

Statistisches Werkstoffmodell

Berechnung von stat. und zykl. Fließkurven, Beispiele

1. Zusammenfassung

Ausser bei Einkristallen und gerichtet erstarrten Legierungen sind die meisten Werkstoffe mikroskopisch sehr inhomogen aufgebaut. Mit einem statistischen Werkstoffmodell lassen sich Simulationsrechnungen der statischen und zyklischen Fließkurven von Metallen vornehmen. Es werden Beispiele für ein lamellares Gusseisen und einen austenitischen Stahl gezeigt.

Speziell für den Fall der Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls von der Kristallorientierung wurden im rein elastischen Bereich die resultierenden E-Modulwerte für regelmässig (gleichmassverteilte) E-Moduleinzelwerte für 5 bis 1500 Kristallite berechnet. Für 19 Körner einer grob erstarrten Legierung in der Messlänge einer Probe erhält man eine statistische Variation des E-Moduls (Standardabweichung/Mittelwert) von 5%. Mit einer zusätzlich messtechnisch normalen Streubreite von 1% ist mit einer bezogenen Standardabweichung des E-Moduls bei solchen Messungen von ca. 6% bzw. $\pm 12\text{GPa}$ (bei einem mittleren E-Modul von 192GPa) zu rechnen. Gesamthaft (Kornstatistik und Messunsicherheit) sind bei solchen Messungen E-Modulwerte von ca. 177 bis 214GPa zu erwarten.

2. Elastisch-plastische Modellvorstellungen

Bei der Festigkeitsberechnung von Bauteilen wird die mit Hilfe einer Hypothese ermittelte wirksame Vergleichsspannung mit der zulässigen oder ertragbaren Spannung verglichen. Hierbei werden die benötigten Werkstoffkennwerte meist an kleinen und einachsigen beanspruchten Proben bestimmt. Obgleich die Werkstoffstruktur, die chemische Zusammensetzung und das mechanisch-thermische Verhalten der Stoffe heute sehr viel besser bekannt ist, ist es wegen des komplexen Aufbaus der Metalle, s. **Bild 1**, bisher nur in Ansätzen möglich, Zusammenhänge zwischen den Befunden der metallographischen und mechanischen Untersuchung herzustellen [1, 2].

Die Anwendung der Finite-Element-Methoden (FEM) gestattet vor allem bei schwierigen geometrischen Verhältnissen und Randbedingungen und bei makroskopisch-elastischer Beanspruchung die Berechnung mehrachsiger Spannungs- und Verformungszustände mit - bei homogenem Werkstoff und isotropem Verhalten - nur wenigen Werkstoffkennwerten. Bei elastoplastischer Verformung muss bereits auf Fließhypothesen und zahlreiche Kennwerte übergegangen werden, die in einer Stoffmatrix zusammengefasst, als Näherungslösungen das Werkstoffverhalten beschreiben. Bei nicht linearelastisch-idealplastischer Werkstoffcharakteristik wird die Fließkurve meist approximiert und als analytischer Spannungs-Dehnungszusammenhang, z. B. als Ramberg-Osgood-Funktion, zugrunde gelegt.

Auch für grosse plastische Dehnungen bei zügiger Beanspruchung oder zyklischer Belastung im low-cycle-Bereich existieren zahlreiche Ansätze zur Beschreibung des Fließ- bzw. Kriechverhaltens, wofür als Beispiel einer Untersuchung die Arbeit von Schlimmer /3/ genannt sein soll. Die erforderlichen Stoffwerte bei Anisotropie, d.h. deren Richtungsabhängigkeiten, müssen mit Hilfe von Zug-, Druck- und Torsionsversuchen bestimmt werden.

Rechenmodelle über die inhomogenen mikroskopisch-plastischen Verformungen der metallischen Werkstoffe bei Beanspruchungen im Bereich der Dauerfestigkeit sind kaum bekannt, weil sich die mikroskopischen und submikroskopischen Verformungen der Erfassung mit den heutigen Verformungsmesstechniken weitgehend entziehen. Da sich die meisten Metalle sowohl im Zug- und Druckversuch als auch im Schwingversuch bis zu Spannungsamplituden in der Grösse der Dauerfestigkeitskennwerte praktisch linearelastisch verhalten, sind dem Spannungs-Dehnungs-Diagramm kaum geeignete Informationen über plastische Verformungsanteile zu entnehmen. Als Makromodellverhalten ist hier mit guter Näherung nur eine lineare Charakteristik sinnvoll, die aber gerade die vorhandenen Mikroplastifizierungen eliminiert.

Da die plastischen Vorgänge auch in einem homogen beanspruchten Volumbereich in Verteilung und Grösse als statistische Erscheinungen und nicht als Reaktion eines Kontinuums anzusehen sind, soll im folgenden der Versuch gemacht werden, die mikroskopischen elastischen und plastischen Verformungen mit Hilfe eines einfachen Grundelementes und statistischer Betrachtungsweise zu berechnen und Zusammenhänge zu Spannungsdehnungsmessungen herzustellen. Weitergehende Analysen und Deutungen aus metallkundlicher Sicht sind hiernach möglich, um "die im Mikrostrukturbereich wirksamen Mechanismen aufzuzeigen und den Bezug zu makrostrukturellen Merkmalen und Verhaltensweisen herzustellen" /1/.

Kafka geht in einem vereinfachten mathematischen Werkstoffmodell von einem vorliegenden Mikrospannungszustand aus /4/. Er definiert ihn als allgemeines Spannungsfeld im Bereich von Versetzungen, Verunreinigungen und anderer Gitterfehler, wie sie bei realen technischen polykristallinen Materialien vorliegen. Mit dem Spannungs-Dehnungs-Diagramm des Zugversuches als einziger Informationsquelle weist er an einer Aluminiumlegierung die Bedeutung der Mikrospannungen auf die plastische Verformung der Werkstoffe nach. Zahlreiche bekannte mechanische Effekte lassen sich durch Betrachtung der elastischen und der gesamten residualen Energie gut beschreiben.

3. Das linearelastisch-idealplastische Einzelelement

Wie in **Bild 2** dargestellt, besteht das stark idealisierte Ersatzmodell für einen mikroskopisch kleinen Volumenbereich aus einem Feder-Reibungsglied (Einzelelement). Die Feder gestattet die Darstellung der rein elastischen Verformungen (s. Elastizitätsmodul), der Beanspruchungsgrenzen (Zug- und Druckfestigkeit) und evtl. der Eigenspannungszustände. Das Reibungsglied symbolisiert die rein plastische Verformung mit den Auslöseschwellen (Zug- und Druckfliessgrenze) und den möglichen Fließwegen (max. Dehnung bei Zugbeanspruchung und max. Stauchung bei Druckbeanspruchung). Dieses stark vereinfachte Modell für den kristallinen Aufbau und die Kornstruktur eines Werkstoffs entspricht aus metallkundlicher Sicht etwa dem Verhalten einer Schraubenversetzung. Die Nachbildung der sich nach kurzen Fließwegen an Gitterfehlstellen aufstauenden Stufenversetzungen ist durch Aenderung des Modellcharakters ebenfalls leicht möglich. Ebenso sind gemischte Versetzungsanordnungen mit statistischer Verteilung bei relativ geringem Programmieraufwand simulierbar.

Ein Versagen eines Einzelelementes (im realen Werkstoff einem hochbeanspruchten Gefügebereich vergleichbar) kann eintreten durch:

- hohe Eigenspannung über der Zug- bzw. Druckfestigkeit bei gleichzeitig sehr hohen Fließgrenzen (kein Eigenspannungsabbau vor der Belastung möglich)
- Ueberschreiten der maximalen Dehn- bzw. Stauchgrenzen beim Eigenspannungsabbau durch plastische Verformung vor der Belastung
- Ueberschreiten der Zug- bzw. Druckfestigkeit (Trennbruch, Voraussetzung sehr hohe lokale Fließgrenzen)
- Ueberschreiten der maximalen Dehnung bzw. Stauchung (Gleitbruch, Voraussetzung hohe Festigkeitswerte der Feder).

Bei Belastung des Einzelelementes wird die Gesamtlängenänderung Δl je nach Grösse der Einzelparameter anteilmässig von der Feder und dem Reibglied oder u.U. nur von der Feder aufgenommen, so dass sich die in **Bild 2** skizzierten Spannungs-Dehnungsverläufe ergeben können. Versagt ein Einzelelement aus einem der möglichen 8 Ursachen, wird es zur Lastaufnahme bei allen weiteren Berechnungen nicht mehr berücksichtigt.

4. Das statistische Gesamtmodell

Stellt man sich nun vor, dass sich eine einachsige beanspruchte Probe aus unterschiedlichen, kraftübertragenden Mikrobereichen zusammensetzt, so lässt sich gemäss **Bild 3** der sich bis zu Beginn der Einschnürdehnung makroskopisch homogen verformende Volumenbereich durch eine sehr grosse Anzahl von Einzelelementen simulieren. Da bei einachsigen beanspruchten Zug- und Druckproben auch bei grösserer Verformung ebene Querschnitte eben bleiben, genügt es, alle elastisch-plastischen Elemente zwischen zwei parallelen Schnittebenen (Einzelheit Z, Ebenen ① und ②) anzuordnen. In Achsrichtung ist die Anordnung von jeweils nur einem Einzelelement ausreichend, da dies als resultierendes Element mehrerer hintereinandergeschalteter Elementebenen interpretiert werden kann.

Verdichtet man alle Elemente in einen ideellen Werkstoffwürfel mit der Kantenlänge 1mm, so wird die resultierende, in Achsrichtung an der Würfeloberfläche angreifende Kraft zur Spannung (in MPa) und man erhält aus der Abstandsänderung Δl der beiden Lastangriffsflächen (Verschiebung der Ebene ② nach ②') die Dehnung des Modells bzw. der Probe.

Die Vorgabe einer oder mehrerer Gesamtdehnungsgrenzen (ϵ_{ges}) ermöglicht die Berechnung der σ - ϵ -Diagramme sowohl für positive Dehnungen (Zugversuch), negative Dehnungen (Druckversuch) als auch bei mehreren positiven und negativen Dehnungsgrenzen der Hysteresiskurven für den dehnungskontrollierten Ermüdungsversuch. Das Dehnungsinkrement $d\epsilon$ gibt die Schrittweite zur Errechnung der σ - ϵ -Kurve an. Aus der Summe der plastischen Verformungen in den Reibungsgliedern lässt sich für die jeweiligen Gesamtdehnungsgrenzen die spezifische (volumbezogene) irreversible Formänderungsarbeit ermitteln. Je nach gewähltem Steuermodus sind sowohl dehnungs- als auch kraftkontrollierte Belastungen möglich.

Entscheidend für die Simulation einer tatsächlichen Spannungs-Dehnungs-Charakteristik eines beliebigen Werkstoffs ist nun die Verteilung der Einzelelementparameter auf das Gesamtmodell. Um bei steigender Dehnung für die resultierende Spannung σ sich stetig

ändernde Werte zu erhalten. ist eine grosse Anzahl von Elementen notwendig, deren Wertzuweisung und Berechnung nur noch mit einer elektronischen Rechanlage zu bewältigen ist. Die individuelle Zuweisung der Einzelgrenzen für Spannungen und Verformungen muss nach statistischen Gesichtspunkten durchgeführt werden, um das mikroskopische polykristalline Werkstoffverhalten beschreiben zu können.

Nach /5, 6, 7/ gibt es eine Anzahl von Computermethoden, um Pseudo-Zufallszahlen in bestimmter Verteilung zu erzeugen. Zum Programmaufbau wurde die Normalverteilung nach Gauss (NV, entsprechend einer in Probenlängsrichtung ausgeprägten Orientierung in den Kristallen) und die Gleichmassverteilung (GV, entsprechend einer in jeder Richtung etwa gleichmässig verteilten Anzahl von Orientierungen) verwendet, die wahlweise benutzt werden können. Zur Zuweisung der Einzelelementparameter werden im Rechenprogramm die vorgegebenen Werkstoffgrenzwerte mit den entsprechenden Zufallszahlen (die zwischen 0 und 1 normiert werden) multipliziert. Das vorliegende Programm verarbeitet bis zu 1500 Einzelelemente (Kristallite) zu einem Gesamtmodell.

Trotz des sehr einfachen Grundelementes - dessen Charakteristik bei makroskopischer Betrachtungsweise das Spannungs-Dehnungsverhalten eines normalgeglühten Baustahls im Zugversuch bis zum Beginn der Verfestigung beschreibt - lassen sich mit dem nun statistisch gewonnenen Gesamtmodell die unterschiedlichsten Fließkurven nachbilden. Dies reicht, wie in der Skizze in **Bild 2** dargestellt wird, vom absolut spröden Werkstoffverhalten bis zu Metallen ohne und mit ausgeprägter Fließgrenze. Auch asymmetrisches Verhalten bei Zug- bzw. Druckbeanspruchung lässt sich nachbilden. Simulationsrechnungen an einem lamellaren Guss bzw. einem Austenit zeigen die **Bilder 4 und 5**.

Angestrebt wurden mit dem Rechenprogramm folgende Untersuchungen:

- Auswirkungen der vorgegebenen Parametergrenzen auf die errechnete Fließkurve im Zug- bzw. Druckversuch (vgl. /2/)
- Einfluss und werkstoffmechanische Deutung der Art der Zufallsverteilung bei den Wertzuweisungen
- Darstellung des Phänomens des Bauschinger-Effektes durch gegensinnig vorhandene Eigenspannungen
- Nachbildung gemessener σ - ϵ -Diagramme und Uebernahme der hierfür gefundenen Parametergrenzen zur
- Berechnung der Hysteresiskurven dieses Modellwerkstoffes bei unterschiedlichen Dehnungsschwingbreiten und
- Vergleich der berechneten irreversiblen Formänderungsarbeit mit den Ergebnissen von thermometrischen Prüfungen /8/.

Dieses Werkstoff-Simulationsprogramm ist in den Jahren 1976-80 im Rahmen einer Forschungsarbeit am Lehrstuhl f. Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre der Universität Stuttgart entstanden. Es ist in Fortran 77 programmiert, lief damals auf dem Hochschulgrossrechner und läuft heute problemlos auf einem PC.

5. Rechnungen

Aktueller Anlass für die statistischen Rechnungen waren beobachtete Streuungen beim Elastizitätsmodul bei LCF/TMF-Messungen an grobkristallin erstarrtem IN738LC in Schaufelfüssen bzw. Fuss-Blattübergang einer GT8C-Turbinenschaufel (TuLa3) von ca. 7.8% (Standardabweichung/Mittelwert aus 21 Proben).

Tafel 1 zeigt die Vorgaben für die Berechnung. Als Basis wurden die an Ni-Einkristall gemessenen E-Moduli von 129GPa (für die [001]-Richtung) und 305GPa (für die [111]-Richtung) gewählt. Da bei relativ schneller Erstarrung beim Abguss der Schaufel keine Vorzugsrichtung bei der Kristallorientierung zu erwarten ist, wurde die Gleichmassverteilung für den E-Modul angenommen. Alle anderen Eingabegrößen wurden so gewählt, dass sich für diesen speziellen Fall eine rein elastische Beanspruchung ergibt und sich der statistisch zufällige E-Modul leicht ermitteln lässt. Da bei elastisch-plastischen Verformungen an zylindrischen einachsigen beanspruchten Proben ebene Querschnitte eben bleiben - keine Verschiebungsinhomogenitäten, lediglich Spannungsinhomogenitäten - sind die Einzelelemente parallel geschaltet. Eine Reihenschaltung darf nur *nach* einer teilweisen Parallelschaltung vorgenommen werden. Bei einer Reihenschaltung *vor* der Parallelschaltung bleiben die Zwischenquerschnitte nicht mehr eben.

Die Anzahl der Einzelelemente wurde von 5 bis 1500 variiert.

In **Tafel 2** ist die statistische Gleichmassverteilung (hier sortiert in 20 Klassen der gleichen Breite) der E-Modulwerte dargestellt. Das Ergebnis der Belastungskurve dieses Modellwerkstoffs im σ - ϵ -Diagramm bis zu einer Dehnung von 0.5% zeigt **Bild 6** (linear-elastisch gemäss den Vorgaben).

Alle Rechnungen für 5 bis 1500 Kristallite in der Messlänge einer dehnungsgesteuert belasteten LCF-Probe macht das Diagramm in **Bild 7** deutlich. Addiert man im Beispiel für 19 Körner (mit ca. 5mmx5mm Grösse) in der Messlänge einer Probe noch die messtechnisch normale Streuung von ca. 1% hinzu, ergibt sich eine zu erwartende Streuung von ca. 6% (Standardabweichung/Mittelwert) - berechnet als statistisches Mittel für 21 Proben. Die Standardabweichung errechnet sich damit zu ca. 12GPa wobei bei den 21 Rechnungen („Versuchen“) ein Minimalwert von 179.4GPa und ein Maximalwert von 211.9GPa bei einem Mittelwert von 192GPa ermittelt wurde. Mit $\pm 1\%$ Messunsicherheit sind damit Messwerte von 177.5GPa bis 213.8GPa zu erwarten - bei den Messungen am IN738LC an der EPFL waren es „Streuungen“ von 170 bis 223GPa.

Selbst für 1500 Kristallkörner (Korngrösse ca. 0.53mm für eine LCF-Hohlprobe \varnothing 11/9mm und 15mm Messlänge) erhält man noch eine E-Modulvariation von 0.5%, d.h. incl. der zu erwartenden Messungenauigkeit von 1% eine normale Varianz von 1.5% bzw. eine statistische Messunsicherheit mit einer Standardabweichung von ca. 3GPa bei einem mittleren Elastizitätsmodul von 192GPa. Die „natürliche“ Messwertstreuung dürfte somit bei diesem feinkörnigeren Modellwerkstoff immer noch bei ca. ± 3.8 GPa liegen.

6. Literatur

- /1/ Cardinal, P.: Beitrag zum Zusammenhang zwischen plastischer Verformung und Struktur metallischer Werkstoffe; Grundlagen, Darstellung, Programmierung, Erprobung. Diss. RWTH Aachen, 1974 sowie Sem. Technol. Mech. Werkstoffe, Inst.f.Werkstoffkunde RWTH Aachen, 1975
- /2/ Kühlmeyer, M.: Einfluss der statistischen Korngrößenverteilung auf die Streckgrenze von Stahl. Verlag Stahleisen m.b.H., Düsseldorf, 1978
- /3/ Schlimmer, M.: Fließverhalten plastisch kompressibler Werkstoffe. Diss. RWTH Aachen, 1974
- /4/ Kafka, V.: Zur Thermodynamik der plastischen Verformung. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, 54, 1974, Heft 10, S.67-657

- /5/ Sachs, L.: Statistische Methoden. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 3. Auflage, 1976
- /6/ Norman, J.E. and L.E. Cannon: A Computer Program for the Generation of Random Variables from any Discrete Distribution. Journal of Statistical Computation and Simulation, Vol. 1, No. 4, 10/1972, p.331-36
- /7/ Ahrens, J.H. and U. Dieter: Computer Methods for Sampling from Gamma, Beta, Poisson and Binomial Distributions. Computing, Vol. 12, 1974, p.223-24
- /8/ Stärk, K.F.: Thermometrische Untersuchungen zum zyklischen Verformungsverhalten metallischer Werkstoffe. Diss. Uni-Stuttgart, 1980
- /9/ Engel, L. und H. Klingele: Rasterelektronenmikroskopische Untersuchungen von Metallschäden. Gerling Institut für Schadenforschung und Schadenverhütung GmbH, Köln, 1974

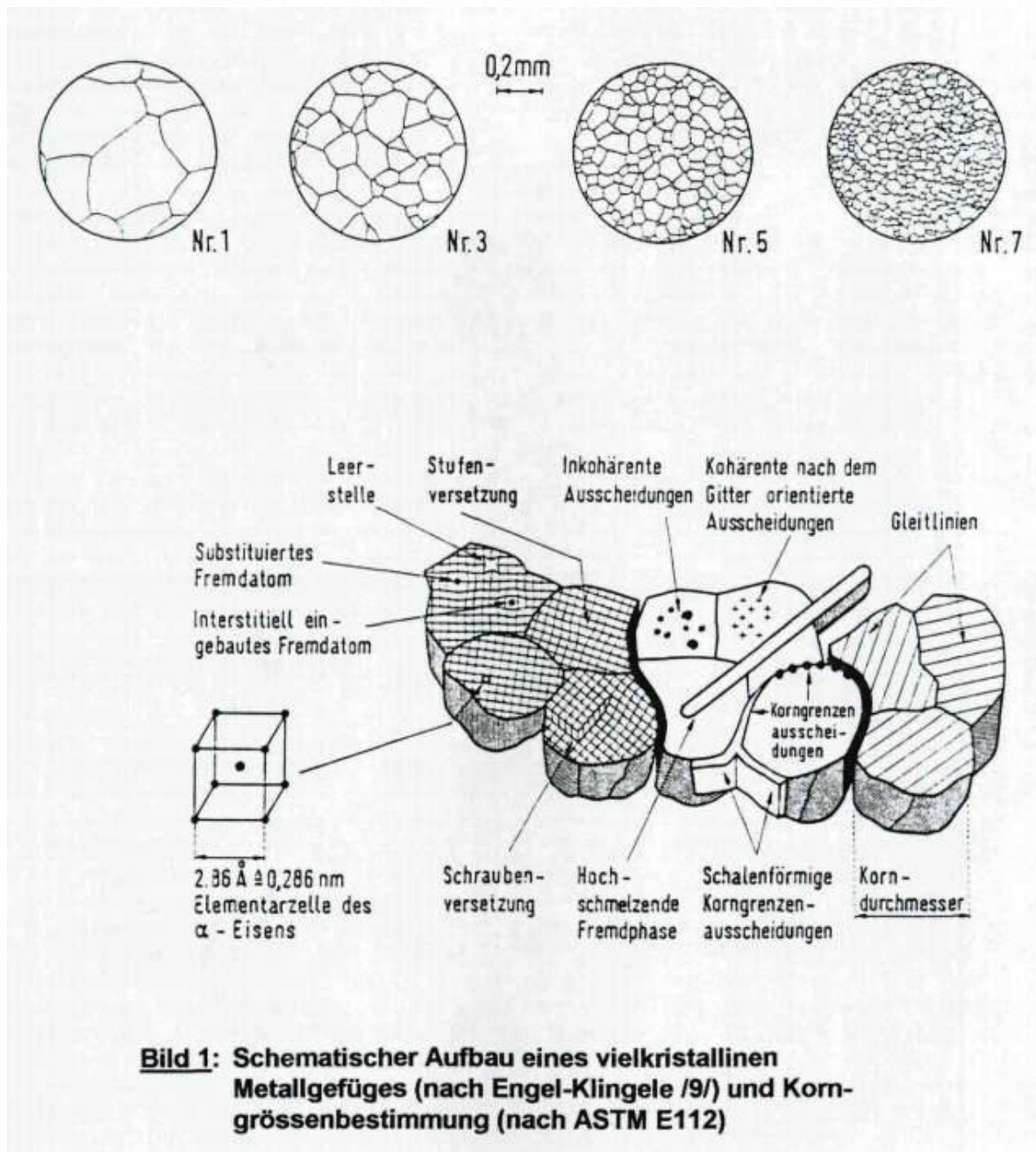
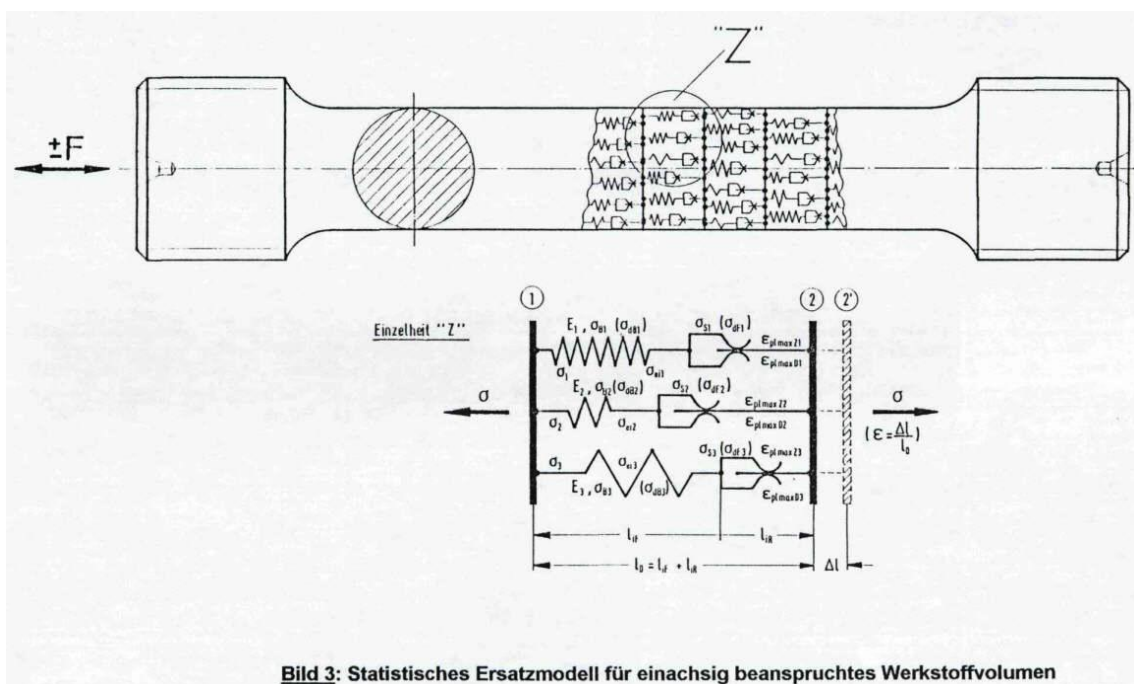
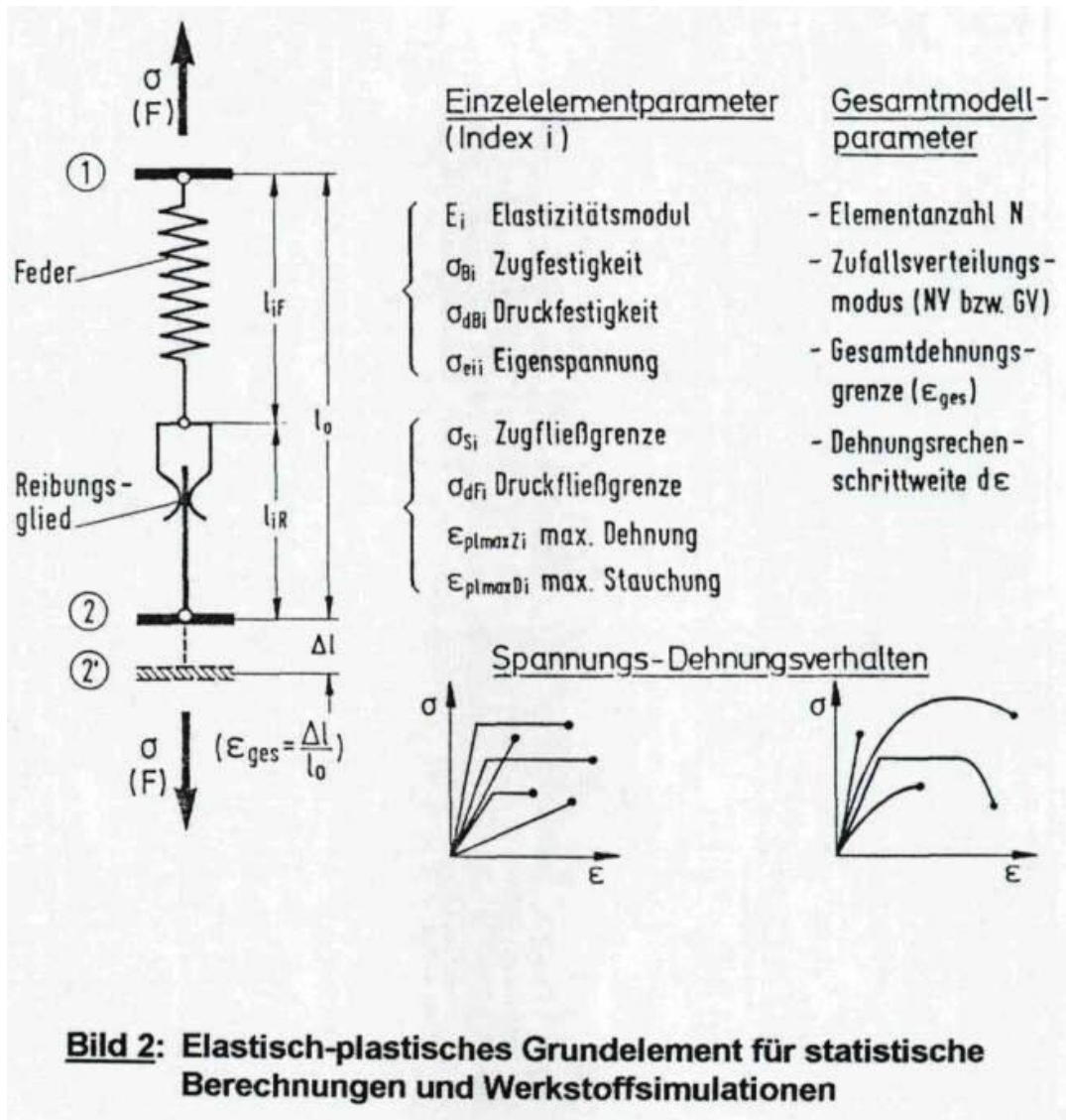


Bild 1: Schematischer Aufbau eines vielkristallinen Metallgefüges (nach Engel-Klingele /9/) und Korngrößenbestimmung (nach ASTM E112)



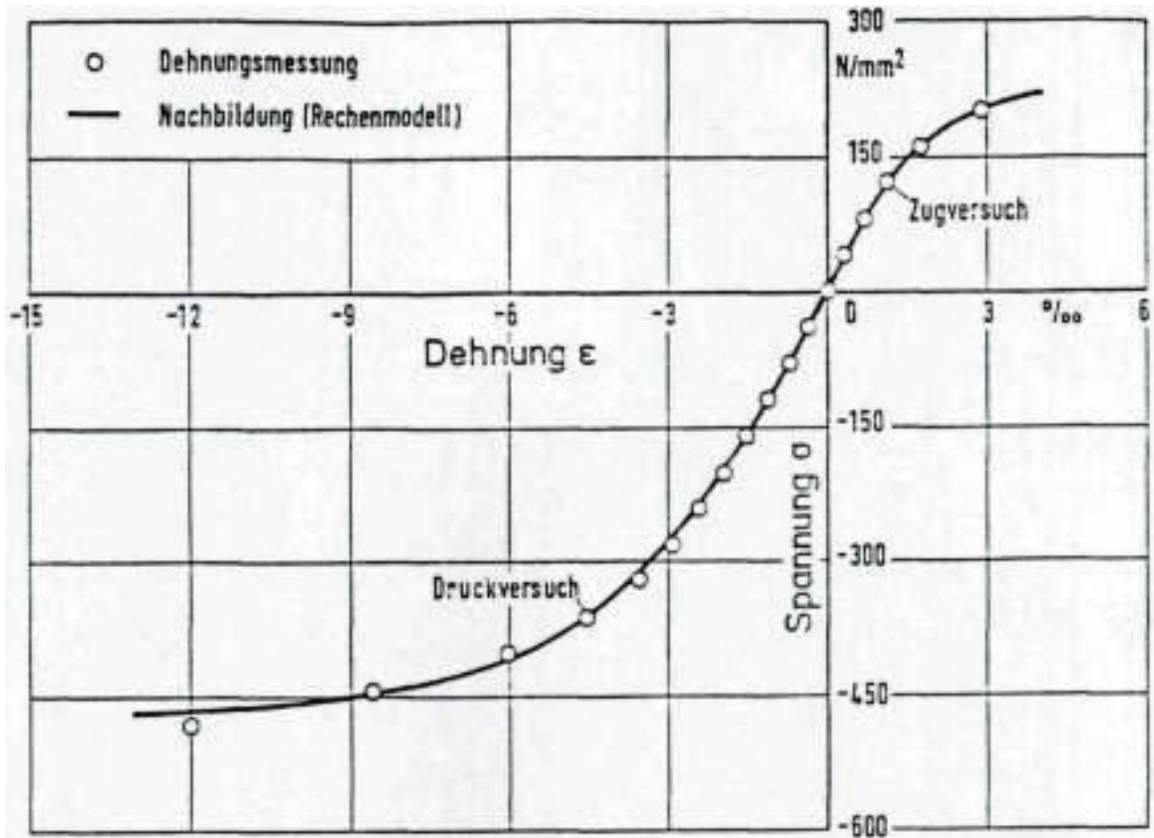


Bild 4: Simulation Grauguss GG-20

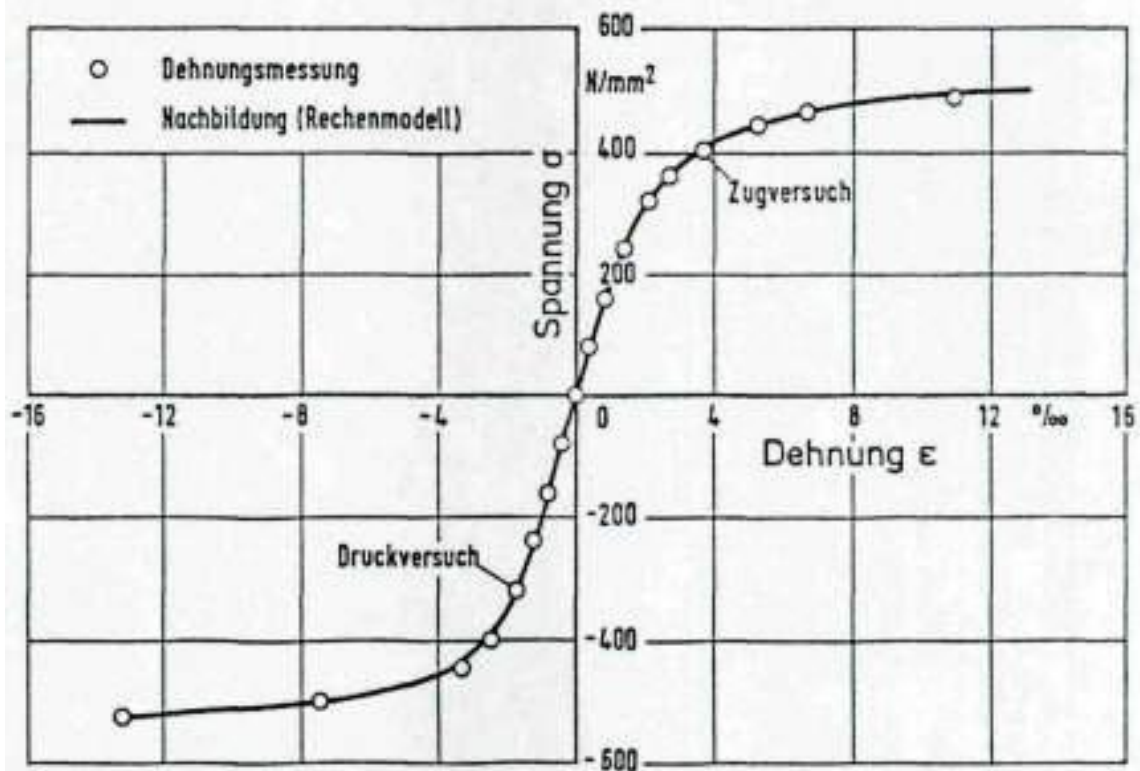


Bild 5: Simulation Austenit X10CrNiMoTi1810

-- EINGABEDATEN --

Werkstoff : Ni-Einkristall

Dehnungsgesteuerter Versuch

Statischer Versuch

Startwert für Zufallsgenerator : 105

Anzahl der Einzelemente : 52

Dehnungsrechenschrittweite (%.) : .10000

Dehnungsschwinggrenzen (%.) :

1. Dehnungsschwinggrenze : 5.0

Elastizitätsmodul (MPa) : von 129000.0 bis 305000.0 Gleichmass

Max. ertrag. Zugspannung (MPa) : von 2500.0 bis 2500.0 Gleichmass

Max. ertrag. Druckspannung (MPa) : von -2500.0 bis -2500.0 Gleichmass

Zugfliessgrenze (MPa) : von 2000.0 bis 2000.0 Gleichmass

Druckfliessgrenze (MPa) : von -2000.0 bis -2000.0 Gleichmass

Max. plast. Dehnung (%.) : von 20.0 bis 20.0 Gleichmass

Max. plast. Stauchung (%.) : von -20.0 bis -20.0 Gleichmass

Eigenspannungen (MPa) : von .0 bis .0 Gleichmass

Tafel 1: Beispiel für Eingaben zur Simulation eines Werkstoffes

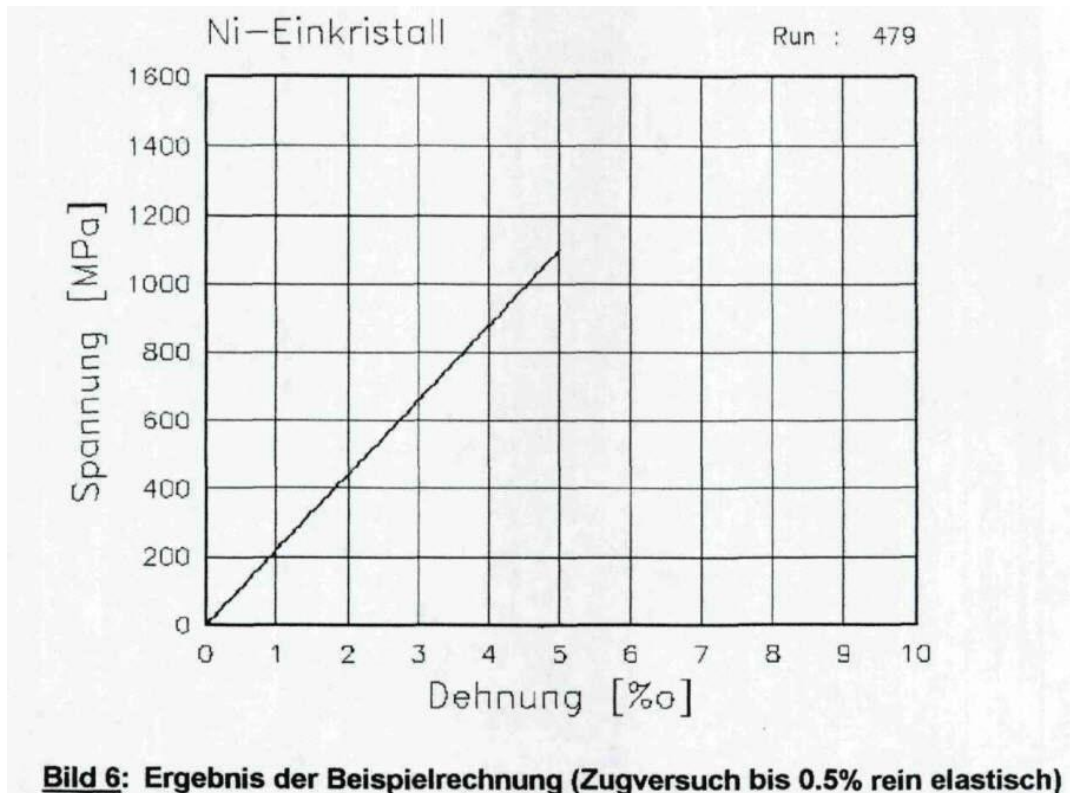
Auswertung der Verteilung für die Elastizitätsmoduli

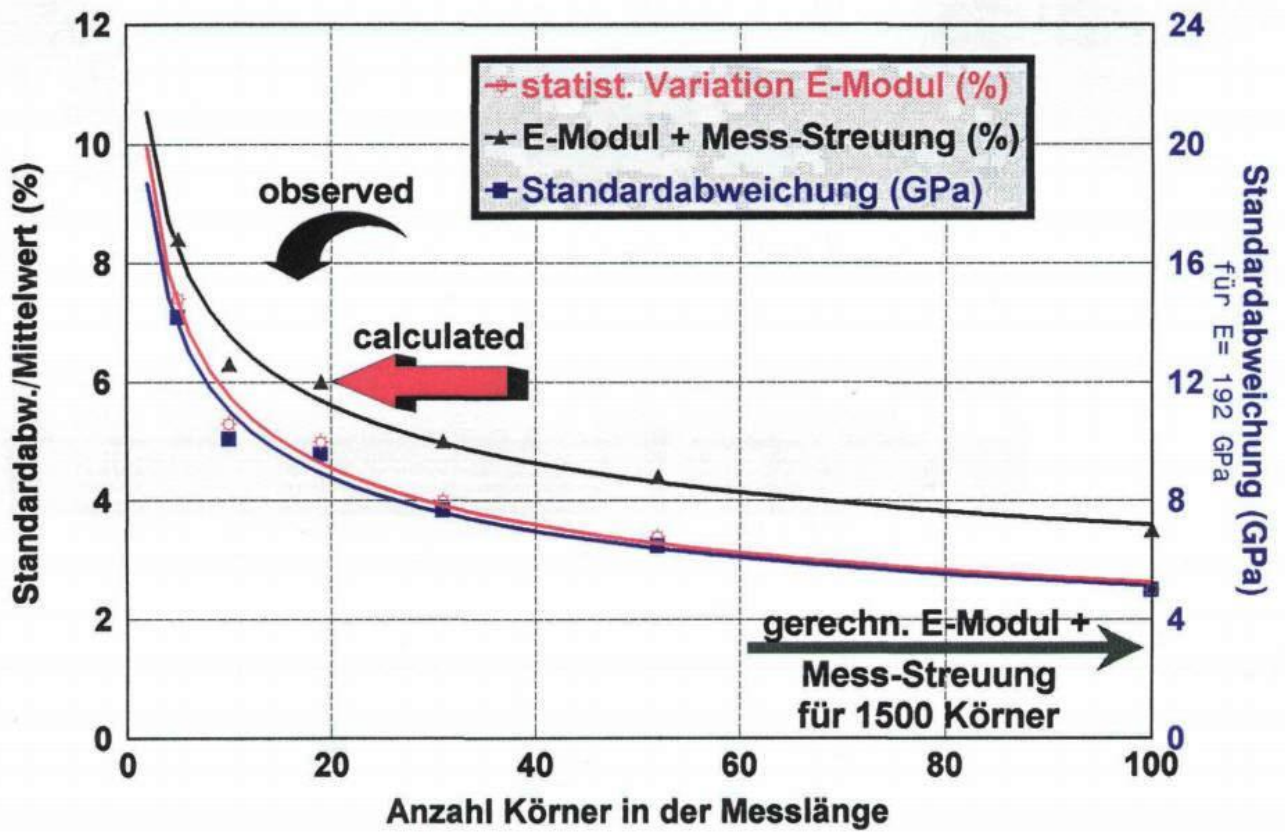
Minimum : 129000.
Maximum : 305000.

Mittelwert : 220258.
Einheit : MPa

Klasse		Anzahl	Klasse		Anzahl
von	bis		von	bis	
129000.	137800.	4	137800.	146600.	4
146600.	155400.	2	155400.	164200.	0
164200.	173000.	2	173000.	181800.	3
181800.	190600.	2	190600.	199400.	2
199400.	208200.	0	208200.	217000.	2
217000.	225800.	2	225800.	234600.	3
234600.	243400.	4	243400.	252200.	5
252200.	261000.	3	261000.	269800.	2
269800.	278600.	5	278600.	287400.	3
287400.	296200.	3	296200.	305000.	1

Tafel 2: Ergebnis der statist. Gleichmassverteilung des Elastizitätsmoduls mit den Grenzen 129GPa und 305GPa (aufgelistet in 20 Klassen)





Sk42 C0410

Bild 7: Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls von der Anzahl Körner in der Messlänge