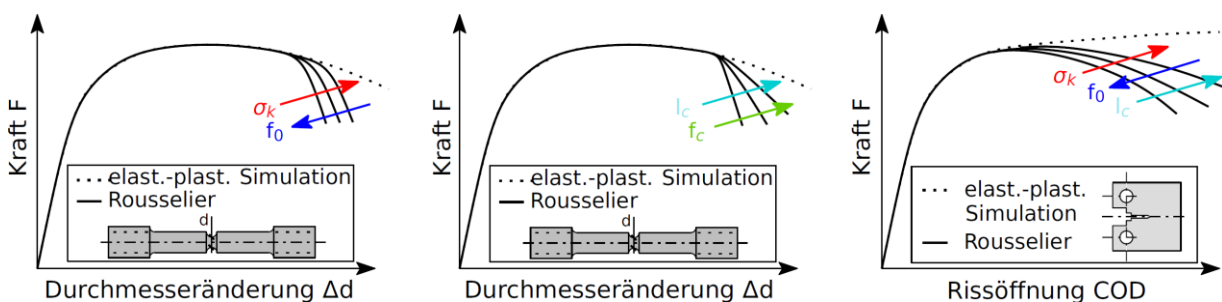


Abbildung 20: Einfluss der Rousselier Parameter auf das Last-Verformungsverhalten unterschiedlicher Probengeometrien [Seebich, 2007, p. 31]

Modelle zur Beschreibung der Hohlraumkoaleszenz. Der Mechanismus der Hohlraumkoaleszenz ist von der Mikrostruktur des Werkstoffs und von der äußeren Belastung abhängig. Der am weitesten verbreitete Ansatz besagt, dass Hohlraumkoaleszenz eintritt sobald ein kritisches Hohlraumvolumen f_c erreicht wird [Tvergaard, 1981]. Andere Ansätze sagen Hohl-

raumkoaleszenz bei Erreichen einer kritischen Dehnung oder einer kritischen Spannung voraus. In diesem Forschungsvorhaben wird angenommen, dass Hohlraumkoaleszenz bei Erreichen eines kritischen Hohlraumvolumens f_c erreicht wird. Zusätzlich zu der Bedingung $f \geq f_c$ wird zugrunde gelegt, dass der Werkstoff bei Erreichen des kritischen Hohlraumvolumens nicht plötzlich, sondern kontinuierlich versagt [Tvergaard & Needleman, 1984]. Diese von Tvergaard und Needleman ursprünglich in das Gurson Modell [Gurson, 1975] eingeführte effektive Schädigung $f^*(f)$ wird hier in die Formulierung des Rousselier Modells übernommen:

$$f^*(f) = \begin{cases} f & \forall f \leq f_c \\ f_c + \frac{(f_u - f_c)}{(f_f - f_c)} \cdot (f - f_c) & \forall f \geq f_c \end{cases} \quad (23)$$

Darin sind: f_c : kritisches Hohlraumvolumen
 f_u : effektives Hohlraumvolumen beim Bruch
 f_f : Hohlraumvolumen bei vollständigem Versagen

Diese Annahme eines kontinuierlichen Versagens führt in der FE-Simulation zu weniger Konvergenzproblemen als eine diskontinuierliche Formulierung der Schädigungsevolution. Man bezeichnet den Term

$$\kappa = \frac{(f_u - f_c)}{(f_f - f_c)} \quad (24)$$

auch als Beschleunigungsterm κ . Das Koaleszenzkriterium in Form eines kritischen Hohlraumvolumens liefert bei kleinen Hohlraumvolumina und hohen Mehrachsigkeiten ausreichend gute Ergebnisse. Treffen diese Annahmen nicht zu, kann auf alternative, aber aufwändigere Modelle zurückgegriffen werden, [Benzerga, et al., 2004] [Pardeon & Hutchison, 2000] [Thomason, 1998].

Die zu bestimmenden Parameter für das Rousselier Modell sind f_0 , f_c , σ_k , D und l_c . Einige der Parameter haben einen direkten Bezug zur Mikrostruktur und können mit Hilfe metallographischer oder tomographischer Untersuchungen am Werkstoff bestimmt werden. Ebenso kann eine Bestimmung der Parameter durch Anpassung der numerischen Ergebnisse an die experimentellen Ergebnisse erfolgen. Der zu bestimmende Parameter wird dabei in der Simulation solange variiert, bis das berechnete Kraft-Verformungsverhalten mit dem Experiment übereinstimmt [Seidenfuß, 1992]. Für diese numerische Anpassungsmethode eignen sich z.B. Rundzugproben unterschiedlicher Kerbradien oder auch Bruchmechanikproben wie C(T)-Proben. Abbildung 20 zeigt schematisch die Einflüsse der verschiedenen Parameter auf das Last-Verformungsverhalten unterschiedlicher Probengeometrien.

4.2 Simulation der Zähigkeitstieflage – das Beremin Modell

Ferritische Stähle zeigen im Bereich der Zähigkeitstieflage in der Regel Werkstoffversagen durch Spaltbruch. Da die mikroskopischen Spaltbruchereignisse einer starken Streuung unterliegen, erfolgt deren Beschreibung mit einem probabilistischen Konzept. Das wichtigste Konzept dieser Art ist das durch die Beremin Gruppe [Beremin, 1983] vorgeschlagene Modell. Dieses basiert auf einem weakest-link Ansatz und einer zweiparametrischen Weibull-Verteilung für das Auftreten eines Spaltbruchereignisses für eine bestimmte Probengeometrie. Die Spaltbruchbelastung wird hierbei durch die Weibullspannung charakterisiert und berechnet sich mit:

$$\sigma_w = \sqrt[m]{\int_{V_{pl}} (\sigma_1)^m \frac{dV}{V_0}} \quad (25)$$

Darin sind: σ_1 : größte Hauptspannung
 m : Weibullmodul
 V_{pl} : plastifiziertes Volumen
 V_0 : Einheitsvolumen

Im Rahmen des weakest-link Ansatzes [Mudry, 1987] wird postuliert, dass das Versagen eines einzelnen Kontrollvolumens V_0 das instabile Versagen der gesamten Struktur zur Folge hat. Damit ergibt sich die akkumulierte Ausfallwahrscheinlichkeit P_f zu:

$$P_f(\sigma_w) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u} \right)^m \right] \quad (26)$$

Die Bestimmung der Materialparameter m und σ_u erfolgt in einer iterativen Anpassung durch den Vergleich von numerischen mit experimentellen Ergebnissen [ESIS P6-98, 1998]. Mit Hilfe der Maximum Likelihood Methode wird schließlich der optimale Parametersatz identifiziert.

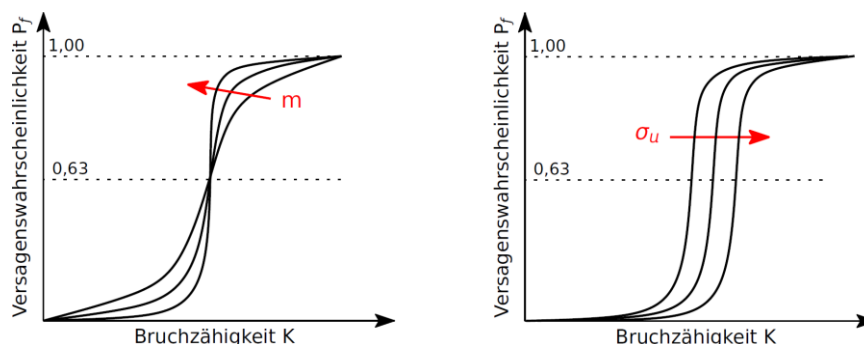


Abbildung 21: Einfluss der Beremin Parameter auf die Versagenswahrscheinlichkeit von Bruchmechanikproben [Seebich, 2007, p. 28]

Der qualitative Einfluss der Beremin Parameter auf die Versagenswahrscheinlichkeit ist schematisch in Abbildung 21 dargestellt.

Der eben beschriebene Vorgang entspricht dem Original-Ansatz von Beremin. Es existiert eine Vielzahl an Modifikationen dieses Originalen Beremin-Modells, z.B. nach Tanguy [Tanguy, 2001], Merkert [Merkert, 2002], Gao et al. [Gao, et al., 1998], Rugieri et al. [Rugieri, et al., 2000] oder Hohe et al. [Hohe, et al., 2003]. Diese Modifikationen werden hier nicht näher erläutert, da in diesem Forschungsvorhaben auf den Original-Ansatz zurückgegriffen wird.

4.3 Simulation des Übergangsgebietes – das gekoppelte Modell

Um das gesamte Schädigungsverhalten zwischen Zähigkeitshochlage und Zähigkeitstieflage numerisch beschreiben zu können sind sogenannte gekoppelte Modelle erforderlich. Diese gekoppelten Modelle müssen in der Lage sein, die mikromechanischen Vorgänge beim Spalt- sowie beim Wabenbruch parallel beschreiben zu können.

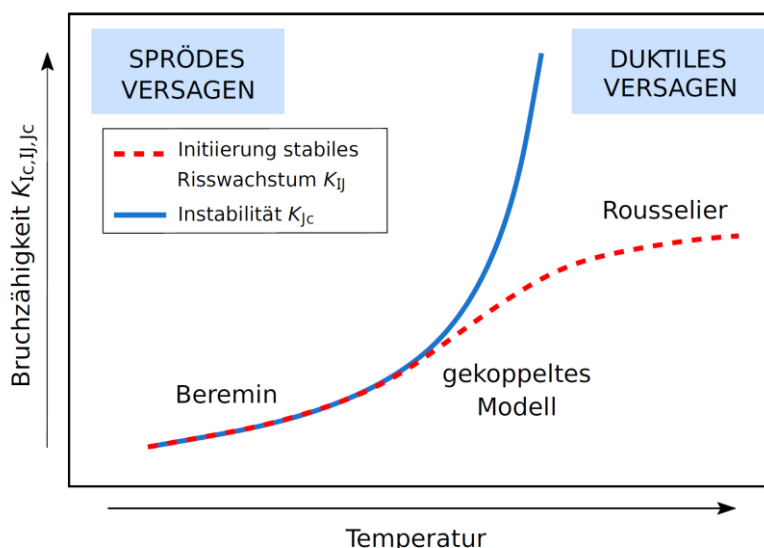


Abbildung 22: Schematische Darstellung zum Einsatz verschiedener Schädigungsmodelle für unterschiedliche Temperaturbereiche

Für die Zähigkeitshochlage bedeutet dies, dass die duktile Rissinitiierung und die Risserweiterung durch Porenbildung beschrieben werden muss. In der Zähigkeitstieflage führt Spaltbruch zum instabilen Versagen des Bauteils. Im Übergangsbereich kommt es zur Kombination beider Versagensmechanismen, Abbildung 22. Dies bedeutet, dass spröder Restbruch mit vorangegangener duktiler Rissinitiierung und duktilen Risswachstum auftreten kann. Das Maß der duktilen Risserweiterung ist dabei neben dem Werkstoff u.a. abhängig von der Spannungsmehrachsigkeit, der Probengröße und der Probengeometrie.

Für dieses Forschungsvorhaben wurde folgende Modellkombination für den Übergangsbereich gewählt: Simulation des duktilen Versagens durch das nichtlokale Rousselier-Modell und Berechnung der Spaltbruchwahrscheinlichkeit mit dem Beremin-Modell, Abbildung 23.

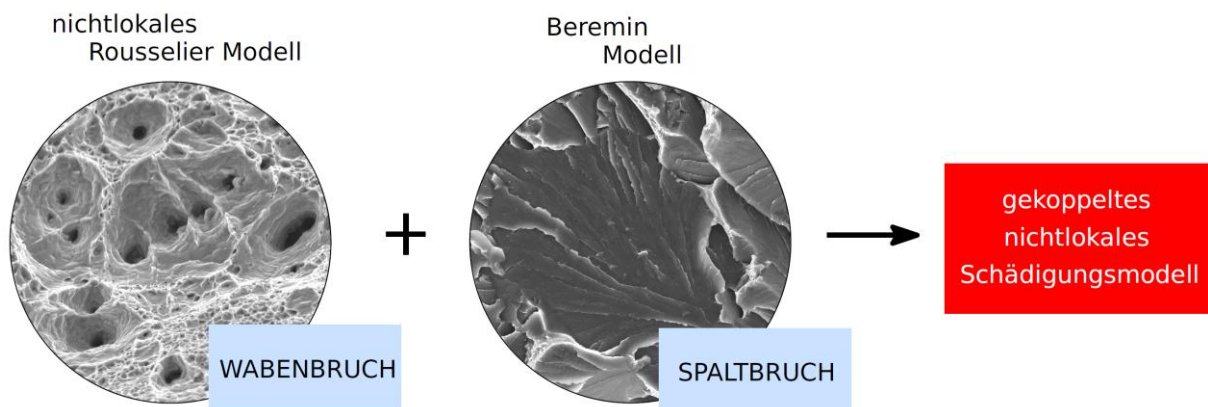


Abbildung 23: Modellkombination für das gekoppelte nichtlokale Schädigungsmodell

Mit dieser Kopplung kann in Abhängigkeit der Temperatur und der Belastung, der Betrag der stabilen Risserweiterung und die zugehörige Spaltbruchwahrscheinlichkeit angegeben werden. Eine genaue Beschreibung der nichtlokalen Formulierung des Rousselier Modells folgt in Kapitel 5.

5 Das nichtlokale Rousselier Modell

Die Motivation zur Entwicklung nichtlokaler Schädigungsmodelle folgt aus der Erkenntnis, dass nach Untersuchungen von [Bazant & Pijaudier-Cabot, 1989] die Schädigung nicht nur von der Zustandsvariable am aktuellen Punkt, sondern auch von den Zustandsvariablen in der Umgebung des aktuellen Punktes abhängig ist. Als Modellvorstellung wird angenommen, dass sich Hohlräume im Werkstoff gegenseitig beeinflussen und nicht unabhängig voneinander sind. Das in Kapitel 4.1 vorgestellte lokale Rousselier Modell ist nicht in der Lage dies zu berücksichtigen. Um die Schädigungsentwicklung nicht allein von den lokalen Spannungen und Dehnungen abhängig zu machen erfolgt die Einführung eines weiteren Materialparameters, welcher direkt in die konstitutiven Gleichungen eingeht. Modelle, bei welchen die Schädigung in einer solchen sogenannten Prozesszone betrachtet wird, werden nichtlokale Schädigungsmodelle genannt.

Es existieren zwei Ansätze zur Vorgehensweise um Einflussgrößen in der Umgebung eines Punktes zu berücksichtigen [Flatten, 2008, p. 46]: Die zusätzliche Größe kann z.B. über ihren gewichteten Mittelwert über das Einflussgebiet berücksichtigt werden oder über Differentialoperatoren in die Gleichungen eingehen. In den folgenden Kapiteln werden diese sogenannten Integral- und Gradientenansätze näher vorgestellt.

5.1 Nichtlokale Erweiterung des lokalen Rousselier Modells

5.1.1 Schädigungsevolution

Die Modellvorstellung der mikroskopischen Betrachtung geht davon aus, dass die Hohlräume im Werkstoff gleichmäßig verteilt sind. Bei einer elastischen Verformung des Werkstoffs bleibt das Werkstoffvolumen konstant. Bei plastischer Verformung kommt es zur Volumenänderung des Werkstoffs, was eine Dichteänderung zur Folge hat, da sich die Masse des Werkstoffs nicht ändert. Diese Dichteänderung folgt aus dem Hohlraumwachstum. Für die Evolutionsgleichung für das Hohlraumwachstum schlägt Chu [Chu & Needleman, 1980] folgenden Zusammenhang vor:

$$\dot{f}_{\text{lokal}} = \dot{f}_{\text{Wachstum}} + \dot{f}_{\text{Nukleation}} \quad (27)$$

Der Einfluss der plastische Dehnung $\dot{\epsilon}_{kk}^{\text{pl}}$ auf das Wachstum der Hohlraum lässt sich formulieren durch:

$$\dot{f}_{\text{Wachstum}} = (1 - f)\dot{\epsilon}_{kk}^{\text{pl}} \quad (28)$$

Die Nukleation wird durch einen stochastischen Ansatz, basierend auf der Gaußschen Normalverteilung und Abhängig von der plastischen Vergleichsdehnung $\dot{\bar{\epsilon}}^{\text{pl}}$, beschrieben:

$$\dot{f}_{\text{Nukleation}} = A\dot{\bar{\epsilon}}^{\text{pl}} \quad (29)$$

Die Schädigungsevolution aus Nukleation wird im Folgenden vernachlässigt, sodass sich $\dot{f}_{\text{Nukleation}} = 0$ ergibt.

5.1.2 Integralansätze

Auf den grundlegenden Arbeiten von Rogula [Rogula, 1965] und Eringen [Eringen, 1966] basierend wird eine Größe mit einer Wichtungsfunktion beaufschlagt und über ein bestimmtes Gebiet gemittelt. Für das nichtlokale Schädigungsmodell bedeutet dies, dass die gewichtete Änderung des lokale Hohlraumvolumens \dot{f} in einem Gebiet Ω betrachtet wird. Die daraus resultierende nichtlokale Schädigungsentwicklung \dot{d} ergibt sich zu:

$$\dot{d} = \frac{1}{\Psi(\mathbf{x})} \int_{\Omega} \psi(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \dot{f}(\mathbf{x}) d\Omega(\mathbf{y}) \quad (30)$$

Darin sind: $\psi(\mathbf{y}, \mathbf{x})$: Gaußsche Wichtungsfunktion
 $\Psi(\mathbf{x})$: Volumenintegral der Gaußschen Wichtungsfunktion
 $d\Omega$: infinitesimales Volumenelement

Das Volumenintegral der Wichtungsfunktion hat die Form:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \psi(\mathbf{y}, \mathbf{x}) d\Omega(\mathbf{y}) \quad (31)$$

Der Vektor \mathbf{y} bezeichnet die Position des infinitesimal kleinen Volumenelements $d\Omega$ und \mathbf{x} steht für den aktuell betrachteten Punkt. Die Gaußsche Wichtungsfunktion hat die Form:

$$\psi(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi^{2/3}l_c^3} \exp\left[-\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2}{4l_c^2}\right] \quad (32)$$

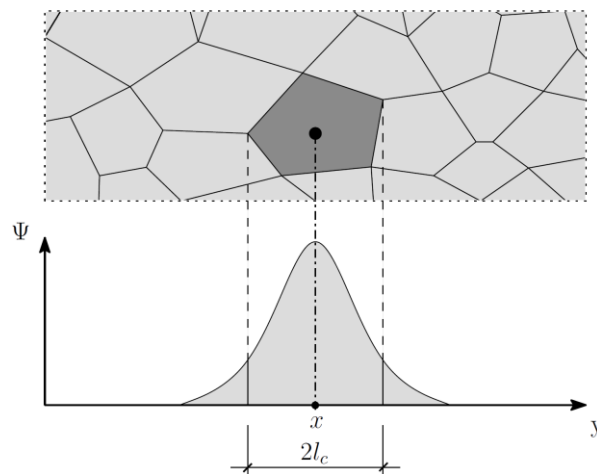


Abbildung 24: Ansatz nach Peerlings [Peerling, 1999]: Berücksichtigung des Umgebungseinflusses durch eine Wichtungsfunktion

Das Volumen $d\Omega$ wird hierbei mit der charakteristischen Länge l_c beschrieben. Diese Länge ist werkstoffabhängig und somit abhängig von der Mikrostruktur. Abbildung 24 zeigt schema-

tisch, welchen Einfluss die Umgebung um einen Punkt \mathbf{x} auf die Schädigungsentwicklung an diesem Punkt hat. Entsprechend der Gaußschen Glockenkurve haben Punkte im Randgebiet von $d\Omega$ einen geringeren Einfluss auf die Schädigungsentwicklung.

Setzt man $l_c = 0$ so geht die nichtlokale Schädigungsentwicklung der integralen Formulierung in die lokale Formulierung über.

5.1.3 Gradientenabhängige Formulierung

Die gradientenabhängige Formulierung baut ebenfalls auf die integrale Form der Schädigungsentwicklung aus Gleichung (30) auf. Die gradientenabhängige Formulierung folgt aus einer Reihenentwicklung nach Taylor für die Funktion \dot{f} . Durch Einsetzen in Gleichung (30) kann die Funktion integriert werden und bei Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung gelangt man zu der Form:

$$\dot{d}(\mathbf{x}) = \dot{f}(\mathbf{x}) + C_{\text{length}} \nabla^2 \dot{f}(\mathbf{x}) \quad (33)$$

Durch zweimaliges Ableiten, Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung und wiederum Einsetzen in Gleichung (33) erhält man:

$$\dot{d}(\mathbf{x}) = \dot{f}(\mathbf{x}) + C_{\text{length}} \nabla^2 \dot{d}(\mathbf{x}) \quad (34)$$

Dabei hängt die Schädigungsentwicklung \dot{d} in impliziter Form vom Gradienten der skalaren Schädigungsentwicklung ab. Die gesuchte Gleichgewichtsbedingung lautet [Reusch, 2003]:

$$\dot{d}(\mathbf{x}) - \dot{f}(\mathbf{x}) - C_{\text{length}} \nabla^2 \dot{d}(\mathbf{x}) = 0 \quad (35)$$

Unter der Annahme, dass die Schädigung nicht über den Gebietsrand „abfließt“ [Feucht, 1998] wird zudem $\nabla \dot{d} \cdot \mathbf{n} = 0$ angenommen. Der Parameter C_{length} kann mit folgender Beziehung abgeschätzt werden:

$$C_{\text{length}} = \frac{l_c^2}{4} \quad (36)$$

Die Länge l_c beschreibt hierbei den Abstand der schädigungsrelevanten Hohlräume zueinander.

Durch die Einführung der nichtlokalen Schädigung d ergibt sich die Fließfunktion nach Rousselier aus Gleichung (22) zu:

$$\Phi = \frac{\sigma_v}{1 - d^*} + \sigma_k \cdot 2 \cdot D \cdot \exp \left[\frac{\sigma_m}{(1 - d^*) \cdot \sigma_k} \right] - \sigma_y = 0 \quad (37)$$

Für die Materialschädigung wird nun die effektive nichtlokale Schädigung $d^*(d)$ anstatt der lokalen Größe $f^*(f)$ aus Gleichung (23) verwendet, mit:

$$d^*(d) = \begin{cases} d & \forall d \leq f_c \\ f_c + \frac{(f_u - f_c)}{(f_f - f_c)} \cdot (d - f_c) & \forall d \geq f_c \end{cases} \quad (38)$$

5.2 Schwache Form der Schädigungsentwicklung

Für die numerischen Berechnungen wird eine schwache Formulierung der Gleichgewichtsbedingung benötigt. Die kinematischen Beziehungen sowie das Materialgesetz müssen somit nicht an jedem Punkt sondern nur im integralen Sinne über ein bestimmtes Gebiet erfüllt werden. In [Feucht, 1998] wird eine Formulierung vorgeschlagen, bei welcher die Evolutionsgleichung mit einer Testfunktion η multipliziert und über ein Gebiet Ω integriert wird. Numerische Schwierigkeiten durch Unstetigkeiten wie Gradienten werden damit umgangen. Die Bilanzgleichung lautet:

$$\int_{\Omega} \left(d(\mathbf{x}) - \dot{f}(\mathbf{x}) - C_{\text{length}} \nabla^2 \dot{d}(\mathbf{x}) \right) \eta \cdot d\Omega = 0 \quad (39)$$

Der Ausdruck in Klammer stellt die starke Formulierung aus Gleichung (34) dar. Für beliebige Testfunktionen η muss sich der Ausdruck in Klammern zu Null ergeben um die Gleichung zu erfüllen. Für die skalare Testfunktion kann ebenso das Hohlraumvolumen oder die Verschiebung eingesetzt werden.

Durch partielle Integration und unter Anwendung des Satz vom Gauß ergibt sich die Gleichung zu:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(d(\mathbf{x}) - \dot{f}(\mathbf{x}) - C_{\text{length}} \nabla^2 \dot{d}(\mathbf{x}) \right) \eta \cdot d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \left(d(\mathbf{x}) - \dot{f}(\mathbf{x}) \right) \eta \cdot d\Omega + \int_{\Omega} \left(C_{\text{length}} \nabla \dot{d}(\mathbf{x}) \right) \nabla \eta \cdot d\Omega - \int_{\Omega} \left(C_{\text{length}} \nabla \dot{d}(\mathbf{x}) \right) \nabla \eta \cdot d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \left(d(\mathbf{x}) - \dot{f}(\mathbf{x}) \right) \eta \cdot d\Omega + \int_{\Omega} \left(C_{\text{length}} \nabla \dot{d}(\mathbf{x}) \right) \nabla \eta \cdot d\Omega - \int_{\Gamma} \left(C_{\text{length}} \nabla \dot{d}(\mathbf{x}) \right) \mathbf{n} \cdot \eta \cdot d\Gamma \end{aligned}$$

Mit der Randbedingung $\nabla \dot{d} \cdot \mathbf{n} = 0$ aus [Feucht, 1998] ergibt sich die endgültige Bilanzgleichung zu:

$$\int_{\Omega} \left(d(\mathbf{x}) - \dot{f}(\mathbf{x}) \right) \eta \cdot d\Omega + \int_{\Omega} \left(C_{\text{length}} \nabla \dot{d}(\mathbf{x}) \right) \nabla \eta \cdot d\Omega = 0 \quad (40)$$

Setzt man $\eta = \dot{d}$ und betrachtet zudem für die Berechnung der Verschiebungen die schwache Form der Impulsbilanz, so ergeben sich die Folgenden zu lösende Gleichungen:

$$\int_{\Omega} (\mathbf{d}(\mathbf{x}) - \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{x})) \dot{\mathbf{d}} \cdot d\Omega + \int_{\Omega} (C_{\text{length}} \nabla \dot{\mathbf{d}}(\mathbf{x})) \nabla \dot{\mathbf{d}} \cdot d\Omega = 0 \quad (41)$$

$$\int_{\Omega} (\nabla \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}) \nabla \mathbf{u} \cdot d\Omega = 0$$

Darin sind: $\boldsymbol{\sigma}$: Spannungstensor
 \mathbf{f} : Volumenkraft
 $\nabla \mathbf{u}$: Variation des Verschiebungsvektors

In der Finite Elemente Methode wird der Verschiebungsvektor \mathbf{u} an einem beliebigen Punkt innerhalb eines Elements mit Hilfe von Ansatzfunktionen \mathbf{N}_u und der Knotenpunktverschiebungen $\hat{\mathbf{u}}$ berechnet. Für die Berechnung des Schädigungszuwachses $\dot{\mathbf{d}}$ im nichtlokalen Rousselier Modell gilt dies analog. Mit der allgemeinen Beziehung für die Verzerrungen,

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \right)^T + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \right) \right] \quad (42)$$

gelten die folgenden Zusammenhänge:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{N}_u \hat{\mathbf{u}} & \dot{\mathbf{d}} &= \mathbf{N}_d \hat{\mathbf{d}} \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \nabla \mathbf{u} = \mathbf{B}_u \hat{\mathbf{u}} & \nabla \dot{\mathbf{d}} &= \mathbf{B}_d \hat{\mathbf{d}} \end{aligned} \quad (43)$$

Die Matrizen \mathbf{B}_u und \mathbf{B}_d enthalten die jeweiligen Ableitungen der Ansatzfunktionen \mathbf{N}_u und \mathbf{N}_d . Das zu lösende Gleichungssystem für ein Element ergibt sich zu:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{ud} \\ \mathbf{K}_{du} & \mathbf{K}_{dd} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \hat{\mathbf{u}} \\ \Delta \hat{\mathbf{d}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_m^{\text{ext}} - \mathbf{f}_m^{\text{int}} \\ -\mathbf{f}_d^{\text{int}} \end{Bmatrix} \quad (44)$$

Hierbei beschreibt $\mathbf{f}_d^{\text{int}}$ den Vektor der Kräfte, welche die Delokalisierung der Schädigung bewirken, $\mathbf{f}_m^{\text{int}}$ den Vektor der Reaktionskräfte aus inneren Spannungen und $\mathbf{f}_m^{\text{ext}}$ den Vektor der externen Reaktionskräfte aus externen Lasten. Die Teilmatrizen der Gesamtsteifigkeitsmatrix \mathbf{K} haben die Form:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{uu} &= \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \mathbf{C}_{ep} \mathbf{B}_u d\Omega & \mathbf{K}_{ud} &= \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \mathbf{C}_{ep} \mathbf{N}_d d\Omega \\ \mathbf{K}_{du} &= - \int_{\Omega} \mathbf{N}_d^T \mathbf{C}_{ep} \mathbf{B}_u d\Omega & \mathbf{K}_{dd} &= \int_{\Omega} \mathbf{N}_d^T \mathbf{N}_d d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{N}_d^T \mathbf{C}_{dd} \mathbf{N}_d d\Omega \int_{\Omega} \mathbf{B}_d^T C_{\text{length}} \mathbf{B}_d d\Omega \end{aligned} \quad (45)$$

Die Gesamtsteifigkeitsmatrix ist demnach unsymmetrisch. Der Anteil der nichtlokalen Schädigung wird durch die Teilmatrizen \mathbf{K}_{ud} , \mathbf{K}_{du} und \mathbf{K}_{dd} beschrieben.

Die konsistenten Tangentensteifigkeitsmatrizen \mathbf{C}_{ep} , \mathbf{C}_{ed} , \mathbf{C}_{de} und \mathbf{C}_{dd} sind ebenfalls um den Anteil der Schädigung zu erweitern. Der Zusammenhang zwischen Dehnung, Spannung und der Schädigung ergibt sich mit der Beziehung:

$$\begin{aligned}\partial \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{C}_{ep} : \partial \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{C}_{ed} : \partial d \\ \dot{\mathbf{f}} &= \mathbf{C}_{de} : \partial \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{C}_{dd} : \partial d\end{aligned}\tag{46}$$

Die Gleichungen für die Lastvektoren aus Gleichung (44) ergeben sich zu:

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_m^{\text{ext}} &= \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}_i d\Omega \\ \mathbf{f}_m^{\text{ext}} &= \int_{\Omega} \mathbf{N}_u^T \mathbf{f}_b d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{N}_u^T \mathbf{t}_s d\Gamma \\ \mathbf{f}_d^{\text{int}} &= \int_{\Omega} \mathbf{N}_d^T d_i d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{N}_d^T \mathbf{f}_i d\Omega \int_{\Omega} \mathbf{B}_d^T C_{\text{length}} \nabla d_i d\Omega\end{aligned}\tag{47}$$

6 Implementierung des User-Elements in ANSYS

Der grundsätzliche Aufbau eines Finite Elemente (FE) Programms gliedert sich in die drei Programmabschnitte Pre-Prozessor, Solver und Post-Prozessor. Im Pre-Prozessor wird das mathematische Modell definiert. Dabei werden die Geometrie, die Randbedingungen, die Vernetzung sowie die Materialdefinition festgelegt. Der Solver dient der kompletten Berechnung der Problemstellung. Im anschließenden Post-Processor erfolgt die Auswertung der berechneten Daten. Für die nachfolgenden Berechnungen wurde das Programm ANSYS gewählt.

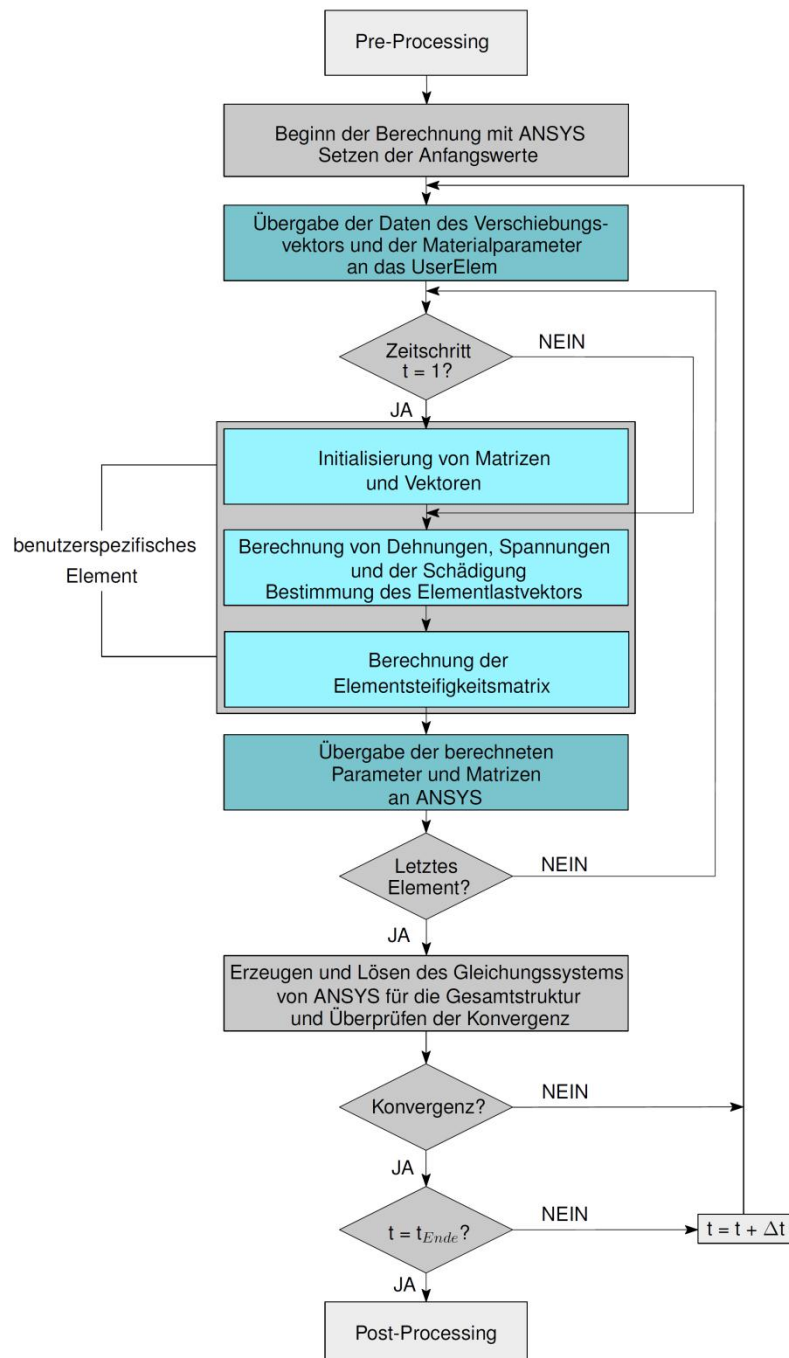


Abbildung 25: Programmstruktur bei Einsatz des benutzerspezifischen Elementtyps UserElement in ANSYS

$$\mathbf{C} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{1-\nu} & 0 \\ \frac{\nu}{1-\nu} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \end{bmatrix} \quad (48)$$

Die Steifigkeitsmatrix des Elements ergibt sich durch folgende Gleichung:

$$\mathbf{K} = \sum_{ij} t_{ij} \alpha_{ij} \mathbf{F}_{ij} = \sum_{ij} t_{ij} \alpha_i \alpha_j \mathbf{F}_{ij} \quad \text{mit} \quad \mathbf{F} = \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} \det \mathbf{J} \quad (49)$$

Durch eine Elementkantenlänge von 2 mm und einer Dicke t von 2 mm vereinfacht sich die Berechnung. Die Jacobi-Matrix entspricht dann der Einheitsmatrix und es folgt $\det \mathbf{J} = 1$.

Die Steifigkeitsmatrizen der analytischen Rechnung und der Simulation mit dem UserElem für den linear elastischen Fall zeigen keinerlei Abweichungen. Die Transformationsmatrix \mathbf{B} wird mit Hilfe der Ansatzfunktionen aus Gleichung (43) berechnet:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \dots & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial y} & \frac{\partial N_8}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (50)$$

Die unbekanntenen Verschiebungen und Reaktionskräfte aus Abbildung 26 ergeben sich mit der Gleichgewichtsbedingung

$$\mathbf{F} = \mathbf{K} \mathbf{u} \quad (51)$$

und zeigen keine nennenswerte Abweichung, Abbildung 26. Das UserElem kann das Ergebnis für die Ein-Element-Rechnung wiedergeben und ist demzufolge korrekt in das FE Programm ANSYS implementiert.

6.1.2 Verifizierung für 3D Berechnungen

Zur Verifikation der Implementierung für dreidimensionale Problemstellungen erfolgt die Berechnung eines Kubusses [Spreng, 2010] nach Abbildung 27. Der Körper mit Elementkantenlänge 1 mm besteht aus einem Element. An der Unterseite erfährt das Element eine Fixierung in y -Richtung. An der Oberseite erfolgte eine Verschiebung aller Knoten in y -Richtung um $\Delta u = 0,3$ mm. Die Berechnung erfolgt mit einem von ANSYS standardmäßig bereitgestellten Element und mit dem UserElem. ANSYS bietet ebenfalls ein dreidimensionales isoparametrisches Element mit 20 Knoten und 27 Integrationspunkten mit der Bezeichnung SOLID186 an. Bei der Berechnung mit dem UserElem wird das Anfangshohlraumvolumen $f_0 = 0$ gesetzt. Somit erfolgt für beide Elementtypen eine rein elastisch-plastische Berechnung. Das Ergebnis des Kraft-Verschiebungsverhaltens zeigt Abbildung 27. Die Ergebnisse beider Elementtypen stimmen nahezu exakt überein. Die Maximale Abweichung liegt unter 0,001 %.

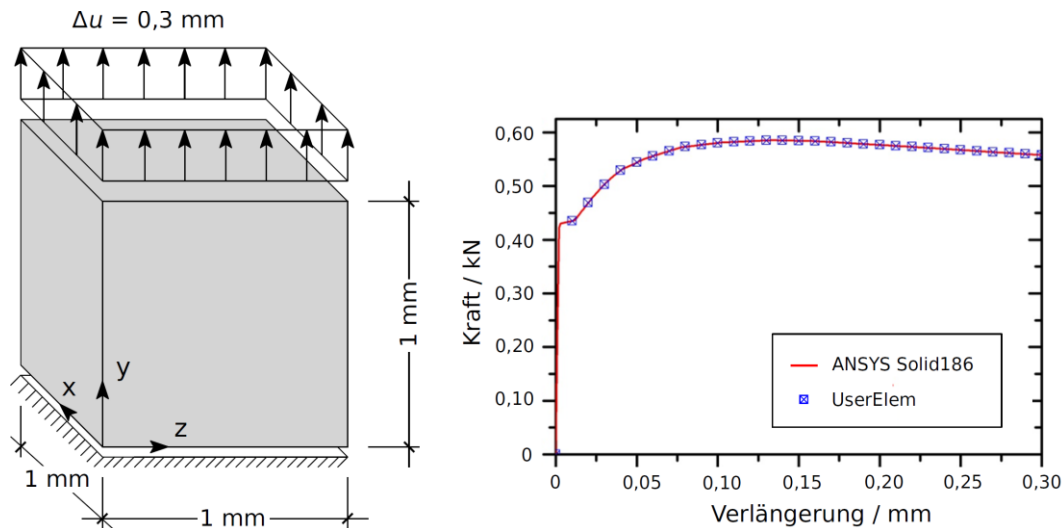


Abbildung 27: Ein-Element-Rechnung zur Verifizierung des UserElem für 3D Problemstellungen

Anhand dieses Beispiels kann die Implementierung des UserElem für 3D Problemstellungen als verifiziert angesehen werden.

6.2 Verifizierung der Netzunabhängigkeit

Um die Netzunabhängigkeit des nichtlokalen Rousselier Modells im Vergleich zum lokalen Modell zu verifizieren erfolgen 2D und 3D Berechnungen. Für 2D Berechnungen stehen 8-knotigen Viereckselementen und für 3D Berechnungen 20-knotigen Hexaederelementen zur Verfügung.

6.2.1 2D Vergleichsrechnungen

Zur Verifizierung der Netzunabhängigkeit des nichtlokalen Rousselier Modells erfolgt die zweidimensionale Berechnung einer Scherbandprobe und einer Flachzugprobe mit Loch.

Die Diskretisierung der Scherbandprobe [Rettenmeier, 2010] erfolgte mit Elementen der Kantenlänge 1,00 mm, 0,50 mm und 0,33 mm, Abbildung 28. Für die Initiierung der Scherbandentwicklung erfahren alle Berechnungen eine Vorschädigung in einem Bereich identischer Größe. Vereinfachend wird eine idealplastische Fließkurve mit einer Streckgrenze von 428 MPa verwendet. Die Streckgrenze im Bereich der Vorschädigung wird um ca. 10 % herabgesetzt und das Anfangshohlraumvolumen um 20 % erhöht.

Bei lokalen Schädigungsmodellen lokalisieren Scherbänder in einer Elementschicht, Abbildung 29. Somit entstehen unterschiedlich breite Scherbänder für unterschiedliche Elementkantenlängen.

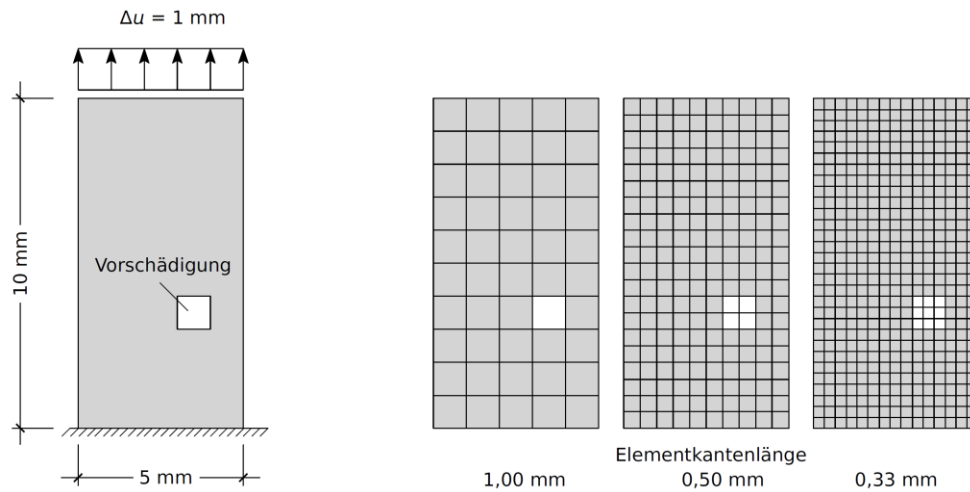


Abbildung 28: Modell der Scherbandprobe und verschiedene Vernetzungen

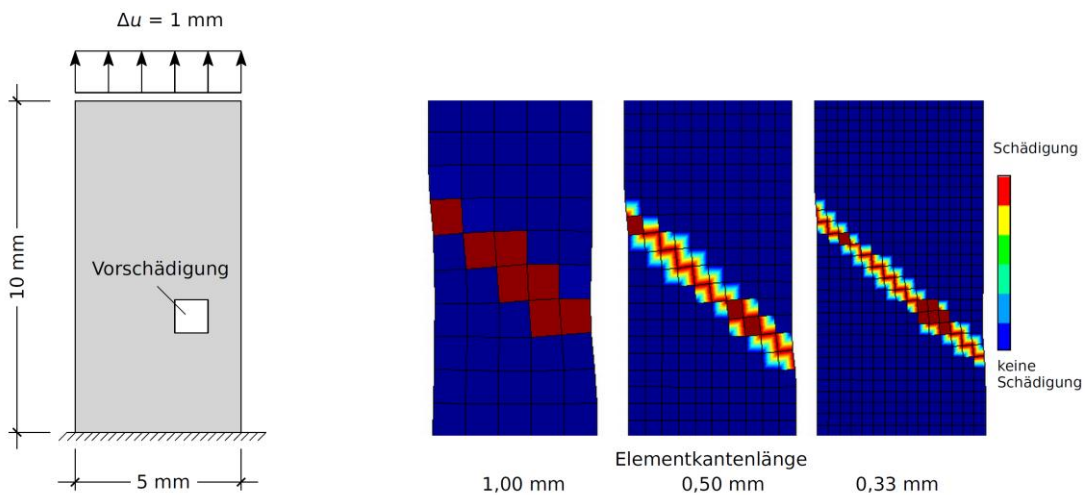


Abbildung 29: Schädigung der Scherbandprobe mit dem lokalen Modell [Samal, 2007]

Die Ergebnisse für das nichtlokale Schädigungsmodell zeigt Abbildung 30. Der geschädigte Bereich ist hierbei in Grau gekennzeichnet. Für alle verwendeten Elementgrößen bildet sich ein Scherband nahezu identischer Breite aus.

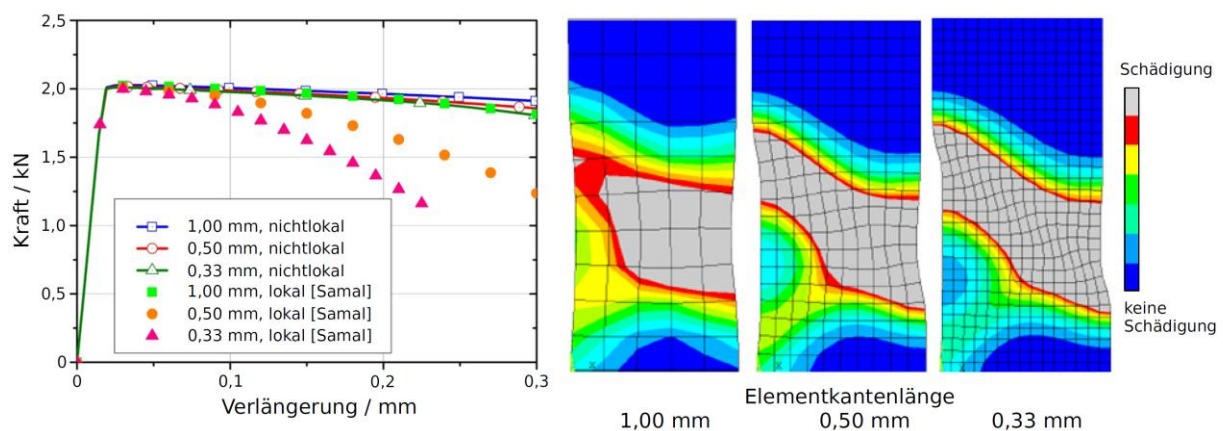


Abbildung 30: Schädigung der Scherbandprobe mit dem nichtlokalen Modell, $\Delta l = 0,4$ mm

Die Netzunabhängigkeit wird besonders beim Vergleich des Kraft-Verlängerungsverhalten deutlich. Alle Simulationen mit dem nichtlokalen Schädigungsmodell zeigen nahezu ein iden-

tisches Verformungsverhalten. Bei Berechnung mit dem lokalen Modell nimmt die Verformbarkeit mit größerer Elementgröße zu. Die Vorteile des nichtlokalen Schädigungsmodelles können anhand dieses Beispiels gut veranschaulicht werden.

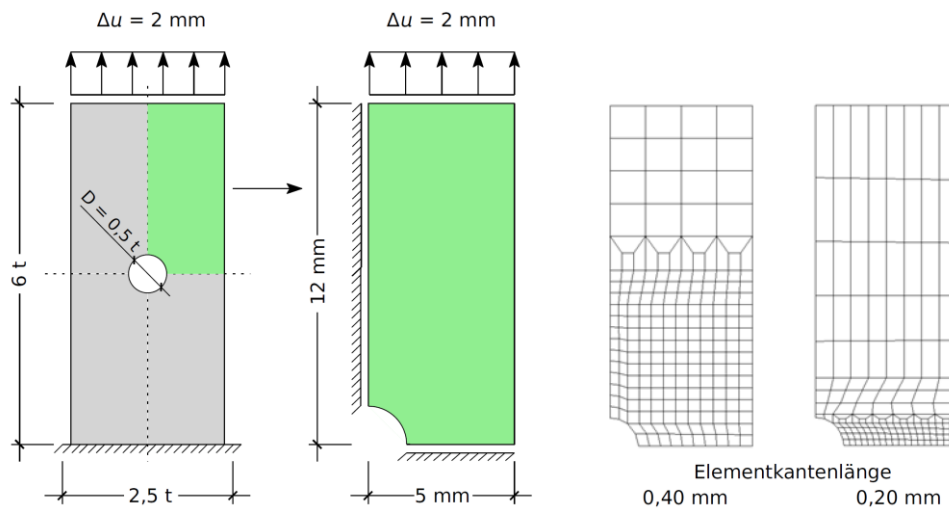


Abbildung 31: Komplekte Geometrie und Viertel-Modell der Flachzugprobe und verschiedene Vernetzungen

Die Berechnung einer Flachzugprobe mit Loch [Rettenmeier, 2010] erfolgte anhand eines Viertel-Modells und zweier unterschiedlicher Vernetzungen, Abbildung 31. Die Elementkantenlänge im kerbnahen Bereich wurde zu 0,40 mm und 0,20 mm gesetzt. Die Berechnungen erfolgen mit der wahren Fließkurve des Werkstoffs 22NiMoCr3-7 und den ermittelten Materialparametern nach Kapitel 6.5.1.

Die Ergebnisse der Flachzugprobe zeigt Abbildung 32. Der Bereich der Schädigung ist in Grau dargestellt. Für beide Vernetzungen unterschiedlicher Elementkantenlängen resultiert mit dem nichtlokalen Schädigungsmodell eine Schädigungszone gleicher Größe.

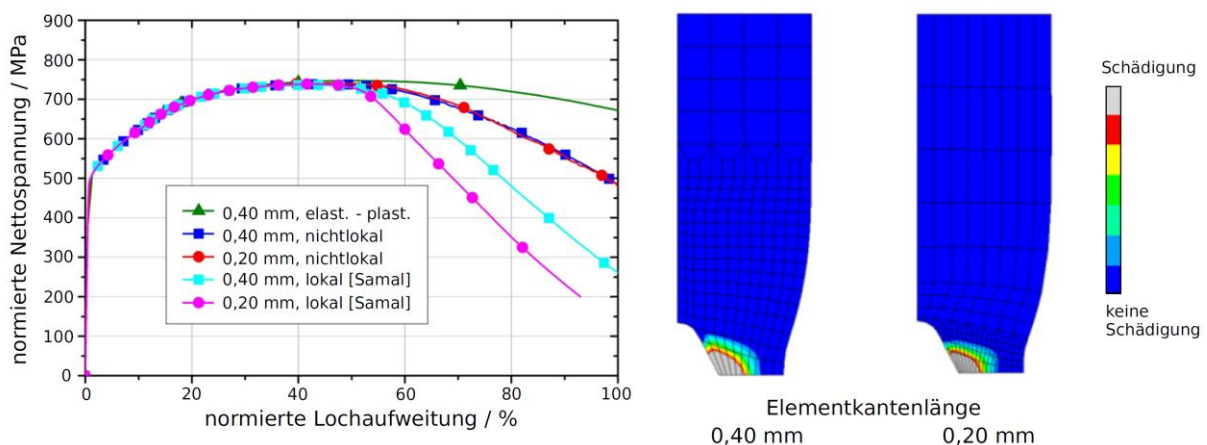


Abbildung 32: Schädigung der Flachzugprobe mit dem nichtlokalen Modell, normierte Lochaufweitung 90 %

Abbildung 32 zeigt ebenfalls das Kraft-Lochaufweitungsverhalten der Flachzugprobe. Zum Vergleich ist eine elastisch – plastische Berechnung den schädigungsmechanischen Be-

rechnungen mit dem lokalen und nichtlokalen Modell gegenübergestellt. Die elastisch – plastische Berechnung kann den Lastabfall durch das Wachstum des geschädigten Bereiches nicht abbilden und zeigt ab ca. 60 % normierter Lochaufweitung ein zu steifes Verhalten. Die Berechnungen mit dem lokalen Modell demonstrieren nochmals die Abhängigkeit von der Elementkantenlänge durch Abweichungen im Verformungsverhalten der unterschiedlichen Vernetzungen. Das nichtlokale Modell zeigt für beide Vernetzungen ein identisches Verhalten. Die Netzunabhängigkeit kann auch für dieses Modell bestätigt werden.

6.2.2 3D Vergleichsrechnungen

Um die Netzunabhängigkeit auch für 3D Berechnungen des nichtlokalen Modells zu verifizieren wird eine quadratische Platte mit der Kantenlänge 50 mm und der Dicke $t = 1$ mm herangezogen [Spreng, 2010], Abbildung 33. Das komplette Modell wird in z-Richtung fixiert, so dass sich ein ebener Dehnungszustand einstellt und für die Berechnung in Dickenrichtung eine Elementschicht ausreicht. Um in Anlehnung an eine C(T)-Probe einen Riss zu modellieren, wird die Hälfte am unteren Ende der Platte in y-Richtung gehalten und die andere Hälfte frei beweglich modelliert. Die Schädigungszone im Bereich der fiktiven Risspitze, dargestellt in Rot, wird deutlich feiner vernetzt. Zum Einsatz kommen Elementkantenlängen von 0,20 mm, 0,10 mm und 0,05 mm in der x-y-Ebene in diesem Bereich. Durch Überprüfung der sich ausbildenden Breite der Schädigungszone kann die Netzunabhängigkeit des nichtlokalen Modells untersucht werden.

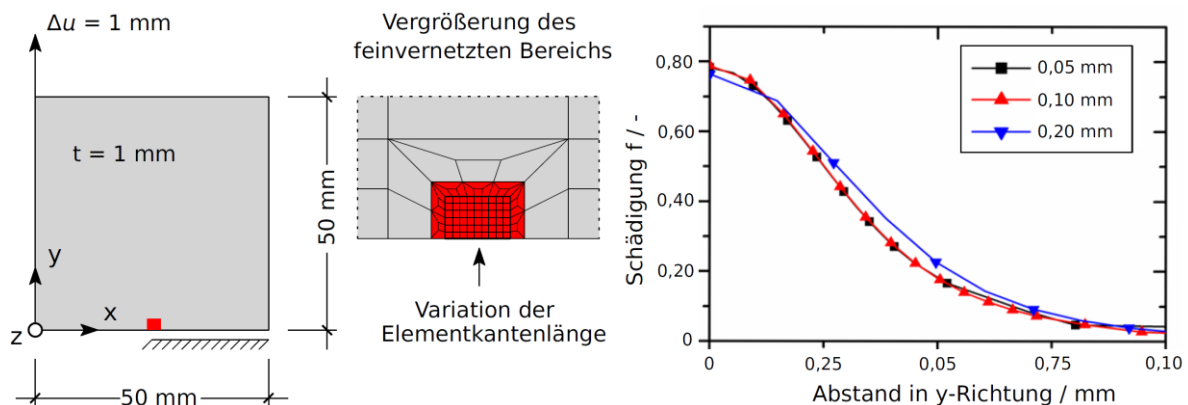


Abbildung 33: 3D Verifikationsrechnung zur Netzunabhängigkeit

Abbildung 33 zeigt den Verlauf der Schädigungsvariable f in einem Abstand $x = 0,2$ mm von der Risspitze entfernt für eine Verschiebung $\Delta u = 1$ mm. Die Ergebnisse stimmen für die Elementkantenlänge von 0,05 mm und 0,10 mm gut überein, d.h. es bildet sich eine Schädigungszone der gleichen Größe aus. Leichte Abweichungen ergeben sich lediglich aus dem Auflösungsvermögen einer zu großen Elementkantenlänge bei 0,2 mm.

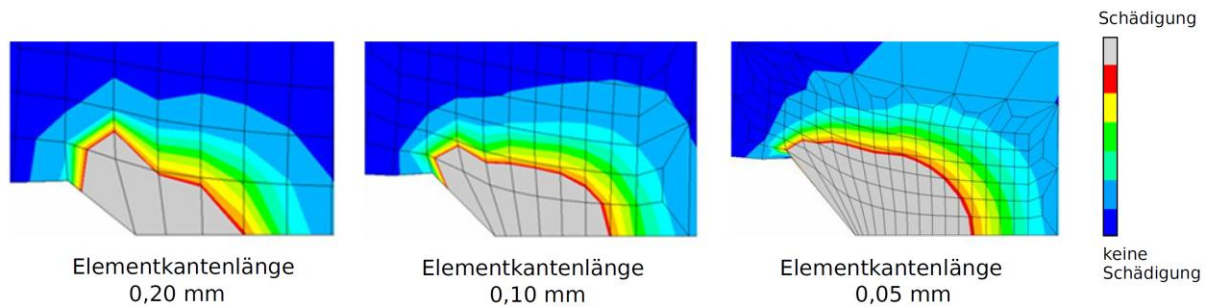


Abbildung 34: Breite der Schädigungszone für unterschiedliche Elementkantenlängen

Das Ergebnis kann durch die graphische Darstellung der Schädigungszone noch verdeutlicht werden. Die Netzunabhängigkeit ist somit auch für den dreidimensionalen Fall bestätigt.

6.3 Verbesserung des Konvergenzverhaltens

Der Einsatz des nichtlokalen Rousselier Modells bringt einen erheblichen Anstieg der Rechenzeit mit sich. Der zusätzliche Freiheitsgrad der Schädigung führt schon bei geringen Elementanzahlen dazu, dass die Lösung der FE-Rechnung nur schlecht konvergiert. Um die Konvergenz zu verbessern und damit Rechenzeit einzusparen werden in diesem Kapitel verschiedene Ansätze verfolgt. So kann beispielsweise ein alternativer Ansatz zur Berechnung der Tangentensteifigkeitsmatrix herangezogen werden. Grundlage bildet hierbei die Arbeiten von Aravas [Aravas, 1987], Zhang [Zhang & Niemi, 1995] und Samal [Samal, 2007].

6.3.1 Optimierung der Konvergenz für 2D Berechnungen

In einem ersten Schritt erfolgt die Untersuchung der von ANSYS standardmäßig bereitgestellten Solver. Die geeigneten Solver lauten:

- Direct Sparse (DS) Solver
- Frontal Solver
- Jacobi Conjugate Gradient (JCG) Solver
- Incomplete Cholesky Conjugate Gradient (ICCG) Solver

Weitere von ANSYS bereitgestellte Solver sind beispielsweise nur für den Umgang mit symmetrischen Matrizen geeignet und daher für das hier zu lösende Problem ungeeignet.

Als 2D Beispielrechnung wird das Modell nach Abbildung 35 herangezogen [Keller, 2011]. Die Scheibe besteht aus 100 Elementen mit je 8 Knoten und erfährt eine Verschiebung von $\Delta u = 0,45$ mm in y-Richtung.

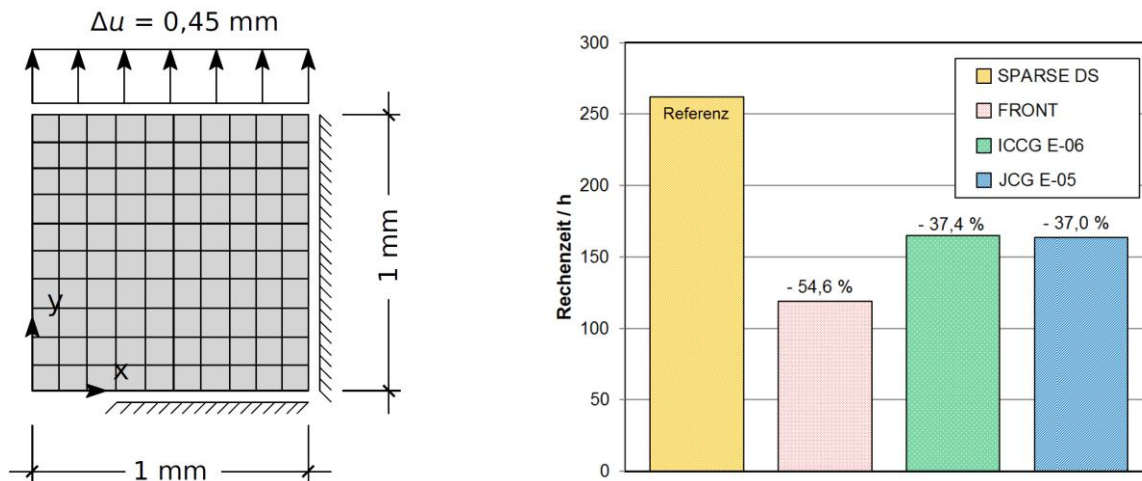


Abbildung 35: 2D Modell und Gegenüberstellung der Rechenzeit für verschiedene Solver

Bei der Berechnung der Lösung muss das Gleichungssystem aus Gleichung (51) gelöst werden. Die Steifigkeitsmatrix \mathbf{K} ist hierbei meist nur schwach besetzt. Mit dem DS Solver können mehrere Gleichungen simultan gelöst werden. Der Frontal Solver minimiert den zur Lösung benötigten Arbeitsspeicher. Beide Gleichungslöser sind direkte Löser. Hierbei wird zunächst mit Hilfe des LU-Algorithmus die Matrix in eine untere und obere Dreiecksmatrix zerlegt und das Gleichungssystem schließlich mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren gelöst.

Im Gegensatz dazu sind der ICCG und JCG iterative Löser. Diese benötigen für die Freiheitsgrade wie Verschiebung oder die nichtlokale Schädigung jeweils einen Startvektor. Die Konvergenz der Lösung wird durch endlich viele Iterationen erreicht. Durch eine gegebenen Toleranz wird für das Residuum ein Abbruchkriterium erzeugt. Für die Berechnung mit un-symmetrischen Matrizen beträgt die Standardeinstellung der Toleranz 10^{-6} . Die Graphik in Abbildung 35 zeigt, dass der Front Solver die kürzeste Rechenzeit liefert. Gegenüber dem DS Solver kann die Rechenzeit um 55 % verkürzt werden. Die iterativen Gleichungslöser schneiden ebenfalls besser als der DS Solver ab mit einer Reduzierung der Rechenzeit um ca. 37 %. Für alle Gleichungslöser wurde eine sehr gute Übereinstimmung der Kraft-Verschiebungsverläufe für das Modell aus Abbildung 35 festgestellt. Eine ausreichende Genauigkeit aller Gleichungslöser ist demnach gegeben.

Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass sich für andere Geometrien mit einer höheren Elementanzahl ein anderer Gleichungslöser als geeigneter erweist. Da in diesem Forschungsvorhaben das Augenmerk auf dreidimensionale Berechnungen gelegt wird, erfolgen jedoch keine weitere Untersuchungen oder Optimierungsmethode für den zweidimensionalen Fall.

6.3.2 Optimierung der Konvergenz für 3D Berechnungen

Für 3D Problemstellungen erfolgt zunächst wie im 2D Fall die Untersuchung der von ANSYS bereitgestellten Gleichungslöser. Um eine ähnlich Elementanzahl wie für die später berech-

neten Bruchmechanikproben zu erlangen, wurde die Geometrie an eine C(T)25-Probe angenähert. Abbildung 36 zeigt eine viertel C(T)25-Probe, welche sich durch Ausnutzung aller Symmetrien ergibt. Der Rote Bereich zeigt den Bereich der Rissspitze, welcher sehr viel feiner als der Rest der Probe vernetzt wird. Die Gesamtanzahl der Elemente beträgt 1416. Als Solver kommen die gleichen Gleichungslöser wie in Kapitel 6.3.1 zum Einsatz. Der Vergleich in Abbildung 36 zeigt, dass der DS Solver für diese 3D Geometrie die kürzeste Rechenzeit benötigt. Für die iterativen Solver wurde durch Variation der Toleranz von 10^{-6} (JCG E-06), 10^{-5} (JCG E-05) und 10^{-4} (ICCG E-04) weitere Rechenzeit eingespart. Eine weitere Verringerung der Toleranz ist nicht möglich, da die Lösung dann nicht mehr konvergiert. Trotz der Variation der Toleranz wird für alle Gleichungslöser der gleiche Kraft-COD-Verlauf erreicht. Dies spricht für die Robustheit des JCG Solvers.

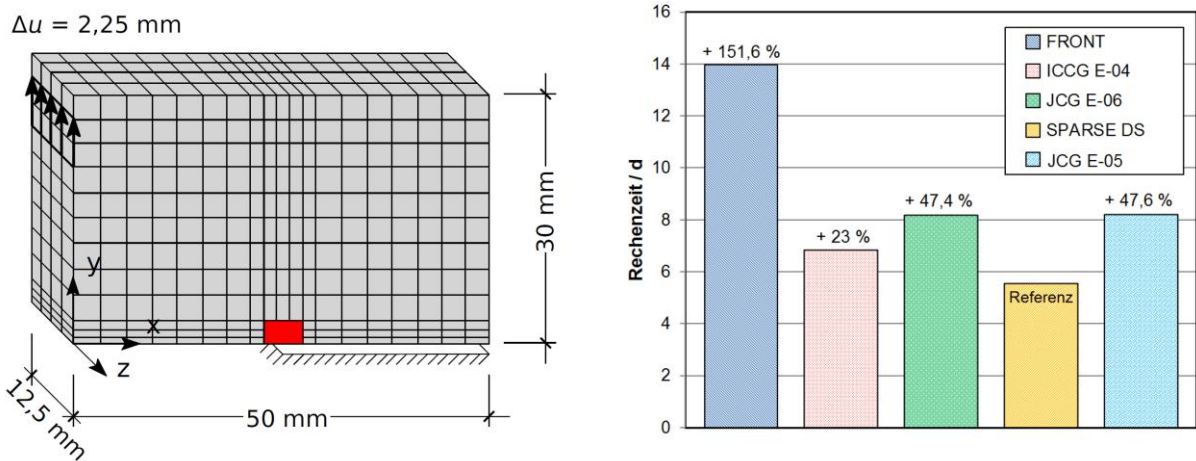


Abbildung 36: 3D Modell der Viertel C(T)25-Probe und Gegenüberstellung der Rechenzeit für verschiedene Solver

6.4 Verifizierung der Tangentensteifigkeitsmatrix

Das Konvergenzverhalten beim Newton-Raphson-Verfahren beeinflusst entscheidend die Rechenzeit. Einfluss auf das Konvergenzverhalten hat die Steifigkeitsmatrix, welche durch Integration aus der Tangentensteifigkeitsmatrix gebildet wird. Die Verbesserung des Konvergenzverhaltens kann beispielsweise durch unterschiedliche Ansätze für den Tangentenmodul erreicht werden.

Die folgenden Ansätze stützen sich auf Aravas [Aravas, 1987] und Mühlich [Mühlich, et al., 2001]. Mühlich definiert hierbei die plastische Vergleichsdehnung als innere Variable, bei Aravas erfolgt die Definition über einen Arbeitsansatz aus plastischer Arbeit. Weitere Herangehensweisen finden sich in Ostermann und Fellin [Fellin & Ostermann, 2002] oder Benallal et al. [Benallal, et al., 1988].

Der Tangentenmodul D berechnet sich mit:

$$\mathbf{D} = \left(\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \mathbf{u}} \right)^{t+\Delta t} \quad \text{mit} \quad \partial \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \partial \varepsilon \\ \partial \mathbf{d} \end{bmatrix}^{t+\Delta t} \quad \text{und} \quad \partial \bar{\sigma} = \begin{bmatrix} \partial \sigma \\ \partial \mathbf{f} \end{bmatrix}^{t+\Delta t} \quad (52)$$

Im Folgenden handelt es sich bei allen Variablen um die Angaben zum Zeitpunkt $t + \Delta t$, auch ohne entsprechende Kennzeichnung.

Zunächst müssen die **konstitutiven Gleichungen** aufgestellt werden. Die Abhängigkeiten der Fließfunktion Φ des nichtlokalen Rousselier Modells aus Gleichung (21) ergeben sich zu:

$$\Phi(p, q, H^\alpha, d) \quad \text{mit} \quad \alpha = 1, 2, \dots, n \quad (53)$$

Bei H^α handelt es sich um die inneren Variablen mit:

$$H^{\alpha=1} = \bar{\varepsilon}^{pl} \quad \text{und} \quad H^{\alpha=2} = f \quad (54)$$

und deren inkrementelle Form:

$$\Delta H^\alpha = (\Delta \varepsilon_p, \Delta \varepsilon_q, p, q, H^\beta) \quad \text{mit} \quad \beta = 1, 2, \dots, n \quad (55)$$

Darin sind: $\Delta \varepsilon_p$: Inkrement der hydrostatischen plastischen Vergleichsdehnung

$\Delta \varepsilon_q$: Inkrement der deviatorischen plastischen Vergleichsdehnung

In der nichtlokalen Formulierung von Samal [Samal, 2007] erfolgt die Definition der plastischen Vergleichsdehnung $\Delta H^1 = \Delta \bar{\varepsilon}^{pl}$ in Form eines Arbeitssatzes nach Aravas [Aravas, 1987]:

$$(1 - d) \cdot \sigma_y \cdot \Delta \bar{\varepsilon}^{pl} = \boldsymbol{\sigma} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{pl} \quad (56)$$

In einer zweiten Variante kann auf eine Formulierung von Mühlich [Mühlich, et al., 2001] zurückgegriffen werden. Die Herleitung erfolgt aus den konstitutiven Gleichungen:

$$\Delta H^{\alpha=1} = \Delta \bar{\varepsilon}^{pl} = h^{\alpha=1}(\Delta \varepsilon_p, \Delta \varepsilon_q, p, q, H^\beta) = h^1(\Delta \varepsilon_p, \Delta \varepsilon_q, p, q, \bar{\varepsilon}^{pl}, f) = \Delta \varepsilon_q \quad (57)$$

h^1 und h^2 sind Funktionen der inneren Variablen $H^{\alpha=1}$ und $H^{\alpha=2}$. Gleichung (57) verursacht geringeren Aufwand bei der Bildung von Ableitungen.

Für die zweite innere Variable folgt:

$$\Delta H^{\alpha=2} = \dot{f} = h^2(\Delta \varepsilon_p, \Delta \varepsilon_q, p, q, \bar{\varepsilon}^{pl}, f) = (1 - d)\Delta \varepsilon_p = (1 - d) \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{pl} : \mathbf{I} \quad (58)$$

Weitere konstitutive Gleichungen sind die Fließregel, welche die Abhängigkeit des Inkrements der plastischen Verzerrungen von den aktuellen Spannungen liefert:

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{pl} = \Delta \Lambda \frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \quad (59)$$

Die Fließregel ist hier in Abhängigkeit der Fließfunktion Φ definiert und wird somit als assoziierte Fließregel bezeichnet. Der Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ ist definiert über die hydrostatische Spannung p und über die Vergleichsspannung q , mit:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{3} q \mathbf{n} - p \mathbf{I} \quad \text{mit} \quad p = -\frac{1}{3} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{I} \quad \text{und} \quad q = \sqrt{\left(\frac{2}{3} \mathbf{S} : \mathbf{S}\right)} \quad (60)$$

Mit Hilfe von Gleichung (59) und der Definition des plastischen Dehnungsincrements über

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{pl} = \frac{1}{3} \Delta \varepsilon_p \mathbf{I} + \Delta \varepsilon_q \mathbf{n} \quad (61)$$

kann $\Delta \Lambda$ eliminiert werden und es ergibt sich:

$$\Delta \varepsilon_p \left(\frac{\partial \Phi}{\partial p} \right) + \Delta \varepsilon_q \left(\frac{\partial \Phi}{\partial q} \right) = 0 \quad (62)$$

Die **konstitutive Gleichungen** lassen sich zusammenfassen zu:

$$\begin{aligned} \Phi(p, q, H^\alpha, d) \\ \Delta H^{\alpha=1} &= \Delta \bar{\varepsilon}^{pl} = \Delta \varepsilon_q \\ \Delta H^{\alpha=2} &= \dot{f} = (1 - d) \Delta \varepsilon_p \\ p &= p^e + K \Delta \varepsilon_p \\ q &= q^e - 3G \Delta \varepsilon_q \\ \Delta \varepsilon_p \left(\frac{\partial \Phi}{\partial p} \right) + \Delta \varepsilon_q \left(\frac{\partial \Phi}{\partial q} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (63)$$

Darin sind: $G = \mu$ mit μ, λ : Lamé- Konstanten

$$K = \lambda + \frac{2}{3} G$$

Für Anwendung der Euler-Rückwärts-Methode zur Berechnung des Tangentenmoduls \mathbf{D} müssen die **Ableitungen zum Zeitpunkt $t + \Delta t$** bestimmt werden. Zunächst wird der Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung über folgende Gleichung hergeleitet [Aravas, 1987]:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}^{el} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{pl} - \frac{1}{3} \Delta \varepsilon_p \mathbf{I} - \Delta \varepsilon_q \mathbf{n} \right) \quad (64)$$

Hierbei ist $\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}$ die plastische Dehnung zu Beginn des Inkrements. Das totale Differential lautet:

$$\partial \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}^{el} : \left(\partial \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{3} \partial \Delta \varepsilon_p \mathbf{I} - \partial \Delta \varepsilon_q \mathbf{n} - \Delta \varepsilon_q \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \partial \boldsymbol{\sigma} \right) \quad (65)$$

Weiterhin wird das totale Differential der Fließfunktion nach Rousselier aus Gleichung (22) benötigt,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p} \partial p + \frac{\partial \Phi}{\partial q} \partial q + \frac{\partial \Phi}{\partial d} \partial d + \frac{\partial \Phi}{\partial H^1} \partial H^1 + \frac{\partial \Phi}{\partial H^2} \partial H^2 = 0 \quad (66)$$

sowie das der konstitutiven Gleichungen wie der plastischen Dehnungen,

$$\begin{aligned} \partial\Delta\varepsilon_p \frac{\partial\Phi}{\partial q} + \Delta\varepsilon_p \left[\frac{\partial^2\Phi}{\partial p \partial q} \partial p + \frac{\partial^2\Phi}{\partial q^2} \partial q + \frac{\partial^2\Phi}{\partial q \partial d} \partial d + \frac{\partial^2\Phi}{\partial q \partial H^1} \partial H^1 + \frac{\partial^2\Phi}{\partial q \partial H^2} \partial H^2 \right] + \\ \partial\Delta\varepsilon_q \frac{\partial\Phi}{\partial q} + \Delta\varepsilon_q \left[\frac{\partial^2\Phi}{\partial p^2} \partial p + \frac{\partial^2\Phi}{\partial p \partial q} \partial q + \frac{\partial^2\Phi}{\partial p \partial d} \partial d + \frac{\partial^2\Phi}{\partial p \partial H^1} \partial H^1 + \frac{\partial^2\Phi}{\partial p \partial H^2} \partial H^2 \right] = 0 \end{aligned} \quad (67)$$

und der inneren Zustandsvariablen. Nach Aravas [Aravas, 1987] und für Variante 1 nach Gleichung (55) berechnen sich diese wie folgt:

$$\partial H^\alpha = \sum_{\beta=1}^n c_{\alpha\beta} \left[\frac{\partial h^\beta}{\partial \Delta\varepsilon_p} \partial \Delta\varepsilon_p + \frac{\partial h^\beta}{\partial \Delta\varepsilon_q} \partial \Delta\varepsilon_q + \frac{\partial h^\beta}{\partial p} \partial p + \frac{\partial h^\beta}{\partial q} \partial q \right] \quad (68)$$

$$\text{mit: } c_{\alpha\beta} = \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{\partial h^\alpha}{\partial H^\beta} \right)^{-1} \quad (69)$$

Für Variante 2 nach Mühlich, Gleichung (56) kann diese Formel nicht verwendet werden, da sich die Ableitungen

$$-\frac{\partial h^1}{\partial H^2} = -\frac{\partial h^2}{\partial H^1} = 0 \quad (70)$$

zu Null ergeben und die Inversen dieser Ableitungen gegen Unendlich streben. Die Gleichungen für die inneren Zustandsvariablen werden direkt hergeleitet. Man bildet die Funktion

$$G^\alpha = \Delta H^\alpha - h^\alpha = 0 \quad (71)$$

Durch Differenzieren und Einsetzen der Werte erhält man:

$$\begin{aligned} -1 \cdot \partial \Delta\varepsilon_q + 1 \cdot \partial \varepsilon^{pl} = 0 & \quad \rightarrow \quad \Delta H^1 = \partial \Delta\varepsilon_q = \partial \varepsilon^{pl} \\ \partial f - (1-d) \partial \Delta\varepsilon_p + \partial \Delta\varepsilon_p \partial d = 0 & \quad \rightarrow \quad \partial f = (1-d) \partial \Delta\varepsilon_p - \partial \Delta\varepsilon_p \partial d \end{aligned} \quad (72)$$

Weiter wird das totale Differential der Gleichungen (59) benötigt:

$$\partial p = -\frac{1}{3} \mathbf{I} : \partial \boldsymbol{\sigma} \quad \text{und} \quad \partial q = \mathbf{n} : \partial \boldsymbol{\sigma} \quad (73)$$

Die Auswertung der Gleichungen (65) und (66) führt auf die Gleichungssysteme:

$$\begin{aligned} A_{11} \partial \Delta\varepsilon_p + A_{12} \partial \Delta\varepsilon_q &= (\mathbf{B}_{11} \mathbf{I} + \mathbf{B}_{12} \mathbf{n}) : \partial \boldsymbol{\sigma} + C_1 \partial d \\ A_{21} \partial \Delta\varepsilon_p + A_{22} \partial \Delta\varepsilon_q &= (\mathbf{B}_{21} \mathbf{I} + \mathbf{B}_{22} \mathbf{n}) : \partial \boldsymbol{\sigma} + C_2 \partial d \end{aligned} \quad (74)$$

Die Auflösung nach den deviatorischen und hydrostatischen plastischen Dehnungen führt auf die Gleichungen:

$$\begin{aligned} \partial \Delta\varepsilon_p &= m_{pl} \mathbf{I} + m_{pn} \mathbf{n} : \partial \boldsymbol{\sigma} + m_{pd} \partial d \\ \partial \Delta\varepsilon_q &= m_{ql} \mathbf{I} + m_{qn} \mathbf{n} : \partial \boldsymbol{\sigma} + m_{qd} \partial d \end{aligned} \quad (75)$$

Die Koeffizienten A, B und C sowie m sind dem Anhang 13.1 zu entnehmen. Das Gleichungssystem kann dann in Gleichung (63) eingesetzt werden. Nach einigen Umformungen resultiert:

$$\partial \boldsymbol{\sigma} = \left[(\mathbf{J} + \mathbf{C}^{el} : \mathbf{M}^{nl})^{-1} : \mathbf{C}^{el} \right] : \partial \boldsymbol{\varepsilon} + \left[(\mathbf{J} + \mathbf{C}^{el} : \mathbf{M}^{nl})^{-1} : \mathbf{C}^{el} : \mathbf{M}^d \right] : \partial \mathbf{d} \quad (76)$$

bzw.

$$\partial \boldsymbol{\sigma} = \left[\left((\mathbf{C}^{el})^{-1} + \mathbf{M}^{nl} \right)^{-1} : \mathbf{C}^{el} \right] : \partial \boldsymbol{\varepsilon} + \left[\left((\mathbf{C}^{el})^{-1} + \mathbf{M}^{nl} \right)^{-1} : \mathbf{M}^d \right] : \partial \mathbf{d} \quad (77)$$

Darin sind:

$$\mathbf{M}^{nl} = \left(\frac{1}{3} m_{pl} \mathbf{II} + \frac{1}{3} m_{pn} \mathbf{In} + m_{ql} \mathbf{nn} + \Delta \varepsilon_q \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \right)$$

$$\mathbf{M}^d = \left(\frac{1}{3} m_{pd} \mathbf{I} - m_{qd} \mathbf{n} \right)$$

Der **Tangentenmodul** aus Gleichung (52) setzt sich schließlich aus folgenden Bestandteilen zusammen:

$$\mathbf{D} = \left(\frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \mathbf{u}} \right)^{t+\Delta t} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{ep} & \mathbf{C}_{ed} \\ \mathbf{C}_{de} & \mathbf{C}_{dd} \end{bmatrix}^{t+\Delta t} \quad (78)$$

bzw. umgeformt

$$\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{D} \partial \mathbf{u} \quad (79)$$

$$\begin{bmatrix} \partial \sigma_{11} \\ \partial \sigma_{22} \\ \partial \sigma_{33} \\ \partial \sigma_{12} \\ \partial \sigma_{13} \\ \partial \sigma_{23} \\ \partial f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial \varepsilon_{11} \\ \partial \varepsilon_{22} \\ \partial \varepsilon_{33} \\ \partial \gamma_{12} \\ \partial \gamma_{13} \\ \partial \gamma_{23} \\ \partial d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & & & & & \mathbf{C}_{ed} \\ & & & & & & | \\ & & \mathbf{C}_{ep} & & & & | \\ & & & & & & | \\ & & & & & & | \\ & & & & & & | \\ & & & & & & | \\ - & - & - & - & + & - & \mathbf{C}_{dd} \end{bmatrix} \partial \mathbf{u} \quad (80)$$

Darin sind:

$$\mathbf{C}_{ep} = \left((\mathbf{C}^{el})^{-1} + \mathbf{M}^{nl} \right)^{-1}$$

$$\mathbf{C}_{ed} = \left((\mathbf{C}^{el})^{-1} + \mathbf{M}^{nl} \right)^{-1} : \mathbf{M}^d$$

$$\mathbf{C}_{ep} = [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]$$

$$\mathbf{C}_{dd} = -\Delta \varepsilon_p$$

Die Anteile \mathbf{C}_{ep} und \mathbf{C}_{dd} ergeben sich aus der impliziten Form von Gleichung (27),

$$G = \dot{f} - (1 - d) \Delta \varepsilon_p \quad \text{mit} \quad \dot{f} = \dot{f}_{\text{Wachstum}} \quad (81)$$

und deren Differentiation

$$\frac{\partial G}{\partial p} \partial p + \frac{\partial G}{\partial q} \partial q + \frac{\partial G}{\partial d} \partial d + \frac{\partial G}{\partial H^1} \partial H^1 + \frac{\partial G}{\partial H^2} \partial H^2 = 0 \quad (82)$$

Die Auswertung ergibt:

$$\partial f = -\Delta \varepsilon_p \partial d \quad (83)$$

woraus C_{ep} und C_{dd} folgen. Hierbei ist die Komponente C_{de} immer mit Nullen besetzt. Dies ist der Fall, da die plastischen Dehnungen in Normalenrichtung in C_{dd} enthalten sind mit $C_{dd} = -\Delta\varepsilon_p = -\varepsilon^{pl} \cdot \mathbf{I} = \varepsilon_{11}^{pl} + \varepsilon_{22}^{pl} + \varepsilon_{33}^{pl}$.

Die Validierung des neuen Algorithmus erfolgt anhand einer Vergleichsrechnung mit der ursprünglich nach Aravas verwendeten Herleitung aus Gleichung (55). Für die Berechnung wird der von ANSYS bereitgestellte Sparse Solver verwendet.

Der Vergleich erfolgt anhand einer C(T)-Probe mit 1 mm Dicke. Hierbei wurde bei beiden Rechnungen der geschädigte Bereich mit $f > 0,05$ identisch dargestellt. Für die Kraft-COD-Kurve zeigt sich kein Unterschied zwischen den beiden Algorithmen, Abbildung 37. Beide Herangehensweisen liefern somit vergleichbare Ergebnisse.

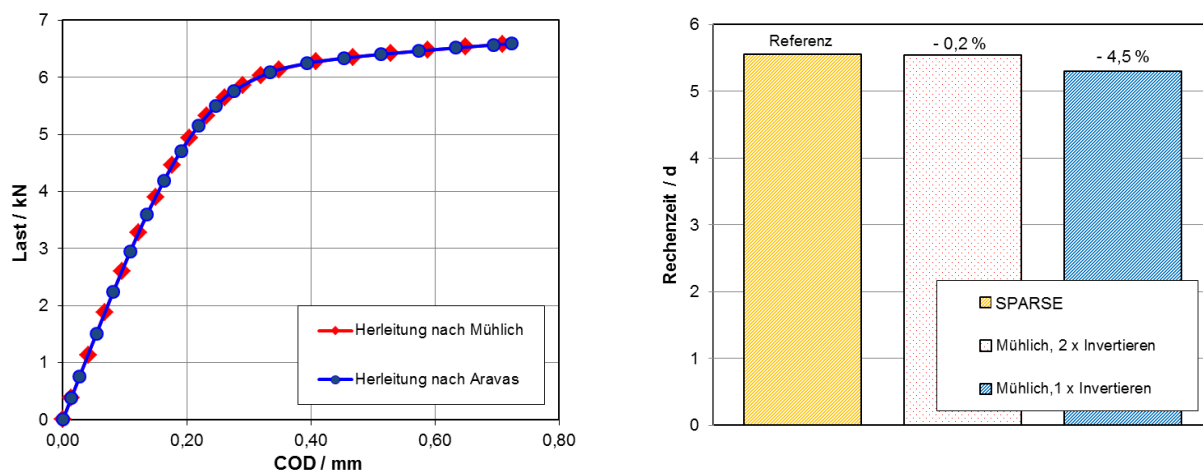


Abbildung 37: Gegenüberstellung des Kraft-COD-Verhaltens und der Rechenzeit für verschiedene Berechnungsarten des Tangentenmoduls

Für die Berechnung nach Mühlich müssen 9×9 Matrizen invertiert werden. Zum einen für die Berechnung von C_{ep} und zum anderen für die Berechnung der Inversen der linear-elastischen Steifigkeitsmatrix. Die Matrizen werden mit Hilfe des Gaußschen Eliminationsverfahrens gelöst. Um weitere Rechenzeit einzusparen kann die Inverse nach [Reusch, 2003] aber auch direkt programmiert werden:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1 + \nu}{E} \sigma_{ij} + \frac{\nu}{E} \sigma_{ij} \delta_{ij} \quad (84)$$

Mit dem Ansatz nach Mühlich und der Variante mit nur einmaligem Matrizeninvertieren kann 4,5 % der Rechenzeit eingespart werden, Abbildung 37.

Da die Matrizeneinträge für unterschiedliche Berechnungen jedoch variieren und somit das Konvergenzverhalten beeinflussen, kann diese Aussage nur für die hier durchgeführte Berechnungen getroffen werden.

6.5 Bestimmung der schädigungsmechanischen Parameter

Die Bestimmung der für das Rousselier Modell und das Beremin Modell benötigten Parameter für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 erfolgt in diesem Abschnitt.

6.5.1 Parameterbestimmung für das Rousselier Modell

Die zu bestimmenden Parameter für das nichtlokale Rousselier Modell sind f_0 , f_c , κ , C_{length} , D und σ_k , vgl. Kapitel 4.1. Im Unterschied zu den ursprünglich fünf Parametern des originalen Rousselier Modells kommt der Parameter κ durch die Einführung des beschleunigten Hohlraumwachstums bei Erreichen der Koaleszenz hinzu.

Der Bezug zur Mikrostruktur für das Rousselier Modell erfolgt u. A. über die Abhängigkeit des Werkstoffverhaltens vom Anfangshohlraumvolumen f_0 . Die Bestimmung von f_0 kann auf unterschiedliche Weise erfolgen:

- mit Hilfe metallographischer Untersuchungen aus der Mikrostruktur.
- aus der chemischen Zusammensetzung. Bei Werkstoffen an denen die Hohlräume an Mangansulfiden entstehen, vgl. Kapitel 2.2.1. kann nach Franklin [Franklin, 1969] eine Näherung für diesen Volumenanteil f^{inc} der Mangansulfide angegeben werden:

$$f^{\text{inc}} = 0,054 \left(S [\%] - \frac{0,001}{\text{Mn} [\%]} \right) \quad (85)$$

Dieser Anteil kann noch abgemindert werden, wenn die metallographischen Untersuchungen zeigen, dass bei Belastung nicht an allen identifizierten Mangansulfiden auch Hohlräume entstanden sind. Das Anfangshohlraumvolumen ergibt sich mit dem Abminderungsfaktor ξ zu:

$$f_0 = \xi f^{\text{inc}} \quad (86)$$

- mit einer numerischen Kalibrierung anhand experimenteller Ergebnisse. Hierbei erfolgt die Anpassung des numerischen Ergebnisses an das experimentell ermittelte Last-Verformungsverhalten, z.B. in [Seebich, 2007].

In diesem Forschungsvorhaben wurde f_0 zu $0,3 \cdot 10^{-3}$ aus der Mikrostruktur bestimmt. Dies kann durch [Krieg & Seidenfuß, 2003] bestätigt werden.

Der Parameter f_c zur Beschreibung der Hohlraumkoaleszenz kann ebenso metallographisch ermittelt werden. Dies ist jedoch schwierig, da Hohlraumkoaleszenz meist instabil abläuft. Eine numerische Anpassung an das experimentelle Last-Verformungsverhalten ist ebenfalls möglich, z.B. an das Last-Kerbeinschnürungsverhalten von gekerbten Rundzugproben [Büttner, 2011]. Für viele Stähle kann ein Wert von $f_c = 0,05$ näherungsweise angenommen werden [Seidenfuß, 1992] [Roos & Seebich, 2006] [Pavenkumar, et al., 2005]. So werden von Koplik und Needleman [Koplik & Needleman, 1988] für f_c Werte zwischen 0,03 und 0,055 aus Zellmodellberechnungen bestimmt. Brocks erhält durch numerische Berechnungen für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 den Wert $f_c = 0,045$.

Der Beschleunigungsfaktor κ berechnet sich mit Gleichung (24). In Anlehnung an das Gurson Modell [Gurson, 1975] folgt für $f_u = 0,5$. Mit $f_f = 0,3$ und $f_c = 0,05$ ergibt sich $\kappa = 1,8$.

Die Parameter D und σ_k sind Integrationskonstanten und besitzen keinen direkten Bezug zur Mikrostruktur. Rousselier schlägt für den Parameter D werkstoffunabhängig den Wert $D = 2$ vor. Im Gegensatz dazu ist σ_k werkstoffabhängig und kann als Widerstand des Werkstoffs gegen Hohlraumwachstum gesehen werden. Rousselier gibt σ_k abhängig von der Fließspannung an, mit:

$$\sigma_k \approx \frac{2}{3} \sigma_0^{\text{mean}} \quad \text{mit} \quad \sigma_0^{\text{mean}} \approx \frac{1}{3} (R_e + R_m) \quad (87)$$

Untersuchungen an der MPA Universität Stuttgart [Seidenfuß, 1992] haben gezeigt, dass ein realistischer Wert für Stahl, unabhängig von der Temperatur, bei $\sigma_k = 445$ MPa liegt. Für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 wurde dieser temperaturunabhängige Wert für das nichtlokale Rousselier Modell übernommen.

Die Größe C_{length} beschreibt einen charakteristischen Längenparameter. Nach Reusch [Reusch, 2003] kann dieser nach Gleichung (35) berechnet werden. Durch die Beziehung zu l_c besitzt auch C_{length} einen direkten Bezug zur Mikrostruktur, denn der Parameter l_c beschreibt den Abstand der schädigungsrelevanten Hohlräume zueinander. In Seebich [Seebich, 2007] wurde für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 die Länge l_c zu 0,4 bestimmt. Daraus folgt $C_{\text{length}} = 0,05$.

Die Parameter für das nichtlokale Rousselier Modell für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 sind in Tabelle 4 zusammengefasst.

6.5.2 Parameterbestimmung für das Beremin Modell

Das Beremin Modell basiert auf einem weakest-link Ansatz und einer zweiparametrischen Weibull-Verteilung, Kapitel 4.2. Für die Berechnung müssen die Parameter m und σ_u bestimmt werden. Der Parameter m ist ein Maß für die Streuung und σ_u charakterisiert das Belastungsniveau, wobei σ_u der Weibullspannung bei einer Versagenswahrscheinlichkeit von 63,2 % entspricht. Bei der Parameterbestimmung wird auf die Methode nach ESIS-P6 [ESIS P6-98, 1998] zurückgegriffen. Hierbei erfolgt die Parameterbestimmung durch eine iterative Anpassung der numerischen an die experimentellen Ergebnisse. Der passendste Parametersatz wird schließlich mit der Maximum-Likelihood Methode identifiziert. Das schrittweise Vorgehen bei der Bestimmung der Parameter zeigt Abbildung 38.

Abhängig vom Werkstoff ergeben sich unterschiedliche Parameter. Vom Ansatz her sind m und σ_u unabhängig von der Temperatur. Mit Hilfe eines einzelnen Parametersatzes kann so die Ausfallwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Temperatur gegeben werden. Abbildung 39 zeigt das Ergebnis einer Parameteranpassung mit der Maximum Likelihood Methode an 50 C(T)25-Proben.

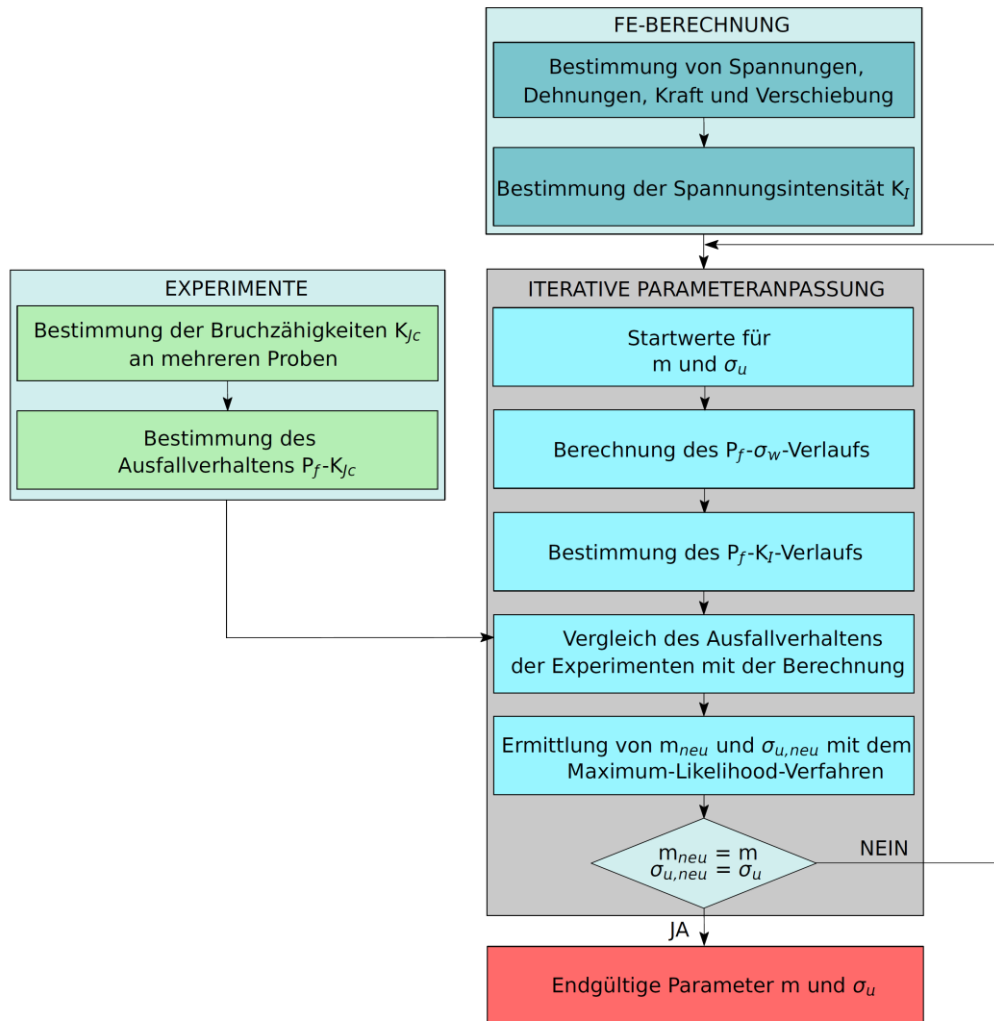


Abbildung 38: Vorgehen bei der Bestimmung der Beremin-Parameter, nach [Seebich, 2007]

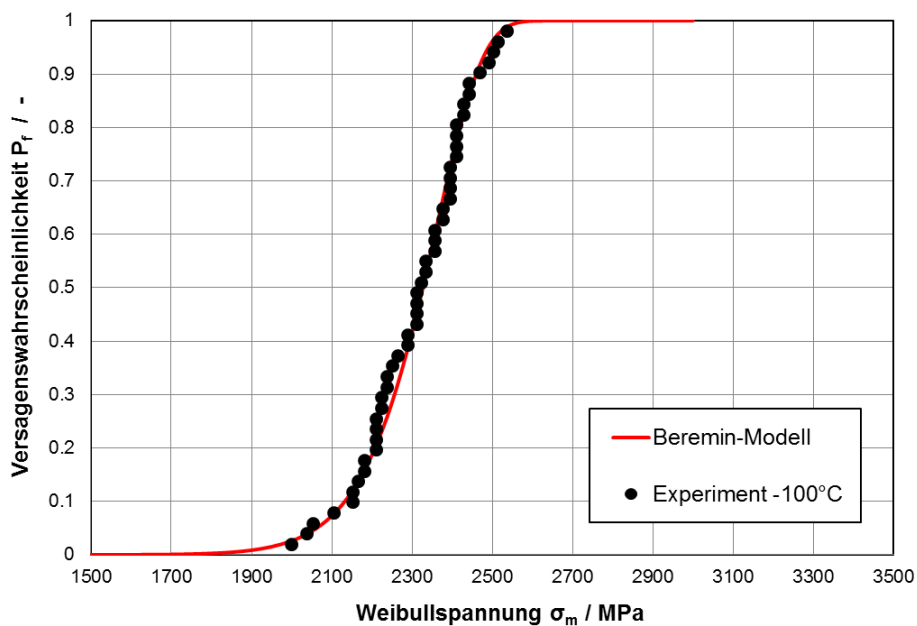


Abbildung 39: Ergebnis einer Parameteranpassung mit der Maximum-Likelihood Methode an 50 C(T)25-Proben

Für die Parameterbestimmung kann wiederum auf die experimentellen Ergebnisse aus dem BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 [Roos & Seebich, 2006] zurückgegriffen werden. Die gefundenen Parameter infolge einer Anpassung an 50 experimentell geprüfte C(T)25-Proben für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 bei -100 °C werden in Kapitel 7.1.4 vorgestellt.

7 Numerische Untersuchungen mit dem gekoppelten nichtlokalen Schädigungsmodell

Im folgenden Kapitel wird die Anwendung des gekoppelten nichtlokalen Schädigungsmodells zur Berechnung des Verformungs- und Versagensverhaltens von Bruchmechanikproben untersucht. Hierzu kann auf die experimentellen Ergebnisse aus dem BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 [Roos & Seebich, 2006] zurückgegriffen werden. Die Entnahmeposition der Proben in [Roos & Seebich, 2006] zeigt Abbildung 40.

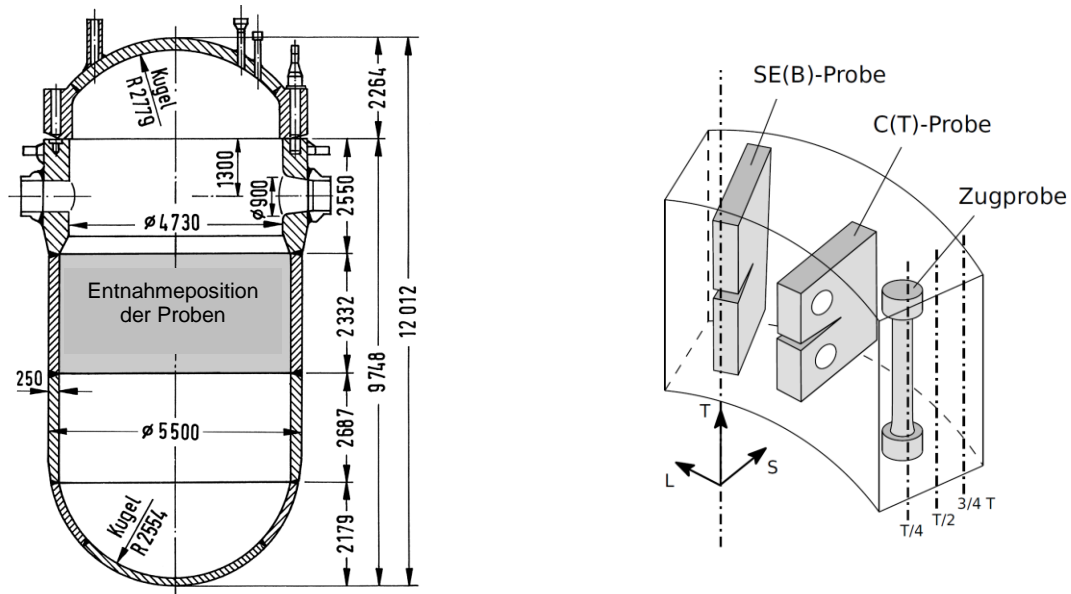


Abbildung 40: RDB Biblis C und Entnahmeposition der Proben für das BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 [Roos & Seebich, 2006]

7.1 Berechnung von Kompaktzugproben

In einem ersten Schritt erfolgt die Optimierung der Netzstruktur im Bereich der Risspitze einer C(T)25-Probe. Hierfür werden zunächst 2D Berechnungen durchgeführt. Abbildung 41 zeigt die schematische Darstellung einer C(T)25-Probe. Für die Simulation ist ein vereinfachtes Viertel-Modell nach Abbildung 41 (c) ausreichend.

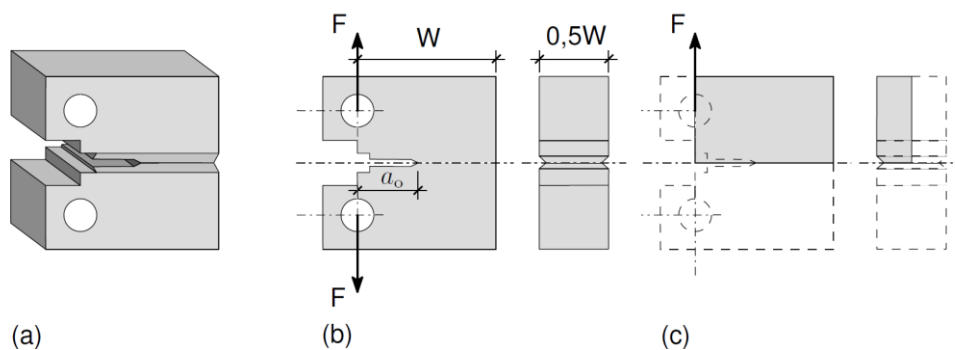
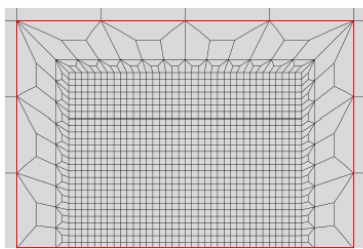
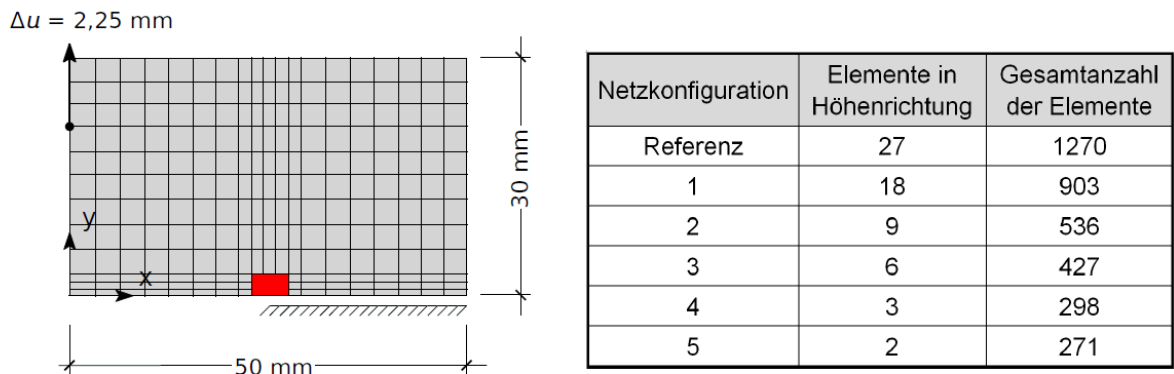
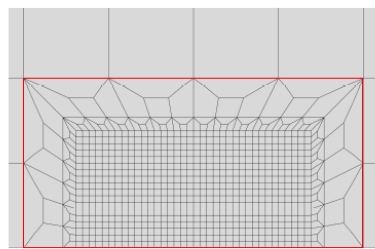


Abbildung 41: Schematische Darstellung der C(T)25-Probe (a) komplette Probe, (b) Längs- und Querschnitt sowie (c) modellierte Viertel Probe

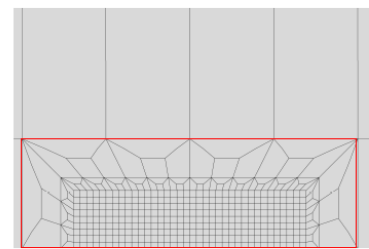
Um die Elementanzahl zu verringern erfolgt eine Optimierung im fein vernetzten Bereich. Hierbei wird die Anzahl der Elemente mit 0,1 mm Kantenlänge senkrecht zur Ligamentebene auf die geringstmögliche Anzahl minimiert. Die untersuchten Netzkonfigurationen zeigt Abbildung 42. Der fein vernetzte Bereich an der Risspitze ist in Rot dargestellt. Nur in diesem Bereich findet eine Berechnung mit dem UserElem statt. Die restlichen Elemente werden linear-elastisch, mit dem von ANSYS bereitgestellten SOLID186 Element, berechnet. Dies führt ebenfalls zu einer deutlichen Reduzierung der Rechenzeit.



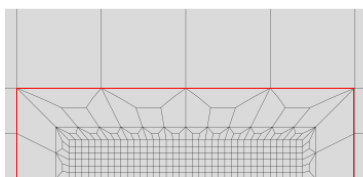
27 Elemente in Höhenrichtung



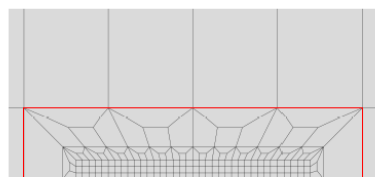
18 Elemente in Höhenrichtung



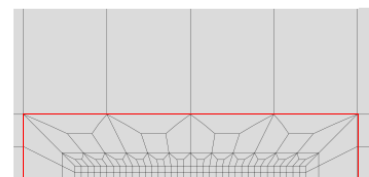
9 Elemente in Höhenrichtung



6 Elemente in Höhenrichtung



3 Elemente in Höhenrichtung



2 Elemente in Höhenrichtung

Abbildung 42: 2D C(T)-Probe mit Variation der Elementanzahl senkrecht zur Ligamentebene

Abbildung 43 zeigt das Kraft-Rissöffnungsverhalten sowie den Spannungsverlauf in y-Richtung für ein COD von 6 mm für die untersuchten Netzkonfigurationen. Bis zu einer Elementanzahl von 6 Elementen in Höhenrichtung zeigt sich ein nahezu identischer Verlauf zur Referenzvernetzung mit 27 Elementen. Für eine Elementanzahl von 2 oder 3 Elementen zeigen sich deutliche Abweichungen für den Verlauf der Spannungen in y-Richtung. Im Folgenden wird demnach die Variante mit 6 Elementen senkrecht zur Ligamentebene gewählt.

Die im Folgenden verwendete Vernetzung zeigt Abbildung 44. Hierbei wurden die Randbedingungen so gewählt, dass 2 Elemente mit der Elementkantenlänge 0,1 mm vor der eigentlichen Risspitze (links) liegen.

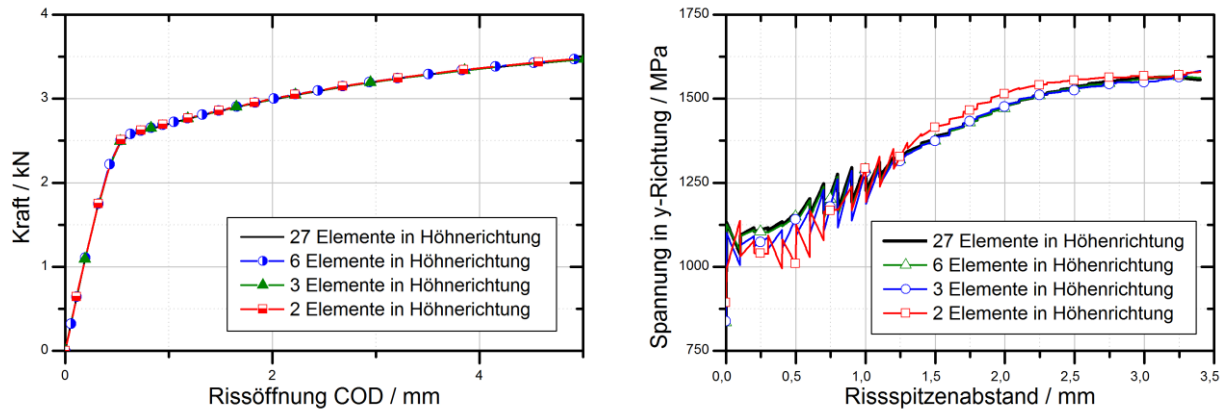


Abbildung 43: Kraft-COD-Verlauf und Spannungsverteilung im Bereich der Risspitze für verschiedene Vernetzungen

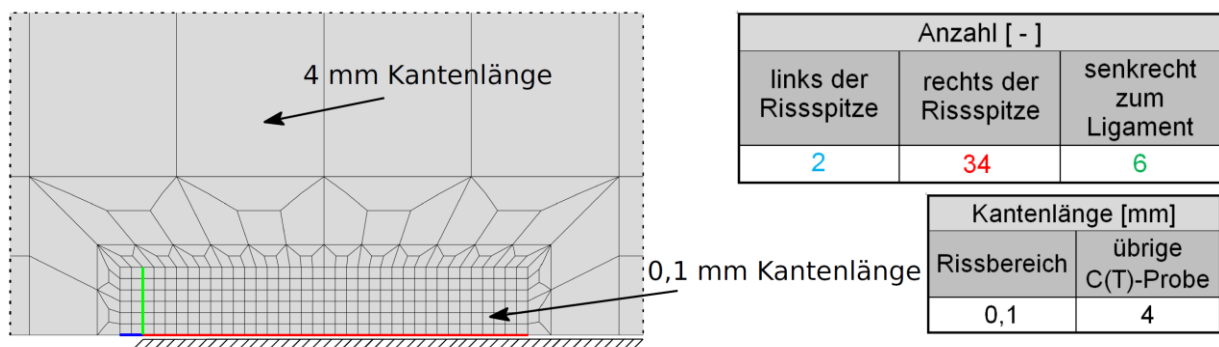


Abbildung 44: Geometrie der Vernetzung und Anzahl der Elemente im Rissbereich

Wie in Kapitel 2.2 beschrieben zeigen ferritische Stähle ein temperaturabhängiges Versagensverhalten. Bei tieferen Temperaturen sinkt die Verformungsfähigkeit und der Spannungsgradient an der Risspitze nimmt zu. Zur Untersuchung verschiedener Temperaturen muss die Elementgröße im Risspitzenbereich an den Spannungsgradienten angepasst werden. Eine Übersicht der untersuchten Netzkonfigurationen für die C(T)25-Probe zeigt Tabelle 3.

Tabelle 3: Übersicht der untersuchten Netzkonfigurationen in Abhängigkeit der Temperatur

| Elementkantenlänge [mm] | Temperatur [°C] | | | | |
|-------------------------|-----------------|--------|--------|---------|---------|
| | +20 °C | -20 °C | -60 °C | -100 °C | -150 °C |
| 0,10 | | | | | |
| 0,05 | | | | | |
| 0,01 | | | | | |
| 0,005 | | | | | |
| 0,002 | | | | | |

Für eine genaue Untersuchung der Bruchmechanikproben wird das Modell auf drei Dimensionen erweitert. Der Schädigungsgradient in Dickenrichtung ist deutlich kleiner als in Rissfortschrittsrichtung (in Richtung des Ligaments) und senkrecht dazu, sodass in Dickenrich-

tung eine deutlich gröbere Elementierung erfolgen kann. Auch in Dickenrichtung erfolgt eine leichte Verfeinerung der Netzstruktur erst im rissnahen Bereich. Dadurch kann die Elementanzahl um rund 13 % gegenüber einer kompletten Verfeinerung verringert werden. Bei Modellierung des dreidimensionalen Modells kann ein Vergleich zwischen seitengekerbter und nicht seitengekerbter Probe stattfinden. C(T)-Proben werden häufig mit Seitenkerben versehen, um einen über den Kerbquerschnitt konstanten Rissfortschritt zu erreichen. Die dreidimensionalen Modelle sowie den Querschnitt der Viertel C(T)25-Probe mit und ohne Seitenkerben zeigt Abbildung 45.

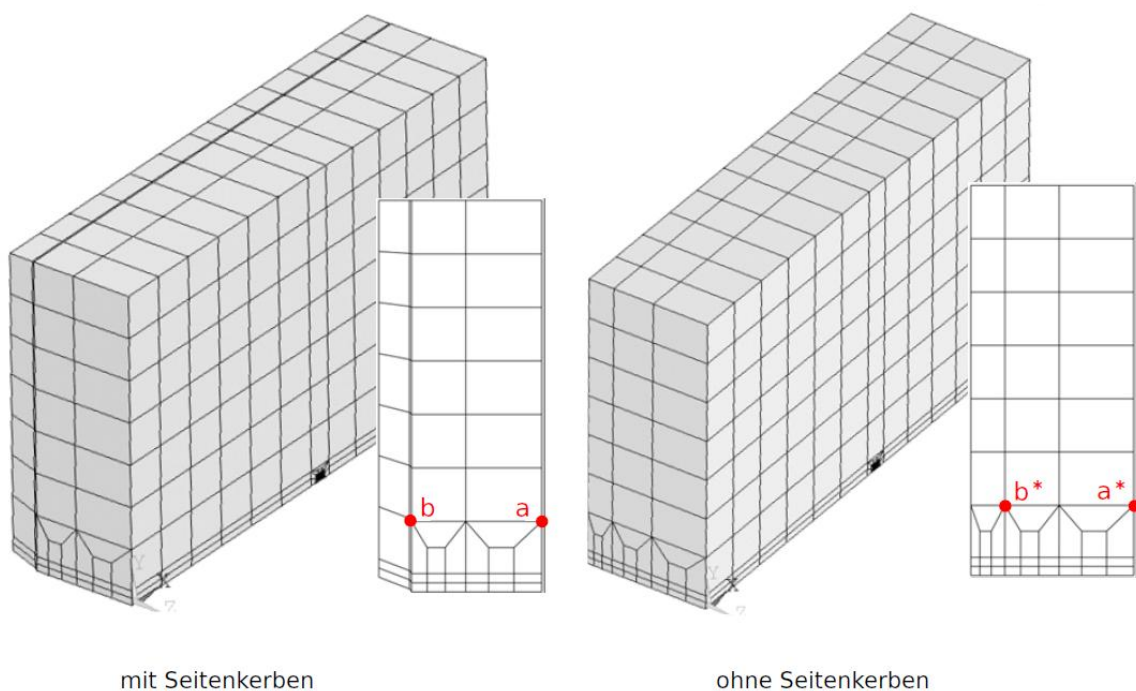


Abbildung 45: 3D Viertel-Modell der C(T)25-Probe mit und ohne Seitenkerben

Die Nettobreite B_N im Kerbgrund ergibt sich für C(T)25-Proben mit 20 %-igen Seitenkerben nach ASTM E1820 [ASTM E1820-08, 2008] zu $B_N = 20$ mm. Um die Rechenergebnisse beider Proben miteinander vergleichen zu können, erfolgt für den Kerbgrund zwischen den Punkten a und b (mit Seitenkerben) und a* und b* (ohne Seitenkerben) eine identische Vernezung. Der Abstand der Punkte beträgt in beiden Fällen $B_N / 2 = 10$ mm.

Tabelle 4: Schädigungsmechanische Parameter und temperaturabhängiger E-Modul für den Werkstoff 22NiMoCr3-7

| Parameter | Größe [mm] |
|---------------------|------------|
| f_0 | 0,0003 |
| f_c | 0,05 |
| κ | 1,80 |
| C_{length} | 0,05 |
| D | 2,00 |
| σ_k | 445 |

| Temperatur | E-Modul [MPa] |
|------------|---------------|
| +20 °C | 212000 |
| -20 °C | 214100 |
| -60 °C | 216350 |
| -100 °C | 217800 |
| -150 °C | 220500 |

Die Fließkurven für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 zeigt Abbildung 14. Die Temperaturabhängigkeit des E-Modul sowie die verwendeten schädigungsmechanischen Parameter sind in Tabelle 4 dargestellt. Für alle Berechnungen wird die Querkontraktionszahl mit $\nu = 0,3$ als konstant angenommen.

In Abbildung 46 ist das experimentelle Kraft-COD-Verhalten einer seitengekerbten C(T)25-Probe mit einer elast.- plast. und schädigungsmechanischen Simulation für die Temperaturen 20 °C und -20 °C gegenübergestellt. Im Bereich kleiner Rissöffnungen zeigen alle Kurven eine gute Übereinstimmung. Bei zunehmender Aufweitung COD steigt die Kraft der elast. – plast. Simulation weiter an, während die schädigungsmechanische Berechnung den Lastabfall durch die zunehmende Reduktion des tragenden Querschnitts durch Risswachstum gut abbilden kann. Für die Temperatur 20 °C kann ab COD = 1,8 mm mit dem nichtlokalen Schädigungsmodell der Vorgang der Rissinitiierung durch Erreichen des kritischen Hohlraumvolumens $f_c = 0,05$ berechnet werden. Somit kann auch in der Berechnung der Beginn der Schädigung und die Verringerung des tragenden Restquerschnitts angezeigt werden. Hierbei kann besonders mit der Simulation der C(T)25-Probe mit Seitenkerben das experimentelle Verhalten sehr gut abgebildet werden. Auch für -20 °C stimmen die Ergebnisse zwischen Experiment und Simulation einer seitengekerbten Probe gut überein, Abbildung 46.

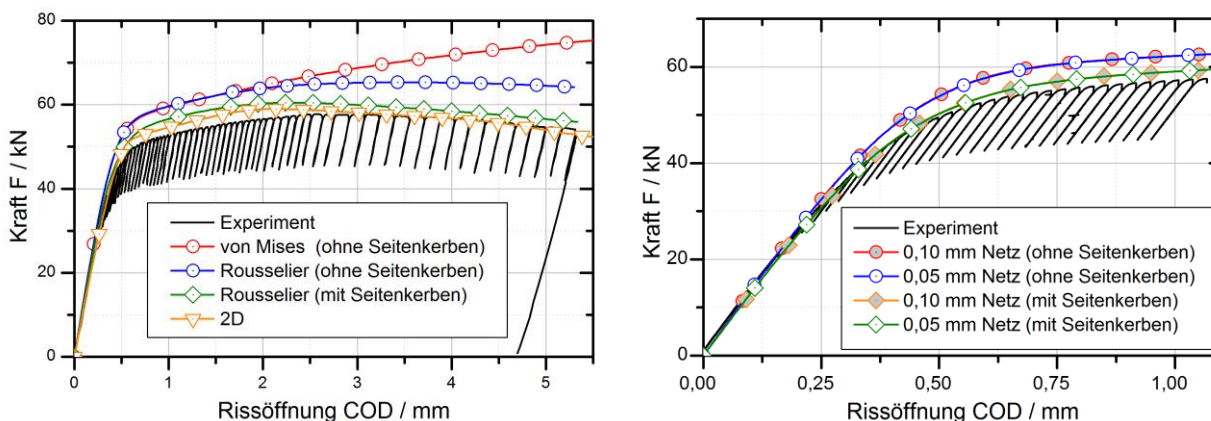


Abbildung 46: Vergleich der experimentell und numerisch ermittelten Kraft-COD-Verläufe von C(T)25-Proben für die Temperaturen 20 °C und -20 °C

7.1.1 Vergleich der Rissfront

In einem zweiten Schritt folgt die Untersuchung der Rissfront. Aus Experimenten ist bekannt, dass bei Proben ohne Seitenkerben die Rissfront in der Mitte des Querschnitts stärker anwächst als im Randbereich und sich die Form eines sogenannten „Daumennagels“ ausbildet. In der Simulation tritt bei Erreichen von $f = f_c = 0,05$ Koaleszenz der Hohlräume ein und eine Erweiterung des Risses wird angenommen. Abbildung 47 zeigt diese Risserweiterung als grauen Bereich für die C(T)25-Probe. Die Simulation ohne Seitenkerben kann die typische „Daumennagel“-Form gut vorhersagen. Für die Simulation mit Seitenkerben zeigt sich eine nahezu gerade Rissfront, wie laut experimentellen Untersuchungen [Roos & Seebich, 2006] zu erwarten war.

Abbildung 47 zeigt zudem die Gegenüberstellung einer experimentellen mit einer berechneten Rissfront einer C(T)25-Probe mit der Prüftemperatur 20 °C. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung beider Ergebnisse.

Zur Untersuchung der Netzunabhängigkeit des nichtlokalen Rousselier Modells zeigt Abbildung 48 den Vergleich der Schädigung in der Mittelebene der C(T)25-Probe für die Elementkantenlängen 0,1 mm und 0,05 mm. Beide Vernetzungen zeigen den gleichen Rissfortschritt für ein COD von 0,9 mm, 1,2 mm und 1,5 mm.

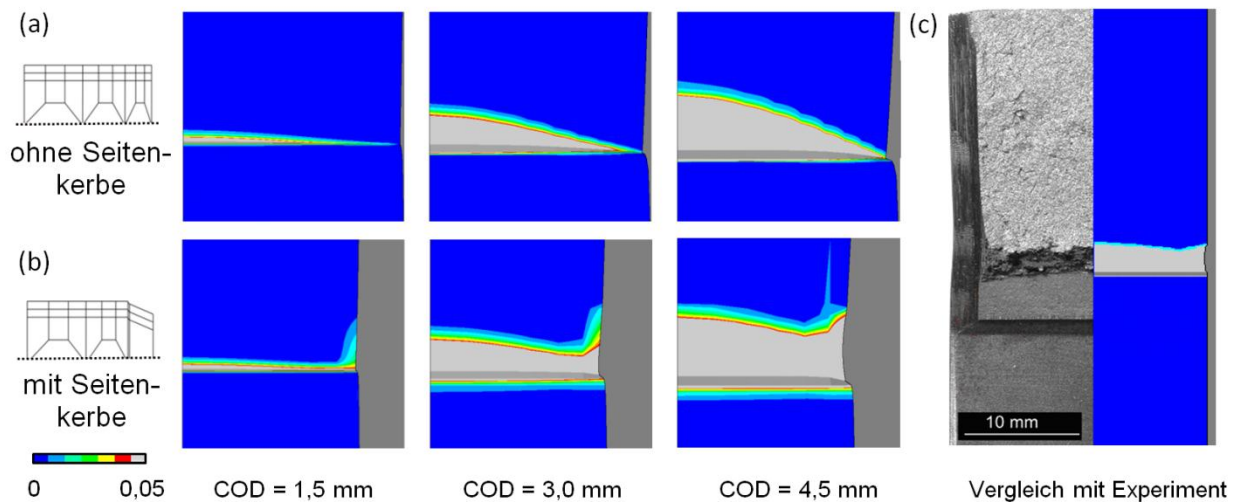


Abbildung 47: Gegenüberstellung der Rissfronten von (a) nicht seitengekerbten und (b) seitengekerbten C(T)25-Proben bei 20 °C sowie (c) Gegenüberstellung von Simulation und Experiment

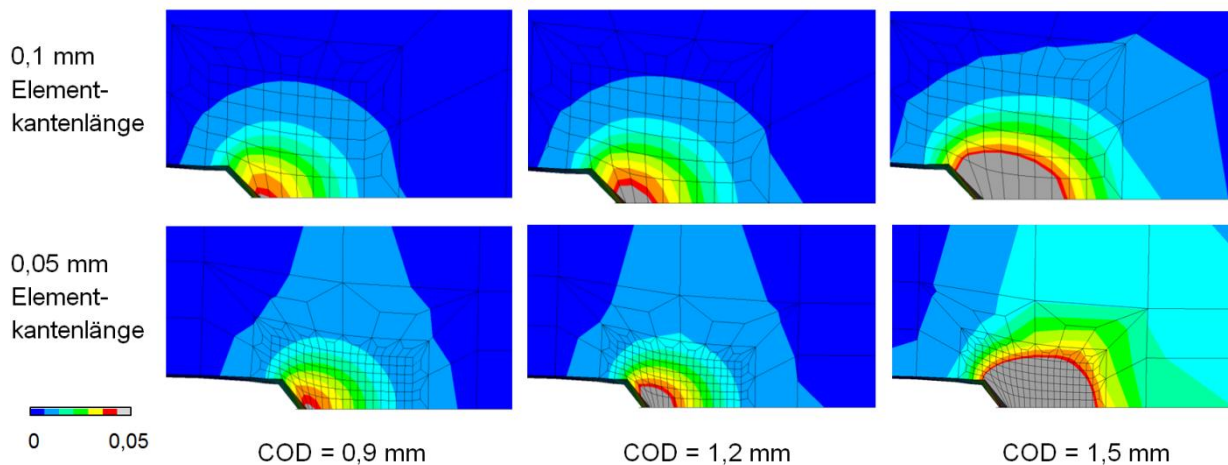


Abbildung 48: Vergleich der Schädigung in der Mittelebene der C(T)25-Probe bei 20 °C für verschiedene Elementkantenlängen

Eine Gegenüberstellung der Schädigung in der Mittelebene der C(T)25-Probe mit und ohne Seitenkerben zeigt Abbildung 49. Der maximale Rissfortschritt ist für beide Proben für die aufgeführten Zeitschritte identisch. Dies zeigt die Unabhängigkeit des Rissfortschritts von den Seitenkerben in der Mittelebene der Probe.

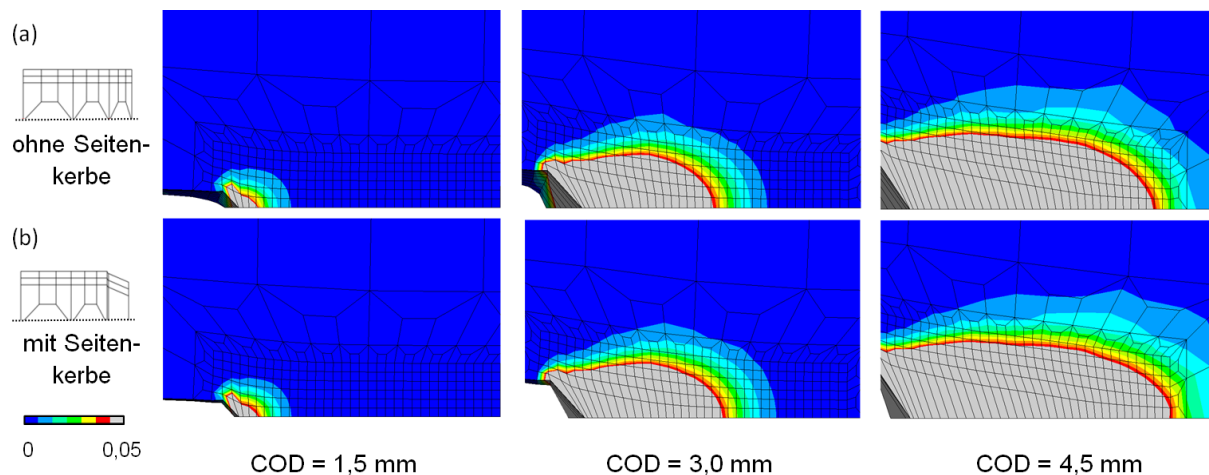


Abbildung 49: Vergleich der Schädigung in der Mitteleben der C(T)-25-Probe mit und ohne Seitenkerben

7.1.2 Bestimmung der Rissinitiierungskennwerte

Das sich an die Initiierung anschließende stabile Risswachstum wird mit Hilfe der Risswiderstandskurve (J_R -Kurve) charakterisiert. Mit Hilfe der Risswiderstandskurve kann das Risswachstum infolge einer Belastungssteigerung ermittelt werden. Der in Kapitel 7.1 berechnete Kraft-Aufweitungs-Verlauf bildet die Grundlage für die Ermittlung dieser Kurve. Abbildung 50 zeigt eine Gegenüberstellung der Risswiderstandskurve ermittelt aus den experimentellen und numerischen Daten für eine Prüftemperatur von 20 °C. Für das Experiment wurden hierbei gemäß ASTM E1921 [ASTM E1921-02, 2002] aus der Kraft-Aufweitungskurve die Stützstellen der Risswiderstandskurve ermittelt. Zwischen dem Ausgangszustand und dem Beginn des Risswachstums erfolgt eine Abstumpfung der Rissspitze. Dieses sogenannte Blunting bezeichnet eine Plastifizierung vor der Rissspitze die keine Erweiterung des Risses mit sich bringt. Im Experiment wird somit bereits vor der eigentlichen Rissinitiierung eine Art Rissfortschritt erfasst, der sich durch Nachgiebigkeiten der Kraft-Verschiebungskurve bemerkbar macht, siehe auch Abbildung 7 in Kapitel 2.2.2.

Im Gegensatz zum Experiment kann in der Simulation das Blunting nicht abgebildet werden. Für die Ermittlung der numerischen Daten erfolgt die Bestimmung der Risswiderstandskurve nach der MPA-Approximation [Roos, 2010]. Für die Ermittlung des Risswachstums Δa gibt es für die numerischen Methoden keine vereinheitlichte Vorgehensweise. Im Folgenden wird die Entwicklung des Hohlraumvolumenanteils f an den Gaußpunkten im Ligament betrachtet. Der Rissfortschritt kann somit in $1/3$ Schritten der Elementkantenlänge in Ligamentrichtung erfasst werden. Im dreidimensionalen Fall wird des Hohlraumvolumenanteils f für alle im Ligament liegenden Elemente ermittelt und anschließend über eine arithmetische Mittelwertbildung das Risswachstum über die Probendicke berechnet. Aufgrund der unterschiedlichen Elementbreiten erfolgt eine Gewichtung des elementweise berechneten Risswachstums in Abhängigkeit des Flächenanteils in Probendickenrichtung.

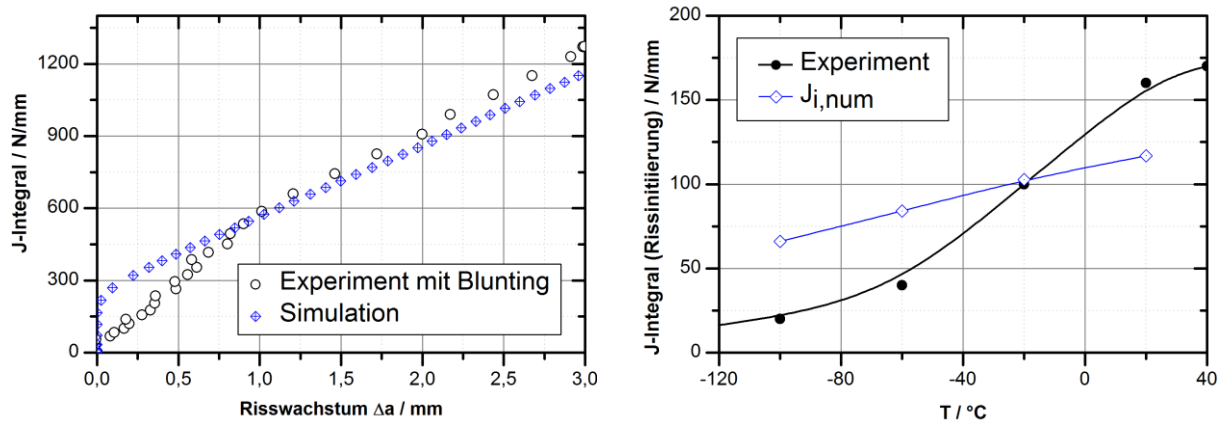


Abbildung 50: Vergleich der simulierten und experimentell ermittelten Risswiderstandskurve für eine C(T)25-Probe mit der Prüftemperatur 20 °C sowie Darstellung der Rissinitiierungskennwerte für verschiedene Temperaturen

Die Simulation kann das experimentell beobachtete Verhalten in gutem Maße abbilden. Abweichungen sind lediglich im Bereich kleiner Risswachstumsbeträge zu erkennen. Ein Vergleich in diesem Bereich ist jedoch nur bedingt möglich, da die experimentellen Daten im Gegensatz zu den numerischen Daten das Blunting berücksichtigen. Unter diesen Voraussetzungen kann die Übereinstimmung als gut bezeichnet werden.

Abbildung 50 zeigt zudem die Rissinitiierung in Abhängigkeit der Temperatur. Als numerische Rissinitiierung wird derjenige Punkt bezeichnet, bei dem der erste Integrationspunkt an der Rissfront das kritische Hohlraumvolumen f_c erreicht. Dieses Vorgehen stellt eine grobe Näherung dar, weil der so vorhergesagte Wert von der Netzfeinheit abhängt. Die Werte können aber auch als untere Schranke gesehen werden. Ein direkter Vergleich mit den experimentellen Werten ist so schwierig. Die numerischen Rissinitiierungskennwerte $J_{i,num}$ zeigen zum Experiment deutliche Abweichungen im Bereich tiefer Temperaturen. Zwar nehmen die numerisch ermittelten Werte mit sinkender Temperatur ebenfalls ab, jedoch in einem viel geringeren Maße als die experimentell beobachteten. Allein mit dem Rousselier Modell, welches lediglich die Anteile des Wabenbruchs berücksichtigt, kann demzufolge das experimentelle Verhalten nicht ausreichend abgebildet werden.

7.1.3 Berechnung des temperaturabhängigen Last-Verformungsverhaltens

Mit Hilfe der experimentellen Ergebnisse aus [Roos & Seebich, 2006] kann ein Vergleich des Last-Verformungsverhaltens zwischen Experiment und Berechnung für die Temperaturen -60 °C, -100 °C und -150 °C erfolgen.

In Abbildung 51 sind die experimentellen den numerischen Ergebnisse für die Temperaturen -60 °C, -100 °C und -150 °C gegenübergestellt. Hierbei wurden für die Simulationen unterschiedliche Netzkonfigurationen nach Tabelle 3 verwendet. Für alle Ergebnisse zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen der Simulation mit Seitenkerben und dem Experiment.

Abbildung 51 zeigt außerdem eine Gegenüberstellung aller Simulationen für die untersuchten Temperaturen. Die durch die Abnahme der Temperatur ebenfalls reduzierte Verformbarkeit des ferritischen Werkstoffs kann sehr gut abgebildet werden.

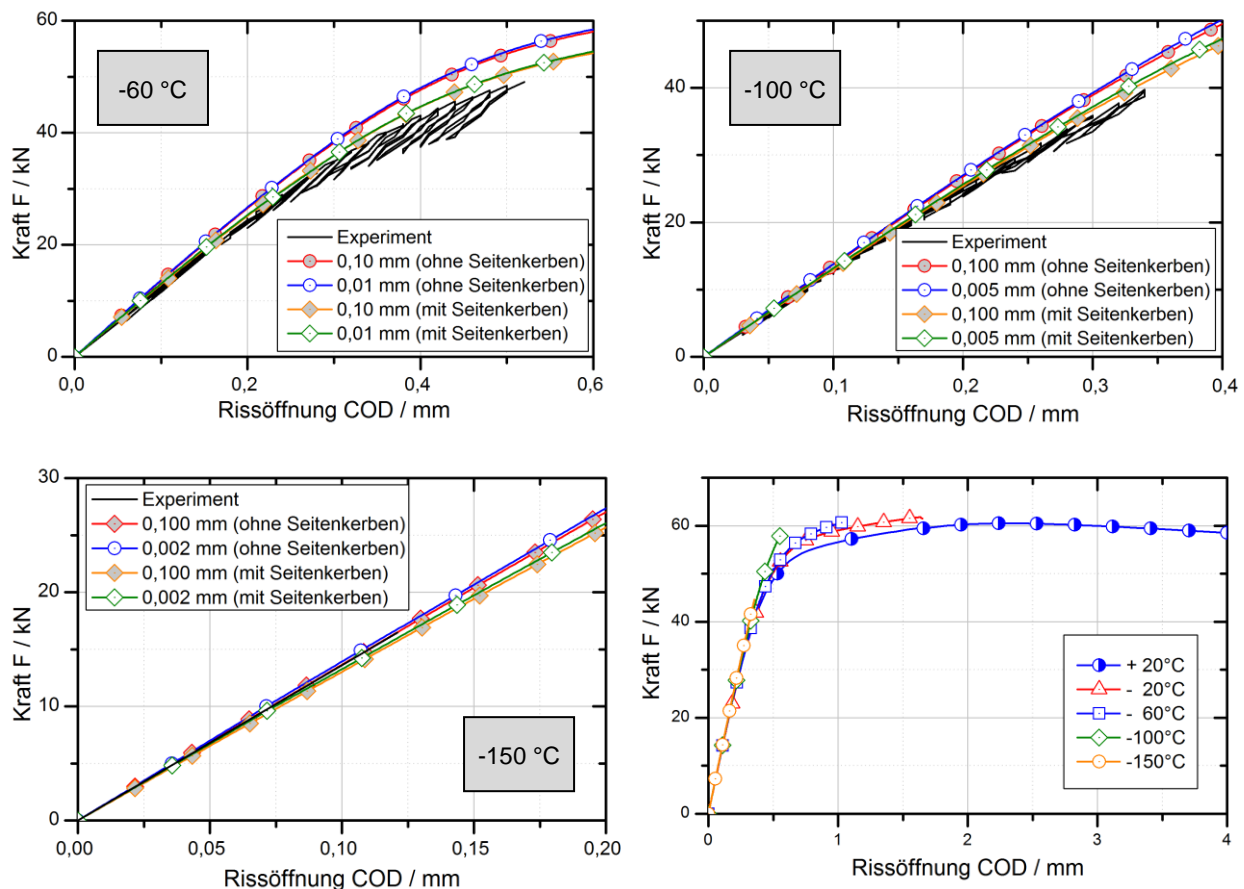


Abbildung 51: Vergleich der experimentell und numerisch ermittelten Kraft-COD-Verläufe für die Temperaturen -60 °C, -100 °C und -150 °C sowie ein Vergleich aller Simulationen mit Seitenkerben

7.1.4 Berechnung der Spaltbruchinstabilität in Abhängigkeit der Temperatur

Die in Kapitel 7.1.3 vorgestellten Berechnungen berücksichtigen nur das stabile Risswachstum infolge des Wabenbruchs. Durch die Anwendung des gekoppelten Ansatzes kann nun den Proben in Abhängigkeit von der makroskopischen Belastung und der Temperatur eine Spaltbruchwahrscheinlichkeit zugeordnet werden. Im BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 wurden an der MPA Universität Stuttgart [Roos & Seebich, 2006] und am IWM Freiburg [Hohe & Tanguy, 2005] C(T)25-Proben mit 20 % Seitenkerbung in Abhängigkeit von der Temperatur geprüft. Bei -100 °C und -20 °C wurden jeweils 50 Proben untersucht, um die Streuung der Ergebnisse beurteilen zu können. Die Beanspruchung bei Instabilität wurde mit dem K_{Jc} Wert charakterisiert, um die Proben untereinander zu vergleichen. Die Bestimmung des K_{Jc} Wertes erfolgte gemäß [ASTM E1921-02, 2002], indem der J-Integralwert am Instabilitätspunkt formal in einen K-Wert umgerechnet wurde. Die experimentellen Ergebnisse sind in Abbildung 52 als schwarze Kreise dargestellt.

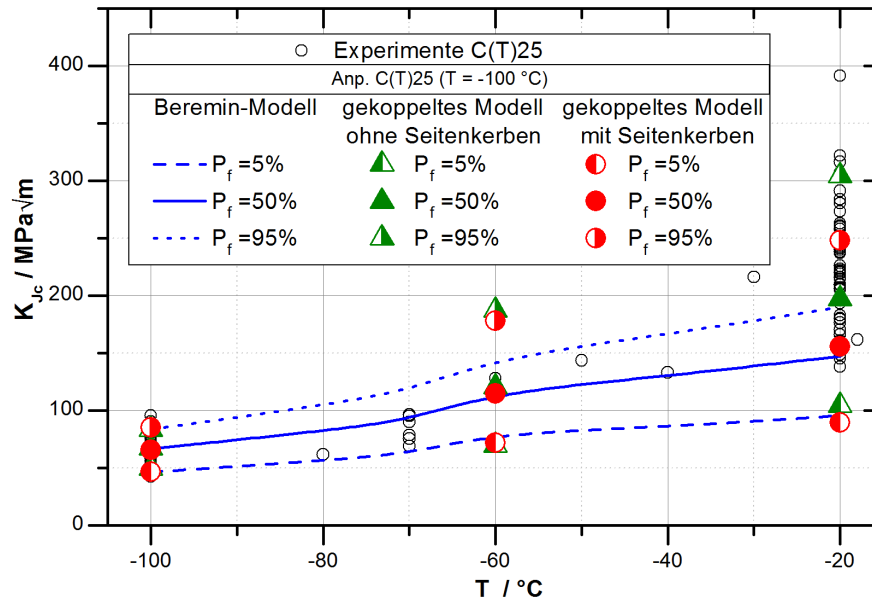


Abbildung 52: Numerische Vorhersage des temperaturabhängigen Spröbruchversagens von C(T)25-Proben mit dem gekoppelten Schädigungsmodell, Anpassung an C(T)25-Proben (-100 °C), nach ASTM E1921 [ASTM E1921-02, 2002], gekoppeltes Modell ohne Seitenkerben nach [Samal, 2007]

Die zur Anwendung des Beremin Modells notwendigen Parameter m und σ_u wurden mit Hilfe der vorliegenden experimentelle Werte bei -100 °C angepasst. Es zeigt sich, dass die Modellierung der Seitenkerben und die Netzfeinheit in Dickenrichtung im Rissbereich einen Einfluss auf die Weibull Parameter hat. Um den Einfluss der Seitenkerben bei der Berechnung der Weibullspannung auszuschließen, wurden die Elemente, welche direkt an die Seitenkerbe anschließen vernachlässigt. Bei -100 °C ergeben sich Weibull Parameter von $m = 21,59$ MPa und $\sigma_u = 2366,58$ MPa. Wie zu erwarten, beschreiben die Berechneten Bruchwahrscheinlichkeiten bei dieser Temperatur die experimentellen Werte sehr gut. Auch für -60 °C ergibt sich eine gute Übereinstimmung. Bei -20 °C unterschätzen die Simulationen etwas die experimentellen Werte. Im Gegensatz zur Simulation, bei der nur das Beremin Modell verwendet wurde, sind die Ergebnisse aber zufriedenstellend. Für die Auswertungen bei -20 °C wurden die Berechnungen mit einer Elementkantenlänge von 0,1 x 0,1 mm im Rissbereich verwendet.

Wird mit dem gleichen gekoppelten nichtlokalen Schädigungsmodell die Temperaturabhängigkeit für nicht seitengekerbte C(T)-Proben berechnet, so decken die Ergebnisse die experimentellen Werte besser ab.

7.2 Berechnung von 3-Punkt Biegeproben

Die Modellierung der SE(B)25x50-Probe erfolgt in Anlehnung an mögliche Querschnittsabmessungen nach ASTM E1820 [ASTM E1820-08, 2008]. Numerisch untersucht wird ausschließlich die Probe mit 20 %-igen Seitenkerben. Die Abmessungen sind Abbildung 53 zu

entnehmen. Die Anfangsriszlänge a_0 liegt mit 26,1 mm im Bereich der Angaben nach ASTM E1820 von $0,45 \leq a_0/W \leq 0,55$.

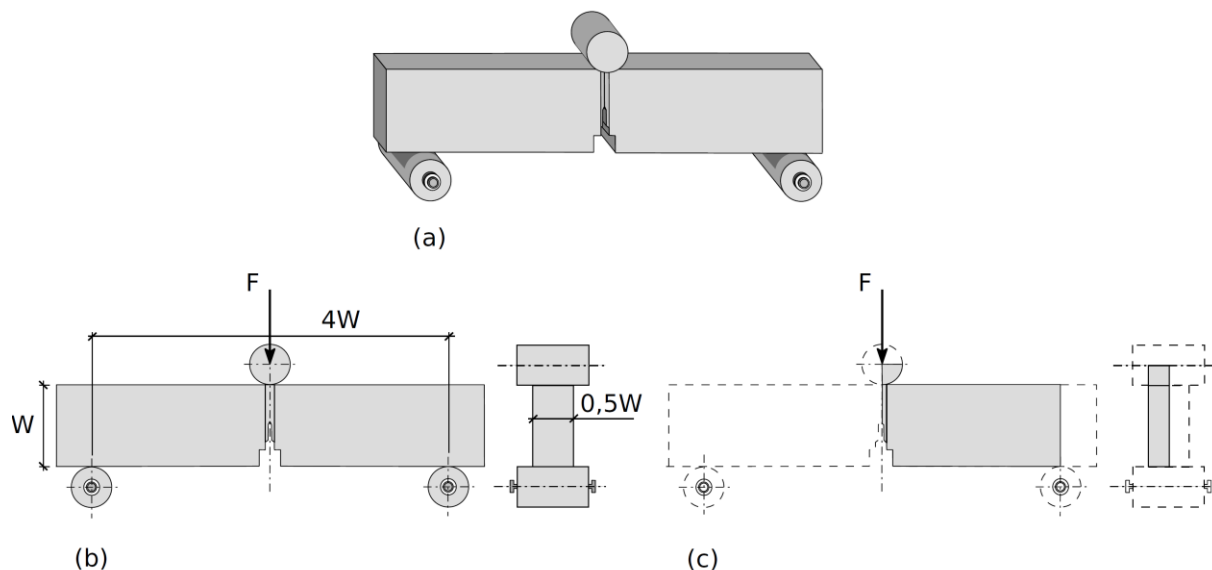


Abbildung 53: Schematische Darstellung der SE(B)25x50-Probe (a) komplette Probe, (b) Längs und Querschnitt sowie (c) modellierte Viertel Probe

Die optimierte Netzstruktur im Bereich der Risspitze der C(T)25-Probe, Kapitel 7.1, wird auch für die Modellierung der SE(B)25x50-Probe übernommen. Bei der Versuchsdurchführung wird die Probe auf zwei Rollen gelagert, während mit einer dritten Rolle die Kraft aufgebracht wird. In der Simulation erfolgt deshalb zusätzlich die Untersuchung des Einflusses des Rollenlagers auf die Verformung der Probe [Brüggemann, 2011].

Wie bei der C(T)25-Probe wird auch bei der SE(B)25x50-Probe das temperaturabhängige Versagensverhalten untersucht. Eine Übersicht über die durchgeführten Simulationen mit zugehörigen Elementkantenlängen im Rissbereich zeigt Tabelle 5. Um den Einfluss des Rollenlagers zu untersuchen wurde eine Vergleichsrechnung bei -20 °C durchgeführt.

Tabelle 5: Übersicht der untersuchten Netzkonfigurationen in Abhängigkeit der Temperatur

| Elementkantenlänge [mm] | SE(B)25x50-Probe ohne Rollenlager | | | | mit Rollenlager |
|-------------------------|-----------------------------------|--------|--------|---------|-----------------|
| | Temperatur [°C] | | | | |
| | +20 °C | -20 °C | -60 °C | -100 °C | -20 °C |
| 0,50 | | | | | |
| 0,05 | | | | | |
| 0,01 | | | | | |
| 0,005 | | | | | |

Wie bei Berechnung der C(T)25-Probe erfolgt die Berechnung mit dem UserElem lediglich im fein vernetzten Bereich der Risspitze. Für die modellierte SE(B)-Probe ohne Rollenlager erfolgte im Bereich der Lasteinleitung eine linear-elastische Berechnung, um große Deformationen im Bereich der punktuellen bzw. linienförmigen Lasteinleitung zu vermeiden. Der Rest

der Probe wird mit dem elastisch – plastischen SOLID186 Element berechnet. Die Zuordnung der verschiedene Elemente und Materialien zeigt Abbildung 54.

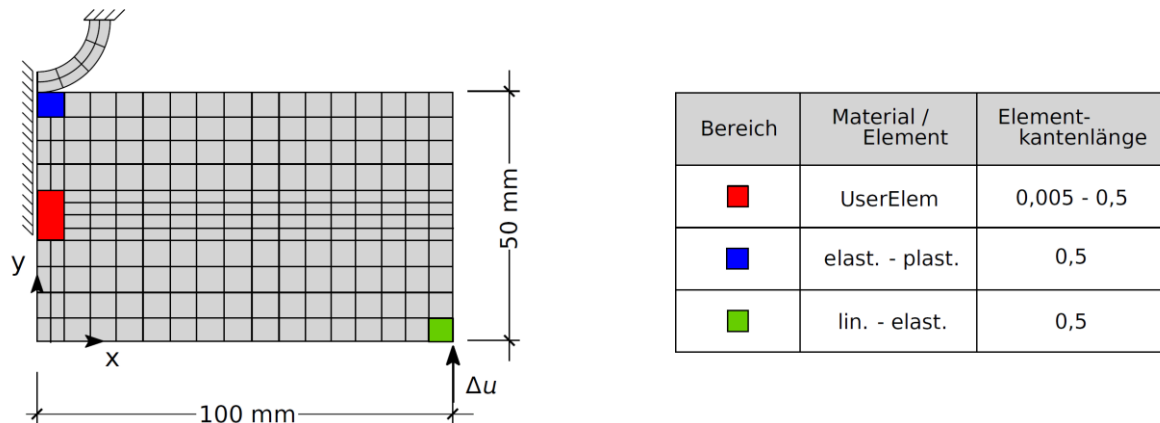


Abbildung 54: 3D Viertel-Modell der SE(B)25x50-Probe mit Seitenkerben, Randbedingungen und Einteilung der verwendeten Elemente, schematische Darstellung

Das Viertel-Modell mit und ohne Rollenlager zeigt Abbildung 55. In der Simulation wird die Durchbiegung so realisiert, dass die Verschiebung auf das im Experiment feste Lager bzw. auf das freie Ende der Probe aufgebracht wird. Die Rolle in der Mitte wird als Starrkörper und unverschieblich modelliert, vgl. auch Abbildung 54.

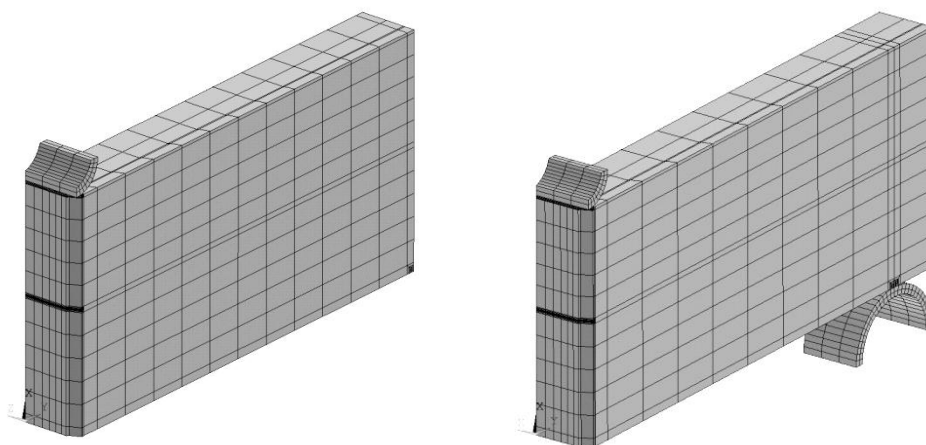


Abbildung 55: 3D Viertel-Modell der SE(B)25x50-Probe mit Seitenkerben, Darstellung mit und ohne Rollenlager

Die schädigungsmechanischen Parameter für das nichtlokale Rousselier Modell sowie weitere Werkstoffkenngrößen werden als geometrieunabhängig und als konstant angenommen, Kapitel 7.1 Tabelle 4. Abbildung 56 zeigt den Vergleich des Kraft-COD-Verhaltens von Simulation und Experiment einer SE(B)25x50-Probe. Zum einen wurde die Probe elastisch-plastisch berechnet und zum anderen mit dem nichtlokalen Rousselier Modell. Für beide Berechnungen wurde zunächst das Modell ohne Rollenaufleger verwendet. Der Lastabfall kann, wie für die C(T)25-Probe, mit dem nichtlokalen Rousselier Modell gut wiedergegeben werden. Abbildung 56 zeigt außerdem das Kraft-COD-Verhalten bei -20 °C . Hierbei wurde zusätzlich der Einfluss des Rollenlagers in der Simulation untersucht.

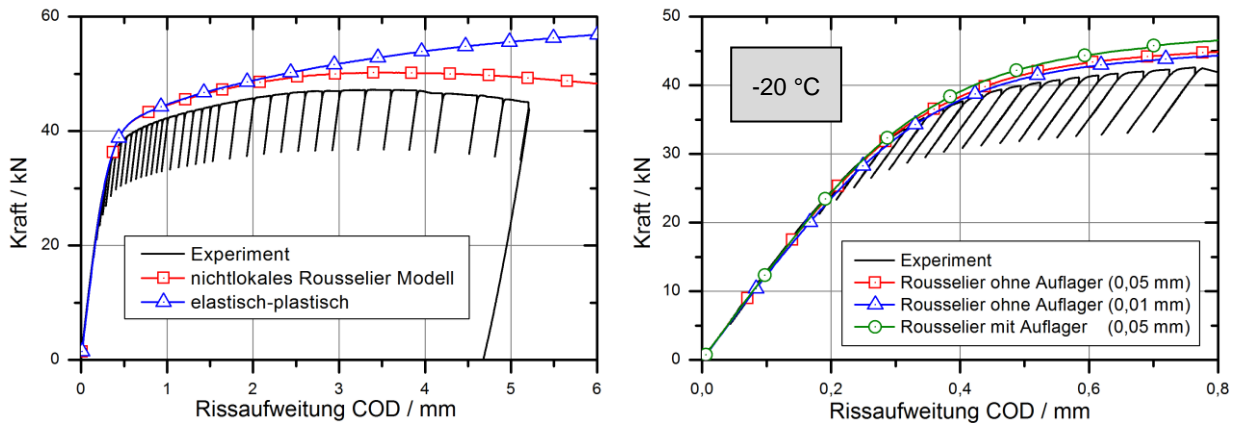


Abbildung 56: Vergleich der experimentell und numerisch ermittelten Kraft-COD-Verläufe für die Temperaturen 20 °C und -20 °C

Die grüne Kurve zeigt das Ergebnis der Simulation mit Rollenlager. Das Ergebnis ist etwas konservativer als ohne Berücksichtigung des Rollenaufagers. Da Einflüsse bei der Versuchsdurchführung wie Eindrücken der Probe oder des Aufagers an der Kontaktstelle in der Simulation nicht abgebildet werden können, wird im Weiteren das Auflager bei der Berechnung vernachlässigt.

7.2.1 Vergleich der Rissfront

Für die SE(B)25x50-Probe erfolgt wie für die C(T)25-Probe eine Untersuchung der Berechneten Rissfront. Abbildung 57 zeigt die Rissfront für ein COD von 2,00 mm, 3,00 mm und 4,30 mm mit Seitenkerben. Wie in Kapitel 7.1.1. erläutert, wird durch die Einbringung der Kerbe eine nahezu gerade Rissfront erreicht. Im Vergleich mit der C(T)25-Probe ist der Rissfortschritt im Randbereich im Verhältnis zur Probenmitte weniger ausgeprägt. Jedoch zeigt sich auch bei der SE(B)25x50-Probe der gewünschte Einfluss der Seitenkerben.

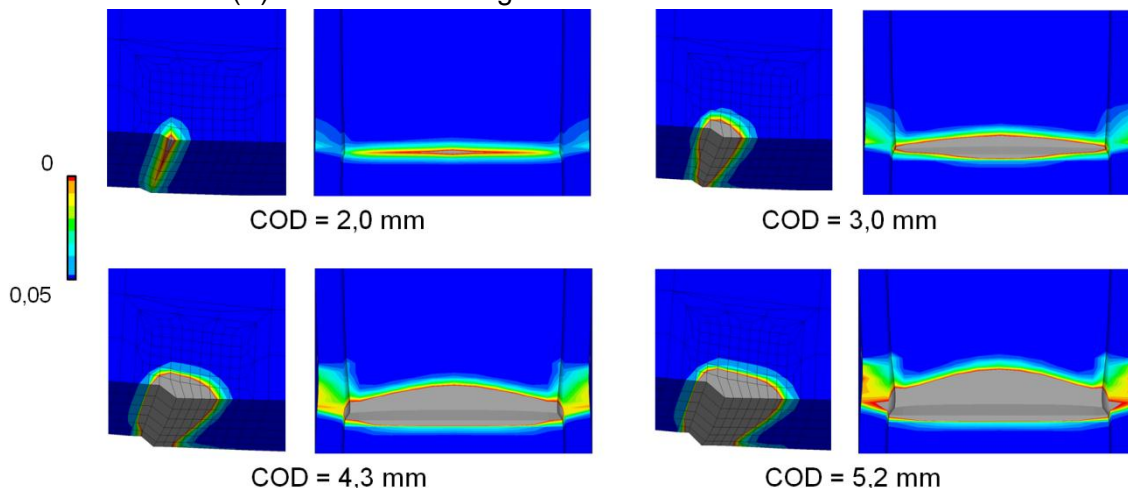


Abbildung 57: Gegenüberstellung der Rissfronten von seitengekerbten SE(B)25x50-Proben bei 20 °C für verschiedene COD, Darstellung in der Mittelebene der Proben und im Ligament

Einen Vergleich der Rissfront zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen zeigt Abbildung 58. Hierbei zeigt sich ebenso eine gute Übereinstimmung.



Abbildung 58: Darstellung einer SE(B)25x50-Probe mit der Prüftemperatur von 20 °C: (a) nach dem Versuch [Roos & Seebich, 2006] und (b) Vergleich der Rissfront zwischen Experiment und Simulation

7.2.2 Berechnung des temperaturabhängigen Last-Verformungsverhaltens

In Abbildung 59 ist ein Vergleich des Last-Verformungsverhaltens zwischen Experiment und Berechnung für die Temperaturen -60 °C und -100 °C gegeben. Allen Berechnungen liegt das Modell ohne Simulation des Rollenlagers zugrunde. Die Experimente [Roos & Seebich, 2006] sowie die Berechnungen erfolgten an SE(B)25x50-Probekörpern mit Seitenkerben. Untersucht wurden die unterschiedlichen Elementkantenlängen im Rissbereich aus Tabelle 5. Vergleichbar mit den Ergebnissen der C(T)25-Probekörper kann auch das experimentell beobachtete Verhalten der SE(B)25x50-Probekörper für alle hier untersuchten Temperaturen sehr gut abgebildet werden.

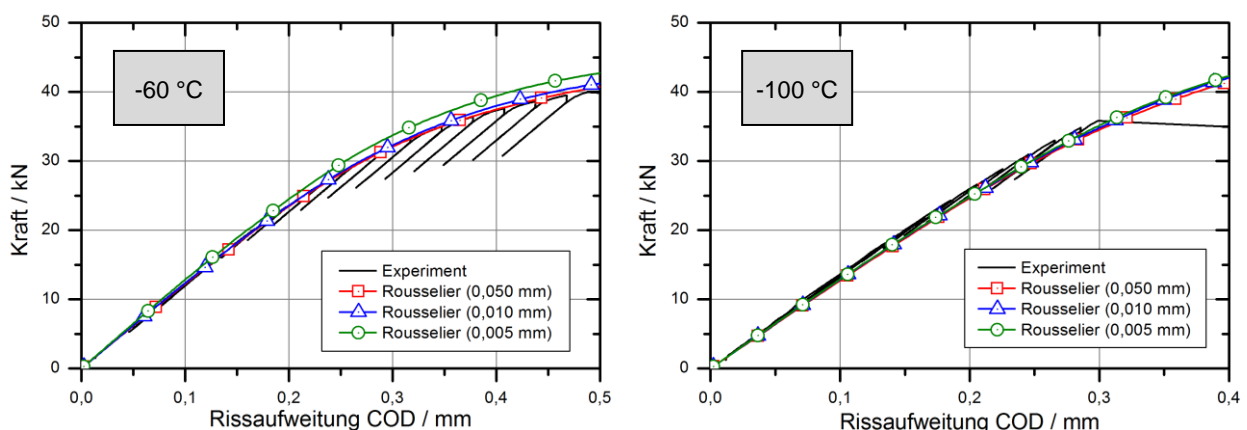


Abbildung 59: Vergleich der experimentell und numerisch ermittelten Kraft-COD-Verläufe für die Temperaturen -60 °C und -100 °C

7.2.3 Berechnung der Spaltbruchinstabilität in Abhängigkeit der Temperatur

Die in Kapitel 7.2.2 vorgestellten Berechnungen berücksichtigen nur das stabile Risswachstum infolge des Wabenbruchs. Durch die Anwendung des gekoppelten Ansatzes kann nun

den Proben in Abhängigkeit von der makroskopischen Belastung und der Temperatur eine Spaltbruchwahrscheinlichkeit zugeordnet werden.

Mit Hilfe der ermittelten Parameter für die C(T)25-Probe aus Kapitel 7.1.4 soll in diesem Abschnitt die Übertragbarkeit der Beremin Parameter auf weitere Probengeometrien überprüft werden. Im BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 wurden an der MPA Universität Stuttgart [Roos & Seebich, 2006] ebenso SE(B)25x50-Proben mit 20 % Seitenkerbung in Abhängigkeit von der Temperatur geprüft. Jedoch wurde im Gegensatz zu den Untersuchungen an C(T)25-Proben nur eine SE(B)25x50-Probe pro Temperaturstufe geprüft. Die Streuung der Ergebnisse kann hierbei nicht dargestellt werden. Die Beanspruchung bei Instabilität wurde mit dem K_{Jc} Wert charakterisiert, um die Proben untereinander zu vergleichen. Die Bestimmung des K_{Jc} Wertes erfolgte gemäß [ASTM E1921-02, 2002], indem der J-Intergalwert am Instabilitätspunkt formal in einen K-Wert umgerechnet wurde. Die experimentellen Ergebnisse sind in Abbildung 60 als schwarze Kreise dargestellt.

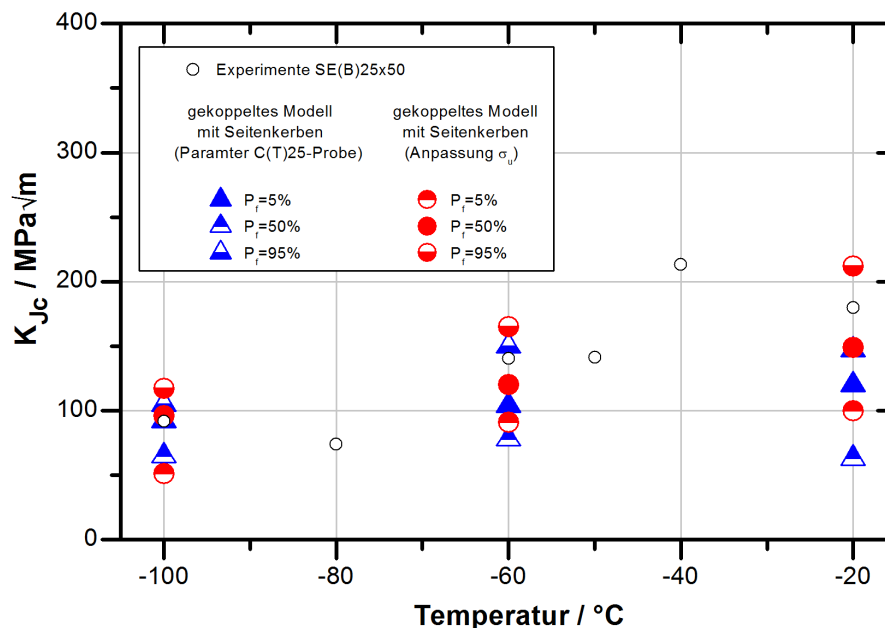


Abbildung 60: Numerische Vorhersage des temperaturabhängigen Spröbruchversagens von SE(B)25x50-Proben mit dem gekoppelten Schädigungsmodell, Beremin Parameter aus Anpassung an C(T)25-Proben (-100 °C), nach ASTM E1921 [ASTM E1921-02, 2002]

Allen Auswertungen wurde das numerische Modell mit einer Elementkantenlänge von 0,5 mm x 0,5 mm im Rissbereich zugrunde gelegt. Bei allen numerischen Modellen wurden in Dickenrichtung 21 anstatt 8 Elemente, wie in Abbildung 55, verwendet, um den Spannungsgradienten über die Dicke der Probe besser abbilden zu können. Zunächst erfolgt die Übertragung der Beremin-Parameter der C(T)25-Probe auf die SE(B)25x50-Probe. Die Ergebnisse sind in Abbildung 60 als blaue Dreiecke dargestellt. Für die Temperaturen -100 °C und -60 °C beschreiben die berechneten K_{Jc} Werte die experimentellen Werte sehr gut. Für -20 °C liegen die numerischen Werte jedoch zu tief. Alternativ wurde der Parameter σ_u

an den K_{Jc} Wert der 50 % - Masterkurve bei -60 °C angepasst. Die Parameter ergeben sich damit zu $m = 21,59$ MPa und $\sigma_u = 2450,00$ MPa. Die ermittelten K_{Jc} Werte sind in Abbildung 60 als rote Kreise dargestellt. Besonders die experimentellen Werte für -20 °C können mit diesem Parametersatz besser abgebildet werden.

8 Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Rissinitiierung

Um den Vorgang der Rissinitiierung näher zu untersuchen werden zum einen sogenannte Rissinitiierungskurven mit dem Rousselier Modell für verschiedene Temperaturen erstellt und mit experimentellen Daten und Berechnungen aus Teil A des Forschungsvorhabens der RWTH Aachen [Münstermann & Kucharczyc, 2013] verglichen. In einem weiteren Schritt folgen fraktographische Untersuchung der Bruchflächen von gekerbten Flachzugproben und metallographische Schlitze an Rundzugproben mit unterschiedlichem plastischen Deformationsgrad. Diese Proben wurden im Rahmen des Forschungsvorhabens Teil A an der RWTH Aachen geprüft und an der MPA Universität Stuttgart metallographisch auf Anzeichen der Rissinitiierung untersucht. Zudem wird ein Vergleich der Gefügestruktur zum unbelasteten RDB-Ringsegment sowie zu einem Makrorisses hergestellt.

8.1 Berechnung des mikroskopischen und makroskopischen Schädigungsbeginns

Der Zeitpunkt der Rissinitiierung wird hier mit Hilfe der Rissinitiierungskurve untersucht. Hierbei wird in Abhängigkeit der Mehrachsigkeit σ_m / σ_v die Vergleichsdehnung bestimmt, bei welcher Rissinitiierung auftritt.

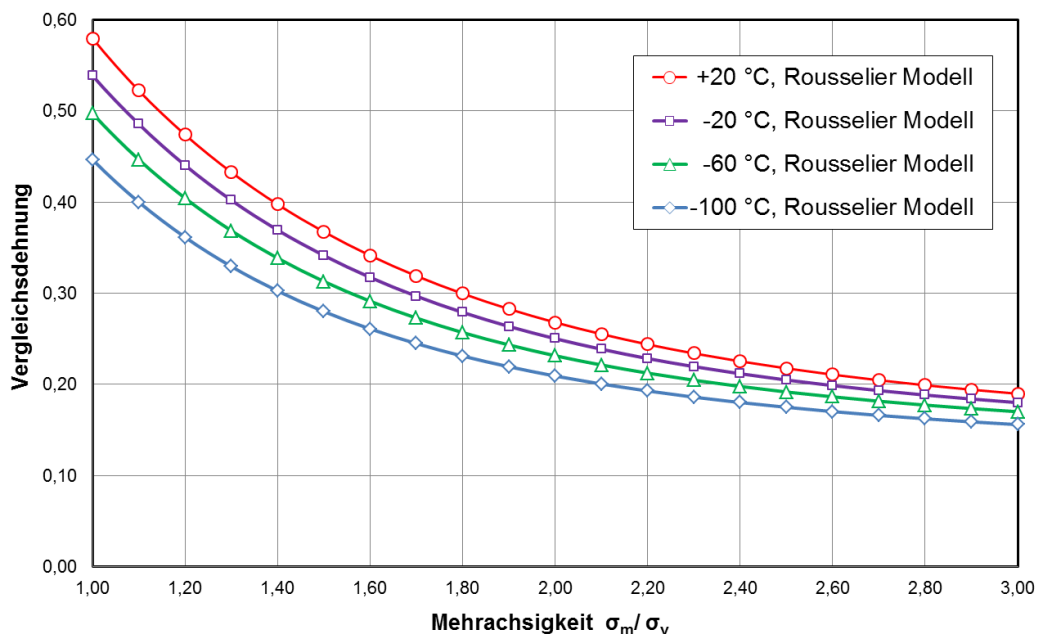


Abbildung 61: Rissinitiierungskurve für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 für die Temperaturen +20 °C, -20 °C, -60 °C und -100 °C

Die Kurven aus Abbildung 61 wurden mit Hilfe des Rousselier Modells und den dafür bestimmten Parametern für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 berechnet, Kapitel 6.5.1. Das Ergebnis ist demnach nur Abhängig von den Rousselier Parametern und der Fließkurve des Werk-

stoffs. Abbildung 61 zeigt die Rissinitiierungskurven für die Temperaturen +20 °C, -20 °C, -60 °C und -100 °C.

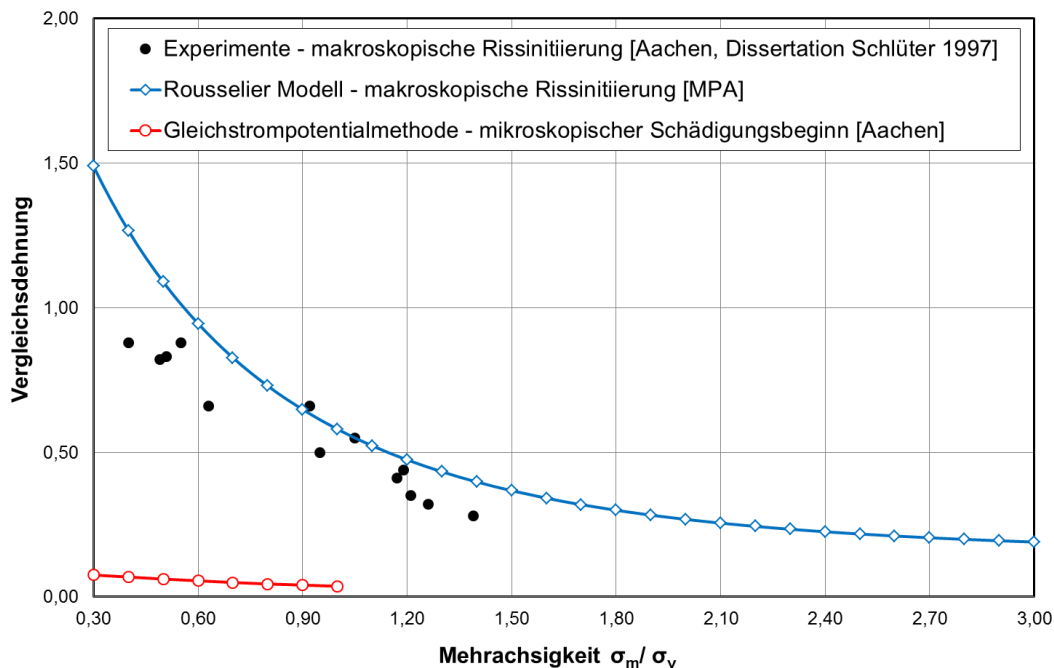


Abbildung 62: Rissinitiierungskurve für den Werkstoff 22NiMoCr3-7, Vergleich der experimentellen Ergebnisse [Schlüter, 1997] und der Berechnung der MPA Stuttgart und der RWTH Aachen für +20 °C

Zur Verifizierung der Ergebnisse zeigt Abbildung 62 den Vergleich der berechneten Rissinitiierungskurve mit experimentellen Daten aus [Schlüter, 1997] für den gleichen Werkstoff bei 20 °C. Die Ergebnisse stimmen hierbei gut überein. Abbildung 62 zeigt ebenfalls die Ergebnisse aus dem Teilprojekt A [Münstermann & Kucharczyc, 2013] dieses Forschungsvorhabens. Die Werte entstammen Messungen mit der Gleichstrompotentialmethode. Die Kurve liegt sehr viel tiefer und die Vermutung liegt nahe, dass die Potentialänderung durch einen vor der tatsächlichen Rissinitiierung stattfindenden Prozess ausgelöst wird.

In den folgenden Abschnitten soll mit Hilfe metallographischer Untersuchungen geklärt werden, ob mit der Gleichstrompotentialmethode die Ablösung der Partikel von der Matrix gemessen wird oder ob tatsächlich bereits Rissinitiierung im makroskopischen Sinn stattfindet.

8.2 Untersuchungen am Grundwerkstoff

Für eine genaue Beurteilung der metallographischen Untersuchungen von belasteten Proben muss zunächst der Grundwerkstoff untersucht werden. In diesem Abschnitt kann auf Ergebnisse des BMWi-Forschungsvorhabens 1501 240 [Roos & Seebich, 2006] zurückgegriffen werden. Mit Hilfe rasterelektronischer Untersuchungen konnten Einschlüsse bestehend aus Mangansulfiden und Verbindungen mit Aluminium, Zirkonium, Schwefel und Magnesium gefunden werden. Abbildung 63 zeigt eine Auswahl der gefundenen Einschlüsse. Für weitere

Einzelheiten sei auf das BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 [Roos & Seebich, 2006] verwiesen.

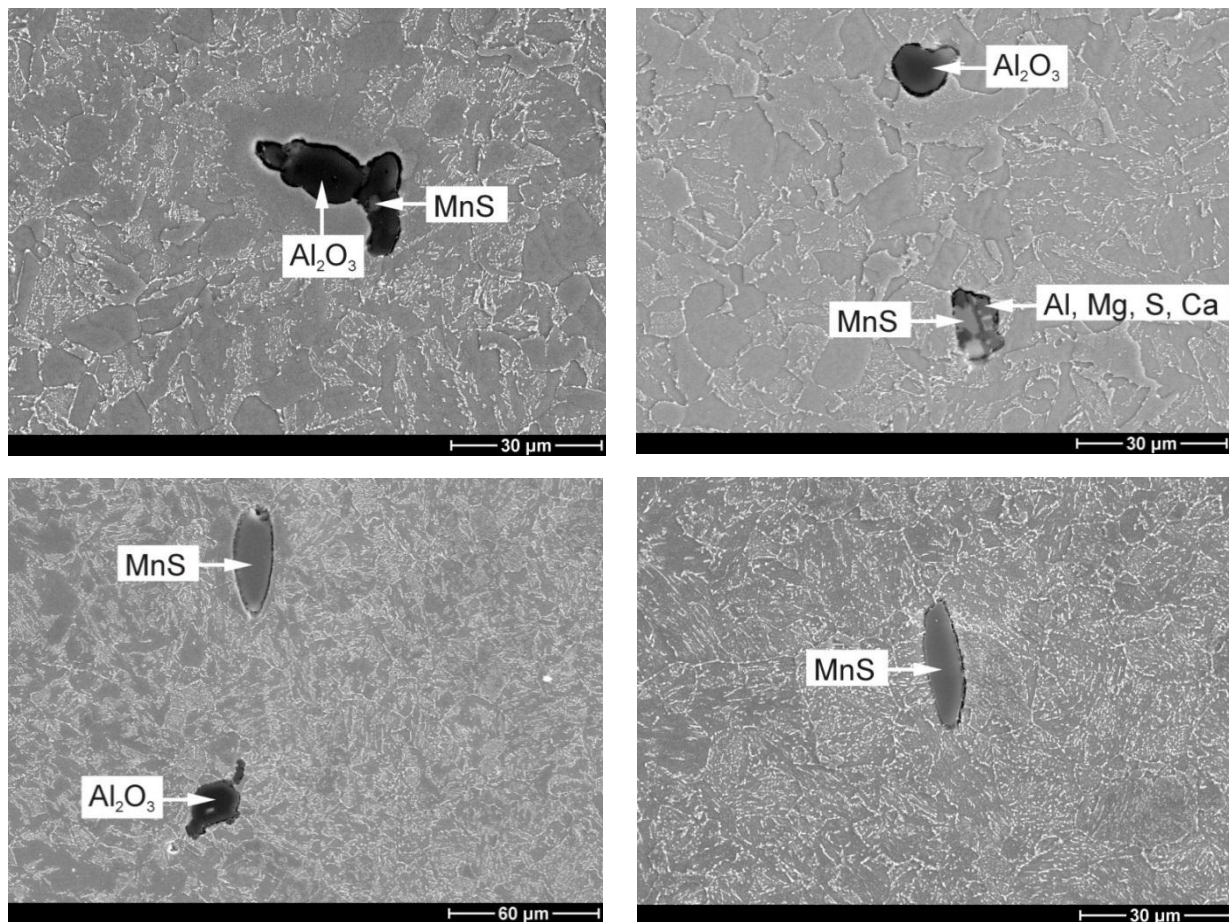


Abbildung 63: Werkstoff 22NiMoCr3-7, Untersuchung der Einschlüsse im Grundwerkstoff, REM, BMWi-Forschungsvorhaben [Roos & Seebich, 2006]

Zunächst erfolgt eine Untersuchung der Bruchflächen von gekerbten Flachzugproben, welche in Aachen geprüft wurden, im Vergleich mit Proben der MPA Universität Stuttgart [Roos & Seebich, 2006].

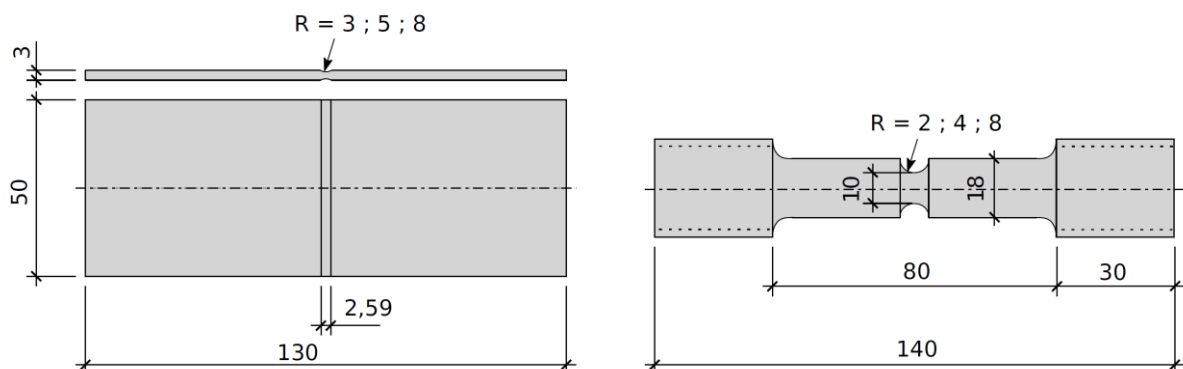
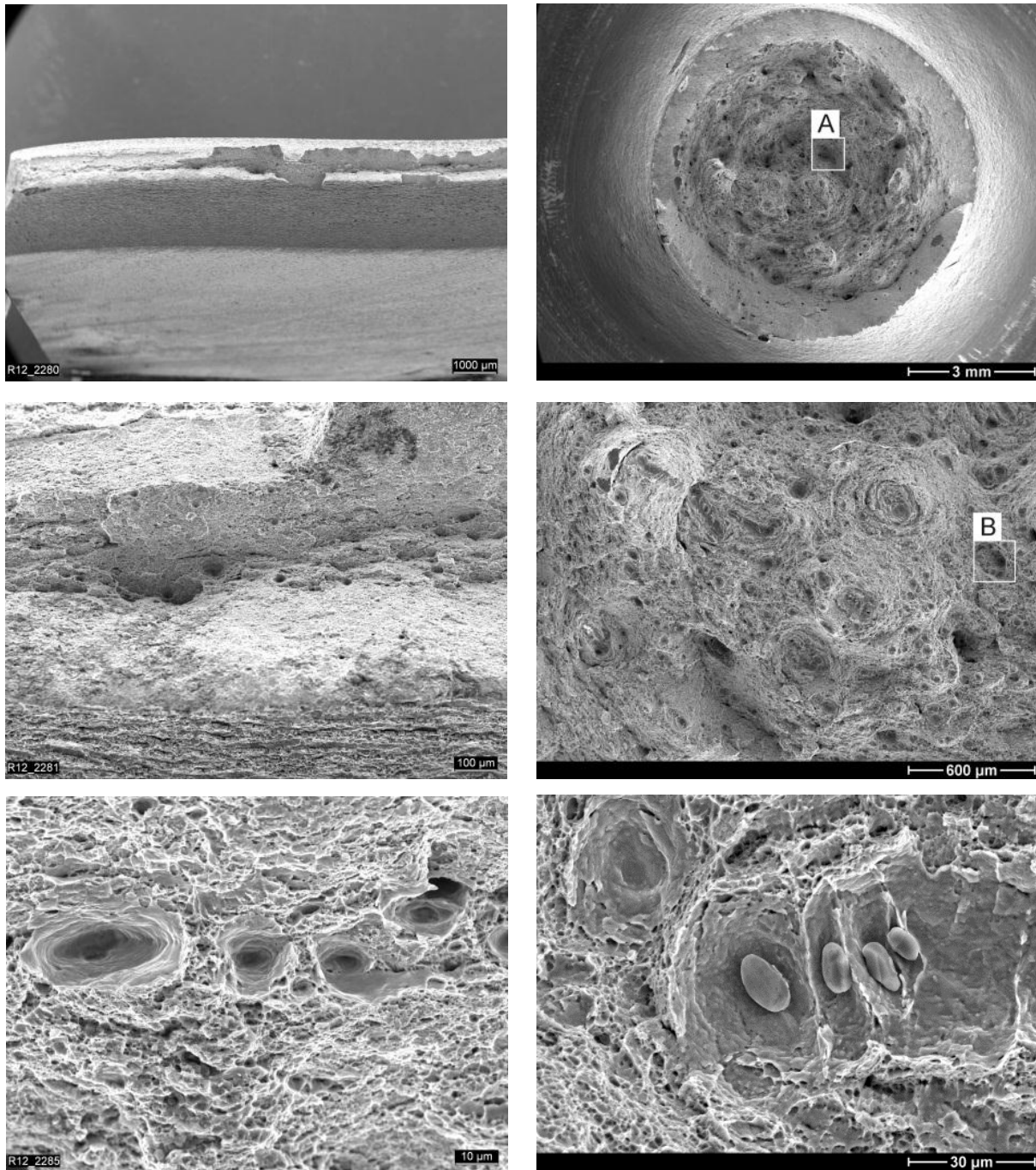


Abbildung 64: Geometrie der Proben: (a) gekerbte Flachzugprobe und (b) Rundzugprobe

Die gekerbten Flachzugproben wurden im Rahmen von Teil A in Aachen gefertigt und geprüft. Die fraktographischen Untersuchungen erfolgen an der MPA Universität Stuttgart. Die Geometrie der Proben zeigt Abbildung 64 (a).



(a)

(b)

Abbildung 65: Bruchflächen: (a) gekerbte Flachzugprobe und (b) Rundzugprobe [Roos & Seebich, 2006, p. 218], REM

Abbildung 65 zeigt den Vergleich der Bruchflächen für eine gekerbte Flachzugprobe und eine Rundzugprobe bei unterschiedlichen Vergrößerungen. Die Bruchflächen beider Proben haben die gleiche duktile Oberfläche mit der typischen Wabenstruktur eines duktilen Bruchs. Das Grundsätzliche Bruchverhalten ist demnach identisch.

8.3 Fraktographische Untersuchungen an Rundzugproben

Im Rahmen der fraktographischen Untersuchungen von unterschiedlich stark belasteten Rundzugproben sollen nun die Messergebnisse der Gleichstrompotentialmethode, Abbildung 62, näher untersucht werden. Die Geometrie der Proben zeigt Abbildung 66. Der Kerbradius beträgt 1,5 mm.

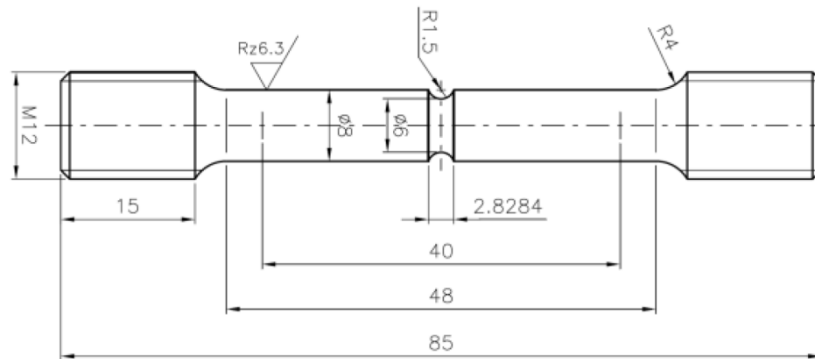


Abbildung 66: Geometrie der Rundzugproben B 22 und B 23 [Münstermann & Kucharczyc, 2013]

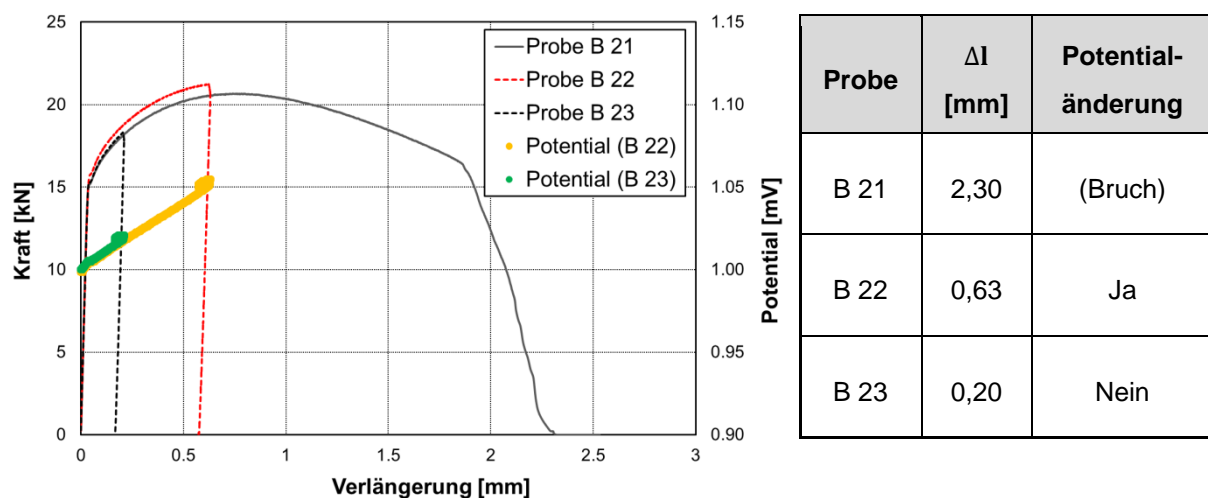


Abbildung 67: Kraft-Verlängerungsverlauf sowie gemessene Potentialänderungen mit Hilfe der Gleichstrompotentialmethode für die Proben B 21, B 22 und B 23

Die Proben wurden unterschiedlich stark belastet und dann ausgebaut. Probe B 21 wurde bis zum Bruch geprüft. Probe B 22 wurde bei einer Verlängerung Δl von 0,63 mm ausgebaut. Bei dieser Probe konnte mit der Gleichstrompotentialmethode eine Potentialänderung gemessen werden. Probe B 21 hingegen wurde nur bis zu einer Verlängerung Δl von 0,20 mm belastet und anschließend ausgebaut. Hierbei wurde keine Potentialänderung gemessen. Eine Übersicht über die Messdaten und die Proben zeigt Abbildung 67. Darin ist auch das Kraft-Verlängerungsverhalten der Proben aufgetragen. Die drei Proben zeigen grundsätzlich das gleiche Verformungsverhalten und können daher als vergleichbar angesehen werden.

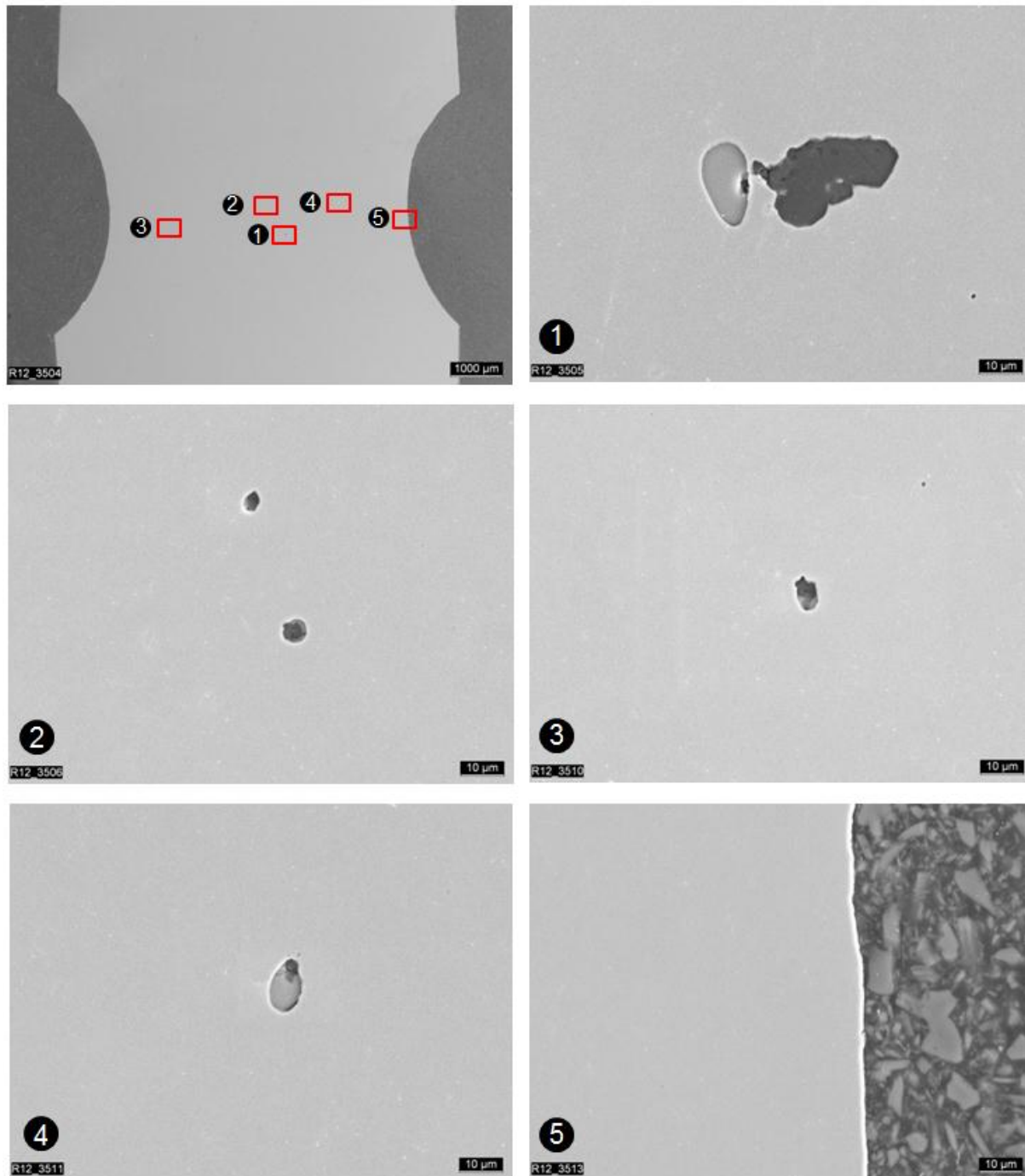


Abbildung 68: Werkstoff 22NiMoCr3-7, Untersuchung der Probe B 23, REM

Für die Untersuchungen wird ein metallographischer Schliff in der Mittelebene der Proben B 22 und B 23 hergestellt und unter dem REM untersucht. Das Augenmerk wird hierbei auf die Verbindung zwischen den Einschlüssen und der Matrix des Umgebungsmaterials gelegt. Abbildung 68 zeigt den Schliff im Korbereich der Probe B 23 und eine Auswahl von fünf Vergrößerungen. Diese sind charakteristisch für alle gefundenen Einschlüsse. Die Einschlüsse wurden meist als Mangansulfide oder Aluminiumoxide identifiziert. Die gefundenen Einschlüsse sitzen hierbei fest in der Matrix und zeigen keinerlei Ablösungen oder gar Hohlräume zwischen Einschluss und Umgebungsmaterial. Dies kann durch die Messung der Gleichstrompotentialmethode bestätigt werden. Diese zeigte keine Potentialänderung.

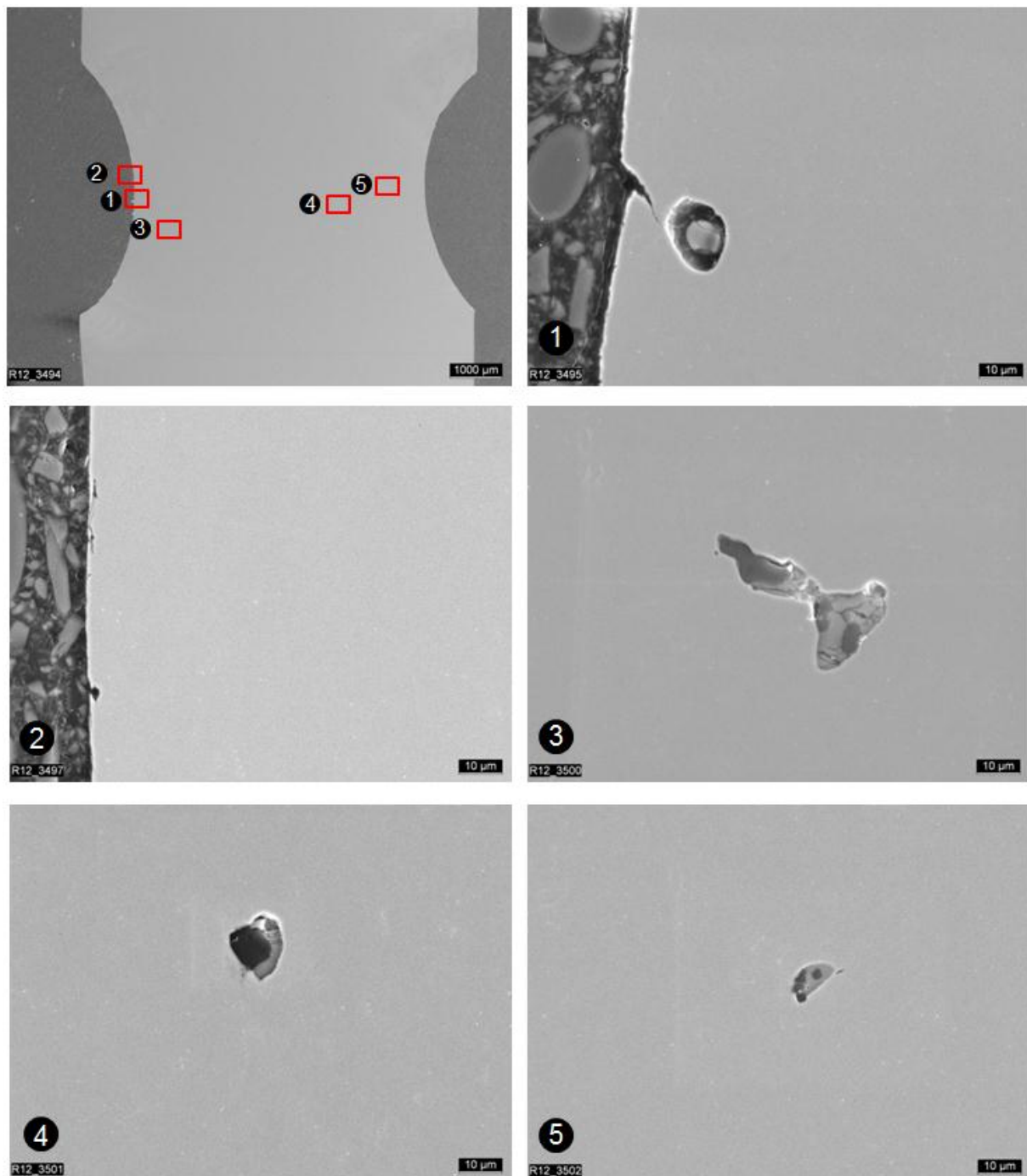


Abbildung 69: Werkstoff 22NiMoCr3-7, Untersuchung der Probe B 22, REM

Die Probe B 22 wies eine Potentialänderung auf. Die metallographischen Untersuchungen zeigen, wie bei der Probe B 23, dass die Einschlüsse fest gebunden in der Matrix sitzen.

Bei einigen wenigen sind im Gegensatz zur Probe B 23 jedoch leichte Ablösungen erkennbar. Bei einem Einschluss sind erste Anzeichen der Hohlraumbildung sichtbar, Abbildung 69 Ausschnitt 1. Da dieser Einschluss jedoch sehr nah am Rand der Probe liegt und sich ein minimaler Riss an der Oberfläche zeigt, könnte auch dieser Riss der Auslöser der Hohlraumbildung gewesen sein. Diese „raue“ Oberfläche zeigt sich auch an weiteren Bereichen der Probe, beispielhaft in Abbildung 69 Ausschnitt 2 dargestellt. Die Ausschnitte 3 bis 5 zeigen

die auffälligsten gefundenen Einschlüsse mit kleinen Ablösungen von der Matrix oder Partikelbrüchen.

Mit Hilfe der Schilfe kann natürlich nur eine Ebene im Kerbquerschnitt untersucht werden. Über das Verhalten des Werkstoffs in anderen Schnittebenen der Probe kann keine Aussagen gemacht werden. Es lässt sich jedoch mutmaßen, dass das Verhalten zwischen Einschlüsse und Matrix das gleiche ist, wie in der untersuchten Schilfeebene.

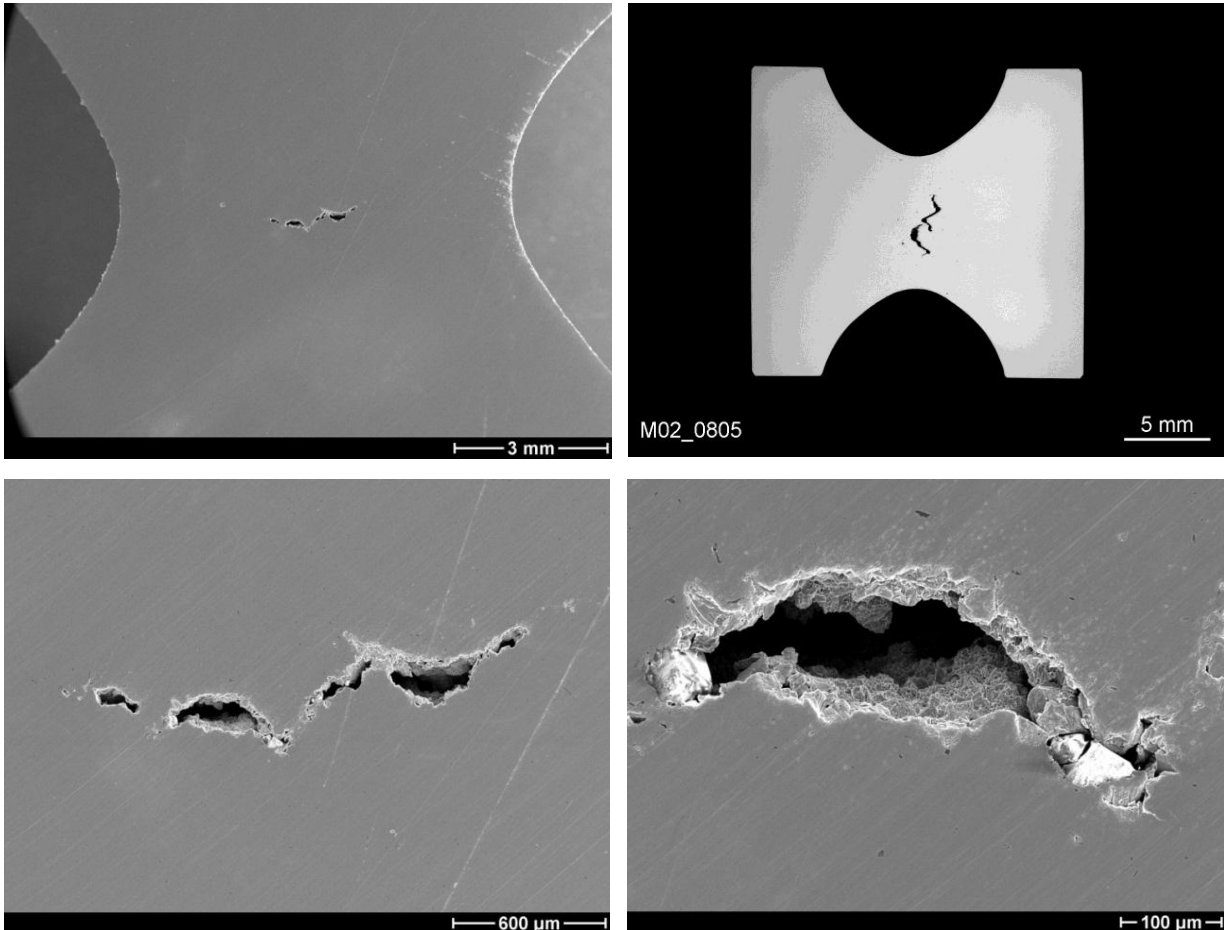


Abbildung 70: Werkstoff 22NiMoCr3-7, Innenanriss einer gekerbten Rundzugprobe ($r = 4 \text{ mm}$, 20 °C), REM, Unterschiedliche Vergrößerungen, BMW-Forschungsvorhaben 1504 240 [Roos & Seebich, 2006, p. 218]

Der größte Unterschied zwischen den Proben B 22 und B 23 sind einige wenige gefundene Partikelablösungen, Partikelbrüche und ein Oberflächenanriss. Die gemessene Potentialänderung resultiert demnach aus diesen Ereignissen. Diese Ablösungen dürfen jedoch nicht mit der Hohlrumbildung und Koaleszenz bei Auftreten eines Risses verwechselt werden. Zum Zeitpunkt der Potentialänderung befinden sich die Proben demnach vor der Rissbildung. Die Kurve der RWTH Aachen aus Abbildung 62 wird folglich als Schädigungsinitiierungskurve bezeichnet. Diese gibt den Zeitpunkt erster kleiner Ablösungen der Einschlüsse von der Matrix wider, jedoch nicht den Zeitpunkt der Rissinitiierung.

Zum Vergleich zeigt Abbildung 70 einen Innenanriss einer Rundzugprobe aus dem BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 [Roos & Seebich, 2006]. Die Ablösungen aus Abbildung 69 sind weit von einer solchen Hohlraumbildung und Koaleszenz entfernt und dürfen nicht mit dieser sogenannten Rissinitiierung verwechselt werden.

9 Veröffentlichungen innerhalb des Forschungsvorhabens

Im Zuge des Forschungsvorhabens wurden folgende Veröffentlichungen publiziert:

1. Seidenfuß, M., S. Gehrlicher, E. Roos: Numerische Simulation des Werkstoffverhaltens im Übergangsbereich der Bruchzähigkeit, 36. MPA-Seminar, Stuttgart, 2011
2. Gehrlicher, S., E. Roos, M. Seidenfuß: Simulation des Werkstoffverhaltens im Übergangsbereich der Bruchzähigkeit mit einem gekoppelten Schädigungsmodell, DVM-Arbeitskreis Bruchvorgänge - Bruchmechanische Werkstoff- und Bauteilbewertung: Beanspruchungsanalyse, Prüfmethode und Anwendungen, Darmstadt, 2012

10 Voraussetzungen zur Durchführung dieses Vorhabens

Die Materialprüfungsanstalt Universität Stuttgart (MPA) verfügt über langjährige Erfahrung auf dem Gebiet der Schädigungsmechanik. Hierbei wurden besonders gute Erfahrungen mit dem Rousselier Modell gemacht [Seidenfuß, 1992] [Roos & Seebich, 2006] [Seebich, 2007] [Büttner, 2011].

Die Berechnungen in diesem Vorhaben erfolgten mit dem FE-Programm ANSYS. Die Implementierung des nichtlokalen Rousselier Modells in ANSYS erfolgt über einen benutzer-spezifischen Elementtyp mit der Bezeichnung UserElem. Dieser Elementtyp wird der Standard ANSYS-Bibliothek in Form eines FORTRAN Programms hinzugefügt.

Aus verschiedenen abgeschlossenen Forschungsvorhaben liegt der MPA Universität Stuttgart eine große Datenbasis aus Bruchmechanik und Bauteilversuchen vor. In einem gemeinsamen Forschungsvorhaben der MPA Universität Stuttgart und dem Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik (IWM) Freiburg wurden eine Vielzahl an Bruchmechanikversuchen an C(T)- und SE(B)-Proben für den Temperaturbereich von 20 °C bis -150 °C durchgeführt [Roos & Seebich, 2006]. Diese Ergebnisse konnten für die Validierung der Berechnungsergebnisse des nichtlokalen Rousselier Modells herangezogen werden.

11 Zusammenfassung

Im Rahmen des BMWi-Verbundvorhabens der RWTH Aachen, des IWM Freiburg und der MPA Universität Stuttgart erfolgte die Weiterentwicklung von Bewertungskonzepten zur Sicherheitsanalyse für mechanisch beanspruchte Bauteile. Hierbei wurden schädigungsmechanische Ansätze zur Beschreibung des Wabenbruchs und local-approach-Konzepten für den Spaltbruch eingesetzt um sowohl die Hochlage als auch das Übergangsgebiet der Zähigkeit zu beschreiben. Mikromechanisch basierte Modelle zur Beschreibung der duktilen Rissinitiierung und des daran anschließenden duktilen Risswachstums bis hin zur Spaltbruchinstabilität wurden weiter entwickelt und verifiziert.

Im BMWi-Teilvorhaben 1501 390B der MPA Universität Stuttgart wurde die zähe Rissinitiierung und das sich daran anschließende stabile Risswachstum im oberen Übergangsgebiet mit einem gekoppelten nichtlokalen Modell berechnet. Die erzielten Ergebnisse können wie folgt zusammengefasst werden:

- Ein vorliegendes benutzerdefiniertes Element für das nichtlokale Rousselier Modell wurde erfolgreich in das kommerzielle Finite Elemente Programm ANSYS implementiert. Die Netzunabhängigkeit konnte anhand einfacher zweidimensionaler und dreidimensionaler Vergleichsrechnungen verifiziert werden.
- Nichtlokale schädigungsmechanische Berechnungen erhöhen im Vergleich mit lokalen Modellen die Rechenzeiten um ein Vielfaches. Um diese Rechenzeiten zu reduzieren wurden für dreidimensionale Problemstellungen unterschiedliche Ansätze für die Berechnung des Tangentenmoduls untersucht. Die Rechenzeit konnte dadurch um 5 % verkürzt werden.
- Zur Vorhersage der Bruchzähigkeit von der Hochlage bis zur Tieflage wurde das nichtlokale Rousselier Modell mit dem Beremin Modell gekoppelt. Dadurch kann sowohl duktilen Risswachstum als auch Versagen durch Spaltbruch parallel beschrieben werden. Alle numerischen Untersuchungen sowie Parameteranpassungen für das gekoppelte nichtlokale Modell wurden für den Werkstoff 22NiMoCr3-7 durchgeführt und mit experimentellen Ergebnissen aus einem vorliegenden BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240 der MPA Universität Stuttgart verglichen.
- Untersucht wurden Bruchmechanikproben (C(T)-Proben und SE(B)-Proben mit und ohne Seitenkerben). Das von der Hochlage bis zur Tieflage berechnete Last-Verformungsverhalten sowie die sich einstellenden Rissfronten stimmten sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen überein. Der Einfluss der Seitenkerben auf die Rissfront konnte erfolgreich gezeigt werden.
- Die Spaltbruchinstabilität in Abhängigkeit der Temperatur für die berechneten Bruchmechanikproben wurde mit Hilfe der Kennwerte K_{Jc} mit dem Masterkurve-Konzept (nach ASTM E 1921) beschrieben. Hierbei konnten als experimentelle Vergleichswerte die umfangreichen Untersuchungen des BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240

herangezogen werden. Die schädigungsmechanischen Berechnungen der C(T)25-Proben konnten die Streuung der experimentellen Ergebnisse gut abbilden. Die ermittelten Parameter konnten ebenso auf die SE(B)25x50-Probe übertragen werden.

- In Zusammenarbeit mit den Projektpartnern der RWTH Aachen (BMW-Vorhaben 1501 390A) wurde der Vorgang der Rissentstehung näher untersucht. Zum einen wurden sogenannte Rissinitiierungskurven mit dem Rousselier Modell für verschiedene Temperaturen erstellt. Die mit dem Rousselier Modell bestimmten Initiierungswerte stimmen mit experimentellen Daten aus [Schlüter, 1997] gut überein und bezeichnen die Initiierung eines makroskopischen Anrisses.
- In einem weiteren Schritt folgten Untersuchungen der Bruchflächen von gekerbten Flachzugproben und metallographischen Schliffen an Rundzugproben mit unterschiedlichem plastischem Deformationsgrad. Diese Proben wurden im Rahmen des BMW-Vorhabens 1501 390A an der RWTH Aachen geprüft und an der MPA Universität Stuttgart metallographisch untersucht um den mikromechanischen Schädigungsablauf zu ermitteln. Der Beginn der Schädigung (Hohlrauminitiierung) kann sehr gut mit der Gleichstrompotentialmethode an der RWTH Aachen bestimmt werden. Die gemessenen Initiierungswerte entsprechen nach den Untersuchungen der MPA Universität Stuttgart dem Zeitpunkt erster Ablösungen der Einschlüsse von der Matrix und liegen weit unter dem Zeitpunkt der makroskopischen Rissinitiierung. Die von der RWTH Aachen erstellte Kurve kann folglich als Schädigungsinitiierungskurve bezeichnet werden.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass mit dem gekoppelten nichtlokalen Schädigungsmodell die Hochlage und das Übergangsgebiet der Bruchzähigkeit bestimmt werden kann. Sowohl die Rissinitiierung, das stabile Risswachstum und der sich daran anschließende Spaltbruch konnte temperaturabhängig mit ausreichender Genauigkeit vorhergesagt werden. Das Vorhabensziel wurde erreicht.

12 Literaturverzeichnis

Andersen, T., 2005. *Fracture mechanics-fundamentals and Application*, Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 3rd Edition.

Aravas, N., 1987. On the numerical integration of a class of pressure-dependent plasticity models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Volume 24, pp. 1395-1416.

Argon, A. S., Im, J. & Safoglu, R., 1975. Cavity Formation from Inclusions in Ductile Fracture. *Metallurgical Transactions*, Volume 6A, pp. 825-837.

ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sec. III, 1995. *Article NB 2300*, New York: American Society of Mechanical Engineers.

ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sec. XI, 1995. *Article A 4000, Material properties*, New York: American Society of Mechanical Engineers.

ASTM E1820-08, 2008. *Standard Test Method for Measurement of Fracture Toughness*, Philadelphia, PA: Annual Book of ASTM Standards, ASTM.

ASTM E1921-02, 2002. *Standard test method for determination of reference temperature T_0 for ferritic steels in the transition range*, Philadelphia, PA: Annual Book of ASTM Standards, ASTM.

Bazant, Z. & Pijaudier-Cabot, B., 1989. Measurement of characteristic length of nonlocal continuum. *Journal of Engineering Mechanics*, Volume 115, pp. 755-767.

Becker, R., Needleman, A., Richmond, O. & Tvergaard, V., 1988. Void Growth and Failure in Notched Bars. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Volume 3, pp. 317-351.

Benallal, A., Billardon, R. & Doghri, I., 1988. An integration algorithm and the corresponding consistent tangent operator for fully coupled elastoplastic and damage equations. *Communications in Applied Numerical Methods*, Volume 4, pp. 731-740.

Benzerga, A. A., Bensson, J. & Pineau, A., 2004. Anisotropic ductile fracture Part I: experiments. *Acta Materialia*, Volume 52, pp. 4623-4638.

Beremin, F., 1983. A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. *Metallurgical Transactions*, Volume 14A, pp. 2277-2287.

Beremin, F. M., 1981. Cavity Formation from Inclusions in Ductile Fracture of A508 Steel. *Metallurgical Transactions*, Volume 12A, pp. 723-731.

- Blumenauer, H. & Pusch, G., 1993. *Technische Bruchmechanik*. 3 Hrsg. Leipzig-Stuttgart: Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie.
- Böhm, J., 1980. *Zur Vorhersage von Dauerschwingfestigkeiten ungekerbter und gekerbter Bauteile unter Berücksichtigung des statistischen Größeneinflusses*. Universität München: Dissertation.
- Böhm, J. & Heckel, K., 1982. Die Vorhersage der Dauerschwingfestigkeit unter Berücksichtigung des statistischen Größeneinflusses. In: *Z. Werkstofftechnik* 13. Weinheim: Verlag Chemie GmbH, pp. 120-128.
- Brüggemann, C., 2011. *Simulation des Versagensverhaltens in der Zähigkeitstieflage unter Verwendung gekoppelter Schädigungsmodelle*. IMWF Universität Stuttgart: Bachelorarbeit.
- Büttner, M., 2011. *Versagensverhalten rissbehafteter Mischschweißnähte – theoretische und experimentelle Untersuchungen*. IMWF, Universität Stuttgart : Dissertation.
- Chakrabarti, A. K. & Spretnak, J. W., 1975. Instability of Plastic Flow in the Direction of Pure Shear: II. Experimental. *Metallurgical Transactions*, Volume 6A, pp. 737-747.
- Chu, C. & Needleman, A., 1980. Void Nucleation Effects in Biaxial Stretched Sheets. *Journal of Engineering Materials and Technology*, Volume 102, pp. 249-256.
- Cottrell, A. H., 1958. Theory of Fracture in Steel and Similar Metals. *Transaction of the Metallurgical Society of AIME*, pp. 192-203.
- DAST-Richtlinie 009, 2005. *Stahlsortenauswahl für geschweißte Stahlbauten*, Berlin: Deutscher Ausschuss für Stahlbau.
- DIN 50125:2004-01, 2009. *Prüfung metallischer Werkstoffe – Zugproben*, Berlin: DIN Deutsches Institut für Normung e.V..
- DIN EN 1993-1-10:2005, 2010. *Eurocode 3: Bemessung und Konstruktion von Stahlbauten – Teil 1-10: Stahlsortenauswahl im Hinblick auf Bruchzähigkeit und Eigenschaften in Dickenrichtung*, Berlin: DIN Deutsches Institut für Normung e.V..
- DIN EN ISO 14556:2000-09, 2006. *Stahl – Kerbschlagbiegeversuch nach Charpy (V-Kerb) – Instrumentiertes Prüfverfahren*, Berlin: DIN Deutsches Institut für Normung e.V..
- Engel, L. & Klingele, H., 1974. *Rasterelektronenmikroskopische Untersuchungen von Metallschäden*. Köln: Gerling Institut für Schadensforschung und Schadensverhütung.
- Erben, W., 1994. *Lebensdauervorhersage gekerbter Bauteile auf der Basis des statistischen Größeneinflusses*, Universität der Bundeswehr München: Dissertation.

Eringen, A. C., 1966. A unified theory of thermomechanical materials. *International Journal of Engineering Science*, Volume 4, p. 179–202.

ESIS P6-98, 1998. *Procedure to measure and calculate material parameters for the local approach to fracture using notched tensile specimens*. ESIS: European Structural Integrity Society.

Fellin, W. & Ostermann, A., 2002. Consistent tangent operators for constitutive rate equations. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Volume 26, pp. 1213-1233.

Feucht, M., 1998. *Ein gradientenabhängiges Gursonmodell zur Beschreibung duktiler Schädigung mit Entfestigung*. Institut für Mechanik, Technische Universität Darmstadt: Dissertation.

Flatten, A., 2008. *Lokale und nicht-lokale Modellierung und Simulation thermomechanischer Lokalisierung mit Schädigung für metallische Werkstoffe unter Hochgeschwindigkeitsbeanspruchungen*, Berlin: BAM-Dissertationsreihe, BAM Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung.

Franklin, A. G., 1969. Comparison between a Quantitative Microscope and Chemical Methods for Assessment of Non-Metallic Inclusions. *Journal of the Iron and Steel Institute*.

Gao, X., Rugieri, C. & Dodds, J. R. H., 1998. Calibration of Weibull stress parameters using fracture data. *International Journal of Fracture*, Volume 92.

Goods, S. H. & Brown, L. M., 1979. The Nucleation of Cavities by plastic Deformation. *Acta Metallurgica*, Volume 27, pp. 1-15.

Grachyova, M. & Müller, A., 2003. *Maximum-Likelihood Schätzung*. Universität Augsburg : Vorlesungsmanuskript.

Gurson, A., 1972. Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth: Part I - Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media. *Journal of Engineering and Material Technology*, Volume 99, pp. 2-15.

Gurson, A., 1975. *Plastic Flow and Fracture Behavior of Ductile Materials Incorporating Void Nucleation, Growth and Interaction*. Providence: Ph.D. Thesis, Brown University.

Hancock, J. W. & Mackenzie, A. C., 1976. On the Mechanism of Ductile Failure in High-Strength Steel Subjected to Multi-Axial Stress-States. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Volume 24, pp. 147-169.

- Hofer, G., Hung, C. C. & Günes, U., 1977. Eine mathematische Funktion für die Beschreibung der Ergebnisse aus Kerbschlagbiegeversuchen. *Zeitschrift Werkstofftechnik*, Band 8.
- Hohe, J., Stöckl, H., Siegele, D. & Tanguy, B., 2003. *Anwendung des Mastercurve-Konzeptes für Sicherheitsbewertungen von Kraftwerkskomponenten – theoretische und numerische Untersuchungen*. MPA-Seminar, Stuttgart, MPA Universität Stuttgart.
- Hohe, J. & Tanguy, B., 2005. *Kritische Überprüfung des Mastercurve-Ansatzes im Hinblick auf die Anwendung bei deutschen Kernkraftwerken*, IWM Freiburg: BMWi-Forschungsvorhaben 1501 239, Abschlussbericht.
- Holland, D., 1992. *Einfluss des Spannungszustandes auf die Vorgänge beim Gleitbruch von Baustählen*. RWTH Aachen: Dissertation.
- Keller, M., 2011. *Programmierung einer konsistenten Steifigkeitsmatrix für ein nichtlokales Schädigungsmodell*. IMWF Universität Stuttgart: Studienarbeit.
- Koplik, J. & Needleman, A., 1988. Void Growth and Coalescence in Porous Plastic Solids. *International Journal of Solid Structures*, Volume 24, pp. 835-853.
- Kreyszig, E., 1979. *Statistische Methoden und ihre Anwendungen*. 7. Hrsg. Göttingen: Vandenhoeck & Ruprecht.
- Krieg, R. & Seidenfuß, M., 2003. *Limit Strains for Severe Accident Conditions*, Forschungszentrum Karlsruhe: Final Report of the EU-project LISSAC, Contact No. FIKS-CT 19999-00012,.
- KTA 3201.1, 1998. *Komponenten des Primärkreises von Leichtwasserreaktoren Teil 1: Werkstoffe und Erzeugnisformen*, Salzgitter: Sicherheitstechnische Regeln des KTA.
- KTA 3201.2, 1997. *Komponenten des Primärkreises von Leichtwasserreaktoren Teil 2, Kerntechnischer Ausschuss*, Salzgitter: Sicherheitstechnische Regeln des KTA.
- Liessem, A., 1996. *Bruchmechanische Sicherheitsanalyse von Stahlbauten aus hochfesten, niedriglegierten Stählen*. RWTH Aachen: Dissertation.
- McClintock, F. A., 1968. A Criterion for ductile Fracture by the Growth of Holes. *Journal of Applied Mechanics*, pp. 363-371.
- Merkert, G., 2002. *Anwendung und Weiterentwicklung von schädigungsmechanischen Ansätzen zur Simulation des Versagensverhaltens von Thermoschockproben*. MPA Universität Stuttgart: Dissertation.

Mudry, F., 1987. A local approach to cleavage fracture. *Nuclear Engineering and Design*, Volume 105, pp. 65-76.

Mühlich, U., Steglich, D. & al., e., 2001. *A User-Material Subroutine of the Rousselier-Model of Porous Metal Plasticity*, Geesthacht, FRG: GKSS Research Centre,.

Müller, W. H., 2001. *Bruchmechanik I*. Technische Universität Berlin, Institut für Mechanik: Vorlesungsmanuskript.

Münstermann, S. & Kucharczyc, P., 2013. *Weiterentwicklung von Bewertungskonzepten zum Versagensverhalten ferritischer Stähle im Übergangsbereich*, IEHK RWTH Aachen: BMWi-Forschungsvorhaben 1501 390A, Abschlussbericht.

Neidel, A., Engel, L. & Klingele, H., 2012. *Handbuch Metallschäden*. 2 Hrsg. München: Hanser Verlag.

NF A 36-010, 1980. *Choix des qualités d'acier pour construction métallique ou chaudronnée vis-à-vis du risque de rupture fragile*, La Plaine Saint-Denis Cedex: AFNOR.

Pardeon, T. & Hutchison, J. W., 2000. An extended model for void growth and coalescence. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Volume 82, pp. 2467-2512.

Pavenkumar, T. et al., 2005. Transferability of fracture parameters from specimens to component level. *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 5, Band 82, pp. 386-399.

Peerling, R. H. J., 1999. *Enhanced damage modeling for fracture and fatigue*. Technische Universität Eindhoven: Dissertation.

Rettenmeier, P., 2010. *Implementierung eines nichtlokalen Schädigungsmodells in das Finite Elemente Programm ANSYS*,. IMWF Universität Stuttgart: Studienarbeit.

Reusch, F., 2003. *Entwicklung und Anwendung eines nicht-lokalen Materialmodells zur Simulation duktiler Schädigung in metallischen Werkstoffen*. Universität Dortmund: Dissertation.

Rice, J. R. & Tracey, D. M., 1969. On the ductile Enlargement of Voids in Triaxial Stress Fields. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Volume 17, pp. 201-217.

Rogula, D., 1965. Influence of spatial acoustic dispersion on dynamical properties of dislocations. *I. Bulletin de l'Académie Polonaise des Sciences - Série des Sciences Technique*, Volume 13, p. 337-343.

Roos, E., 2010. *Festigkeitslehre II*. IMWF Universität Stuttgart: Vorlesungsmanuskript.

- Roos, E., 2011. *Werkstoffkunde für Ingenieure*. Stuttgart: Springer Verlag, 4. Auflage.
- Roos, E. & Seebich, H.-P., 2006. *Kritische Überprüfung des Masterkurve-Ansatzes im Hinblick auf die Anwendung bei deutschen Kernkraftwerken*. BMWi-Forschungsvorhaben 1501 240, Abschlussbericht : MPA Universität Stuttgart.
- Roos, E. & Seidenfuß, M., 2010. *Schadenskunde, Manuskript zur Vorlesung*, Stuttgart: MPA Universität Stuttgart.
- Rousselier, G., 1987. Ductile Fracture Models and their Potential in Local Approach of Fracture. *Nuclear Engineering and Design*, Volume 105, pp. 97-111.
- Rousselier, G., 2001. Dissipation in porous metal plasticity and ductile fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Volume 49, pp. 1727-1746.
- Rugieri, C., Gao, X. & Dodds, J. R. H., 2000. Transferability of elastic-plastic fracture toughness using the Weibull stress approach: significance of parameter calibration. *Engineering Fracture Mechanics*, Volume 67.
- Samal, M. K., 2007. *Nonlocal damage models for structural integrity analysis*. MPA Universität Stuttgart: Dissertation.
- Schlüter, N., 1997. *Einfluss der Beanspruchung und des Gefüges auf die locale Schädigung beim Gleitbruch von Baustählen*. IEHK RWTH Aachen: Dissertation.
- Seebich, H.-P., 2007. *Mikromechanisch basierte Schädigungsmodelle zur Beschreibung des Versagensablaufs ferritischer Stähle*. Universität Stuttgart,: Dissertation.
- Seidenfuß, M., 1992. *Untersuchungen zur Beschreibung des Versagensverhaltens mit Hilfe von Schädigungsmodellen am Beispiel des Werkstoffes 20 MnMoNi 5 5*. Staatliche Materialprüfungsanstalt (MPA) Universität Stuttgart: Dissertation.
- Seidenfuß, M., 2004. *Das Rousselier Modell: Verknüpfung zwischen Mikrostruktur und kontinuumsmechanischer Anwendung*. Köln, DVM-Arbeitskreis Bruchvorgänge, Weiterbildungsseminar.
- Seidenfuß, M., 2013 (in press). *Schädigungsmechanische Modelle zur Beschreibung des Versagensablaufs in metallischen Bauteilen*. Universität Stuttgart, Fakultät für Energie-, Verfahrens- und Biotechnik: Habilitationsschrift.
- Spreng, F., 2010. *Vorhersage des temperaturabhängigen Versagensverhaltens eines ferritischen Stahls mit einem nichtlokalen Schädigungsmodell*. IMWF Universität Stuttgart: Studienarbeit.

- Tanaka, K., Mori, T. & Nakamura, T., 1970. Cavity Formation an the Interface of a Spherical Inclusion in a Plastically Deformed Matrix. *Philosophical Magazine*, Volume 21, pp. 267-279.
- Tanguy, B., 2001. *Modélisation de l'essai charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MnD5 dans le domaine transition*. Paris: Centre des Matériaux P. M. Fourt l'Ecole des Mines de Paris.
- Tanguy, B., Besson, J., Piques, R. & Pineau, A., 2005. Ductile to brittle transition of a A508 steel characterized by Charpy impact test. Part II: modeling of the Charpy transition curve. *Engineering Fracture Mechanics*, Volume 3, pp. 413-434.
- Tanguy, B., Besson, J., Piques, R. & Pineau, A., 2005. Ductile-brittle transition of a A508 steel characterized by the Charpy impact test. Part I: experimental results. *Engineering Fracture Mechanics*, Volume 1, pp. 49-72.
- Thomason, P. F., 1998. A view on ductile-fracture modelling. *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures*, Volume 21, pp. 1105-1122.
- TÜV Bayern, 1976. *Anlage 2 zum Abnahmeprüfzeugnis*. TÜV Bayern: Prüfungs-Nr. 1415113/7.
- Tvergaard, V., 1981. Influence of void shear bands instabilities under plane strain conditions. *International Journal of Fracture*, Volume 17, pp. 389-407.
- Tvergaard, V. & Needleman, A., 1984. Analysis of the Cup-Cone Fracture in a Round Tensile Bar. *Acta Metallurgica*, Volume 32, pp. 157-169.
- Wallin, K., 1998. *Master Curve Analysis of Ductile to Brittle Transition Region Fracture Toughness Round Robin Data*. Technical Research Centre of Finland, Espoo, Finland: VTT Publications 367.
- Wallin, K., London, 1991. Statistical modelling of fracture in the ductile-to-brittle transition range, defect Assessment in Components, Fundamentals and Applications. *Mechanical Engineering Publications*, pp. 415-445.
- Weibull, W., 1939. *A statistical theory of the strength of materials*, Stockholm: Royal Swedish Institute for Engineering Research, Part I and II,.
- Zerbst, U., Wiessner, C., Kocak, M. & Hodulak, L., 1999. *SINTAP: Entwurf einer vereinheitlichten europäischen Fehlerbewertungsprozedur – eine Einführung*. Geesthacht, FRG: GKSS Research Centre.

Zhang, Z. & Niemi, . E., 1995. class of generalized mid-point algorithms for the Gurson-Tveergard material model. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Volume 38, pp. 2033-2053.

13 Anhang

13.1 Anhang zu Kapitel 7

$$A_{11} = \frac{\partial \Phi}{\partial q} = \frac{1}{1-d}$$

$$A_{12} = \frac{\partial \Phi}{\partial p} = -\frac{d}{(1-d)} \cdot D \cdot \exp\left\{\frac{-p}{(1-d)\sigma_k}\right\}$$

$$A_{21} = 0$$

$$A_{22} = \frac{\Delta \sigma_y}{\Delta \varepsilon^{-pl}}$$

$$B_{11} = \frac{1}{3} \Delta \varepsilon_q \frac{\partial^2 \Phi}{\partial p^2} = \frac{1}{3} \Delta \varepsilon_q \cdot \frac{d}{\sigma_k (1-d)^2} \cdot D \cdot \exp\left\{\frac{-p}{(1-d)\sigma_k}\right\}$$

$$B_{12} = 0$$

$$B_{21} = \frac{1}{3} \frac{\partial \Phi}{\partial p} = -\frac{1}{3} \frac{d}{(1-d)} \cdot D \cdot \exp\left\{\frac{-p}{(1-d)\sigma_k}\right\}$$

$$B_{22} = -\frac{\partial \Phi}{\partial q} = -\frac{1}{(1-d)}$$

$$C_1 = -\Delta \varepsilon_q \frac{\partial^2 \Phi}{\partial p \partial d} - \Delta \varepsilon_p \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q \partial d} =$$
$$-\Delta \varepsilon_q \cdot D \cdot \frac{1}{(1-d)^2} \cdot \left[\frac{p \cdot d}{(1-d)\sigma_k} - 1 \right] \cdot \exp\left\{\frac{-p}{(1-d)\sigma_k}\right\} - \Delta \varepsilon_p \frac{1}{(1-d)^2}$$

$$C_2 = -\frac{\partial \Phi}{\partial d} = -\frac{q}{(1-d)^2} + \left[1 - \frac{p}{\sigma_k} \cdot \frac{d}{(1-d)^2} \right] \cdot D \cdot \exp\left\{\frac{-p}{(1-d)\sigma_k}\right\}$$

$$m_{pl} = \frac{B_{11}A_{22} - B_{21}A_{12}}{A_{11}A_{22} - A_{21}A_{12}} \quad m_{pm} = \frac{B_{12}A_{22} - B_{22}A_{12}}{A_{11}A_{22} - A_{21}A_{12}} \quad m_{pd} = \frac{C_1A_{22} - C_2A_{12}}{A_{11}A_{22} - A_{21}A_{12}}$$

$$m_{ql} = \frac{B_{21}A_{11} - B_{11}A_{21}}{A_{11}A_{22} - A_{21}A_{12}} \quad m_{qm} = \frac{B_{22}A_{11} - B_{12}A_{21}}{A_{11}A_{22} - A_{21}A_{12}} \quad m_{qd} = \frac{C_2A_{11} - C_1A_{21}}{A_{11}A_{22} - A_{21}A_{12}}$$