

Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg Hamburg University of Applied Sciences

Masterarbeit

Mohamed Tlili

Charakterisierung des Einschnürverhaltens von Hohlzugproben anhand der Methode der Finite Elemente und kontinuummechanischer Schädigungsmodellen

Fakultät Technik und Informatik Department Maschinenbau und Produktion Faculty of Engineering and Computer Science Department of Mechanical Engineering and Production Management

Mohamed Tlili

Charakterisierung des Einschnürverhaltens von Hohlzugproben anhand der Methode der Finite Elemente und kontinuummechanischer Schädigungsmodellen

Masterarbeit eingereicht im Rahmen der Masterprüfung

im Studiengang Berechnung und Simulation am Department Maschinenbau und Produktion der Fakultät Technik und Informatik der Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg

in Zusammenarbeit mit: Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM Lebensdauerkonzepte für Wasserstoffanwendungen

Erstprüfer: Prof.Dr.-Ing Jens Telgkamp Zweitprüfer: Dipl. Math. Heiner Oesterlin

Abgabedatum:15.01.2024

Zusammenfassung

Mohamed Tlili

Thema der Masterthesis

Charakterisierung des Einschnürverhaltens von Hohlzugproben anhand der Methode der Finite Elemente und kontinuummechanischer Schädigungsmodellen

Stichworte

Zugversuch, Duktilität, Wasserstoffschädigung, Triaxialität, das GTN-Modell, FEM-Methode, quasistatische Berechnung, dynamisch explizite Berechnung

Kurzzusammenfassung

Die Verwendung von Hohlzugproben mit kontinuierlichen Wasserstoffexposition während eines Zugversuchs bietet sich als eine attraktive Alternative, um den Einfluss der Wasserstoffversprödung zu erforschen. Diese Methode ist zeit- und kostensparend, zudem verlangt sie keine anspruchsvollen Explosionsschutzmaßnahmen im Gegensatz zu klassischen zylindrischen Vollproben, die einen Autoklaven benötigen. Allgemein hängt das mechanische Verhalten der Zugprobe von Geometrie, Belastung und Material ab. Durch die Erzeugung einer zylindrischen Bohrung in die Probe wird die Geometrie geändert. Durch die Belastung der Probe mit Außen- bzw. Innendruck wird eine Änderung in der Lastverteilung hervorgerufen und schließlich durch die Eindringung des Wasserstoffs in die Metallgitter, findet eine Degradation der Werkstoffkennwerte statt. Um den Effekt der drei Faktoren auf das mechanische Verhalten der Probe zu verstehen, werden sie mittels des Abaqus CAE im Zugversuch modelliert. Die gewonnenen Ergebnisse zeigten, dass die Duktilität der Probe von der Variation des Außen-, Innenradius sowie der Probenlänge abhängig ist. Der Druck hat Einfluss auf die Schädigungsentwicklung und je nach Konstellation wirkte er hemmend oder fördernd. In das Material diffundierter Wasserstoff beschleunigt die Entstehung der Schädigung und den Bruchmoment. Allerdings waren die verwendeten Berechnungsmethoden und die Laborergebnisse nicht ausreichend, um ein abschließendes Bild über die wirkenden Schädigungsmechanismen zu konstatieren, hier sind weitere Laboruntersuchungen notwendig.

Mohamed Tlili

Title of the paper

Characterization of the necking behavior of tubular tensile specimens using the Finite Element Method and continuum mechanical damage models

Keywords

Tensile test, Ductility, Hydrogen embrittlement, triaxiality, GTN-Model, FEM-method, quasistatic calculation, dynamically explicit calculation.

Abstract

The use of hollow tensile specimens with continuous hydrogen supply during a tensile test is an attractive alternative to investigate the influence of hydrogen embrittlement. This method is time and cost saving and does not require sophisticated explosion protection measures in contrast to classical cylindrical full specimens which require an autoclave to accomplish hydrogen diffusion. In general, the mechanical behavior of the tensile specimen depends on geometry, load and material. The creation of a cylindrical hole in the sample changes the geometry, the loading of the sample with external or internal pressure causes a change in the load and finally the penetration of the hydrogen into the metal lattice causes a degradation of the material properties. In order to understand the effect of the three factors on the mechanical behavior of the sample, they are modeled using the Abaqus CAE in the tensile test. The results obtained showed that the ductility of the sample depends on the variation of the outer and inner radius as well as the sample length. The pressure controlled the growth of the damage and depending on the constellation, had an inhibiting or promoting effect. Hydrogen diffusion also accelerated the development of the damage and the fracture moment. However, the calculation method used and the laboratory results were not sufficient to provide a picture of the damage mechanisms involved.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich meinen Dank all jenen aussprechen, die mich während der Anfertigung dieser Masterarbeit unterstützt und motiviert haben.

Ein besonderer Dank gebührt meinem Betreuer des Fraunhofer Instituts für Werkstoffmechanik IWM in Freiburg, Herrn Dipl. Math. Heiner Oesterlin, der die Aufgabe des Zweitprüfers angenommen hat. Ihre fachliche Expertise, gaben mir Inspiration für viele neue Denkanstöße und Ihre wertvollen Ratschläge waren von großem Wert für den Erfolg meiner Arbeit, sowie die äußerst angenehme Zusammenarbeit.

Ein herzliches Dankeschön gilt auch meinem Erstprüfer Prof. Dr. Ing. Jens Telgkamp von der HAW Hamburg, für die Zeit und der konstruktiven Kritik während des Mid-Term-Reviews, die mir viele Anregungen für die weitere Bearbeitung des Themas gab.

Außerdem möchte ich mich bei Herren Dr. Frank Schweitzer, Gruppenleiter Lebensdauerkonzepte für Wasserstoffanwendungen, bedanken. Sie haben großen Anteil an der Fertigstellung dieser Arbeit, indem Sie die technischen, als auch die bürokratischen Hindernisse aus dem Weggeräumt haben, sodass ich mich vollends auf die Aufgabenstellung konzentrieren konnte.

Ohne Herrn. Dr. Ing. Ken Wackermann wäre diese Masterarbeit gar nicht erst entstanden. Ich möchte mich ganz besonders bei Ihnen für meine Einstellung am Fraunhofer Institut und so für die Chance meine Kenntnisse unter Beweis zu stellen, bedanken.

Abschließend möchte ich meiner Familie meine gebührende Wertschätzung entgegenbringen. Auf ihre Unterstützung konnte ich mich während des gesamten Studiums verlassen und die mir stehts ein großes Maß an Geduld entgegengebracht hat, ohne die ich mich nicht ansonsten zu 100 % auf die vorliegende Arbeit hätte konzentrieren können. Insbesondere danke ich meine Frau für ihre Geduld beim Korrekturlesen dieser Arbeit.

Inhaltverzeichnis

Zus	samı	nenfa	assung	I	
Da	nksa	gung]	. III	
Inh	altve	erzeio	chnis	.IV	
Ab	bildı	ungsv	/erzeichnis	V	
Tab	belle	nverz	zeichnis	VII	
No	men	klatu	r\	VIII	
1	Ein	leitu	ng	1	
1	.1	Star	nd der Technik	1	
1	.2	Auft	bau der Arbeit	2	
2	The	eoret	ische Grundlagen	4	
2	.1	Der	Zugversuch	4	
2	2.2	Der	elastische Bereich	5	
2	2.3	Der	elasto-plastische Bereich	6	
2	2.4	Eins	schnürung und Kontinuumsschädigungsmodelle	10	
2	2.5	Das	GTN-Modell	15	
2	.6	Was	sserstoffversprödung	17	
3	Kal	ibrie	rung des GTN-Modells und FEM-Simulation	20	
3	5.1	Lite	raturreview zur Kalibrierung des GTN-Modells	20	
3	.2	Lite	raturreview zur Wasserstoffschädigung mittels FEM-Methode	23	
3	.3	Qua	sistatische und dynamische Berechnungsmethoden	25	
	3.3	.1	Das Newton-Raphson Verfahren	25	
	3.3	.2	Nicht lineare dynamische Zeitintegration	28	
3	5.4	Das	FEM-Modell	29	
4	Ein	fluss	der Bohrung und Parameter-Studie	41	
4	.1	Sim	ulation	41	
4	.2	Erge	ebnisse	42	
4	.3	Para	ameterstudie zur Variation der Geometrie	50	
5	Ein	fluss	des Drucks und der Wasserstoffversprödung	56	
5	5.1	Einf	luss des Drucks	56	
	5.1	.1	Simulation	56	
	5.1	.2	Ergebnisse	57	
5	5.2	Einf	luss der Wasserstoffversprödung	62	
	5.2	.1	Kalibrierung und Simulation der Wasserstoffschädigung	62	
	5.2	.2	Einfluss der Wasserstoffschädigung auf der Voll- und Hohlprobe	72	
6	Dis	kuss	ion der Ergebnisse	81	
7	Zusammenfassung und Ausblicke 87				
Qu	eller	verz	eichnis	90	

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1: Qualitative Darstellung einer Spannungs-Dehnungskurve	,
Abbildung 2.3 Koaleszenz aufgrund a) von lateralen Verbindung der Hohlräume,b) aufgrund von Void Sheeting [13]	'
Abbildung 2 4 Finfluss der Triaxialität auf den Bruchmodus [18]	,
Abbildung 2.5. Links : Qualitative Darstellung des Unterschieds zwischen der wahren und der	
Fließspannungen im Bereich der Finschnürung [17] rechts : Qualitative Darstellung der	
Finschnürungsgeometrie [19]	
Abbildung 2 6 ⁻ Iterative Prozedur zur Ermittlung der Eließkurve [20]	
Abbildung 2 7: Finfluss der Koaleszenz auf der Variation des spezifischen	
Hohlraumvolumens sowie der Spannungs-Dehnungskurve. [22] Unten: Homogenisierung der	
Nukleation und des Wachstums zwischen zwei Zeitpunkten. [22]	,
Abbildung 2.8 Qualitative Darstellung von Gitterfehlern, die die Eindringung von Wasserstoff	
begünstigen [2])
Abbildung 3.1:Einfluss der f_0 , f_n und f_c auf der Spannungs-Dehnungskurve eines	
Zellmodells bei Links: einer Triaxialität von 0.58: Rechts einer Triaxialität von 2 [26])
Abbildung 3.2 Der Einfluss der Triaxialität auf die Topologie der Bruchfläche und	
Hohlraumformation [14]	;
Abbildung 3.3: Darstellung der Funktionsweise des Newton-Raphsons Algorithmus in	
Anlehnung nach [10, p. 236]	;
Abbildung 3.4: Einfluss des Startpunktes auf dem Konvergenzverhalten des Problems in	
Anlehnung an [32, p. 7]	,
Abbildung 3.5: Technisches Zeichen der Vollprobe)
Abbildung 3.6:Extrapolationsmodelle im Einschnürbereich	
Abbildung 3.7: Das FEM-Modell der Vollprobe: Links Geometrie; Rechts FEM-Netz	•
Abbildung 3.8: Vergleich zwischen der von Mieses Plastizitätsmodell (Lineare Extrapolation)	
und die Nukleations-parameter des GTN-Modells	j
Abbildung 3.9: Einfluss der Schrittweite auf der Nukleation a) Element unten Links,	
b) Element unten rechts; VVFN: Evolution des spezifischen Hohlraumvolumen aufgrund von	
Nukleation	j
Abbildung 3.10: Ermittlung des kritischen Hohlraumvolumens durch den Vergleich zwischen	
Labor und FEM-Ergebnisse, VVF: Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens	
Abbildung 3.11: Einfluss des Bruchparameters auf der Spannungs-Dehnungskurv	í
Abbildung 3.12 Vergleich zwischen der resultierenden und aus dem Labor stammende	
Spannungs-Dehnungskurve	į
Abbildung 3.13 Einfluss der Netzverfeinerung auf der Spannungs-dehnungskurve	1
Abbildung 3.14 : Einfluss der Netzverfeinerung auf der Evolution der Einschnürung	1
Abbildung 4.1: Das FEM-Modell der Hohlprobe: Links Geometrie; Rechts FEM-Netz41	
Abbildung 4.2: Vergleich zwischen den Spannungs-Dehnungskurven der Voll und Hohlprobe	
Abbildung 4.3 Gegenüberstellung des Einschnürverhaltens der Voll und Hohlprobe	,
Abbildung 4.4 Varaition der a)b)plastische Dehnungsfeld;c)d) der Triaxialität,e)f)spezifische	
Hohiraumvolumen bei dem Zeitpunkt wo $\varepsilon eq = 0.8$. Links: Vollprobe. Rechts: Hohiprobe 45	,
Abbildung 4.5: Variation der a)b) plastische Dehnungsfeld; c)d) der Triaxialitat, e)f) spezifische	
Honiraumvolumen bei dem Zeitpunkt wo $\varepsilon eq = 1.3$. Links: Vollprobe. Rechts: Hohlprobe 46	,
Abbildung 4.6. Variation der a)b) plastische Dennungsfeld; c)d) der Triaxialität, e)f) spezifische	
Honiraumvolumen bei dem Zeitpunkt kurz bevor $f = fc$. Links: Vollprobe. Rechts: Hohlprobe	,
4/	
Abbildung 4.7 Variation ajb) des spezifischen Honiraumvolumens kurz nach der Koaleszenz.	,
Abbildung 4.8 Variation a)b) dor von Missos und des bydrastatischen Drucker a)d) der)
Triavialität: a)f) des spezifischen Hohlraumvolumens hei der Voll sowie Hohlprobe	•
mananan, ejij des spezinschen normaunivolumens bei der von sowie normprobe	/

Abbildung 4.9: Einfluss des Innen-, und Außenradius und der Parallellänge auf der Spannungs-Dehnungskurve
Abbildung 4 10 Finfluss des Innen- und Außenradius und der Parallellänge auf die
Entwicklung der Einschnürung 52
Abbildung 4 11 slokal der Knoten an der Außenseite der Zugnrobe in Abbängigkeit von der
Referenz Geometrie in einer logarithmischen Skala
Abbildung 4 12: Lineare Regression zwischen $\ln(K)$ und $\ln(\Lambda)$. Debai ist Λ die Eläche der
Probe obne die Berücksichtigung des Innenradius
Abbildung 4 12: Zusammenhang zwischen der Konstanten der lingaren Begressionen aus
Abbildung 4.13. Zusammerinang zwischen der Konstanten der imearen Regressionen aus
Abbildung 5 1/5 EM Medell der Vall und Lieblarebe
Abbildung 5. 1: FEM-Modell der Voll- und Honiprobe
Abbildung 5.2:Einfluss des Drucks auf ajspannungs-Dennungskurve der vollprobe; Djauf der
von -Mieses Spannung; C auf der Variation des nydrostatischen Drucks; d auf der Triaxialität;
e)aut der Evolution des spezifischen Honiraumvolumens (VVF) ;t)aut dem vvachstum des
spezifischen Honiraumvolumens (VVFG); g) auf der Nukleationdes spezifischen
Honiraumvolumens des Elements A (VVFN).
Abbildung 5.3: Einfluss des Drucks auf a)Spannungs-Dehnungskurve der Hohlprobe; b)auf
der von-Mieses Spannung; c)auf der Variation des hydrostatischen Drucks; d)auf der
Triaxialität; e)auf der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens (VVF);f)auf dem
Wachstum des spezifischen Hohlraumvolumens (VVFG); g) auf der Nukleationdes
spezifischen Hohlraumvolumens des Elements B* (VVFN)
Abbildung 5.4:Kontourplot a) des spezifischen Hohlraumvolumen (VVF) während der
Koaleszenz; b) des Hydrostatischen Drucks; c) der lokalen Wasserstoffkonzentration65
Abbildung 5.5: Annährung der Weibull`schen Verteilung an die Gauss`schen Verteilung66
Abbildung 5.6: Annährung der Gauss`schen Verteilung an die Weibull`schen Verteilung in
Abhängigkeit von der Wasserstoffschädigungsparameter aus [15]67
Abbildung 5.7 Abhängigkeit der Skalenparameter von der Wasserstoffkonzentration68
Abbildung 5.8: Einfluss der gewählten Wasserstoffschädigungsparameter $\xi 1$ und $\xi 2$ auf der
Spannungs-Dehnungskurve70
Abbildung 5.9: Einfluss der gewählten Wasserstoffschädigungsparameter $\xi 1$ und $\xi 2$ auf dem
Einschnührverhalten und Evolution des spezifischen Hohlraumvolumen im Zentrum der
probe
Abbildung 5.10 Ermittlung des neuen <i>fc</i> Parameters durch den Vergleich zwischen der
Einschnürung und das Hohlraumvolumen (VVF) des Elements im Zentrum der Vollprobe71
Abbildung 5.11: Kontourplot a) des spezifischen Hohlraumvolumen während der Koaleszenz;
b) des Hydrostatischen Drucks; c) der lokalen Wasserstoffkonzentration bei der Hohlprobe 72
Abbildung 5.12:Gegenüberstellung der Einschnürung der Voll, der Voll unter Außendruck und
der Vollprobe unter Außendruck und Wasserstoffschädigung73
Abbildung 5.13 Gegenüberstellung der Spanungs-dehnungskurve der Voll, der Voll unter
Außendruck und der Vollprobe unter Außendruck und Wasserstoffschädigung73
Abbildung 5.14 Einfluss des Wasserstoffs auf a) der Nukleation (VVFN);b)auf dem
Wachstum (VVFG); c) auf der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumen (VVF); d) auf
der von-Mieses Spannung; e) auf dem hydrostatischen Druck f) auf der Triaxialität im
Zentrum der Vollprobe
Abbildung 5.15 Gegenüberstellung der Einschnürung der Hohl, der Hohl unter Innendruck
und der Hohlprobe unter Innendruck und Wasserstoffschädigung
Abbildung 5.16 Gegenüberstellung der Spanungs-dehnungskurve der Hohl, der Hohl unter
Innendruck und der Hohlprobe unter Innendruck und Wasserstoffschädigung
Abbildung 5.17:Einfluss des Wasserstoffs auf a) der Nukleation (VVFN);b)auf dem
Wachstum (VVFG); c) auf der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumen (VVF); d) auf
der von-Mieses Spannung; e) auf dem hydrostatischen Druck f) auf der Triaxialität bei dem
ersten Element welches aus dem Netz der Hohlprobe entfernt wird
Abbildung 5.18: Konturplot a)b) der Triaxialität während der Koaleszenz: c)d) des
spezifischen Hohlraumvolumens während der Koaleszenz e)f)a)h des spezifischen
Hohlraumvolumens während des Bruchs
Abbildung 6.1: Bruchfläche der Voll und Hohlprobe unter normale Bedingungen

Tabellenverzeichnis

Tabelle 3-1 die, von Zhang untersuchte Nukleationsparameter. [26]	
Tabelle 3-2:Parameter des Kalibrierten GTN-Models	
Tabelle 4-1:ermittelte Werte der linearen Regressionen (K Wert und die Steigung) für	
Abbildung 4.12.	
Tabelle 4-2 ermittelte Werte der linearen Regressionen für Abbildung 4.13	
Tabelle 5-1: Materialkarte für die Iterationen A, B und C in Abhängigkeit von der	
Normalisierten Wasserstoffkonzentrationen	
Tabelle 5-2: Einfluss des Wasserstoffs auf der Voll und Hohlprobe	78

Nomenklatur

Formelzeichen

Symbol	Bedeutung	Einheit
a, a _i	Konstante	[-]
а	Beschleunigungsvektor	$[mm/s^2]$
A_0	Querschnittsfläche der Referenzgeometrie	[mm ²]
Α	Querschnittsfläche	[mm ²]
Â	Beschädigte Querschnittsfläche	[mm ²]
Α	Nukleationskoeffizient	[-]
b	Konstante	[-]
С	Schallgeschwindigkeit	[mm/s]
C _{ijkl}	Komponente des Elastizitätstensors	[MPa]
C_L	Wasserstoffkonzentration	[PPM]
D	Schädigungsparameter	[-]
Ε	Elastizitätsmodul	[MPa]
f	spezifisches Hohlraumvolumen	[-]
f_0	Anfang spezifisches Hohlraumvolumen	[-]
<i>f</i> _c	kritisches spezifisches Hohlraumvolumen	[-]
f_f	Spezifisches Hohlraumvolumen beim Bruch	[-]
f_n	zu induzierende spezifisches Hohlraumvolumen	[-]
F	Kraft	[N]
G	Größenfaktor	[-]
g	Formänderungsarbeit	[N.mm]
G	Schubmodul	[MPa]
K	Kompressionsmodul	[MPa]
K _{bridgman}	Konstante	[-]
lo	Länge aus der Referenzgeometrie, Länge des Messbereichs	[mm]
l_c	Parallellänge	[mm]

1	Länge	[mm]
М	Massenmatrix	[tonne]
n _i	Konstante	[-]
$q_1; q_2; q_3$	Konstitutive Parameter des GTN-Models	[-]
ra;ri;r	Radius	[mm]
R(u)	Residuum	[N]
S	Löslichkeit	$[PPM.mm/\sqrt{N}]$
S _n	Standarddeviation	[-]
S _{ij}	Komponente des Deviatorischen Spannungstensors	[MPa]
t(u)	Kraftvektor	[N]
Т	Triaxialität	[-]
и	Verschiebung	[mm]
V	Geschwindigkeit	[mm/s]
%EL	Bruchdehnung	[-]
%ROA	Brucheinschnürung	[-]
<i>S%</i>	Schwefelgehalt	[-]
MN%	Mangangehalt	[-]

Griechische Symbole

Symbol	Bedeutung	Einheit
α	Konstante	[-]
δ_{ij}	Kronecker-Delta	[-]
Δt	Zeitinkrement	[Sek]
ε	Dehnung	[-]
Ee	Elastische Dehnung	[-]
E _{eq}	Äquivalente plastische Dehnung	[-]
E _{kl}	Komponente des Dehnungstensors	[-]
\mathcal{E}_n	Median der Gauss`schen Verteilung	[-]
ε_p	Plastische Dehnung	[-]

ε^p_{ij}	Komponente des Plastischen Dehnungstensors	[-]
\mathcal{E}_r	Radiale Dehnung	[-]
$\mathcal{E}_{ ext{tech}}$	Technische Dehnung	[-]
ε_y	Dehnung in Y Richtung	[-]
€ _{wahr}	Wahre Dehnung	[-]
γ_{yr}	Gleitung	[-]
θ	Poissons Zahl	[-]
λ; μ	Lame Konstante	[MPa]
ρ	Dichte	[tonne/mm ³]
ξ_1	Wasserstoffschädigungsfaktor	[-]
ξ2	Wasserstoffschädigungsfaktor	$[mm/\sqrt{N}]$
σ	Spannung	[MPa]
σ_{eq}	von-Mieses Vergleichsspannung	[MPa]
σ_{f0}	Fließgrenze	[MPa]
σ_h	Hydrostatische Spannung	[MPa]
σ_{ij}	Komponente des Spannungstensors	[MPa]
σ_{kk}	Spur des Spannungstensor	[MPa]
σ_{max}	Maximale Spannung	[MPa]
σ_r	Radiale Spannung	[MPa]
σ_{tech}	Technische Spannung	[MPa]
σ_{vM}	Von-Mieses Spannung	[MPa]
$\sigma_y;\sigma_{zug}$	Zugspannung	[MPa]
$\sigma_{ heta}$	Tangentiale Spannung	[MPa]
$ au_{yr}$	Schubspannung	[MPa]
ϕ	Normalisierte Wasserstoffkonzentration	$[\sqrt{N}/mm]$

Abkürzungen

AIDE	Adsorption-Induced-Dislocation Emission
CPU	Zentrale Verarbeitungseinheit (Prozessor)

DIC	Digital Image Correlation
DOE	Design of Experiments
GTN-Modell	Gursson-Tvergaard-Needelman Modell
HEDE	Hydrogene-Enhanced-Decohesion
HELP	Hydrogene-Enhanced-localised-Plasticity
PEEQ	Equivalent Plastic Strain
PPM	Part per Million
TRIAX	Triaxialität
UMAT	User Material Subroutine
VVF	Void Volume Fraction
VVFG	Void Volume Fraction due to growth
VVFN	Void Volume Fraction due to Nucleation

1 Einleitung

1.1 Stand der Technik

In Folge des Klimawandels und der damit einhergehenden Bemühungen umweltfreundliche Energiequellen sowie Strategien zur Reduzierung von CO2-Emissionen herauszuarbeiten, ist die Bedeutung der grünen Wasserstoffstrategien gestiegen. Aktuell arbeitet die Bundesregierung an einer Strategie zur Entwicklung der Infrastruktur für grünen Wasserstoff. Es werden Schritte unternommen, um bis 2027/2028 ein Wasserstoffnetzwerk mit neuen Leitungen von mehr als 1800 km aufzubauen und zu erweitern. Bis zum Jahr 2030 beabsichtigt die Bundesregierung, eine Elektrolysekapazität von mindestens zehn Gigawatt zu schaffen. Zudem plant sie, in internationalen Kooperationen mit anderen Ländern Partnerschaften aufzubauen, um Importstrategien für Wasserstoff zu entwickeln [1].

Durch die Nutzung überschüssiger klimafreundlicher Strommengen, aus bspw. Windenergieanlagen oder Solarpaneele, können Wassermoleküle (H2O) mittels Wasserelektrolyse in Sauerstoff und Wasserstoff aufgespalten werden. Die gewonnene Menge an Wasserstoff kann nun gespeichert und zu einem späteren Zeitpunkt als Energieträger in verschiedenen Industriezweigen wiederverwendet werden. Dieser umweltfreundliche Prozess kann eine tragende Rolle bei der Reduzierung von Kohlenstoffemissionen spielen und wird daher als "grüner Wasserstoff" bezeichnet [1].

Jedoch birgt diese Strategie bislang industrielle Herausforderungen, welche die Integrität, Zuverlässigkeit und Lebensdauer der Bauteile in Frage stellen

Durch den Transport von Wasserstoff durch Pipelines, die Verwendung von Tanks als Speicher oder die Anwendung von Wasserstoff in Produktionsstätten, kommen Wasserstoffatome mit metallischen Komponenten in Kontakt und können bedingt durch ihre Größe leicht in die Metallstruktur diffundieren und sich in den Zwischengitterplätzen einlagern. Dies führt zu Änderungen der Materialeigenschaften.

Seit dem späten 19. Jahrhundert wurden Bemühungen unternommen, um Theorien zu konzipieren, die die Wechselwirkung zwischen Wasserstoffmolekülen und Materialschädigung darstellen. Dazu gehören grundlegende Konzepte, wie die HEDE-Hypothese (*eng. Hydrogene-Enhanced-Decohesion*), die HELP-Hypothese (*eng. Hydrogene-Enhanced-localised-Plasticity*), sowie die AIDE-Hypothese (*eng. Adsorption-Induced-Dislocation Emission*), die in verschiedenen wissenschaftlichen Arbeiten derzeit verwendet werden [2].

Trotz allem befindet sich das Thema der Wasserstoffversprödung erst am Anfang und bleibt ein Bereich mit hohem Forschungsbedarf. Dies ist auf die Vielzahl der diversen Einflussfaktoren zurückzuführen, die das physikalische Problem erheblich beeinflussen, darunter die Diffusionsrate. Die Rate der Wasserstoffdiffusion hängt von der Temperatur und dem Druck ab, wobei höhere Temperaturen und hydrostatische Spannungen zu einer verstärkten volumetrischen Dehnung führen, was die Wasserstoffeinlagerung energetisch begünstigt. Zusätzlich wird die Versprödung auch von anderen Faktoren beeinflusst, wie der Art der Belastung, sei es monoton oder zyklisch, sowie von der Gitterstruktur des Materials. Martensitische Gefüge sind im hohen Maße prädisponiert für Wasserstoffversprödung, da schon geringe Konzentrationen von 0,5 bis 1 PPM (*engl.Part Per Million*) zu Rissbildung führen können, im Gegensatz zu ferritischen Stählen, die relativ hohen Konzentrationen bis zu 10 PPM standhalten. [2]

Daher ist die Quantifizierung jener Degradation und die Qualifizierung des Materials in Wasserstoffumgebung unter verschiedenen Randbedingungen von großer Bedeutung.

Für monotone Belastungen werden im Fraunhofer Institut IWM (Institut für Werkstoffmechanik) Autoklaven verwendet, in denen Zugproben für mehrere Stunden unter

voreingestelltem Druck und Temperatur eingelagert und abschließend bis zum Bruch belastet werden. Dies dient der Charakterisierung der Festigkeitskennwerte, sowie ihrer Einschnürverhalten. [3]

Jedoch es hat sich herausgestellt, dass solche Versuche kosten- und zeitaufwändig sind. Zudem stellt komprimierter Wasserstoff im Kontakt mit Sauerstoff eine Explosionsgefahr dar und erfordert daher aufwendige Sicherheitsvorkehrungen. [4]

Eine alternative Vorgehensweise wäre die Verwendung von hohlgebohrten Geometrien. Dabei wird eine Standardprobe in der Mitte mit einem Langloch versehen und anschließend unter verschiedenen Gasgemischen, Druck- und Temperaturbedingungen getestet. Die Probe wird an eine Wasserstoffquelle angeschlossen und in einer Prüfmaschine platziert, wo sie kontinuierlich dem Wasserstoff ausgesetzt ist. [3]

Ebendiese Prüfmethode bietet den Vorteil, dass sie einfach und kostengünstig ist und in den unterschiedlichsten Prüfmaschinen nachgerüstet werden kann. Darüber hinaus spiegelt sie realistische Prüfbedingungen wider, insbesondere bei Zugversuchen mit langsamen Dehnraten, da die Wasserstoffzufuhr konstant gehalten wird. Außerdem ermöglicht sie den Vergleich divergenter Gasgemische. [4]

Der Vergleich zwischen der Spannungs-Dehnungskurve und den fraktographischen Bildern von Vollproben und Hohlproben in einer Wasserstoffumgebung, stellten eine Verringerung der Duktilität, sowie Anzeichen für sprödes Versagen dar. Aus diesem Grund wird die Finite-Elemente-Methode (FEM) angewendet, um den Einfluss der Geometrie und der Wasserstoffdiffusion auf den resultierenden Feldgrößen zu analysieren. und um so ein tieferes Verständnis des Einschnürverhaltens der Hohlprobe zu gewinnen.

1.2 Aufbau der Arbeit

In der vorliegenden Studie wird die Finite Elemente Methode angewendet, um den Einfluss der Geometrie, Druck- sowie Wasserstoffschädigung auf das mechanische Verhalten der Zugprobe zu untersuchen.

Im zweiten Kapitel werden die theoretischen Grundlagen der Elastizität, der Plastizität sowie die Steuerparameter des Gursson Tvergaard Needleman Schädigungsmodells (GTN-Modell) präsentiert, um sie später in der FEM-Simulation anzuwenden.

Im dritten Kapitel wird ein Literaturreview zur Kalibrierung des GTN-Modells unter normalen und Wasserstoffbedingungen bereitgestellt. Zudem werden die Newton-Raphson- und die explizite dynamische Zeitintegrationsmethode näher erläutert, da sie im Laufe der Studie benötigt werden, um die Simulation des Zugversuchs durchzuführen. Abschließend wird die Kalibrierung des Materials, welches der von-Mieses Plastizität unterliegt, gestartet, und durch die iterative Hinzufügung der Schädigung am Ende, die experimentelle Spannungs-Dehnungskurve anhand der FEM-Simulation reproduziert.

Nachdem das Material angepasst wurde, wird in Kapitel 4 der Einfluss der Bohrung in der Zugprobe, auf den resultierenden physikalischen Feldern im Einschnürbereich untersucht. Daraufhin wird in einer Parameterstudie die Wirkung der Variation des Außen- und Innenradius sowie der Länge der Probe auf das mechanische Verhalten der Probe analysiert

Kapitel 5 untergliedert sich in zwei Teilen. Im ersten Teil wird die Simulation des Zugversuchs der Voll- und Hohlprobe in Druckumgebung, sowie die Variation des Drucks auf das Verhalten der zwei Geometrien präsentiert. Anschließend werden die Schädigungsparameter des GTN-Modells in Abhängigkeit zur Wasserstoffkonzentration ausgedrückt und darauf aufbauend wird der Einfluss der Schädigung der Voll- und Hohlprobe simuliert.

Die Diskussion der resultierenden Ergebnisse, sowie eine kritische Reflexion auf die verwendeten Methoden und Ansätzen folgen in Kapitel sechs.

Abschließend folgt eine Zusammenfassung der gesamten Arbeit und eine Empfehlung der nächsten zu unternehmenden Schritte.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Der Zugversuch

Der Zugversuch ist ein Standardprüfverfahren zur Ermittlung von Materialkennwerten wie dem Elastizitätsmodul, der Festigkeit, der Bruchdehnung und die Brucheinschnürung eines Werkstoffs. Jenes Testverfahren gehört zur Gruppe der zerstörenden Werkstoffprüfungen, da die Probe nach dem Test beschädigt ist und nicht wiederverwendet werden kann. Die Ergebnisse dieses Tests hängen von diversen Faktoren wie der Geometrie und den Prüfbedingungen ab.

Die Geometrie der Probe und die Prüfbedingungen können unterschiedlich sein. Die Geometrie der Probe kann flach, zylindrisch, gekerbt oder ungekerbt sein. Als Prüfbedingungen spielen Temperatur, Druck und Dehnrate eine entscheidende Rolle. Um jedoch die Vergleichbarkeit und Allgemeingültigkeit der Ergebnisse zu gewährleisten, wurden diese Bedingungen standardisiert.

Als Beispiel sei die DIN 50125 erwähnt, die die Geometrie für ungekerbte Testproben, sei es flach oder zylindrisch, beschreibt [5]. Die DIN EN ISO 68921-1 stellt die Methodik dar, anhand derer die verschiedenen Materialkennwerte aus einem Zugversuch ermittelt werden, sowie die dazu gehörige genormte Abzugsrate, mit der die Probe belastet wird, etc. [6].

Um die Probe zu testen, wird sie zuerst in eine Spannvorrichtung der Prüfmaschine mittels Schulterhalterung oder Gewinde festgehalten bzw. festgeschraubt. Anschließend findet eine Dehnung in Längsrichtung statt, während schrittweise Kraft auf sie ausgeübt wird. Im Laufe des Versuchs ändert der Werkstoff seinen Widerstand und die Prüfmaschine passt die aufgebrachte Kraft entsprechend an. Die Kraftmessung erfolgt mit Hilfe einer Kraftmessdose, während die Verlängerung der Probe entweder direkt durch den Extensometer gemessen werden kann und oder indem die Bewegung des beweglichen Kolbens aufgenommen wird. [7, p. 334]

Der Versuch endet, wenn die Probe schließlich bricht. Aus diesem Versuch wird eine Kraft-Verschiebungskurve gewonnen, die die Reaktion der Probe auf eine Zugbelastung abbildet. Diese Reaktion hängt stark von den Materialeigenschaften und der Geometrie der Probe ab.

Um den Einfluss der Geometrie zu minimieren, wird die Kurve von dem Kraftverschiebungsraum in den technischen Spannungs-Dehnungsraum transformiert. Dabei ergibt sich die technische Spannung, auch als erste Piola-Kirchhoff-Spannung bekannt, aus dem Verhältnis der aufgebrachten Kraft durch die Querschnittsfläche der unverformten Referenzgeometrie A0:

während die technische Dehnung das Verhalten zwischen der Verschiebung und der Referenz Länge wiedergibt:

Die Form dieser Kurve ermöglicht es, entscheidende Erkenntnisse über das Verhalten des Materials zu gewinnen. Materialien, die eine kleine Fläche unter der Kurve aufweisen, wie gehärtete Stähle oder Kohlenstofffasern werden als spröde bezeichnet, da sie vor dem Bruch keine detektierbaren Versagensmerkmale zeigen. Sie brechen, kurz nachdem eine Proportionalitätsgrenze erreicht wurde. Im Gegensatz dazu haben Materialien wie z. B Kohlenstofffarmestähle, Kupfer, Aluminiumlegierungen etc. eine größere Fläche unter der Kurve, was eine höhere Dehnbarkeit signalisiert, damit können sie große Verformungen tolerieren, bevor sie erste Anzeichen eines Versagens in Form von Einschnürungen aufweisen.

Die in Abbildung 2.1 dargestellte Kurve für duktile Werkstoffe lässt sich in drei Abschnitte unterteilen: Der lineare elastische Bereich endet, wenn die Fließgrenze σ_{f0} erreicht. Danach weist das Material sowohl elastische als auch plastische Verformungseigenschaften auf. Der zweite Abschnitt endet, wenn die Spannung die maximale Zugfestigkeit σ_{max} erreicht. Der letzte Bereich, der sich von Punkt σ_{max} bis zum Punkt Z erstreckt, kennzeichnet den Einschnürbereich, der schließlich mit dem Bruch der Probe einhergeht.



Abbildung 2.1: Qualitative Darstellung einer Spannungs-Dehnungskurve

2.2 Der elastische Bereich

In diesem Bereich verhält sich das Material linear und elastisch. Linearität bedeutet, dass die aufgebrachte Spannung oder Kraft proportional zur Dehnung oder Verschiebung ist. Eine Verdopplung bzw. Verdreifachung der Kraft führt zu einer Verdopplung bzw. Verdreifachung der Verschiebung, solange der Fließgrenze σ_{f0} nicht erreicht wurde. Die elastische Eigenschaft wird durch zwei Merkmale aufgezeigt: Reversibilität, da die Be- und Entlastung auf demselben Pfad stattfinden, und die Tatsache, dass die Probe unverzüglich auf ihre Referenzkonfiguration zurückkehrt, wenn sie vollständig entlastet wird.

Unter diesem Gesichtspunkt sind die Verformungen infinitesimal klein, sodass der Unterschied zwischen der technischen und den Cauchy-Spannungen (wahre Spannungen) vernachlässigbar gering ist. Rheologisch betrachtet, kann dieses Verhalten qualitativ als ein Feder-Verhalten (Hooke'sches Element) modelliert werden. Daher wird dieser Bereich als der Hooke'sche Bereich bezeichnet.

Der Hooke'sche Zusammenhang kann nun für einen ein-(1D) sowie dreidimensionalen (3D) Spannungszustand wie folgt ausgedrückt werden:

$$\sigma = E\varepsilon$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$
Gl. 2-3

Hierbei repräsentiert E das Elastizitätsmodul, während σ und ε Tensoren zweite Ordnung darstellen, die aufgrund ihrer Symmetrien jeweils sechs unabhängige Komponenten besitzen.

Der Zusammenhang zwischen σ , C und ε wurde durch eine Indexschreibweise ausgedrückt. Die Variablen *i,j,k* und *l* laufen von 1 bis 3. *k* und *l* sind die sogenannte "Dummy Variablen" und die Summation wird über diese durchgeführt solange sie zweimal in einer Multiplikation vorkommen.

C ist ein Tensor vierter Ordnung der allgemein 3⁴ Komponenten besitzt. Basierend auf der Symmetrie der Spannung und Dehnung folgt:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} = C_{jikl} \varepsilon_{kl} = \sigma_{ji}$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} = C_{ijlk} \varepsilon_{lk} = \sigma_{ij}$$

Gl. 2-4

Die Fläche unter der Hoock'schen Geraden bezeichnet die Formänderungsarbeit g, Ihr Betrag kann durch die Integration der Spannung in Abhängigkeit zur Dehnung ermittelt werden. Daher gilt:

$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2 g}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial^2 g}{\partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{ij}} = C_{klij} \qquad \qquad Gl. 2-5$$

Somit reduziert sich die Anzahl der unabhängigen Komponenten auf 21. Weitere Reduktionen erfolgen durch die Annahme von Materialsymmetrien wie z. B Orthotropie, Transversale Isotropie etc. [8, pp. 283-301]

Materialien wie Stähle, Aluminium, Kupfer usw. besitzen nahezu richtungsunabhängige Eigenschaften, d. h. die Komponenten bleiben invariant unter jeder beliebigen Rotation im Raum. Daher werden sie als isotrop bezeichnet und ihr Elastizitätstensor lässt sich durch die Lame Konstanten λ und μ beschreiben.

Durch die Zerlegung des Dehnungstensors in einen volumetrischen und deviatorischen Anteil und durch das Einsetzen in Gl.2-6 kann der Zusammenhang zu den hydrostatischen und deviatorischen Anteilen des Spannungstensors hergestellt werden:

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{3} \varepsilon_{mm} \cdot \delta_{kl} + \varepsilon_{kl}^{dev}$$

$$\sigma_{ij} = \left[\lambda \, \delta_{ij} \, \delta_{kl} + \, \mu \left(\delta_{ik} \, \delta_{jl} + \delta_{il} \, \delta_{jk}\right)\right] \cdot \varepsilon_{kl}$$

$$\sigma_{ij} = \left(\lambda + \frac{2}{3} \cdot \mu\right) \, \varepsilon_{mm} \cdot \delta_{ij} + 2 \cdot \mu \cdot \varepsilon_{ij}^{dev}$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{3} \, \sigma_{mm} \cdot \delta_{ij} + \, \sigma_{ij}^{dev}$$

$$Gl. 2-7$$

Dabei repräsentiert der Term $\sigma_h = \frac{1}{3} \sigma_{mm}$ die hydrostatische Spannung, während σ_{ij}^{dev} der deviatorische Anteil des Spannungstensors darstellt. Der Übergang zwischen den Dehnungsund Spannungskomponenten wird durch das Kompressionsmodul *K* und das Schubmodul *G* ausgedrückt. Dabei gilt für *K*:

$$K = \lambda + \frac{2}{3}\mu = \frac{E}{3(1-2\vartheta)}$$
 Gl. 2-8

während G:

2.3 Der elasto-plastische Bereich

Nachdem die Fließgrenze überschritten wurde, bleibt die Reaktion der Probe bei nicht zu hohen Temperaturen momentan, aber nicht mehr reversibel. Die verrichtete Arbeit setzt sich nun aus einer potenziellen Energie und einem dissipativen Anteil, der unter der Form von Wärme aus dem System ausgeführt wird, zusammen. Der Werkstoff verhält sich zu diesem Zeitpunkt plastisch.

Auf mikroskopischer Ebene ist die Plastizität eng mit der Bewegung von Versetzungen im Kristallgitter verknüpft. Diese Bewegungen treten auf, wenn die Atome sich hinsichtlich der Schubspannungen neu anordnen lassen.

Materialien, die eine ausgeprägte Dehngrenze aufweisen, zeigen nach Erreichen der Fließgrenze einen zickzackartigen Verlauf. Dieser Bereich wird als Lüders-Bereich bezeichnet, in dem Wechselwirkungen zwischen den Versetzungen und Fremdatomen auftreten. Die Entstehung von Versetzungen führt dazu, dass die Kristallgitter erweitert und dadurch Atome wie Kohlenstoff oder Stickstoff eingelagert werden und somit die Bewegung der Versetzungen behindern. Erst wenn mehr Energie aufgebracht wird, können sich die Versetzungen von diesen Fremdatomen lösen und weiterbewegen. [7, p. 337]

Materialien wie Aluminium oder austenitische Stähle haben keine augenscheinliche Dehngrenze. Der Übergang zwischen dem Hooke'schen Bereich und dem plastischen Bereich ist fließend, was die Identifizierung der Fließgrenze schwer macht. Die DIN EN ISO 68921-1 definiert daher die 0.2 %- Dehnung als Proportionalitätsgrenze. Diese kann grafisch ermittelt werden, indem eine parallele Gerade zur Hoocke'schen Geraden durch 0.2 % Offset gezogen wird und sich mit der Spannungs-Dehnungskurve kreuzt.

Bei einer weiteren Verformung steigt die Festigkeit des Materials. Der Grund hierfür beruht auf einer Vermehrung von Versetzungen, die sich irgendwann gegenseitig blockieren und damit zur Materialverfestigung führen. Darüber hinaus herrscht im Messlängenbereich ein einachsiger Spannungszustand, wodurch die Verformung gleichmäßig erfolgt. Die Probe reagiert auf die Zugbelastung in Längsrichtung, durch eine gleichmäßige Verringerung ihres Querschnitts. Dieser Abschnitt endet, sobald die maximale Festigkeit des Werkstoffs erreicht wird. [7, p. 338]

Da der Werkstoff inelastisches Verhalten aufweist, unterscheiden sich die Belastungs- und Entlastungspfade, wodurch ein eindeutiger Zusammenhang zwischen Dehnung und Spannung nicht mehr vorhanden ist. Die Eindeutigkeit der Spannung erfordert zwei Informationen, nämlich die elastische und die plastische Dehnung. Unter der Annahme von kleinen Verformungen lässt sich die Dehnung nun additiv zu elastischen und plastischen Anteilen zerlegen.

$$\varepsilon_t = \varepsilon_e + \varepsilon_p$$
 Gl. 2-10

Für eine 3D-Formulierung der Plastizität sind drei Bausteine nötig: die Fließbedingung (Yield Condition), das Verfestigungsgesetz (Hardening Rule) und die Fließregel (Flow Rule).

Die Fließbedingung ist eine Funktion, die den Spannungstensor sowie weitere innere Variablen als Input erhält, um zu bestimmen, ob das vorliegende Material sich im Fließzustand befindet. Eine der bekanntesten Theorien zur Beschreibung der plastischen Verformung von Metallen ist die Fließbedingung nach von-Mieses. Ihre Implementierung kommt in vielen FEM-Softwares zu tragen. Sie postuliert, dass die verrichtete Arbeit, die benötigt wird, um das Fließen in 3D-Spannungszustand hervorzurufen, gleich derjenigen bei einem 1D-Spannungszustand ist. [9, p. 183]. Die Von-Mieses Fließbedingung wird wie folgt ausgedrückt:

$$\varphi(\boldsymbol{\sigma}, \varepsilon_{eq}) = \sigma_{vM}(\boldsymbol{\sigma}) - \sigma_f(\varepsilon_{eq}) \le 0 \qquad \qquad Gl. \ 2-11$$

Dabei repräsentiert σ_{vM} die von-Mieses Spannung, während $\sigma_f(\varepsilon_{eq})$ die Fließspannung ist.

Wie bereits erwähnt, entsteht Plastifizierung durch die Bildung und Bewegung von Versetzungen, die ihrerseits Schubdeformationen hervorrufen und somit eine Gestaltänderung des Körpers verursachen. Dies bedeutet wiederum, dass Fließen ein isochorer Prozess und damit die Existenz einer Volumenänderung nicht vorhanden ist. Der Term $\varepsilon_{ii} = \varepsilon_{ij} \delta_{ij}$ aus Gl.2.7 ist gleich null. Diese Betrachtung führt zur Schlussfolgerung, dass zur Berücksichtigung

des Fließens nur der deviatorische Anteil des Spannungstensors herangezogen wird, weshalb die von-Mieses Vergleichshypothese auch als Gestaltänderungshypothese bekannt ist.

Daher wird die von-Mieses Spannung wie folgt geschrieben

Der von-Mieses Fließkörper kann im Hauptspannungsraum als ein Zylinder dargestellt werden, dessen Basis die deviatorische Ebene und seine Hauptachse die hydrostatische Spannungsachse ist (s. Abbildung 2.2). Auch hier ist durch die Geometrie des Körpers ersichtlich, dass Fließen nicht von dem hydrostatischen Anteil hervorgerufen wird, da der Radius des Zylinders konstant ist.



Abbildung 2.2: Darstellung des von-Mieses Fließkörpers in Haigh-Westergaard-Koordinaten in Anlehnung an [9, p. 183]

Es existieren auch andere Fließbedingungen, wie z. B Mohr Coulomb für Bodenmechanik, Drucker-Prager, sowie die Fließbedingung nach Tresca. Letztere ist zudem ausschließlich von dem deviatorischen Anteil des Spannungstensors abhängig und wird durch ein sechskantiges Prisma im Hauptspannungsraum repräsentiert [9, p. 185]

Anhand der Fließregel wird die Evolution des inkrementellen plastischen Dehnungstensors während des Fließens quantifiziert. Im Falle, dass das plastische Potential die Fließbedingung sei, wird von einer assoziierten Fließregel gesprochen [10, p. 206]. Der Zusammenhang zwischen dem plastischen Dehnratentensor und dem plastischen Potential in Abhängigkeit des deviatorischen Spannungstensors kommt in folgender Form zum Ausdruck:

Die Herleitung stützt sich auf die Normalitätsbedingung, die besagt, dass der sechsdimensionale plastische Dehnungsvektor $d\epsilon^p$ stets senkrecht zum Fließkörper und damit ist er kollinear zur Normale auf dem Fließkörper N [9, p. 182] [10, p. 206]

Zuletzt beschreibt das Verfestigungsgesetz die Evolution des Fließkörpers. Die mathematische Formulierung erfolgt durch die Definition einer Verfestigungsart und eines Verfestigungsverhaltens [9, pp. 192-193]. Dabei beschreibt die Verfestigungsart die Entwicklung der Fließspannung in Abhängigkeit von inneren Variablen, wie z. B. die äquivalente plastische Dehnung $\sigma_f = \sigma_f(\varepsilon_{eq})$. Die äquivalente plastische Dehnung ε_{eq}

hingegen ist eine Funktion, die den plastischen Dehnungstensor als Input bekommt und durch eine doppelte Kontraktion einen Skalar liefert, der mit der 1D-plastischen Dehnung vergleichbar ist.

Unter Versetzungsarten fallen verschiedene Modelle, wie z. B: [11] [12]

Linear : $\sigma_f(\varepsilon_{eq}) = \sigma_{f0} + a_0 \varepsilon_{eq}$

Hollomon : $\sigma_f(\varepsilon_{eq}) = a_1 \varepsilon_{eq}^{n1}$

Swift : $\sigma_f(\varepsilon_{eq}) = a_2 + a_3 \varepsilon_{eq}^{n2}$

Voce $: \sigma_f(\varepsilon_{eq}) = a_4 - a_5 \exp(-n_3 \varepsilon_{eq})$

Hockett-Scherby : $\sigma_f(\varepsilon_{eq}) = a_6 - a_7 \exp(-n_4 \varepsilon_{eq}^{n5})$

Wobei hier a_i und n_i Fittings-Parameter sind, um das Modell an die aus dem Versuch gewonnenen Kurve anzupassen.

Das Verfestigungsverhalten des Materials kann durch eine Isotrope, oder Kinematische Verfestigung sowie die Kombination von beiden abgebildet werden. Wenn eine Isotrope Verfestigung vorliegt, bleibt die Position der Rotationsachse des Fließkörpers unbeweglich dagegen nimmt sein Radius in Abhängigkeit der Spannung und der vorliegenden äquivalenten plastischen Dehnung zu. Wenn eine kinematische Verfestigung vorliegt, geschieht das Gegenteil. Der Radius bleibt konstant dagegen verschiebt sich das Zentrum des Fließkörpers.

Bei monotonen Belastungen hat das Verfestigungsverhalten keine Wirkung auf das Verhalten des Modells. Dennoch wird eine isotrope Verfestigung gewählt, damit der Solver keinen Fehler meldet

Die Evolution der Fließbedingung kann durch ihre Ableitung (die Konsistenz Bedingung) beschrieben werden:

$$d\varphi(\boldsymbol{\sigma}, \varepsilon_{eq}) = \frac{\partial \varphi}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon_{eq}} d\varepsilon_{eq} = \frac{\partial \sigma_{\nu M}}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - \frac{\partial \sigma_f(\varepsilon_{eq})}{\partial \varepsilon_{eq}} d\varepsilon_{eq} = 0 \qquad \qquad \textbf{Gl. 2-15}$$

Der Term $\frac{\partial \varphi}{\partial \sigma_{ij}}$ liefert [10, p. 206]:

Während bei der Annahme einer linearen Verfestigung gilt

Durch das Einsetzen des konstitutiven Gesetzes

$$d\sigma_{ij} = C_{ijkl} (d\varepsilon_{kl} - d\varepsilon_{kl}^p) = C_{ijkl} (d\varepsilon_{kl} - d\varepsilon_{eq} N_{kl})$$
 Gl. 2-18

in Gl.2-15 resultiert die äquivalente plastische Dehnrate unter der folgenden Schreibweise:

Eine detaillierte Herleitung zu Gl.2-19 kann aus [10, pp. 189-214] entnommen werden.

Zusammengefasst kann nun anhand der drei vorgestellten Bausteine und der vier folgenden Szenarien entschieden, ob der Werkstoff sich plastisch verhält:

• Die Spannung ist unter der Mantelfläche des Fließkörpers und bleibt bei dem nächsten Inkrement weiterhin unterhalb des Fließkörpers. Damit ist das Verhalten elastisch, die Fließbedingung bleibt negativ und der Zuwachs an plastischer Dehnung ist nicht vorhanden:

$$\varphi(\mathbf{\sigma}, \varepsilon_{eq}) = \sigma_{vM}(\mathbf{\sigma}) - \sigma_f(\varepsilon_{eq}) < 0$$
$$d\varepsilon_{eq} = 0$$

• Liegt die Spannung auf der Mantelfläche und der nächste Schritt wäre eine Entlastung, liefert die Fließbedingung den Wert null. Ihre Ableitung ist negativ und der Zuwachs an plastischer Dehnung nicht vorhanden:

$$\varphi(\mathbf{\sigma}, \varepsilon_{eq}) = \sigma_{vM}(\mathbf{\sigma}) - \sigma_f(\varepsilon_{eq}) = 0$$
$$d\varphi(\mathbf{\sigma}, \varepsilon_{eq}) = \frac{\sigma_{vM}}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - \frac{\partial \sigma_f}{\partial \varepsilon_{eq}} d\varepsilon_{eq} < 0$$
$$d\varepsilon_{eq} = 0$$

• Liegt die Spannung auf der Mantelfläche und der nächste Schritt wäre hingegen eine neutrale Belastung, liefert die Fließbedingung weiterhin den Wert null, ihre Ableitung ist nun jedoch auch null. Der Zuwachs an plastischer Dehnung ist noch immer nicht vorhanden

$$\varphi(\mathbf{\sigma}, \varepsilon_{eq}) = \sigma_{vM}(\mathbf{\sigma}) - \sigma_f(\varepsilon_{eq}) = 0$$
$$d\varphi(\mathbf{\sigma}, \varepsilon_{eq}) = \frac{\sigma_{vM}}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - \frac{\partial \sigma_f}{\partial \varepsilon_{eq}} d\varepsilon_{eq} = 0$$
$$d\varepsilon_{eq} = 0$$

• Liegt die Spannung auf der Mantelfläche und der nächste Schritt wäre eine plastische Belastung, wie im Falle eines Zugversuchs, dann gilt:

$$\varphi(\mathbf{\sigma}, \varepsilon_{eq}) = \sigma_{vM}(\mathbf{\sigma}) - \sigma_f(\varepsilon_{eq}) = 0$$
$$d\varphi(\mathbf{\sigma}, \varepsilon_{eq}) = \frac{\sigma_{vM}}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - \frac{\partial \sigma_f}{\partial \varepsilon_{eq}} d\varepsilon_{eq} = 0$$
$$d\varepsilon_{eq} > 0$$

2.4 Einschnürung und Kontinuumsschädigungsmodelle

Wie eingangs erwähnt, führte die Zugbelastung im Bereich der Gleichmaßdehnung zu einer gleichmäßigen Abnahme des Querschnitts. Diese Geometrieänderung hat einen Anstieg im Niveau der technischen sowie wahren Spannung hervorgerufen. Um dieser Veränderung entgegenzuwirken, hat sich das Material verfestigt. Die dort herrschende Spannung steigt weiter, bis die maximale Festigkeit erreicht wurde, ab dem Moment ist die Verfestigung nicht mehr in der Lage, die Abnahme des Querschnitts auszugleichen und es folgt eine Instabilität.

An der Stelle, wo sich die größte Imperfektion befindet, tritt das Einschnüren ein. Die plastische Verformung konzentriert sich lokal in diesem Bereich und die Verformung ist nun ungleichmäßig. Währenddessen entlastet sich das Material außerhalb dieses Bereichs.

Die technische Spannungs-Dehnungskurve zeigt einen fallenden Ast, dies entspricht jedoch nicht dem, was in der Probe stattfindet, da sich die Spannung und Dehnung auf die anfängliche Referenzgeometrie beziehen. Das wahre Verhalten des Werkstoffs weist darauf hin, dass die wahre Spannung (Cauchy Spannung) noch weiter zunimmt und die Verfestigung weiterhin vorhanden ist. Aufgrund der Geometrie des Einschnürens, herrscht ein triaxialer Spannungszustand, wodurch die registrierte wahre Spannung nicht mehr der von-Mieses Spannung entspricht. Nach weiterer Verformung beginnt das Material sich zu entfestigen und irgendwann findet der Bruch statt. Der Werkstoff entlastet sich entlang der Hoocke`schen Geraden und die verbleibende plastische Dehnung wird als Bruchdehnung bezeichnet. Ihre Ermittlung basiert auf der Referenzgeometrie und repräsentiert ein Maß der Verformungsfähigkeit bzw. der Duktilität des Werkstoffs.

Ein zweiter nennenswerter Wert, der den Bruch charakterisiert, ist die Brucheinschnürung. Sie beschriebt die Querschnittänderung der Zugprobe und bezieht sich auch auf die Referenzgeometrie.

Von metallurgischer Perspektive aus betrachtet lassen sich die Initiierung und Evolution der Einschnürung, sowie letztendlich der duktile Bruch, mit der Bildung, dem Wachstum und der Koaleszenz von Hohlräumen in Verbindung bringen. Dies geschieht infolge der Kombination aus Lokalisierung der plastischen Verformungen und der Tatsache, dass das Gefüge Keimstellen enthält, wie zum Beispiel Fremdeinschlüsse und Korngrenzen. Diese Keimstellen weisen auf mikrostruktureller Ebene verschiedenartige Materialeigenschaften als das Matrixmaterial auf, was wiederum zu Spannungskonzentrationen führt. Diese Spannungskonzentrationen sind verantwortlich für den Bruch und bzw. oder die Ablösung dieser Einschlüsse vom Matrixmaterial sowie für die Nukleation der Hohlräume [13] [14].



Abbildung 2.3 Koaleszenz aufgrund a) von lateralen Verbindung der Hohlräume,b) aufgrund von Void Sheeting [13]

Am Ende des Zugversuchs erfolgt der Bruch. Bei duktilen Materialien ist die Bruchfläche durch ein Cup-Cone-Muster gekennzeichnet. Die Ursache für diese Geometrie entstammt der Triaxialität und der Hohlraumformation.

Die Hohlräume wachsen homogen und aufgrund des im Einschnürbereich vorherrschenden 3D-Spannungszustands treten in der Mitte der Probe hohe hydrostatische Spannungen bzw. volumetrische Dehnungen auf, die einen Dilatationseffekt auf die dortigen Hohlräume ausüben (Void Impingment) [13] [14]. An der äußeren Seite der Probe hingegen, wirken stärkere deviatorische Spannungen bzw. herrscht eine geringere Triaxialität, welches zur Bildung von schmalen und schrägen Hohlraumbändern führt, [13] [14], auch bekannt als "Void Sheeting" [13]. Irgendwann erreicht das Hohlraumvolumen einen kritischen Punkt, wo die Hohlräume sich miteinander verbinden. Die Situation wird instabil und ein plötzlicher Spannungsabfall tritt ein. Dieser Moment ist durch einen Knick in der Spannungs-Dehnungskurve charakterisiert [15] [16], wie in Abbildung 2.1 durch den Punkt Fc dargestellt ist. Der Zeitpunkt der Koaleszenz hängt von der Entfernung und Orientierung der Hohlräume, der Fließspannung, sowie der Verfestigungsart ab [17].

Die Bruchfläche zeigt, dass in der Mitte der Probe eine Materialtrennung aufgrund interner Einschnürung stattfindet, was zu lateraler Koaleszenz zwischen den Hohlräumen führt. Im Bereich der Scherlippen hingegen findet die Koaleszenz in Richtung der maximalen Schubspannungen statt [13] [17] wie es in Abbildung 2-3 zu sehen ist.

Die Triaxilität ist ein wichtiges Maß, um den Bruch zu beschreiben, sie stellt ein Verhältnis zwischen der hydrostatischen Spannung und der von-Mieses Spannung dar:

In der Studie von Bao et al. [18] wurde festgestellt, dass die Bruchdehnung bei einer Aluminiumlegierung vom Typ Al 2024-T351 von der Triaxialität beeinflusst wird. Bei hoher Triaxialität, wie bei den Fällen von gekerbten Proben, sinkt die Bruchdehnung und die Bruchfläche weist eine starke Hohlraumformation auf. Bei Druckversuchen (Upsetting test) hingegen, wo eine geringe Triaxialität herrscht, dominierten Scherbrüche die Materialtrennungen. Bei mittlerer Triaxialität wie bei ungekerbten Zugversuchen, herrscht in der Bruchfläche eine Kombination der beiden Modi [18].



Abbildung 2.4 Einfluss der Triaxialität auf den Bruchmodus [18]

Für die Modellierung des Werkstoffverhaltens mithilfe von FEM-Software, inklusive des Einschnürbereichs, ist es notwendig, die Fließkurve zu definieren. Vor dem Einsetzen der Einschnürung kann die Fließkurve direkt aus der wahren Spannungs-Dehnungskurve gewonnen werden. Nach dem Einsetzen der Einschnürung allerdings, herrscht ein 3D-Spannungszustand,

der von der Geometrie der Probe und des Einschnührbereichs abhängig ist. Die Fließspannung unterscheidet sich nun von der Zugspannung (s. Abbildung 2-5 links).

Um die Fließkurve in diesem Bereich zu ermitteln, stehen zahlreiche Methoden zur Verfügung. Eine der klassischeren Methoden, wäre die Verwendung der Bridgman-Korrektur. Hierbei handelt es sich um einen Zusammenhang zwischen der Zugspannung und der äquivalenten Spannung.

Die Grundidee hinter dieser Methode besteht darin, die Gleichgewichtsbedingungen im verformten Zustand herzustellen. Durch die Vernachlässigung der Schubspannung gelingt es, eine Verbindung zwischen der Geometrie des eingeschnürten Bereichs und den Spannungen in jedem Punkt auf der minimalen Fläche zu beschreiben. Daraufhin ist es möglich, durch die Integration der axialen Spannungen über die gesamte Fläche die von-Mieses Spannung zu identifizieren und den Korrekturfaktor in Gl.2-21 zu ermitteln [19].

$$K_{bridgman} = \frac{\sigma_{zug}}{\sigma_{vM}} = \left(1 + \frac{2R}{a}\right) \cdot \ln\left(1 + \frac{a}{2R}\right) \qquad \qquad Gl. \ 2-23$$

Dabei beschreibt die geometrische Größe a den Radius der minimalen Fläche der Probe, während R den Außenradius der Mantelfläche beim Einschnüren ausdrückt, wie in Abbildung 2.5 rechts dargestellt ist.



Abbildung 2.5: **links**: Qualitative Darstellung des Unterschieds zwischen der wahren und der Fließspannungen im Bereich der Einschnürung [17], **rechts**: Qualitative Darstellung der Einschnürungsgeometrie [19]

Im Verlauf der Herleitung trifft Bridgman die Annahme, dass die von-Mieses Spannung über der minimalen Fläche gleichmäßig verteilt ist, was zu einer Diskrepanz zwischen seine Methode und den FEM-Ergebnissen führt [19]. Eine weitere Einschränkung dieser Methode besteht darin, dass die Veränderungen in der Geometrie des eingeschnürten Bereichs aufgenommen werden müssen. Dies ist erstens problematisch, da solche Prozesse die Verwendung von DIC *(engl. Digital Image Correlation)* Technologie erfordern, die in der Vorbereitung sehr aufwändig ist. Zweitens ist das Einschnüren ein Stabilitätsproblem und kann an verschiedenen Stellen im Messbereich auftreten, weshalb der Prozess nicht immer vollständig erfasst werden kann [19].

Eine andere Methode wäre die Interaktion zwischen FEM und den Versuchsergebnissen. Diese Prozedur ist meistens iterativ und erfolgt durch die Extrapolation der Fließkurve anhand einer Verfestigungsart oder einer "Punkt für Punkt"-Korrektur [19] [20].

Bei der Extrapolationsmethode wird die Fließkurve nach dem Einschnüren mithilfe einer Verfestigungsart, wie sie in Abschnitt 2.3 vorgestellt wurde, weiter verlängert. Zur Ermittlung der Modellkoeffizienten können die folgenden drei Informationen verwendet werden:

Eine C⁰ Kontinuität der Fließkurve beim Einschnüren und damit gilt [11] [12]:

$$\sigma = \sigma(\varepsilon_{ul}) \qquad \qquad Gl. \ 2-24$$

Die Concidere Gleichung, welche die Bedingung fürs Einschnüren beschreibt und eine C^1 Kontinuität der Fließkurve bereitstellt [11] [12]:

Die dritte Information kann aus der Spannung im Bruchpunkt und der Verwendung der Bridgman-Korrektur erfolgen [11] [12] [19]:

$$\sigma_{vM}(\varepsilon_{bruch}) = \frac{\sigma}{K_{bridaman}} = \frac{1}{K_{bridaman}} \cdot \frac{F}{A}$$
 Gl. 2-26

Dabei handelt es sich hier bei den Spannungen und Dehnungen um wahre Spannungen und Dehnungen.

Kewon et al. [11] [12] verwendeten die vorher erwähnte Prozedur, um die Fließkurven für einen niederlegierten und einen austenitischen Stahl zu ermitteln. Bei der ersten Stahlsorte wurde ein gewichtetes Modell, aus dem Hollomon- und dem linearen Verfestigungsmodell kombiniert. Dagegen wurde bei der zweiten Stahlsorte das Hocket-Sherby-Modell verwendet. Die Modelle hatten mehr als drei Fitting-Parameter, was bedeutet, dass sie überbestimmt waren. Diese Charakteristik hat für zusätzliche Flexibilität gesorgt. Die resultierenden FEM-Ergebnisse wurden mit den Versuchsergebnissen verglichen. Wenn die Differenz größer war als ein vorgegebener Toleranzwert, wurden die Parameter neu angepasst [11] [12].

Bei der "Punkt-für-Punkt"-Methode wird die Fließkurve iterativ angepasst. Nach der Einschnürung wird die wahre Spannungs-Dehnungskurve durch mehrere Abschnitte entlang der Dehnungsachse geteilt. Die Spannung im ersten Punkt nach der Einschnürung wird durch zwei extrapolierte Werte ausgedrückt. Der erste Wert σ_1 ist der Schnittpunkt zwischen der Verlängerung der Tangente im vorherigen Punkt und der vertikalen Geraden (G), die durch die Dehnung der gesuchten Spannung verläuft. Der zweite Wert σ_1 stellt den Schnittpunkt zwischen der horizontalen durch denselben vorherigen Punkt und der Geraden (G), dar. [20]



Abbildung 2.6: Iterative Prozedur zur Ermittlung der Fließkurve [20]

Der gesuchte Spannungswert wird nun in gewichteter Form ausgedrückt als $\sigma = w.\sigma_1 + (1 - w).\sigma_2$. Das Ziel der iterativen Schleife ist jetzt die Ermittlung der optimalen Gewichtung w, damit die FEM-Ergebnisse mit den Labor-Ergebnissen in diesem Punkt übereinstimmen. Nachdem der optimale Wert für den ersten Spannungspunkt ermittelt wurde, wird die Suche weitergeführt, um die nächste optimale Gewichtung für den nächsten Spannungspunkt zu finden. Wang et al [20]verwendeten diese Schleife in Ansys APDL und haben dabei die RESTART-Option aktiviert. In ihrer Studie wurde von zwei bis sechs Stunden Rechenzeit berichtet für ein FEM-Modell, dessen Einschnürbereich aus 200 bis 800 Brick-Elementen vernetzt wurde [20].

Wie bereits erwähnt, stellen die Gitterfehler Inhomogenitäten dar, infolgedessen werden Spannungskonzentrationen erzeugt. Diese nehmen mit fortschreitender Belastung zu und sorgen für die Entstehung der Hohlräume. Letztere beeinträchtigen die Werkstoffeigenschaften des Materials, wie bspw. das E-Modul oder das plastische Potential. Die Aufwendigkeit solcher Inhomogenitäten im FEM-Modell zu modellieren, wäre unrealistisch. Daher kommen die Kontinuum-Schädigungsmodelle zum Einsatz. Sie sind mechanische und mathematische Modelle, bei denen eine theoretische Verschmierung der Schädigung mit den Materialeigenschaften stattfindet, um die Entfestigung des Materials auszudrücken.

Eines der ersten Kontinuum-Schädigungsmodelle war das Modell von McLintock, Race und Tracey. In diesem wurde festgestellt, dass das Wachstum von sphärischen oder zylindrischen Hohlräumen in einem perfekten plastischen Material von der Triaxialität und plastischen Dehnung beeinflusst wird. Darauf aufbauend wurde ein Bruchkriterium für duktile Werkstoffe formuliert. Es postuliert, dass der Bruch im Material stattfinden kann, wenn der Radius der Hohlräume einen kritischen Wert erreicht. Nachteilig war es nicht in der Lage, das Wachstum der Hohlräume während der Entfestigung des Werkstoffs zu berücksichtigen [13].

Das Schädigungsmodell von Lemaitre ist ein phänomenologisches Modell und beruht auf der Annahme, dass die Evolution der Schädigung die Degradation des Elastizitätsmoduls des Werkstoffs herbeiführt. In 1D beschreibt der Schädigungsparameter d den Zusammenhang zwischen dem be- und unbeschädigten Querschnitt (\hat{A}, A_0) durch die Beziehung $d = 1 - \frac{\hat{A}}{A_0}$. Der Zusammenhang zwischen den Spannungen im be- und unbeschädigten Modell wird nun durch $\hat{\sigma} = \frac{\sigma}{1-d}$ ausgedrückt. Lemaitre postulierte durch das Prinzip der Äquivalenz der Dehnungen, dass die Dehnungen in beiden Modellen gleich sind, und damit konnte er den Schluss ziehen, dass wenn d = 0 gilt $\varepsilon = \frac{\sigma}{E}$ und für den Fall, dass 0 < d < 1 gilt $\varepsilon = \frac{\hat{\sigma}}{\hat{E}} = \frac{\sigma}{E(1-d)}$ [21, pp. 13-14].

Das Modell ist in Abaqus implementiert und erfordert zur Definition die Evolution des Schädigungsparameters. Diese kann entweder durch einen iterativen FEM-Prozess erfolgen oder durch eine Abfolge von Be- und Entlastungen in einem Zugversuch, um die Veränderung des Elastizitätsmoduls aufzunehmen [21, p. 22].

2.5 Das GTN-Modell

Das GTN-Modell ist ein mikromechanisch basiertes Schädigungsmodell, welches in der Lage ist, die Entfestigung von Materialien durch die Entwicklung des Hohlraumvolumens bis zum Bruch darzustellen. In zahlreichen Studien kam dieses gängige Modell bereits zum Einsatz. Basierend auf den Arbeiten von Gursson, Tvergaard und Needlemann rührt auch dessen Namen her.

Gursson führte zunächst eine Untersuchung zum Einfluss der Entwicklung des Hohlraumvolumens auf das Entfestigungsverhalten des Materials durch. Er schlug eine Fließfunktion vor, welches das Hohlraumvolumen mit den deviatorischen und hydrostatischen Anteilen des Spannungstensors verknüpft. Dabei basierte sein Ansatz auf einer Vereinfachung, dass die Wachstumsrichtung des Hohlraumvolumens homogen und isotrop darlegt. Das Modell war jedoch nicht in der Lage, die Bildung und Koaleszenz der Hohlräume zu beschreiben [22].

Um den abrupten Verlust der Materialtragfähigkeit abzubilden, schlugen Tvergaard und Needelmann eine Funktion vor, die das Wachstum des Hohlraumvolumens beschleunigt, sobald ein kritisches spezifisches Hohlraumvolumen f_c erreicht wird. Schließlich implementierten Chu und Needelmann eine Gauss`sche Normale Verteilung, um die kontinuierliche Nukleation der Hohlräume zu berücksichtigen [13] [22].

Die Fließfunktion des GTN-Modells wird wie folgt ausgedrückt:

$$\varphi(\sigma_{ij}, f, \sigma_f) = \frac{\sigma_{\nu M}^2}{\sigma_f^2} + 2. q_1. f. \cosh\left(\frac{3. q_2. \sigma_h}{2. \sigma_f}\right) - 1 - q_3 f^2 = 0 \qquad \qquad \textbf{Gl. 2-27}$$

Dabei sind q_i konstitutive Parameter, die die Form des Fließkörpers beschreiben. Tvergaard schlug die Werte $q_1 = 1.5$, $q_2 = 1$, $q_3 = q_1^2 = 2.25$ vor basierend auf den Ergebnissen von numerischen Untersuchungen an Materialien mit periodischen Hohlräumen [23]. Während f das Verhältnis zwischen dem Hohlraumvolumen und dem Gesamtvolumen der Domäne widerspiegelt und wird das spezifische Hohlraumvolumen genannt.

Um die Geschwindigkeit der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumen zu steuern, wird die von Tvergaard und Needelman folgende C^0 Funktion verwendet [22] [23]:

$$f\begin{cases} f & f \le f_c \\ f_c + \alpha(f - f_c) & f > f_c \end{cases}$$

$$\alpha = \frac{f_u^* - f_c}{f_f - f_c}$$
Gl. 2-28

Die Funktion weist im ersten Abschnitt vor dem Erreichen des kritischen spezifischen Hohlraumvolumens f_c auf eine gleichmäßige Progression hin, während sich im zweiten Abschnitt die Entwicklung mit dem Faktor α amplifizieren wird, um den rapiden Verlust der Tragfähigkeit des Elements abzubilden (s. Abbildung 2.7). Wenn das spezifische Hohlraumvolumen den Wert f_f erreicht, wird das Element aus dem FEM-Netz entfernt.

Durch die von Gursson getroffene Annahme verändert sich die Geometrie des Hohlraums nicht, sondern es findet lediglich eine homogene Progression des Hohlraumvolumens aufgrund von Nukleation und Wachstum statt (s. Abbildung 2.7) [22].

$$df = df_{nukleation} + df_{wachstum} \qquad \qquad Gl. 2-29$$

Die Wachstumsrate wird in Funktion der volumetrischen plastischen Dehnrate ausgedrückt: [22]

$$df_{wachstum} = (1 - f)d\varepsilon_{ij}{}^{p}\delta_{ij} \qquad \qquad Gl. 2-30$$

Während die Nukleationsrate dem Ansatz folgt: [22]

$$df_{Nukleation} = A_{Gauss} d\varepsilon_{eq} \qquad \qquad Gl. \ 2-31$$

Der Term A_{Gauss} steuert die Intensität der Nukleation und wird durch eine Gauß`sche Normale Verteilung abgebildet: [22]

$$A_{Gauss} = \frac{f_n}{S_n \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_{eq} - \varepsilon_n}{S_n}\right)^2\right] \qquad \qquad Gl. \ 2-32$$

Dabei ist f_n das zu induzierende spezifische Hohlraumvolumen, demgegenüber ε_n und S_n jeweils der Median und die Standardabweichung sind, und steuern während der gesamten Simulation die Nukleation.



Abbildung 2.7: Einfluss der Koaleszenz auf der Variation des spezifischen Hohlraumvolumens sowie der Spannungs-Dehnungskurve. [22] Unten: Homogenisierung der Nukleation und des Wachstums zwischen zwei Zeitpunkten. [22]

2.6 Wasserstoffversprödung

Der Schaden, der durch die Interaktion von Wasserstoff mit metallischen Werkstoffen entsteht, ist allgemein als Wasserstoffversprödung bekannt. Dabei wird die Duktilität des Materials beeinträchtigt und der Widerstand gegen Rissbildung degradiert. Im Hinblick auf die Abnahme der Fließspannung und Einschnürung ist dieses Phänomen ersichtlich.

Die Entstehung der Wasserstoffversprödung wurde in der Fachliteratur in drei Klassen kategorisiert [24]:

- Hydrogene Environment Embrittlement (HEE).
- Internal Hydrogene Embrittlement (IHE).
- Hydrogene Reaction Embrittlment (HRE)

In der ersten Klasse (HEE) findet eine Kombination aus äußerer Belastung und der Aufnahme von Wasserstoff im gasförmigen Zustand statt. In der Nähe von scharfen Kerben und Oberflächendefekte kommt es zur Rissbildung, da die Oberfläche durch den Adsorptionsprozess angereichert wird. Währenddessen handelt es sich bei der IHE um eine elektrochemische Wechselwirkung. Die Wasserstoffaufnahme findet hier durch eine Elektrolytlösung statt, wie bspw. beim Galvanisieren oder durch die kathodische Aufladung. Die Wasserstoffatome diffundieren unter der Oberfläche, verbinden sich miteinander und bilden H2-Moleküle. Letztere verzerren das Kristallgitter und initiieren somit Risse unter der Oberfläche. Bei der HRE entsteht die Schädigung durch eine chemische Reaktion, bei der sich die Wasserstoffatome mit anderen Atomen (wie z. B. Kohlestoffatomen) verbinden und Gasmoleküle (wie z. B. Methan) bilden. Letztere verzerren die Kristallgitter und führen zur Werkstoffversprödung [24].

Die Quantifizierung der Wasserstoffschädigung ist eine komplexe Fragestellung und wird von verschiedenen Faktoren beeinflusst wie z. B. die Zeit, die Temperatur sowie der Belastungszustand. Letztere erzeugt durch die hydrostatischen Spannungen volumetrische Dehnungen, die das Kristallgitter aufweiten. Dieser Prozess begünstigt den Diffusionsfluss und sorgt für die Erhöhung der lokalen Wasserstoffkonzentration.

Die Diffusionskonstante des Materials ist ebenfalls eine Temperaturabhängige Größe, sie steigt bei steigenden Temperaturen und sorgt damit für eine höhere Diffusionsrate. Zudem ist sie auch vom Gittertyp des Materials abhängig wie bspw. bei kubisch-raumzentrierten (KRZ) Gittern der Fall ist. Diese weisen aufgrund ihrer höheren Packungsdichte eine stärkere Diffusion auf als kubisch-flächenzentrierte (KFZ) Gitter. [2]

Ein weiterer entscheidender Faktor, der die Menge der Diffusion beeinflusst, sind Gitterfehler, wie z. B. interstitielle Stellen, Versetzungen, Korngrenzen sowie innere mikroskopische Risse etc. (s. Abbildung 2.8). Sie stellen bevorzugte Anlagerungsorte für Wasserstoffatome dar, weil dort niedrige potenzielle Energie herrscht. Diese Orte werden als Wasserstofffallen bezeichnet. [2]

Auf mikroskopischer Ebene wurden seit den 1920er Jahren verschiedene Hypothesen aufgestellt, um den Einfluss der Wasserstoffversprödung auf das Metallgitter und die damit einhergehende Verschlechterung der Werkstoffeigenschaften zu erklären. Eine dieser Hypothesen ist die HEDE-Hypothese, die 1926 von Pfeil vorgestellt wurde. Sie besagt, dass die diffundierten Wasserstoffatome sich in Gitterfehlstellen und an den Korngrenzen vor dem Riss ansammeln und die interatomare Bindung an diesen Stellen durch eine chemische Wechselwirkung mit den Eisenatomen schwächen [2].

Die HELP-Hypothese wurde im Jahr 1972 aufgrund fraktografischer Untersuchungen vorgeschlagen. Dabei wird angenommen, dass die hohe lokale Konzentration von Wasserstoffatomen vor der Rissspitze die Bewegung von Versetzungen fördert. Dies führt zu einer lokalen Verringerung der Fließspannung und einer Erhöhung der plastischen Verformung [2].

Die AIDE-Hypothese wurde von Lynch [2] vorgeschlagen und geht davon aus, dass die Adsorption die Entstehung von Versetzungen an der Oberfläche fördert und zu einer Versprödung führt. Diese bewegen sich irgendwann weniger Atomlagen vor der Rissspitze, ähnlich wie bei der HELP-Hypothese und sorgen für die Schwächung der interatomaren Bindung. [2]. Infolge der AIDE-Hypothese können quasi-Sprödbruch, sowie H-induzierte inter-oder transkristaline Bruchstrukturen erscheinen [25, p. 21]



Abbildung 2.8 Qualitative Darstellung von Gitterfehlern, die die Eindringung von Wasserstoff begünstigen [2]

3 Kalibrierung des GTN-Modells und FEM-Simulation

3.1 Literaturreview zur Kalibrierung des GTN-Modells

Auf der Suche nach einer Methode zur Kalibrierung des GTN-Parameters wurden zahlreiche Ansätze identifiziert, die unterschiedliche Methoden verfolgen. Nach gründlicher Recherche kann darauf hingewiesen werden, dass derzeit keine etablierte Standardmethode existiert.

In seiner Studie untersuchte Zhang [26] anhand einer Sensitivitätsanalyse den Einfluss des anfänglichen (f_0), Nukleations- (f_n) und kritischen (f_c) spezifischen Hohlraumvolumens auf der Spannungs-Dehnungskurve einer zylindrischen ungekerbten, einer gekerbten und einer CT-Probe. Die konstitutiven Parameter $q_1 = 1.5$, $q_2 = 1$ und $q_3 = q_1^2$ wurden gemäß der Studie von Tvergaard et al. [23] festgelegt, während der Median ε_n und die Standardabweichung S_n der Gauss`schen Verteilung auf 0.3 und 0.1 gesetzt wurden. Die Studie erklärte die Wahl dieser Parameter aufgrund deren häufigen Verwendung in den FEM-Berechnungen. [26]

Während der Anpassung der f_0 , f_n und f_c Parameter wurde festgestellt, dass deren Einfluss von der Triaxialität abhängig ist. Bei der zylindrischen ungekerbten Zugprobe wurden sechs unterschiedliche Parametersätze identifiziert, die denselben Verlauf der Spannungs-Dehnungskurve belegen. Erst als die Parametersätze bei der gekerbten und der CT-Probe angewendet wurden, traf ein Unterschied auf. Der Autor erwähnte, dass die Proben mit geringer Triaxialität weniger sensibel auf die Parameteränderung reagieren. Die Ergebnisse wurden am Ende bestätigt, anhand der Anwendung der Parametersätze bei zwei Zellmodellen mit Triaxialitätswerten von 0.58 und 2, deren Ergebnisse in Abbildung 3.1 dargestellt sind [26]

$q_1 = 1.5; q_2 = 1; q_3 = q_1^2; \varepsilon_n = 0.3; S_n = 0.1$								
Parametersatz	f_0	f_{n}	fc	Parametersatz	f_0	f_{n}	fc	
F01	0.0005	0.0	0.0046	FN1	0.0	0.00075	0.0036	
F02	0.001	0.0	0.009	FN2	0.0	0.0015	0.007	
F03	0.002	0.0	0.018	FN3	0.0	0.003	0.014	

Tabelle 3-1 die.	, von Zhang	untersuchte Nukleat	ionsparameter. [2	26]
	,			



Abbildung 3.1:Einfluss der f_0 , f_n und fc auf der Spannungs-Dehnungskurve eines Zellmodells bei Links: einer Triaxialität von 0.58; **Rechts** einer Triaxialität von 2 [26]

In der Studie von Kiran et al. [27] wurde die Kalibrierung des Materialverhaltens eines Baustahls von Typ ASTM A992 anhand des GTN-Modells durchgeführt. Zu diesen Zweck wurden vier proben mit unterschiedlichen Anfangstriaxialitätswerten verwendet und variierten zwischen 0.33 und 1.05. Die Fließkurve wurde nach der maximalen Festigkeit linear extrapoliert und die FEM-Modelle wurden mit bilinearen rotationssymmetrischen Elementen konstruiert. Während der Kalibrierung wurden die konstitutiven Parameter q_1 und q_2 aus der Studie von Tvergaard et al. [23] übernommen. Währenddessen wurde das anfängliche spezifische Hohlraumvolumen und die Standardabweichung der Gauss'schen Verteilung jeweils auf 0 und 0.05 gesetzt. In der Studie wurde festgestellt, dass die Wahl der restlichen Parameter nicht eindeutig sein kann. Die Nukleationsparameter könnten klein gewählt werden, damit entstehen die Hohlräume früh und haben genug Zeit während der Simulation zu wachsen. Oder eine zweite Möglichkeit wäre die Wahl von hohen Nukleationsparameter, damit würden die Hohlräume später entstehen dafür aber schneller wachsen. In der Tat haben die Autoren eine Parameterstudie durchgeführt und konnten einen exponentiellen Zusammenhang zwischen dem Median der Gauss'schen Verteilung ε_n und dem Parameter f_n feststellen. Um die Problematik der Mehrdeutigkeit der Nukleationsparameter zu umgehen, wurde ein Vergleich der experimentellen und der FEM-Ergebnisse einer gekerbten Probe durchgeführt, dessen verwendetes Materialverhalten der von-Mieses Plastizität unterlag. In dem Moment, wo sich die zwei Kurven voneinander distanzieren, wurde das ε_n Parameter bestimmt. Die Ermittlung des f_n Parameters erfolgte aus dem bereitgestellten exponentiellen Zusammenhang. Abschließend wurden , f_c und f_f identifiziert, die für den rapiden Verlust der Tragfähigkeit der Zugprobe zuständig sind. Die Anpassung erfolgte subjektiv durch den Vergleich zwischen FEM- und Laborergebnissen mittels einer Brute-Force-Methode. Zum Schluss wurde ein interessanter Aspekt erwähnt, nämlich die Abhängigkeit des f_f Werts (spezifische Hohlraumvolumen beim Bruch) von der Elementgröße. Es wurde festgestellt, dass der Wert des f_f Parameters sinkt, wenn das FEM-Netz grob ist und steigt, wenn das FEM-Netz relativ fein ist [27].

In der Studie von Peng et al. [28] wurde das GTN-Modell mithilfe von fraktographischen und FEM-Untersuchungen kalibriert. Die Bestimmung der Parameter f_0 , f_c und f_f erfolgte durch den Einsatz eines KEYENCE VHX700 FC Mikroskops und einer Bildbearbeitungssoftware. Das anfängliche Hohlraumvolumen f_0 wurde vor der Belastung gemessen, während die Parameter f_c und f_f durch kontinuierliche Überwachung der Entwicklung des Hohlraumvolumens in verschiedenen Phasen des Zugversuchs identifiziert wurden. Der Zeitpunkt der Koaleszenz wurde ermittelt, als die wahre Spannungs-Dehnungskurve ihr Maximum erreichte [28].

Die Ermittlung von ε_n , S_n und f_n erfolgte auch ähnlich wie bei Kiran et al [27] anhand eines Brute Force Ansatzes. Insgesamt wurden 27 verschiedene Kombinationen untersucht und die optimalen Ergebnisse wurden durch einen direkten Vergleich zwischen FEM und Laborergebnissen identifiziert. Der Fehler variierte in dieser Studie zwischen 9.74 % und 10.47 % [28].

Es wurde allerdings in dieser Arbeit nicht erwähnt, wie die Fließkurve extrapoliert wurde

Zhang et al. [29] etablierten eine Korrelation zwischen dem Lemaitre und dem GTN-Modell, hier wurde argumentiert, dass die Quantifizierung des Hohlraumvolumens anhand von Bildbearbeitungssoftware, manchmal subjektiv sein kann, weil sie von der Intensität der Farbfilter abhängig ist, die wiederum als Benutzereingabe stattfindet. Der Zusammenhang zwischen dem Lemaitre und dem GTN-Model kann durch einen sphärischen Hohlraum mit einem Radius r in einem Würfel und dessen Länge L vorgestellt werden. Das spezifische Hohlraumvolumen beträgt damit $f = \frac{Hohlraumvol}{Würfelvol} = \frac{\pi}{6} \left(\frac{r}{L}\right)^3$, hingegen beträgt das Verhalten zwischen dem beschädigten und unbeschädigten Querschnitt laut Lemaitre $d = 1 - \frac{E_{eff}}{E_0} = 1 - \frac{E_{eff}}{E_0}$

 $\frac{\hat{A}}{A_0} = \frac{\pi}{4} \left(\frac{r}{L}\right)^2$. Der Zusammenhang zwischen dem Schädigungsparameter *d* und das spezifische Hohlraumvolumen *f* lautet $f = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{d}{\pi}\right)^{3/2}$. Basierend auf dieser Betrachtung wurde anhand einer einzigen Zugprobe eine Serie von Belastungen und Entlastungen durchgeführt, um die Variation des E-Moduls aufzunehmen und am Ende die Evolution der Hohlräume zu ermitteln [29].

Die Kalibrierung des GTN-Modells wurde wie folgt strukturiert:

Zunächst wurden die Parameter q_1 und q_2 wie üblich gewählt. Die Hohlraumevolutionsparameter ε_n , S_n und f_n wurden dann durch eine iterative Schleife so angepasst, dass das spezifische Hohlraumvolumen bei jedem Stadion der Spannungs-Dehnungskurve der Änderung des E-Moduls entspricht. Während der Schleife wurde der Toleranzwert zwischen den FEM- und Laborergebnissen berechnet. Falls dieser Toleranzwert weiterhin größer als eine vorgegebene Grenze blieb, wurden die Parameter q_1 und q_2 modifiziert, und die Schleife wurde erneut gestartet. Nach der Bestimmung der konstitutiven und Nukleationsparameter wurden die Bruchparameter f_c und f_f anhand von gekerbten Proben und einer Ct-Probe angepasst [29].

In der Studie von Achouri et al. [14] wurde eine modifizierte Version des GTN-Modells verwendet, um die Schädigung bei geringerer Triaxialität präziser zu beschreiben. Das klassische GTN-Modell vernachlässigt bei dominanter Schubbelastung das Wachstum der Hohlräume, wodurch der Bruchpunkt überschätzt wird. Zu diesem Zweck erfolgte die Kalibrierung des modifizierten GTN-Modells anhand von Fraktografie und FEM-Berechnungen, um insgesamt 11 Parameter anzupassen (8 Parameter für das klassische GTN-Modell und 3 Parameter, um den Effekt der geringen Triaxialität zu berücksichtigen). Der Vergleich zwischen den Laborergebnissen und den FEM-Berechnungen zeigte eine relativ hohe Übereinstimmung, da der Fehler in der Bruchdehnung bei verschiedenen Geometrien zwischen 0.04 % und 1.5 % variierte. Nichtsdestotrotz wurde darauf hingewiesen, dass der ermittelte Parametersatz nicht eindeutig sei und bei vorgegebenen Geometrien das physikalische Verhalten, aufgrund der starken Kopplung zwischen den Parametern, nicht genau wiedergeben werden kann. [14]

Ein zusätzlich nennenswerter Aspekt in dieser Studie, sind die mikroskopischen Bilder, die eine Vorstellung des Zusammenhangs zwischen der Entwicklung der Hohlräume, der Morphologie der Bruchfläche und der Art der Belastung bereitstellt.

In gekerbten Zugproben zeigt sich eine höhere Triaxialität im Vergleich zu ungekerbten Proben. Dies ist in Abbildungen 3.2 b1 und 3.2 b2 ersichtlich, indem der Bereich um den Mikroriss bei der gekerbten Probe dichter und mit relativ größeren Hohlräumen besiedelt ist im Vergleich zur ungekerbten Probe (s. Abbildungen 3.2 a). Die ungekerbte Probe weist zwei voneinander unterschiedliche Materialtrennungsmodi auf. Der erste Modus befindet sich in der Mitte der Probe, wie in Abbildung 3.2 a1 dargestellt ist und enthält Spuren von Hohlräumen aufgrund der hohen Triaxialität. Allerdings ist der Bruch weniger stark ausgeprägt als bei der gekerbten Probe. Dagegen wird der zweite Materialtrennmodus durch eine Shear Lippe gebildet und enthält kleine Hohlräume, die in 45 Grad Winkel orientiert sind (s. Abbildung 3.2 a2). Bei der auf Schub getesteten Probe hingegen, wie in Abbildung 3.2 c1 zeigt, ist die Triaxialität gering. Daher entstehen die Hohlräume, wie bei der Shear Lippe der ungekerbten Probe, in Richtung der maximalen Schubspannung, die am Ende zu einer Materialtrennung entlang dieser führt. [14]



Abbildung 3.2 Der Einfluss der Triaxialität auf die Topologie der Bruchfläche und Hohlraumformation [14]

3.2 Literaturreview zur Wasserstoffschädigung mittels FEM-Methode

In letzter Zeit hat die Modellierung der Wasserstoffversprödung mithilfe der FEM-Methode erheblich an Aufmerksamkeit gewonnen. Dies zeigt sich deutlich durch die Vielzahl von Studien und Ansätzen, die darauf abzielen, dieses Phänomen numerisch besser zu verstehen. Dieser Abschnitt konzentriert sich ausschließlich auf Studien, die das GTN-Modell verwendet haben, um die Wasserstoffschädigung zu quantifizieren, sowie den Einfluss von Wasserstoff auf die Bruchfläche der Zugproben zu untersuchen.

In der Studie von Adisapoor et al. [30] wurde festgestellt, dass der lokale Wasserstoffgehalt im Material die Duktilität, sowie den Bruchmechanismus beeinflusst. Diese Beobachtung stützte sich auf den Ergebnissen des Zugversuchs von vier Testgruppen, die unter verschiedenen Testbedingungen untersucht wurden. Die erste Gruppe wurde unter Vakuum geprüft; die zweite gasförmig mit Wasserstoff, anhand der IHPC -Technologie (eng. In Situ Hydrogene Plasma Charging) beaufschlagt; die dritte Gruppe wurde in einer Elektrolytlösung kathodisch mit Wasserstoff durch die EEHC-Technologie (engl. Ex Situ Elektrochemical Hydrogene Charging) beladen, während die letzte Gruppe durch Ex+In-Situ mit Wasserstoff beladen und bis zum Bruch gezogen wurde. Die Spannungs-Dehnungskurven der vier Gruppe zeigten eine minimale Abnahme der Fließgrenze, sowie der maximalen Festigkeit. Jedoch fand eine sehr starke Bruchdehnung ihre Beeinträchtigung in der statt, Intensität war von Wasserstoffkonzentration abhängig. Die In-Situ beladene Gruppe hat eine Abnahme in der Bruchdehnung von 11 % im Vergleich zu den normalen Proben (Vakuum getesteten Proben), gezeigt. Währenddessen zeigte die Ex+In-Situ Gruppe eine Abnahme von 70 % bei der Bruchdehnung, da sie die höchste lokale Wasserstoffkonzentrationen besaß. [30]
Die fraktorgrafischen Bilder zeigten, dass die Intensität der lokalen Wasserstoffkonzentration die Versprödung förderte. Die Bruchfläche der Ex+In-Situ Proben kennzeichneten sich mit einer hohen Ausprägung von inter- und transgranularen Rissen sowie Spaltbrüchen aus. Daraufhin schlussfolgerten die Autoren, dass diese Bruchmorphologie ein direktes Ergebnis des HEDE-Prozesses sei. Bei den Ex-Situ Proben war die Wasserstoffkonzentration kleiner als bei den Ex+In-Situ Proben, welche bei der Bruchfläche zur Entstehung von Hohlraumkoaleszenz führte. Jedoch war die Konzentration von inter- und transgranularen Rissen noch immer dominanter, sodass die Autoren zwar eine Präsenz des HELP-Mechanismus konstatierten, jedoch der HEDE vorherrschend war. Anders verhielt es sich bei den In-Situ Proben, die die geringste Abnahme der Duktilität, sowie die geringste Wasserstoffkonzentration aufwies. Auch hier waren inter- und transgranulare Risse zu sehen, jedoch in geringerem Maße als bei den Ex-Situ Proben. Die Präsenz und Koaleszenz der Hohlräume war hier vorherrschend, welches ausschlaggeben für den HELP-Prozess ist. [30]

Um die Ergebnisse durch die FEM-Methode zu reproduzieren, wurde die Kalibrierung des GTN-Parameters für jede einzelne Gruppe durchgeführt. Durch den Vergleich zwischen den einzelnen kalibrierten Parametern jeder einzelnen Gruppe konnte abschließend der Einfluss der Wasserstoffschädigung sichtbar gemacht werden. Während der Kalibrierung wurden die Standardabweichung S_n bei allen Gruppen auf 0.2 gesetzt und die konstitutiven Parameter q_1 und q_2 jeweils auf 1.3 und 0.86. Die übrigen Parameter wurden anhand einer DOE (Design of Experiment) Methode ermittelt. Der Vergleich zwischen der Ex+In-Situ GTN- und das Vakuum GTN-Modell zeigten, dass die Wasserstoffkonzentration alle Parameter beeinflusste. Als hier anfangsspezifische Hohlraumvolumen Beispiel dienen das f_0 und der Nukleationsparameter f_n , welche beide um fast 30 % stiegen. Das erklärte die Reduktion in der Fließgrenze, der Fließspannung und teilweise die Duktilität. Der Bruchparameter f_c hingegen ist um 60 % gesunken, welches zur Bedeutung hatte, dass die Hohlräume ein kleineres kritisches spezifisches Hohlraumvolumen erreichen müssen, bevor die instabile Phase auftritt. [30]

In der Studie von Takashi et al. [31] wurde die Morphologie von mehreren ungekerbten Zugproben aus 316 L Stahl unter Umgebungs- und Wasserstoffbedingung untersucht. Um den Diffusionsprozess zu etablieren, wurden die Proben für 192 Std. in eine Wasserstoffumgebung gelegt, deren Temperatur 250°C betrug, während der Außendruck 10 MPa erreichte. Die fraktografischen Bilder der Bruchflächen zeigten, dass das Cup-Cone Bruchmuster bei beiden Gruppen vorhanden war. Das bedeutete, dass im Zentrum der Probe eine höhere Triaxialität herrschte als im äußeren Bereich. Diese führte zur Entstehung, zum Wachstum und zur Vereinigung der Hohlräume. Währenddessen war der Bereich der Scherlippen mit kleineren Hohlräumen besiedelt. Zudem hat der Vergleich gezeigt, dass der Bereich der Scherlippen bei den Proben, die in Wasserstoffumgebung platziert wurden, größer war als bei den Proben, die in normale Bedingung getestet wurden. Darauf aufbauend kamen die Autoren zur Schlussfolgerung, dass Wasserstoff den HELP-Mechanismus die Lokalisierung der Schubdeformationen verstärkte, welche wiederum die Entstehung von kleineren Hohlräumen auf einer größeren Fläche begünstigte. [31]

In der Studie von Depreature et al. [16] wurden 12 Zugproben mit vier unterschiedlichen Geometrien in drei Versuchsumgebungen untersucht. Die Geometrien wurden gewählt, damit eine Anfangstriaxialität von 0.33 für ungekerbte Proben bis hin zu 1.12 für eine gekerbte Probe, mit 1.2 Kerb- und 3 mm Querschnittsradius, resultiert. Während die Konzentrationen in den Wasserstoffumgebungen zwischen 0 und 1.09 PPM variierten. Die ermittelten Spannungs-Dehnungskurven haben gezeigt, dass die Wasserstoffkonzentration die maximale Festigkeit geringfügig beeinflusste, jedoch war im Bereich der Bruchdehnung eine spürbare Abnahme zu finden. Letztere wurde sogar weiter beeinflusst, wenn eine hohe Triaxialität vorhanden ist. Die scharf gekerbten Proben in der Wasserstoffumgebung zeigten eine Reduktion von fast 70 % im

Bereich der Bruchdehnung, im Vergleich zu denselben Proben unter normalen Bedingungen. Währenddessen wurde bei den ungekerbten Proben eine Abnahme von 35±14 % registriert. Auf einer fraktografischen Ebene war das Cup-Cone Muster bei den ungekerbten Proben in normalen und unter Wasserstoffbedingungen vorhanden. In beiden Probengruppen kennzeichnete sich der Bereich der hohen Triaxialität durch Hohlräume aus, jedoch nur in der zweiten Gruppe, unter Einfluss von Wasserstoff, war zusätzlich eine Existenz von Spaltbrüchen vorhanden. Zudem wurde auch erwähnt, dass die Scherbruchfläche aufgrund der Wasserstoffdiffusion dominanter war. Durch die Verwendung von Röntgentomographie wurden zwei Kenntnisse gewonnen. Zum einen fördert Wasserstoff die Nukleation der Hohlräume, welche bereits bei einer Dehnung von 0.1 stattfand, im Vergleich zu 0.7 unter normalen Bedingungen (hier wurde nicht erwähnt um welche Dehnung es sich handelte). Zweitens, die Autoren bemerkten, dass die Hohlräume in die laterale Richtung gewachsen sind. Dieses Ereignis hat die Reduktion der Ligamentquerschnittsfläche bewerkstelligt und damit frühere Materialseparation ausgelöst. Basierend auf diesen Erkenntnissen wurde in der Studie eine UMAT-Subroutine verwendet, die in der Lage ist, eine gekoppelte mechanische und Diffusionsberechnung durchzuführen. Dabei war der treibende Faktor für die Diffusion, die Existenz eines hydrostatischen Spannungsgradienten, der die Bewegung der Wasserstoffatome begünstigte. Um die Nukleation der Hohlräume zu beschleunigen, wurde der Parameter ε_n in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration ausgedrückt. Die Kalibrierung erfolgte zuerst unter normalen Bedingungen, durch die Ermittlung der Nukleations- und Bruchparameter, anhand iterativer Vergleiche zwischen den Labor- und FEM-Ergebnissen. Im zweiten Schritt wurden die Degradationsparameter der Wasserstoffschädigung, die für Beschleunigung der Hohlräume zuständig sind, adjustiert. Die FEM-Ergebnisse zeigten eine relativ hohe Übereinstimmung, insbesondere bei den Proben mit hohen Anfangstriaxialitätswerten. Jedoch war die Diskrepanz bei den ungekerbten Proben höher. Die Studie nannte zwei mögliche Ursachen für die Differenz. Das erste Argument ähnelt dem von Achouri et al., nämlich dass das GTN-Modell nur das Wachstum des Hohlraumvolumens infolge von plastischer volumetrischer Dehnung berücksichtigen kann, jedoch nicht dessen Formänderung, welche durch Schubdeformationen hervorgerufen wird. Des Weiteren ist die Koaleszenz infolge von Scherung bei ungekerbten Proben dominanter. Das zweite Argument beruht darauf, dass Wasserstoff das Wachstum von Hohlräumen senkrecht zur Belastungsachse fördert und somit den tragenden Ligamentbereich im Vergleich zum sphärischen Hohlraumwachstum verringerte [16].

3.3 Quasistatische und dynamische Berechnungsmethoden

3.3.1 Das Newton-Raphson Verfahren

Durch nichtlineare Berechnungsmethoden werden die Probleme, die aufgrund des elastoplastischen Materialverhaltens, der Schädigung und der Präsenz von großen Verformungen entstehen, gelöst. Zudem ist die Abzugsrate bei dem vorliegenden Zugversuch vernachlässigbar klein, daher kann die Trägheits-, sowie der gedämpfte Anteil der Bewegungsgleichungsgleichung nicht berücksichtigt werden und damit gilt der Prozess als quasistatisch.

Basierend auf dieser Information, wird das nichtlineare Problem durch die Newton-Raphsons-Methode gelöst. Das Verfahren hat die Charakteristik, dass es iterativ und gradient-basiert ist. Zudem ist die Lösung zu Beginn der Berechnung nicht eindeutig und hängt sehr stark von der Wahl des Startpunktes ab.

Die Lösung des nicht linearen Gleichungssystems wird durch eine inkrementelle Minimierung des Residuums zwischen den äußeren und den inneren Kräften durchgeführt. Zuerst wird, durch eine Taylor Entwicklungsserie, das Residuum an der Stelle u_0 formuliert [10, p. 232].

$$t(u) - F(u) = R(u) = R(u_0) + \frac{\partial R(u)}{\partial u} \bigg|_{u=u_0} (u - u_0) + \sum_{k=2}^n \frac{1}{k!} \frac{\partial R(u)^k}{\partial u} \bigg|_{u=u_0} (u - u_0)^k = 0 \quad Gl. 3-1$$

Dabei werden die Terme höhere Ordnung vernachlässigt [10, p. 232]

$$t(u) - F(u) = R(u) \approx R(u_0) + \frac{\partial R(u)}{\partial u} \Big|_{u=u_0} (u - u_0) \approx 0 \qquad \qquad Gl. 3-2$$

Umformen der Gl. 3-2 nach u liefert [10, p. 232]:

$$u_0 - \left(\frac{\partial R(u)}{\partial u}\Big|_{u=u_0}\right)^{-1} \cdot R(u_0) \approx u \qquad \qquad Gl. 3-3$$

An dieser Stelle bedeutet Gl. 3-3, dass der Schnittpunkt u zwischen den Tangenten der äußeren und inneren Kräfte ermittelt wurde. An der neuen Stelle u wird das Residuum erneut formuliert und der nächste Kandidat wird gesucht. Das Verfahren endet, wenn ein vorprogrammierter Toleranzwert erreicht, wird.

In der Regel wird eine bestimmte Anzahl von Lastschritten oder eine maximale Schrittweite festgelegt. Der Solver versucht daraufhin, auf der Grundlage des Newton-Raphson-Algorithmus, das geplante Lastinkrement zu erreichen. Die Konvergenz in jedem Lastschritt hängt stark von der zuvor erreichten Toleranz ab, da sie den Startpunkt für den nächsten Lastschritt darstellt und von der Konvexität des Problems an diesem Punkt. Das Erhöhen der Anzahl der Lastschritte kann dazu beitragen, die Nichtlinearität genauer abzubilden, garantiert jedoch nicht zwangsläufig die Konvergenz der Berechnung.

Das Kraft-Verschiebungsdiagramm in Zugversuchen bildet einen monotonen Anstieg bis zum Eintreten des Einschnürens ab. Anhand der Materialentfestigung tritt irgendwann bei der Einschnürung ein abfallender Ast auf. Dies führt dazu, dass die Verwendung des Newton-Raphson-Algorithmus mit Kraftsteuerung numerische Probleme hervorruft. Die Ursache dafür, ist die Unrealisierbarkeit der Invertierung der Tangentialsteifigkeitsmatrix, da mindestens ein Eigenwert gleich null ist.



Abbildung 3.3: Darstellung der Funktionsweise des Newton-Raphsons Algorithmus in Anlehnung nach [10, p. 236]

Eine Alternative dazu bietet sich in Form der Bogenlängenmethode (Arc Length) oder der Verwendung des Newton-Raphson-Verfahrens mit Verschiebungssteuerung als Randwertbedingung an. Diese Methode konvergiert auch dann, wenn eine horizontale Tangente erreicht wird, da sie eine steuernde Wirkung aufweist [32, p. 80], solange die Verschiebung ihre Richtung beibehält.

Der Abaqus Solver stellt diverse Steuerungsmöglichkeiten bereit, darunter die Wahl der Solver Art (direkt oder iterativ). Damit wird angegeben, ob die Lösung mit dem Gauss`schenVerfahren oder dem konjugierten Gradientenverfahren erfolgt. In dem beschriebenen Zusammenhang wird die direkte Methode gewählt, obwohl sie zeitintensiver ist. Dies ist zurückzuführen auf die deutliche Verlangsamung der iterativen Methode bei schlecht konditionierten Matrizen, sowie bei großen Verformungen. Zudem ist die iterative Methode nicht in der Lage, unsymmetrische Matrizen zu behandeln [32, pp. 15-16].

Da im Laufe der Simulation Druck angebracht wird, ist die Selektion der unsymmetrischen Option daher empfehlenswert. Jener Druck ist eine verformungsabhängige Belastung und besitzt damit keine Potenzialeigenschaften. Mit dieser Option wird sichergestellt, dass der Solver die Lasttangenten unsymmetrisch behandelt, um ein besseres Konvergenzverhalten zu erzielen [32, p. 16].

Während des Simulationsverlaufs und bei Erreichung des Einschnürbereichs, wird die Berechnung aufgrund großer Verformungen oft instabil. Aus diesem Grund empfiehlt die Abaqus Dokumentation die Anwendung von Stabilisierungsmaßnahmen [33]. Bei Aktivierung dieser Funktion wird vom Solver künstliche Dämpfung in Bereichen hinzugefügt, in denen, bedingt durch Entfestigung, große Verschiebungen auftreten. So kann gewährleistet werden, dass ein Teil der potenziellen Energie durch die Dämpfung dissipieret [32, p. 22] [33]. Darüber hinaus reduziert der Solver, wenn es nötig ist, die Schrittweite, um sicherzustellen, dass der Prozess ausreichend Zeit hat, damit keine großen Geschwindigkeiten auftreten [33].

Basierend auf der Konvexität des Problems organisiert der Solver die Anzahl der Schritte zur Lösung des aktuellen Lastinkrements. Wenn jedoch der Solver innerhalb von 16 Iterationen keine Lösung findet, wird die Suche im aktuellen Lastinkrement abgebrochen und mit 25 % der geplanten Schrittweite erneut gestartet. Sollte die Lösung immer noch nicht konvergieren, wiederholt der Solver diesen Prozess so lange, bis die minimale Schrittweite unterschritten wird oder die Wiederholungsversuche 5-mal durchgeführt wurden [33].



Abbildung 3.4: Einfluss des Startpunktes auf dem Konvergenzverhalten des Problems in Anlehnung an [32, p. 7]

Um dem Solver mehr Gelegenheiten zu geben, eine Lösung zu finden wurde die Anzahl der Wiederholungen auf 20 festgelegt. Diese Option kann jedoch bedeuten, dass mehr CPU-Zeit verloren geht, wenn der Konvergenzbereich sehr nahe am aktuellen Punkt liegt, der Solver indessen in einem stark nichtlinearen Bereich operiert (s. Abbildung 3.4).

3.3.2 Nicht lineare dynamische Zeitintegration

Die Lösung der Bewegungsgleichung kann durch zwei Ansätze erfolgen; durch die analytischen oder die numerischen Methoden. Erstere sind für diese Arbeit nicht von großem Interesse und werden daher kurz skizziert. Die analytischen Methoden liefern Lösungen in der geschlossenen Form, die mathematisch exakt sind. Basierend auf der Modalanalyse oder der Fast-Fourier-Transformation können diese verwendet werden, um die dynamische Antwort eines FEM-Modells zu untersuchen., jedoch beschränken sich solche Methoden auf lineare Modelle.

Die numerischen Integrationsmethoden hingegen sind allgemeiner und lösen die Bewegungsgleichung im Zeitbereich auf. In diesem Gebiet treten wiederum zwei Methoden ein, die implizite und die explizite Zeitintegration.

Für kurzzeitige dynamische Vorgänge wie beispielsweise Impact oder große Verformungen sind die impliziten Integrationsmethoden oft weniger geeignet. Dies liegt daran, dass in der Gleichgewichtsgleichung zwei Unbekannte vorhanden sind. Zum einen der gesuchte Zustand, wie bspw. die Verschiebung, und zum anderen der Zeitpunkt, in dem dieser Zustand erreicht wird. Die Ermittlung der zwei Variablen erfolgt durch die Invertierung der Steifigkeitsmatrix, welche zeitaufwändig sein kann.

Unter der Annahme, dass die Änderung der Verschiebung und Geschwindigkeit zwischen zwei Zeitpunkten linear verläuft, könnte die Verwendung der Zentraldifferenzen-Methode zur Herstellung einer expliziten Lösung der Bewegungsgleichung dienen. [10, p. 251]

Die Beschleunigung sowie die Geschwindigkeit lassen sich als eine Steigung darstellen, die durch Vorwärts- und Rückwärtsdifferenzieren ausgedrückt werden kann. [10, p. 251]

$$v_{n} = \frac{1}{2} \left(v_{n}^{vorw} + v_{n}^{rück} \right) = \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2.\,\Delta t}$$

$$a_{n} = \frac{\left(v_{n}^{vorw} + v_{n}^{rück} \right)}{\Delta t} = \frac{v_{n+1/2} - v_{n-1/2}}{\Delta t} \qquad Gl. 3-4$$

$$a_{n} = \frac{u_{n-1} - 2.\,u_{n} + u_{n+1}}{\Delta t^{2}}$$

Mit der Gl. 3-4 wurde die Beschleunigung in Funktion der unbekannten Verschiebungen ausgedrückt. Wenn jetzt jene Gleichung in die allgemeine Bewegungsgleichung (Gl. 3-5) eingefügt wird, können daraufhin die unbekannten und bekannten Glieder voneinander getrennt werden. Dies wird als explizite Methode bezeichnet. [10, p. 253].

$$M. a + t(u_n) = F_n$$

$$\frac{1}{\Delta t^2} \cdot M. (u_{n-1} - 2.u_n + u_{n+1}) = F_n - t(u_n)$$

$$\frac{1}{\Delta t^2} \cdot M. u_{n+1} = F_n - t(u_n) - \frac{1}{\Delta t^2} M. (u_{n-1} - 2.u_n)$$
Gl. 3-5

Die unbekannten Verschiebungen werden durch Invertieren der Massenmatrix **M** ermittelt. Durch Verwendung der Lumped-Matrix-Formulierung steigert die Effizienz, da sie die Diagonalisierung ermöglicht und das Gleichgewichtssystem entkoppelt. Dies schafft eine Möglichkeit der Invertierung durch Bildung der Kehrwerte der Diagonalelemente. So wird eine Zeitersparnis pro Zeitschritt gewährleistet [10, p. 254].

Durch die Annahme, dass die Variation der Geschwindigkeit und Verschiebung in einem Zeitinkrement linear verläuft, ist die explizite Zeitintegration bedingt stabil. Die Stabilität hängt maßgeblich von der Größe des Zeitinkrements ab. Für jedes Zeitinkrement wird ein Diskretisierungsfehler eingeführt, der wiederum mit der Größe des Zeitinkrements in Zusammenhang steht. Dieser Fehler kumuliert mit den Fehlern der vorherigen Zeitinkremente und kann letztendlich das physikalische Verhalten des Modells beeinflussen.

Eine weitere mögliche Fehlerquelle, die die Simulation beeinträchtigen kann, sind Rundungsfehler, die auftreten, wenn mit einer begrenzten Anzahl von Nachkommastellen gerechnet wird. Aus diesem Grund bietet Abaqus die Option "Double Precision" an. Diese Option erfordert zwar mehr Rechenleistung, sorgt jedoch für eine höhere Genauigkeit, insbesondere, da der zu untersuchende Bereich in dieser Arbeit der letzte Bereich in der Spannungs-Dehnungskurve ist. Daher wird diese Option ausgewählt.

Der Solver berechnet auf Basis des Courant-Friedrich-Lewy Stabilitätskriteriums das kritische Zeitinkrement. Unter diesem verhält sich die Simulation stabil. Wird das Zeitinkrement jedoch überschritten, wird diese instabil. Das Kriterium stellt die Schallgeschwindigkeit C in Abhängigkeit von der Zeit und die charakteristische Länge des Elements dar. Das Ergebnis aus diesem Zusammenhang liefert den maximalen benötigten Zeitintervall, den eine Schallwelle braucht, um ein Element durchlaufen zu können.

Wenn das eingegebene Zeitinkrement größer ist als das vom Solver ermittelte minimale Zeitinkrement, besteht die Gefahr, dass die Änderung der Spannung und Verzerrungen nicht in der Berechnung mitberücksichtigt werden [10, p. 259].

Das minimale Zeitinkrement in der FEM-Simulation wird wie folgt ausgedrückt [10, p. 259]

Dabei ist l_{char} die kleinste Länge (Breite, Länge, Diagonale) in einem Element, dessen maximale Eigenfrequenz die größte im gesamten FEM-Model ist [10, p. 259]. Während die Schallgeschwindigkeit bei den 3D-Elementen sich aus dem Verhältnis zwischen dem Elastizitätsmodul, der Dichte und der Poissonzahl schreiben lässt:

Bei feinen FEM-Netzen kann das kritische Zeitinkrement sehr klein sein, sodass die gesamte Berechnung in einer unrealistischen Zeitdauer durchgeführt werden müsste. Aus diesem Grund wird die Technik der Masseskalierung verwendet. Dabei wird die Dichte des Materials erhöht, damit die Schallgeschwindigkeit reduziert werden kann (Gl.3-7). Dies wiederum führt zur Erhöhung des kritischen Zeitinkrements (Gl.3-6), welche die Berechnungszeit reduziert. Es ist allerdings von großer Bedeutung am Ende der Simulation die Veränderung der kinetischen Energie des Models zu prüfen. Denn sie repräsentiert ein direktes Ergebnis der Masseskalierung und kann sich auf das Verhalten des FEM-Modells nachteilig auswirken. [10, p. 263]

3.4 Das FEM-Modell

Die untersuchte Zugprobe folgt dem klassischen Zugprobendesign, mit einem kreisförmigen Querschnitt, wie in Abbildung 3.5 dargestellt. Der Durchmesse D_0 des Querschnitts beträgt 5 mm. Gemäß DIN 50125 beträgt die Messlänge l_0 dort wo der Extensometer platziert wird, mindestens das Fünffache des Querschnittsdurchmessers. Währenddessen beträgt die Parallellänge l_c mindestens das Sechsfache des Querschnittsdurchmessers. Die Schulter zwischen dem Kopf und dem Ende der parallelen Länge weist einen Radius von 6 mm auf. Schließlich hat der Kopf der Probe einen Durchmesser von 10 mm und eine Länge von 15 mm [5].

Das verwendete Material ist ein austenitischer Stahl des Typs 316TI mit hoher Korrosionsbeständigkeit, Festigkeit und Duktilität, der durch Titanbeimischungen weiter verstärkt wird. Die Werkstoffdaten wurden in Form einer technischen Spannungs-Dehnungskurve bereitgestellt und die Brucheinschnürung beträgt 74 %.



Abbildung 3.5: Technisches Zeichen der Vollprobe

Die technische Spannungs-Dehnungskurve wird als Eingabe in einem Matlab-Skript definiert, und gemäß DIN EN ISO 68921-1 werden die, für die Simulation erforderlichen Materialeigenschaften ermittelt. Das Elastizitätsmodul wurde als 195596 MPa identifiziert, die Fließgrenze betrug 419 MPa, während die maximale Spannung einen Wert von 644 MPa erreichte. Um das elastoplastische Materialverhalten zu modellieren, ist die Fließkurve erforderlich. Zuerst konvertiert das Matlab-Skript die technische Spannungs-Dehnungskurve in die wahre Spannungs-Dehnungskurve. Die wahre Dehnung bzw. Hencky Dehnung, auch in Abaqus logarithmische Dehnung genannt, bezieht sich auf die aktuelle Konfiguration und kann bei 1D Spannungszustand wie folgt ausgedrückt werden:

$$\varepsilon_{wahr} = \int_{l_0}^{l} \frac{dl}{l} = ln\left(\frac{l}{l_0}\right) = ln(\varepsilon_{tech} + 1) \qquad \qquad Gl. 3-8$$

Die wahre Spannung bzw. Cauchy Spannung ist per Definition Kraft pro Fläche, dabei gehört die Fläche zur aktuellen Konfiguration:

$$\sigma_{wahr} = \frac{F}{A} = \frac{F}{A_0} \cdot \frac{l}{l_0} = \sigma_{tech} \cdot (\varepsilon_{tech} + 1)$$
 Gl. 3-9

Nach Ermittlung der wahren Spannungs-Dehnungskurve, werden die Spannungswerte ab dem Einsetzen des Fließens, bis zur maximalen Festigkeit erfasst. Die Berechnung der entsprechenden plastischen Dehnungen, wird anhand des elastischen Anteils gemäß Gl 2-10 abgezogen. Anschließend werden die Spannungswerte nachträglich gefiltert, da die Kurve während der Verfestigung bisweilen einen zickzackartigen Verlauf aufweist. Dies deutet darauf hin, dass eine minimale Entfestigung vorhanden ist. Jedoch führt dies auf Seiten der Simulation zu einer Fehlermeldung mit anschließendem Abbruch der Berechnung. Abschließend wird im Einschnürbereich gemäß Gl.2-22 und Gl.2.23 eine lineare, eine Swift- und eine Hollomon-Extrapolation vorgeschlagen wie sie in Abbildung 3.6 zu sehen ist. Nun werden die Materialdaten für ein elastoplastisches Verhalten, das der von-Mieses Plastizität unterliegt, organisiert.

Wie in Abbildung 3.5 zu sehen, ist die Geometrie rotationssymmetrisch. Das Modell enthält keine Imperfektionen und zudem ist das Material isotrop. Im Laufe der Einschnürung wird angenommen, dass die quer zur Belastung entstehende Verformung gleichmäßig bleibt, daher wird das Modell in 2D, mittels rotationssymmetrischem FEM-Netzes abgebildet.

Rotationssymmetrische Elemente besitzen zwei translatorische Freiheitsgraden in einem zylindrischen Koordinatensystem (r, θ, y) pro Knoten. Diese Charakteristik stellt einen Vorteil gegenüber Volumenelementen dar, weil sich dadurch der Rechenaufwand reduzieren kann. Die

translatorischen Freiheitsgeraden generieren pro Knoten vier Verzerrungen, nämlich die axiale Dehnung $\varepsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y}$, die radiale Dehnung $\varepsilon_y = \frac{\partial u}{\partial r}$, die Tangentiale Dehnung $\varepsilon_{\theta} = \frac{\partial v}{\partial y}$ und abschließend die Gleitung $\gamma_{ry} = \gamma_{yr} = \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial y}$. Die konstitutive Gleichung zwischen der Dehnung und der Spannung kann, wie folgt ausgedrückt werden:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{y} \\ \sigma_{r} \\ \sigma_{\theta} \\ \tau_{ry} \end{bmatrix} = \frac{E}{(1+\vartheta)(1-2\vartheta)} \begin{bmatrix} 1-\vartheta & \vartheta & \vartheta & 0 \\ \vartheta & 1-\vartheta & \vartheta & 0 \\ \vartheta & \vartheta & 1-\vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\vartheta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{y} \\ \varepsilon_{r} \\ \varepsilon_{\theta} \\ \gamma_{ry} \end{bmatrix}$$
Gl. 3-10



Abbildung 3.6: Extrapolationsmodelle im Einschnürbereich

Die zusätzliche quer zur Zugrichtung vorhandene Symmetrie kann benutzt werden, um ein Viertel des 2D Modells zu simulieren und damit den Rechenaufwand weiter reduzieren

Da die Kalibrierung des Modells in Abaqus Standard, sowie in Abaqus Explicit stattfindet, werden zwei verschiedene Randbedingungen definiert, um die Probe zu lagern. In Abaqus Standard, wo die quasistatische Berechnung durchgeführt wird, ist die axiale Verschiebung der unteren Seite des Modells durch ein axiales Rolllager blockiert $(u_y(y=0)=0)$ Demgegenüber wird die Rotationsachse des Modells durch eine radiale Lagerung blockiert $(u_r(r=0)=0)$ wie in Abbildung 3.7 zu sehen ist. Um die Probe zu ziehen, wird ein Master-Knoten oberhalb des Modells definiert und mit der Außenkante des Kopfes der Probe (Slave), anhand einer kinematischen Kopplung (RBE 2) verbunden. Auf dem Master Knoten wird eine axiale "Remote Displacement" u_{Master} angebracht, derweil werden die anderen translatorischen und rotatorischen Freiheitsgeraden blockiert, um die starre Körperbewegung zu verhindern.

In der expliziten Umgebung hingegen wird anstelle von Verschiebungen mit Geschwindigkeiten gearbeitet. Die Geschwindigkeiten an der Unterseite sowie an der Rotationsachse werden auf null gesetzt, wohingegen der Master-Knoten mit einer Geschwindigkeit v_{Master} in der axialen Richtung gezogen wird. Diese Geschwindigkeit wird innerhalb von 0.1 Sek auf das Maximum erhöht und bleibt bis zum Ende der Simulation konstant. Dies wird durch die Verwendung einer "Smooth-Step"-Funktion durchgeführt, um Oszillationen aufgrund der Änderung der Geschwindigkeit zu vermeiden. Ebenfalls werden

hier die rotatorische und die quer zur Zugrichtung translatorische Geschwindigkeit auf null gesetzt.



Abbildung 3.7: Das FEM-Modell der Vollprobe: Links Geometrie; Rechts FEM-Netz

Vor dem Beginn der Vernetzung ist es erforderlich, das Modell auf singuläre Stellen zu überprüfen. Singuläre Stellen sind mathematische Artefakte, die unrealistische physikalische Ergebnisse verursachen können, wie bspw. Spannungsspitzen oder Verformungen, die sich nicht zu einer Grenze konvergieren lassen, sobald das Netz verfeinert wird. Solche singulären Stellen können geometriebedingt sein, wie scharfe Kerben ohne Krümmungsradien oder in 2D-Kontinuum-Modellen, Winkel, die über 60 Grad und fest eingespannt sind etc.

In vorliegendem Modell sind die Unterseite und die Rotationsachse durch Rolllager befestigt, daher wird hier keine Singularität erwartet. Neben geometrischen Aspekten können Singularitäten auch aufgrund von Belastungen auftreten, bspw. durch Knotenkräfte, Linienlasten oder am Rand von Lasteinleitungselementen, wie dem in diesem Fall verwendeten RBE2-Element. Jedoch liegt diese Singularität weit entfernt vom zu untersuchenden Bereich, sodass sie kaum einen Einfluss auf die resultierenden Ergebnisse hat

Während der Simulation ist der Spannungszustand im Messbereich sowohl im linearen als auch im Bereich der Gleichmaßdehnung eindimensional. Nachdem die maximale Festigkeit erreicht wurde, konzentrieren sich die Verformungen lokal und die Probe schnürt ein. Basierend auf dieser Information erfolgt eine grobe Vernetzung im Kopf- und Schulterbereich, während die Oberseite des Messbereichs feiner vernetzt wird (s. Abbildung 3.7). Die Unterseite des Messbereichs wird dichter vernetzt, um die physikalischen Felder während der Einschnürung optimal darzustellen. Im Messbereich wird auf die Verwendung eines Transition-Netzes verzichtet, um die Anzahl der Elemente zu reduzieren, da die Einschnürung bzw. Schädigungen sich dort lokalisieren könnten.

Um den hohen Rechenaufwand zu reduzieren und dennoch präzise Ergebnisse zu erzielen, wurde bei der Modellierung eine Netzregelung implementiert. Die Anzahl *X* der Elemente entlang der Breite des Messbereiches steuert die Feinheit des Netzes. Zunächst wird die Probe in sieben Bereiche unterteilt (s. Abbildung 3.7), wobei für die Höhe des Einschnürbereichs 1 mm zugeordnet wurde. Die Elemente haben einen Größenfaktor $G = \frac{Höhe}{Breite} = 0.75$, die Anzahl der Elemente in der Höhenrichtung beträgt 0.75 *X*. Zusätzlich wurde ein Bias von 5 entlang der Höhe verwendet. Im zweiten Bereich haben die Elemente einen Größenfaktor von 0.5 und ein Bias von 3. In den Bereichen drei, vier und fünf kamen die Größenfaktoren 0.5, 0.5 bzw. 0.325 zum Einsatz. Im Schulterbereich beträgt der Größenfaktor der Elemente 0.3125, jedoch wurde die Anzahl der Elemente über der Breite auf 10 reduziert.

Diese Netzregelung wird für alle anderen Proben übertragen. Sollte sich die Geometrie der Probe ändern, variiert sich nur die Anzahl der Elemente dementsprechend proportional. Die Größenverhältnisse der Elemente bleiben überall erhalten, um sicherzustellen, dass die Ergebnisse nicht durch eine Netzveränderung verfälscht werden. Durch das Entfestigungsverhalten des Materials, konzentrieren sich die plastischen Dehnungen lokal und führen zur Vermehrung der Schädigung, die stark von den Elementgrößen abhängig ist [9, p. 192]. Das Netz wird in Abaqus Standard sowie Explizit anhand linearer Elemente modelliert, um die Vergleichbarkeit eindeutig zu halten.

Die FEM-Ergebnisse sollten stets netzunabhängig sein. Vor der Untersuchung des Modellverhaltens ist ein wesentlicher Schritt die Durchführung einer Konvergenzstudie. Im Allgemeinen ist die Konvergenz erreicht, wenn die physikalischen Felder, wie u.a. Verschiebung, plastische Dehnung, hydrostatischer Druck usw. keine starke Variation aufweisen, wenn eine Netzverfeinerung durchgeführt wird. Zudem ist für diese Arbeit eine minimale bis keine Variation der vertikalen Verschiebung am Extensometer, sowie der radialen Verschiebung des unteren Eckpunkts im Einschnürbereich ein besonderes Kriterium für das Erreichen der Konvergenz. Das Materialverhalten der Probe ist jedoch unbekannt und wird durch den Vergleich der FEM-Ergebnisse mit der aus dem Labor stammenden Spannungs-Dehnungskurve ermittelt. Der Ausgangspunkt ist die in Abbildung 3.6 ermittelte Fließkurve. Durch eine iterative Hinzufügung der Schädigung, wird der gesuchte Verlauf erreicht. Die erzielten Ergebnisse hängen jedoch von der Fließkurve, der geplanten Schrittweite und der Elementgröße ab.

Wenn die Konvergenz der vertikalen Verschiebung am Extensometer, auf Basis der von-Mieses Plastizität im Fokus liegt, kann sie durch eine Netzverfeinerung nachgewiesen werden. Nachdem die maximale Festigkeit überschritten wurde, verlagern sich die Verformungen im Einschnürbereich. Jedoch ist die erreichte Dehnung des FEM-Models größer als die Bruchdehnung der Probe. Zudem verfestigt sich die Probe nach der eingegebenen Fließkurve weiter. Sobald das letzte Wertepaar (äquivalente plastische Dehnung und Fließspannung) überschritten wurde und die Simulation noch nicht beendet ist, setzt der Solver weiterhin ein perfektes plastisches Materialverhalten voraus und führt die Berechnung fort. Dadurch variieren die Brucheinschnürung und die physikalischen Felder mit der weiteren Netzverfeinerung. Irgendwann tritt eine Netzverzerrung auf, die auf der Spannungs-Dehnungskurve durch eine Spannungszunahme sichtbar ist. Die Durchführung einer Konvergenzstudie auf Basis der von-Mieses Plastizität lässt sich somit als ungeeignete Vorgehensweise konstatieren, da sie eine Oberschranke für das GTN-Modell darstellt.

Um den Aufwand minimal zu halten, wird auf eine gleichzeitige Durchführung der Konvergenzstudie und Materialkalibrierung verzichtet. Im ersten Schritt folgt die Durchführung der Kalibrierung und im zweiten wird der Effekt der Netzverfeinerung untersucht.

Die Probe wurde mit 80 Elementen über die Breite vernetzt, welches zur Bedeutung hat, dass die Breite jedes Elements 0.041 mm betrug. Das FEM-Netz umfasst insgesamt 18930 Elemente, wie in Abbildung 3.7 zu sehen ist.

Die Anwendung des Hollomon- oder Swift-Modells als Extrapolationsmethoden zeigt, dass die FEM-Spannungs-Dehnungskurve, nach Erreichen der maximalen Spannung, ein schnelles Entfestigungsverhalten, im Vergleich zur im Labor ermittelten Spannungs-Dehnungskurve aufweist. Aufgrund dessen wird die lineare Extrapolationsmethode verwendet, um die Entfestigung zu verlangsamen.

Die konstitutiven Parameter $q_1 = 1.5$ und $q_2 = 1$ werden in dieser Arbeit aus der Studie von Tvergaard et. al [23] übernommen. Das anfangsspezifische Hohlraumvolumen f_0 wird aus der chemischen Zusammensetzung gemäß der folgenden Gleichung [29] berechnet:

$$f_0 = 0.054 \left[S(\%) - \frac{0.001}{Mn(\%)} \right]$$
 Gl. 3-11

Dabei ist S der Schwefelanteil und beträgt 0.03 %, während Mn ist der Mangangehalt und beträgt 2 % [34], welches zu f_0 1.593.10⁻³ führt.

Wie bereits erwähnt, erfolgt die Nukleation des Hohlraumvolumens durch eine Gauss`sche Verteilung, die wiederum von den Nukleationsparametern ε_n , S_n und f_n gesteuert wird. Während der Simulation und bei Erreichung der Fließgrenze, wird der Parameter f_0 im Element induziert. Sobald die Simulation dann um Δt fortschreitet, ändert sich das spezifische Hohlraumvolumen aufgrund der Nukleation sowie des Wachstums, welches durch volumetrische plastische Dehnungen aufgerufen wird. Das aufgrund der Nukleation entstehende Hohlraumvolumen hängt von der plastischen Dehnung, sowie der drei Nukleationsparameter ab. Abbildung 3.8 stellt vier unterschiedliche Kombinationen und deren Einfluss auf die Spannungs-Dehnungskurve im Vergleich mit dem von-Mieses Modell dar.

Durch Abbildung 3.8 ist ersichtlich, dass der Parameter ε_n , definiert, ab welchem Punkt die Diskrepanz, zwischen der von Mieses-Spannung und dem GTN-Modell sichtbar wird. Der Parameter S_n steuert die Geschwindigkeit, mit der die Spannung abfällt, bzw. die Geschwindigkeit der Hohlrauminduktion. Der Parameter f_n beeinflusst die Menge des zu induzierenden Hohlraums. Dessen Einfluss auf die Spannungs-Dehnungskurve wird im Vergleich zwischen der grünen Kurve und den restlichen GTN-Kurven deutlich. Bei der grünen Kurve nimmt die Spannung weniger stark ab als bei den anderen.

Bei der Verschiebung des Medians der Gauss'schen Verteilung ε_n im Einschnürbereich und bei geringen Standardabweichungen, um die Nukleationsgeschwindigkeit zu erhöhen, wurde festgestellt, dass das Modell weniger empfindlich auf Parameteränderungen reagiert, obwohl sich die Probe in der Entfestigungsphase befindet und die Triaxialitätswerte dort hoch sind. Diese Beobachtung scheint auf den ersten Blick den Ergebnissen in [26] zu widersprechen. Allerdings hat die Untersuchung gezeigt, dass das Problem rein numerisch ist und von der geplanten Schrittweite abhängt. Wenn die Schrittweite größer als die Standardabweichung ist, ist die Simulation nicht mehr in der Lage, die gesamte Variation der Gauss`schen Verteilung zu durchlaufen, und dadurch wird weniger Hohlraumvolumen pro Element induziert.



Abbildung 3.8: Vergleich zwischen der von Mieses Plastizitätsmodell (Lineare Extrapolation) und die Nukleations-parameter des GTN-Modells

Das Problem kann durch die folgende Maßnahmen gelöst werden:

- Die Kalibrierung anhand einer expliziten dynamischen Zeitintegrationsmethode, da die Schrittweite minimal sein kann, welches die Induktion des geplanten Hohlraumvolumens garantiert. Diese Lösung wird allerdings nicht gewählt. Die Erläuterung folgt im Abschnitt 5.2.1.
- Die Nukleation findet früher statt, und die Standardabweichung erhöhen. Jedoch ist Übereinstimmung zwischen der FEM- und Versuchsergebnisse nicht gewährleistet.
- Die Schrittweite der Newton-Raphson-Methode reduzieren, damit das geplante spezifische Hohlraumvolumen induziert wird. Dieser Schritt kann jedoch mit einer hohen Rechenzeit verbunden sein.
- Die Anpassung der Fließkurve nach der maximalen Festigkeit.

Die Kalibrierung der Nukleationsparameter, sowie die Anpassung der Fließkurve finden in Abaqus Standard anhand der Newton-Raphson-Methode statt. Auf dem Masterknoten wurde ein $u_{Master} = 10 mm$ definiert, wobei die Simulationszeit 10 betrug. Die Simulation startet mit einer Schrittweite 10^{-4} , wogegen die minimale Schrittweite 10^{-6} beträgt und die maximale Schrittweite eine Größe von 0.005 aufweist. Anhand dieser Einstellungen wird das Problem in mindestens 2001 Iterationsschritten gelöst und die Iterationszeit beträgt 48 min.

Die Nukleationsparameter, die die optimale Übereinstimmung zwischen der FEM und der Versuchskurve liefern, lauten $\varepsilon_n = 0.62$, $S_n = 0.15$, $f_n = 0.005$. Die beiden Kurven überlappen sich zu Beginn der Simulation bis zur maximalen Festigkeit. Jedoch distanzieren sie sich während der Entfestigung voneinander. Wenn nun ε_n erhöht und/oder S_n reduziert wird, muss die Schrittweite weiter reduziert werden, um sicherzustellen, dass der vorgeplante f_n Parameter vollständig induziert wurde. Das bedeutet allerdings, dass die Iterationszeit steigen wird. Aus diesem Grund wurde entschieden, die Parameter konstant zu halten und die Extrapolation der Fließkurve gemäß [18] zu modifizieren, bis eine Übereinstimmung zwischen der FEM und der Versuchskurve erreicht wird.

Für diesen Zweck wurden, auf dem linearen Extrapolationsbereich (s. Abbildung 3.6), 17 Kontrollpunkte definiert. Dabei wurden drei Bedingungen berücksichtigt: die Monotonie der Fließkurve, die Stetigkeit und abschließend die Ableitung der Spannung nach der Dehnung. Letztere soll in einem Kontrollpunkt kleiner oder gleich der Ableitung im vorherigen

Kontrollpunkt sein
$$\left(\frac{d\sigma_f}{d\varepsilon_{eq}}\Big|_{\varepsilon_{eq}=\varepsilon_i} \le \frac{d\sigma_f}{d\varepsilon_{eq}}\Big|_{\varepsilon_{eq}=\varepsilon_{i-1}}\right)$$

Die resultierende optimale Fließkurve, die eine Übereinstimmung zwischen der FEM- und Labor Spannungs-dehnungskurve ist in Abbildung 3.6 dargestellt.

Abbildung 3.9 veranschaulicht den Einfluss der Schrittweite auf die Nukleation in den unteren linken und rechten Elementen des Netzes. Es ist ersichtlich, dass bei einer zu großen Schrittweite, das für die Simulation geplante Hohlraumvolumen f_n nicht erreicht wird.



Abbildung 3.9: Einfluss der Schrittweite auf der Nukleation **a**) Element unten Links, **b**)Element unten rechts; VVFN: Evolution des spezifischen Hohlraumvolumen aufgrund von Nukleation

Nachdem die optimale Nukleationsparameter und die optimale Fließkurve ermittelt wurden, folgt nun die Kalibrierung der Bruchparameter. Der f_c -Parameter beschreibt den Moment der Koaleszenz zwischen den Hohlräumen, der Prozess geschieht sehr schnell und wird infolge von interner Einschnürung und aufgrund von Vereinigung von Scherbändern stattfinden. In der Studie von Depreature et al. [16] wurden mehrere gekerbte Proben bis zum Bruch gezogen, wobei der f_c Parameter durch den Knick in der Spannungs-Dehnungskurve identifiziert wurde. Jedoch waren in der vorliegenden Studie nur die Daten eines einzigen Zugversuchs vorhanden und ein Knick in der Spannungs-Dehnungskurve ist nicht zu erkennen.

Zhang [22] erwähnte in seiner Studie, dass die Hohlräume wachsen, zuerst homogen, doch wenn das kritische Volumen erreicht wird, findet bis zum Moment der Materialseparation, eine rapide Expansion der Hohlräume statt. Zudem erwähnte er auch, dass die Koaleszenz der Probe durch eine beschleunigte Reduktion der Tragfähigkeit begleitet wird [22].

Wenn die wahre Spannung-Dehnungskurve gegenüber der Verfestigungskurve $(\frac{d\sigma_{wahr}}{d\varepsilon_{wahr}})$ dargestellt wird, kann festgestellt werden, dass nachdem die maximale Festigkeit erreicht wurde, sich das Material kurz weiter mit einer konstanten Verfestigungsrate verfestigt, sich dann in einer relativ langsamen Entfestigungsphase befindet, und dann kurz vor dem Ende eine rapide Entfestigung stattfindet. Die Verfestigungskurve $(\frac{d\sigma_{wahr}}{d\varepsilon_{wahr}})$ zeigt einen annähernden vertikalen Verlauf kurz vor dem Ende des Versuchs. Ab diesem Moment kann die Spannungs-Dehnungskurve nur steil nach unten verlaufen. Basierend auf dieser Argumentation, beträgt die wahre Dehnung $\varepsilon_{wahr} = 0.4544$, wenn das kritische spezifische Hohlraumvolumen (f_c) erreicht wird. Gemäß Gl.3.6 wird die wahre Dehnung auf die technische Dehnung konvertiert, welche damit $\varepsilon_{tech} = 0.576$ beträgt.

Die Quantifizierung des f_c -Parameters erfolgt, indem die Versuchskurve, die FEM-Kurve, sowie die Evolution des Hohlraumvolumens am unteren linken Element des Netzes gegenübergestellt werden. Das Element im Zentrum der Probe wurde als Referenz gewählt, da dort die erste Materialtrennung aufgrund der hohen Triaxialität stattfindet. Sobald das kritische Hohlraumvolumen in diesem Element erreicht wurde, finden rapide die Koaleszenz und der abrupte finale Bruch statt.

Wie in Abbildung 3.10 zu sehen und aufgrund der Diskrepanz zwischen der Laborkurve und der FEM-Kurve, ergeben sich zwei mögliche Alternativen für f_c . Die erste Alternative besteht in der Auswahl des Wertes A, die Kurve knickt schneller ab und dadurch wird eine bessere Übereinstimmung mit der Bruchdehnung erzielt. Die zweite Alternative und somit die Wahl von Wert B ergäbe eine gewisse Diskrepanz im Niveau des Bruchs, sorgt jedoch für eine komplette Abbildung des Probenverhaltens. Die Entscheidung fiel für diese Arbeit auf die zweite Variante, da der Fokus auf der Untersuchung des Einflusses der Geometrie auf die mechanische Antwort der Probe liegt.



Abbildung 3.10: Ermittlung des kritischen Hohlraumvolumens durch den Vergleich zwischen Labor und FEM-Ergebnisse, VVF: Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens

Nachdem das kritische Hohlraumvolumen f_c ermittelt wurde, folgt nun die Fortsetzung der Kalibrierung des f_f Parameters. Gleichwohl in den Studien von Zhang [26] und Bernauer et al. [35] erwähnt wurde, dass der Einfluss des f_f Parameters keine entscheidende Rolle bei Zugproben spielt, da der Bruchprozess rapide stattfindet, wurden dennoch drei unterschiedliche f_f Parameter durch eine explizite Berechnung iteriert, um ein besseres Verständnis des Sachverhalts zu bekommen

Abbildung 3.11 demonstriert, dass der Parameter f_f grundsätzlich die Geschwindigkeit steuert, mit der der Bruch durch das Ligament verläuft. Seine Manifestation auf der Spannungs-Dehnungskurve ist durch die Steuerung der Sinkrate ersichtlich, jedoch vernachlässigbar klein. Für dieses Model wurde f_f auf 0.25 gesetzt.

Die Ergebnisse der Kalibrierung zeigen eine hohe Übereinstimmung zwischen dem GTN-Modell und den Laborergebnissen. Abbildung 3.12 präsentiert eine Gegenüberstellung zwischen den Labor-, den resultierenden Ergebnissen infolge der Newton-Raphson-Methode, sowie einer explizit dynamischen Berechnung. Zu Beginn der Simulation weicht die Kurve der Newton-Raphson Berechnung von der expliziten und der Labor Spannungs-Dehnungskurve ab. Trotz allem ist dies kein Fehler, da dies an der Herabsetzung der Solverschreibrate, während der Berechnung liegt. Dies geschah, um die Berechnungszeit zu reduzieren und die Speicherkapazität zu schonen. Wenn die Schreibrate des Solvers im linearen, sowie im Bereich der Gleichmaßdehnung erhöht wird, überlappt sich die Kurve, infolge einer Newton-Raphson Berechnung, mit den anderen Kurven.



Abbildung 3.11:Einfluss des Bruchparameters auf der Spannungs-Dehnungskurv



Abbildung 3.12 Vergleich zwischen der resultierenden und aus dem Labor stammende Spannungs-Dehnungskurve

Die resultierenden GTN-Parameter sind in Tabelle 3-2 zusammengefasst. Es ist allerdings notwendig zu beachten, dass die Kalibrierung nur infolge einer einzigen Geometrie stattgefunden hat und währenddessen wurde eine Anpassung der Fließkurve vorgenommen, damit eine Übereinstimmung resultiert.

Tabelle 3-2:Parameter des Kalibrierten GTN-Models

q_1	q_2	f_0	ε_n	S _n	f_n	f_c	f_f
1.5	1	1.593.10-3	0.62	0.15	0.005	0.2	0.25

Um den Effekt der Vernetzung auf das kalibrierte Modell zu untersuchen, wurden vier unterschiedliche Netzgrößen verwendet. Die Vernetzung unterliegt den vorher erwähnten Reglungen. Die Anzahl der Elemente im Netz variiert nur in Abhängigkeit zur Anzahl der Elemente in der Breite. Währenddessen bleibt die Elementgröße (Höhe /Breite) erhalten. In der Breite enthielt das erste Netz 40 und insgesamt 4747 Elemente. Im zweiten wurden 60 Elemente für die Breite verwendet und 10712 für die gesamte Geometrie. Das dritte Netz wird durch Abbildung 3.8 repräsentiert und ist somit das aktuelle Netz (80 in der Breite und 18930 insgesamt). Das vierte wurde in der Breite durch 100 Elemente geteilt und insgesamt enthielt das Netz 27758 Elemente. Die Berechnung wurde in Abaqus Explizit durchgeführt und die resultierende Spannungs-Dehnungskurven sind in Abbildung 3.13 und 3.14 zu sehen.



Abbildung 3.13 Einfluss der Netzverfeinerung auf der Spannungs-dehnungskurve



Abbildung 3.14 : Einfluss der Netzverfeinerung auf der Evolution der Einschnürung

Die Kurven überlappen sich während der gesamten Simulation, was darauf hinweist, dass die herrschenden Spannungen in den Proben gleich sind, obwohl das Netz verfeinert wurde. Die Evolution der Brucheinschnürung zeigt, dass die Netzverfeinerung die Ergebnisse nicht beeinflusst hat, sie erreichen alle einen Wert von 0.83. Dadurch gilt das Model als konvergiert. Die Brucheinschnürung aus dem Versuch betrug 0.74, dieser Wert könnte erreicht werden in dem f_c früher gewählt werden. Jedoch stand die Simulation des gesamten Verhaltens der Probe im Fokus.

4 Einfluss der Bohrung und Parameter-Studie

4.1 Simulation

Im vorliegenden Abschnitt erfolgt ein Vergleich zwischen der Vollprobe und der Hohlprobe auf Grundlage des kalibrierten GTN-Modells. Die Hohlprobe weist die gleiche Geometrie wie die Vollprobe auf, wird jedoch zusätzlich in der Mitte mit einer Bohrung versehen, deren Durchmesser 1.5 mm beträgt. Während der Simulation bleiben die Parameter unverändert: Das Modell bleibt rotationssymmetrisch, die Elemente besitzen lineare Ansatzfunktionen und die Vernetzung erfolgt gemäß den zuvor genannten Netzregeln. Durch die Reduzierung der Breite des Ligaments, aufgrund der Bohrung auf 1.75 mm, werden nun 56 Elemente entlang der Breite generiert. Diese Aufteilung führt zu insgesamt 14015 Elementen im Modell.

Bei den Randbedingungen wird die Probe am unteren Rand mithilfe von Rolllagern befestigt, wodurch während der Simulation die translatorische Bewegun in der radialen Richtung frei bleibt. An der äußeren Seite des Kopfes wird, wie zuvor erwähnt, ein Lasteinleitungselement (RBE 2) angebracht und mit dem Masterknoten verbunden.



Abbildung 4.1: Das FEM-Modell der Hohlprobe: Links Geometrie; Rechts FEM-Netz

Die Voll und Hohlprobe werden nun bis zum Bruch simuliert. Zu diesem Zweck, werden die Proben zuerst quasistatisch mit Newton Raphson simuliert, wobei die axiale Verschiebung des Masterknotens sowie die Reaktionskraft der Rolllager als "History Output" definiert sind. Nach der Durchführung der Simulation, wird das Kraft-Verschiebungsdiagramm erstellt, woraus die maximale Verschiebung des Masterknotens abgelesen werden kann.

Bei der expliziten Berechnung wurde während der Arbeit und bei allen Proben eine Ziehgeschwindigkeit von 10 mm/s geplant, die von 0 bis 0.1 Sek, mittels einer "Smooth Step"-Funktion aufgebaut wird.

Basierend auf diesen Informationen, setzt sich nun die Simulationszeit für eine explizite Berechnung wie folgt zusammen: aus der benötigten Zeit, die für den Aufbau der Geschwindigkeit anfällt, sowie der Zeit, um die aus der quasistatischen Berechnung resultierenden maximalen Verschiebung des Masterknotens zu erreichen. Anhand dieser Methode können die Mengen an unnötig generierten Daten nach der Bruchzeit unterdrückt werden. Zudem kann anhand des resultierenden Kraft-Verschiebungsdiagramms der quasistatischen Berechnung die Schreibrate des Solvers während der expliziten Berechnung gesteuert werden, um die Größe der Daten weiter zu reduzieren. Von Beginn der Simulation bis kurz nach Überschreiten der maximalen Spannung werden die Ergebnisse alle 0.01 Sek geschrieben und nach diesem Moment bis zum Ende der Simulation werden die Ergebnisse alle 5.10⁻⁵ Sek geschrieben.

4.2 Ergebnisse

Die resultierenden technischen Spannungs-Dehnungskurven der Voll- und Hohlproben sind in Abbildung 4.2 dargestellt. Beide Proben zeigen ein bis zur Fließgrenze (419 MPa) lineares Verhalten, danach beginnt das Material zu fließen, die technischen Spannungen nehmen weiter zu, bis hin zum Punkt der maximalen Festigkeit (644 MPa). Wie erwartet, findet in diesem Bereich eine Überlappung der beiden Kurven statt, da der herrschende Spannungszustand eindimensional und der Verlauf nur materialbedingt ist. Die Geometrie hat hier keinen Einfluss. Die Divergenz zwischen den beiden Kurven beginnt nach Überschreiten der maximalen Festigkeit und nimmt mit fortschreitender Belastung bis zum Moment des Bruchs weiter zu. Auffällig ist, dass die Hohlprobe ein schnelleres Entfestigungsverhalten als die Vollprobe zeigt. Dies deutet darauf hin, dass sich der hier vorherrschende 3D-Spannungszustand, von dem der Vollprobe unterscheidet. Die Bruchdehnung der Hohlprobe ist geringer als die der Vollprobe, was darauf hindeutet, dass die Duktilität im Vergleich zur Vollprobe abgenommen hat.



Abbildung 4.2:Vergleich zwischen den Spannungs-Dehnungskurven der Voll und Hohlprobe

Der Vergleich der Einschnürung am kleinsten Querschnitt der beiden Proben, wie in Abbildung 4.3 dargestellt, zeigt im linearen Bereich sowie im Bereich der Gleichmaßdehnung denselben Verlauf. Nach Überschreitung der maximalen Festigkeit zieht sich die Hohlprobe schneller als die Vollprobe zusammen. Beide Kurven (schwarz und Blau) erreichen ein lokales Maximum, sinken kurz ab und steigen dann erneut auf. Der neuerliche Anstieg der Kurven ist ein Hinweis auf Netzverzerrung, welche bei den letzten Elementen kurz vor der Trennung auftritt. Die Simulation gilt als beendet, sobald die lokalen Maxima erreicht werden. Die lokalen Maxima in beiden Kurven zeigen, dass die Vollprobe eine höhere Brucheinschnürung aufweist als die Hohlprobe.



Abbildung 4.3 Gegenüberstellung des Einschnürverhaltens der Voll und Hohlprobe

Bei der Voll- und Hohlprobe zeigt der Vergleich der Verschiebungsverläufe der äußeren Knoten vor der Einschnürung, wie in Abbildung 4.3 durch jeweils die gelbe und grüne Kurve illustriert, dass die Zugproben ein ähnliches Verhalten aufweisen, wenn sie von außen betrachtet werden. Dies zeichnet sich an der Überlappung der beiden Kurven ab. Der innere untere Knoten der Hohlprobe (rote Kurve) zeigt einen qualitativ ähnlichen Verlauf wie die anderen Kurven. Der Absolutwert der Steigung ist jedoch geringer als der des äußeren Knotens. Das lässt darauf schließen, dass das Ligament während der Gleichmaßdehnung bei der Hohlprobe auf die Belastung durch eine Kombination aus einer Abnahme des äußeren Radius und gleichzeitiger Abnahme der Breite des Ligaments reagierte. Im Bereich der Einschnürung, wo sich die Kurven der äußeren Knoten voneinander entfernen, nimmt die Geschwindigkeit bei der Hohlprobe (grüne Kurve) stärker zu, als bei der Vollprobe (gelbe Kurve). Bei den inneren Knoten der Hohlprobe (rote Kurve) steigt die Geschwindigkeit zunächst kurz an und nimmt dann rasch ab, bis ein Zeitpunkt erreicht ist, an dem ein lokales Minimum ($t \approx 0.83 Sek$) in der Verschiebungskurve auftritt. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass die Bewegung in Richtung der Rotationsachse gebremst wurde. Daraufhin bewegt sich der innere Knoten nach rechts und es kommt zu einer lokalen Einschnürung der inneren Seite.

Um die Entwicklung der Einschnürung genauer zu untersuchen, werden die resultierenden äquivalenten plastischen Dehnungs-(PEEQ), Triaxialitäts-(TRIAX) und spezifischen Hohlraumvolumenfelder (VVF) zweier Proben an drei verschiedenen Zeitpunkten miteinander verglichen. Die ersten beiden Abbildungen wurden aufgenommen, als die maximale plastische Dehnung jeweils 0.8 und 1.3 betrug. Die dritte wurde im Moment der Koaleszenz erstellt und

die letzte zu dem Zeitpunkt, als das erste Element aus dem Netz entfernt wurde. Abbildung 4.4.a und 4.4.b bieten einen Vergleich der äquivalenten plastischen Dehnung (PEEQ) zwischen der Voll- und Hohlprobe. Die Feldverteilung stellt Ähnlichkeiten beider Proben dar, wobei der maximale Wert im unteren linken Eckpunkt A für die Voll- und Hohlprobe zu erkennen ist und mit zunehmender Entfernung von diesem Eckpunkt abnimmt. Die Bilder zeigen zudem die momentane, sowie im Hintergrund die anfängliche Referenzgeometrie, welche durch eine gestrichelte schwarze Linie umrandet ist. Die Vollprobe reagiert durch eine Abnahme in der Querschnittfläche während der Einschnürung, während die Hohlprobe eine kombinierte Verschiebung in Richtung der Rotationsachse und eine Abnahme der Querschnittfläche aufweist. Dies ist geschuldet durch die freiliegende Innenseite. Das Triaxialitätsfeld ist in den Abbildungen 4.4.c und 4.4.d dargestellt, wobei die maximalen Werte sich unten am linken Eckpunkt A befinden und nahezu gleich sind. Die Verteilung der Vollprobe zeigt jedoch eine höhere Eckkonzentration, wohingegen die Verteilung der Hohlprobe relative Homogenität besitzt. Das Konturplot des spezifischen Hohlraumvolumens (VVF) demonstriert ebenfalls eine isotrope Verteilung, die sich am unteren linken Eckpunkt, sowohl in der Voll- als auch der Hohlprobe konzentriert. Der maximale Wert ist jedoch bei der Vollprobe leicht höher.

Die Abbildungen 4.5.a und 4.5.b veranschaulichen die Konzentration der äquivalenten plastischen Dehnung, an den beiden unteren linken Eckpunkten der jeweiligen Proben, in dem Moment, der Erreichung des maximalen Werts von 1.3. In der Vollprobe zeigt sich im Zentrum eine ellipsoid förmige Verteilung, während in der Hohlprobe eine leicht nach oben spitz zulaufender Verteilung vorliegt. Der Gradient der äquivalenten plastischen Dehnung in Richtung der Außenseite ist zudem bei der Hohlprobe steiler als bei der Vollprobe. Was bedeutet, dass da die Hohlprobe wenige Verformung erfährt. Die Triaxialität in der Vollprobe, wie in Abbildung 4.5.c dargestellt ist, spitzt sich im Zentrum der Probe weiter zu und verbreitet sich mehr nach außen. Dies deutet darauf hin, dass die Elemente in diesem Bereich stärker aufgeweitet werden und somit das Hohlraumvolumen schneller wächst. Der Grund hinter dieser Verteilung liegt an der Randbedingung, sie blockieren die Freiheitgerade des Eckpunkts und dadurch herrschen mehr hydrostatische Spannungen. Bei der Hohlprobe bleibt die Triaxialität im Großteil des Ligaments (grüner Bereich) gering und variiert zwischen 0 und 0.4. Nur 0.2 mm vor dem unteren Eckpunkt konzentriert sich die Triaxialität in einem kleinen Bereich und erreicht einen Wert von 0.65 (s. Abbildung 4.5.d). An dieser Stelle werden auch die Elemente dort aufgeweitet. Die Abbildungen 4.5.e und 4.5.f zeigen, dass bis zu diesem Zeitpunkt das Wachstum des spezifischen Hohlraumvolumens immer noch homogen ist, wie in [22] beschrieben wurde und konzentriert sich im Zentrum bzw. in der Innenseite der Voll und Hohlprobe.

Bis zur Koaleszenz steigt die maximale äquivalente plastische Dehnung in der Vollprobe weiter an und erreicht im Zentrum der Probe einen Wert von 1.8, und besitzt weiterhin eine ellipsoid förmige Verteilung. Währenddessen erreicht die äquivalente plastische Dehnung bei der Hohlprobe vor dem Eckpunkt einen maximalen Wert von 1.962. Wie in den Abbildungen 4.6.e und 4.6.f zu sehen, ist das Feld in Richtung der maximalen Schubspannung angespitzt. Zudem ist auf den Abbildungen 4.6.b, d und f der Hohlprobe zu erkennen, dass ihre innere Seite sich nun nach links krümmt. Die Triaxialität bei der Vollprobe überlagert sich auch vor dem Eckpunkt und erreicht einen maximalen Wert von 1.87 (Abbildung 4.6.c), während der Wert bei der Hohlprobe 1 beträgt (Abbildung 4.6.d). Das spezifische Hohlraumvolumen ist bei beiden Proben annähernd identisch. Interessant ist auch, wie die Verteilung des Hohlraumvolumen sich bei den beiden Proben unterscheidet. Bei der Vollprobe bewegt sich die Koaleszenz nach rechts, was darauf hindeutet, dass eine interne Einschnürung stattfindet, wie in [13] erwähnt wurde. Derweil, wie in Abbildung 4.6.f zu sehen, verläuft die Koaleszenz der Hohlprobe tendenziell in Richtung der maximalen Schubspannung. Die Koaleszenz erfolgt sehr schnell, sodass bereits bei den nächsten 10⁻⁴ Sek die ersten Elemente aus dem Netz gelöscht werden, wie die Abbildungen 4.7.a und 4.7.b demonstrieren. Dabei beträgt die Schrittweite in der expliziten Berechnung 10⁻⁷ Sek. Der Bruch verläuft bei der Vollprobe von links nach rechts, wohingegen er in der Hohlprobe sich gleichzeitig in beiden Richtungen erstreckt. Ein Cup-Cone Bruchmuster ist hier nicht zu sehen, sondern nur eine laterale Materialtrennung.



Abbildung 4.4 Varaition der **a)b)**plastische Dehnungsfeld;**c)d)** der Triaxialität,**e)f)**spezifische Hohlraumvolumen bei dem Zeitpunkt wo $\varepsilon_{eq} = 0.8$. Links:Vollprobe. Rechts:Hohlprobe



Abbildung 4.5: Variation der **a)b)**plastische Dehnungsfeld;**c)d)** der Triaxialität,**e)f)**spezifische Hohlraumvolumen bei dem Zeitpunkt wo $\varepsilon_{eq} = 1.3$. Links:Vollprobe. Rechts:Hohlprobe



Abbildung 4.6. Variation der **a)b)**plastische Dehnungsfeld;**c)d)** der Triaxialität,**e)f)**spezifische Hohlraumvolumen bei dem Zeitpunkt kurz bevor $f = f_c$. Links:Vollprobe. Rechts:Hohlprobe



Abbildung 4.7 Variation **a)b)** des spezifischen Hohlraumvolumens kurz nach der Koaleszenz. Links:Vollprobe. Rechts:Hohlprobe

Um den Einfluss der Bohrung auf die Probe weiter zu untersuchen, wurden die Variationen der von-Mieses Spannung, der hydrostatischen Spannung, der Triaxialität, sowie der Entwicklung des spezifischen Hohlraumvolumens in Abhängigkeit der wahren globalen radialen Dehnung $(\ln (\frac{A_0}{4}))$ extrahiert, und sowohl bei der Voll- als auch der Hohlprobe gegenübergestellt.

Drei Elemente wurden aus der Vollprobe ausgewählt. Das erste, Element A, befindet sich am unteren linken Rand des Querschnitts, wo die Initialisierung der Koaleszenz und des Bruchs beginnen. Element C in der Mitte und schließlich wurde das dritte, Element D, aus Sicht der Rotationsachse x=1.84 mm erwählt. Bei der Hohlprobe hingegen wurden vier Elemente selektiert. Die Elemente A*, C* und D* wurden, wie bei der Vollprobe, an der unteren Kante des Netzes entnommen. Das Element B* repräsentiert das erste Element, das aus dem Netz entfernt wird. Die Auswahl der letzten Elemente D und D* erfolgte bewusst, da kurz vor dem Ende der Simulation eine Netzverzerrung bei den Elementen auftritt, die sehr nah an der Außenseite der Probe liegen, welches den Unterschied zwischen den Ergebnissen nicht eindeutig genug wiedergibt.

Die wahre radiale Dehnung im Ligament lautet für die Voll- und Hohlprobe jeweils:

$$\varepsilon_{r \, wahr \, Voll} = \ln \left(A0/A \right) = \ln \left(2.5^2 / (2.5 + u_{r \, außen})^2 \right)$$

$$\varepsilon_{r \, wahr \, Hohl} = \ln \left((2.5^2 - 0.75^2) / ((2.5 + u_{r \, außen})^2 - (0.75 + u_{r \, innen})^2) \right)$$

Gl. 4-1

Abbildung 4.8.a illustriert die Variation der von Mieses-Spannung sowie der hydrostatischen Spannungen bei den Elementen der Vollprobe. Zu Beginn der Simulation und im Bereich der Gleichmaßdehnung überlappen sich die Kurven. Ab dem Zeitpunkt, an dem die maximale Festigkeit überschritten wird, beginnen die Kurven sich auseinander zu distanzieren. Element A (schwarze Kurve) zeigt die geringste Duktilität, da es eine Bruchdehnung von 1.4786 aufweist. Im Vergleich dazu erreichen die Elemente C und D (jeweils blaue und rote Kurve) 1.546 und 1.655.

Die hydrostatische Spannung (negativer Wert des hydrostatischen Drucks) nimmt bei Element A während der Einschnürung schneller als bei Element C und D und sinkt am Ende zuerst auf null, sobald das Element aus dem Netz entfernt wurde. Ab diesem Zeitpunkt, und aufgrund der Reduzierung der Fläche des tragenden Ligaments, nehmen die hydrostatischen Spannungen bei



den verbleibenden Elementen zu. Daher ist ein Anstieg nach dem Bruch des ersten Elements zu beobachten.

Abbildung 4.8 Variation **a**)**b**) der von-Mieses und des hydrostatischen Drucks; **c**)**d**) der Triaxialität; **e**)**f**) des spezifischen Hohlraumvolumens bei der Voll sowie Hohlprobe

Die Variation der Triaxialität erreicht bei Element A (s. Abbildung 4.8.c, schwarze Kurve) ein Maximum von 2.16. Das führt zu einer lateralen Verbindung der Hohlräume (internes Necking). Bei den Elementen C und D verläuft die Triaxialität geringer, welche jedoch vor der finalen Trennung wieder steigt. sodass dort der vorherrschende Trennmodus ebenfalls durch eine laterale Verbindung der Hohlräume erfolgt.

Aus der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens der Vollprobe (VVF) (Abbildung 4.8.e) ist ersichtlich, dass der Bruch aus dem Element A (schwarze Kurve) heraus startet und sich in Richtung der Außenseite verbreitet. Mit dem Erreichen des Werts von 0.25 findet eine Entfernung der Elemente aus dem Netz heraus statt.

Bei der Hohlprobe weisen die Kurven einen ähnlichen Verlauf auf, jedoch entwickelt sich während der Einschnürung, die Entfestigungsphase kürzer als bei der Vollprobe. Die Bruchdehnung der Elemente variiert zwischen 1.41 und 1.52. Im Vergleich variiert die Bruchdehnung der Vollprobe zwischen 1.47 und 1.65. Abbildung 4.8.b zeigt, dass das Element B*, bei dem die Koaleszenz und der Bruch initiiert werden, die geringste Duktilität hat.

Bei der hydrostatischen Spannung verlaufen die Kurven der Hohlprobe dichter zueinander und besitzen einen geringeren Anstieg als die Elemente der Vollprobe. Jedoch kurz bevor das erste Element aus dem Netz entfernt wird, nimmt sie schneller zu.

Im Bereich der Triaxialität verlaufen die Kurven überlappend, sowohl im linearen Bereich als auch im Bereich der Gleichmaßdehnung, und weisen einen konstanten Wert von 0.33 auf. Dieses Ergebnis ist erwartungsgemäß, da in diesen Bereichen ein eindimensionaler Spannungszustand herrscht. Die von-Mieses Spannung entspricht der axialen Spannung $\sigma_{vM} = \sigma_y$, während die hydrostatische von der axialen Spannung abhängig ist: $\sigma_h = \frac{1}{3} (\sigma_{rr} + \sigma_{yy} + \sigma_{\theta}) = \frac{1}{3} \sigma_{yy}$. Innerhalb der Einschnürung steigt die Triaxialität weiter an. Dabei erfährt das Element B* die höchste hydrostatische Spannung und die geringste von-Mieses Spannung, welches, im Vergleich zu anderen Elementen der Hohlprobe, zur höchsten Triaxialität führt.

Die Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens (VVF) (Abbildung 4.8.f) lässt erkennen, dass der Bruch aus dem Element B* heraus startet und sich in Richtung der Rotationsachse sowie in Richtung der Außenkante ausbreitet. Das Cup-Cone Bruchmuster war bei dieser Geometire nicht vorhanden, da die Bruchgeometrie lateral zur Zugrichtung verlief, bis eine finale Trennung des Materials stattfand.

Ein interessanter Aspekt von Element A* ist die Beobachtung, dass es weniger Triaxialität erfährt und dies, obwohl es sich am linken Rand der Probe befindet und näher zum Ort, in dem der Bruch initiiert wird, als das Element C* in der Mitte der Probe.

4.3 Parameterstudie zur Variation der Geometrie

Um den Effekt der Variation des Innenradius auf der Spannungs-Dehnungskurve zu untersuchen, wurde eine Parameterstudie durchgeführt. Dabei wurden drei Parameter variiert; der Außenradius der Zugprobe, der Innenradius, sowie die Parallellänge. Für diesen Zweck wurden 24 Simulationen durchgeführt. Die ersten 12 Simulationen besitzen eine Parallellänge l_c die 7-mal so groß wie der Durchmesser der Probe während bei der zweiten Gruppe beträgt das Verhältnis zwischen der Parallellänge und dem Durchmesser 6. Jede Gruppe enthält drei Untergruppen; die erste Untergruppe hat einen Außenradius von 3 mm, die zweite 3.5 mm, während die dritte einen Außendurchmesser von 4 mm hat. Jede Untergruppe enthält nun eine Vollprobe und drei Hohlproben mit jeweils 0.5,1 und 1.5 mm Innenradius. Die Proben wurden mit dem kalibrierten GTN-Modell simuliert und die vorhererwähnte Netzregel für die Vernetzung verwendet. Allerdings reduzierte sich die Anzahl der Elemente über die Breite und Länge um 25 %. D.h. für den Einschnürbereich wurden statt 80, 60 Elemente verwendet, worauf die Höhe (1 mm) durch 45 Elemente unterteilt wurde. Durch die Veränderung der Geometrie (Breite und Höhe der Probe) bleibt die Elementgröße erhalten. Die DIN 50125 schreibt vor, dass die Länge des Messbereichs, sowie die Parallellänge in Funktion des Durchmessers, variieren müssen [5]. Aus diesem Grund und damit die Elementgröße nicht variiert, werden auch die Höhen der verschiedenen Bereiche, die für die Netzerstellung notwendig sind, proportional mitgeändert. Für die in Abschnitt 3.4 und 4.1 präsentierte Probe, betrug die Höhe des Einschnübereichs, wie bereits erwähnt, 1 mm, während die Messlänge fünfmal die Breite betrug (2.5x5 = 12.5). Das Verhältnis zwischen der Höhe des Einschnübereichs und der Messlänge hat einen Wert von 1/12.5 = 0.08. Dieser Wert wird bei allen anderen Probengeometrien verwendet. Als Beispiel, bei einer Probe deren Außenradius 3 mm beträgt, wird für die Höhe des Einschnübereichs 5x3x0.08 = 1.2 mm zugeordnet. Die Breite wird dann mit 3x60/2.5 = 72 Elementen unterteilt, während die Höhe 72x0.75 = 54 Element enthält.

Bei manchen Hohlproben wurde festgestellt, dass eine Netzverzerrung kurz vor dem Ende der Simulation bzw. bevor die vollständige Materialtrennung stattfindet, vorhanden ist. Ihr Einfluss auf die Spannungs-Dehnungskurve war nicht stark ausgeprägt. Trotz allem erreichten manche Proben Brucheinschnürungswerte, die über 1 lagen. Solche Werte sind physikalisch nicht möglich, denn das würde bedeuten, dass die Querschnittsfläche negativ ist. Kurz vor dem Ende der Simulation ist auf der Einschnürkurve ein lokales maximum zu sehen. Diese wird als Zeichen für das Simulationsende verwendet.

Die Ergebnisse der Simulation sind durch die Spannungsdehnungskurven sowie die Einschnürungskurven dargestellt.



Abbildung 4.9: Einfluss des Innen-, und Außenradius und der Parallellänge auf der Spannungs-Dehnungskurve

Durch die Abbildung 4.9 ist ersichtlich, dass die Geometrie weder den linearen Bereich noch den der Gleichmaßdehnung beeinflusst hat. Die Fließgrenze, sowie die maximale Festigkeit betrugen bei allen Proben jeweils 419 MPa und 644 MPa. Jedoch findet im Einschnürbereich eine Distanzierung der Kurven statt. Proben, deren Parallellänge (l_c) 7-mal die Größe des Durchmessers aufweisen, besitzen eine höhere Duktilität, als Proben deren Parallellänge (l_c) 6-mal die Größe des Durchmessers besitzen. Der Unterschied der Duktilität zwischen den Vollproben mit unterschiedlichen Außenradien ist vernachlässigbar gering, wie in Abbildung 4.9 (volle und gestrichelte Linien mit kreisförmigen Markern) dargestellt. Zusätzlich ruft die Vergrößerung des Innenradius eine Abnahme in der Duktilität hervor. Dieses Ergebnis kann jeweils durch die Probe $(ra = 3; ri = 0.5; \frac{1}{2}l_c = 6.ra)$ blaue Kurve, (ra = 3.5; ri =

1; $\frac{1}{2}l_c = 6.ra$;) rote Kurve und (ra = 4; ri = 1.5; $\frac{1}{2}l_c = 6.ra$;) orange Kurve beobachtet werden. Obwohl letztere Probe, die größte Querschnittfläche hat, besitzt diese trotz allem eine geringere Bruchdehnung als jene Probe mit dem kleinsten Außenradius (ra = 3; ri = 0.5; $\frac{1}{2}l_c = 6.ra$;).



Abbildung 4.10 Einfluss des Innen-, und Außenradius und der Parallellänge auf die Entwicklung der Einschnürung

Die Entwicklung der Einschnürung in Abbildung 4.10, bestätigt auch dass die Proben sich die eine kleiner Parallellänge besitzen, entfestigen sich schneller als die Proben, die eine längere Parallellänge haben.

Im Jahr 1928 berichtete der englische Ingenieur D.A. Oliver in seiner Studie [36] von einer Korrelation zwischen der Länge der Probe, dem Querschnitt und der dazu gehörigen Verlängerung nach dem Bruch. In seiner Studie wurden mehrere Proben aus weichem Stahl, mit verschiedenen Querschnitten, bis zum Bruch getestet. Dabei hatten die Proben eine Parallellänge von 10 Inch und wurden zusätzlich alle 0.5 Inch entlang des Messbereichs markiert. Nach dem Bruch wurden die Proben wieder zusammengesetzt und die lokale Dehnung ε_{lokal} die jede Markierung erfahren hat, wurde in Abhängigkeit von ihrer anfänglichen Referenzposition *L*, in eine logarithmische Skala eingetragen. Die resultierenden Kurven zeigten einen annähernden linearen Verlauf, welches den Schluss zulässt, dass der Zusammenhang zwischen der Verlängerung und die Position aus der Referenzgeometrie in einer exponentiellen Form ausgedrückt werden kann [36]:

Dabei repräsentiert L_{P_bruch} die Verschiebung eines Punktes im Messbereich im Moment des Bruchs, L_{P0} die Anfangsposition, *a* die Steigung des linearen Zusammenhangs in einer logarithmischen Skala, während *K* aus der Kurve direkt abgelesen werden kann, wenn L = 1 ist.

Es wurde auch festgestellt, dass der Zusammenhang zwischen der Konstanten K und der Querschnittsfläche der Referenzgeometrie in einer logarithmischen Skala linear verläuft. Nach derselben Überlegung resultierte dann ein exponentieller Zusammenhang, wie in [36]:

Für jede der beiden Exponenten (*a* und *b*) wurde jeweils ein Mittelwert bestimmt, da sie bei Veränderung der Geometrie, keine starken Variationen aufwiesen [36].

Der vorgestellte Ansatz wird für diese Parameterstudie angewandt, um eine mögliche Korrelation zwischen der Geometrie der Voll- und Hohlprobe, sowie deren Duktilität zu etablieren. Zu diesem Zweck wurden aus den Simulationen die Positionen aller Knoten, die sich im Bereich der Parallellänge und auf der Außenseite der Probe befanden, in einer Datei extrahiert und durch ein Matlab-Script bearbeitet. Wie in [36] beschrieben, wurde zuerst die lokale Dehnung ε_{lokal} in Abhängigkeit der Länge aus der Referenzgeometrie in Abbildung 4.4 dargestellt. Daraus ist ersichtlich, dass der Zusammenhang zwischen den zwei Variablen nahezu linear ist. Während der Bearbeitung der Ergebnisse wurden nur die Knoten, die in einem Bereich von $0.3.\frac{1}{2}.l_c$ und $\frac{1}{2}.l_c$,liegen, gewählt. Grund dahinter liegt daran, dass die Knoten im Einschnübereich, eine hohe Dehnung aufweisen, dass der angenommene lineare Verlauf nicht mehr vorhanden ist.



Abbildung 4.11 ε_{lokal} der Knoten an der Außenseite der Zugprobe in Abhängigkeit von der Referenz Geometrie in einer logarithmischen Skala

Die ermittelten K Werte wurden auch gemäß [36] in einer logarithmischen Skala in Abhängigkeit von ln(A) dargestellt. Dabei repräsentiert A die Fläche der Probe ohne die Berücksichtigung des Innenradius. Die resultierenden Kurven sind in Abbildung 4.12 zu sehen.

Die Abbildung 4.12 zeigt, dass eine lineare Regression zwischen den Proben mit demselben innen Radius vorliegt. Daher wird nun die Konstante jeder einzelnen linearen Regression in Abhängigkeit vom inneren Radius (ri) dargestellt und in Abbildung 4.13 veranschaulicht.

Anhand der Methode von D.A. Oliver ist es möglich, einen Zusammenhang zwischen der Geometrie und der Position der Knoten im Moment des Bruchs zu finden.

Der Zusammenhang bei dem kalibrierten Materialmodell, zwischen der Position der Knoten in Ruhelage und die lokale Dehnung im Bruchmoment, kann für die parallele Länge $\frac{1}{2}l_c = 6.ra$ und $\frac{1}{2}l_c = 7.ra$, sowie der vorher präsentierten Innen- und Außenradien, wie folgt ausgedrückt werden:

$$\varepsilon_{lokal} = \exp(-0.1103x + 0.6612) \cdot A^{0.09645} \cdot L_{P0}^{0.835513} ; wenn \frac{1}{2}l_c = 6 \cdot ra$$

$$\varepsilon_{lokal} = \exp(-0.1392x + 0.6685) \cdot A^{0.09645} \cdot L_{P0}^{0.835513} ; wenn \frac{1}{2}l_c = 7 \cdot ra$$

Die Exponenten a=0,09645 und b=0.835513 wurden jedes Mal aus dem Mittelwert der Steigungen der linearen Regressionen ermittelt.

Die ermittelte Werte der linearen Regressionen für die Abbildungen 4.12 und 4.13 wurden in den Tabellen 4-1 und 4-2 bereitgestellt.



Abbildung 4.13: Lineare Regression zwischen ln(K) und ln(A). Dabei ist A die Fläche der Probe ohne die Berücksichtigung des Innenradius



Abbildung 4.12: Zusammenhang zwischen der Konstanten der linearen Regressionen aus Abbildung 4-12 und der innere Radius

ra Außenradius	ri Innenradius	$\frac{1}{2}l_o$	$\frac{1}{2}l_c$	Fläche	K	ln(A)	ln(K)
3.0	0.0	15.0	6. <i>ra</i>	28.27	2.54	3.34	0.93
3.0	0.5	15.0	6. <i>ra</i>	28.27	2.50	3.34	0.92
3.0	1.0	15.0	6. <i>ra</i>	28.27	2.44	3.34	0.89
3.0	1.5	15.0	6. <i>ra</i>	28.27	2.37	3.34	0.86
3.5	0.0	17.5	6. <i>ra</i>	38.48	2.61	3.65	0.96
3.5	0.5	17.5	6. <i>ra</i>	38.48	2.57	3.65	0.94
3.5	1.0	17.5	6. <i>ra</i>	38.48	2.52	3.65	0.92
3.5	1.5	17.5	6. <i>ra</i>	38.48	2.45	3.65	0.90
4.0	0.0	20.0	6. <i>ra</i>	50.27	2.66	3.92	0.98
4.0	0.5	20.0	6. <i>ra</i>	50.27	2.64	3.92	0.97
4.0	1.0	20.0	6. <i>ra</i>	50.27	2.59	3.92	0.95
4.0	1.5	20.0	6. <i>ra</i>	50.27	2.53	3.92	0.93
3.0	0.0	15.0	7. <i>ra</i>	28.27	2.52	3.34	0.92
3.0	0.5	15.0	7.ra	28.27	2.48	3.34	0.91
3.0	1.0	15.0	7.ra	28.27	2.41	3.34	0.88
3.0	1.5	15.0	7.ra	28.27	2.33	3.34	0.85
3.5	0.0	17.5	7.ra	38.48	2.58	3.65	0.95
3.5	0.5	17.5	7.ra	38.48	2.55	3.65	0.94
3.5	1.0	17.5	7.ra	38.48	2.49	3.65	0.91
3.5	1.5	17.5	7.ra	38.48	2.41	3.65	0.88
4.0	0.0	20.0	7.ra	50.27	2.64	3.92	0.97
4.0	0.5	20.0	7.ra	50.27	2.61	3.92	0.96
4.0	1.0	20.0	7.ra	50.27	2.56	3.92	0.94
4.0	1.5	20.0	7. <i>ra</i>	50.27	2.50	3.92	0.92

Tabelle 4-1:ermittelte Werte der linearen Regressionen (K Wert und die Steigung) für Abbildung 4.12

Tabelle 4-2 ermittelte Werte der linearen Regressionen für Abbildung 4.13

ri (Innenradius)	Konstante der Parallellänge $\frac{1}{2}l_c = 6.ra$	Konstante der Parallellänge $\frac{1}{2}l_c = 7.ra$
0	0.656	0.6561
0.5	0.6113	0.6082
1	0.5559	0.548
1.5	0.4907	0.4442

5 Einfluss des Drucks und der Wasserstoffversprödung

5.1 Einfluss des Drucks

5.1.1 Simulation

In diesem Abschnitt wird der Einfluss des Drucks auf die Voll- und Hohlprobe untersucht. Bei der Untersuchung der beiden Proben innerhalb der Wasserstoffumgebung ist die Notwendigkeit des Drucks gegeben, um die Diffusion des Wasserstoffs zu vereinfachen. Die Vollprobe wird in einem Autoklav platziert und mit Außendruck beaufschlagt, wohingegen die Hohlprobe an eine Gasleitung angeschlossen und mit Innendruck belastet wird. Durch die Simulation des Zugversuchs mit einem überlagerten Außen- bzw. Innendruck folgt die Herleitung des Verständnisses für das mechanische Verhalten der Voll und Hohlprobe unter diesen Bedingungen.

Hierfür werden die in Abschnitt 3.4 und 4.1 präsentierten Geometrien mit verschiedenen Druckkonstellationen belastet und bis zum Bruch simuliert. Das bereits kalibrierte GTN-Modell, sowie das FEM-Netz bleiben erhalten und nur die Randbedingungen werden angepasst, um eine Berücksichtigung der neuen Faktoren zu gewährleisten. Bei jeder Geometrie werden zwei Lastfälle modelliert. Zuerst wird der Aufbau des Ducks auf den Wert *P* abgebildet, während der zweite eine Kombination aus Zugbelastung und überlagertem Druck darstellt. In dieser Studie liegen die verwendeten Drucke unter der Fließgrenze. Obgleich sie dadurch mit einer linearen Berechnung durchgeführt werden könnten, folgt die Weiterbearbeitung durch Option NLGEOM=ON. Diese Methode wird durch ihre Allgemeingültigkeit verwendet, um auch in Zukunft bei Überschreiten der Fließgrenze aufgrund von höheren Drucken eine Simulation durchzuführen.

Sobald die Probe sich im Labor im Autoklav befindet, wirkt der Druck von außen. Gemäß dieser Information wird in Abaqus ein Druck auf der Außenkontur der Geometrie angebracht. Bei der Hohlprobe hingegen wird der Druck auf der Innenseite der Geometrie modelliert. Durch die Belastung der Innenseite der Hohlprobe mittels Drucks entwickeln sich Spannungen entlang der Zugrichtung als Reaktion darauf und sind als Deckelkräfte bekannt. Diese werden durch einen negativen Druck (Zugspannung) auf der Oberseite der Geometrie modelliert. Der Zusammenhang zwischen dem Innendruck und die infolge der Deckelkräfte entwickelten Spannung lautet:

Die Untersuchung des Druckeffekts wird anhand drei verschiedener Drucke durchgeführt; P = 20 MPa; P = 40 MPa und P = 60 MPa. Daraus resultieren sechs Simulationen, die mit den Ergebnissen der Voll- und Hohlproben unter normalen Bedingungen verglichen werden.

Die Modellierung des Zugversuchs in Kombination mit der Druckbedingung der Voll- und Hohlprobe sind in Abbildung 5.1 dargestellt.

5.1.2 Ergebnisse



Abbildung 5.1:FEM-Modell der Voll- und Hohlprobe

Die Simulationen wurden anhand der Newton-Raphson Methode durchgeführt. Dabei wurde die Annahme getroffen, dass die Simulation beendet sei, sobald das spezifische Hohlraumvolumen 0.25 erreicht. Für die Vollprobe wurde das Element A im Zentrum der Probe (untere linke Ecke des FEM-Models) gewählt, um die Variation der physikalischen Felder zu untersuchen. Wohingegen bei der Hohlprobe das Element B* gewählt wurde, welches, wie bereits in Abschnitt 4.2 erläutert, als erstes aus dem Netzt gelöscht wird.

Einleitend werden die Ergebnisse der Vollprobe anhand der bereitgestellten Diagramme in Abbildung 5.2 evaluiert. Nachdem die Vollprobe mit Druck belastet wurde, ändert sich die Position des virtuellen Extensometers ($\frac{1}{2}l_0 = 5 x ra = 5 x 2.5 = 12.5 mm$) sowie der Querschnittsfläche der Probe. Um die Spannungs-Dehnungskurven der Vollproben unter Druck darstellen zu können, muss nun geklärt werden, auf welche Referenzgeometrie sich die Dehnung und Spannung beziehen sollen.

Im Labor und nach der Durchführung des Zugversuchs bestehen die aufgenommenen Daten aus Kraft und Verschiebung, die nun konvertiert werden müssen. Die Kraft wird im Prinzip aus einem Kraftmessgerät entnommen. Die ermittelte Spannung bezieht sich dadurch auf die gemessene Querschnittsfläche der Probe, bevor sie in der Prüfeinrichtung platziert wird. Während die Dehnung aus der gewonnenen Wegmessung resultiert. Diese Daten stammen aus dem Extensometer, oder aus der Bewegung des Kolbens, sobald die Ziehvorrichtung mit dem Ziehen der Probe beginnt. Dies hat zur Folge, dass in dem Moment, in dem sich der Druck in der Simulation aufgebaut und der Masterknoten mit dem Ziehen der Probe beginnt, dies die Aufnahme der Dehnung einleitet.

Basierend auf dieser Information, folgt die Darstellung der Spannungs-Dehnungskurve der Proben unter Druck, wie in Abbildung 5.2-a zu sehen ist.

Durch die Kurve ist ersichtlich, dass sich der lineare Bereich der vier Proben überlappt und sie dieselbe Fließgrenze erreichen. Ab diesem Stadium jedoch beginnen die Kurven sich zu distanzieren und erreichen jeweils verschiedene maximale Festigkeiten. Unter normalen Bedingungen beträgt die Vollprobe, wie bereits erwähnt, eine maximale Festigkeit von 644 MPa. Unter 20 MPa, 40 MPa und 60 MPa Außendruck besitzen die Vollproben jeweils 650.9 MPa, 657.98 MPa und 665.91 MPa. Zudem hat der Druck den Moment der Einschnürung unterdrückt, da die totalen Dehnungen bei der maximalen Festigkeit der vier Proben zwischen 0.42, 0.449, 0.465 und 0.475 variierten. Im Einschnürbereich entfernen sich die Kurven weiter auseinander; je höher der Außendruck, desto langsamer entfestigen sich die Proben.

Abbildung 5.2-b stellt einen Vergleich der Variationen der von-Mieses Spannungen in Funktion der wahren radialen Dehnung zwischen den ersten Elementen im Zentrum der Vollprobe dar, die mit unterschiedlichen Drucken beaufschlagt wurden. Die Verläufe der vier Kurven sind im linearen Bereich, im Bereich der Gleichmaßdehnung, sowie zum Großteil des Einschnürbereichs annähernd gleich (die Einschnürung der Vollprobe unter normalen Bedingungen beginnt bei $\ln\left(\frac{A_0}{A}\right) = 0.313$). Erst mit Erreichen der radialen wahren Dehnung auf 1.0 beginnen die Kurven sich voneinander zu entfernen. Zudem ist auch hier ersichtlich, dass die Entfestigung bei dem Element A der Vollprobe unter 60 MPa Außendruck eine langsamere Entfestigungsphase und mehr Duktilität aufweist als im Vergleich mit dem Element der Vollprobe unter normalen Bedingungen.

Bei den hydrostatischen Spannungen (negative Wert des hydrostatischen Drucks), Abbildung 5.2-c, weisen die Kurve einen ähnlichen Verlauf auf, lediglich ein wenig voneinander versetzt. Die Versetzung zwischen den Kurven spiegelt den Unterschied des hydrostatischen Drucks $\Delta P = 20 MPa$ wider. Am Ende der Simulation knickt die Vollprobe unter normalen Bedingungen (schwarze Kurve) früher ab als die anderen Vollproben, die unterschiedliche Außendrucke erfahren haben. Der Grund hierfür ist, dass diese Probe eine höhere hydrostatische Spannung erfahren hat und die Schädigung daher früher einsetzt. Bei der Vollprobe unter 60 MPa Außendruck wurde das Element aufgrund des Außendrucks weniger aufgeweitet, welches den Einfluss der plastischen volumetrischen Dehnung gehemmt hat.

Im Bereich der Triaxialität hat der Druck zu einem verspäteten Auftreten der Bruchdehnung geführt. Zudem wurde auch die maximale erreichte Triaxialität minimal verringert (s. Abbildung 5.2-d). Bei der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens sowie dessen Wachstum ist in den Abbildungen 5.2-e und 5.2-f ersichtlich, dass die hydrostatische Spannung vom Druck gehemmt und das Wachstum der Hohlräume daher gebremst wurde. Bei der Nukleation hingegen (s. Abbildung 5.2-g) hatte der Druck keinen Einfluss. Schlussfolgernd ist zu konstatieren, dass der Druck die Einschnürung unterdrückt, für mehr Duktilität sorgt und das Wachstum der Hohlräume verlangsamt.

Nun folgt die Analyse der Ergebnisse des Drucks auf die Hohlprobe, welche in den bereitgestellt Diagrammen der Abbildung 5.3 werden. Die Erstellung der Spannungsdehnungskurven der Hohlprobe unter Innendruck wurden, wie vorher präsentiert, ermittelt. Abbildung 5.3-a illustriert einen Vergleich zwischen ihnen und zeigt eine Überlappung während des Großteils der Simulation. Die Fließgrenze wurde nicht beeinflusst, während eine minimale Veränderung bei der maximalen Festigkeit registriert wurde. Die Vollprobe unter normale Bedingung, wies eine maximale Festigkeit von 644.3599 MPa und eine Totale Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.42836$ auf, die Probe unter 20 MPa innendruck wies eine maximale Festigkeit von 644.62 MPa und eine Totale Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.4248$ auf, die Probe unter 40 MPa innendruck wies eine maximale Festigkeit von 644.95 MPA und eine Totale Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.4227$ auf und abschließend die Probe unter 60 MPa innendruck wies eine maximale Festigkeit von 645.34 MPa und eine Totale Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.42305$ auf. Kurz bevor das kritische spezifische Hohlraumvolumen f_c erreicht wurde ($f = f_c$, wenn $\varepsilon_{tech} = 0.561$), beginnt die Distanzierung zwischen den Kurven langsam sichtbar zu sein. Der Innendruck bewerkstelligte minimale Beschleunigung der Einschnürung. Dies ist ersichtlich durch die Abnahme der totalen Dehnung. Die Probe unter 60 MPA innendruck zeigte eine Zunahme bei der totalen Dehnung, dies könnte ein Ausreißer sein der Grund dafür könnte in der gewählten Schrittweite liegen.

Bei dem ersten Element, welches aus dem FEM-Netz entfernt wurde, illustriert Abbildung 5.3b, dass die Variation im Bereich von-Mieses Spannung zum Großteil der Simulation nicht vom Innendruck beeinflusst wurde. Bevor das Element aus dem Netz gelöscht wird, findet jedoch eine Beschleunigung im Bereich der Entfestigungsphase statt. Diese scheint in Abhängigkeit des Drucks zu stehen. Die Erhöhung des Drucks hat die Duktilität des Elements verringert, da dieses eine geringere Bruchdehnung aufweist als das Element des Models ohne Innendruck.

Ähnlich wie bei der Variation der von-Mieses Spannung ist die hydrostatische Spannung bei den vier Proben nahezu gleich und lediglich kurz bevor f_c erreicht wird, beginnen sie sich voneinander zu distanzieren (s. Abbildung 5.3-c). Die Triaxialität in Abbildung 5.3-d bestätigt zudem die Reduzierung der Bruchdehnung infolge des Innendrucks. Die Elemente im Zentrum der Hohlprobe ohne Innendruck, mit 20 MPa,40 MPa und 60 MPa, erreichten jeweils eine Bruchdehnung (ln(A0/A)) von 1.423, 1.416,1.403 und schließlich 1.395.

Bei der Evolution und dem Wachstum des spezifischen Hohlraumvolumens (VVF und VVFG) wie in Abbildung 5.3-e und 5.3-f zu sehen, ist es ersichtlich, dass das spezifische Hohlraumvolumen nach der Fließgrenze homogen wuchs, jedoch bei der Koaleszenz wurde das Wachstum beschleunigt. Die Beschleunigung des Wachstums ist allerdings vom Druck abhängig. Die Hohlprobe mit dem höchsten Druck hatte eine schnellere Wachstumsphase als die Probe unter normalen Bedingungen. Im Niveau der Nukleation (s. Abbildung 5.3-g) hingegen sind keine Unterschiede zu beobachten.


Abbildung 5.2:Einfluss des Drucks auf **a**)Spannungs-Dehnungskurve der Vollprobe;**b**)auf der von-Mieses Spannung; **c**)auf der Variation des hydrostatischen Drucks; **d**)auf der Triaxialität; **e**)auf der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens (VVF) ;**f**)auf dem Wachstum des spezifischen Hohlraumvolumens (VVFG); **g**) auf der Nukleationdes spezifischen Hohlraumvolumens des Elements A (VVFN).



Abbildung 5.3: Einfluss des Drucks auf **a**)Spannungs-Dehnungskurve der Hohlprobe;**b**)auf der von-Mieses Spannung; **c**)auf der Variation des hydrostatischen Drucks; **d**)auf der Triaxialität; **e**)auf der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens (VVF);**f**)auf dem Wachstum des spezifischen Hohlraumvolumens (VVFG); **g**) auf der Nukleationdes spezifischen Hohlraumvolumens des Elements B* (VVFN)

5.2 Einfluss der Wasserstoffversprödung

5.2.1 Kalibrierung und Simulation der Wasserstoffschädigung

In diesem Abschnitt wird die Simulation des Zugversuchs bei der Voll- und Hohlprobe unter dem Einfluss des Drucks und der Wasserstoffdiffusion durchgeführt.

Die Simulation der Wasserstoffschädigung bringt zwei Einschränkungen mit sich. Zum einen kann die Diffusion ausschließlich in Abaqus Standard anhand des Massen-Transport-Moduls simuliert werden. Zum anderen kann diese nicht simultan mit einer mechanischen Berechnung gekoppelt werden. Daher werden zwei Annahmen getroffen, um die Berechnung fortzuführen.

Wie bereits erwähnt, war die Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens durch zwei Phasen charakterisiert. Erstere kennzeichnet das homogene Wachstum des spezifischen Hohlraumvolumens, welches maßgeblich von den Nukleations-Parametern sowie den plastischen volumetrischen Dehnungen abhängt. Kennzeichnend für die zweite Phase ist die lokale Konzentration des spezifischen Hohlraumvolumens in den Bereichen mit einer hohen Triaxialität, die irgendwann zur Koaleszenz führt. Eine rapide Entfestigung des Materials findet aufgrund der Entstehung und Verbreitung des Risses statt, bis zur finalen Separation des Ligaments.

Das Zeitintervall, ab dem der Riss entsteht, bis zum finalen Bruch ist kurz. Von daher kann die Materialtrennungsprozedur als ein dynamisches Ereignis betrachtet werden, obwohl der Zugversuch quasistatisch ist. Deshalb wird die Annahme getroffen, dass die Diffusion des Wasserstoffs langsamer gegenüber der Rissverbreitung ist. Aufgrund dessen lautet die erste Annahme: Sobald das erste Element das kritische spezifische Hohlraumvolumen erreicht hat, wird die Variation der physikalischen Felder so schnell sein, dass keine Beeinflussung der Diffusion besteht. Die zweite Annahme besteht darin, dass die Schädigung langsam stattfindet. Anders ausgedrückt, die Schädigung infolge von Wasserstoff findet nur statt, nachdem die Diffusion beendet wurde. Die zweite Annahme kann von der physikalischen Realität abweichen, jedoch ist sie wichtig, um mit der Simulation fortzufahren, da wie bereits erwähnt, eine gekoppelte mechanische und Diffusionsberechnung momentan in Abaqus nicht vorhanden ist. Zudem ist das Ziel dieser Studie, ein Verständnis des Einflusses des Wasserstoffs auf das mechanische Verhalten der Zugprobe zu vermitteln und keine Dimensionierung oder einen Bauteilentwurf zu erstellen.

Basierend auf den beiden präsentierten Annahmen kann nun die Wasserstoffsimulation modelliert werden. Zuerst wird der Zugversuch bei der Voll- bzw. Hohlprobe mit Druck in Abaqus Standard anhand von Newton-Raphson bis zum Erreichen des maximalen spezifischen Hohlraumvolumens durchgeführt. Zwei Punkte müssen Beachtung finden, bevor mit der Simulation begonnen werden kann. Im Input Deck muss ein Befehl hinzugefügt werden, um die resultierenden Spannungen in Gaußpunkten als ASCII-Datei mit der Form "Datei.FIL" speichern zu können. Diese werden später für die Diffusionsberechnung benötigt. Der zweite Punkt betrifft die erfolgreiche Abschließung der Simulation, auch nach dem Erreichen des f_c -Moments. Ansonsten kann die "Datei.FIL"-Datei nicht angenommen werden. Das bedeutet, es ist notwendig, dass die eingegebene Verschiebung u_{Master} so groß sein soll, dass das Erreichen von f_c garantiert ist, aber trotzdem so klein, dass der Solver die Nachricht "The Analysis has been completed succefully" liefert.

Wie bereits erwähnt, ist die Simulation des Zugversuchs verschiebungsgesteuert. Dies bedeutet, dass die Methode in der Lage ist, steigende Äste im Verschiebungskraft-Diagramm, sowie Snap-Through Phänomene zu berechnen. Die einzigen Konvergenzschwierigkeiten, die dem Solver während der Simulation begegnen, befinden sich am Ende der Simulation, wenn die vorgeplante Schrittweite zu groß gegenüber der Entfestigung ist. Damit ist der Solver nicht mehr in der Lage, den nächsten Zustand zu berechnen. Zudem liefert Abaqus während der Berechnung einen Bericht über den Status der laufenden Simulation. Dieser beinhaltet u. a. die Iterationszahl, die verwendete Schrittweite und die Anzahl der verwendeten Bisektionen.

Während der gesamten Berechnung beträgt die maximale Schrittweite, mit der die Simulation durchgeführt wird, 0.005, während der $u_{Master} = 10 mm$ beträgt. Mit dieser Einstellung wird sichergestellt, dass die vorgeplante Schädigung induziert wird. Kurz vor dem Ende der Simulation, wird der Entfestigungsprozess beschleunigt, dass der Solver nicht in der Lage ist, den nächsten Zustand zu berechnen. Daher reduziert dieser die Schrittweite so lange, bis die minimale vorgeplante Schrittweite und oder die maximale Anzahl der Bisektionen erreicht wurde. Wenn eine dieser beiden Bedingungen eintritt und der nächste Zustand nicht ermittelt werden könnte, bricht der Solver die Berechnung ab. Basierend auf den erreichten Ergebnissen, wird nun eine zweite Berechnung organisiert.

Die Simulation findet durch die Definition von drei Lastfällen, bei Proben unter Druckeinfluss, statt. Im zweiten Lastfall bekommt der u_{Master} den letzten mit 0.005 Schrittweite berechneten vertikalen konvergierten Verschiebungswert. Im. dritten Lastfall wird nun der u_{Master} auf dem nicht konvergierten Verschiebungswert angebracht. Die Schrittweite in diesem Lastfall wird nun auf 0.0001 reduziert, um sicherzustellen, dass der Solver in der Lage ist, erfolgreich die Schädigung in der Nähe von f_c zu berechnen.

Um eine hohe Datenmenge zu vermeiden, wird die Schreibrate im. zweiten Lastfall auf 1 gesetzt, während beim dritten Lastfall die Ergebnisse aller Iterationen geschrieben werden. Dies dient der Sicherstellung, dass der Moment bei dem das spezifische Hohlraumvolumen f_c erreicht, aufgenommen wird. Im Falle einer erfolglosen Berechnung, wird der Verschiebungswert des u_{Master} im dritten Lastfall um ein paar Mikrometer reduziert.

Basierend auf den mechanischen Ergebnissen, wird nun die Diffusion des Wasserstoffs zum Zeitpunkt des kritischen Hohlraumvolumens simuliert. Zu diesem Zweck wird die bereits generierte FIL-Datei benötigt, um ein vordefiniertes Feld (*engl. Predefined Field*) zu deklarieren. Aufgrund dessen berechnet Abaqus die Verteilung der Konzentration des Wasserstoffs in Abhängigkeit vom herrschenden hydrstatischen Druck. Dieser Schritt (die Definition eines vordefinierten Feldes infolge einer FIL-Datei) kann nur erfolgen, wenn die Ergebnisse aus Abaqus Standard stammen und nicht aus Abaqus Explicit gewonnen werden. Daher wsr es wichtig, die Kalibrierung der Nukleation-Parameter des GTN-Modells in Abaqus Standard durchzuführen. Wäre beispielsweise eine kleine Standarddeviation gewählt worden, wie in der Studie von Kiran et.al. ($S_N = 0.05$) [27], könnte die Kalibrierung zwar anhand einer expliziten Berechnung durchgeführt werden, allerding wäre die Berechnungszeit bis zum f_c Moment, die zur Erstellung der FIL-Datei notwendig ist, unrealistisch lang, da die Schrittweite weiter reduziert werden soll, um die vorgeplante Nukleation zu induzieren.

Die Diffusion ist ein physikalischer Prozess und beschreibt den Platzwechselvorgang der Atome bzw. Moleküle, wenn ein Konzentrations-, Temperatur- und oder Druckunterschied herrscht. In Abaqus stützt sich der Vorgang auf das Massenerhaltungsgesetz: [37]

Dabei beschreibt der Term $\frac{dc}{dt}$ die zeitliche Variation der Konzentration und hat die Einheit Part per Million (PPM) pro Sek. V bezeichnet das Volumen der betrachteten Domäne in mm³, **n** die Normale auf der Fläche S und J repräsentiert den Diffusionsfluss. [37]

Der Diffusionsfluss ist in Anlehnung an das Fick`sche Gesetz formuliert und wird anhand folgender Gleichung geschrieben: [37]

$$J = -s.D\left[\frac{\partial\phi}{\partial x} + k_s \frac{\partial}{\partial x} (\ln (\theta - \theta_z)) + k_p \frac{\partial p}{\partial x}\right] \qquad Gl. 5-3$$

Dabei repräsentiert *s* die Löslichkeit des diffundierten Stoffs und hat als Einheit PPM mm \sqrt{N} in dieser Studie wird Ihren Wert gleich 1 PPM mm \sqrt{N} gesetzt. [37]

D ist die Diffusionskonstante und hat den Wert 4.5.10⁻⁴ mm²/sec [16], während $\frac{\partial \phi}{\partial x}$, die örtliche Änderung der normalisierten Konzentration ϕ darstellt. Die normalisierte Konzentration bildet das Verhältnis zwischen der Konzentration *c* und der Löslichkeit *s* ab: $\phi = \frac{c}{c}$ [37]

Durch die Verwendung der normalisierten Konzentration, wird die Stetigkeit des Konzentrationsfelds sichergestellt, wenn unterschiedliche Materialien mit unterschiedlichen Löslichkeitswerten das FEM-Netz teilen. [37]

Der zweite Term der Gleichung berücksichtigt den Einfluss des Temperaturgradienten. Dabei stellt k_s den sogenannten Soret-Faktor dar, [37]. Dadurch, dass die Temperatur in dieser Studie keine Berücksichtigung findet, wird k_s in der Simulation nicht eingegeben.

Der dritte Term verknüpft die Diffusion des Wasserstoffs in Abhängigkeit vom vorherrschenden hydrostatischen Druck der Probe und wird durch den Faktor k_p und die örtliche Änderung des Druckgradienten $\frac{\partial p}{\partial x}$ charakterisiert [37].

Der Faktor k_p wird Druckspannungsfaktor genannt und wird in folgende Form in Abhängigkeit der herrschenden normalisierten Konzentration ϕ angegeben: [37]

Dabei stellt $V_H = 2000 \ mm^3/mol$ [16] das partielle molare Volumen des Wasserstoffs bei Stählen dar. *R* ist die universelle Gaskonstante und beträgt 8314 *mJ*/(*mol. K*) [37].

Die Temperatur $\theta = 300 \ K \equiv 27 \ C^{\circ}$ stellt im Versuch durchgeführte Temperatur dar, während $\theta_z = 273 \ K \equiv 0 \ C^{\circ}$ beträgt.

Im vorliegenden FEM-Model der Voll- und Hohlprobe wird jeweils an der Außenkontur der Vollprobe, sowie der Innenkontur des Zylinders der Hohlprobe, eine normalisierte Konzentration von $\phi = 1.\sqrt{N}/mm$ angebracht. Die Diffusion wird für 28800 Sec (8 Std) mit einer Schrittweite von 180 Sek simuliert. Diese wird nach 160 Iterationen abgeschlossen und die Ergebnisse der Variation der normalisierten Konzentration im Eingeschnürten Bereich ist in Abbildung 5.4-c zu sehen.

Abbildung 5.4 stellt einen Konturplot des spezifischen Hohlraumvolumens, des hydrostatischen Drucks, sowie der Ergebnisse der Diffusion im Zeitpunkt $f = f_c$ dar. Die Ergebnisse der Diffusionsberechnung können nur auf der Referenzgeometrie abgebildet werden, da die resultierende Konzentrationsverteilung ein Skalarfeld repräsentiert.

Durch den Vergleich zwischen Abbildung 5.4-b und 5.4-c kann geschlussfolgert werden, dass die Intensität des hydrostatischen Drucks, Einfluss auf der resultierende Wasserstoffkonzentration nimmt.

Im Bereich des geringen hydrostatischen Drucks (roter Bereich Abbildung 5.4 b), findet eine auch Diffusionsaktivität statt. Die Ursache hierfür liegt darin, dass im Laufe der Simulation der Term $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ in Gl.5-3 irgendwann größer als der Term $k_p \frac{\partial p}{\partial x}$ ist und somit vermehrt Wasserstoff in diesen Bereich eindringt.

Damit die Wasserstoffschädigung in der mechanischen Berechnung miteinfließt, werden die resultierenden Diffusionsergebnisse als Vorlage verwendet, um die angepassten GTN-Parameter in Abhängigkeit von der Konzentration auszudrücken. Das bedeutet wiederum, dass bei Elementen, die eine hohe Wasserstoffkonzentration aufweisen, eine frühere und schnellere Nukleation stattfindet, während im Extremfall, Elemente, die kein Wasserstoff aufgenommen haben, die in Abschnitt 3.4 ermittelten Nukleationsparameter besitzen. Dieser Ansatz stützt sich zum Teil auf die Studie von Depreature et al [16] Der Unterschied zwischen der hier vorgestellten Studie und der Studie von Depreature et al [16] besteht darin, dass in [16], eine Subroutine entwickelt wurde, um eine gekoppelte mechanische und Diffusionsberechnung durchzuführen



Abbildung 5.4:Kontourplot **a**) des spezifischen Hohlraumvolumen (VVF) während der Koaleszenz; **b**) des Hydrostatischen Drucks; **c**) der lokalen Wasserstoffkonzentration

In der Studie von Depreature et al. [16] wurde der Nukleationskoeffizient A in Funktion der Wasserstoffkonzentration ausgedrückt. Zu diesem Zweck wurde eine Weibull'sche Verteilung verwendet, da diese eine höhere Flexibilität besitzt, um verzerrte Verteilungen darzustellen und wie in [16] erwähnt wurde, in der Lage ist, strikte positive Nukleation-Werte bereitzustellen.

Die Weibull'sche Verteilung wird wie folgt ausgedrückt:

$$A_{Weibull} = \frac{f_n \cdot k}{\varepsilon_n} \cdot \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_n}\right)^{k-1} \exp\left[-\left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_n}\right)^k\right] \qquad \qquad Gl. 5-5$$

Dabei repräsentiert der Term k den Formparameter der Verteilung, während $\frac{1}{\varepsilon_n}$ den Skalenparameter darstellt.

Der Kehrwert des Skalenparameters ε_n wird in [16] in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration C_L geschrieben:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n0} - \xi_1, (1 - \exp(-\xi_2, C_L))$$
 Gl. 5-6

Dabei repräsentiert ε_{n0} die Inverse des Skalenparameters, wenn keine Wasserstoffschädigung vorhanden ist. Währenddessen die Parameter ξ_1 und ξ_2 verwendet werden, um den Einfluss der Konzentration auf die Schädigung zu adjustieren.

In Abaqus stützt sich die mathematische Formulierung der Nukleation der Hohlräume auf dem Chu und Needleman-Ansatz, der wiederum die Gauss`sche Verteilung verwendet [22]. Um den Ansatz wie in [16] zu verwenden ist es notwendig den Einfluss der Variation der Konzentration in Gl.5-6 auf die Weibull'schen Verteilung aus Gl.5-5, sowie den Zusammenhang mit der Gauss'schen Verteilung zu untersuchen.

Zu diesem Zweck wurden die ermittelten Parameter der Gauss'schen Verteilung und die an die Gauss'sche Verteilung angepasste "äquivalente" Weibull'sche Verteilung, in Abbildung 5.5 dargestellt.



Abbildung 5.5: Annährung der Weibull'schen Verteilung an die Gauss'schen Verteilung

In Abbildung 5.5 ist ersichtlich, dass der Unterschied zwischen den Verteilungen vernachlässigbar klein ist.

Nach dem die Parameter der "äquivalenten" Weibull`schen Verteilung ermittelt wurden, folgt nun die Darstellung der Einfluss der Konzentration. Hierzu wurde die Konzentration von $C_L =$ 0 *PPM* für die Umgebungsbedingung bis hin zu $C_L = 2.2 PPM$, mit einer Variationsrate $\Delta C_L =$ 0.2 *PPM* in Gl.5-6 eingesetzt und der Einfluss auf die Weibull`sche Verteilung (Gl.5-5) in Abbildung 5-6 mit den durchgezogenen Linien dargestellt. Die verwendete Wasserstoffschädigungsparameter ξ_1 und ξ_2 wurden für den Moment aus [16] entnommen und betragen jeweils 0.55 und 1.86 PPM⁻¹. Anhand dieser kann die "äquivalente" Gauss`sche Verteilung ermittelt und in Abbildung 5-6 mit den gestrichelten Linien dargestellt werden

Die Abbildung 5.6 verdeutlicht, dass die Erhöhung der Wasserstoffkonzentration, die Reduktion des Medians ε_n und der Standarddeviation S_n der Gauss`schen Verteilung bewerkstelligt hat.



Abbildung 5.6: Annährung der Gauss`schen Verteilung an die Weibull`schen Verteilung in Abhängigkeit von der Wasserstoffschädigungsparameter aus [15]

Das verwendete Material in [16] war ein API 5L X70 Pipeline Stahl wohingegen in dieser Studie das zu untersuchende Material ein austenitischer Stahl vom Typ 316TI ist. Daher können die ermittelten Schädigungsparameter infolge von Wasserstoffdiffusion $\xi_1 = 0.55$ und $\xi_2 =$ 1.86 *PPM*⁻¹ nicht verwendet werden. Stattdessen wurde in der Studie von Michler et al. [38] berichtet, dass beim Versuch einer Vollprobe aus 316TI unter Umgebungsbedingungen und mit einer Abzugsrate von 5.5.10⁻⁵ s⁻¹, eine Fließgrenze von 429 MPa, eine maximale Festigkeit von 644 MPa und eine Brucheinschnürung von 74% erzielt wurden. [38]

In einer Wasserstoffumgebung mit 10 MPa Außendruck und einer Wasserstoffkonzentration von 2 PPM hingegen, betrugen die resultierende Fließgrenze, die maximale Festigkeit und die Brucheinschnürung jeweils 468 MPa, 650 MPa und 61%. Die Abnahme in der Brucheinschnürung betrug 17.56%. [38]

In der vorliegenden Studie wird die Annahme getroffen, dass die vorherige Abnahme in der Brucheinschnürung von 17.56% auch durch 20 MPa Außendruck und eine Wasserstoffkonzentration von 1.0 PPM erreicht werden kann. Darauf aufbauend werden die ξ_1 und ξ_2 Parameter in Gl. 5-6 variiert, bis die gezielte Kalibrierung erreicht wird. Die Brucheinschnürung der Vollprobe unter 20 MPa Außendruck beträgt 83.15%. Durch die Wasserstoffdiffusion soll sie nun auf 68.54% sinken.

Dadurch dass die Beschleunigung der Nukleation durch die Parameter ξ_1 und ξ_2 gesteuert wird, ist die Kalibrierung der Wasserstoffschädigung überbestimmt. Zudem stellt sich heraus, dass die Ermittlung dieser Parameter uneindeutig ist. Der Grund hinter dieser Aussage, liegt im Verlauf der Gl.5-6, welcher in Abbildung 5.7 veranschaulicht wurde.

Wie in Abbildung 5.7 zu erkennen ist, wurde Gl.5-6 in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration dargestellt. Es ist ersichtlich, dass der Parameter ξ_1 die Absenkung der Inverse der Skalenparameter der Weibull`schen bzw. des Medians der Gauss`schen Verteilung steuert. Währenddessen ist der Parameter ξ_2 für ihre Sinkrate verantwortlich. Es stellt sich nun die Frage, mit welchen Parametersätzen bzw. mit welcher Konstellation, nun der iterative Prozess durchgeführt werden soll.



Abbildung 5.7 Abhängigkeit der Skalenparameter von der Wasserstoffkonzentration

Für den Parameter ξ_1 muss die Wahl des Wertes gering ausfallen, wohingegen ξ_2 einen hohen Wert besitzen muss, um schnellstmöglich ein Plateau ab einer Konzentration von 0.6 PPM zu erreichen, wie durch die schwarze, grüne und orange Kurve dargestellt ist. Physikalisch kann daraus geschlussfolgert werden, dass die Elemente, bei denen die Wasserstoffkonzentration über der erwähnten Konzentration liegt, dieselbe Gauss`sche Verteilung besitzen und dadurch eine gleichzeitige Nukleation stattfindet. Die Zweite Möglichkeit wäre die Wahl eines höheren ξ_1 und eines geringen ξ_2 Werts, wie durch die roten und blauen gestrichelten Kurven dargestellt Dies hätte zur Folge, dass zu jeder Konzentration ein unterschiedlicher ist. Nukleationszeitpunkt herrscht. Diese zweite Variante ist physikalisch sinnvoller, allerdings auch aufwendiger, da für jeden Konzentrationspunkt eine "äquivalente" Gauss'sche Verteilung für jede einzelne Weibull'sche Verteilung ermittelt werden muss. Aus diesem Grund wird die iterative Ermittlung anhand der ersten Methodik fortgeführt und dementsprechend werden mit den schwarzen, grünen und orangen Kurven in Abbildung 5.7 iteriert. Durch diese Methodik bleibt der Aufwand hinter der Anpassung der Gauss'schen Verteilung gering und die Abdeckung eines großen Suchfeldes ist somit gesichert.

Anhand der vorgeschlagenen Wasserstoffschädigungsparameter in Abbildung 5.7 werden die Nukleationsparameter des GTN-Modells in Abhängigkeit von der Konzentration in Tabelle 5-1 bereitgestellt. Die Materialdaten können bspw. anhand der Iteration A wie folgt interpretiert werden. Bei den Elementen, die keine Wasserstoffaufnahme aufweisen, findet die Nukleation, anhand der Nukleationsparameter die in Abschnitt 3.4 ermittelt wurden, statt. Währenddessen besitzen die Elemente, bei denen die Wasserstoffkonzentration 0.2 beträgt, einen Median von 0.169, was wiederum bedeutet, dass wenn die plastische äquivalente Dehnung diesen Wert erreicht, der Nukleationskoeffizient A_{Gauss} seinen maximalen Wert erzielt. Zudem beträgt die Standarddeviation den Wert 0.0415. Die Elemente, deren Wasserstoffkonzentrationen zwischen 0.0 und 0.2 liegen, interpoliert der Solver linear.

Ab diesem Stadium wird die Berechnung nur explizit durchgeführt, da die Standarddeviationswerte klein ausfallen und die Verwendung der Newton-Raphson Methode zeitaufwendiger wäre.

		Iteration A		Iteration B		Iteration C	
H-Parameter		$\xi_1 = 0.55$	$\xi_2 = 10$	$\xi_1 = 0.4$	$\xi_2 = 10$	$\xi_1 = 0.25$	$\xi_2 = 10$
Normalisierte Konzentration	f _n	ε _n	S _n	ε _n	S _n	ε _n	S _n
0	0.005	0.62	0.15	0.62	0.15	0.62	0.15
0.2	0.005	0.169	0.0415	0.29	0.071	0.415	0.1
0.4	0.005	0.105	0.0265	0.245	0.06	0.385	0.095
0.6	0.005	0.1	0.0245	0.24	0.0585	0.385	0.094
0.8	0.005	0.1	0.024	0.24	0.0585	0.38	0.094
1	0.005	0.1	0.024	0.24	0.0585	0.38	0.094
1.2	0.005	0.098	0.024	0.24	0.0585	0.38	0.094
1.4	0.005	0.098	0.024	0.24	0.0585	0.38	0.094
1.6	0.005	0.098	0.024	0.24	0.0585	0.38	0.094
1.8	0.005	0.098	0.024	0.24	0.0585	0.38	0.094
2	0.005	0.098	0.024	0.24	0.0585	0.38	0.094
2.2	0.005	0.098	0.024	0.24	0.0585	0.38	0.094

Tabelle 5-1: Materialkarte für die Iterationen A, B und C in Abhängigkeit von der Normalisierten Wasserstoffkonzentrationen

Die Ergebnisse der drei durchgeführten Iterationen sind durch ihre zugehörigen Spannungs-Dehnungskurven, sowie durch deren Evolution des Einschnürverhaltens in Abbildung 5.8 und Abbildung 5.9 präsentiert. Zudem weist die Wasserstoffschädigung daraufhin, dass die Beschleunigung der Nukleation eine geringe Reduktion der maximalen Festigkeit bewerkstelligt hat, wohingegen die Abnahme in der Bruchdehnung stärker ausgeprägt ist.

Ein interessanter Aspekt entsteht zudem durch den Vergleich zwischen der Probe, bei der die Schädigung früh einsetzt (Iteration A) und der Probe, bei der die Schädigung relativ spät startet (Iteration C). Die erste Probe (siehe blaue Kurve), weist aufgrund vom früheren Einsetzten der Nukleation, weniger Spannung im Bereich der Gleichmaßdehnung auf, jedoch eine höhere Duktilität im Bereich der Einschnürung als bei der zweiten Probe (grüne Kurve), bei welcher die Schädigung später entstand.

Iteration A (blaue Kurve) wies eine maximale Festigkeit von 644.38 MPa bei einer Totalen Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.4494$ und einer Bruchdehnung $\varepsilon_{bruch} = 0.586$ auf, Iteration B (rote Kurve) wies eine maximale Festigkeit von 645.27 MPa bei einer totalen Dehnung von $\varepsilon_{tech} =$ 0.4383 und einer Bruchdehnung $\varepsilon_{bruch} = 0.579$ auf, Iteration C (grüne Kurve) wies eine maximale Festigkeit von 648.55 MPa bei einer totalen Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.4133$ und einer totalen Bruchdehnung $\varepsilon_{bruch} = 0.563$ auf. Im Vergleich dazu kennzeichnete sich die Vollprobe mit Außendruck und ohne Wasserstoffschädigung mit einer maximalen Festigkeit von 650.91 MPa bei einer totalen Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.4504$ und eine Bruchdehnung $\varepsilon_{bruch} = 0.5919$.

In Abbildung 5.9 findet auch eine Darstellung des Vergleichs der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens des Elements, das sich im Zentrum der Proben befindet, statt. Ersichtlich ist, dass die frühere Nukleation die Wachstumsphase des Hohlraumvolumens unbeeinflusst lässt. Die Steigerung auf den Wert f = fn = 0.005 fand rapide statt, wie anhand der blau gestrichelten Kurve zu erkennen ist (Nukleation startet bei $t \approx 0.3 \ sek$.). Nach der Nukleation wuchs jedoch das Hohlraumvolumen homogen mit einer konstanten Wachstumsrate weiter, bis das kritische spezifische Hohlraumvolumen erreicht wurde ($t \approx 0.9 \ sek$). Die anderen Proben zeigen ein gegenteiliges Verhalten; je später die Nukleation geplant wurde, desto schneller wurde ein Wachstum bewerkstelligt.



Abbildung 5.8: Einfluss der gewählten Wasserstoffschädigungsparameter ξ_1 und ξ_2 auf der Spannungs-Dehnungskurve

Die früher stattfindende Nukleation der Hohlräume hatte letztlich nur einen geringen Einfluss auf das Einschnürverhalten der Proben. Dies ist ersichtlich im Vergleich zwischen der schwarzen durchgezogenen Kurve, welche die Vollprobe unter Druck darstellt und der blauen durchgezogenen Line, welche die Probe repräsentiert, bei welcher die Nukleation zuerst startet (Iteration A). Eine spätere Nukleation der Hohlräume hat, wie anhand der roten und grünen Kurve ersichtlich, dazu geführt, dass ein früheres Einsetzen der Einschnürung stattfindet, wohingegen es keinen Einfluss bei der Brucheinschnürung gab, alle Proben wiesen einen Wert von 83 % auf.



Abbildung 5.9: Einfluss der gewählten Wasserstoffschädigungsparameter ξ_1 und ξ_2 auf dem Einschnührverhalten und Evolution des spezifischen Hohlraumvolumen im Zentrum der probe

Anhand der vorpräsentierten Ergebnisse lässt sich schlussfolgern, dass sich der Ansatz von Depreature et al. [16] für dieses Materialmodell nicht ausreicht, um die Wasserstoffschädigung abzubilden. Zwei Gründe könnten hierfür ausschlaggebend sein. Erstens, die Entwicklung des Hohlraumvolumens in diesem Modell ist überwiegend von Wachstum gekennzeichnet. Das spezifische Hohlraumvolumen beträgt aufgrund von Nukleation fn = 0.005, während das spezifische Hohlraumvolumen infolge von Wachstum 0.245 beträgt. Der zweite Grund könnte vermutlich mit der Entkopplung der Diffusion von der mechanischen Berechnung zusammenhängen.



Abbildung 5.10 Ermittlung des neuen fc Parameters durch den Vergleich zwischen der Einschnürung und das Hohlraumvolumen (VVF) des Elements im Zentrum der Vollprobe

Ab diesem Stadium werden die Schädigungsparameter der Iteration C gewählt und mit diesen weiter gerechnet. Um die Abnahme in der Brucheinschnürung zu bewerkstelligen, wird das kritische spezifische Hohlraumvolumen fc reduziert. Die Reduktion dieses Parameters stützt sich auf den Vergleich zwischen der Evolution der Einschnürung in Iteration C und der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumens im Zentrum der Vollprobe, welches in Abbildung 5.10 dargestellt ist. Die gezielte Brucheinschnürung 68.54 % wird erreicht, wenn der fc Parameter auf 0.025 gesetzt ist, zudem wird der Parameter f_f arbiträr auf 0.03 gesetzt.

Ähnlich wie bei der Vollprobe, wird die Simulation des Zugversuchs der Hohlprobe bis zum Moment der Koaleszenz fc = 0.2 durchgeführt, um ein vordefiniertes Spannungsfeld zu generieren. Letzteres wird in die Diffusionsberechnung einfließen, um die Verteilung der lokalen Wasserstoffkonzentration im Material nach 8 *std* \equiv 28800 *sek* berechnen zu können. Abschließend werden die Nukleationsparameter in Abhängigkeit von den Wasserstoffschädigungsparametern ξ_1 und ξ_2 der Iteration C und die resultierende lokale Wasserstoffkonzentration ausgedrückt.

Abbildung 5.11 stellt die Verteilung des spezifischen Hohlraumvolumen während der Koaleszenz, des hydrostatischen Drucks, sowie die resultierende lokale Wasserstoffkonzentrationsverteilung infolge der Diffusion im Einschnürbereich, dar.



Abbildung 5.11: Kontourplot a) des spezifischen Hohlraumvolumen während der Koaleszenz; b) des Hydrostatischen Drucks; c) der lokalen Wasserstoffkonzentration bei der Hohlprobe

5.2.2 Einfluss der Wasserstoffschädigung auf der Voll- und Hohlprobe

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der Wasserstoffschädigung auf das Verhalten der Vollund Hohlprobe mit Außen und Innendruck untersucht.

Zuerst werden die Ergebnisse der Vollprobe unter Wasserstoffbedingung und 20 MPa Außendruck mit der Vollprobe, welche nur mit einem Außendruck von 20 MPa beaufschlagt wurde (Abschnitt 5.1.2) und der normalen Probe (Abschnitt 4.2) miteinander verglichen. Zu diesem Zweck werden die Spannungs-Dehnungskurven, die Entwicklungen der Einschnürungen, sowie die Evolutionen der physikalischen Größen im Zentrum der Proben, herangezogen

Der Vergleich der Spannungs-Dehnungskurven zwischen den drei Proben weist eine gleichbleibende Fließgrenze bei allen Proben auf. Erst ab diesem Moment bis zur maximalen Festigkeit ist ein Unterschied im Verfestigungsverhalten zu sehen. Die Vollprobe aus Abschnitt 4.2 (schwarze Kurve) erreichte eine maximale Festigkeit von 644.33 MPa bei einer totalen Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.4250$, und eine Bruchdehnung von 0.5897. Die Vollprobe unter 20 MPa Außendruck (Abschnitt 5.1.2, blaue Kurve) wies eine maximale Festigkeit von 650.91 MPa bei einer totalen Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.4504$ und einer Bruchdehnung 0.5911 auf. Abschließend kennzeichnete sich die Probe unter Wasserstoff und 20 MPa Außendruck (rote Kurve) durch eine maximale Festigkeit von 648.9155 MPa bei einer totalen Dehnung von $\varepsilon_{tech} = 0.4133$ und einer totalen Bruchdehnung von 0.533.

Der einzige Unterschied, der zwischen der Probe unter Wasserstoff und 20 MPa Außendruck und der Iteration C zu beachten ist, ist die Reduktion des f_c Parameters von 0.2 auf 0.025. Diese Reduktion wurde durchgeführt, um eine Abnahme in der Brucheinschnürung zu bewerkstelligen. Letztere führte zu keiner Beeinflussung der maximalen Festigkeit der Vollprobe unter Wasserstoff und 20 MPa Außendruck, jedoch führte es zur Herabsetzung der Bruchdehnung von $\varepsilon_{bruch} = 0.563$ auf $\varepsilon_{bruch} = 0.533$.



Abbildung 5.13 Gegenüberstellung der Spanungs-dehnungskurve der Voll, der Voll unter Außendruck und der Vollprobe unter Außendruck und Wasserstoffschädigung



Abbildung 5.12:Gegenüberstellung der Einschnürung der Voll, der Voll unter Außendruck und der Vollprobe unter Außendruck und Wasserstoffschädigung

Der Einfluss der früher stattfindenden Nukleation der Hohlräume, ist auf der Evolution der Einschnürung zu sehen. Die Einschnürung der Probe unter Wasserstoffeinfluss (rote Kurve) distanziert sich von der schwarzen und blauen Kurve, bis das kritische Hohlraumvolumen $f_c = 0.025$ erreicht wird. Ab diesem Zeitpunkt wachsen die Hohlräume rapide, bis zum Stattfinden des finalen Bruchs, wo die Brucheinschnürung 68.5 % beträgt.

Die Evolution der Einschnürung wurde hier in Abhängigkeit von der Verschiebung im Extensometer und nicht in Abhängigkeit von der Zeit dargestellt, um die Vergleichbarkeit zu halten, da bei den Proben unter Druck, dieser erst aufgebaut werden muss, um daraufhin den Zugversuch fortzuführen.

In Abbildung 5.14 a wird der Vergleich zwischen der Evolution der Nukleation des spezifischen Hohlraumes bei den drei Vollproben unter den bereits erwähnten Bedingungen dargestellt. Der Verlauf jeder Kurve bildet die Integration des Terms A_{Gauss} . $d\varepsilon_p$. Zudem wurden die Kurven in Abhängigkeit von ln (A0/A) gezeigt. Bei der Vollprobe unter normalen Bedingungen und unter Außendruck, betrug der Median der Gauss`schen Verteilung $\varepsilon_n = 0.6$ und die Standardabweichung $S_n = 0.15$. Wie eingangs erwähnt, hat der Druck keinen Einfluss auf die Nukleation der Hohlräume, daher überlappten sich die schwarze und blaue Kurve. Hingegen verursachte der Wasserstoff und Außendruck ein Herabsetzten des Medians und der Standardabweichung in Abhängigkeit der lokalen Wasserstoffkonzentration. Die lokale normalisierte Konzentration bei den vier Integrationspunkten des Elements variierte zwischen $0.656 \sqrt{N}/mm$ und $0.816 \sqrt{N}/mm$, im Zentrum des Elements beträgt sie $0.73 \sqrt{N}/mm$. Basierend auf der Tabelle 5-1 besitzt das Element ein Median von $\varepsilon_n = 0.38175$, während seine Standardabweichung bei $S_n = 0.094$ liegt. Diese Information erklärt das frühere Eintreten der Nukleation im Element. Der Effekt der Reduktion des Medians ist ersichtlich, indem die Nukleationskurve nach links rückt, während die Abnahme in der Standardabweichung die Steigung der Kurve erhöht (rote Kurve).

Die Nukleation hat nur einen geringfügigen Einfluss auf das spezifische Hohlraumvolumen, wie in Abbildung 5.14-c ersichtlich. Ab ln (A0/A) = 0.2, nimmt die rote Kurve schneller zu, demgegenüber bleibt die Evolution, aufgrund des Wachstums in Abbildung 5.14-b, unverändert. Das spezifische Hohlraumvolumen erreicht den kritischen Wert $f_c = 0.025$, wenn ln (A0/A) = 1.053 (erste Kante der roten Kurve). Im Nachhinein steigt die Kurve rapide auf $f = f_f = 0.03$ (zweite Kante), woraufhin das Element aus dem Netz gelöscht wird.

Die Variation der von-Mieses Spannung, wie in Abbildung 5.14-d dargestellt, zeigt, dass die Kurven sich im linearen Bereich, im Bereich der Gleichmaßdehnung, sowie zu Beginn der Einschnürung überlappen. Erst ab $\ln (A0/A) = 0.8$ beginnt die rote Kurve sich von den anderen zu distanzieren und wenn sich $\ln (A0/A) = 1.06$. befindet, sinkt sie auf null, was wiederum das Erreichen des Bruchhohlraumvolumens des Elements signalisiert. Anhand dieses Verhaltens zeigt das Element die geringste Duktilität.

Zur Kenntnis genommen werden muss, dass mit dem Erreichen der Fließgrenze die Überlappung der drei Kurven relativ ist. Einzig bei einer extremen Vergrößerung, ist ein minimaler Unterschied der Kurven zu erkennen. Im Vergleich zu den geplotteten Spannungen ist der Unterschied daher vernachlässigbar. Aufgrund der früher einsetzenden Nukleation distanziert sich die rote Kurve ein wenig weiter von den anderen Kurven, jedoch nur für kurze Zeit und ihr Einfluss auf die anderen Feldgrößen ist nicht von Relevanz.

Im Bereich der Evolution des hydrostatischen Drucks bzw. der hydrostatischen Spannung (s. Abbildung 5.14-e) ist der Einfluss der Reduktion des Medians und der Standardabweichung nicht zu beobachten. Der einzige Unterschied, der hier zu Beginn der Simulation gesehen werden kann, wird vom Außendruck hervorgerufen. Der Einfluss der Reduktion des kritischen spezifischen Hohlraumvolumens f_c ist hingegen deutlicher zu erkennen. Ähnlich wie bei der Evolution der von-Miese Spannung, sinkt die Kurve auf null, sobald ln (A0/A) = 1.053 erreicht.

Die Triaxialität in der Vollprobe unter dem Effekt des Außendrucks und Wasserstoffs (s. Abbildung 5.14-f) zeigt ein ähnliches Verhalten, wie bei der Vollprobe unter Außendruck. Durch die annähernd gleiche Entwicklung der von-Mieses Spannung und der hydrostatischen

Spannung, ist jenes Verhalten zu erwarten. Der Unterschied liegt jedoch in der Reduktion des f_c Parameters, da diese bei der Probe unter Außendruck und Wasserstoffeinfluss eine maximale erreichte Triaxialität von 0.686 aufweist.



Abbildung 5.14 Einfluss des Wasserstoffs auf **a**) der Nukleation (VVFN);**b**)auf dem Wachstum (VVFG); **c**) auf der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumen (VVF); **d**) auf der von-Mieses Spannung; **e**) auf dem hydrostatischen Druck **f**) auf der Triaxialität im Zentrum der Vollprobe

Ähnlich wie bei der Vollprobe, wird der Vergleich zwischen der Hohlprobe unter Wasserstoffeinfluss und Innendruck mit der Hohlprobe unter Innendruck, sowie der Hohlprobe unter normalen Bedingungen hergestellt.

Die Spannungs-Dehnungskurven der drei Proben zeigen augenscheinlich eine Überlappung (s. Abbildung 5.15), jedoch weist auch hier das frühere Einsetzen der Nukleation einen kleinen Unterschied zwischen ihnen auf. Die drei Proben erreichen dieselbe Fließgrenze, worauf sie sich dann zu distanzieren beginnen. Die Proben unter normaler Bedingung und jene unter Innendruck, erreichen eine maximale Festigkeit von 644.36 MPa und 644.63 MPa bei einer

totalen Dehnung von 0.43136 und 0.42388. Dahingegen beträgt die maximale Festigkeit 642.75 MPa bei einer totalen Dehnung von 0.3810, bei der Hohlprobe unter Wasserstoffeinfluss und Innendruck.

Zu beachten ist, dass eine kleine Diskrepanz bei den resultierenden maximalen Festigkeiten und den dazugehörigen totalen Dehnungen der Hohlproben unter normalen und Innendruck Bedingungen in diesem Abschnitt und in Abschnitt 5.1.2 zu finden ist. Dies liegt daran, dass die vorliegenden Ergebnisse infolge einer expliziten Berechnung durchgeführt wurde, bei der die Schreibrate jede 0.001 Sek. eingestellt wurde, während bei der quasi-statischen Berechnung die Schreibrate alle 0.005. bei einem $u_{master} = 10 \ mm$ erfolgte.



Abbildung 5.16 Gegenüberstellung der Spanungs-dehnungskurve der Hohl, der Hohl unter Innendruck und der Hohlprobe unter Innendruck und Wasserstoffschädigung



Abbildung 5.15 Gegenüberstellung der Einschnürung der Hohl, der Hohl unter Innendruck und der Hohlprobe unter Innendruck und Wasserstoffschädigung

Der Einfluss der Beschleunigung der Nukleation ist bei der Evolution der Einschnürung zu sehen, die rote Kurve distanziert sich von der schwarzen und blauen Kurve und erreicht einen Brucheinschnürung von 67 % im Vergleich zu 77% bei den anderen Proben aufgrund der Abnahme im kritischen spezifischen Hohlraumvolumen f_c .



Abbildung 5.17:Einfluss des Wasserstoffs auf **a**) der Nukleation (VVFN);**b**)auf dem Wachstum (VVFG); **c**) auf der Evolution des spezifischen Hohlraumvolumen (VVF); **d**) auf der von-Mieses Spannung; **e**) auf dem hydrostatischen Druck **f**) auf der Triaxialität bei dem ersten Element welches aus dem Netz der Hohlprobe entfernt wird

Abbildung 5.17-a stellt die Nukleation des spezifischen Hohlraumvolumens des Elements, welches aus dem Netz gelöscht wird, dar, welche durch die Wasserstoffschädigung früher als bei den anderen Elementen, startete. Im Vergleich mit zur roten Kurve aus Abbildung 5.14-a,

ist kein Unterschied festzustellen, obwohl die lokale normalisierte Konzentration bei der Hohlprobe höher liegt. Diese Beobachtung ist ein direktes Ergebnis der Wahl der Schädigungsparameter aus Iteration C. Fällt die Wahl auf Iteration A oder B oder würden die Wasserstoffschädigungsparameter ξ_1 und ξ_2 so gewählt, dass der Verlauf der Inverse des Weibull`schen Skalenparameter steiler sinken würde, wäre die Schädigung früher entstanden. Somit weist die Probe weniger Festigkeit, jedoch mehr Duktilität auf.

Wie bei der Vollprobe, zeigt auch hier das erste Element, welches aus dem Netz entfernt wird, dasselbe Verhalten. Obwohl die Nukleation früher stattfand, hatte sie keine große Wirkung auf die Entwicklung der von-Mieses Spannung, des hydrostatischen Drucks oder der Triaxialität. Hingegen ist der Einfluss der Reduktion des kritischen spezifischen Hohlraumvolumens deutlich zu erkennen, woraufhin die Bruchdehnung schneller erreicht wird.

Der Vergleich zwischen den Werkstoffkenngrößen der Voll und Hohlproben sowie des Einflusses des Wasserstoffs sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst. Dabei beziehen sich die Änderungen der Werkstoffkenngrößen bei der Voll- und Hohlprobe unter Wasserstoff und Außen- bzw. Innendruck auf die Werkstoffkenngrößen der Voll- und Hohlprobe unter Außen- bzw. Innendruck.

	Vollprobe	Vollprobe & 20MPa Außendruck	llprobe & 20MPa Außendruck Vollprobe & 20MP & H2	
Fließgrenze [MPa]	419	419	419	-
σ _{max} [MPa]	644.33	650.91	648.91	0.3%
$\varepsilon_{\sigma_{max},Total}$ [-]	0.425	0.4504	0.4133	8.24%
EL [%]	58.97	63.12	55.72	11.72%
RoA [%]	83.15	83.15	68.54	17.57%
			Hohlprobe & 20MPa Innenendruck & H2	
	Hohlprobe	Hohlprobe & 20MPa Innendruck	Hohlprobe Innenendru	& 20MPa ick & H2
Fließgrenze [MPa]	Hohlprobe 419	Hohlprobe & 20MPa Innendruck 419	Hohlprobe Innenendru 419	& 20MPa ick & H2 -
Fließgrenze [MPa] σ _{max} [MPa]	Hohlprobe 419 644.36	Hohlprobe & 20MPa Innendruck 419 644.63	Hohlprobe Innenendru 419 642.75	& 20MPa ack & H2 - 0.29%
Fließgrenze [MPa] σ_{max} [MPa] $\varepsilon_{\sigma_{max},Total}$ [-]	Hohlprobe 419 644.36 0.43136	Hohlprobe & 20MPa Innendruck 419 644.63 0.42388	Hohlprobe o Innenendru 419 642.75 0.3810	& 20MPa ick & H2 - 0.29% 10.11%
Fließgrenze [MPa] σ_{max} [MPa] $\varepsilon_{\sigma_{max},Total}$ [-] EL [%]	Hohlprobe 419 644.36 0.43136 56.764	Hohlprobe & 20MPa Innendruck 419 644.63 0.42388 56.614	Hohlprobe - Innenendru 419 642.75 0.3810 52.5	& 20MPa ack & H2 - 0.29% 10.11% 7.26%

Tabelle 5-2: Einfluss des Wasserstoffs auf der Voll und Hohlprobe

Um den Unterschied zwischen der Voll- und Hohlprobe infolge von Druck und Wasserstoffschädigung weiter zu untersuchen, wurde die Verteilung der Triaxialität bei beiden Proben aufgenommen, bevor der Bruch initiiert wurde, sowie die Evolution kurz bevor und während des Bruchs. Durch die Abbildungen 5.18 a ist ersichtlich, dass die Triaxialität sich im Zentrum der Probe konzentriert und einen maximalen Wert von 0.686 im Vergleich zur normalen Vollprobe erreicht, welche einen Wert von 2.16 erlangt (s. Abschnitt 4.2). Eine Zuspitzung der dazugehörigen spezifischen Hohlraumvolumenverteilung im Zentrum findet kurz vor der Koaleszenz statt (s. Abbildung 5.18 c). Mit dem Erreichen des kritischen

spezifischen Hohlraumvolumens, wird das Wachstum des Hohlraumvolumens beschleunigt. Hierbei wird der Bruch initiiert und eine Ausbreitung nach außen hin vollzogen (s. Abbildung 5.18 e und 5.18 f).

Bei der Hohlprobe verdichtet sich die Triaxialität vor der Innenseite der Probe und erreicht einen Wert von 0.558 (s. Abbildung 5.18 b), demgegenüber zeigte die normale Hohl Probe einen Triaxialitätswert vor dem Bruch von 1.715 (s. Abbildung 4.2). Abbildung 5.18 c weist die höchste Verteilung des Hohlraumvolumens am unteren linken Eckpunkt auf, wo sich auch die Koaleszenz ereignet. Der Bruch startet bei dem zweiten Element von Links betrachtet und dehnt sich nach rechts aus, wie in Abbildung 5.18 f und 5.18 h zu sehen ist. Dieses Elements wurde verwendet, um die Diagramme in Abbildung 5.17 bereitzustellen



Abbildung 5.18: Konturplot **a**)**b**) der Triaxialität während der Koaleszenz; **c**)**d**)des spezifischen Hohlraumvolumens während der Koaleszenz **e**)**f**)**g**)**h**) des spezifischen Hohlraumvolumens während des Bruchs

Durch die Beschleunigung der Nukleation und die Reduktion des kritischen spezifischen Hohlraumvolumens, trat der Bruchmoment früher auf, daher hatte das spezifische Hohlraumvolumen bei der Hohlprobe nicht ausreichend Zeit, eine Verlagerung weg von der Innenseite einzuleiten. Dies führt zur Erklärung des dortigen Bruchs und dem Nicht Vorhandensein der lokalen Einschnürung der Innenseite.

6 Diskussion der Ergebnisse

In Abschnitt 3.4 wurde die Kalibrierung des GTN-Modells einer Vollprobe basierend auf den resultierenden Laborergebnisse durchgeführt. Die Anpassung erfolgte subjektiv durch den Vergleich zwischen der FEM- und experimentellen Spannungs-Dehnungskurve.

Die Ermittlung der Fließkurve im Bereich des Gleichmaßdehnunges wurde aus der wahren Spannungs-Dehnungskurve extrahiert. Es ist jedoch theoretisch möglich, die Fließkurve in diesem Bereich höher zu setzen und bei der Kalibrierung auch ein höheres anfängliches spezifisches Hohlraumvolumen (f_0) sowie Nukleationsvolumen (f_n) zu wählen, damit sich die FEM- und die experimentelle Kurve überlappen. Diese Methode wurde allerdings nicht verwendet, weil das resultierende Hohlraumvolumen am Ende der Simulation zu groß werden kann, sodass die Berechnung instabil verläuft. Dies ist ersichtlich durch den Umstand, dass eine minimale Änderung in der Anzahl der Elemente der Breite der Probe, einen großen Unterschied im Bereich der Einschnürung zu Folge hat.

Obwohl das anfängliche spezifische Hohlraumvolumen (f_0) vorhanden ist, war sein Einfluss auf die Fließgrenze und das Gleichmaßdehnung marginal klein, was an seinem geringen Wert liegt. Zudem besitzt die Probe in diesem Stadium einen geringen Triaxialitätswert, welcher zu ihrer relativen Unsensibilität führt, wie in [26] erwähnt wurde.

Nachdem die maximale Festigkeit erreicht wurde, findet im Messbereich ein 3D Spannungszustand statt, welcher zur Folge hat, dass der Zugspannungsverlauf nicht mehr den Verlauf der von-Mieses Spannung spiegelt. Entsprechend stellt sich die Frage, wie nun die Fließkurve extrapoliert werden soll. Nach dem Wissensstand des Autors dieser Arbeit, existiert keine Standard-Vorgehensweise. Somit kann die Kurve beliebig durch verschiedene Modelle extrapoliert werden, sowie auch durch deren Kombinationen, solange die resultierende FEM-Spannung-Dehnungskurve, über der experimentellen Kurve liegt. Durch die iterative Hinzufügung der Schädigung kann eine Übereinstimmung erreicht werden.

In dieser Studie wurde die lineare Extrapolation verwendet. Die FEM-Ergebnisse näherten sich der experimentellen Spannungs-Dehnungskurve an, als der Median der Gauss`schen Verteilung (ε_n) erhöht und die Standardabweichung (S_n) reduziert wurde. Allerdings zeigte die Probe geringere Reaktion auf die Veränderung der Nukleationsparameter als $\varepsilon_n \ge 0.62$ und $S_n \le 0.1$. Der Grund für diese Situation war rein numerisch und bestand darin, dass die Schrittweite bei der Newton-Raphson-Methode zu groß war, sodass der Solver nicht mehr in der Lage war, die vorgeplante Menge an Hohlräumen zu induzieren. Ab diesem Zeitpunkt wurden die Nukleationsparameter konstant gehalten und eine Anpassung der Fließkurve bewirkt, damit die Differenz zwischen der experimentellen und der FEM Spannungs-Dehnungskurve reduziert wird. Durch diese Argumentation lässt sich herleiten, dass kein eindeutiges Ergebnis vorhanden ist. Theoretisch betrachtet, existieren in diesem Stadium unendlich viele Kombinationen aus Schädigungsverläufen und Fließkurven, um die experimentelle Spannungs-Dehnungskurve darzustellen.

Die Verwendung der Bridgman-Korrektur wie in [11] [12], ist unvorteilhaft, da sie erstens mit der Verwendung von DIC-Technik verbunden ist, welche Kosten und Zeit aufwendig ist. Zudem ist sie unpräzise und zu hohen Diskrepanzen führen, wenn große Dehnungen vorherrschen [19].

Auch die Ermittlung der Schädigung, anhand von Tomographie Technologien, kann kostenund zeitaufwendig sein. Die Methode ist zudem subjektiv, da der verwendete Filter der Bildbearbeitungssoftware benutzerdefiniert ist. Das Schneiden und Polieren der Bruchfläche kann das ermittelte Hohlraumvolumen beeinträchtigen [39].

Die Verwendung von Proben mit unterschiedlichen Anfangstriaxialtäten kann sich als Alternative anbieten, um den Effekt der Mehrdeutigkeit der Parametersätze zu reduzieren und die Bruchdehnung der Probe in Abhängigkeit von der Triaxialität auszudrücken. Dieser Ansatz war in vielen Studien präsent, in dieser Studie jedoch nicht und damit stellt sich die Qualität der kalibrierten Parameter bei einer Geometrieänderung in Frage.

Die Ermittlung des kritischen Hohlraumvolumens (f_c) in der vorliegenden Arbeit basierte auf der Variation der Verfestigungskurve $\left(\frac{d\sigma_{wahr}}{d\varepsilon_{wahr}}\right)$ und die Gegenüberstellung zwischen der Entwicklung des Hohlraumvolumens im Zentrum der Probe und der Spannungs-Dehnungskurve wie in Abbildung 3.10 dargestellt wurde. Es war allerdings ersichtlich, dass die Evolution des Hohlraumvolumens während dieser Phase rapide stattfand, was eine minimale Änderung in der Dehnung zu einer hohen Variation im spezifischen Hohlraumvolumen zur Folge hatte. Eine Alternative bietet sich hier, durch die Verwendung von Zellmodellen unter dem Einfluss von konstanter Triaxialität, wie in der Studie von Koplik et al. [40] erklärt wurde. Dieser Ansatz kann allerdings nur durch die Verwendung von Subroutinen stattfinden, da es ansonsten schwierig wird, die Triaxialität während der Simulation konstant zu halten. Eine andere mögliche Alternative ist die Implementierung des Thomason Modells wie es in der Studie von Zhang [22] zur Anwendung kam.

Nach der Kalibrierung des Modells, wurde eine Konvergenzstudie, durch die Änderung der Schrittweite und Rechenmethode, sowie einer Verfeinerung des Netzes durchgeführt. Bei den resultierenden Spannungs-Dehnungskurven fand eine Überlappung statt, was darauf hindeutete, dass die Berechnung konvergierte. Allerdings trat am Ende der Berechnung kein Cup-Cone Muster auf (s. Abbildung 6.1), welches auf folgende Begründungen zurückführen ist.

Zum einen ist an der Stelle, wo die Materialtrennung aufgrund von Scherbruch stattfindet, die Triaxialität sehr gering, die Belastung ist von Schub dominiert und die Hohlräume dort werden mehr verzerrt. Dieses Verhalten kann vom GTN-Modell nicht genau abgebildet werden [13] [14].

Zweitens ist die Evolution des Hohlraumvolumens von Wachstum dominiert, das zu induzierende spezifische Hohlraumvolumen f_n beträgt 0.005, während das Bruchvolumen f_f 0.3 beträgt. Dies bedeutet wiederum, dass wenn das spezifische Hohlraumvolumen eines Elements an der Außenseite der Probe 0.005 erreicht, muss es trotzdem weiterwachsen bis $f = f_f = 0.25$ erreicht. Diese Wachstumsphase findet dagegen nur durch die volumetrische plastische Dehnung statt.

Zuletzt spielt das Netzdesign eine entscheidende Rolle für die Abbildung des Cup-Cone Musters. Der Einschnürbereich der Vollprobe (2.5 mm X 1.0 mm) wurde mit 7500 bilinearen Elementen vernetzt. Kurz vor der Koaleszenz war die axiale Dehnung so groß, dass die Höhe der Elemente dort annähernd 5-mal die Größe der Breite betrug. Diese Geometrie könnte der Grund für die nicht Entstehung einer Materialtrennung entlang der Ebene der maximalen Schubspannung sein, daher ist es notwendig, an dieser Stelle die Höhe der Elemente zu reduzieren. Es kann allerdings sein, dass die Höhe des Elements mit dem Verhalten der Fließkurve verbunden ist, daher wird die Durchführung einer Parameterstudie empfohlen, um einen Zusammenhang zwischen den beiden Faktoren zu ermitteln.

Basierend auf dieser Argumentation, wird erwartet, dass das kalibrierte GTN-Modell den Bruchprozess überschätzt, da die Elemente an der Außenseite, nicht aufgrund von Scherbruch gelöscht werden, sondern im Netz bleiben und nach dem der Riss sie erreicht hat, entwickelt sich das Hohlraumvolumen weiter aufgrund von volumetrischen Dehnungen bis das Element komplett beschädigt ist. Der Vergleich zwischen der Voll- und Hohlprobe in Abschnitt 4.2 und 4.3 zeigte, dass die Spannungs-Dehnungskurve der Hohlprobe ein schnelleres Entfestigungsverhalten als die der Vollprobe aufwies und demzufolge eine geringere Bruchdehnung.



Abbildung 6.1:Bruchfläche der Voll und Hohlprobe unter normale Bedingungen

Bei der Entwicklung der Einschnürung zeigten die beiden Proben von Anfang bis zur maximalen Festigkeit dasselbe Verhalten, danach allerdings schnürt die Hohlprobe früher ein. Aufgrund der Netzverzerrung bei manchen Proben war es schwierig festzustellen, ob die Geometrie die Brucheinschnürung beeinträchtigt hat, doch durch die Vergrößerung des Innenradius der Bohrung wurde eine Reduzierung der Brucheinschnürung, wie in Abbildung 4.10 dargestellt, ersichtlich.

Im Einschnürbereich konzentrierten sich die Spannungen bei der Vollprobe im Zentrum, demzufolge nahm die Triaxialität zu, welche auf eine größere hydrostatische Spannung, als eine von-Mieses Spannung, hinwies. Darauf aufbauend wurden die Elemente in diesem Bereich expandiert. Währenddessen war die mechanische Antwort bei der Hohlprobe, eine Kombination aus einer Abnahme des Außen- sowie Innenradius, ebenso wie eine Abnahme im Ligament. Dies lässt erkennen, dass während der Simulation eine Verschiebung in Richtung der Rotationsachse beim Außen- und Innenpunkt des Ligaments stattfand. Hinzukommend war die Verschiebungsgeschwindigkeit des Außenpunktes schneller als die des Innenpunktes. Kurz vor der Koaleszenz kam eine lokale Einschnürung zustande welche auf einer sich der Rotationsachse wegbewegende Hohlprobeninnenseite schließen lässt. Demzufolge konzentrierte sich die Triaxialität vor dem Innenpunkt, von wo aus dem Bruch initiiert wurde. Im Vergleich zur Vollprobe ist die Triaxialität kleiner als bei der Hohlprobe.

Wie bereits verdeutlicht, liefert das GTN-Modell, nachdem das erste Element aus dem Netz entfernt wurde, nicht das zu erwartende Materialverhalten. Basierend auf den fraktografischen Bildern die in der Studie von Achouri et al. [14] bereitgestellt wurden (s. Abbildung 3.2) und die resultierenden Kontourplot der Triaxialität der Voll und Hohlproben, nach dem das erste Element gelöscht wurde, kann folgendes konkludiert werden:

Bei der Vollprobe ist die Triaxialität im Zentrum der probe hoch, daher wird dort der Trennmodus auf Basis der Interne Einschnürung (Internal Necking [13]) stattfinden. In Richtung der Außenseite nimmt die Triaxialität ab, daher findet dort ein Scherbruch statt (s. Abbildung 2.3 und 2.4). Bei der Hohlprobe ereignet sich in dem Bereich, wo das erste FEM-Element entfernt wurde ein Trennmodus aufgrund von interner Einschnürung jedoch der Radius der Hohlräume sind kleiner zu erwarten als bei der Vollprobe da die erreichte Triaxialität in dem Bereich kleiner war. An der Außenseite ist dort aufgrund der geringe Triaxialität eine Scherbruch zu erwarten. Im Ligamentbereich zwischen der Innenseite der Probe und wo das erste FEM-Element aus dem Netz entfernt wurde, sind dort auch Hohlräume zu erwarten, sie müssen allerdings kleiner sein als die Hohlräume, die aufgrund der hohen Triaxialität entstanden sind, Darüber hinaus könnte die Bruchfläche in diesem Bereich nicht lateral zur Belastungsachse sein.

Für die Entstehung des Langlochs der Vollprobe, muss das Material entfernt werden. Dieser Prozess kann zur Folge haben, dass die Oberflächenqualität des Zylinders durch Risse reduziert wird, welche wiederum die Entstehung von Spannungskonzentrationen begünstigt, die zu einem neuen Spannungsbild führen kann, und dadurch könnten die Laborergebnisse von den präsentierten FEM-Ergebnisse stark abweichen.

In Abschnitt 5.1 wurde der Einfluss des Drucks und der Geometrie auf die mechanische Antwort der Zugprobe untersucht. Die Vollprobe wurde von außen mit Druck beaufschlagt, demzufolge wurde, die während der Simulation entwickelte hydrostatische Spannung, im Vergleich zu einer Vollprobe ohne Außendruck reduziert. Darauf aufbauend wurde das Wachstum der Hohlräume gehemmt, sodass die Probe eine höhere maximale Festigkeit aufwies und die Einschnürung unterdrückt wurde. Zudem zeigte die Vollprobe eine höhere Brucheinschnürung, welche zu ausgeprägteren Ergebnissen mit der Zunahme des Außendrucks führte.

Bei der Hohlprobe wirkte der Druck auf die Innenseite, woraufhin sich die Deckelkräfte als Reaktion entwickelten. Die Variation des Drucks hat die Probe minimal beeinflusst, die durch die gleichbleibende Fließgrenze und die minimale verändernde maximale Festigkeit veranschaulicht wurde. Während der Einschnürung und kurz vor dem Erreichen der Koaleszenz, erfährt die Probe mit höherem Druck, jedoch ein schnelleres Entfestigungsverhalten.

Durch die Beobachtung der Verläufe der hydrostatischen Drucke, ist es auffällig, dass sie bzw. die hydrostatischen Spannungen annährend additiv zerlegt werden können. Die Zerlegung besteht aus dem Anteil, welcher während der Zugbelastung entsteht und jener aus der Entstehung des Drucks:

$$\sigma_{h} = \frac{1}{3} \cdot (\sigma_{y} + \sigma_{r} + \sigma_{\theta}) \approx \frac{1}{3} [(\sigma_{yzug} + \sigma_{rzug} + \sigma_{\theta zug}) + (\sigma_{y,p} + \sigma_{r,p} + \sigma_{\theta,p})]$$

$$\sigma_{h} \approx \frac{1}{3} (\sigma_{yzug} + \sigma_{rzug} + \sigma_{\theta zug}) - P_{a}$$

Gl. 6-1

Die Hohlprobe kann als ein dickwandiger Zylinder betrachtet werden. Dadurch kann die entwickelte Spannung infolge von Innendruck, an jeder Stelle r in Abhängigkeit des Außenund Innenradius, wie folgt geschrieben werden:

$$\sigma_{y,p} = \frac{P_i \cdot ri^2}{ra^2 - ri^2}; \sigma_{r,p} = \frac{P_i \cdot ri^2}{ra^2 - ri^2} \left[1 + \frac{ra^2}{r^2} \right]; \sigma_{\theta,p} = \frac{P_i \cdot ri^2}{ra^2 - ri^2} \left[1 - \frac{ra^2}{r^2} \right]$$
Gl. 6-2

Die additive Zerlegung der hydrostatischen Spannung liefert:

$$\sigma_{h} = \frac{1}{3} \cdot \left(\sigma_{y} + \sigma_{r} + \sigma_{\theta}\right) \approx \frac{1}{3} \left(\sigma_{yzug} + \sigma_{rzug} + \sigma_{\theta zug}\right) + \sigma_{y,p}$$

$$\sigma_{h} \approx \frac{1}{3} \left(\sigma_{yzug} + \sigma_{rzug} + \sigma_{\theta zug}\right) + \frac{P_{i} \cdot ri^{2}}{ra^{2} - ri^{2}}$$
Gl. 6-3

Durch den Vergleich zwischen Gl.6-1 und 6-3 ist ersichtlich, dass der Druck bei der Vollprobe die hydrostatische Spannung infolge von Zugbelastung reduziert. Damit wird das Wachstum der Hohlräume gebremst, während der Druck, mithilfe der entwickelten Deckelkräfte dazu beiträgt, dass die hydrostatische Spannung steigt.

Um den Effekt der Wasserstoffversprödung zu modellieren, wurde die Nukleation in Abhängigkeit von der normalisierten Wasserstoffkonzentration beschleunigt. Die Ergebnisse zeigten, je früher die Nukleation stattfindet, desto mehr sinken die maximale Festigkeit. Die Entwicklung der Einschnürung wurde geringfügig beeinflusst, wobei die Brucheinschnürung konstant blieb. Erst mit einem späteren Einsetzen der Nukleation, fand eine Beschleunigung der Einschnürung statt, wobei sich auch hier die Brucheinschnürung nicht geändert hat. Ab diesem Zeitpunkt wird das kritische spezifische Hohlraumvolumen f_c von 0.2 auf 0.025 reduziert, damit am Ende ein früheres Erscheinen der Koaleszenz sowie des Bruchs bewerkstelligt wird.

Die Berechnung anhand der Nukleationsparameter der Iteration C und die Herabsetzung der Bruchparameter f_c und f_f zeigte, dass die Wasserstoffversprödung die maximale Festigkeit verringert, die Einschnürung beschleunigt und die Duktilität (Bruchdehnung und Brucheinschnürung) reduziert.

Der Vergleich zwischen der Voll- und Hohlprobe belegt eine niedrigere Sensibilität der Hohlprobe gegenüber der Wasserstoffversprödung als die Vollprobe, welche aus der Tabelle 5-2 entnommen werden kann. Die Vollprobe unter Außendruck weist eine Abnahme von 11.72 % bei der Bruchdehnung und 17.57 % bei der Brucheinschnürung auf, während die Hohlprobe mit Innendruck eine Abnahme der Bruchdehnung von 7.26 % und bei der Brucheinschnürung von 14.14 % aufwies.

Die Intensität jener Änderung ist durch die Wahl der ξ_1 und ξ_2 Parameter bedingt. Die Tatsache wiederum, dass die Abnahme der Bruchdehnung der Hohlprobe geringer als die der Vollprobe ist, kann durch folgende Überlegung erklärt werden:

Mit der Wahl von ξ_1 und ξ_2 , die zum früheren Einsetzen der Schädigung führte (Iteration A), reagierte die Vollprobe unter Wasserstoff und Außendruck mit einer geringeren Abnahme der Bruchdehnung als die der Vollprobe unter Außendruck. Hingegen mit der Wahl von ξ_1 und ξ_2 , welche die Nukleation später stattfinden ließ, eine größere Abnahme der Bruchdehnung zur Folge. Dieses Verhalten ist auch bei der Hohlprobe zu erwarten. Um den Aufwand hinter der "Konvertierung" der Weibull`schen Verteilung zur Gauss`schen Verteilung zu reduzieren, wurde wie bereits erwähnt, die Wahl der ξ_1 und ξ_2 Parameter getroffen, die zu einem zügigeren Erreichen eines Plateaus im Verlauf der Inverse des Skalenparameters führte. Selbst durch eine höhere lokale Wasserstoffkonzentration, entsteht kaum ein Einfluss auf die Nukleation der Hohlräume. Wenn nun der Verlauf der Inverse des Skalenparameters steiler gewählt wird, führt dies zur größeren Ausprägung des Einflusses auf die lokale Wasserstoffkonzentration. Die Hohlprobe besaß nach der Diffusion eine höhere Wasserstoffkonzentration als die Vollprobe, welches eine beschleunigte Nukleation der Hohlräume bewirkt. Dadurch steigt die Duktilität der Probe und resultiert am Ende einer geringeren Abnahme der Bruchdehnung. Damit kann konstatiert werden, dass Wasserstoff durch die frühere Nukleation die plastische Verformung fördert, welches sich auf die HELP-Hypothese zurückführen lässt.

Diese Argumentation kommt allerdings nicht bei der Brucheinschnürung zum Tragen, da hier, aufgrund der früheren Nukleation der Hohlräume, keine Abnahme stattfand.

Die Reduktion der f_c und f_f Parameter hat dazu geführt, dass die Koaleszenz und der Bruch früher eintrafen und demzufolge erreichten die Voll- und Hohlprobe eine maximale Triaxialität von 0.686 und 0.559 im Vergleich zu 2.16 und 1.715 bei der Vollprobe unter normalen Bedingungen. Diese Veränderung hat keine Auswirkung auf den Bruchprozess der Vollprobe, wohingegen der Bruch bei der Hohlprobe von der Innenseite heraus begann und sich nach außen hin ausbreitete. Mit den ursprünglichen f_c und f_f Parametern hingegen, wird sich das spezifische Hohlraumvolumen vor der Innenseite verdichten und von dort aus den Bruch starten.

Am Ende des Bruchprozesses ist ein Cup-Cone Muster entstanden, welches jedoch nur eine Folge des Netzdesigns und der Wahl der Bruchparameter ist. Mit dem Erreichen der Koaleszenz an den unteren Elementen, waren diese annähernd quadratisch und dem zufolge war es eine Frage der Zeit, bis der Bruch sich in Richtung der maximalen Schubspannung orientierte. Mit einer Modifikation des Größenfaktors des Elements im Einschnürbereich $G = \frac{H\ddot{o}he}{Breite}$, könnte

die Geometrie des Cup-Cone Musters im Bruchmoment nicht erreicht werden und höchstwahrscheinlich eine laterale Materialtrennung wie bei der Voll- und Hohlprobe unter normalen Bedingungen zur Folge haben.

In der verwendeten Literatur dieser Arbeit, wurden wie bereits erwähnt, mehrere Proben unter verschiedenen Konzentrationen und zum Teil unter verschiedenen Anfangstriaxialitätswerten getestet. Die Autoren kalibrierten ihre Schädigungsparameter basierend auf den resultierenden experimentellen Ergebnissen. Die aus den FEM-resultierenden physikalischen Feldern wurden mit den fraktografischen Bildern verglichen, um am Ende den Einfluss des Wasserstoffs auf den Bruchmechanismus zu erklären. In dieser Arbeit jedoch wurde die Kalibrierung auf Basis eines einzigen Zugversuchs durchgeführt, welches die Schwierigkeit mit sich bringt, ein genaues Bild über den Bruchmechanismus zu konstatieren. Dafür sind weitere Tests notwendig

Das einzige Merkmal, das hier erwähnt werden kann ist folgendes: Dadurch, dass die Triaxialität gesunken ist, fallen die Hohlräume kleiner auf und die Bruchfläche könnte mehr von Scherbruch dominiert werden und Spuren von inter- und transgranularen Rissen aufweisen.

7 Zusammenfassung und Ausblicke

In der vorliegenden Studie wurde die FEM-Simulation des Zugversuchs einer Voll- und Hohlprobe durchgeführt. Das Ziel war die Untersuchung des Effekts der Geometrie, sowie des Einflusses des Drucks und der Wasserstoffversprödung auf das mechanische Verhalten der genannten Proben.

Der Ausgangspunkt war das experimentelle Spannungs-Dehnungsdiagramm einer Vollprobe aus A316 TI (austenitischer Stahl), welcher für die Kalibrierung des GTN-Models verwendet wurde. Die Kalibrierung fand in Abaqus Standard und Explizit, sowie durch die iterative Variation der Nukleationsparameter, der Bruchparameter und der Fließkurve statt. Zunächst wurde die Fließkurve nach der maximalen Festigkeit linear extrapoliert, um danach stückweise angepasst zu werden, solange bis eine hohe Übereinstimmung zwischen der resultierenden FEM- und experimentellen Spannungs-Dehnungskurve erreicht wurde.

Die Simulation der Voll- und Hohlprobe unter normalen Bedingungen präsentierte einen Einfluss der Geometrie auf das Einschnürverhalten. Eine Hohlprobe, welche denselben Außenradius und dieselbe Länge wie eine Vollprobe besitzt, weist ein geringeres Duktilitätsverhalten auf. Ersichtlich ist dies durch das schnellere Entfestigungsverhalten nach der maximalen Festigkeit, sowie der früheren Entwicklung der Einschnürung. Dagegen bewerkstelligte eine Zunahme im Außenradius oder Verlängerung der Probe eine ausgeprägte Duktilität.

Die Bruchinitiierung fand bei der Vollprobe in der Mitte statt, dort wo die Triaxialität und das spezifische Hohlraumvolumen ihren höchsten Wert erreichten, und verbreitete sich nach außen. Bei der Hohlprobe hingegen, mit ihrer in der radialen Richtung freibeweglichen Innenseite, verlagerte sich das spezifische Hohlraumvolumen kurz vor die Innenseite, von wo aus am Ende die Koaleszenz und der Bruch stattfanden. Letzterer breitete sich nach links und rechts, bis zur finalen Materialtrennung, aus.

Die resultierenden Triaxialitätswerte der Vollprobe waren höher als bei der Hohlprobe, was darauf hindeutet, dass die Bruchfläche bei der Vollprobe mit einer höheren Anzahl und größeren Hohlräumen besiedelt ist, als jene der Hohlprobe.

Die Beaufschlagung der Vollprobe mit Außendruck führte, dass das Wachstum der Hohlräume verspätet einsetzt, welches wiederum eine verspätete Einschnürung zu Folge hatte und resultierte zudem in eine Steigerung der maximalen Festigkeit und Duktilität. Der Innendruck förderte das Wachstum der Hohlräume der Hohlprobe, die Fließgrenze blieb unveränderlich und die Festigkeit wurde minimal verändert. Im Vergleich mit der Hohlprobe ohne Innendruck, trat die Einschnürung früher ein.

Um die Wasserstoffschädigung zu bewerkstelligen, wurde der Ansatz von Depreature et al. [16] für diese Studie verwendet. Dieser beruht auf die Nukleationsparameter des GTN-Modells in Abhängigkeit zur lokalen Wasserstoffkonzentration auszudrücken. Aufgrund von fehlenden experimentellen Daten, wurden drei verschiedene Parametersätze verwendet, um unterschiedliche Nukleationszeitpunkte zu untersuchen. Mit Beschleunigung der Nukleation der Hohlräume, trat eine höhere plastische Verformung ein, die maximale Festigkeit wurde reduziert und die Einschnürung ereignete sich zu einem späteren Zeitpunkt. Zuerst fand nur eine minimale Beeinflussung der Bruchdehnung statt, erst mit der Reduzierung des Wasserstoffschädigungseffekts, nahm auch die Bruchdehnung ab.

Durch das frühere Einsetzen der Nukleation, kam es jedoch zu keiner Beeinflussung der Brucheinschnürung, um dies zu bewerkstelligen und dadurch dieselben Ergebnisse wie im Labor zu erhalten, wurde das kritische spezifische Hohlraumvolumen von 0.2 auf 0.025 herabgesetzt. Basierend auf den Schädigungsparametern ξ_1 =0.25, ξ_2 = 10 und durch die Herabsetzung des kritischen Hohlraumvolumens, konnte ein Vergleich zwischen der Voll- und Hohlprobe unter Wasserstoffschädigung und Außen- bzw. Innendruck gezogen werden, welcher erkennen ließ, dass die Vollprobe eine höhere Anfälligkeit gegenüber dem Wasserstoff aufwies als die Hohlprobe. Dies lässt sich anhand der höheren Reduktion der maximalen Festigkeit, Bruchdehnung und Brucheinschnürung konstatieren. Lediglich beim Eintreten der Einschnürung weist die Vollprobe eine geringere Reduktion als die Hohlprobe auf.

Die resultierenden Ergebnisse in dieser Arbeit wurden, basierend auf der Kalibrierung des GTN-Modells mit einem einzigen experimentellen Versuch, erreicht. Daher wird es höchstwahrscheinlich zur Diskrepanz zwischen dem FEM- und experimentellen Modell kommen, sobald eine gekerbte Probe oder eine Scherprobe modelliert wird. Um die Vorhersagekraft des Models präziser gestalten zu können, sind folgende Schritte zu empfehlen:

- Die Verwendung der Modifikation von Nahshon und Hutchinson, die in der Studie von Achouri et al. [14] beschrieben wurde. Somit berücksichtigt das Modell das Wachstum der Hohlräume bei geringer Triaxialität. Allerdings ist hier eine Subroutine notwendig, da sie (die Modifikation) nicht in Abaqus implementiert ist.
- Die Anpassung von q_1 , q_2 und des f_c Parameters, basierend auf der Studie von Koplick [40]. Kurz zusammengefasst, wurde in dieser Studie ein 2D et al. rotationssymmetrisches Zellmodell mit einem sphärischen Hohlraum in der Mitte versehen. Das Material unterliegt der von-Mieses Plastizität und das Modell ist so gelagert, dass die Verformungen lediglich horizontal und vertikal stattfinden können. Das Modell wird in die horizontale und vertikale Richtung belastet, bis ein uniaxialer Dehnungszustand eintritt. Ab diesem Moment hat das Material seine Tragfähigkeit verloren und die Koaleszenz ist erreicht. Anhand der Methode können verschiedene Triaxialitätswerte simuliert werden. Die resultierenden Verläufe der Evolution des Hohlraums können verwendet werden, um die konstitutiven Parameter q_1 und q_2 anzupassen [40]. Die Methode könnte allerdings numerisch aufwendig sein, da es zu Schwierigkeiten kommen könnte, unter der Verwendung der expliziten Rechenmethode, die Triaxialität, kurz vor der Koaleszenz, konstant zu halten. Denkbar wäre die Durchführung der Berechnung mittels der Arc-Length Methode, jedoch muss eine kleine Schrittweite vor der Koaleszenz gewählt werden. Wenn allerdings die Berechnung nicht konvergiert, kann die Belastung verschiebungsgesteuert modelliert werden. Hier empfiehlt sich die Studie von Tekoglu [41].
- Die Nukleationsparameter können anhand des Vorschlags von Zhang et al [29] angepasst werden, um eine Verknüpfung zwischen dem Hohlraumvolumen und der Änderung des Elastizitätsmoduls abzubilden, wie in Abschnitt 3.1 ausführlicher erwähnt wurde. Jedoch sind die experimentellen Ergebnisse einer Zugprobe, die belastet und entlastet wurde, notwendig.
- Abaqus bietet dem Anwendenden die Möglichkeit die Materialdaten in Abhängigkeit von einer Variablen auszudrücken. Diese Option kann verwendet werden, um die Nukleationsparameter in Abhängigkeit der äquivalenten plastischen Dehnung auszudrücken. Dadurch besteht die Möglichkeit, eine zusätzliche Flexibilität bei der Kalibrierung zu garantieren.
- Von einer experimentellen Seite aus gesehen, sind die Durchführungen von Zugversuchen an gekerbten Proben, Scher-, sowie Druckversuchen notwendig. Dadurch ergibt sich die Möglichkeit ein Versagenskörper (Fracture Locus) in Abhängigkeit von der Triaxialität und Bruchdehnung darzustellen. Diese kann verwendet werden, um die Kalibrierungsqualität des Models zu prüfen.

- Um den Einfluss der Wasserstoffversprödung darüber hinaus zu untersuchen, empfiehlt sich momentan die Wiederholung der Testserie, in einer Wasserstoffumgebung mit unterschiedlichen Wasserstoffkonzentrationen. Hierdurch lässt sich der Einfluss der Konzentration auf das Versagenskörper darstellen, wie in der Studie von Deprature et al. [16] geschildert wurde. Dennoch wird das Problem der Mehrdeutigkeit der Parametersätze trotzdem vorhanden sein, da es nicht ersichtlich ist, wie die Konzentration jeden einzelnen Parameter explizit beeinflusst.
- Um den zeitaufwendigen Kalibrierungsprozess und den damit verbundenen Pre- und Post -Processings-Aufwand gering zu halten, sollten Subroutinen entwickelt werden. Zudem ist es wichtig eine gekoppelte Diffusion und mechanische Berechnung zu programmieren, um die quasi-statische Berechnung zu vermeiden. Auch diese kann sich als zeitaufwendig gestalten, wenn die Nukleationsparameter bei hoher äquivalenter plastischer Dehnung stattfindet.

Quellenverzeichnis

- [1] Bundesregierung, "Energie und Klimaschutz," 26 06 2023. [Online]. Available: https://www.bundesregierung.de/breg-de/schwerpunkte/klimaschutz/wasserstofftechnologie-1732248. [Zugriff am 07 09 2023].
- [2] S. Lynch, "Hydrogen embrittlement (HE) phenomena and mechanisms," Woodhead Publishing Limited, 2011.
- [3] T. Michler, "Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM," [Online]. Available: https://www.iwm.fraunhofer.de/de/geschaeftsfelder/werkstoffbewertunglebensdauerkonzepte/highlights/hohlproben---eine-alternative-zurautoklaventechnik.html. [Zugriff am 07 09 2023].
- [4] K. Wackermann, K. Krebser, W. Pfeiffer und J. Preußner, "Hohlproben Eine Alternative zur Autoklaventechnik," [Online]. Available: https://www.iwm.fraunhofer.de/content/dam/iwm/de/geschaeftsfelder/werkstoffbewertu ng-lebensdauerkonzepte/mikrostruktur-eigenspannungen/wasserstoffversproedungmetallischerwerkstoffe/Hohlproben_Autoklaventechnik_i_d_2018_g71_FraunhoferIWM.pdf. [Zugriff am 07 09 2023].
- [5] DIN Deutsches Institut für Normung, "DIN 50125," Beuth Verlag GmbH, Berlin, 2022.
- [6] German Institute for Standardization, "DIN EN ISO 6892-1," Beuth Verlag GmbH,, Berlin Germany, 2020.
- [7] W. W. Seidel und F. Hanhn, Werkstofftechnik Werkstoffe-Eigenschaften-Prüfung-Anwendung, München: Carl Hanser Verlag, 2010.
- [8] M. A. Neto, A. Amaro, L. Roseiro und R. Leal, Engineering computation of structures: the finite element method, Cham Heidelberg New York Dordrecht London: Springer, 2015.
- [9] W. Rust, Nichtlineare Finite-Elemente-Berechnungen, Heidelberg,Berlin: Vieweg+Teubner Verlag, 2011.
- [10] M. Wagner, Lineare und nichtlineare FEM, Wiesbaden, Germany: Soringer Vieweg, 2019.
- [11] H. D. Kweon, J. W. Kim, O. Song und D. Oh, "Determinitation of true stree-strain curve of type 304 and 316 stainless steels unsing a typical tesnsile test and finite element analysis," Science Direct, 2020.
- [12] H. D. Kweon, E. J. Heo, D. H. Lee und J. W. Kim, "A methodology for determining the true stress-strain curve of SA-508 low alloy steel from a tensile test with fintie element analysis," Springer, Korea, 2018.
- [13] J. Besson, "Continuium models of ductile fracture: A review," *International Journal pf Damage Mechanics,* Bd. 19, Nr. 10.1177/1056789509103482, pp. 3-52, 2010.
- [14] M. Achouri, G. Germain, P. Dal Santo und D. Saidane, "Experimental characterization and numerical modeling of micromechanical damage under different stress states," *Materials and Design*, Bd. 50, pp. 207-222, 2013.
- [15] Z. Zhang, M. Hauge, J. Odegard und C. Thaulow, "Determining material true-strain curve from tensile specimens with rectangualr cross-section," *International Journal of solids and structures*, Bd. 36, pp. 3497-3516, 1999.
- [16] R. Depraetere, W. De Waele, M. Cauwels, T. Depover, K. Verbeken und S. Hertele, "Modeling of Hydrogen-Charged Notched Tensile Tests of an X70 Pipeline Steel with a hydrogen-Informed Gurson Model," [Online]. Available: https://doi.org/10.3390/ma16134839. [Zugriff am 01 09 2023].
- [17] D. Wilkinson und A. Weck, "Experimental investigation of void coalescence in metallic sheets containing laser drilled holes," *Acta Metrialia*, Bd. Acta Mterialia 56, Nr. 2008, pp. 1774-1784, 2008.

- [18] Y. Bao und T. Wierzbicki, "On fracture locus in the equivalent strain and stress triaxiality space," Onternational Journal of mechanical Sciences, Bd. 46, pp. 81-98, 2004.
- [19] S. Tu, X. Ren, J. He und Z. Zhang, "Stress-strain curves of metallic materials and post-necking strain hardening characterization: Areview".
- [20] Y.-D. Wang, S.-h. Xu, S.-b. Ren und H. Wang, "An Experimental-Numerical Combined Method to detrmine the true constitutive relation of tensilespecimens after Necking," 2016. [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.1155/2016/6015752.
- [21] J. Lemaitre , A course on damage mechanics, Berlin,Heidelberg,NewYork: Springer-Verlag, 1992.
- [22] Z. Zhang, "A complete Gurson Model," [Online]. Available: https://www.researchgate.net/publication/267194773. [Zugriff am 01 06 2023].
- [23] V. Tvergaard und A. Needleman, "Analysis of the Cup-Cone Fracture in a round Tensile Bar," *Acta metall.*, Bd. 32, pp. 159-169, 1984.
- [24] J. A.Lee, "Hydrogen Embrittelement," NASA Marshall Space Flight Center, Huntsville, Alabama, [Online]. Available: https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20160005654/downloads/20160005654.pdf. [Zugriff am 01 08 2023].
- [25] G. Schauer, "OPUS Online Publikationen der Universität Stuttgart," [Online]. Available: https://elib.uni-stuttgart.de/handle/11682/10105. [Zugriff am 01 12 2023].
- [26] Z. Zhang, "A sensitivity analysis of material parameters for the Gurson constitutive Model," *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Stuctures,* Bd. 19, Nr. 5, pp. 561-570, 1996.
- [27] R. Kiran und K. Kandelwal, "Researchgate," [Online]. Available: https://www.researchgate.net/publication/264621145. [Zugriff am 01 08 2023].
- [28] J. Peng, Y. Wang, Q. Dai, X. Kiu, L. Liu und Z. Zhang, "Effect of Stress Triaxiality on Plastic Damage Evolution and Failure Mode for 316L Notched Specimen," [Online]. Available: https://doi.org/10.3390/met9101067. [Zugriff am 01 08 2023].
- [29] T. Zhang, K. Lu, A. Mano, Y. Yamaguchi, J. Katsuyama und Y. Li, "A novel method to uniquely determine the parameters in Gurson–Tvergaard–Needleman model," 2021. [Online]. Available: DOI: 10.1111/ffe.13568. [Zugriff am 01 08 2023].
- [30] M. Adisapoor, J. Kadkhodapour, A. Pourkamali Anaraki, S. Sharifi, A. Darabi und A. Barnoush, "Experimental and Numerical Investigation of Hydrogen Embrittlement effecton Microdamage Evolution of advanced High-Strength Dual-Phase Steel," [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/s12540-020-00681-1. [Zugriff am 01 08 2023].
- [31] M. Takashi, J. Yamabe und S. Matsuoka, "Effects of hydrogen on tensile properties and fracture surface morphologies of Type 316L stainless Steel," [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.12.099. [Zugriff am 01 08 2023].
- [32] W. Rust, Nichtlineare Finite-Elemente-Berechnungen mit ANSYS Workbench Strukturmechanik: Kontakt, Material, große Verformungen, Wiesbaden, Germany: Springer Vieweg, 2020.
- [33] A. V. 6. Dokumentation. [Online]. Available: https://classes.engineering.wustl.edu/2009/spring/mase5513/abaqus/docs/v6.6/books/ usb/default.htm?startat=pt03ch07s01aus40.html. [Zugriff am 01 08 2023].
- [34] M. GmbH, "Woite-Edelstahl," [Online]. Available: https://woite-edelstahl.info/aisi316lde.html. [Zugriff am 01 08 2023].
- [35] G. Bernauer, W. Brocks, U. Mühlich, D. Steglich und M. Werwer. [Online]. Available: https://www.hereon.de/imperia/md/content/hzg/institut_fuer_werkstoffforschung/wms/g tnbericht.pdf. [Zugriff am 01 07 2023].

- [36] D.A.Oliver, "Proposed new Citeria of ductility from a new law connecting the percentage elongation with size of test-Piece," [Online]. Available: https://doi.org/10.1243/PIME_PROC_1928_115_019. [Zugriff am 01 08 2023].
- [37] A. V. 6. Dokumentation (Diffusion). [Online]. Available: https://classes.engineering.wustl.edu/2009/spring/mase5513/abaqus/docs/v6.6/books/ usb/default.htm?startat=pt03ch06s08at25.html. [Zugriff am 01 09 2023].
- [38] T. Michler, T. Freitas, H. Oesterlin, C. Fischer, K. Wackermann und F. Ebling, "ScienceDirect," [Online]. Available: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.03.248. [Zugriff am 01 12 2023].
- [39] N. Bonora, A. Ruggiero, D. Gentile und S. De Meo, "Practical Applicability and Limitations of the Elastic Modulus Degradation Technique for Damage Measurements in Ductile Metals," [Online]. Available: doi: 10.1111/j.1475-1305.2009.00678.x. [Zugriff am 01 12 2023].
- [40] J. Koplik und A. Needleman, "Void growth and coalescence in porous plastic solids," [Online]. Available: https://hal.science/hal-03610791. [Zugriff am 01 09 2023].
- [41] C.Tekoglu, "Representative volume element calculations under constant stress triaxiality, Lode parameter, and shear ratio," [Online]. Available: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020768314003424. [Zugriff am 01 10 2023].
- [42] V. Tvergaard, "On localization in ductile materials containing spherical voids," International Journal of Fracture, Bd. 18, Nr. 4, 1982.

-	_	
-	_	
	_	_
_	-	_
_		_

Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg Hamburg University of Applied Sciences

Erklärung zur selbstständigen Bearbeitung einer Abschlussarbeit

Gemäß der Allgemeinen Prüfungs- und Studienordnung ist zusammen mit der Abschlussarbeit eine schriftliche Erklärung abzugeben, in der der Studierende bestätigt, dass die Abschlussarbeit "– bei einer Gruppenarbeit die entsprechend gekennzeichneten Teile der Arbeit [(§ 18 Abs. 1 APSO-TI-BM bzw. § 21 Abs. 1 APSO-INGI)] – ohne fremde Hilfe selbständig verfasst und nur die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt wurden. Wört- lich oder dem Sinn nach aus anderen Werken entnommene Stellen sind unter Angabe der Quellen kenntlich zu machen."

Quelle: § 16 Abs. 5 APSO-TI-BM bzw. § 15 Abs. 6 APSO-INGI

Dieses Blatt, mit der folgenden Erklärung, ist nach Fertigstellung der Abschlussarbeit durch den Studierenden auszufüllen und jeweils mit Originalunterschrift als letztes Blatt in das Prüfungsexemplar der Abschlussarbeit einzubinden.

Eine unrichtig abgegebene Erklärung kann -auch nachträglich- zur Ungültigkeit des Studienabschlusses führen.

Erklärung zur selbstständigen Bearbeitung der
Hiermit versichere ich,
Name:
Vorname:
dass ich die vorliegende Masterarbeit – bzw. bei einer Gruppenarbeit die gekennzeichneten Teile der Arbeit – mit dem Thema:
Charakterisierung des Einschnürverhaltens von Hohlzugproben anhand der Methode der Finite Elemente und kontinuummechanischer Schädigungsmodellen
ohne fremde Hilfe selbständig verfasst und nur die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Wörtlich oder dem Sinn nach aus anderen Werken entnommene Stellen sind unter Angabe der Quellen kenntlich gemacht.
- die folgende Aussage ist bei Gruppenarbeiten auszufüllen und entfällt bei Einzelarbeiten -
Die Kennzeichnung der von mir erstellten und verantworteten Teile der -bitte auswählen-
ist erfolgt durch:
Ort Datum Unterschrift im