



Johannes Schmid, BSc

Modellierung der Mikrostruktur eines kriechfesten Stahles

Modelling the microstructure of a creep resistant steel

Masterarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom-Ingenieur

Masterstudium Wirtschaftsingenieurwesen-Maschinenbau

eingereicht an der

Technischen Universität Graz

Betreuer: Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Bernhard Sonderegger

Institut für Werkstoffkunde, Fügetechnik und Umformtechnik

Graz, 19. Mai 2018

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe. Das in TUGRAZonline hochgeladene Textdokument ist mit der vorliegenden Masterarbeit identisch.

Datum

Unterschrift

Danksagung

Ich möchte allen Personen danken, welche mir bei der Erstellung dieser Masterarbeit geholfen haben.

Ein besonderer Dank gilt dabei meinem Betreuer Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Bernhard Sonderegger, welcher mir stets mit Rat und Tat zur Seite stand.

Weiters möchte ich meinen Eltern danken, welche immer ein offenes Ohr für mich haben und mich in jeder Situation unterstützen.

Danke.

Kurzfassung

Die vorliegende Masterarbeit beschäftigt sich mit der Modellierung der Mikrostruktur eines kriechfesten Stahles. Dabei wird hier der Stahl X10CrMoVNb9-1, oder auch als P91 bezeichnet, näher untersucht. Um das Kriechverhalten simulieren zu können, wurden die Simulationsprogramme MatCalc und Matlab herangezogen und kooperativ verwendet.

Dabei knüpfte die vorliegende Arbeit an bereits bestehende Projekte an, welche im Rahmen eines bilateralen Industrieprojektes mit Mitsubishi Heavy Industries (MHI) 2016 durch Riedlsperger [1] und 2017 durch Krenmayr [2] entstanden sind.

Mittels MatCalc wurde die Entwicklung der Ausscheidungen im Laufe der Zeit unter Beaufschlagung von 650°C über die Temperaturzyklen Normalisieren, Anlassen und einer vorläufigen Betriebsdauer von über 100.000 Stunden simuliert. Aufgrund der Tatsache, dass es mit dem Programm MatCalc nicht möglich ist, die Auswirkungen einer beaufschlagten Spannung zu simulieren und somit Aussagen über die Dehnung über der Zeit zu treffen, mussten die relevanten Ergebnisse der Ausscheidungen (Mittlerer Durchmesser und Stückzahl pro Volumen der Ausscheidungen) dem Programm Matlab zur weiteren Berechnung übergeben werden. Hierfür musste eine geeignete Schnittstelle entwickelt werden.

Mit dem Programm Matlab wurde das semi-physikalische Kriechmodell nach Yadav [3] abgebildet. Nach einer sehr kritischen Hinterfragung des Modelles wurde dies in einigen Punkten abgeändert und an das Kriechmodell nach Ghoniem [4] angepasst. Dem Matlab - Code wurden einige Erweiterungen hinzugefügt, welche beispielsweise eine Berechnung mit und ohne MatCalc - Daten ermöglichen. Des weiteren ist es möglich, dass die Berechnung mittels der originalen Orowan - Gleichung oder mittels der modifizierten Orowan - Gleichung nach Yadav [3] durchgeführt wird. Aufgrund der Nutzung von MatCalc Daten wurde die Berechnungsdauer um ein vielfaches erhöht. Um diesem Phänomen entgegen zu wirken, wurde eine variable Schrittweite implementiert, welche sehr schnelle Berechnungen ermöglicht und trotzdem hinreichend genaue Ergebnisse liefert. Eine weitere Erweiterung ist die Ausgabe eines Zeitstanddiagrammes nach einer oder mehreren verschiedenen Berechnungen unter der Berücksichtigung von verschiedenen beaufschlagten Spannungen. Mittels einem, im Rahmen dieser Arbeit angefertigten, Graphical User Interface (GUI) wurde eine einfache Bedienung des Matlab - Codes und somit der verschiedenen Berechnungsmöglichkeiten ermöglicht.

Alle Ergebnisse wurden grafisch aufbereitet und sind vollständig im Anhang der vorliegenden Arbeit abgebildet. Ebenfalls sind die Skripten des MatCalc Codes, sowie des Matlab Codes vollständig im Anhang abgebildet und der Masterarbeit in digitaler Form beigelegt.

Abstract

This Master thesis deals with the modelling of the microstructure of a creep resistant steel. The steel X10CrMoVNb9-1, or colloquially called P91, is examined in detail. In order to simulate the creep behavior two simulation programs, namely MatCalc and Matlab, were cooperatively used.

This thesis follows up a project, within the scope of a bilateral industrial project with Mitsubishi Heavy Industries (MHI), by Riedlsperger [1] and by Krenmayr [2].

By using MatCalc the evolution of the precipitates under the heat of 650°C while 100.000 hours of use was simulated at a normalizing, tempering and service cycle. Due to the fact that it is impossible to simulate an applied stress and predict a strain over time with MatCalc, the relevant results of the precipitates (mean diameter and number density) have to be transferred to Matlab for further calculations.

Yadav's [3] semi-physical creep model was displayed by the program Matlab. After a critical evaluation Yadav's model was alternated in some aspects and adjusted to Ghoniem's [4] creep model. Apart from that, further enhancements, such as calculations with or without the MatCalc data, were added to the Matlab code. Furthermore, a calculation using the original Orowan's equation or the modified Orowan's equation after Yadav [3] was made possible. Because of the use of MatCalc data the calculation time increased extremely. To work against this phenomenon a variable step size was implemented, which facilitated a faster calculation and sufficiently exact results. A further improvement was the calculation of a time to rupture diagram considering different applied stresses. By using a Graphical User Interface (GUI), which has been designed in the course of this thesis, a simple usage of the Matlab code and a selection out of various calculation methods was enabled.

All results were graphically processed and can be found in the appendix. The complete MatCalc code as well as the Matlab code is attached to the hard copy Master thesis and its digital version.

Inhaltsverzeichnis

Verwendete Variablen und Parameter	xiii
1. Einleitung	1
1.1. Ziel dieser Masterarbeit	1
1.2. Kriechen	2
1.2.1. Kriechstadien	3
1.3. Eigenschaften von martensitischen Stählen	4
1.3.1. Eigenschaften P91	4
1.3.2. Herstellung und Mikrostruktur P91	4
1.3.2.1. Wärmebehandlung	4
1.3.2.2. Mikrostruktur	5
1.3.2.3. Ausscheidungsstruktur	7
1.3.2.4. Kristallstruktur	7
2. Literaturstudie	8
2.1. Kriechmechanismen	8
2.1.1. Versetzungskriechen	8
2.1.2. Diffusionskriechen	10
2.1.3. Versetzungsgleiten	10
2.1.4. Korngrenzengleiten	11
2.1.5. Verformungsmechanismuskarte	12
2.2. Kriechmodellierung	14
2.2.1. Phänomenologische Kriechmodelle	14
2.2.1.1. Logarithmisches Kriechen nach Phillips	14
2.2.1.2. Potenzgesetz nach Norton	15
2.2.2. Semi-physikalische Kriechmodelle	15
2.2.2.1. Ghoniem [4]	15
2.2.2.2. Basirat [41]	18
2.2.2.3. Yadav [3]	18
2.2.2.4. Kriechmodell - Vorliegende Arbeit	21
2.3. Entwicklung der Mikrostruktur	21
2.3.1. Gitterbaufehler	21
2.3.1.1. Nulldimensionale Gitterbaufehler	21
2.3.1.2. Eindimensionale Fehler - Versetzungen	22
2.3.1.3. Zweidimensionale Fehler	24
2.3.1.4. Dreidimensionale Fehler	25

2.4.	Kriechmodelle - Mikrostrukturentwicklung	26
2.4.1.	Verwendete Formeln	26
2.4.2.	Teilchenvergrößerung / Ostwald - Reifung	32
2.4.3.	Eigenschaften und Rolle von Ausscheidungen	32
2.4.3.1.	Chromkarbid - $M_{23}C_6$	33
2.4.3.2.	MX Ausscheidungen - NbC und VN	33
2.4.3.3.	Laves Phase	33
2.4.3.4.	Aluminium Nitride	33
2.4.3.5.	Modifizierte Z Phase	33
2.5.	Diffusionskoeffizienten	34
3.	Experimental	37
3.1.	MatCalc	37
3.2.	Brücke zwischen MatCalc und Matlab	39
3.3.	Matlab	42
3.3.1.	Ursprüngliche Struktur des Matlab - Codes	42
3.3.2.	Interface Matlab	43
3.3.2.1.	Abfragefenster Berechnungsmöglichkeiten	43
3.3.2.2.	Abfragefenster Parameter	45
3.3.2.3.	Abfragefenster MatCalc Daten Import	46
3.3.2.4.	Abfragefenster Ausscheidungen	46
3.3.2.5.	Abfragefenster Zeitstanddiagrammdateien	48
3.3.3.	Variable Schrittweite	49
3.4.	Referenzierung der verwendeten Symbole	49
3.4.1.	Zusammenführung von verschiedenen Symbolen aus verschiedenen Literaturquellen	49
3.4.2.	Zusammenführung Symbole vorliegende Arbeit - Matlab	51
3.5.	Änderungen im Code	52
3.5.1.	Änderungen in <i>Creep_model.m</i>	52
3.5.2.	Änderungen in <i>Service_Conditions.m</i>	52
3.5.3.	Änderungen in <i>Experimental_Data.m</i>	53
3.5.4.	Änderungen in <i>Parameters.m</i>	53
3.5.5.	Änderungen in <i>microstructure_parameters.m</i>	53
3.5.6.	Änderungen in <i>model_parameters.m</i>	53
3.5.7.	Änderungen in <i>main_model.m</i>	53
3.5.8.	Änderungen in <i>plot_figures.m</i>	54
3.5.9.	Änderungen in <i>CreepRate.m</i>	54
3.5.10.	Neue <i>matlab.m</i> Files und <i>excel.xlsx</i> Files	55
3.5.10.1.	<i>processing_MatCalc_data.m</i>	55
3.5.10.2.	<i>time_to_rupture_diagram.m</i>	55
3.5.10.3.	<i>Zeitstandsdaten.xlsx</i>	55
4.	Ergebnisse und Diskussion	57
4.1.	Simulation der Ausscheidungskinetik (MatCalc)	57
4.1.1.	Normalisieren	58
4.1.2.	Anlassen	59

4.1.3. Betrieb	60
4.2. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Vorstudien (Matlab)	63
4.3. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Verbesserungen (Matlab)	65
4.4. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Endergebnisse (Matlab)	67
4.4.1. Simulationsergebnisse - Dehnung ϵ	68
4.4.2. Simulationsergebnisse - Geschwindigkeiten v_g , v_c , v_{eff} und v_{const}	71
4.4.3. Simulationsergebnisse - ρ_m , ρ_{dip} , ρ_b und R_{sbg}	72
4.4.4. Simulationsergebnisse - σ_{app} , σ_i und σ_{eff}	74
4.4.5. Simulationsergebnisse - Unterschiedliche Berechnungsmöglichkeiten	74
4.4.6. Simulationsergebnisse - Zeitstanddiagramm	76
5. Zusammenfassung, Fazit und Ausblick	79
5.1. Zusammenfassung	79
5.1.1. Theoretische Grundlagen	79
5.1.2. MatCalc	79
5.1.3. Matlab	80
5.2. Fazit	80
5.3. Ausblick	81
A. Anhang	A 1
A.1. Materialparameter	A 1
A.2. MatCalc - Code	A 2
A.3. Matlab - Code	A 8
A.3.1. <i>Creep_model.m</i>	A 9
A.3.2. <i>Service_Conditions.m</i>	A 10
A.3.3. <i>Experimental_Data.m</i>	A 13
A.3.4. <i>Parameters.m</i>	A 14
A.3.5. <i>microstructure_parameters.m</i>	A 15
A.3.6. <i>model_parameters.m</i>	A 16
A.3.7. <i>main_model.m</i>	A 17
A.3.8. <i>processing_MatCalc_data.m</i>	A 24
A.3.9. <i>plot_figures.m</i>	A 28
A.3.10. <i>time_to_rupture_diagram.m</i>	A 29
A.4. Matlab - Simulationsergebnisse	A 31
A.4.1. Berechnung mittels Ostwald Gleichung, unter der Berücksichtigung von Damage mit v_g	A 32
A.4.2. Berechnung mittels MatCalc - Daten, unter der Berücksichtigung von Damage mit v_g	A 35
A.4.3. Berechnung mittels MatCalc - Daten, unter der Berücksichtigung von Damage mit v_{eff}	A 38
A.4.4. Berechnung mittels Ostwald Gleichung, und originaler Orowan - Gleichung mit v_g	A 41

Abbildungen

1.	Kriechkurve mit Dreiteilung der Kriechbereiche [8]	2
2.	Vergleich der Kriechkurven unter konstanter Last und konstanter Spannung [8] .	3
3.	Kriechrate mit Einteilung in Kriechstadien [7]	4
4.	Beispielhafte Darstellung einer Wärmebehandlung für martensitische Stähle, nach [20] [21]	5
5.	Beispielhafte Darstellung der Mikrostruktur, nach [1] [24]	6
6.	Klettern einer Stufenversetzung [34]	8
7.	Aufstau von Versetzungen [7]	9
8.	Bewegung der Leerstellen beim Diffusionskriechen [35]	10
9.	Korngrenzgleiten [7]	11
10.	Idealisierte Verformungsmechanismuskarte, nach [36] [9] [7]	12
11.	Verformungsmechanismuskarten, nach [7] [37]	13
12.	Formelzusammenhang - Modell Ghoniem	17
13.	Unterschied zwischen dem Modell nach Ghoniem [4] und Yadav [3], nach [2] . .	19
14.	Formelzusammenhang - Modell Yadav	20
15.	Nulldimensionale Gitterbaufehler [32]	22
16.	Stufenversetzung mit Burgersvektor [32]	23
17.	Schraubenversetzung mit Burgersvektor [32]	23
18.	Stapelfehler [32]	24
19.	Großwinkelkorngrenze [32]	24
20.	Kleinwinkelkorngrenze [32]	25
21.	Parameter zur Berechnung der Diffusionskoeffizienten für Selbstdiffusion und Liniendiffusion [76]	34
22.	Diffusionskoeffizienten für Selbstdiffusion und Liniendiffusion [76]	35
23.	Diffusionskoeffizienten für Selbstdiffusion [77]	36
24.	Temperaturzyklus - Normalisieren	38
25.	Temperaturzyklus - Anlassen	38
26.	Temperaturzyklus - Service	39
27.	Matcalc Export über Microsoft Excel	39
28.	MatCalc - Button für Export	40
29.	MatCalc - Exportdialog	40
30.	Exportierte Matcalc Daten am Beispiel eines Auszuges der Durchmesserwerte in [nm] einiger Ausscheidungen, welche auf die Zeit "auto" in [h] aufgetragen wurden	41
31.	Matlab Abfragefenster Berechnungsmöglichkeiten	43
32.	Matlab Abfragefenster Parameter	45

33.	Matlab Abfragefenster MatCalc Daten Import	46
34.	Matlab Abfragefenster Ausscheidungen	47
35.	Matlab Abfragefenster bzgl. Speicherung der Zeitstanddiagrammdateien	48
36.	Matlab Abfragefenster bzgl. Visualisierung eines Zeitstanddiagrammes	48
37.	Variable Schrittweite, nach [80]	49
38.	Zeitstanddiagramm nach ASME, ECCC und NIMS [81] [82] [83]	56
39.	Resultate der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Normalisieren	58
40.	Resultate der MatCalc Berechnung für die Stückzahlen pro Volumen der Ausscheidungen während dem Normalisieren	58
41.	Resultate der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Anlassen	59
42.	Resultate der MatCalc Berechnung für die Stückzahlen pro Volumen der Ausscheidungen während dem Anlassen	59
43.	Resultate der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Betrieb	60
44.	Resultate der MatCalc Berechnung für Stückzahlen pro Volumen der Ausscheidungen während dem Betrieb	60
45.	Auszug der ersten Stunden von den Resultaten der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Betrieb	61
46.	Auszug der ersten Stunden von den Resultaten der MatCalc Berechnung für die Stückzahlen pro Volumen der Ausscheidungen während dem Betrieb	61
47.	Tabellarischer Auszug der ersten Stunden von den Resultaten der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Betrieb	62
48.	Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650° in der Ausgangskonfiguration des Matlab - Codes, nach [2]	63
49.	Mittlerer Subkornradius R_{sbg} in der Ausgangskonfiguration des Matlab - Codes, nach [2]	64
50.	Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650° , nach Richtigstellung der Gleichungen 2.7, 2.21, 2.11 und 2.13	65
51.	Mittlerer Subkornradius R_{sbg} nach Einstellung der Diffusionskoeffizienten	66
52.	Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650° mit den zugehörigen Fit - Parametern, welche in Tabelle 4 aufgelistet sind.	68
53.	Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650° mit den zugehörigen Fit - Parametern, welche in Tabelle 4 aufgelistet sind.	69
54.	Dehnungen ε unter Beaufschlagung von 120, 90, 80, 75, 70, 65, 60, 55 und 50 MPa bei jeweils $650^\circ C$	70
55.	Geschwindigkeiten von Versetzungen	71
56.	Verläufe von ρ_m , ρ_{dip} , ρ_b und R_{sbg}	73
57.	Simulationsergebnisse der Spannungen σ_{app} , σ_i und σ_{eff}	74
58.	Simulationsergebnisse der verschiedenen Berechnungsmöglichkeiten	75
59.	Zeitstanddiagramm nach ECCC [81]	77
60.	Simulationsergebnisse Zeitstanddiagramm	78
61.	Formelzusammenhang - Ausblick, Anmerkung siehe Kapitel 5.3	82

62.	Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650°	A 32
63.	Simulationsergebnisse	A 33
64.	Simulationsergebnisse	A 34
65.	Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650°	A 35
66.	Simulationsergebnisse	A 36
67.	Simulationsergebnisse	A 37
68.	Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650°	A 38
69.	Simulationsergebnisse	A 39
70.	Simulationsergebnisse	A 40
71.	Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650°	A 41
72.	Simulationsergebnisse	A 42
73.	Simulationsergebnisse	A 43

Tabellen

1.	Verwendete Variablen und Parameter	xiii
2.	Referenzierung der verwendeten Symbole	50
3.	Zusammenführung Symbole vorliegende Arbeit - Matlab	51
4.	Gegenüberstellung einiger Fit - Parameter	69
5.	Startwerte - ρ_m , ρ_{dip} , ρ_b und R_{sbg}	72
6.	Verwendete Fit - Parameter bei allen Berechnungsmöglichkeiten	76
7.	Materialparameter	A 1
8.	Fit - Parameter	A 32
9.	Fit - Parameter	A 35
10.	Fit - Parameter	A 38
11.	Fit - Parameter	A 41

Abkürzungen

ASME	American Society of Mechanical Engineers
CDM	Continuum Damage Mechanics
ECCC	European Continuous Casting Conference
GUI	Graphical User Interface
MHI	Mitsubishi Heavy Industries
NIMS	National Institute for Materials Science

Verwendete Variablen und Parameter

Tabelle 1.: Verwendete Variablen und Parameter

Symbol	Einheit	Beschreibung
a_1	[]	Glide velocity parameter Parameter für Geschwindigkeit von Versetzungsgleiten
a_g	[m]	Size of the unit cell Größe der Elementarzelle
A	[]	Constant that depends on the material Materialkonstante
α	[]	Dislocation interaction constant Konstante zur Wechselwirkung der Versetzung
b	[m]	Burgers vector Burgersvektor
β	[]	parameter for controlling the density of sources Parameter zur Bestimmung der Quellstärke
c_{dip}	[]	Weight factor Gewichtungsfaktor
d_{anh}	[m]	Length parameter Längenparameter
D_{cav}	[]	Softening parameter based on cavitation damage Ausmaß Schädigung durch Poren
D_{ppt}	[]	Softening parameter related to coarsening of precipitates Ausmaß Schädigung durch Ausscheidungsvergrößerung
D_s	$[\frac{m^2}{s}]$	Selfdiffusioncoefficient Selbstdiffusionskoeffizient
D_{vp}	$[\frac{m^2}{s}]$	Pipediffusioncoefficient Diffusionskoeffizient an den Versetzungslinien
ϵ	[%]	Creep strain Kriechdehnung
$\dot{\epsilon}$	[%/t]	Creep strain rate Kriechdehnungsrate
η_v	[]	Transfer coefficient of vacancies Transferkoeffizient von Leerstellen
G	[Pa]	Shear modulus Schubmodul
γ_{sb}	[J]	Surface energy of the subgrain boundary Grenzflächenenergie von Subkorn Grenzen

h_b	$[m]$	Dislocation spacing within the subgrain walls Versetzungsabstand in der Subkorngrenze
h_m	$[m]$	Dislocation spacing of mobile dislocations Versetzungsabstand der mobilen Versetzungen
k	$[J/K]$	Boltzmann constant Boltzmann Konstante
k_d	$[\frac{m^3}{s}]$	Coarseningparameter Vergrößerungsrate
k_p	$[\frac{1}{s}]$	Coarseningparameter Vergrößerungsrate
l	$[]$	Constant that depends on the type of precipitate Vergrößerungsparameter
L_α	$[m]$	Length of interaction between dislocation and defects Abstand zwischen wechselwirkenden Versetzungen und Gitterfehlern
L_p	$[m]$	Path length for diffusion along the core Pfadlänge der Diffusion entlang dem Versetzungskern
M	$[]$	Taylor's factor Taylor Faktor
M_{sb}	$[m \cdot Pa^{-1} \cdot s^{-1}]$	Mobility of subgrain boundaries Mobilität der Subkorngrenzen
N_v	$[m^{-3}]$	Number density Stückzahl pro Volumen
$N_{v,initial}$	$[m^{-3}]$	Start value of the number density Anfängliche Stückzahl pro Volumen
ν	$[]$	Poissons ratio Poissonzahl
P_{sb}	$[Pa]$	Pressure of subgrain boundaries Druck an Subkorngrenze
Q	$[J]$	Activation energy Aktivierungsenergie
$r_{initial}$	$[m]$	Start value of the precipitate before coarsening Anfänglicher mittlerer Radius der Ausscheidung
r_{mean}	$[m]$	Mean radius of precipitates Mittlerer Radius der Ausscheidung
R_{sbg}	$[m]$	Mean subgrain radius Mittlerer Subkornradius
ρ_b	$[m^{-2}]$	Boundary dislocation density Versetzungsdichte - Subkörner
ρ_{dip}	$[m^{-2}]$	Dipole dislocation density Versetzungsdichte - Dipole
ρ_m	$[m^{-2}]$	Mobile dislocation density Versetzungsdichte - mobile Versetzungen
ρ_t	$[m^{-2}]$	Total dislocation density Versetzungsdichte - gesamt

σ_{app}	[Pa]	Applied stress Beaufschlagte Spannung
σ_{eff}	[Pa]	Effective stress Effektive Spannung
σ_i	[Pa]	Internal stress Interne Spannung
t	[s]	Time Zeit
T	[K]	Temperature Temperatur
T_s	[K]	Melting temperature Schmelztemperatur
v_c	[m/s]	Climb velocity of dislocations Klettergeschwindigkeit von Versetzungen
$v_{c_{konstant}}$	[m/s]	Constant climb velocity of dislocations Konstante Klettergeschwindigkeit von Versetzungen
v_{eff}	[m/s]	Effective velocity of mobile dislocations Effektive Geschwindigkeit von mobilen Versetzungen
v_{cl}	[m/s]	Climb velocity for lattice diffusion Klettergeschwindigkeit durch Gitterdiffusion
v_{cp}	[m/s]	Climb velocity for pipe diffusion Klettergeschwindigkeit durch Liniendiffusion
v_g	[m/s]	Glide velocity Gleitgeschwindigkeit von Versetzungen
W	[J]	Activation energy for pipe diffusion Aktivierungsenergie für die Diffusion an Versetzungslinien
Ω	[m ³]	Atomic volume Atomvolumen
ζ	[]	Parameter on the effect of dislocation dipoles on boundary dislocations Konstante für den Effekt von Versetzungsdipolen auf Grenzflächenversetzungen

1. Einleitung

1.1. Ziel dieser Masterarbeit

Das Ziel der vorliegenden Masterarbeit war die Erstellung eines semi-physikalischen Kriechmodells unter der Nutzung der Programme MatCalc und Matlab. Dabei sollte mittels MatCalc eine aussagekräftige Ausscheidungssimulation durchgeführt werden und das eigentliche Kriechmodell mittels Matlab modelliert werden. Die Grundlagen hierbei beruhten auf den Daten eines bilateralen Industrieprojektes mit Mitsubishi Heavy Industries (MHI) 2016. Der Matlab - Code welcher dadurch hervorging musste auf etwaige Fehler untersucht werden und mit den aufgelisteten Forderungen erweitert werden. Die Ergebnisse der Ausscheidungssimulation durch MatCalc sollten dann mit dem in Matlab zu erarbeitenden Kriechmodell gekoppelt werden und dadurch eine exaktere Berechnung ermöglichen. Des Weiteren sollte die vorhandene Berechnungsmethodik kritisch hinterfragt werden und durch verschiedene Optionen erweitert werden. Um den Berechnungsverlauf zu beschleunigen und dabei trotzdem hinreichend genauen Ergebnisse zu liefern musste eine variable Schrittweite implementiert werden. Außerdem sollte nach Ausgabe der Ergebnisse die Möglichkeit einer Einfügung der Berechnungsdaten in ein Zeitstanddiagramm ermöglicht werden. Alle Auswahlmöglichkeiten der Berechnung sollten durch eine grafische Benutzeroberfläche gestützt werden und die Ergebnisse mussten grafisch aufbereitet werden.

1.2. Kriechen

Bei Werkstoffen ist unter Belastung von verschiedenen Temperaturen ein unterschiedliches Verhalten festzustellen. Bei niedrigen Temperaturen entspricht die Verformung in etwa einer Funktion der aufgebrachten Spannung $\varepsilon = f(\sigma)$. Bei höheren Temperaturen (0,3 - 0,4 der Schmelztemperatur $T_s [K]$) entspricht die Verformung jedoch einer Funktion, welche abhängig von der Spannung, Zeit und Temperatur $\varepsilon = f(\sigma, t, T)$ ist. Dieses unterschiedliche Verhalten lässt sich auf thermisch aktivierte Vorgänge zurückführen. [5] [6]

Kriechen lässt sich also als zeitabhängige, plastische Verformung unter Last beschreiben. [7]

In Abbildung 1 ist eine beispielhafte Kriechkurve visualisiert, bei welcher die Dehnung bei konstanter Spannung und Temperatur über die Zeit dargestellt wird. [5]

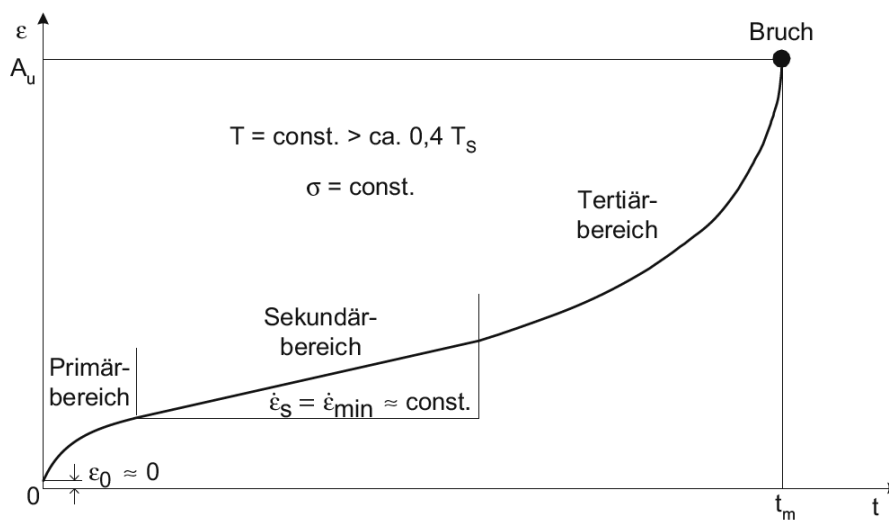


Abbildung 1.: Kriechkurve mit Dreiteilung der Kriechbereiche [8]

Der Unterschied zwischen konstanter Last und konstanter Spannung ist in Abbildung 2 aufgezeigt. Die Abweichung dieser beiden Kurven lässt sich anhand der Deformation und einer daraus resultierenden Querschnittänderung beschreiben. Eines der charakteristischsten Merkmale einer solchen Kriechkurve sind die drei Bereiche, in welche eine solche Kurve eingeteilt werden kann. Diese Bereiche werden in dem nachfolgenden Kapitel 1.2.1 näher erleutert.

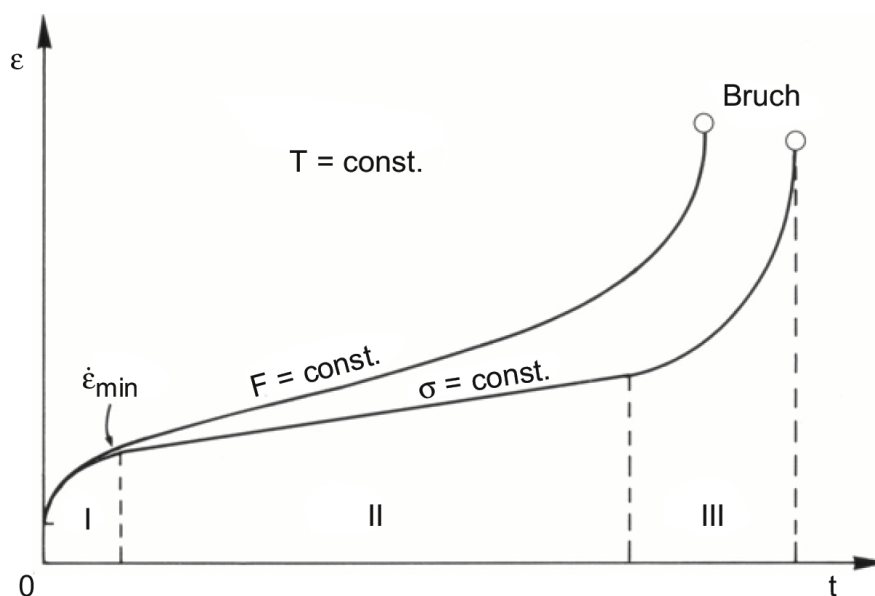


Abbildung 2.: Vergleich der Kriechkurven unter konstanter Last und konstanter Spannung [8]

1.2.1. Kriechstadien

In den Abbildungen 2 und 3 sind die Bereiche I, II und III visualisiert. Diese teilen die Kriechkurve in den Bereich des primären, sekundären und tertiären Kriechen ein.

Bereich I: Primäres Kriechen

In diesem Bereich nimmt die Kriechrate, wie in Abbildung 3 dargestellt stetig ab und es tritt vorwiegend Verfestigung ein. [5] [6] [9]

Bereich II: Sekundäres Kriechen

Im Bereich des sekundären Kriechen stellt sich ein Gleichgewicht zwischen den thermisch aktivierten, entfestigenden Vorgängen und der Verfestigung ein. Dadurch kommt es zu einer konstanten Kriechrate, wie in Abbildung 3 dargestellt. Dieser Bereich kann durch das Potenzgesetz nach Norton beschrieben werden, welches in Kapitel 2.2.1.2 näher erläutert wird. [5] [6]

Bereich III: Tertiäres Kriechen

Der Bereich des tertiären Kriechen charakterisiert sich durch eine starke Zunahme der Kriechrate aufgrund der Verringerung des tragenden Querschnittes. In diesem Abschnitt überwiegen die thermisch aktivierten Verformungsvorgänge, welche eine Entfestigung bewirken. Dadurch entsteht ein stark beschleunigtes Kriechen bis zum Bruch. [5] [6]

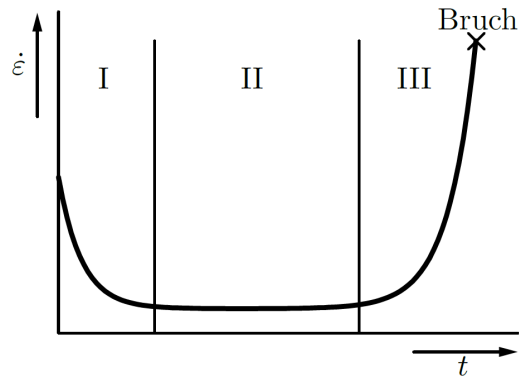


Abbildung 3.: Kriechrate mit Einteilung in Kriechstadien [7]

1.3. Eigenschaften von martensitischen Stählen

Martensitische Stähle mit einem Chrom-Gehalt von 9-12% sind aufgrund ihrer Eigenschaften, auf welche in Kapitel näher 1.3.1 eingegangen wird, sehr gut für Hochtemperaturanwendungen geeignet. Die Einsatzgebiete solcher Stähle sind vor allem bei Rotorblättern in Gas- und Dampfturbinen, aber auch Dampfdruckleitungen, Druckbehälter, Kesselteile und Ähnliches. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird der Stahl X10CrMoVNb9-1, oder auch als P91 bezeichnet, als Repräsentant dieser Gruppe von Stählen herangezogen, da dieser Stahl im Rahmen dieser Masterarbeit betrachtet wurde. [10] [11] [1] [12]

1.3.1. Eigenschaften P91

Zu den Eigenschaften des P91 zählen eine hohe Härte, ein großer Verschleißwiderstand, sowie eine günstige Kombination von Festigkeit und Zähigkeit. [13] [14] Besonders hervorzuheben ist die hohe Kriechfestigkeit unter hohen Temperaturen und die hohe Resistenz gegen Spannungsrisskorrosion sowie gegen Oxidation. [15][16][17][18][19]

1.3.2. Herstellung und Mikrostruktur P91

1.3.2.1. Wärmebehandlung

Das Ziel einer Wärmebehandlung von martensitischen 9-12%Cr Stählen, wie beispielsweise der P91, ist es eine optimale Verteilung von Zähigkeit und Warmfestigkeit zu bekommen. Die Reihen-

folge, der dafür Notwendigen Wärmebehandlung entspricht im Normalfall dem Austenitisieren, gefolgt von einer anschließenden Martensitbildung und einem darauf mehrstufigen Anlassen. Aufgrund der Komplexität der Metallurgie dieser Stahlorte, muss die Wärmebehandlung unter höchster Vorsicht absolviert werden, um während dem Abschnitt der Martensitbildung eine weitgehend vollständige martensitische Mikrostruktur zu erzeugen. [20] Abbildung 4 stellt eine, wie oben genannte Abfolge von Wärmebehandlungen dar.

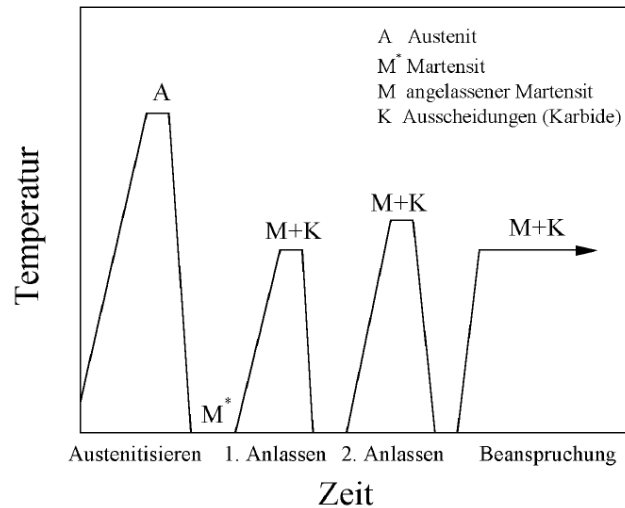


Abbildung 4.: Beispielhafte Darstellung einer Wärmebehandlung für martensitische Stähle, nach [20] [21]

1.3.2.2. Mikrostruktur

Die in Abbildung 4 gezeigte Abkühlung nach der Austenitisierung bewirkt eine Entstehung von Latten- bzw. Plattenmartensit, welche vom Kohlenstoffgehalt abhängt. [20] [22] [23] Abbildung 5 stellt diesen Zusammenhang visuell dar.

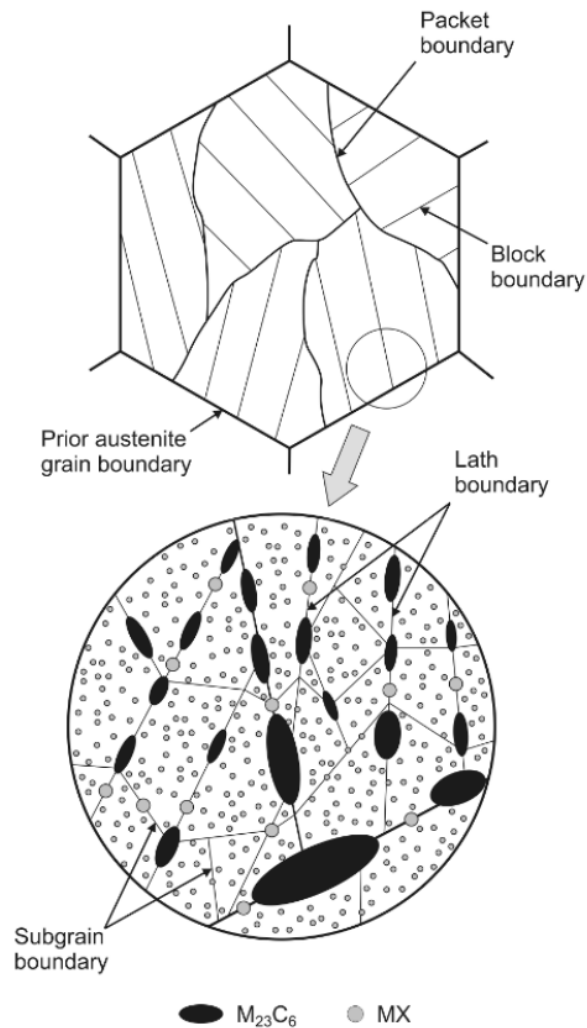


Abbildung 5.: Beispielhafte Darstellung der Mikrostruktur, nach [1] [24]

Um eine genügend hohe Abkühlungsrate zu erreichen, welche für eine Martensitumwandlung unabdingbar ist, reicht bei Bauteilen, welche einen Durchmesser von $< 500\text{mm}$ aufweisen, eine Luftabkühlung. Ist die Abkühlungsrate zu langsam, wird α -Ferrit gebildet. [20] [25] [23] Bevor es zu einer martensitischen Umwandlung kommt, ist es möglich, dass das Karbid $M_{23}C_6$ an den Korngrenzen ausgeschieden wird. [20] [26]

Die Bildung von neuen Korngrenzen innerhalb von Austenitkörnern ist mit der Martensitumwandlung verbunden. Während dem Anlassen erfolgt eine Umwandlung von Martensitlatten in Subkorngrößen. Während den weiteren Anlassenstufen finden weitere Ausscheidungen statt. [20] [26] [27] [28]

1.3.2.3. Ausscheidungsstruktur

Der hohe Kriechwiderstand von 9-12% Cr - Stählen resultiert aus einer teilchenstabilisierten Substruktur. Die wesentlichen Aufgaben von Ausscheidungen sind dabei wie folgt zu interpretieren [20] [29] [30] :

- Subkorn Grenzen werden in ihren Bewegungen eingeschränkt.
- Versetzungen und Subkorn Grenzen werden an einer gemeinsamen Reaktion gehindert.
- Subkorn Grenzen werden aufgrund von Ausscheidungen an einzelnen Stellen fixiert.
- Versetzungen werden in ihren Bewegungen aufgehalten.

Eine nähere Erläuterung der betrachteten Ausscheidungen erfolgt in Kapitel 2.4.3.

1.3.2.4. Kristallstruktur

Im Gegensatz zu idealen Kristallen, weisen reale Kristalle viele Abweichungen bzgl. ihres Raumgitters auf. Diese Abweichungen führen zu einer Störung und Verspannung des Raumgitters, durch welche der Energiegehalt des Kristalls zunimmt. Unter diesem Aspekt sollte die Bezeichnung Baufehler also nicht negativ betrachtet werden, da abgesehen von wenigen Ausnahmen das Erzeugen von bestimmten Fehlern, die Werkstoffeigenschaften verbessert. [6] Zusammenfassend lässt sich sagen, dass es die Kristallbaufehler sind, welche die metallischen Werkstoffe mit ihren Eigenschaften versehen. [31] Diese Baufehler lassen sich aufgrund ihrer geometrischen Dimensionen wie folgt einordnen [32]:

- **Nulldimensional** (Punktfehler): Substitutionsatome, Zwischengitteratome, Leerstellen
- **Eindimensional** (Linienfehler): Versetzungen
- **Zweidimensional** (Flächenfehler): Groß- und Kleinwinkelkorn Grenzen, Phasengrenzen, Grenzen von Ordnungsbereichen, Zwillingsgrenzen, Grenzflächen, Stapelfehler
- **Dreidimensional** (räumliche Fehler): Poren, Hohlräume, Lunker, Einschlüsse, Ausscheidungen

Eine nähere Erläuterung dieser Kristallbaufehler erfolgt in Kapitel 2.3.1

2. Literaturstudie

2.1. Kriechmechanismen

In den folgenden Punkten werden die verschiedenen Kriechmechanismen näher erläutert. Diese Gegenüberstellung wird aufzeigen, dass bei den verschiedenen Prozessen eine Abhängigkeit von Temperatur und Spannung vorliegt. Veranschaulicht werden diese Zusammenhänge in sogenannten Verformungsmechanismen-Diagrammen, welche in Kapitel 2.1.5 näher erläutert werden. [7]

2.1.1. Versetzungskriechen

Die Deformationsmöglichkeit des Versetzungskriechens tritt bei kristallinen Körpern unter hohen homologen Temperaturen auf. Der entsprechende Temperaturbereich wird in Kapitel 2.1.5 aufgezeigt. Aufgrund einer äußeren Spannung führen Versetzungen Bewegungen aus. [33]
Sobald eine Versetzung in ihrer ursprünglichen Gleitbewegung ein Hindernis, wie z.B.: eine Ausscheidung, erreicht kann die Versetzung bei hohen Temperaturen dem Hindernis, beispielsweise durch Klettern, ausweichen. Wie in Abbildung 6 dargestellt, geschieht dies indem die Versetzungslinie durch Diffusion Leerstellen anlagert oder aussendet und sich dadurch aus der ursprünglichen Gleitebene senkrecht herausbewegt. [7]

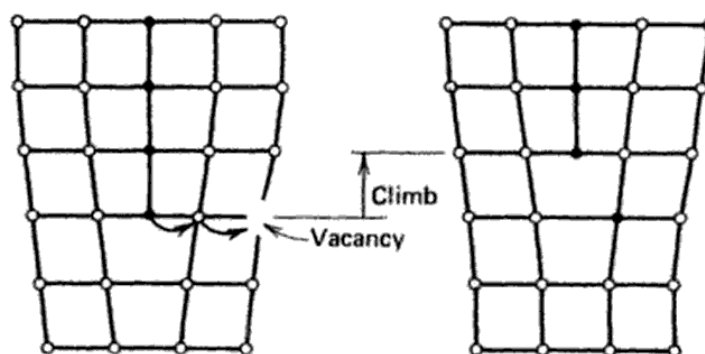


Abbildung 6.: Klettern einer Stufenversetzung [34]

In Abbildung 7 sind beispielsweise zwei Stufenversetzungen dargestellt, welche an einem Hindernis aufgestaut werden und Leerstellen anlagern (Versetzung 1) und aussenden (Versetzung 2) müssen, um klettern zu können. In diesem Fall wird die Verformungsrate durch die Geschwindigkeit bestimmt, mit welcher die Leerstellen bei den Versetzungen angelagert oder ausgesendet werden. Der bestimmende Faktor dieser Geschwindigkeit ist die Leerstellenstromdichte. [7]

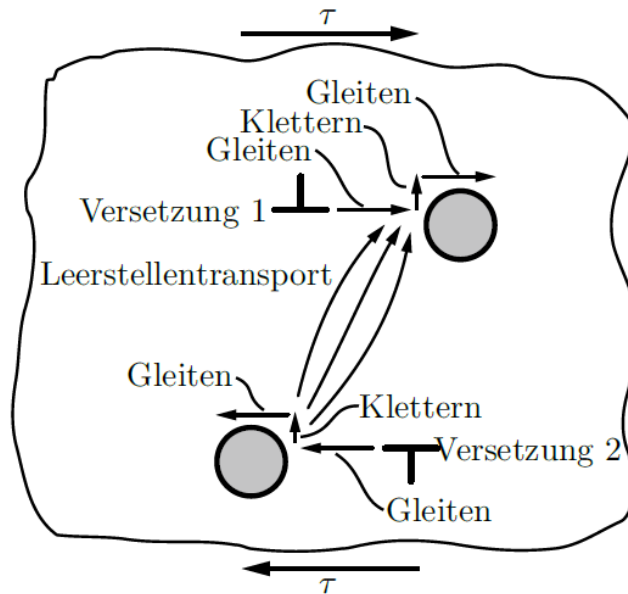


Abbildung 7.: Aufstau von Versetzungen [7]

2.1.2. Diffusionskriechen

Ähnlich wie beim Versetzungskriechen, tritt der Kriechmechanismus des Diffusionskriechens bei hohen homologen Temperaturen auf. Abbildung 10 zeigt diesen Temperaturbereich auf. Die Korngrenzen dienen, anstelle der Versetzungen beim Versetzungskriechen, als Quellen und Senken für die Leerstellen. Wie in Abbildung 8 dargestellt, diffundieren die Leerstellen zu Stellen mit geringerer Zugspannung, bzw. mit höherer Druckspannung. Der Materialfluss orientiert sich anschließend in entgegengesetzter Richtung. Die Verformungsgeschwindigkeit wird wie beim Versetzungskriechen durch den bestimmenden Faktor der Leerstellenstromdichte beschrieben.

[7] [9]

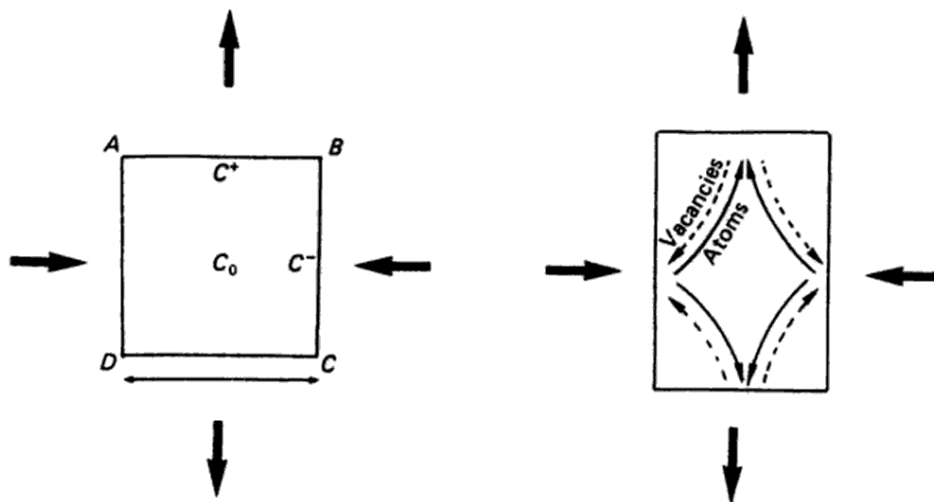


Abbildung 8.: Bewegung der Leerstellen beim Diffusionskriechen [35]

2.1.3. Versetzungsgleiten

Das Versetzungsgleiten, welches die konventionelle plastische Verformung prägt, herrscht, wie in Abbildung 10 dargestellt, im gesamten Temperaturbereich unter der Voraussetzung, dass die Spannung hoch genug ist, um die Fließgrenze zu überschreiten. [5] [9]

2.1.4. Korngrenzengleiten

Hohe Temperaturen ermöglichen es den Körnern in Metallen und Keramiken, dass sie sich gegeneinander bewegen. Dieser Vorgang, welcher in Abbildung 9 dargestellt ist, wird als Korngrenzengleiten bezeichnet. Das Korngrenzengleiten ist in der Verformungsmechanismuskarte, wie in Abbildung 10 dargestellt, nicht abgebildet, da es bei Metallen wenig zur Kriechverformung beiträgt. Trotz des eher geringen Anteils an der Kriechverformung ist das Korngrenzengleiten aufgrund folgender Punkte sehr wichtig. Beim Diffusionskriechen wird durch das Korngrenzengleiten die Kompatibilität zwischen den Körnern sicher gestellt. Des Weiteren kann die Verschiebung von Korngrenzen, an Punkten wo sich drei Korngrenzen treffen, wie in der Mitte von Abbildung 9 dargestellt, zu einer starken Erhöhung der lokalen Spannung führen. Diese Erhöhung kann ein Aufreißen der Korngrenzen bewirken. Aus diesen beiden genannten Gründen ist es sehr wichtig, dass die Korngrenzen resistenter gegenüber dem Korngrenzengleiten werden. Gelingt dies, wird die Verformung durch das Diffusionskriechen gestört und die Gefahr einer verfrühten Materialschädigung wird eingegrenzt. [5] [7] [9]

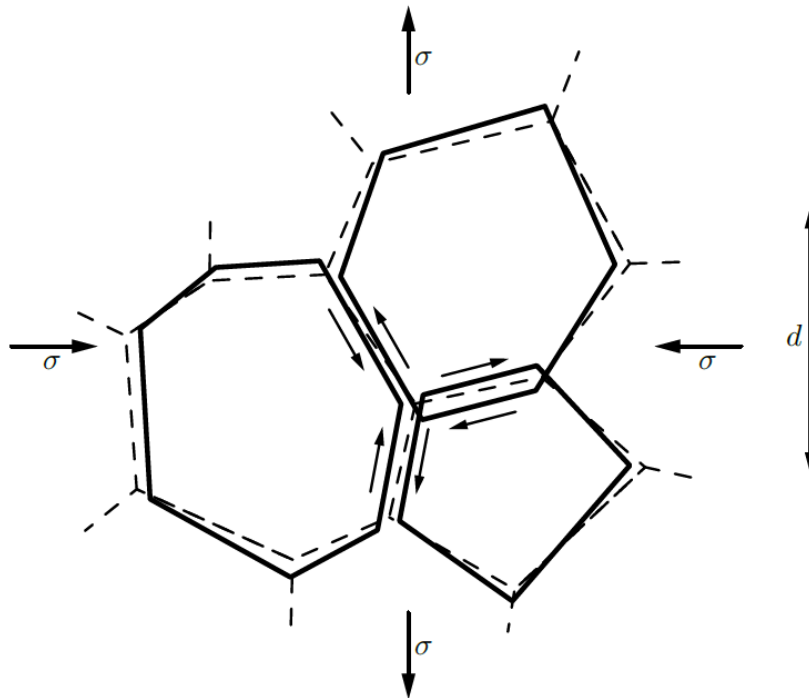


Abbildung 9.: Korngrenzengleiten [7]

2.1.5. Verformungsmechanismuskarte

Die Kriechverformungsmechanismen, welche in dem Kapitel 2.1 bereits erläutert wurden, zeigen eine unterschiedliche Abhängigkeit von Temperatur und Spannung. Aufgrund dieser Abhängigkeiten können die Kriechverformungsmechanismen in einer Verformungsmechanismuskarte, wie in Abbildung 10 dargestellt, eingeteilt werden. In einer Verformungsmechanismuskarte, auch Verformungsmechanismen-Diagramm genannt, sind die Temperatur und die Spannung normiert auf die Schmelztemperatur bzw. auf das Schubmodul aufgetragen. Der Bereich der "elastischen Verformung" ist durch eine niedrige Temperatur und eine niedrige angelegte Spannung bestimmt. Das Diffusionskriechen beginnt bei höheren Temperaturen und ist aufgrund der niedrigen Spannung in diesem Bereich ausgeprägter, als das Versetzungskriechen. Wird die Spannung erhöht, nimmt das Versetzungskriechen an Bedeutung zu. Die plastische Verformung, welche auch wie in Kapitel 2.1.3 erläutert, als Versetzungsgleiten bezeichnet wird, beginnt bei noch höheren Spannungen, welche schließlich bei der theoretischen Festigkeit des Materials endet. Diese Einteilung an verschiedenen Kriechverformungsmechanismen ist prinzipiell für jedes verschiedene Material unterschiedlich. Dadurch ist es möglich, dass anhand von verschiedenen Verformungsmechanismuskarten für verschiedene Werkstoffe festgestellt werden kann, unter welchen Bedingungen, welche Mechanismen vorherrschen. In Abbildung 11 sind die Diagramme für Aluminium, Wolfram und Magnesiumoxid, bei jeweils einer Korngröße von $32\mu\text{m}$ gegenübergestellt. Hierbei sind die materialabhängigen Unterschiede sehr gut veranschaulicht. [7]

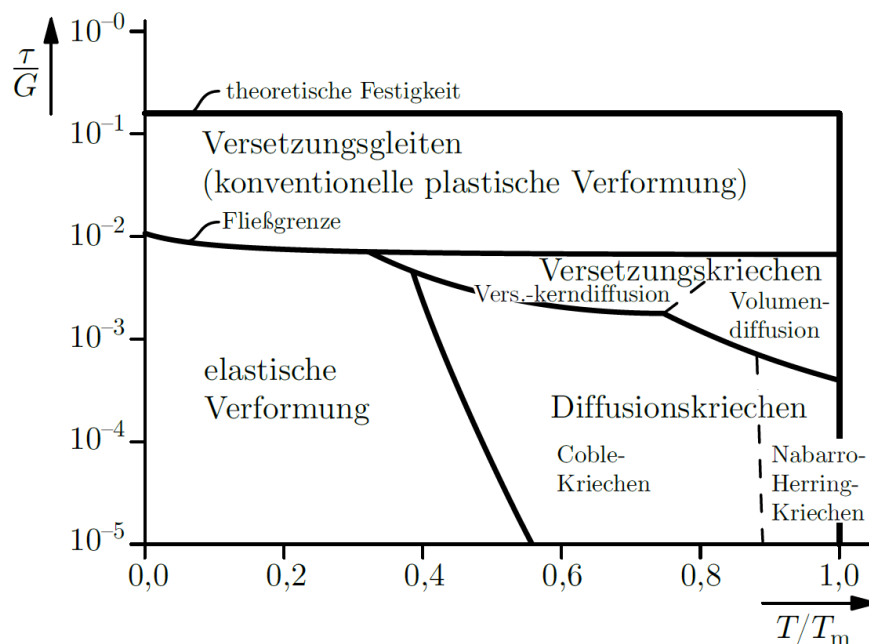


Abbildung 10.: Idealisierte Verformungsmechanismuskarte, nach [36] [9] [7]

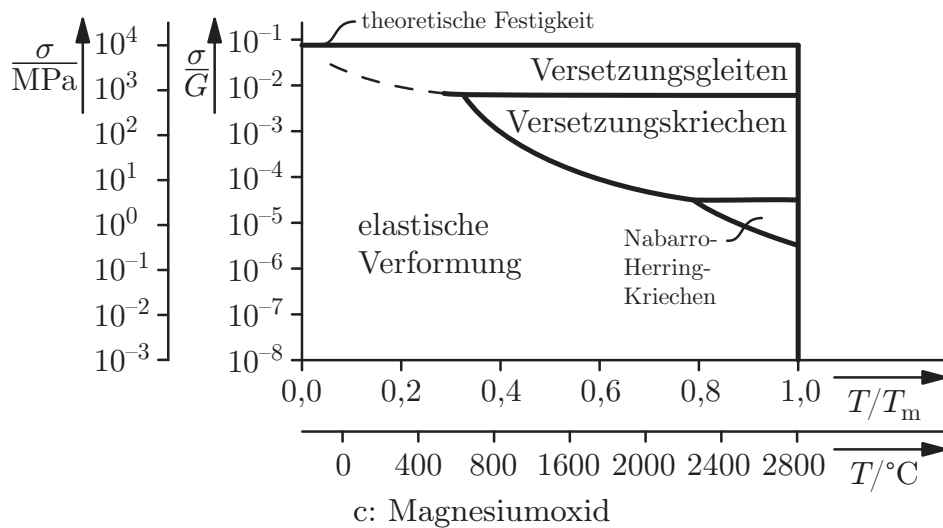
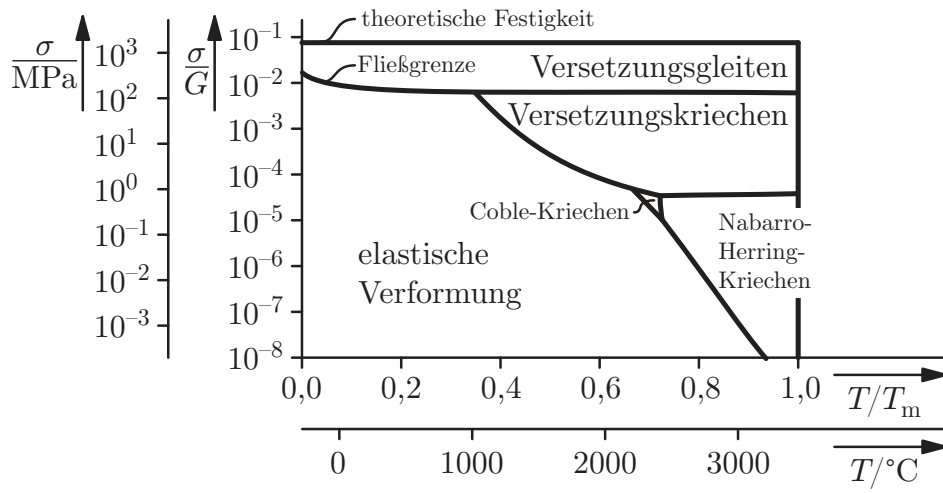
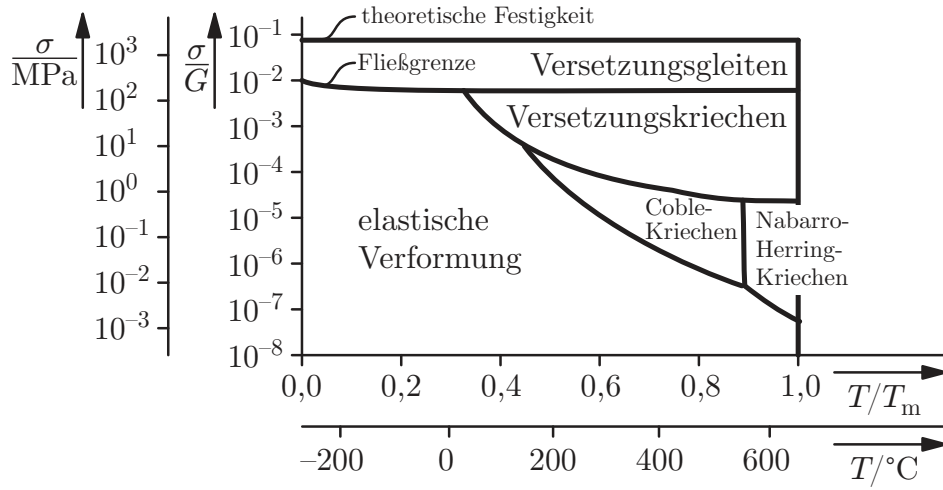


Abbildung 11.: Verformungsmechanismuskarten, nach [7] [37]

2.2. Kriechmodellierung

Die Vorteile von Kriechmodellierungen liegen in der Vorhersagemöglichkeit von verbleibender Lebensdauer oder auch der Bestimmung der Deformation eines Bauteils an einem bestimmten Punkt der Lebensdauer. [2]

Generell können die Kriechmodelle wie folgt eingeteilt werden, wobei manche Kriechmodelle Charakteristiken von beiden Gruppen aufweisen und somit nicht exakt eingeteilt werden können. [2]

- Phänomenologische Kriechmodelle
- Semi-physikalische Kriechmodelle

2.2.1. Phänomenologische Kriechmodelle

Diese Modelle beinhalten keine speziell beschriebenen Kriechmechanismen. Ein phänomenologisches Kriechmodell ist anhand von analytischen Funktionen aufgebaut, welche durch Ergebnisse von Experimenten gestützt werden. Solche Modelle sind sehr stark von Fit-Parametern abhängig, welche durch Experimente angenähert werden. Die Vorhersagegenauigkeit solcher Modelle ist sehr stark von der Konstanz der Fit-Parameter abhängig, welche allgemein von der Temperatur, Spannung und dem Material abhängen. Als Repräsentanten der phänomenologischen Kriechmodelle werden nachfolgend zum einen das logarithmische Kriechen nach Phillips in Kapitel 2.2.1.1 und zum anderen das Potenzgesetz nach Norton in Kapitel 2.2.1.2 erläutert. [2]

2.2.1.1. Logarithmisches Kriechen nach Phillips

Mit Gleichung 2.1 wird das logarithmische Kriechen nach Phillips beschrieben. Hierbei handelt es sich um ein phänomenologisches Kriechmodell, welches explizit nur für die Berechnung der Dehnung während dem primären Kriechbereich geeignet ist. Dabei sind ε die Dehnung, t die Zeit und B , sowie b Konstanten, welche durch Experimente vorab bestimmt werden müssen. [38] [39]

$$\varepsilon = B \cdot \log \cdot (1 + b \cdot t) \quad (2.1)$$

2.2.1.2. Potenzgesetz nach Norton

Das Potenzgesetz nach Norton, welches in Gleichung 2.2 aufgezeigt wird, ist ebenso ein phänomenologisches Kriechmodell, welches im Gegensatz zum logarithmischen Kriechen nach Phillips, nur für den sekundären Kriechbereich gültig ist. Dabei sind ε die Dehnung, T die Temperatur, σ die beaufschlagte Spannung, Q die Aktivierungsenergie, R die Gaskonstante und B , sowie n Konstanten, welche durch Experimente vorab bestimmt werden müssen. [5] [38] [40]

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = B \cdot \sigma^n \cdot e^{-\frac{Q}{RT}} \quad (2.2)$$

2.2.2. Semi-physikalische Kriechmodelle

Semi-physikalische Kriechmodelle beschreiben im Gegensatz zu phänomenologischen Kriechmodellen beispielsweise die Mikrostruktur, die Entwicklung der Mikrostruktur usw. Aufgrund dieser Eigenschaften reicht die Vorhersagbarkeit eines semi-physikalischen Kriechmodelles weiter als die eines phänomenologischen. Die Nachteile von semi-physikalischen Kriechmodellen lassen sich mit der längeren Berechnungsdauer und mit einer unvollständigen Eingliederung der Mikrostruktur, aufgrund der hohen Komplexität, beziffern. [2]

2.2.2.1. Ghoniem [4]

Das Kriechmodell für martensitische Stähle nach Ghoniem [4] beschreibt das Kriechverhalten mithilfe eines physikalischen Ansatzes, welcher interne Variablen, wie z.B.: Versetzungsdichten, Subkorngrößen und Ausscheidungsdaten berücksichtigt. [2]

Das Kriechmodell nach Ghoniem basiert auf folgenden zwei Annahmen [2] [4]:

- Das Versetzungskriechen ist der dominante Kriechmechanismus, welcher das Kriechen aufgrund von mobilen Versetzungen bewirkt.
- Die Kriechrate ist proportional zur mobilen Versetzungsdichte multipliziert mit der Gleitgeschwindigkeit der Versetzungen, was auf die klassische Orowan Gleichung referenziert, wie in Kapitel 2.4 genauer erläutert.

Die Mikrostrukturparameter, welche durch den Ansatz von Ghoniem beachtet werden sind wie folgt gegliedert [2] [4]:

- Versetzungsdichte - mobile Versetzungen
- Versetzungsdichte - dipole Versetzungen
- Versetzungsdichte - Subkörner
- Subkörner
- Ausscheidungen

Aufgrund dieser umfangreichen Ausführung dieses Modelles ist das Kriechmodell nach Ghoniem die Basis für sehr viele "state-of-the-art" semi-physikalische Kriechmodelle [2]. Abbildung 12 soll den Formelzusammenhang nach Ghoniem [4] visualisieren.

Die folgenden Gleichungen, welche auch in der vorliegenden Arbeit verwendet wurden, stammen aus dem Kriechmodell nach Ghoniem [4]:

- Gleichung 2.9
- Gleichung 2.11
- Gleichung 2.12
- Gleichung 2.13
- Gleichung 2.14
- Gleichung 2.15
- Gleichung 2.16
- Gleichung 2.17
- Gleichung 2.18
- Gleichung 2.21
- Gleichung 2.22

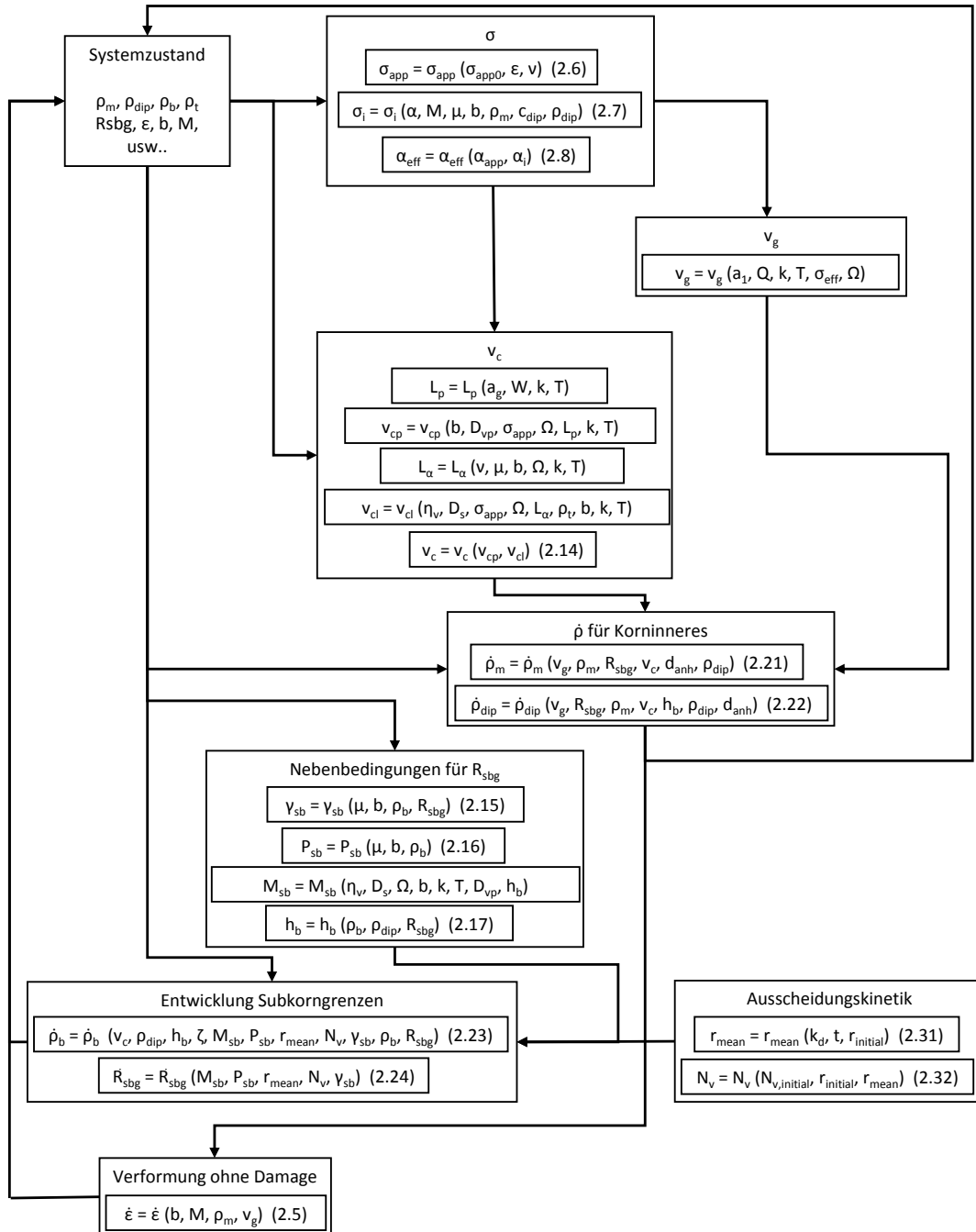


Abbildung 12.: Formelzusammenhang - Modell Ghoniem

2.2.2.2. Basirat [41]

Das Kriechmodell nach Basirat [41] kombiniert ein physikalisch basiertes Modell mit einem Continuum Damage Mechanics (CDM) - Ansatz, welcher die Schädigung des Materials durch Damage - Parameter berücksichtigt. In dem Zusammenhang, welcher in Gleichung 2.3 aufgezeigt ist, beschreibt $\dot{\epsilon}$ die Kriechdehnungsrate, ρ_m die Versetzungsdichte der mobilen Versetzungen, ρ_{dip} die Versetzungsdichte der dipolen Versetzungen, σ die beaufschlagte Spannung, T die Temperatur, D_s das Ausmaß der Schädigung aufgrund von Feststofflösungen, D_P das Ausmaß der Schädigung aufgrund von Ausscheidungsvergrößerungen und D_N das Ausmaß der Schädigung aufgrund von Poren. [2] [42] [41]

Der Ansatz, Schädigungsparameter in die Beschreibung zu implementieren wurde von Yadav [3] übernommen und wird dort besprochen.

$$\dot{\epsilon} = f(\rho_m, \rho_{dip}, \sigma, T, D_s, D_P, D_N) \quad (2.3)$$

2.2.2.3. Yadav [3]

Das Kriechmodell nach Yadav [3] kombiniert das Kriechmodell nach Ghoniem [4], welches in Kapitel 2.2.2.1 beschrieben wurde, mit dem Continuum Damage Mechanics (CDM) Ansatz von dem Kriechmodell nach Basirat [41], welches in Kapitel 2.2.2.2 beschrieben wurde. Im weiteren Sinne beinhaltet das Modell nach Yadav [3] folgende Vereinfachungen und Erweiterungen [2]:

- Die Entstehung der Laves Phase wird nicht als Schädigung berücksichtigt.
- Die Absonderung von Versetzungen von Subkorn Grenzen hat laut Yadav [3] einen sehr geringen Einfluss auf die Entwicklung von Versetzungsdichten und wurde deshalb vernachlässigt.
- Die Nukleation von neuen Subkörnern hat laut Yadav [3] einen vernachlässigbar geringen Einfluss auf die Entwicklung der Subkorngröße und wurde deshalb vernachlässigt.
- In dem Modell nach Ghoniem [4] wurde angenommen, dass alle Ausscheidungen den selben Radius aufweisen. Das Modell nach Yadav [3] hat diesen Ausdruck erweitert, um verschiedene Ausscheidungsgrößen zu berücksichtigen.

In Abbildung 13 wird der Unterschied der Modelle Ghoniem [4] und Yadav [3] aufgezeigt. Sehr gut zu sehen ist hierbei, dass der primäre und sekundäre Bereich durch das Modell nach Ghoniem [4] sehr gut abgebildet ist, und die Kombination mit dem Modell nach Basirat [41] die Darstellung des tertiären Bereiches ermöglicht. [2]

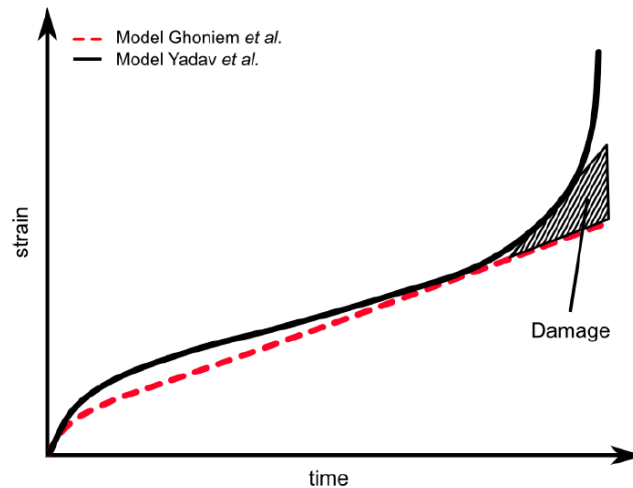


Abbildung 13.: Unterschied zwischen dem Modell nach Ghoniem [4] und Yadav [3], nach [2]

In dem Zusammenhang von dem Modell nach Yadav [3], welches in Gleichung 2.4 schematisch aufgezeigt ist, beschreibt $\dot{\epsilon}$ die Kriechdehnungsrate, ρ_m die Versetzungsdichte der mobilen Versetzungen, ρ_{dip} die Versetzungsdichte der dipolen Versetzungen, ρ_b die Versetzungsdichte der Subkörner, σ die beaufschlagte Spannung, T die Temperatur, D_{ppt} das Ausmaß der Schädigung aufgrund von Ausscheidungsvergrößerung, D_{cav} Ausmaß der Schädigung aufgrund von Poren. [3]

$$\dot{\epsilon} = f(\rho_m, \rho_{dip}, \rho_b, \sigma, T, D_{ppt}, D_{cav}) \quad (2.4)$$

Dieser Formelzusammenhang, welcher in Gleichung 2.4 aufgezeigt ist, ist in Abbildung 14 in seine Einzelheiten aufgeschlüsselt, dargestellt und wird in Kapitel 2.4.1 explizit erläutert.

Die folgenden Gleichungen, welche in der vorliegenden Arbeit verwendet wurden, stammen aus dem Kriechmodell nach Yadav [3]:

- Gleichung 2.8
- Gleichung 2.7
- Gleichung 2.23
- Gleichung 2.24
- Gleichung 2.25
- Gleichung 2.29
- Gleichung 2.28
- Gleichung 2.27
- Gleichung 2.26

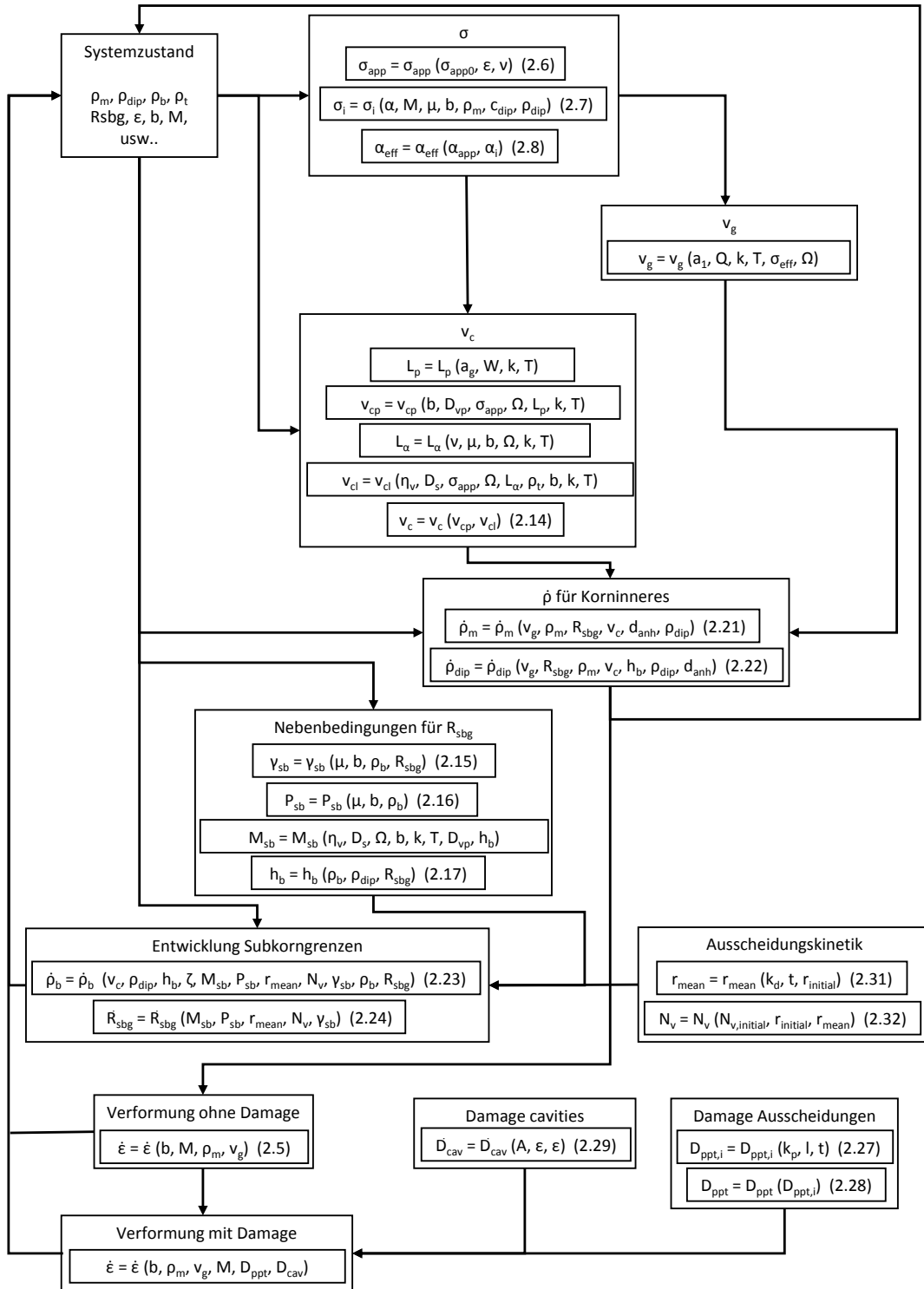


Abbildung 14.: Formelzusammenhang - Modell Yadav

2.2.2.4. Kriechmodell - Vorliegende Arbeit

Das Kriechmodell der vorliegenden Arbeit orientiert sich sehr stark an dem Kriechmodell nach Yadav [3]. Der primäre Unterschied liegt in Gleichung 2.21. Das Modell nach Yadav [3] vernachlässigt den Term "Dislocation subgrain emission", welcher durch $v_g \cdot \frac{\beta \cdot R_{subg}}{l_b^2}$ ausgedrückt wird. Eine genaue und kritische Betrachtung dieser Gleichung hat diesen Term als nicht vernachlässigbar gezeigt. Ein weiterer Unterschied liegt in den Gleichungen 2.21, 2.22 und 2.23. Die jeweils verwendete Variable "Klettergeschwindigkeit von Versetzungen" v_c referenziert auf Gleichung 2.14. In den Gleichungen 2.21, 2.22 und 2.23 wird v_c von Gleichung 2.14 entkoppelt und als konstanter Fit-Parameter $v_{c_{konstant}}$ angesehen. Eine genaue Erklärung der verwendeten Formeln erfolgt in Kapitel 2.4.1.

2.3. Entwicklung der Mikrostruktur

2.3.1. Gitterbaufehler

Die generellen Eigenschaften, sowie Einteilungsmöglichkeiten von Gitterbaufehlern wurden bereits ausführlich in Kapitel 1.3.2.4 erläutert. Die nachfolgenden Unterkapitel sollen die einzelnen geometrischen Dimensionen von Gitterbaufehlern näher bringen.

2.3.1.1. Nulldimensionale Gitterbaufehler

Punkfehler, oder auch Nulldimensionale Gitterbaufehler genannt, sind Störungen welche eine atomare Größenordnung aufweisen. Unterschieden wird dabei, wie in Abbildung 15 dargestellt, zwischen folgenden Arten [32]:

- **Leerstelle:** Die regulären Gitterplätze sind hierbei unbesetzt.
- **Substitutionsatome:** Ein Fremdatom befindet sich auf einem Wirtsatomplatz.
- **Zwischengitteratome:** Atome, welche interstitiell eingelagert sind (Zwischengitteratome).

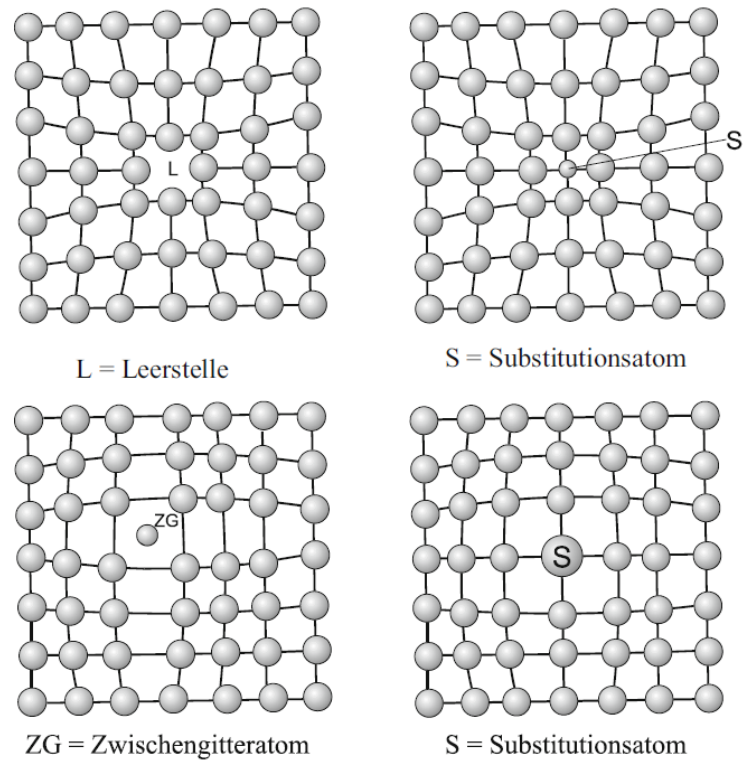


Abbildung 15.: Nulldimensionale Gitterbaufehler [32]

2.3.1.2. Eindimensionale Fehler - Versetzungen

Versetzungen werden als Fehler angesehen, welche sich linienförmig durch den Kristall ziehen. Innerhalb dieser Linie sind die Atome zueinander verschoben, wodurch sich die Anordnung zu einem perfekten Kristall sehr unterscheidet. [43]

Versetzungen können hinsichtlich ihres Aufbaus in zwei verschiedene Arten unterteilt werden [32]:

- **Stufenversetzungen**
- **Schraubenversetzungen**

Als Stufenversetzung, wie in Abbildung 16 abgebildet, kann eine halbe, in das Gitter eingeschobene Ebene betrachtet werden. Die Versetzungslinie dieser Ebene resultiert aus der Berandung dieser Halbebene. [32]

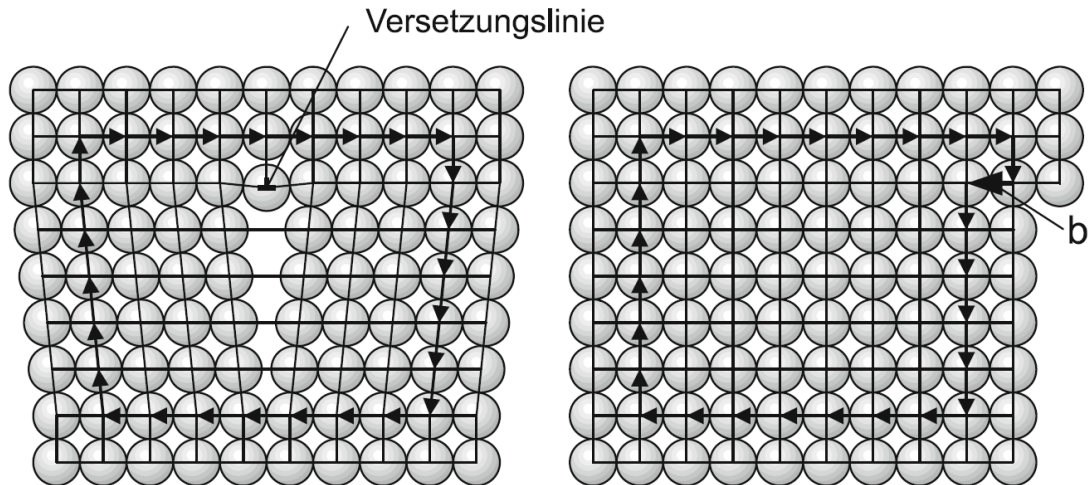


Abbildung 16.: Stufenversetzung mit Burgersvektor [32]

Im Gegensatz zu einer Stufenversetzung, sind bei Schraubenversetzungen die Gitterebenen des Kristalls wendelförmig zu den Versetzungslinien, welche senkrecht zu den Gitterebenen stehen, verzerrt. Abbildung 17 soll dies genauer veranschaulichen. [43]

Bei beiden Versetzungen dient der Burgersvektor b als Maß für die Größe der Verzerrung. Der Burgersvektor ergibt sich aus der Wegdifferenz, welche zur Schließung bei einem Umlauf um eine Versetzung erforderlich ist. [32] [44]

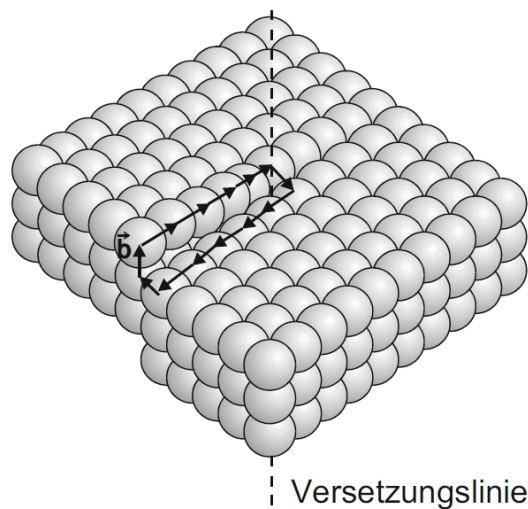


Abbildung 17.: Schraubenversetzung mit Burgersvektor [32]

2.3.1.3. Zweidimensionale Fehler

Zweidimensionale Fehler können, wie bereits in Kapitel 1.3.2.4 angeführt, in Stapelfehler, in Groß- und Kleinwinkelkorngrenzen, in Zwillingsgrenzen, in Phasengrenzen, in Grenzen von Ordnungsbereichen und in Grenzflächen eingeteilt werden. [32]

Als Stapelfehler, werden Störungen in der Stapelfolge bei Kristallgittern bezeichnet. Abbildung 18 zeigt einen Stapelfehler AB**BB**AB. [32]

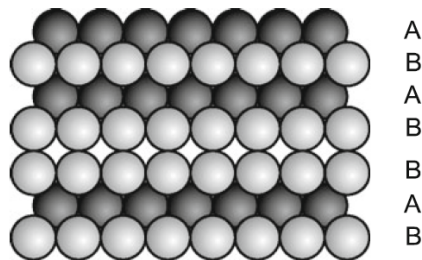


Abbildung 18.: Stapelfehler [32]

Ein weiterer zweidimensionaler Fehler ist im Allgemeinen eine Groß- bzw. Kleinwinkelkorngrenzen. Zwischen Bündeln von Martensitlatten liegen Großwinkelkorngrenzen. Kleinwinkelkorngrenzen (Subkorngrenzen) wiederum liegen zwischen den Martensitlatten eines Bündels. Abbildungen 20 und 19 sollen dies genauer veranschaulichen. [20] [26] [27] [28]

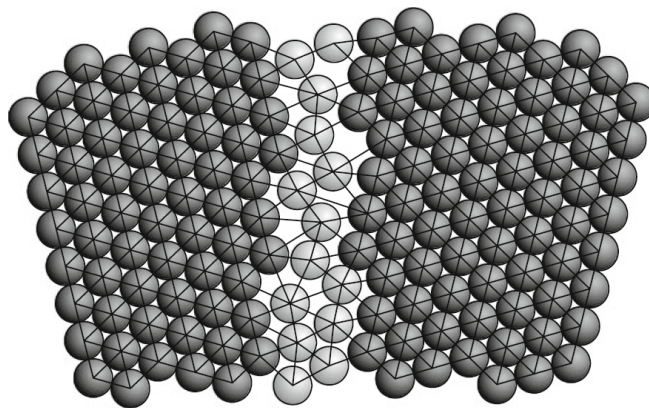


Abbildung 19.: Großwinkelkorngrenze [32]

Eine Zwillingsgrenze wird als Großwinkelkorngrenze aufgefasst, welche eine regelmäßige Struktur aufweist. Als letzter Repräsentant der zweidimensionalen Gitterfehler bleiben die Grenzen von Ordnungsbereichen. [32]

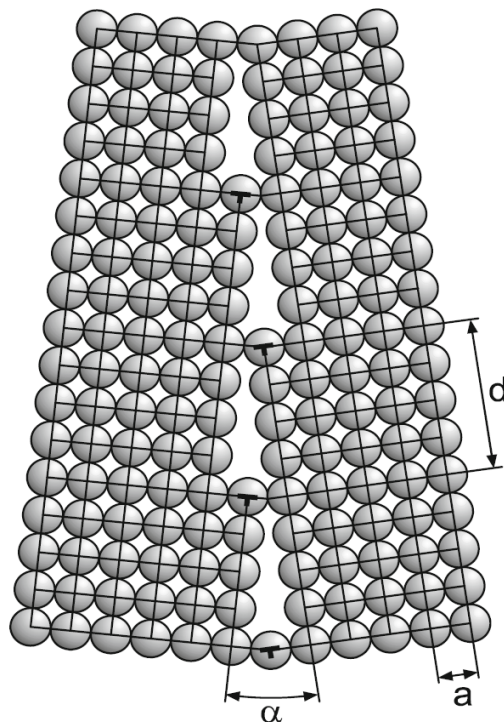


Abbildung 20.: Kleinwinkelkorngrenze [32]

2.3.1.4. Dreidimensionale Fehler

Die Art der dreidimensionalen Fehler beinhaltet Lunker, Einschlüsse, Risse, Poren und Ausscheidungen. Diese Fehlerart ist, im Gegensatz zu den null-, ein-, und zweidimensionalen Fehlern, in ihrer Größe mit Abstand am größten. [32]

2.4. Kriechmodelle - Mikrostrukturentwicklung

Ziel eines Kriechmodelles ist es, die Verformungsrate bzw. Verformung im Laufe der Zeit zu beschreiben. Idealer Ausgangspunkt hierfür bietet die Orowan Gleichung, welche bereits 1940 aufgestellt wurde und mit Gleichung 2.5 veranschaulicht ist. [45] [46] [47] [48] [49]

In der Orowan Gleichung wird das Mikrostrukturelement "Versetzungsdichte der mobilen Versetzungen" ρ_m sowie deren Gleitgeschwindigkeit v_g mit der makroskopisch beobachtbaren Verformungsrate $\dot{\epsilon}$ verknüpft. Des weiteren beschreibt b den Burgersvektor, welcher bereits in Kapitel 2.3.1.2 näher erläutert wurde und M den Taylor Faktor. [3] [4] [50] [51] [52] [41] [53] [54]

$$\frac{d\epsilon}{dt} = \frac{b}{M} \cdot \rho_m \cdot v_g \quad (2.5)$$

Um die Verformungsrate berechnen zu können, braucht man demzufolge die zeitliche Entwicklung der involvierten Größen. Wie dies erreicht werden kann, wird im nächsten Abschnitt demonstriert.

2.4.1. Verwendete Formeln

Im weiteren Text werden die Gleichungen zur Mikrostrukturentwicklung besprochen, die im experimentellen Teil dieser Arbeit verwendet werden. Die Gleichungen stammen durchgehend aus den Quellen Ghoniem [4], Basirat [41] und Yadav [3].

Durch die Belastung, aufgrund der ursprünglich beaufschlagten Spannung σ_{app0} erfolgt mit der Zeit eine Änderung des Querschnittes, der zylinderförmigen Probe. Aufgrund dieser Änderung verändert sich auch die beaufschlagte Spannung σ_{app} . Dieser Zusammenhang ist in Gleichung 2.6 dargestellt, wobei ν die Poisson-Zahl ist und für die meisten Metalle einem Wert von $\nu \approx 0,3$ entspricht. [43]

$$\sigma_{app} = \sigma_{app0} \cdot (1 + \epsilon \cdot \nu) \quad (2.6)$$

Die interne Spannung σ_i ist die Spannung, die die Mikrostruktur einer von außen angelegten Spannung σ_{app} entgegenhält und wie durch Gleichung 2.7 veranschaulicht berechnet wird. Die Gleichung setzt sich unter anderem aus der Konstante zur Wechselwirkung der Versetzung α , dem Schubmodul G , der Versetzungsdichte der mobilen Versetzungen ρ_m , einem Gewichtungsfaktor c_{dip} und der Versetzungsdichte von Dipolen ρ_{dip} zusammen. [3] [41]

$$\sigma_i = \alpha \cdot M \cdot G \cdot b \cdot \sqrt{\rho_m + c_{dip} \cdot \rho_{dip}} \quad (2.7)$$

In Gleichung 2.8 beschreibt σ_{eff} die effektive Spannung, welche aus der Differenz von der beaufschlagten Spannung σ_{app} und der internen Spannung σ_i resultiert. Die effektive Spannung ist ausschlaggebend für die Bewegung von mobilen Versetzungen. [3] [55] [56]

$$\sigma_{eff} = \sigma_{app} - \sigma_i \quad (2.8)$$

In Gleichung 2.9 beschreibt v_g die Gleitgeschwindigkeit der mobilen Versetzungen. Dabei ist Q die Aktivierungsenergie, k die Boltzmann Konstante, T die Temperatur und Ω das Atomvolumen. Hervorzuheben ist der Parameter a_1 , welcher nur als reiner Fit-Parameter dient. [3] [4]

$$v_g = a_1 \cdot e^{-\frac{Q}{kT}} \cdot \sigma_{eff} \cdot \frac{\Omega}{k \cdot T} \quad (2.9)$$

Die Pfadlänge der Diffusion entlang dem Versetzungskern L_p berechnet sich, wie in Gleichung 2.10 dargestellt, unter anderem mit der Größe der Elementarzelle a_g und der Aktivierungsenergie für die Diffusion an den Versetzungslinien W . [57]

$$L_p = a_g \cdot \sqrt{2} \cdot e^{\frac{W}{2kT}} \quad (2.10)$$

In Gleichung 2.11 wird mit v_{cp} die Geschwindigkeit der Versetzungsbewegung bei Liniendiffusion berechnet. Dabei ist D_{vp} der Diffusionskoeffizient an den Versetzungslinien. Wie D_{vp} berechnet wird, wird in Kapitel 2.5 aufgezeigt. [4]

$$v_{cp} = \frac{2 \cdot \pi \cdot b \cdot D_{vp} \cdot \sigma_{eff} \cdot \Omega}{L_p^2 \cdot k \cdot T} \quad (2.11)$$

Der Abstand zwischen wechselwirkender Versetzung und Gitterfehler L_α wird wie in Gleichung 2.12 aufgezeigt berechnet. Diese Variable wird unter anderem mit dem Transportkoeffizienten für Leerstellen η_v , dem Selbstdiffusionskoeffizient D_s , welcher in Kapitel 2.5 diskutiert wird, der gesamten Versetzungsdichte ρ_t , welche durch Summierung von ρ_m , ρ_{dip} und ρ_b berechnet wird, benötigt, um die Klettergeschwindigkeit durch Gitterdiffusion v_{cl} , zu berechnen. [4]

$$L_\alpha = \frac{(1 + \nu) \cdot G \cdot b \cdot 0.5 \cdot \Omega}{3 \cdot \pi \cdot (1 - \nu) \cdot k \cdot T} \quad (2.12)$$

$$v_{cl} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \eta_v \cdot D_s \cdot \sigma_{eff} \cdot \Omega}{(1 - \eta_v \cdot \ln(L_\alpha \cdot \sqrt{\rho_t})) \cdot b \cdot k \cdot T} \quad (2.13)$$

Die Summe der Klettergeschwindigkeit durch Gitterdiffusion v_{cl} und Liniendiffusion v_{cp} , welche durch die Gleichungen 2.11 und 2.13 beschrieben werden, ergeben die in Gleichung 2.14 dargestellte Klettergeschwindigkeit von Versetzungen v_c . [4]

$$v_c = v_{cp} + v_{cl} \quad (2.14)$$

Die Grenzflächenenergie von Subkorn Grenzen γ_{sb} wird, wie in Gleichung 2.15 dargestellt, unter anderem mit der Versetzungsdichte der Subkörner ρ_b und mit dem mittleren Subkornradius R_{sbg} berechnet. [4]

$$\gamma_{sb} = \frac{G \cdot b^2}{3} \cdot \rho_b \cdot R_{sbg} \quad (2.15)$$

Der in Gleichung 2.16 berechnete Druck an der Subkorn Grenze wird unter anderem benötigt um die Rate der Versetzungsdichte ρ_b und die Rate des mittleren Subkornradius R_{sbg} zu berechnen. [4]

$$P_{sb} = \frac{4}{3} \cdot G \cdot b^2 \cdot \rho_b \quad (2.16)$$

Gleichung 2.17 beschreibt den Versetzungsabstand in der Subkorn Grenze h_b , welcher unter anderem benötigt wird, um die in Gleichung 2.18 und 2.20 definierte Mobilität der Subkorn Grenzen M_{sb} zu berechnen. Die jeweilige Gültigkeit der Gleichungen 2.18 und 2.20 bestimmt Ungleichung 2.19. Ist die Ungleichung erfüllt, so wird die Mobilität der Subkorn Grenzen M_{sb} durch Gleichung 2.18 berechnet. Ist die Ungleichung nicht erfüllt, so wird sie durch Gleichung 2.20 berechnet. [4]

$$h_b = \frac{1}{(\rho_b + \rho_{dip}) \cdot R_{sbg}} \quad (2.17)$$

$$M_{sb} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \eta_v \cdot D_s \cdot \Omega}{b \cdot k \cdot T} + \frac{2 \cdot \pi \cdot b \cdot D_{vp} \cdot \Omega}{h_b^2 \cdot k \cdot T} \quad (2.18)$$

$$P_{sb} \geq 2 \cdot \pi \cdot \left(\sum_{i=1}^n r_{mean,i}^2 \cdot N_{v,i} \right) \cdot \gamma_{sb} \quad (2.19)$$

$$M_{sb} = \frac{D_s \cdot \Omega}{4 \cdot \pi \cdot \left(\sum_{i=1}^n r_{mean,i}^4 \cdot N_{v,i} \right) \cdot k \cdot T} \quad (2.20)$$

Die Änderung der Versetzungsdichte von mobilen Versetzungen besteht, wie in Gleichung 2.21 aufgezeigt, aus erzeugenden und vernichtenden Termen. [4] [3]

Zu den erzeugenden Termen zählen der "Frank-Read Source" Term, welcher eine Multiplikation von mobilen Versetzungen beschreibt und der "Dislocation subgrain emission" Term, welcher eine Emission von mobilen Versetzungen von den Subkörnern beschreibt. Zu den vernichtenden Termen zählen "Production of subgrain walls", "Climb recovery" und "Dynamic recovery". Dabei entspricht $h_m = \frac{1}{\rho_m^{0.5}}$ dem Versetzungsabstand der mobilen Versetzungen, d_{anh} ist als Längenparameter zu interpretieren und ρ_{dip} ist die Versetzungsdichte der Dipole, welche durch Gleichung 2.22 ausgedrückt wird. Hervorzuheben in dieser Gleichung ist der Parameter zur Bestimmung der Quellstärke β , welcher als reiner Fit-Parameter dient. [3] [4] [2] [58] [50] [51] [52]

$$\frac{d\rho_m}{dt} = \underbrace{\left[\frac{v_g}{h_m} \cdot \rho_m \right]}_{\text{Frank-Read Source}} + \underbrace{\left[v_g \cdot \frac{\beta \cdot R_{sbg}}{h_b^2} \right]}_{\text{Dislocation subgrain emission}} - \underbrace{\left[\frac{v_g}{2 \cdot R_{sbg}} \cdot \rho_m \right]}_{\text{Production of subgrain walls}} - \underbrace{\left[8 \cdot \rho_m^{\frac{3}{2}} \cdot v_c \right]}_{\text{Climb recovery}} - \underbrace{\left[d_{anh} \cdot (\rho_m + \rho_{dip}) \cdot \rho_m \cdot v_g \right]}_{\text{Dynamic recovery}} \quad (2.21)$$

Gleichung 2.22 beschreibt die Änderung der Versetzungsdichte der Dipole, welche aus einem Produktionsterm "Immobilization" und zwei Vernichtungstermen "Static Recovery" und "Dynamic Recovery" besteht. [3] [4] [2] [50] [51] [52]

$$\frac{d\rho_{dip}}{dt} = \underbrace{\left[\frac{v_g}{2 \cdot R_{sbg}} \cdot \rho_m \right]}_{\text{Immobilization}} - \underbrace{8 \cdot \left[\frac{v_c}{h_b} \cdot \rho_{dip} \right]}_{\text{Static Recovery}} - \underbrace{\left[d_{anh} \cdot \rho_m \cdot \rho_{dip} \cdot v_g \right]}_{\text{Dynamic recovery}} \quad (2.22)$$

Die Änderungsrate der Versetzungsdichte der Subkörner, welche in Gleichung 2.23 aufgezeigt ist, besteht aus einem Produktionsterm, welcher die Versetzungsdipole in Subkornversetzungen beschreibt und zwei Vernichtungstermen, welche zum einen den Effekt von Versetzungsdipolen auf Grenzflächenversetzungen beschreiben und zum anderen die Formation von neuen Subkornoberflächen beschreiben. In Gleichung 2.23 beschreibt ζ eine Konstante für den Effekt von Versetzungsdipolen auf Grenzflächenversetzungen, $r_{mean,i}$ ist der mittlere Radius der betrachteten Ausscheidung und $N_{v,i}$ ist die Stückzahl von Ausscheidungen pro Volumen. Hervorzuheben ist in dieser Gleichung der Summenterm $\sum_{i=1}^n (r_{mean,i}^2 \cdot N_{v,i})$, welcher mit den Radien und den Stückzahlen von Ausscheidungen, welche sich an Korngrenzen und Subkorn Grenzen befinden, zu berechnen ist. [3] [4] [2] [50] [51] [52]

$$\frac{d\rho_b}{dt} = \underbrace{8 \cdot \left[\frac{v_c}{h_b} \cdot \rho_{dip} \right] - \zeta \cdot \left[\frac{v_c}{h_b} \cdot \rho_{dip} \right]}_{\text{Static recovery and loss of dipoles}} - \underbrace{M_{sb} \cdot \left[P_{sb} - 2 \cdot \pi \cdot \left(\sum_{i=1}^n r_{mean,i}^2 \cdot N_{v,i} \right) \cdot \gamma_{sb} \right]}_{\text{Subgrain growth}} \cdot \frac{\rho_b}{R_{sbg}} \quad (2.23)$$

Die Werte der Variablen $r_{mean,i}$ und $N_{v,i}$ gehen in der vorliegenden Arbeit beispielsweise aus den Gleichungen 2.31 und 2.32 hervor, welche in Kapitel 2.4.2 noch diskutiert werden. Weitere Quellen der Werte dieser Variablen sind in der vorliegenden Arbeit eine externe MatCalc Berechnung, auf welche in Kapitel 3.1 näher eingegangen wird.

Die Änderung des mittleren Subkornradius R_{sbg} , welche in Gleichung 2.24 beschrieben ist, besteht nach Ghoniem [4] aus den Termen "Subgrain growth" und "Nukleation". Der Term "Nukleation" ist nach Yadav [3] vernachlässigbar und wird auch in dieser Arbeit nach Überprüfung nicht weiter betrachtet. Der Summenterm $\sum_{i=1}^n (r_{mean,i}^2 \cdot N_{v,i})$, welcher in Gleichung 2.24 dargestellt ist, entspricht dem selbigen, wie in Gleichung 2.23. [3] [4] [2] [50] [51] [52] [56] [59] [60]

$$\frac{dR_{sbg}}{dt} = M_{sb} \cdot \underbrace{\left[P_{sb} - 2 \cdot \pi \cdot \left(\sum_{i=1}^n r_{mean,i}^2 \cdot N_{v,i} \right) \cdot \gamma_{sb} \right]}_{\text{Subgrain growth}} \quad (2.24)$$

Aufgrund der Vergrößerung von $M_{23}C_6$ und MX Ausscheidungen hat Yadav [3] die Orowan Gleichung, welche bereits in Gleichung 2.5 aufgezeigt wurde, mit dem CDM Ansatz nach Basirat [41] kombiniert, was zu einer modifizierten Orowan Gleichung führt, welche wie folgt beschrieben wird. [3]

In Gleichung 2.25 beschreibt D_{ppt} das Ausmaß der Schädigung durch Ausscheidungsvergrößerung und D_{cav} das Ausmaß der Schädigung durch Poren. Die Werte von D_{ppt} und D_{cav} können zwischen 0 und 1 liegen, wobei 0 keine Schädigung bedeutet und 1 eine Schädigung von 100% darstellt, was einem Materialversagen gleichzusetzen ist. Diese modifizierte Variante der Orowan Gleichung, ermöglicht es im Gegensatz zur normalen Variante, die Kriechdehnung auch im tertiären Bereich zu berechnen. [3]

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{b \cdot \rho_m \cdot v_g}{M \cdot (1 - D_{ppt}) \cdot (1 - D_{cav})} \quad (2.25)$$

Das gesamte Ausmaß der Schädigung durch die Ausscheidungsvergrößerung D_{ppt} lässt sich wie in Gleichung 2.28 dargestellt, als Summe der Schädigungen durch die ausscheidungsspezifischen Vergrößerungen berechnen. In der Schädigungsrate, welche in Gleichung 2.26 bzw. 2.27 dargestellt

ist, beschreibt die Konstante k_p die Vergrößerungsrate, welche sich mit $(l-1)^{th}$ berechnen lässt, wobei th die initiale Größe der Ausscheidung beschreibt und l auf den Typ der Ausscheidung referenziert. Beispielsweise wird der Wert $l = 6$ für eine MX Ausscheidung verwendet und $l = 4$ für eine $M_{23}C_6$ Ausscheidung. [3] [61] [55] [62] [63] [64] [41] [65]

$$\dot{D}_{(ppt),i} = \frac{k_p}{(l-1)} \cdot (1 - D_{(ppt),i})^l \quad (2.26)$$

$$D_{(ppt),i} = 1 - (k_p \cdot t + 1)^{\frac{1}{1-l}} \quad (2.27)$$

$$D_{ppt} = \sum_{i=1}^n (D_{(ppt),i}) \quad (2.28)$$

Das Ausmaß der Schädigung durch Poren D_{cav} , wird wie in Gleichung 2.29 dargestellt durch die Kriechdehnung ε , durch die Kriechdehnungsrate $\dot{\varepsilon}$ und durch die Konstante A berechnet. A ist in diesem Fall als Materialkonstante zu verstehen, welche eine Abhängigkeit von Material, Temperatur und Spannung darstellt und als reiner Fit-Parameter zu interpretieren ist. [3] [66] [63] [41]

$$\dot{D}_{cav} = (A \cdot \varepsilon \cdot \dot{\varepsilon}) \quad (2.29)$$

Wird die Schädigung im Material nicht berücksichtigt, dann entfallen die beiden Damageparameter D_{ppt} und D_{cav} . Dadurch vereinfacht sich die Gleichung 2.25 auf die ursprüngliche Gleichung 2.5.

Die in Gleichung 2.9 beschriebene Gleitgeschwindigkeit der Versetzungen v_g ist nur relevant, wenn keine Hindernisse vorliegen. In dem Moment, wo es Hindernisse gibt, muss v_g durch eine effektive Geschwindigkeit ersetzt werden. v_{eff} ist hier die effektive durchschnittliche Geschwindigkeit von mobilen Versetzungen im Subkorninneren. Laut Sonderegger und Riedlsperger kann v_{eff} wie in Gleichung 2.30 veranschaulicht berechnet werden. [67]

$$\frac{1}{v_{eff}} = \frac{1}{v_g} + \frac{1}{v_c} \cdot \sum_{i=1}^n (r_{mean,i}^3 \cdot N_{v,i}) \cdot \frac{\pi}{2} \quad (2.30)$$

2.4.2. Teilchenvergrößerung / Ostwald - Reifung

Um die geforderten Eigenschaften einer Legierung zu erreichen, wird die optimale Zusammensetzung der Teilchen mittels gezielter Wärmebehandlung eingestellt. Solange die Betriebstemperatur unter der Grenze von ca. $0,4 \cdot T_S$ liegt, kann die Teilchendispersion als langzeitstabil betrachtet werden. Eine Ausnahme bilden jedoch die Ausscheidungen, da schon unterhalb von $0,4 \cdot T_S$ deutliche Vergrößerungen der Karbide zu beobachten sind. Die Vergrößerung der Ausscheidungen bei konstantem Volumenanteil wird als "Ostwald - Reifung" bezeichnet und durch Gleichung 2.31 beschrieben. [9]

In Gleichung 2.31 beschreibt t die Zeit, r_{mean} den Ausscheidungsradius zum Zeitpunkt t , $r_{initial}$ den ursprünglichen Ausscheidungsradius und k_d eine temperaturabhängige Vergrößerungsrate. [9]

$$r_{mean}^3 - r_{initial}^3 = k_d \cdot t \quad (2.31)$$

Aufgrund der Ausscheidungsvergrößerung, welche unter der Voraussetzung eines konstanten Volumens erfolgt, verändert sich dadurch die Stückzahl an Ausscheidungen pro Volumen N_v . Gleichung 2.32 beschreibt dies, wobei $N_{v,initial}$ die anfängliche Stückzahl pro Volumen beschreibt.

$$N_v = \frac{N_{v,initial} \cdot r_{initial}^3}{r_{mean}^3} \quad (2.32)$$

2.4.3. Eigenschaften und Rolle von Ausscheidungen

Eine Ausscheidung ist ein kleines, abgeschlossenes Volumen innerhalb der Matrix, das eine andere (ebenfalls feste) Phase besitzt als die Matrix. [43]

Wie bereits in Kapitel 1.3.2.3 erwähnt, resultiert der hohe Kriechwiderstand von 9-12% Cr-Stählen aus einer teilchenstabilisierten Substruktur. [20] [29] [30]

In den nachfolgenden Unterkapiteln werden die Ausscheidungen, welche die Mikrostruktur in dem in der vorliegenden Arbeit behandelten Werkstofftyp am meisten beeinflussen, diskutiert. [1]

2.4.3.1. Chromkarbid - $M_{23}C_6$

Dieses mit Chrom angereicherte Karbid ist maßgeblich für den hohen Kriechwiderstand verantwortlich. Die Keimbildung dieses Karbids erfolgt, wie auch in Abbildung 5 (Kapitel 1.3.2.2) visualisiert, vorwiegend an Korngrenzen. Bei erhöhten Temperaturen wirkt sich die hohe Tendenz zur Vergrößerung dieses Karbides negativ auf die Kriechfestigkeit aus. [1] [12] [24] [68]

2.4.3.2. MX Ausscheidungen - NbC und VN

Diese Klasse von Ausscheidungen beinhalten Niobcarbide NbC , Vanadiumnitride VN und weitere gemischte Formen. Zu finden sind diese Ausscheidungen hauptsächlich in Versetzungen und an Subkorngrenzen. MX Ausscheidungen tragen mit ihren Eigenschaften zu einer verstärkten Kriechfestigkeit bei und ihre Tendenz zur Vergrößerung kann als gering eingestuft werden. Als negativen Aspekt lässt sich, nach fortgeschrittener Lebensdauer, die Möglichkeit der Bildung einer "modifizierten Z Phase", beziffern, welche VN - Ausscheidungen ersetzt. [1] [12] [24] [68]

2.4.3.3. Laves Phase

Dieser Ausscheidungstyp weist in der Literatur eine umstrittene Rolle auf. Die Laves Phase entsteht nach einigen hundert Stunden an Betrieb und scheidet sich an Stellen, wie Korngrenzen oder Subkorngrenzen aus und weist eine hohe Vergrößerungsrate auf. [1] [12] [68] [69]

2.4.3.4. Aluminium Nitride

Aluminium Nitride AlN bergen einen Vorteil bzgl. des Fertigungsprozesses, was auch der hauptsächliche Grund ist, warum diese Ausscheidung bei diesen Stählen hinzugegeben wird, da dieser Ausscheidungstyp einen negative Aspekt bzgl. der Langzeitkriechfestigkeit aufweist. [1] [70] [71]

2.4.3.5. Modifizierte Z Phase

Die Wahrscheinlichkeit bzgl. der Entstehung des Ausscheidungstyps der "Modifizierte Z Phase" hängt stark mit dem Chrom-Anteil in martensitischen Stählen zusammen. Je höher der Cr-Anteil, desto höher ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich eine "Modifizierte Z Phase" ausscheidet. Der negative Aspekt dieser Ausscheidungsart ist eine sehr starke Reduktion der Kriechfestigkeit, aufgrund von einer Vernichtung von MX-Partikeln und einer sehr starken Vergrößerung. [1] [12] [72] [73]

2.5. Diffusionskoeffizienten

Die Diffusionskoeffizienten D_s und D_{vp} , welche primär zur Berechnung der Gleichungen 2.11, 2.13 und 2.18 benötigt werden, werden wie in Gleichung dargestellt 2.33 berechnet. Dabei ist Q die Aktivierungsenergie, T die Temperatur, R die Gaskonstante, D_0 ein Parameter, welcher beispielsweise aus Abbildung 21 hervorgeht und D der zu berechnende Diffusionskoeffizient. [74] [75]

$$D = D_0 \cdot e^{-\frac{Q}{RT}} \quad (2.33)$$

bcc-Fe	Low T, RT—693 K		Medium T, 693-1214 K	
	Q , kJ/mol	D_0 , m ² /s	Q , kJ/mol	D_0 , m ² /s
Bulk	285	6.0×10^{-4}	330	1.5
GB	125	6.0×10^{-7}	170	1.5×10^{-3}
Disl	150	1.5×10^{-6}	195	3.8×10^{-3}

Abbildung 21.: Parameter zur Berechnung der Diffusionskoeffizienten für Selbstdiffusion und Liniendiffusion [76]

In Abbildung 22 sind die Werte der durch Gleichung 2.33 berechneten Diffusionskoeffizienten für Selbstdiffusion und Liniendiffusion grafisch dargestellt.

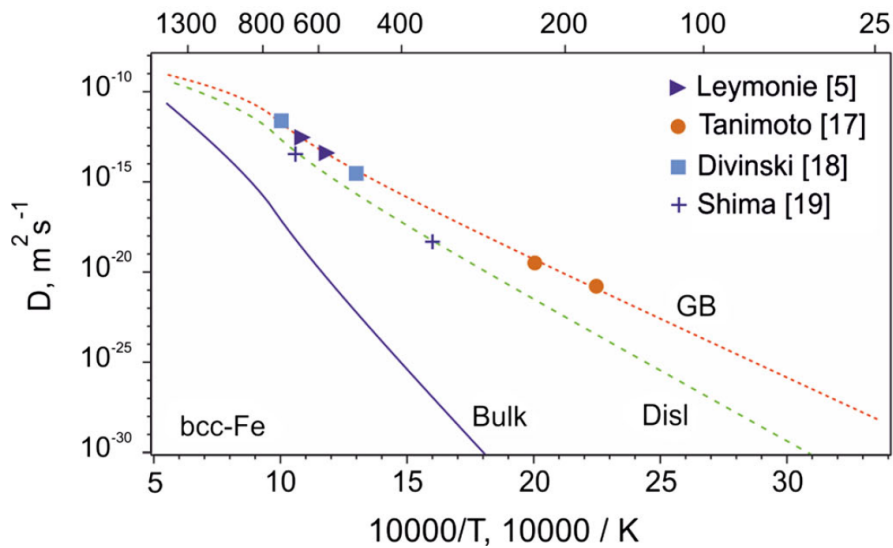


Abbildung 22.: Diffusionskoeffizienten für Selbstdiffusion und Liniendiffusion [76]

Werden die Werte der durch Gleichung 2.33 berechneten Diffusionskoeffizienten, welche in Abbildung 22 grafisch veranschaulicht sind, mit Werten von Diffusionskoeffizienten, welche aus anderen Quellen stammen, verglichen, so sind teilweise sehr hohe Abweichungen zu erkennen.

Beispielsweise ist in der vorliegenden Arbeit Abbildung 23 mit der zugehörigen Quelle [77] als Referenz veranschaulicht. Auch die Werte der Diffusionskoeffizienten welche durch Pein [78] berechnet wurden, variieren im Vergleich zu den Quellen [76] und [77] sehr stark.

Aus diesem Grund werden die Diffusionskoeffizienten in der vorliegenden Arbeit als Fit-Parameter angesehen. Als Referenz dienen hierbei Experimentalwerte für R_{sbg} , da eine Variation von den Diffusionskoeffizienten einen sehr großen Einfluss auf das Endergebnis von R_{sbg} hat. Durch diesen Vergleich wird ein sehr guter Rückschluss auf die Werte der Diffusionskoeffizienten ermöglicht.

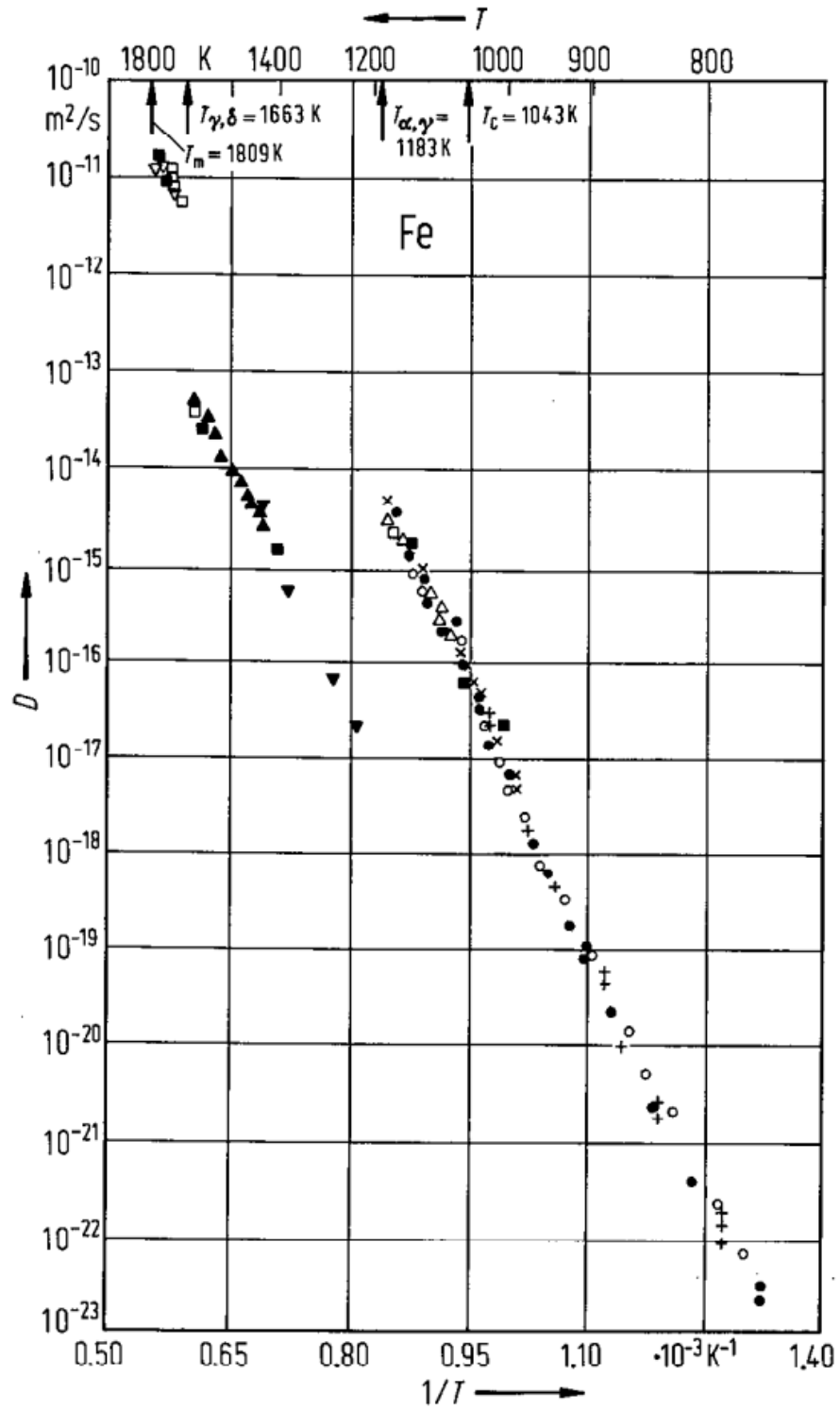


Abbildung 23.: Diffusionskoeffizienten für Selbstdiffusion [77]

3. Experimental

3.1. MatCalc

MatCalc ist ein wissenschaftliches Simulationsprogramm, welches in der vorliegenden Arbeit hauptsächlich zur Ausscheidungssimulation verwendet wurde. Der Umfang dieser Software geht, in Bezug auf die Anwendung in der vorliegenden Arbeit, um ein vielfaches darüber hinaus. [79]

In der vorliegenden Arbeit wurde die MatCalc Version 5.62 mit den Datenbanken *mc_fe_v2.008.ddb* und *mc_fe_v2.050.tdb* verwendet. Die Grundstruktur des verwendeten MatCalc Skriptes, welches im Rahmen eines bilateralen Industrieprojektes mit Mitsubishi Heavy Industries (MHI) 2016 durch Riedlsperger [1] entstand, wurde für die vorliegende Arbeit modifiziert. Der in dieser Arbeit verwendete Teil des MatCalc Skriptes wurde exakt von Riedlsperger [1] übernommen und findet sich im Anhang A.2 und ist der vorliegenden Arbeit in digitaler Form beigelegt.

Mittels dieses Skriptes wurden für den Stahl P91 eine Reihe an Ausscheidungssimulationen durchgeführt, welche im wesentlichen die Werte der Durchmesser und Stückzahlen pro Volumen von verschiedensten Ausscheidungen, während den Wärmebehandlungen vor dem eigentlichen Betrieb und dem Betrieb zu jedem Zeitpunkt lieferten.

Die Temperaturzyklen welche in der Reihenfolge von Normalisieren, Anlassen und Service durchgeführt wurden sind in den Abbildungen 24, 25 und 26 ersichtlich, wobei Normalisieren und Anlassen die Wärmebehandlung vor dem Betrieb aufzeigen und Service den eigentlichen Betrieb simuliert.

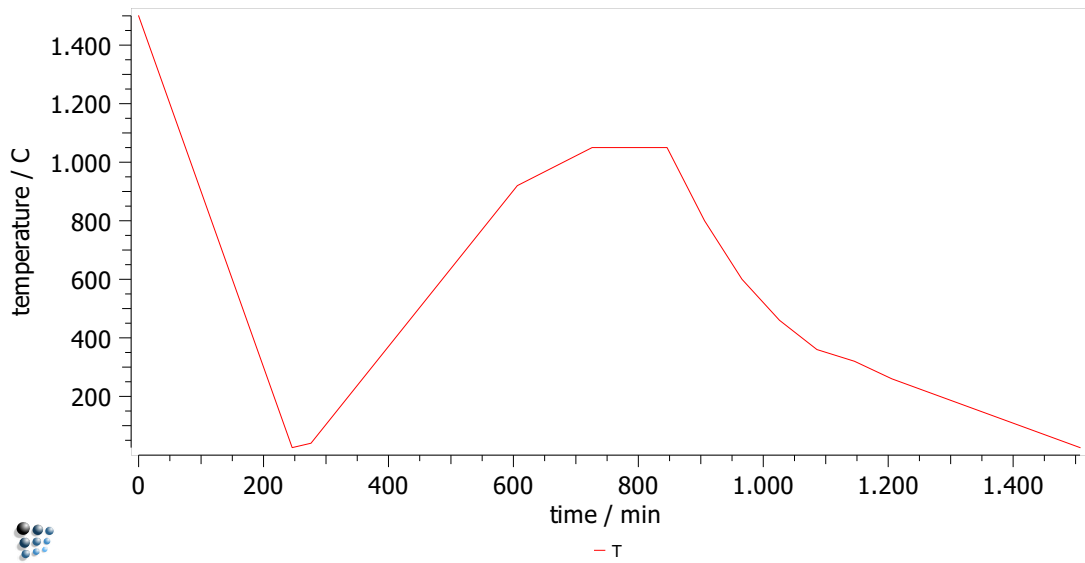


Abbildung 24.: Temperaturzyklus - Normalisieren

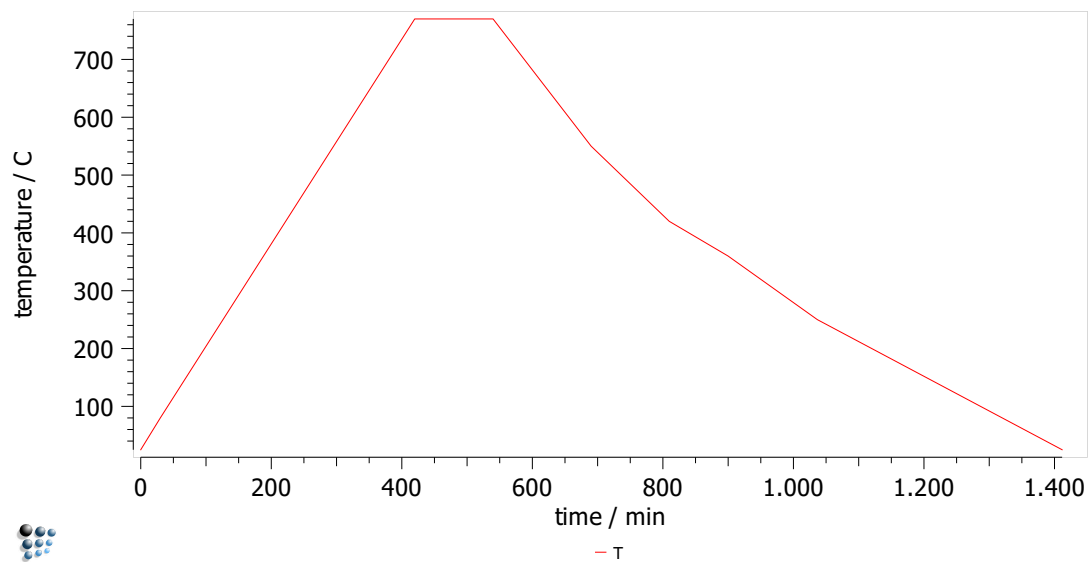


Abbildung 25.: Temperaturzyklus - Anlassen

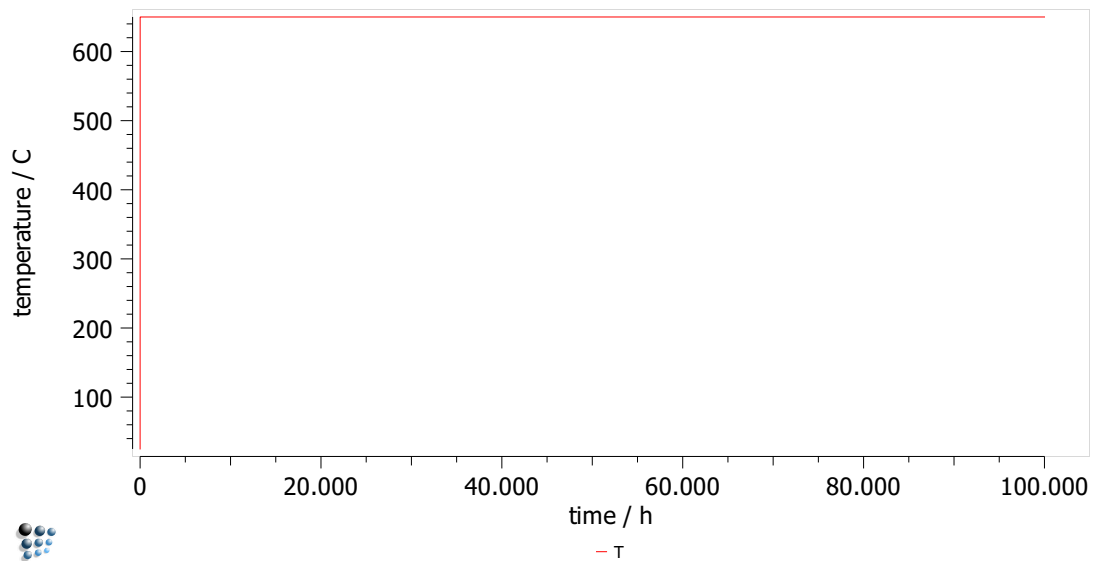


Abbildung 26.: Temperaturzyklus - Service

Für die eigentliche Kriechsimulation werden nur die Ausscheidungsdaten während dem Betrieb, welcher mit 650° simuliert wird, benötigt. Darum wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit auf die Abschnitte Normalisieren und Anlassen nur geringfügig näher eingegangen. Hervorzuheben ist, dass es mit MatCalc nicht möglich ist, den Einfluss einer mechanischen Belastung zu simulieren. Demnach mussten mechanische Belastung und Temperaturbelastung getrennt voneinander simuliert werden, sofern die Kriechsimulation mit Matlab auf die Daten von MatCalc zurückgreift.

3.2. Brücke zwischen MatCalc und Matlab

Um die Ausscheidungsdaten in Matlab verwenden zu können, müssen diese aus MatCalc richtig exportiert werden. Dies geschieht, wie in Abbildung 27 dargestellt über den Zwischenschritt Microsoft Excel.

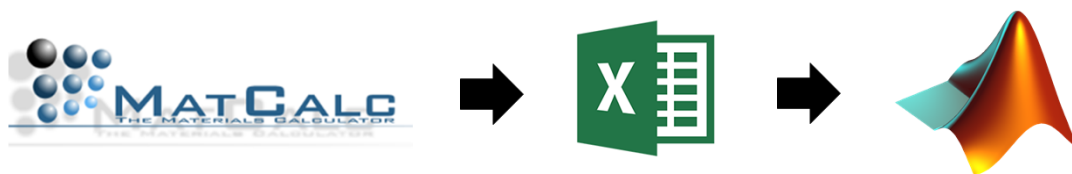


Abbildung 27.: Matcalc Export über Microsoft Excel

MatCalc weist eine eigene Exportfunktion auf, welche die gewählten Werte in die Zwischenablage des verwendeten PCs kopiert. Um dies zu erreichen muss nach erfolgreicher MatCalc - Simulation das in Abbildung 28 dargestellte Symbol mit rechter Maustaste gedrückt werden. Zu finden ist dieses Symbol jeweils links unter dem Diagramm, von welchem die Daten exportiert werden sollen. Im Fall der vorliegenden Arbeit sind dies die Daten der Durchmesser der Ausscheidungen (Abbildung 43) und die Stückzahlen pro Volumen der Ausscheidungen (Abbildung 44), jeweils während dem Betrieb.

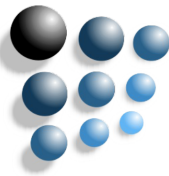


Abbildung 28.: MatCalc - Button für Export

Nach dem Rechtsklick auf das Symbol, welches in Abbildung 28 dargestellt ist, erscheint ein Auswahlfenster, welches in Abbildung 29 dargestellt ist. Um die Daten in die Zwischenablage zu speichern muss, wie in dieser Abbildung veranschaulicht, auf "Copy to clipboard", dann auf "Plot" und letzten Endes auf "data" geklickt werden.

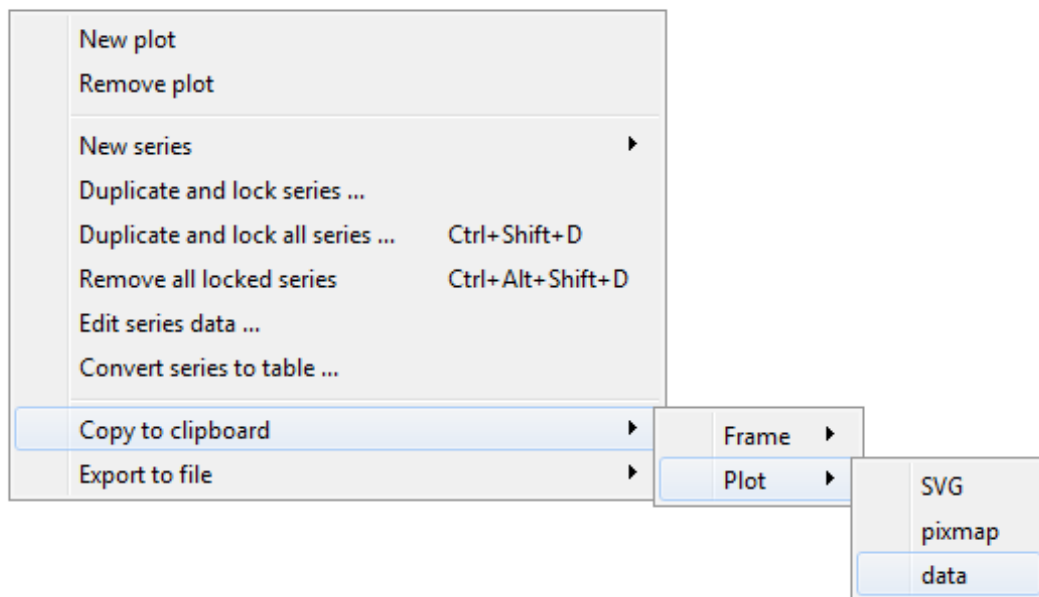


Abbildung 29.: MatCalc - Exportdialog

Von der Zwischenablage aus, können die Daten in Microsoft Excel eingefügt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde Microsoft Excel 2013 verwendet.

Abbildung 30 zeigt die Anordnung der exportierten MatCalc Daten auf. Ein herausstechendes Merkmal ist hierbei die mehrmalige Spalte 'auto', wobei es sich um die Zeit handelt. Da in jeder zweiten Spalte idente Zahlenwerte abgebildet sind, ist der erste Schritt im Matlab Code eine Neuordnung dieser Spalten, da die Zeitschritte nur einmal benötigt werden und um die Rechenzeit zu optimieren.

auto	NbC(aust,g)	auto	NbC(aust,d)	auto	AlN(aust,d)	auto	Cr2N(aust,d)	auto	VN(aust,g)
0	265,024534	0	26,8153659	0	81,8516052	0	0	0	125,018871
2,78E-16	265,024534	2,78E-16	26,8153659	2,78E-16	81,8516052	2,78E-16	0	2,78E-16	125,018871
1,67E-15	265,024534	1,67E-15	26,8153659	1,67E-15	81,8516052	1,67E-15	0	1,67E-15	125,018871
8,61E-15	265,024534	8,61E-15	26,8153659	8,61E-15	81,8516052	8,61E-15	0	8,61E-15	125,018871
4,33E-14	265,024534	4,33E-14	26,8153659	4,33E-14	81,8516052	4,33E-14	0	4,33E-14	125,018871
2,17E-13	265,024534	2,17E-13	26,8153659	2,17E-13	81,8516052	2,17E-13	0	2,17E-13	125,018871
1,09E-12	265,024534	1,09E-12	26,8153659	1,09E-12	81,8516052	1,09E-12	0	1,09E-12	125,018871
5,43E-12	265,024534	5,43E-12	26,8153659	5,43E-12	81,8516052	5,43E-12	0	5,43E-12	125,018871
2,71E-11	265,024534	2,71E-11	26,8153659	2,71E-11	81,8516052	2,71E-11	0	2,71E-11	125,018871
1,36E-10	265,024534	1,36E-10	26,8153659	1,36E-10	81,8516052	1,36E-10	0	1,36E-10	125,018871
6,78E-10	265,024534	6,78E-10	26,8153659	6,78E-10	81,8516052	6,78E-10	0	6,78E-10	125,018871
3,39E-09	265,024534	3,39E-09	26,8153659	3,39E-09	81,8516052	3,39E-09	0	3,39E-09	125,018871
1,70E-08	265,024534	1,70E-08	26,8153659	1,70E-08	81,8516052	1,70E-08	0	1,70E-08	125,018871
8,48E-08	265,024534	8,48E-08	26,8153659	8,48E-08	81,8516052	8,48E-08	0	8,48E-08	125,018871
4,24E-07	265,024534	4,24E-07	26,8153659	4,24E-07	81,8516052	4,24E-07	0	4,24E-07	125,018871
2,12E-06	265,024534	2,12E-06	26,8153659	2,12E-06	81,8516052	2,12E-06	0	2,12E-06	125,018871
1,06E-05	265,024534	1,06E-05	26,8153659	1,06E-05	81,8516052	1,06E-05	0	1,06E-05	125,018871
5,30E-05	265,024534	5,30E-05	26,8153659	5,30E-05	81,8516052	5,30E-05	0	5,30E-05	125,018871
0,00026491	265,024534	0,00026491	26,8153659	0,00026491	81,8516052	0,00026491	0	0,00026491	125,018871
0,00132455	265,024534	0,00132455	26,8153659	0,00132455	81,8516052	0,00132455	0	0,00132455	125,018871
0,00662274	265,024534	0,00662274	26,8153659	0,00662274	81,8516052	0,00662274	0	0,00662274	125,018871
0,03311369	265,024534	0,03311369	26,8153659	0,03311369	81,8516052	0,03311369	0	0,03311369	125,018871
0,11728878	265,024534	0,11728878	26,8153659	0,11728878	81,8516052	0,11728878	0	0,11728878	125,018871
0,20146386	265,024534	0,20146386	26,8153659	0,20146386	81,8516052	0,20146386	0	0,20146386	125,018871
0,28563894	265,024534	0,28563894	26,8153659	0,28563894	81,8516052	0,28563894	0	0,28563894	125,018871

Abbildung 30.: Exportierte Matcalc Daten am Beispiel eines Auszuges der Durchmesserwerte in [nm] einiger Ausscheidungen, welche auf die Zeit "auto" in [h] aufgetragen wurden

3.3. Matlab

Die Grundstruktur des Matlab Codes, welcher in der vorliegenden Arbeit verwendet wurde, ging aus einem bilateralen Industrieprojekt mit Mitsubishi Heavy Industries (MHI) 2016 durch Krenmayer [2] hervor, welcher den Matlab Code von Yadav [42] weiterentwickelte. In der vorliegenden Arbeit wurden alle funktionsfähigen Abschnitte des vorhandenen Matlab Codes exakt von Krenmayer [2] übernommen und jegliche Richtigstellungen bzw. Änderungen des Codes werden in Kapitel 3.5 festgehalten. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde die Matlabversion Matlab R2017b, mit der Erweiterung "Curve Fitting Toolbox", verwendet.

Der gesamte Matlab Code findet sich im Anhang A.3 und ist der vorliegenden Arbeit in digitaler Form beigelegt.

3.3.1. Ursprüngliche Struktur des Matlab - Codes

Die prinzipielle Struktur des ursprünglichen Matlab - Codes bestand aus einem Hauptfile *Creep_model.m*, welches die eigentlichen Codeabschnitte, welche in verschiedene *Matlab.m* Files aufgesplittet waren, in der nachfolgenden Reihenfolge, lädt.

- *Service_Conditions.m*
- *Experimental_Data.m*
- *Parameters.m*
- *microstructure_parameters.m*
- *model_parameters.m*
- *main_model.m*
- *plot_figures.m*
- *CreepRate.m*

Neben einigen Erweiterungen wurde diese Struktur und Vorgehensweise auch in der vorliegenden Arbeit beibehalten.

Die Resultate und die damit verbundenen Probleme des ursprünglichen Codes werden in Kapitel 4.2 diskutiert.

3.3.2. Interface Matlab

Um die Bedienung des, im Rahmen der vorliegenden Arbeit erstellten Matlab Codes, so einfach wie möglich zu gestalten, wurden im Rahmen dieser Masterarbeit einige "Eingabefenster" in den Code implementiert, welche in den nachfolgenden Punkten näher erläutert werden. Prinzipiell ist in allen Abfragefenstern auf eine sehr einfache Beschriftung geachtet worden und es werden zusätzliche Erklärungen im "Command Window" von Matlab eingeblendet. Generell sind alle JA / NEIN Abfragen mit 1 bzw. 0 zu beantworten, was in Abbildung 31 durch die Werte in den eckigen Klammern [] aufgezeigt wird.

3.3.2.1. Abfragefenster Berechnungsmöglichkeiten

Abbildung 31 visualisiert das erste Abfragefenster, was unmittelbar nach Ausführung des Matlab-Codes erscheint. In diesem Abfragefenster ist es möglich einige Berechnungsmöglichkeiten einzustellen.

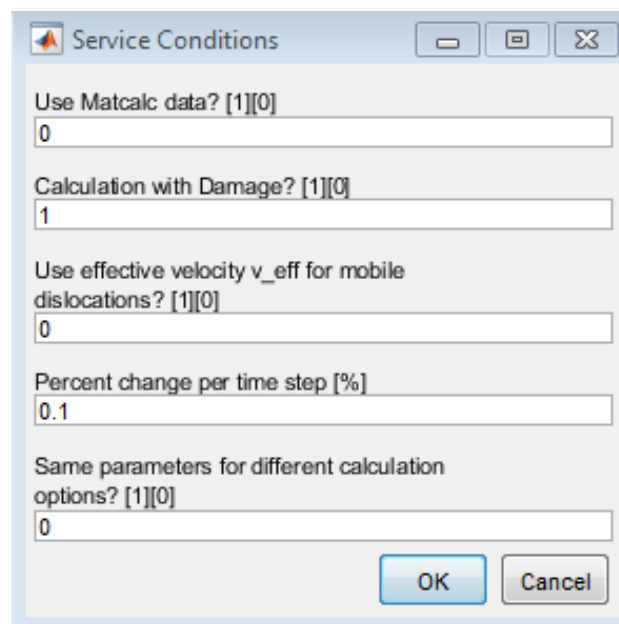


Abbildung 31.: Matlab Abfragefenster Berechnungsmöglichkeiten

Zum einen wird in diesem Abfragefenster abgefragt, ob die Kriechsimulation mit MatCalc Daten durchgeführt werden soll, oder nicht. Falls dies nicht gewünscht wird, und somit mit [0] beantwortet wird, erfolgt die Berechnung der Ausscheidungsdaten mit den Formeln 2.32 und 2.31, welche bereits in Kapitel 2.4.2 erklärt wurden. Wird eine Berechnung mit MatCalc Daten gewünscht, und somit mit [1] beantwortet, müssen sich die Daten der gewünschten Ausscheidungen in dem selben Ordner der Matlab Files befinden. Benötigt werden, wie bereits in Kapitel 3.1 aufgezeigt, die Werte der Durchmesser, sowie die Werte der Stückzahlen, je in einem eigenen Microsoft Excel File.

Eine weitere Abfragemöglichkeit, stellt die Frage, ob die Berechnung unter der Berücksichtigung von Schaden (Damage) durchgeführt werden soll, oder nicht. Hierbei liegt der Unterschied ob die originale Orowan Gleichung 2.5 oder die erweiterte Orowan Gleichung 2.25 verwendet werden soll.

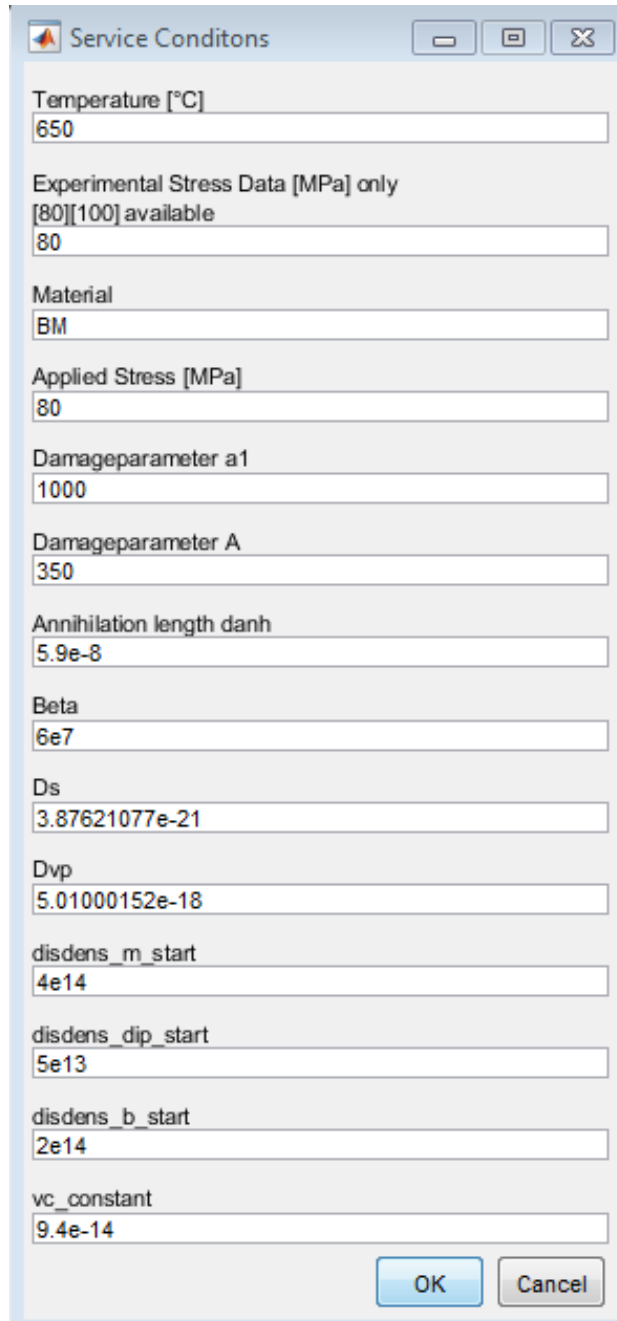
Die nächste Abfrage beinhaltet die Variation bzgl. effektiver Gleitgeschwindigkeit v_{eff} . Der Unterschied hierbei liegt in der Berechnung der Gleitgeschwindigkeit der Versetzungen. Wird dieses Abfragefenster mit [1] beantwortet, so wird Gleichung 2.30 verwendet. Wird es mit [0] beantwortet, wird die Gleitgeschwindigkeit mit Gleichung 2.9 berechnet.

Die nächste Eingabemöglichkeit erfragt die "Prozentuale Änderung je Zeitschritt", welche in Abbildung 31 beispielsweise mit 0.1% ausgefüllt wurde. Diese Eingabe referenziert auf die variable Schrittweite, welche in Kapitel 3.3.3 diskutiert wird.

Aufgrund der verschiedenen Berechnungsmöglichkeiten sind auch verschiedene Konfigurationen der Fit - Parameter notwendig. Diese werden in Bezug auf die Konfiguration der ersten drei Eingabemöglichkeiten eigenständig unterschiedlich geladen. Ist dies nicht gewünscht, ermöglicht die letzte Abfrage die Nutzung von gleichen Parametern, welche in Abbildung 32 dargestellt sind. Wird diese Abfrage mit [1] beantwortet, werden immer die selben Parameter geladen, was einen Vergleich der verschiedenen Berechnungsmöglichkeiten, bei gleichen Fit - Parametern, ermöglicht. Wird diese Abfrage mit [0] beantwortet, werden jeweils optimierte, in Bezug auf die Berechnung, unterschiedliche Parameter geladen.

3.3.2.2. Abfragefenster Parameter

In dem Abfragefenster, welches in Abbildung 32 dargestellt ist, werden einige Fit - Parameter abgefragt. Diese Fit - Parameter sind notwendig, um die Resultate der Kriechmodellierung an die Experimentalwerte anzupassen.



Parameter	Value
Temperature [°C]	650
Experimental Stress Data [MPa] only [80][100] available	80
Material	BM
Applied Stress [MPa]	80
Damageparameter a1	1000
Damageparameter A	350
Annihilation length danh	5.9e-8
Beta	6e7
Ds	3.87621077e-21
Dvp	5.01000152e-18
disdens_m_start	4e14
disdens_dip_start	5e13
disdens_b_start	2e14
vc_constant	9.4e-14

Abbildung 32.: Matlab Abfragefenster Parameter

Die Werte, welche abgefragt werden, sind die beaufschlagte Temperatur, die Experimentalwerte, mit welchen die Simulation verglichen werden soll, die Materialart, die beaufschlagte Spannung, die Parameter a_1 , A , d_{anh} , β , D_s , D_{vp} und die Startwerte der Versetzungsdichten ρ_m , ρ_{dip} und ρ_b . Hervorzuheben ist der Parameter $v_{c_{konstant}}$, welcher in Kapitel 2.2.2.4 erläutert wird.

3.3.2.3. Abfragefenster MatCalc Daten Import

Das Abfragefenster, welches in Abbildung 33 dargestellt ist, erscheint nur, wenn im ersten Abfragefenster (Abbildung 31) die Option "Use MatCalc data" gewählt wurde. In diesem Abfragefenster sind die Dateinamen der Microsoft Excel Files einzugeben, welche die Daten der Ausscheidungen enthalten.

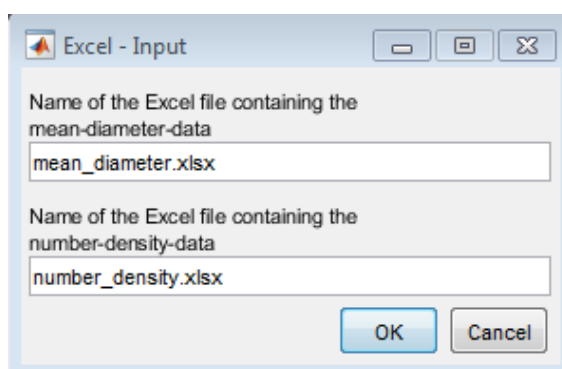


Abbildung 33.: Matlab Abfragefenster MatCalc Daten Import

3.3.2.4. Abfragefenster Ausscheidungen

Das nachfolgende Abfragefenster, welches in Abbildung 34 dargestellt ist, generiert sich aufgrund der eingelesenen Daten, einen Schritt zuvor, selber. Dies geschieht, indem Matlab die Bezeichnungen der Ausscheidungen, welche durch MatCalc berechnet wurden einliest und damit das Abfragefenster generiert. Die Abfrage, welche hierbei erfolgt, referenziert auf die Positionen der Ausscheidungen. Dabei wird, wie auch im "Command Window" erläutert, abgefragt ob sich die jeweilige Ausscheidung im Subkorninneren befindet, oder nicht. Generell betrifft dies, in dem visualisierten Beispiel, alle Vanadiumnitride. Befindet sich die Ausscheidung also im Subkorninneren, so ist die Abfrage mit [0] zu beantworten. Befindet sich die Ausscheidung nicht im Subkorninneren, so ist die Abfrage mit [1] zu beantworten. Der Matlab Code wurde so weit darauf vorbereitet, dass das Programm einen Vorschlag geben kann, an welcher Stelle sich die Ausscheidungen befinden. Der Vorschlag muss durch den Benutzer überprüft werden und gegebenenfalls richtig gestellt werden.

Classification of Precipitates

NbC(aust,g)
1

NbC(aust,d)
1

AlN(aust,d)
1

Cr2N(aust,d)
1

VN(aust,g)
0

NbC(mart,g)
1

NbC(mart,d)
1

NbC(mart,s)
1

AlN(mart,d)
1

VN(mart,g)
0

VN(mart,d)
0

VN(mart,s)
0

M23C6(mart,s)
1

M23C6(mart,g)
1

M7C3(mart,s)
1

Cem(mart,s)
1

Cr2N(mart,d)
1

Laves(mart,s)
1

Z(m,vn_a_g)
1

Z(m,vn_m_g)
1

Z(mart,vn_m_d)
1

Z(mart,vn_m_s)
1

Z(mart,d)
1

OK Cancel

Abbildung 34.: Matlab Abfragefenster Ausscheidungen

3.3.2.5. Abfragefenster Zeitstanddiagramm Daten

Die folgenden Abfragefenster, wie in den Abbildungen 35 und 36 aufgezeigt, erscheinen sobald eine erfolgreiche Kriechsimulation durchgeführt wurde. Abbildung 35 zeigt die Frage, bzgl. der Speicherung der Daten zur Berechnung eines Zeitstanddiagrammes. Falls diese Abfrage positiv beantwortet wird, speichert Matlab die Spannung, mit welcher die Simulation durchgeführt wurde und die Zeit, bei welcher die Kriechkurve eine Dehnung von 6% erreicht hat, was mit einem Materialversagen gleichzusetzen ist.

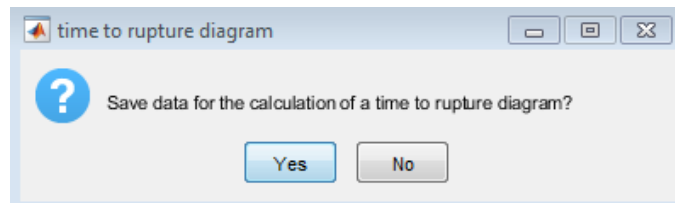


Abbildung 35.: Matlab Abfragefenster bzgl. Speicherung der Zeitstanddiagramm Daten

Das letzte Abfragefenster, welches in Abbildung 36 dargestellt ist, dient zur möglichen Darstellung eines Zeitstanddiagrammes. Eine solche Darstellung ist erst sinnvoll, wenn die Kriechsimulation zuvor mit einigen unterschiedlich beaufschlagten Spannungen durchgeführt wurde. Abbildung 59 (Kapitel 4.4.6) zeigt ein beispielhaftes Resultat eines Zeitstanddiagrammes.

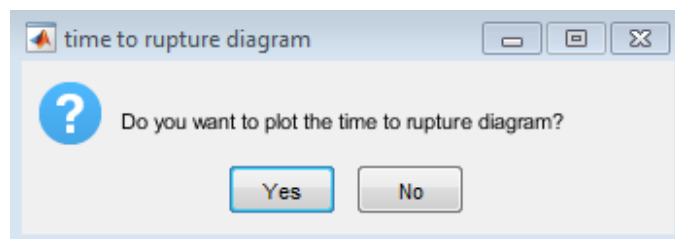


Abbildung 36.: Matlab Abfragefenster bzgl. Visualisierung eines Zeitstanddiagrammes

3.3.3. Variable Schrittweite

Die Berechnung der Kriechdaten erfolgt in Matlab mittels einer variablen Schrittweite, welche innerhalb der vorliegenden Arbeit eingeführt wurde. Jede Differenzialgleichung, welche in Kapitel 2.4 aufgeführt ist, wird vor einem Zeitschritt überprüft, bzw. mit der zugelassenen prozentualen Änderung, welche durch das erste Abfragefenster (Abbildung 31) definiert wird, auf den Zeitschritt rückgerechnet. Diese Rückrechnung erfolgt für jede Differenzialgleichung getrennt. Danach werden die möglichen zugelassenen Zeitschritte verglichen und anschließend erfolgt die Berechnung der Differenzialgleichungen mit dem gleichen kleinsten zugelassenen Zeitschritt. Abbildung 37 soll dies veranschaulichen. Dabei ist zu beachten, dass in Abschnitten von großer Änderung viele kleine Zeitschritte erfolgen und in Abschnitten von kleiner Änderung wenige große. Dies hat den Vorteil, dass die Berechnung zu jedem Zeitpunkt hinreichend genau ist und die Geschwindigkeit der Berechnung trotzdem sehr hoch ist. [80]

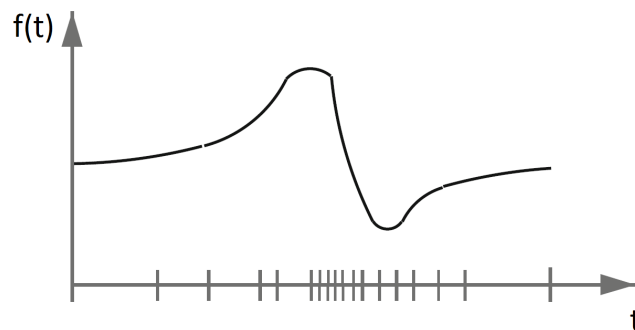


Abbildung 37.: Variable Schrittweite, nach [80]

Wenn die Kriechsimulation mit MatCalc Daten durchgeführt wird, werden die Ausscheidungsdaten für den jeweils errechneten Zeitschritt bzw. Zeitpunkt zusätzlich linear interpoliert, um eine exakte Berechnung zu ermöglichen.

3.4. Referenzierung der verwendeten Symbole

3.4.1. Zusammenführung von verschiedenen Symbolen aus verschiedenen Literaturquellen

In der nachfolgenden Tabelle 2 werden die verschiedenen Symbole aus den Literaturquellen Ghoniem [4] und Yadav [3] in ihren Bezeichnungen gegenüber gestellt, sowie eine genaue Herkunft der einzelnen Variablen wird dargestellt.

Tabelle 2.: Referenzierung der verwendeten Symbole

Diese Arbeit	Ref. [3]	Ref. [4]	Eq. in [3]	Eq. in [4]
a_1	a_1	a_1	1	12
a_g				
A	A		12	
α	α		3	
b	b	b	8, 9	1, 20, 27, 34, 36, 38, 39, 40, 46
β		β		47
c_{dip}	c_{dip}		3	
d_{anh}	d_{anh}	δ	4, 5	47, 48
D_{cav}	D_{cav}		9	
\dot{D}_{cav}	\dot{D}_{cav}		12	
D_{ppt}	D_{ppt}		9, 10, 11	
\dot{D}_{ppt}	\dot{D}_{ppt}		10	
D_s		D_s		26, 40
D_{vp}		D_p		34, 39
ε	ε	ε	8, 9, 12	46
$\dot{\varepsilon}$	$\dot{\varepsilon}$	$\dot{\varepsilon}$	12	1
η_v		η_α		24, 40
G	G	μ	3	20, 36, 38
γ_{sb}	γ_{sb}	γ_{sb}	6, 7	36, 42, 49, 50
h_b	h_b	h	5, 6	3, 39, 47
h_m	h_m		4	
k	k	k	1	12, 20, 34, 39, 40
k_d				
k_p	k_p		10	
l	l		10	
L_α		L_α		20, 24
L_p		L_p		34
M	M		3, 8, 9	
M_{sb}	M_{sb}	M_{sb}	6, 7	39, 40, 49, 50
N_v	N_v	N_p	6, 7	42, 49, 50
$N_{v,initial}$				
v		v		20
P_{sb}	P_{sb}	P_{sb}	6, 7	38, 42, 49
Q	Q	W_g	1	12
$r_{initial}$				
r_{mean}	r_{mean}	r_p	6, 7	42, 49, 50
R_{sbg}	R_{sbg}	R_{sb}	4, 5, 6, 7	3, 36, 42, 47, 48, 49, 50
ρ_b	ρ_b	ρ_b	6	3, 36, 38, 49
ρ_{dip}	ρ_{dip}	ρ_s	3, 4, 5, 6	3, 47, 48, 49

ρ_m	ρ_m	ρ_m	3, 4, 5, 8, 9	1, 46, 47, 48
ρ_t		ρ_N		24
σ_{app}	σ_{app}	σ_a	2	8
σ_{eff}	σ_{eff}	σ_c	2	8, 24, 34
σ_i	σ_i	σ_i	2, 3	8
t	t	t	4, 5, 6, 7, 8, 9	42, 46, 47, 48, 49, 50
T	T	T	1	12, 20, 26, 34, 39, 40
v_c	v_c	v_c	4, 5, 6	47, 48, 49
v_{cl}		v_c		27
v_{cp}		v_c		34
v_g	v_g	v_g	1, 4, 5, 8, 9	1, 12, 46, 47, 48
W				
Ω	Ω	Ω	1	12, 20, 26, 34, 39, 40
ζ	ζ	ζ	6	49

3.4.2. Zusammenführung Symbole vorliegende Arbeit - Matlab

Die nachfolgende Tabelle 3 dient einer Zusammenführung von den Symbolen, welche in der vorliegenden Arbeit verwendet wurden und wie die selbigen im Matlab Code bezeichnet wurden.

Tabelle 3.: Zusammenführung Symbole vorliegende Arbeit - Matlab

Symbol in Arbeit	Symbol im Code	Symbol in Arbeit	Symbol im Code
a_1	a_1	a_g	ag
A	A	α	$alpha$
b	b	β	$beta$
c_{dip}	c_{dip}	d_{anh}	d_{anh}
D_{cav}	D_{cav}	\dot{D}_{cav}	$rate_D_{cav}$
D_{ppt}	D_{prc}	\dot{D}_{ppt}	$rate_D_{prc}$
D_s	D_s	D_{vp}	Dvp
ε	$strain$	$\dot{\varepsilon}$	$rate_strain$
η_v	eta	G	G
γ_{sb}	Vsb	h_b	Hb
h_m	Hm	k	k
k_d	Kd	k_p	Kp
l	l	L_α	L_alpha_v
L_p	Lp	M	M
M_{sb}	Msb	N_v	Nvp
$N_{v,initial}$	$Nvp0$	v	ny
P_{sb}	Ps	Q	Q
$r_{initial}$	$rp0$	r_{mean}	r_p

R_{sbg}	R_{sbg}	ρ_b	$disdens_b$
ρ_{dip}	$disdens_{dip}$	ρ_m	$disdens_m$
ρ_t	$disdens_t$	σ_{app}	$sigma_{applied}$
σ_{eff}	$sigma_{effective}$	σ_i	$sigma_i$
t	t	T	T
v_{eff}	v_{eff}	v_c	vc
v_{cl}	v_{cl}	v_{cp}	vcp
v_g	v_g	W	W
Ω	$omega$	ζ	$zeta$

3.5. Änderungen im Code

In den nachfolgenden Unterkapiteln werden die Änderungen erläutert, welche an dem ursprünglichen Matlab Code durchgeführt wurden.

3.5.1. Änderungen in *Creep_model.m*

- Es wurde ein weiteres Unterfile *time_to_rupture_diagram.m* eingefügt, welches in *Creep_model.m* durch den Befehl *time_to_rupture_diagram* aufgerufen wird. Dadurch ist es möglich, ein Zeitstandsdiagramm der vorherigen Simulationen zu generieren.
- Aufgrund von Fehlerhaften Ergebnissen, wurde am Anfang des Codes ein "clear - Befehl" eingefügt. Dies hat die fehlerhaften Ergebnisse richtig gestellt.

3.5.2. Änderungen in *Service_Conditions.m*

- Das ursprüngliche Auswahlfenster der Service-Conditions wurde angepasst. Es ist nun möglich, einige Fit-Parameter direkt zu bearbeiten. Das Service-Conditions Auswahlfenster, welches in Abbildung 32 dargestellt ist, hatte ursprünglich die Möglichkeit der Abfragen über "Temperature", "Material" und "Applied Stress".
- Es wurden weitere Codezeilen in das *Service_Conditions.m* File eingefügt, welche das Auswahlfenster, welches in Abbildung 31 abgebildet ist, ermöglicht.
- Für das Auswahlfenster, welches in Abbildung 32 dargestellt ist, wurden einige verschiedene Parametervorschläge eingefügt, welche abhängig von dem Auswahlfenster, welches in Abbildung 31 dargestellt ist, eingefügt werden.

- Alle Parameter, welche extern eingelesen werden und durch das Auswahlfenster ersetzt werden, wurden auskommentiert.
- Einige Hinweise, welche im "Command-Window" von Matlab erscheinen, wurden eingefügt.

3.5.3. Änderungen in *Experimental_Data.m*

- Hier wurden einige Codezeilen eingefügt, welche Zeitstandsdaten von NIMS, ECCC und ASME von einer externen Quelle einlesen.

3.5.4. Änderungen in *Parameters.m*

- In diesem File wurden keine Änderungen durchgeführt.

3.5.5. Änderungen in *microstructure_parameters.m*

- In diesem File wurden keine Änderungen durchgeführt.

3.5.6. Änderungen in *model_parameters.m*

- Alle Parameter, welche extern eingelesen werden und durch das Auswahlfenster ersetzt werden, wurden auskommentiert.

3.5.7. Änderungen in *main_model.m*

- Ein Funktionsaufruf wurde eingefügt, welcher die Nutzung von MatCalc Daten ermöglicht. Diese Funktion wird in Kapitel 3.5.10.1 genauer beschrieben.
- Die Möglichkeit einer Erstellung einer Leermatrix für die Zeitstandsdiagramm Daten wurde eingefügt, sofern so eine Matrix noch nicht existiert.
- Die Startwerte der Variablen "*TIME_STEP*" und "*v_eff*" wurden eingefügt.
- Gleichung 2.7 wurde geändert, da im Code die Variable *M* gefehlt hat. Dies führte zu einer erheblichen Abweichung des Ergebnisses.

- Eine Möglichkeit zur Datenspeicherung der einzelnen Schritte der Berechnung wurde eingefügt.
- Gleichung 2.18 wurde geändert, da im Code der zweite Term fehlerhaft war. Im Nenner war fälschlicherweise eine andere Variable als h_b eingetragen. Die Auswirkung diese Änderung ist vernachlässigbar.
- Einige Zeilen bzgl. der MatCalc Daten wurden eingefügt, welche eine Interpolation der Daten bzgl. der variablen Zeitschritte ermöglicht.
- Einige weiteren Zeilen bzgl. der MatCalc Daten wurden eingefügt, welche eine Weiterverarbeitung der Daten durchführt um sie in die Summenterme $\sum_{i=1}^n r_{mean,i}^2 \cdot N_{v,i}$ der Gleichungen 2.23 und 2.24 einzufügen.
- In Gleichung 2.21 wurde der Term $\frac{\beta \cdot R_{sbg}}{hb^2} \cdot v_g$ eingefügt, welcher ursprünglich aufgrund der Annahme von Yadav [3] vernachlässigt wurde, jedoch in Ghoniem [4] angeführt ist.
- Eine Bedingung (Ungleichung 2.19) nach Ghoniem [4] wurde eingefügt, welche Gleichung 2.18 in bestimmten Abschnitten in Gleichung 2.20 überführen kann. Dies wird in Kapitel 2.4.1 genauer erläutert.
- Eine weitere Auswahl wurde eingefügt, welche die Nutzung von Gleichung 2.30 anstelle von 2.9 ermöglicht.
- Einige Zeilen wurden eingefügt, welche die Auswahl von dem Auswahlfenster, welches in Abbildung 31 dargestellt ist, ermöglichen.
- Die Möglichkeit der Berechnung einer variablen Zeitschrittweite wurde eingefügt.
- Eine Abbruchbedingung wurde eingefügt, welche die Simulation bei einer Dehnung von 6% abbricht.

3.5.8. Änderungen in *plot_figures.m*

- Einige Plot-optionen, wie z.B.: Achsenbeschriftungen usw., wurden geringfügig geändert.

3.5.9. Änderungen in *CreepRate.m*

- In diesem File wurden keine Änderungen durchgeführt.

3.5.10. Neue *matlab.m* Files und *excel.xlsx* Files

Im Zuge der Erarbeitung der vorliegenden Arbeit wurden einige *matlab.m* Files adaptiert, und auch einige neue hinzugefügt. Die hinzugefügten Files lauten wie folgt und werden in den nachfolgenden Unterkapiteln genauer erläutert.

- *processing_MatCalc_data.m*
- *time_to_rupture_diagram.m*
- *Zeitstandsdaten.xlsx*

3.5.10.1. *processing_MatCalc_data.m*

Die Hauptaufgabe dieses Files wird mit der Importierung der MatCalc Daten beziffert. Anfangs wurde eine Abfrage bzgl. der Benennung der Microsoft Excel Files, welche die MatCalc Daten beinhalten, implementiert. Die anschließenden Zeilen des Codes bewerkstelligen eine Neuordnung der Spalten, was bereits in Kapitel 3.2 erläutert wurde und in Abbildung 30 abgebildet ist. Anschließend erfolgt eine Abfrage bzgl. der Vanadiumnitride, welche dann in die Kalkulation des Vorschlages bzgl. der Ausscheidungspositionen, was ebenso bereits in Kapitel 3.3.2.4 und Abbildung 34 gezeigt wurde, einfließt. Zuletzt erfolgt eine Ausschließung jener MatCalc Daten, welche den selben Zeitschritt bzw. Zeitpunkt aufweisen.

3.5.10.2. *time_to_rupture_diagram.m*

Dieses File hat die Hauptaufgabe, der Erstellung eines Zeitstanddiagrammes, welches beispielsweise in Abbildung 38 angeführt ist. Dies geschieht durch einige Abfragen, wie bereits in Abbildung 35 und 36 aufgezeigt. Referenziert wird dabei auf Experimentalwerte von ASME, ECCC und NIMS, welche ebenso in Abbildung 38 dargestellt sind.

3.5.10.3. *Zeitstandsdaten.xlsx*

Das Microsoft Excel File *Zeitstandsdaten.xlsx* beinhaltet die Experimentaldaten von den Zeitstanddiagrammen nach ASME, ECCC und NIMS für den P91 Stahl, wie in Abbildung 38 dargestellt. [81] [82] [83] Diese Werte werden eingelesen und die Simulation wird anschließend damit verglichen.

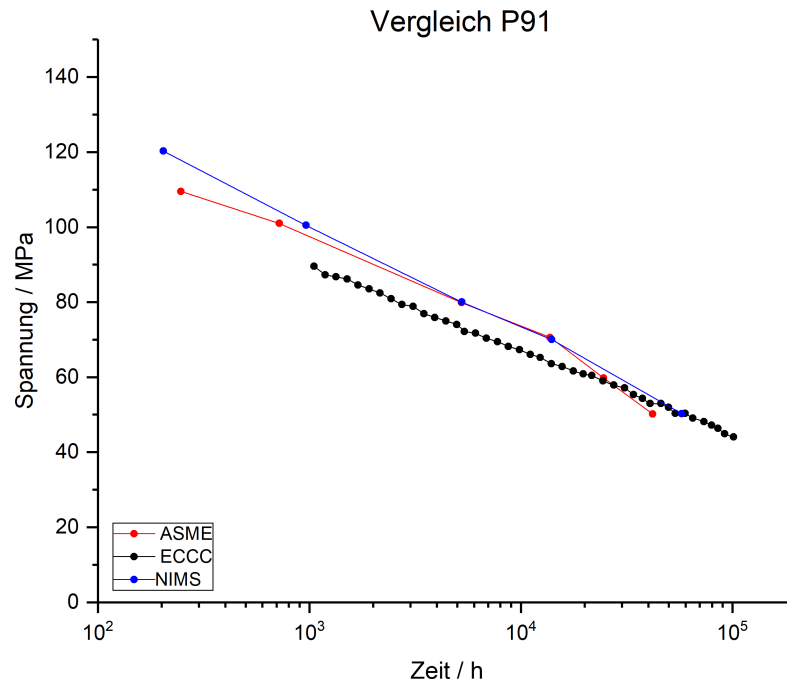


Abbildung 38.: Zeitstanddiagramm nach ASME, ECCO und NIMS [81] [82] [83]

4. Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit grafisch veranschaulicht und diskutiert, wobei aufgrund des hohen Umfanges einige Ergebnisse komprimiert im Anhang A.4.1, A.4.2, A.4.3 und A.4.4 veranschaulicht werden. Unterteilt wird dieses Kapitel in die Abschnitte der MatCalc Ergebnisse und der Matlab Ergebnisse, wobei bei den MatCalc Ergebnissen hauptsächlich auf den Service - Bereich eingegangen wird, da das Normalisieren und Anlassen für die Kriechsimulation des eigentlichen Betriebes prinzipiell irrelevant ist und nur benötigt wurde um die Startwerte der Ausscheidungsdaten zu berechnen.

4.1. Simulation der Ausscheidungskinetik (MatCalc)

In den Abbildungen 39, 40, 41 und 42 sind die Resultate der Durchmesser der Ausscheidungen und die Stückzahlen pro Volumen während der Bereiche Normalisieren und Anlassen dargestellt. Wie bereits erwähnt wird auf diese Bereiche nicht näher eingegangen.

Das Hauptaugenmerk liegt, bei den MatCalc Ergebnissen, auf denen des Service Bereiches. Dieser Bereich wurde über einem Zeitraum von 100.000 Stunden simuliert. Der Grund der langen simulierten Zeit, lag in der Suche eines möglichen Ausscheidens einer modifizierten Z-Phase. Wie bereits in Kapitel 2.4.3 erwähnt, hätte eine Ausscheidung der modifizierten Z-Phase eine rapide Minderung der Kriechfestigkeit mit sich gebracht. Im Zuge der Simulation über 100.000 Stunden wurde keine modifizierte Z-Phase gefunden.

4.1.1. Normalisieren

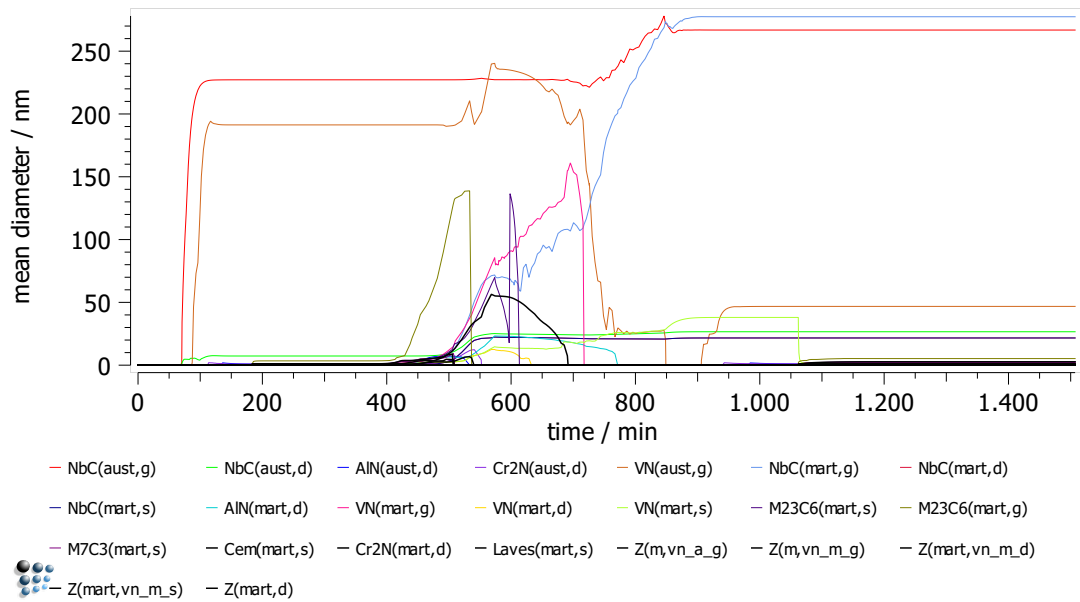


Abbildung 39.: Resultate der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Normalisieren

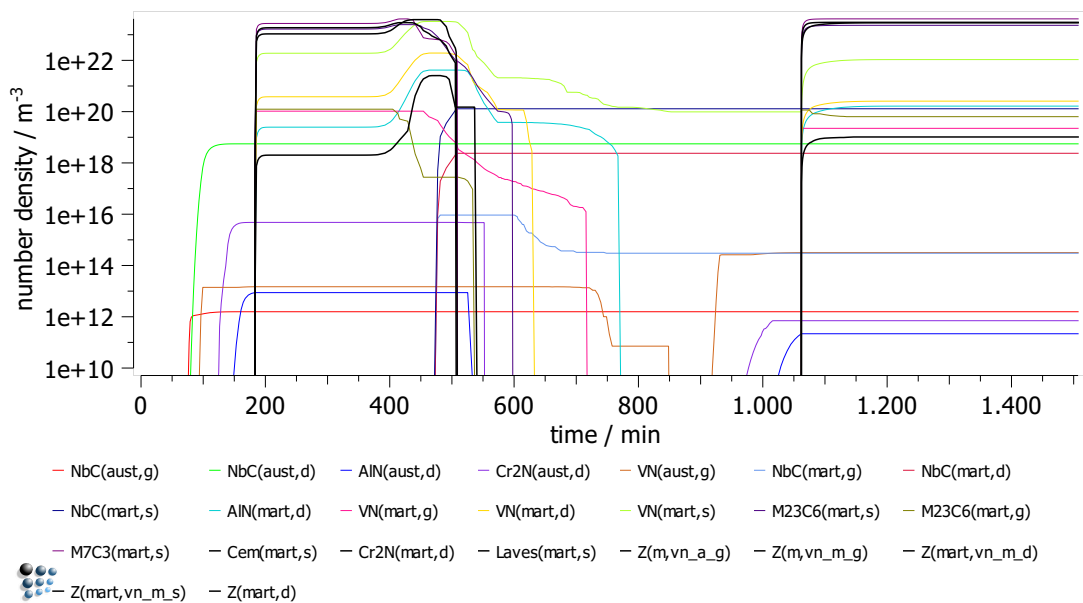


Abbildung 40.: Resultate der MatCalc Berechnung für die Stückzahlen pro Volumen der Ausscheidungen während dem Normalisieren

4.1.2. Anlassen

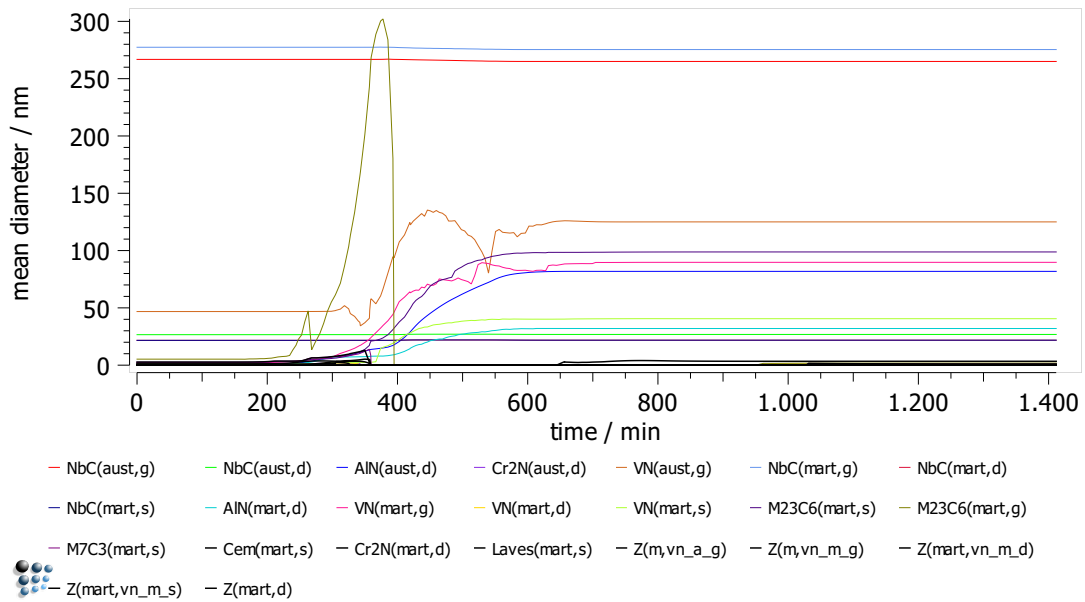


Abbildung 41.: Resultate der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Anlassen

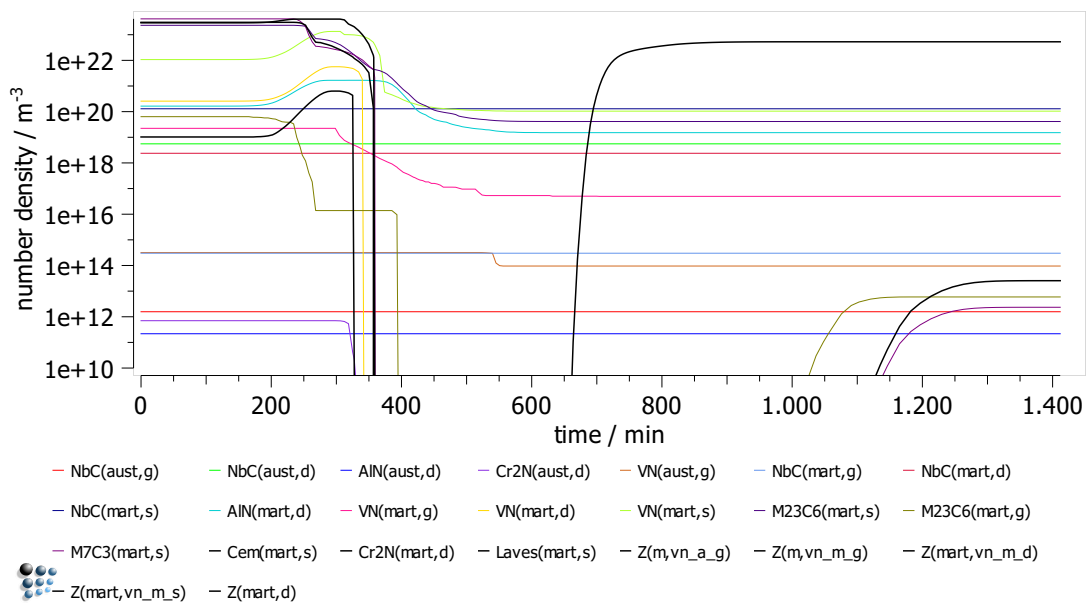


Abbildung 42.: Resultate der MatCalc Berechnung für die Stückzahlen pro Volumen der Ausscheidungen während dem Anlassen

4.1.3. Betrieb

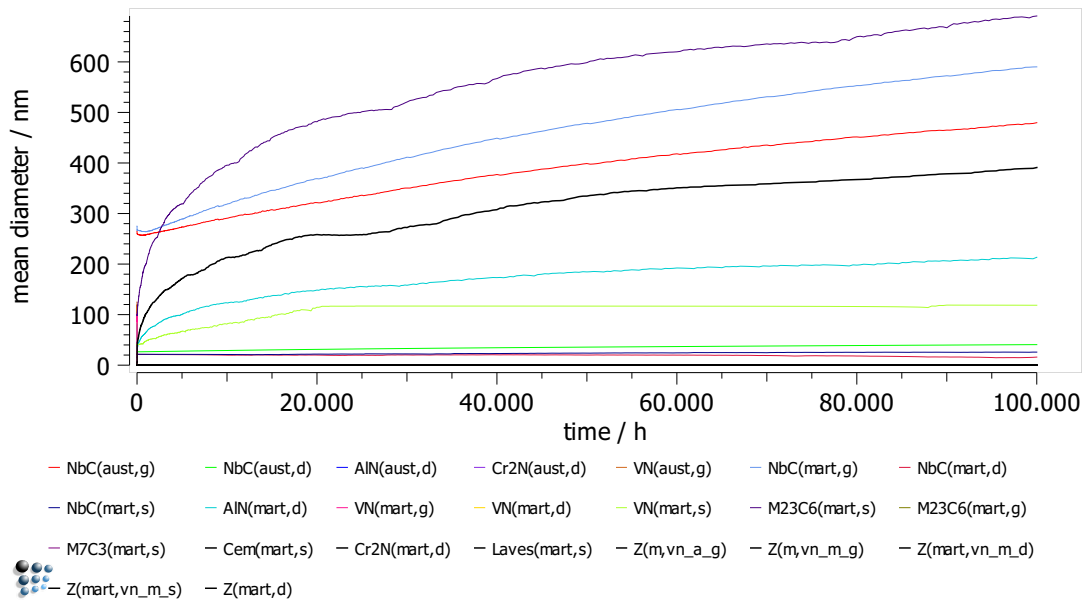


Abbildung 43.: Resultate der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Betrieb

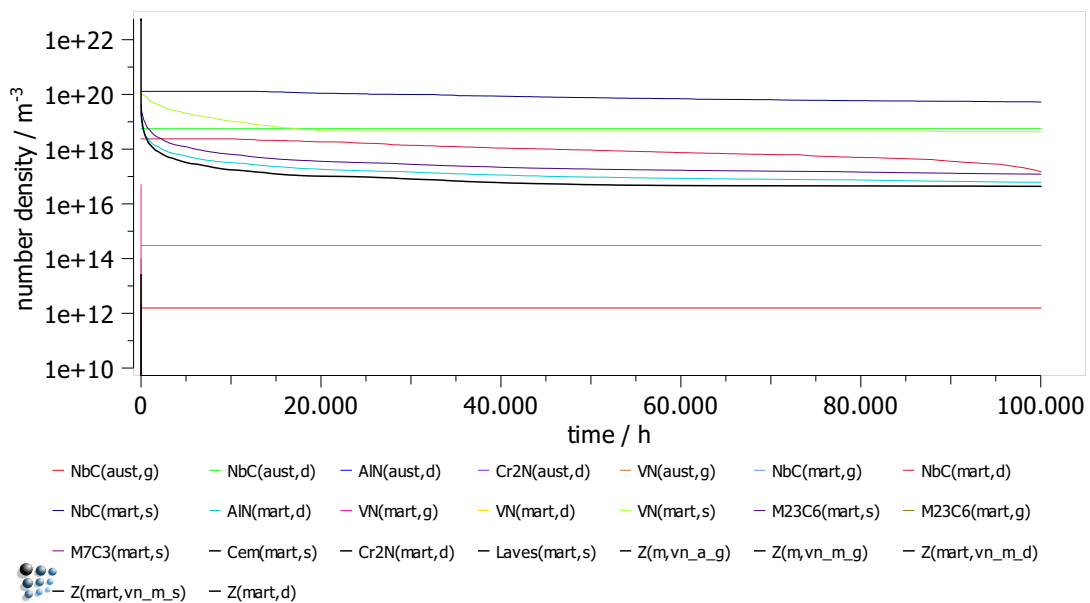


Abbildung 44.: Resultate der MatCalc Berechnung für Stückzahlen pro Volumen der Ausscheidungen während dem Betrieb

4.1. Simulation der Ausscheidungskinetik (MatCalc)

In den Abbildungen 43, 44 und 47 sind die Verläufe der Durchmesser der Ausscheidungen und der Stückzahlen pro Volumen, jeweils während dem Betrieb abgebildet. Wenn die Abbildungen miteinander verglichen werden, dann geht hervor, dass die Werte der Durchmesser prinzipiell steigen und die Werte der Stückzahlen pro Volumen prinzipiell fallen. Dieses Phänomen lässt sich durch die Vergrößerung beschreiben, da hier einzelne Ausscheidungen aufgrund der Vergrößerung durch andere annulliert werden.

Da der Bereich von 100.000 Stunden eine schlechte Skalierung aufzeigt wurde in Abbildung 45 und 46 jeweils ein Auszug der beiden Verläufe dargestellt. In den beiden Auszügen ist ersichtlich, dass in dem Anfangsbereich des Betriebs einige Ausscheidungen sehr abrupt annullieren.

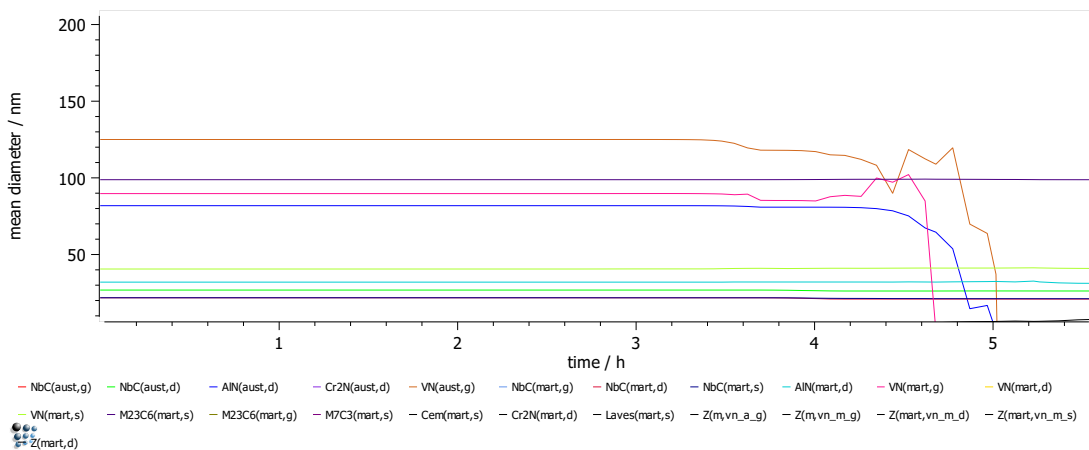


Abbildung 45.: Auszug der ersten Stunden von den Resultaten der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Betrieb

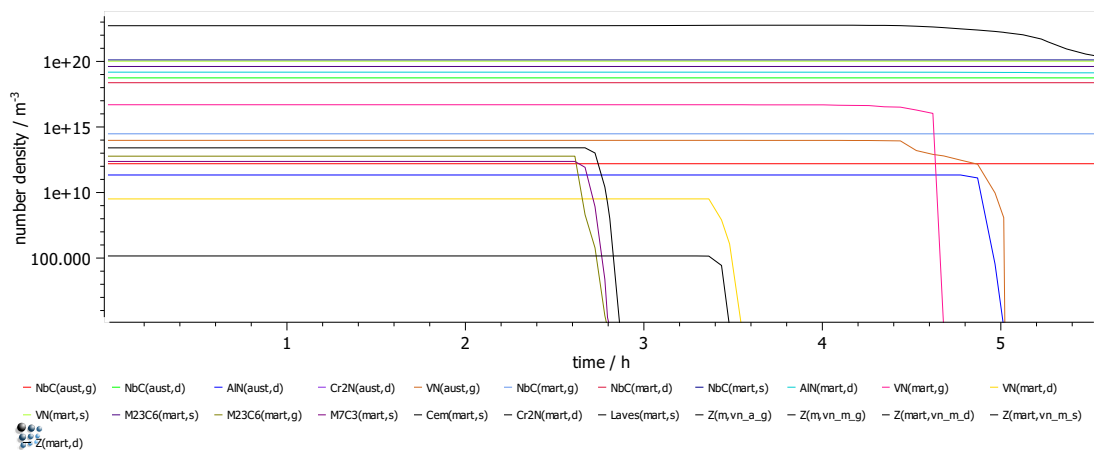


Abbildung 46.: Auszug der ersten Stunden von den Resultaten der MatCalc Berechnung für die Stückzahlen pro Volumen der Ausscheidungen während dem Betrieb

4.1. Simulation der Ausscheidungskinetik (MatCalc)

auto	NbC(aust,g)	auto	NbC(aust,d)	auto	AlN(aust,d)	auto	Cr2N(aust,d)
0	265,024534	0	26,8153659	0	81,8516052	0	0
2,78E-16	265,024534	2,78E-16	26,8153659	2,78E-16	81,8516052	2,78E-16	0
1,67E-15	265,024534	1,67E-15	26,8153659	1,67E-15	81,8516052	1,67E-15	0
8,61E-15	265,024534	8,61E-15	26,8153659	8,61E-15	81,8516052	8,61E-15	0
4,33E-14	265,024534	4,33E-14	26,8153659	4,33E-14	81,8516052	4,33E-14	0
2,17E-13	265,024534	2,17E-13	26,8153659	2,17E-13	81,8516052	2,17E-13	0
1,09E-12	265,024534	1,09E-12	26,8153659	1,09E-12	81,8516052	1,09E-12	0
5,43E-12	265,024534	5,43E-12	26,8153659	5,43E-12	81,8516052	5,43E-12	0
2,71E-11	265,024534	2,71E-11	26,8153659	2,71E-11	81,8516052	2,71E-11	0
1,36E-10	265,024534	1,36E-10	26,8153659	1,36E-10	81,8516052	1,36E-10	0
6,78E-10	265,024534	6,78E-10	26,8153659	6,78E-10	81,8516052	6,78E-10	0
3,39E-09	265,024534	3,39E-09	26,8153659	3,39E-09	81,8516052	3,39E-09	0
1,70E-08	265,024534	1,70E-08	26,8153659	1,70E-08	81,8516052	1,70E-08	0
8,48E-08	265,024534	8,48E-08	26,8153659	8,48E-08	81,8516052	8,48E-08	0
4,24E-07	265,024534	4,24E-07	26,8153659	4,24E-07	81,8516052	4,24E-07	0
2,12E-06	265,024534	2,12E-06	26,8153659	2,12E-06	81,8516052	2,12E-06	0
1,06E-05	265,024534	1,06E-05	26,8153659	1,06E-05	81,8516052	1,06E-05	0
5,30E-05	265,024534	5,30E-05	26,8153659	5,30E-05	81,8516052	5,30E-05	0
0,00026491	265,024534	0,00026491	26,8153659	0,00026491	81,8516052	0,00026491	0
0,00132455	265,024534	0,00132455	26,8153659	0,00132455	81,8516052	0,00132455	0
0,00662274	265,024534	0,00662274	26,8153659	0,00662274	81,8516052	0,00662274	0
0,03311369	265,024534	0,03311369	26,8153659	0,03311369	81,8516052	0,03311369	0
0,11728878	265,024534	0,11728878	26,8153659	0,11728878	81,8516052	0,11728878	0
0,20146386	265,024534	0,20146386	26,8153659	0,20146386	81,8516052	0,20146386	0
0,28563894	265,024534	0,28563894	26,8153659	0,28563894	81,8516052	0,28563894	0
0,36981403	265,024534	0,36981403	26,8153659	0,36981403	81,8516052	0,36981403	0
0,45398911	265,024534	0,45398911	26,8153659	0,45398911	81,8516052	0,45398911	0
0,5381642	265,024534	0,5381642	26,8153659	0,5381642	81,8516052	0,5381642	0
0,62233928	265,024534	0,62233928	26,8153659	0,62233928	81,8516052	0,62233928	0
0,70651436	265,024534	0,70651436	26,8153659	0,70651436	81,8516052	0,70651436	0
0,79068945	265,024534	0,79068945	26,8153659	0,79068945	81,8516052	0,79068945	0
0,87486453	265,024534	0,87486453	26,8153659	0,87486453	81,8516052	0,87486453	0
0,95903962	265,024534	0,95903962	26,8153659	0,95903962	81,8516052	0,95903962	0
1,0432147	265,024534	1,0432147	26,8153659	1,0432147	81,8516052	1,0432147	0
1,12738979	265,024534	1,12738979	26,8153659	1,12738979	81,8516052	1,12738979	0
1,21156487	265,024534	1,21156487	26,8153659	1,21156487	81,8516052	1,21156487	0
1,29573995	265,024534	1,29573995	26,8153659	1,29573995	81,8516052	1,29573995	0
1,37991504	265,024534	1,37991504	26,8153659	1,37991504	81,8516052	1,37991504	0
1,46409012	265,024534	1,46409012	26,8153659	1,46409012	81,8516052	1,46409012	0
1,54826521	265,024534	1,54826521	26,8153659	1,54826521	81,8516052	1,54826521	0
1,63244029	265,024534	1,63244029	26,8153659	1,63244029	81,8516052	1,63244029	0
1,71661538	265,024534	1,71661538	26,8153659	1,71661538	81,8516052	1,71661538	0
1,80079046	265,024534	1,80079046	26,8153659	1,80079046	81,8516052	1,80079046	0
1,88496554	265,024534	1,88496554	26,8153659	1,88496554	81,8516052	1,88496554	0
1,96914063	265,024534	1,96914063	26,8153659	1,96914063	81,8516053	1,96914063	0
2,05331571	265,024534	2,05331571	26,8153659	2,05331571	81,8516053	2,05331571	0
2,1374908	265,024534	2,1374908	26,8153659	2,1374908	81,8516054	2,1374908	0
2,22166588	265,024534	2,22166588	26,8153659	2,22166588	81,8516054	2,22166588	0
2,30584096	265,024534	2,30584096	26,8153659	2,30584096	81,8516056	2,30584096	0

Abbildung 47.: Tabellarischer Auszug der ersten Stunden von den Resultaten der MatCalc Berechnung für die Durchmesser der Ausscheidungen während dem Betrieb

4.2. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Vorstudien (Matlab)

In diesem Kapitel wird das bestehende Matlab – Modell, welches als Ausgangspunkt für die vorliegende Arbeit verwendet wurde, näher erklärt. Abbildung 48 beschreibt dabei die Dehnung über die Zeit als Ergebnis der Ausgangsfassung des Matlab – Modelles. Dieses Ergebnis weist keinen primären Kriechbereich auf und die Abweichung zu den hinterlegten Messwerten ist relativ groß, obwohl das vorliegende Ergebnis hinsichtlich der Fit - Parameter bereits optimiert wurde. Einen weiteren Anreiz zur Verbesserung des bestehenden Modelles setzte der Vergleich des bestehenden Simulationsergebnisses des Subkornradius, welches in Abbildung 49 veranschaulicht ist, mit den zugehörigen Experimentalwerten. Die Simulationsdaten weichen im Gegensatz zu den zugehörigen Experimentalwerten nach Yadav [3] um einen Faktor 10 ab.

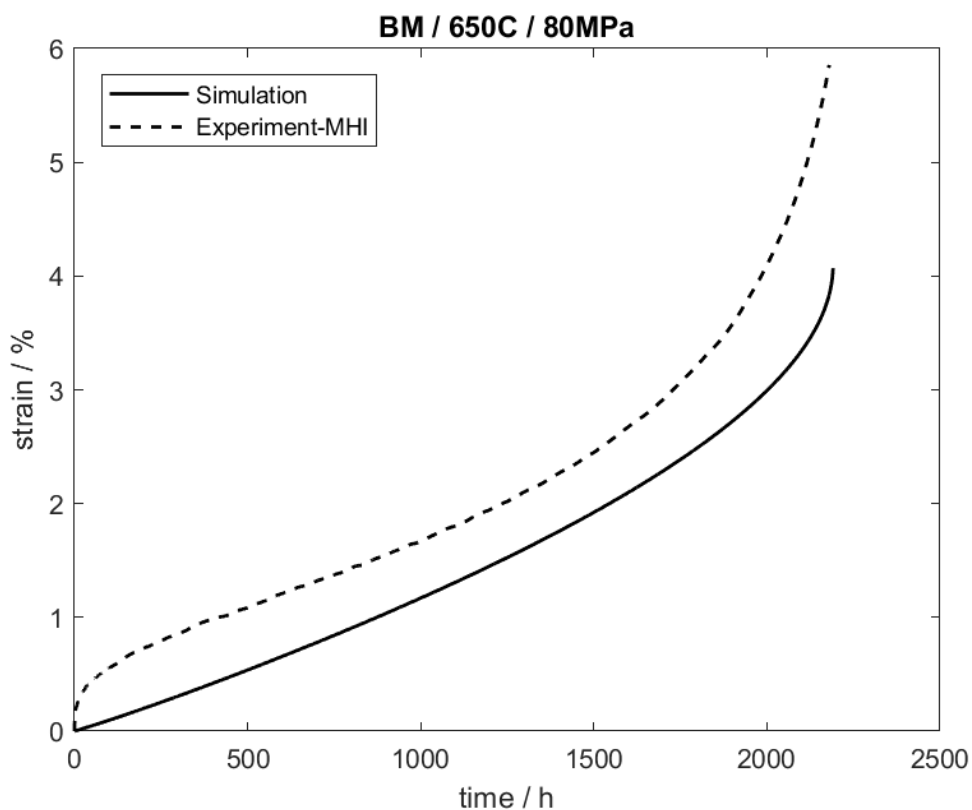


Abbildung 48.: Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650° in der Ausgangskonfiguration des Matlab - Codes, nach [2]

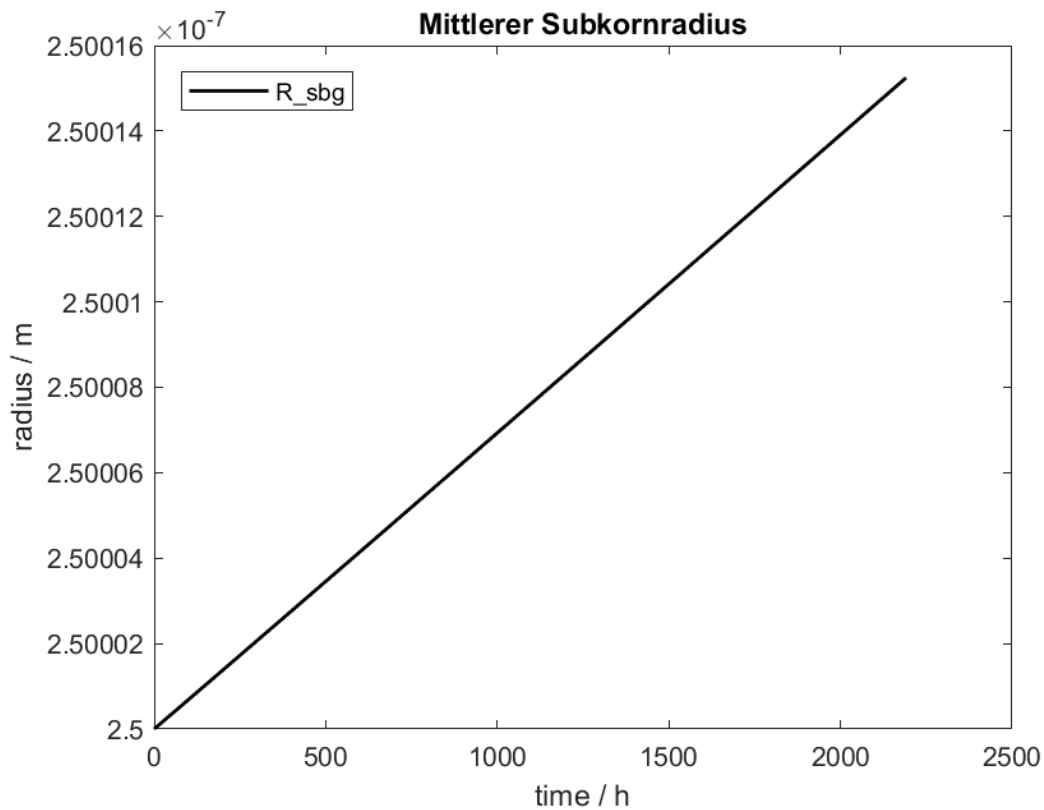


Abbildung 49.: Mittlerer Subkornradius R_{sbg} in der Ausgangskonfiguration des Matlab - Codes, nach [2]

Aufgrund der großen Abweichungen zu den Experimentalwerten wird eine Verbesserung des Modelles angestrebt. Nach einer ersten Einschätzung wurden folgende Verbesserungspotentiale identifiziert:

- Prüfung des bestehenden Codes auf Richtigkeit.
- Prüfung der Diffusionskoeffizienten auf ihre Richtigkeit, um diese Fehlerquelle hinsichtlich der Abweichung von R_{sbg} auszuschließen.
- Einstellung der Fit – Parameter a_1 , A und d_{anh} um einen korrekten primären Kriechbereich zu simulieren.
- Implementierung einer Nutzung von MatCalc – Daten, um genauere Ausscheidungsdaten in die Berechnung einbinden zu können.

4.3. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Verbesserungen (Matlab)

Der erste Schritt in der Bearbeitung des Modelles, war eine Prüfung auf Richtigkeit des bestehenden Modelles. Diese Prüfung führte zu dem Ergebnis, dass die Gleichungen 2.7, 2.21, 2.11 und 2.13 falsch in dem Code abgebildet wurden. Die Richtigstellung dieser Gleichungen, bewirkte die Änderung, welche in Abbildung 50 dargestellt ist. Wird Abbildung 50 mit 48 verglichen, so geht hervor, dass die Richtigstellung der Fehler zu einem weiteren Abweichen von den Messwerten führte.

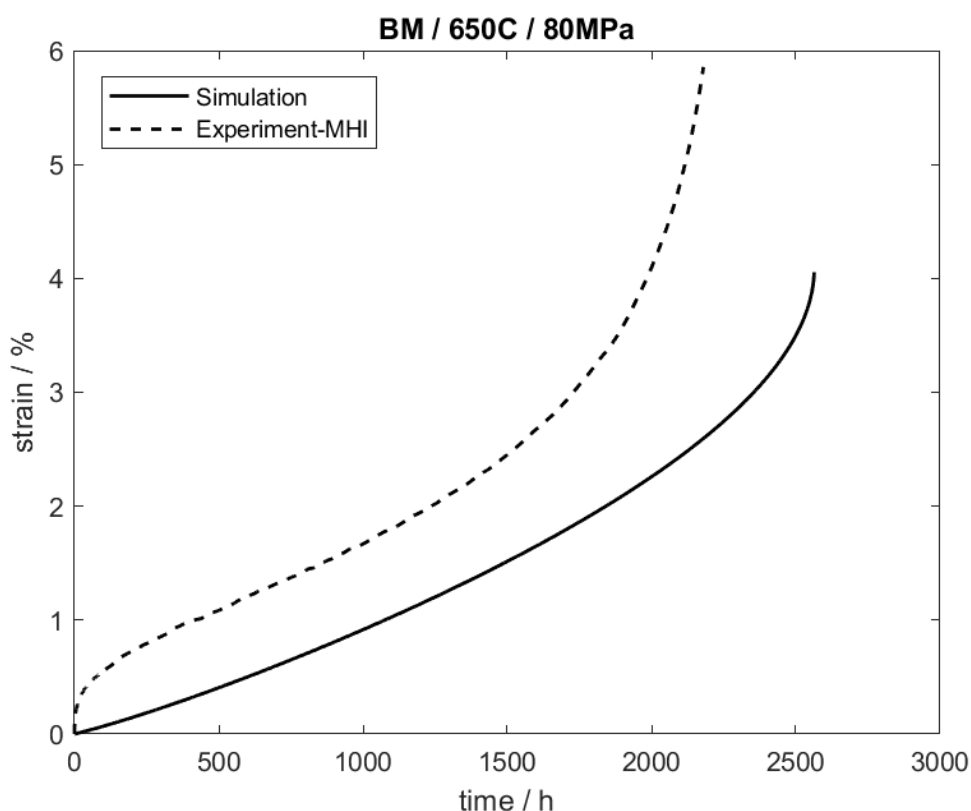


Abbildung 50.: Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von 80MPa und 650° , nach Richtigstellung der Gleichungen 2.7, 2.21, 2.11 und 2.13

Nach der Einarbeitung der in Kapitel 4.2 aufgelisteten Verbesserungspotentiale, wurden die Diffusionskoeffizienten aufgrund von starken Abweichungen von verschiedenen Literaturquellen, wie bereits in Kapitel 2.5 erwähnt, als Fit – Parameter verwendet. Aus dieser weiteren Einstellungsmöglichkeit resultiert eine sehr gute Anpassung der Simulationsdaten, an die Experimentalwerte nach Yadav [3]. Trotz der verbesserten Anpassungsmöglichkeit durch die Variation der Diffusionskoeffi-

4.3. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Verbesserungen (Matlab)

zienten lieferte die Berechnung von R_{sbg} kein befriedigendes Ergebnis. Erst die Erweiterung von Gleichung 2.21, welche die Mobilität der Subkorgrenzen berechnet, auf Gleichung 2.20, welche eine Variation der Berechnung der Mobilität der Subkorgrenzen in gewissen Zeitabschnitten ermöglicht und bereits in Kapitel 2.4.1 beschrieben wurde, lieferte eine sehr gute Übereinstimmung der Simulationsdaten von R_{sbg} zu den Experimentalwerten, was in Abbildung 51 dargestellt ist.

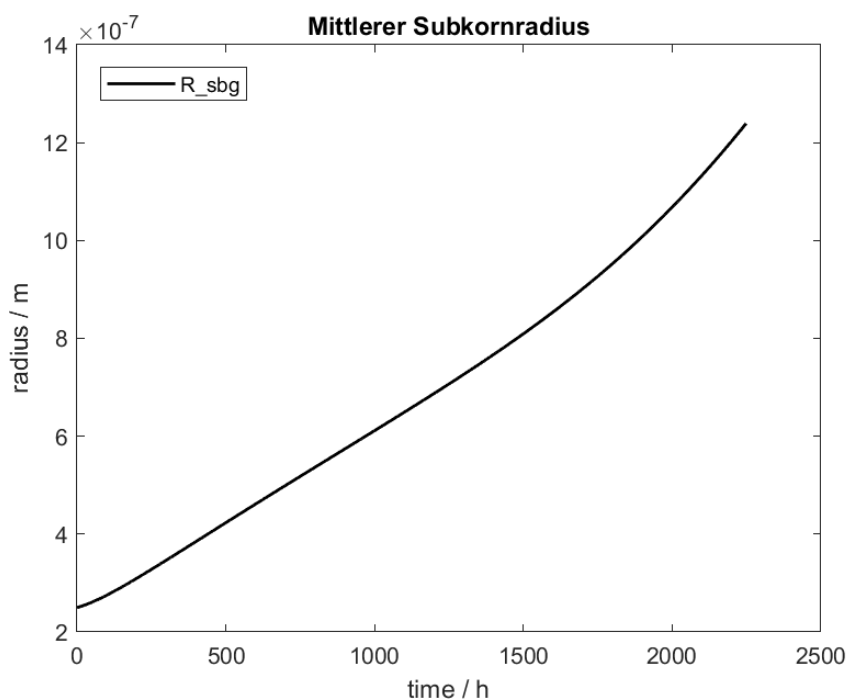


Abbildung 51.: Mittlerer Subkornradius R_{sbg} nach Einstellung der Diffusionskoeffizienten

Die Variation der Fit – Parameter a_1 , A und d_{anh} lieferte kein zufriedenstellendes Ergebnis. Aufgrund dieser Tatsache, wurde in Gleichung 2.21 der Term "Dislocation subgrain emission", wie in Ghoniem [4] aufgezeigt, eingefügt. Diese Erweiterung führte durch den zusätzlichen Fit - Parameter β zu einer besseren Einstellungsmöglichkeit und zu sehr guten Resultaten, welche beispielsweise in Abbildung 52 und 53 angeführt sind.

Um eine schnellere Eingabe der Fit – Parameter zu ermöglichen, wurde ein verbessertes Graphical User Interface (GUI) implementiert, welches bereits in Kapitel 3.3.2 diskutiert wurde.

Die Ermöglichung einer Nutzung von MatCalc Daten bewirkte eine sehr starke Erhöhung der Berechnungsdauer. Um diesem Phänomen entgegen zu wirken wurde eine variable Schrittweite, wie bereits in Kapitel 3.3.3 erläutert, implementiert. Dadurch liefert der Code sehr schnelle Berechnungen, bei hinreichend genauen Ergebnissen.

4.4. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Endergebnisse (Matlab)

Eine weitere Erweiterung war die Einführung einer effektiven Geschwindigkeit von mobilen Versetzungen v_{eff} , welche durch Gleichung 2.30 berechnet wird. Die Variable v_{eff} stellt eine Erweiterung zur Gleitgeschwindigkeit der Versetzungen v_g , welche durch Gleichung 2.9 berechnet wird. Eine genaue Erläuterung von v_{eff} erfolgt in Kapitel 2.4.1.

Die Möglichkeit ein Zeitstanddiagramm auszugeben wurde als letzte Erweiterung hinzugefügt. Dadurch ist es möglich mehrere verschiedene Berechnungen unter verschiedenen beaufschlagten Spannungen durchzuführen und diese gesammelt in einem Zeitstanddiagramm, wie beispielsweise in Abbildung 60 abgebildet, auszugeben.

In der folgenden Aufzählung sind alle Erweiterungen des Codes kompakt zusammengefasst:

- Ausbesserung fehlerhafter Code - Segmente.
- Einführung der neuen Fit - Parameter β , D_s und D_{vp} in den Gleichungen 2.21, 2.13, 2.11, 2.18 und 2.20.
- Einstellung der Fit – Parameter a_1 , A , d_{anh} , β , D_s und D_{vp} in den Gleichungen 2.9, 2.29, 2.21, 2.13, 2.11, 2.18 und 2.20.
- Implementierung von MatCalc - Daten.
- Einführung einer variablen Schrittweite.
- Verbesserung des GUI.
- Einführung von v_{eff} mittels Gleichung 2.30.
- Einführung einer Unterscheidungsmöglichkeit von M_{sb} mittels Ungleichung 2.19.

4.4. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Endergebnisse (Matlab)

In diesem Kapitel werden die Simulationsergebnisse von Matlab näher erläutert. Wobei nur auf die wichtigsten Ergebnisse näher eingegangen wird. Eine vollständige und komprimierte Zusammenfassung aller Graphen ist in Anhang A.4.1, A.4.2, A.4.3 und A.4.4 visualisiert. Alle in diesem Kapitel, bis auf wenige explizit erwähnten Ausnahmen, aufgezeigten Ergebnisse wurden mit der modifizierten Orowan Gleichung, wie in Gleichung 2.25 aufgezeigt und mit der Gleitgeschwindigkeit v_g , wie in Gleichung 2.9 beschrieben, berechnet. Diese Berechnungsmöglichkeit wurde bereits in Kapitel 3.3.2.1 und mit Abbildung 31 beschrieben.

4.4.1. Simulationsergebnisse - Dehnung ε

In den Abbildungen 52 und 53 sind jeweils die Simulationsergebnisse der Dehnung über die Zeit abgebildet. Die beiden Abbildungen veranschaulichen jeweils die Ergebnisse von zwei Simulationen unter Verwendung der modifizierten Orowan Gleichung (Gleichung 2.25) mit identer Temperatur und werden jeweils Experimentalwerten bei entsprechender Temperatur gegenübergestellt.

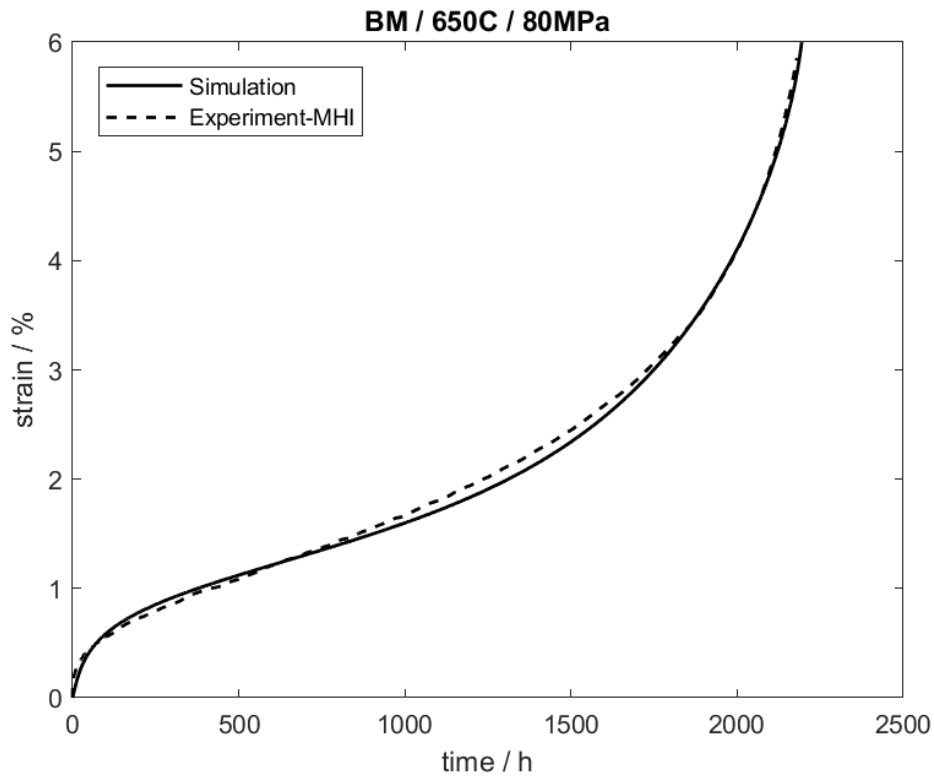


Abbildung 52.: Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650° mit den zugehörigen Fit - Parametern, welche in Tabelle 4 aufgelistet sind.

4.4. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Endergebnisse (Matlab)

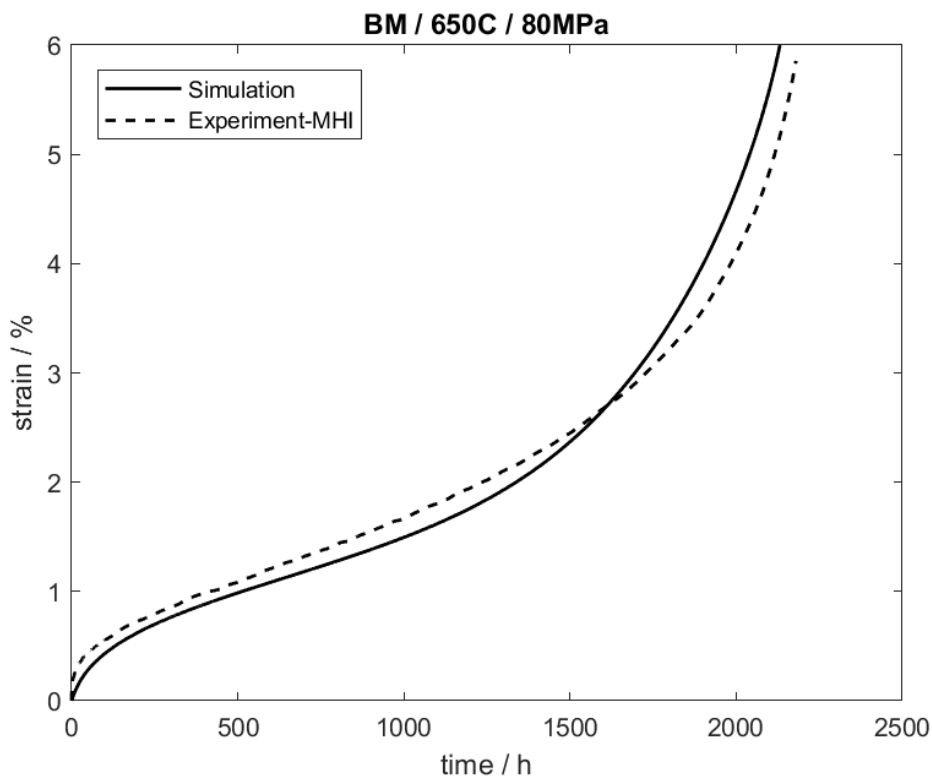


Abbildung 53.: Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von 80MPa und 650° mit den zugehörigen Fit - Parametern, welche in Tabelle 4 aufgelistet sind.

Bei genauerer Betrachtung ist festzustellen, dass Abbildung 52 um einiges näher an den Experimentalwerten ist, als Abbildung 53. Dieser Umstand geht aufgrund von unterschiedlichen Startwerten der Versetzungsdichten und unterschiedlichen Fit - Parametern hervor. In Tabelle 4 sind die unterschiedlichen Werte gegenübergestellt.

Tabelle 4.: Gegenüberstellung einiger Fit - Parameter

	Abbildung 52	Abbildung 53
a_1	600	1000
A	455	350
d_{anh}	$6,5 \cdot 10^{-8}$	$5,9 \cdot 10^{-8}$
β	0	$6 \cdot 10^7$
Startwert von ρ_m	$7 \cdot 10^{14}$	$4 \cdot 10^{14}$
Startwert von ρ_{dip}	$1 \cdot 10^{14}$	$5 \cdot 10^{13}$
Startwert von ρ_b	$2 \cdot 10^{14}$	$2 \cdot 10^{14}$

4.4. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Endergebnisse (Matlab)

Ausschlaggebend ist hierbei der Startwert von ρ_m . Die Verringerung dieses Wertes führt zu der Abflachung des primären Kriechbereiches, wie sie in Abbildung 53 im Gegensatz zu Abbildung 52 dargestellt ist. Trotz des "besseren" Ergebnisses, welches in Abbildung 52 veranschaulicht ist, muss der Startwert von ρ_m abgeändert werden, was schließlich zu dem Ergebnis führt, welches in Abbildung 53 veranschaulicht ist. Der Grund dieses Umstandes ist mit den Gleichungen 2.8, 2.6 und 2.7 veranschaulicht. Wird die Kriechsimulation beispielsweise mit der Konfiguration der Fit - Parameter durchgeführt, welche das "bessere" Ergebnis liefern, welches in Abbildung 52 veranschaulicht ist und mit einer geringeren Spannung, als die abgebildeten 80MPa, beaufschlagt, so erzielt Gleichung 2.8 ein negatives Ergebnis. Dieser Umstand ist physikalisch nicht korrekt. Ein weiterer kritischer Punkt, ist die Berechnung ohne beaufschlagte Spannung (0 MPa). Egal, wie niedrig der Wert von ρ_m ist, das Ergebnis, welches Gleichung 2.8 liefert, ist immer negativ. Darum wurden die Parameter, wie im rechten Abschnitt von Tabelle 4 gewählt. Diese Konfiguration liefert ein passendes Ergebnis, wie in Abbildung 53 veranschaulicht und lässt eine korrekte Berechnung bis 50MPa zu. In Abbildung 54 sind beispielsweise einige Simulationsergebnisse unter verschiedenen Spannung veranschaulicht

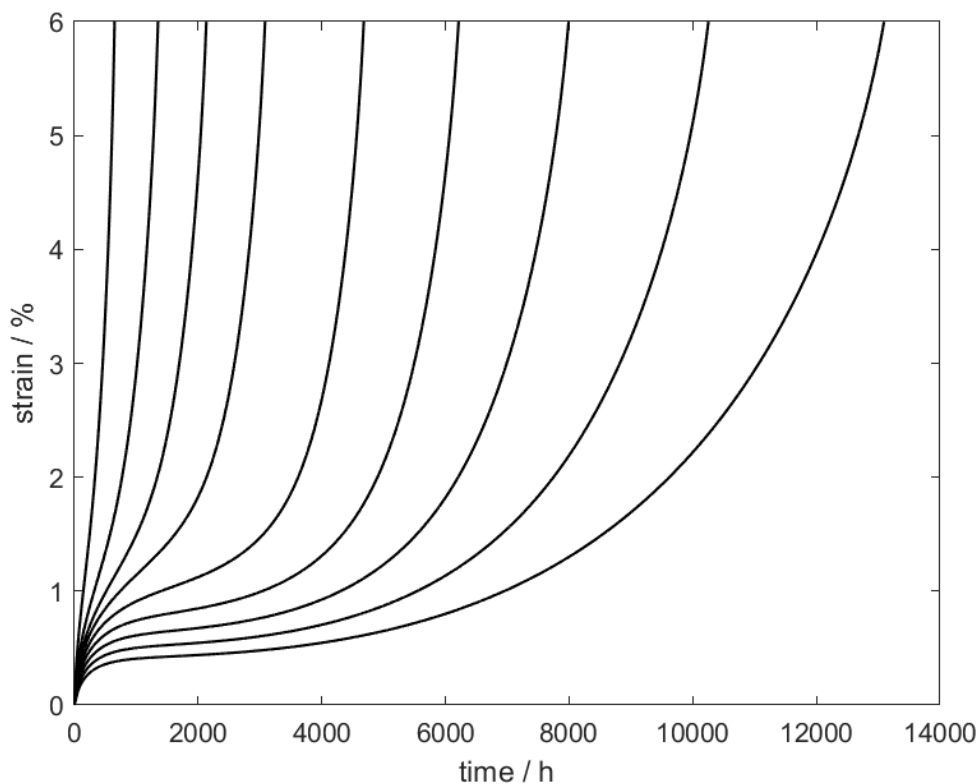
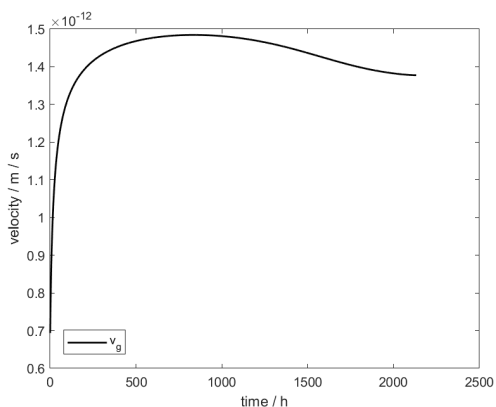


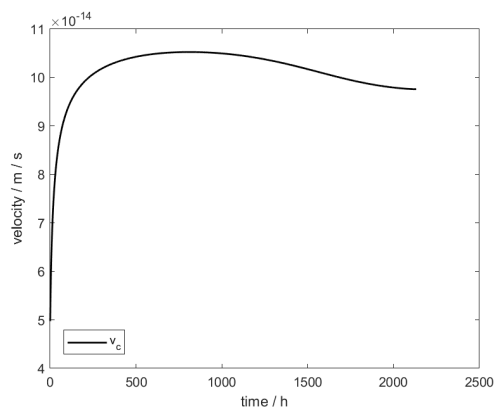
Abbildung 54.: Dehnungen ε unter Beaufschlagung von 120, 90, 80, 75, 70, 65, 60, 55 und 50 MPa bei jeweils 650°C

4.4.2. Simulationsergebnisse - Geschwindigkeiten v_g , v_c , v_{eff} und $v_{c_{konst}}$

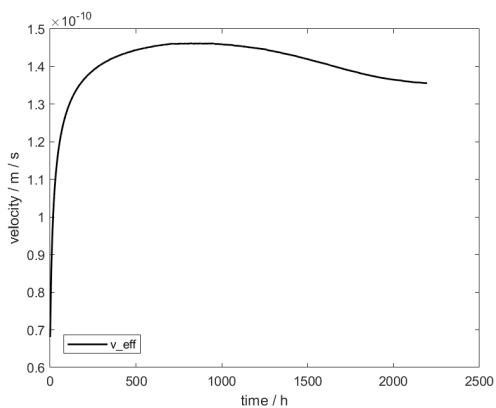
In Abbildung 55 sind die Simulationsergebnisse von der Gleitgeschwindigkeit der Versetzungen v_g , der Klettergeschwindigkeit von Versetzungen v_c , der effektiven Geschwindigkeit von mobilen Versetzungen v_{eff} und die konstante Klettergeschwindigkeit von Versetzungen $v_{c_{konst}}$, welche als Fit-Parameter verwendet wird, veranschaulicht. Um ein aussagekräftiges Ergebnis zu bekommen, wurde die Simulation jeweils einmal mit v_g und einmal mit v_{eff} berechnet. Der Unterschied hierbei wurde bereits in Kapitel 3.3.2.1 erläutert und in Kapitel 2.4.1 mathematisch dargestellt.



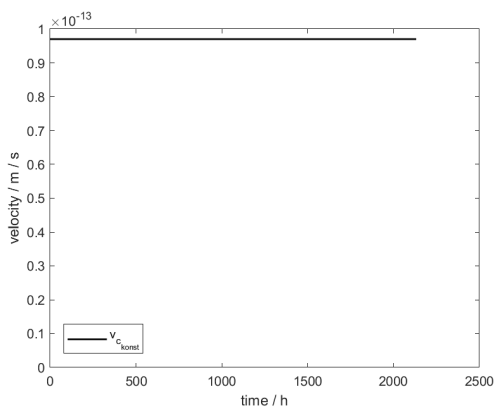
(a) Gleitgeschwindigkeit der Versetzungen



(b) Klettergeschwindigkeit der Versetzungen



(c) Effektive Geschwindigkeit der mobilen Versetzungen



(d) Konstante Klettergeschwindigkeit der Versetzungen

Abbildung 55.: Geschwindigkeiten von Versetzungen

4.4.3. Simulationsergebnisse - ρ_m , ρ_{dip} , ρ_b und R_{sbg}

In diesem Unterkapitel werden die Ergebnisse der Berechnungen von ρ_m , ρ_{dip} , ρ_b und R_{sbg} näher erläutert. In Tabelle 5 sind jeweils die Startwerte der entsprechenden Variablen aufgetragen.

Tabelle 5.: Startwerte - ρ_m , ρ_{dip} , ρ_b und R_{sbg}

Startwert von ρ_m	$7 \cdot 10^{14}$
Startwert von ρ_{dip}	$1 \cdot 10^{14}$
Startwert von ρ_b	$2 \cdot 10^{14}$
Startwert von R_{sbg}	$2,5 \cdot 10^{-7}$

Die in Abbildung 56 dargestellten Versetzungsdichten weisen alle sehr hohe Startwerte auf. Der Wert der mobilen Versetzungsdichte, wie in Abbildung 56(a) dargestellt, sinkt im Verlauf der Zeit rapide. Der Grund für diese Änderung wird mit der Vernichtung und Bildung von Versetzungsdipolen (Abbildung 56(b)) beziffert, welche sich in Subkornversetzungen transformieren. Aus diesem Grund steigt zu Beginn die Versetzungsdichte der Subkörner, wie in Abbildung 56(c) dargestellt. Mit Erhöhung der Dehnung ε fällt die Versetzungsdichte der Subkörner, aufgrund von der Vergrößerung der Subkörner, wie in Abbildung 56(d) dargestellt. [3] [55]

4.4. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Endergebnisse (Matlab)

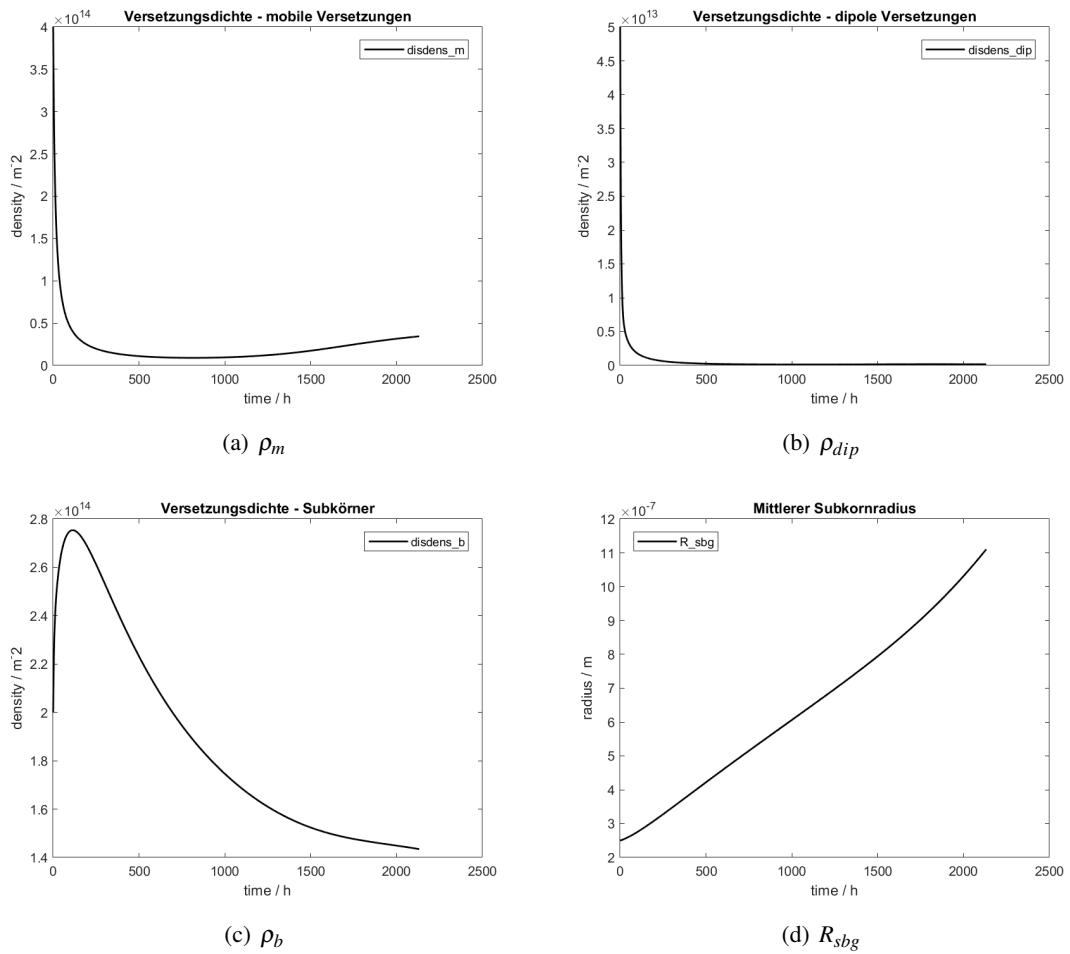


Abbildung 56.: Verläufe von ρ_m , ρ_{dip} , ρ_b und R_{sbg}

4.4.4. Simulationsergebnisse - σ_{app} , σ_i und σ_{eff}

In Abbildung 57 sind die durch Gleichung 2.8, 2.6 und 2.7 berechneten Spannungen veranschaulicht. Diese Spannungen wurden bereits in Kapitel 2.4.1 näher erläutert.

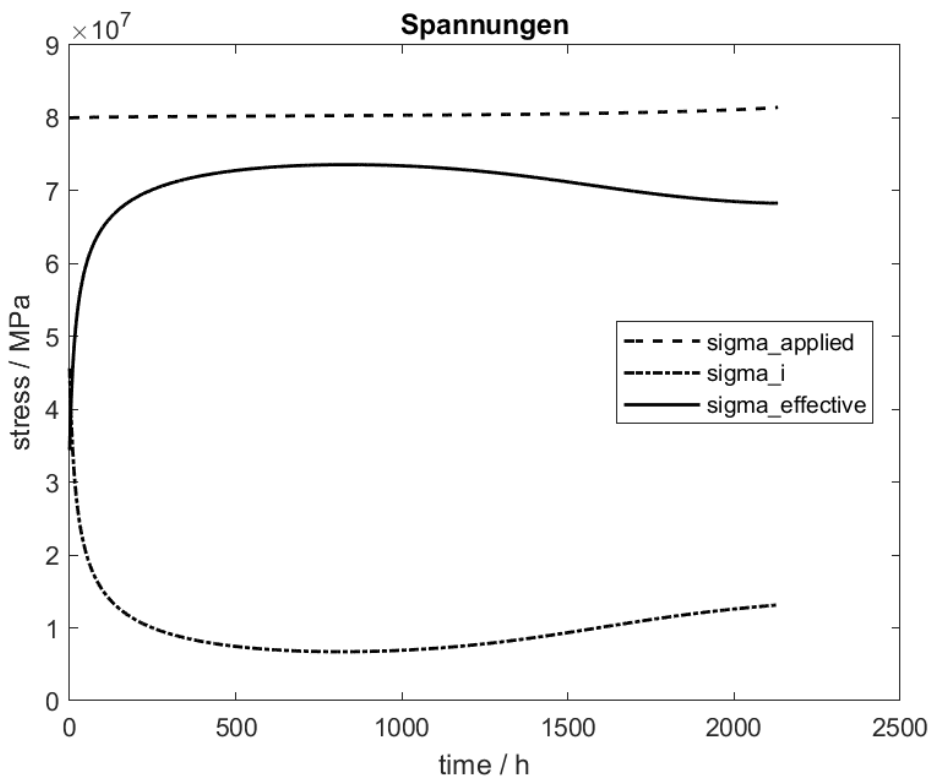


Abbildung 57.: Simulationsergebnisse der Spannungen σ_{app} , σ_i und σ_{eff}

4.4.5. Simulationsergebnisse - Unterschiedliche Berechnungsmöglichkeiten

In diesem Unterkapitel soll der Unterschied, der verschiedenen Berechnungsmöglichkeiten, unter gleichen Fit - Parametern, betrachtet werden. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die originale Orowan - Gleichung, wie in Gleichung 2.5 aufgezeigt, im Gegensatz zur modifizierten Orowan - Gleichung, wie in Gleichung 2.25 aufgezeigt, nur für den primären und sekundären Bereich gültig ist. Um diese Berechnungsmöglichkeit sinnvoll nutzen zu können, war es notwendig die Berechnung nach dem sekundären Bereich, zu beenden. Dies wurde ermöglicht, durch die Einführung eines Breaks bei 3% Dehnung.

Abbildung 58 zeigt eine Gegenüberstellung der verschiedenen Berechnungsmöglichkeiten bei gleichen Fit - Parametern, welche wie in Tabelle 6 definiert sind. Eine vollständige Auflistung aller verwendeten Parametern und Konstanten mit ihren zugehörigen Zahlenwerten ist in Anhang A.1 und A.4.1 abgebildet.

Die veranschaulichte Gegenüberstellung zeigt prinzipiell zwei eklatante Unterschiede, welche durch die Berechnung mit oder ohne Damage hervorgehen. Werden nur die drei Kurven betrachtet, welche auch einen tertiären Bereich zeigen, so geht ein sehr geringer Unterschied hervor. Dies liegt vor allem daran, dass die Vergrößerungsrate k_d in Gleichung 2.31, welche die Ostwald - Reifung beschreibt, an das Ergebnis der MatCalc Berechnung angepasst wurde und somit ein identes Ergebnis liefert. Die Berechnung mittels Gleichung 2.30 zeigt ebenso ein sehr ähnliches Ergebnis auf, was darauf schließen lässt, dass alle drei Berechnungsmöglichkeiten sehr plausible Ergebnisse liefern.

Werden die drei Kurvenverläufe betrachtet, welche keinen tertiären Bereich beinhalten, so geht ebenfalls eine sehr hohe Ähnlichkeit hervor. Auch in diesem Fall ist dies mit der Anpassung der Vergrößerungsrate k_d zu beziffern.

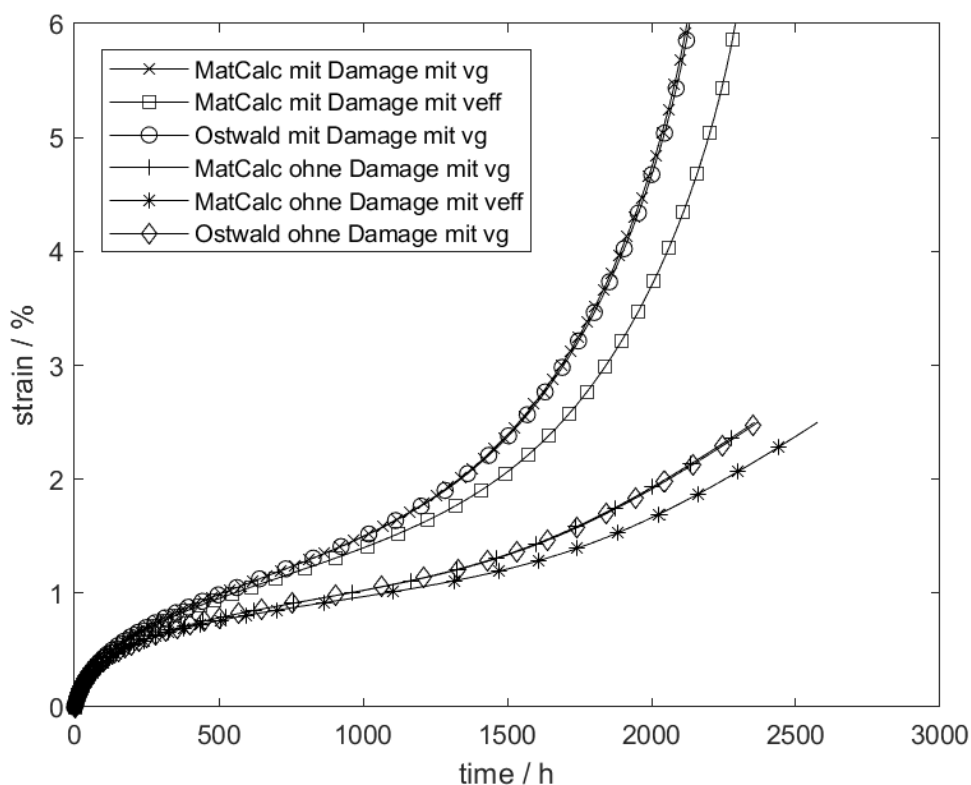


Abbildung 58.: Simulationsergebnisse der verschiedenen Berechnungsmöglichkeiten

Tabelle 6.: Verwendete Fit - Parameter bei allen Berechnungsmöglichkeiten

a_1	1000
A	350
d_{anh}	$5,9 \cdot 10^{-8}$
β	$6 \cdot 10^7$
Startwert von ρ_m	$7 \cdot 10^{14}$
Startwert von ρ_{dip}	$1 \cdot 10^{14}$
Startwert von ρ_b	$2 \cdot 10^{14}$
Startwert von R_{sbg}	$2,5 \cdot 10^{-7}$

4.4.6. Simulationsergebnisse - Zeitstanddiagramm

In diesem Abschnitt werden die Simulationsergebnisse diskutiert, welche mittels eines Zeitstanddiagrammes veranschaulicht werden. Bei einem Zeitstanddiagramm werden die Spannung über der Zeit, in doppelt logarithmischer Darstellung, aufgetragen. Dabei werden immer jene Werte in das Diagramm übertragen bei denen ein Prüfobjekt eine bestimmte Dehnung bzw. einen Materialbruch unter einer bestimmten Spannung nach einer gewissen Zeitdauer erreicht. Eine Reihe solcher Messpunkte unter verschiedenen Spannungen ergeben anschließend ein, wie in Abbildung 59 dargestelltes, Zeitstanddiagramm. Bei diesem Zeitstanddiagramm wurden einige verschiedene Stähle, wie beispielsweise der in der vorliegenden Arbeit diskutierte P91, gegenübergestellt. Diese Daten wurden neben anderen genutzt um das Zeitstanddiagramm, welches die Simulation mittels Matlab liefert, mit einigen Referenzdaten zu hinterlegen.

4.4. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Endergebnisse (Matlab)

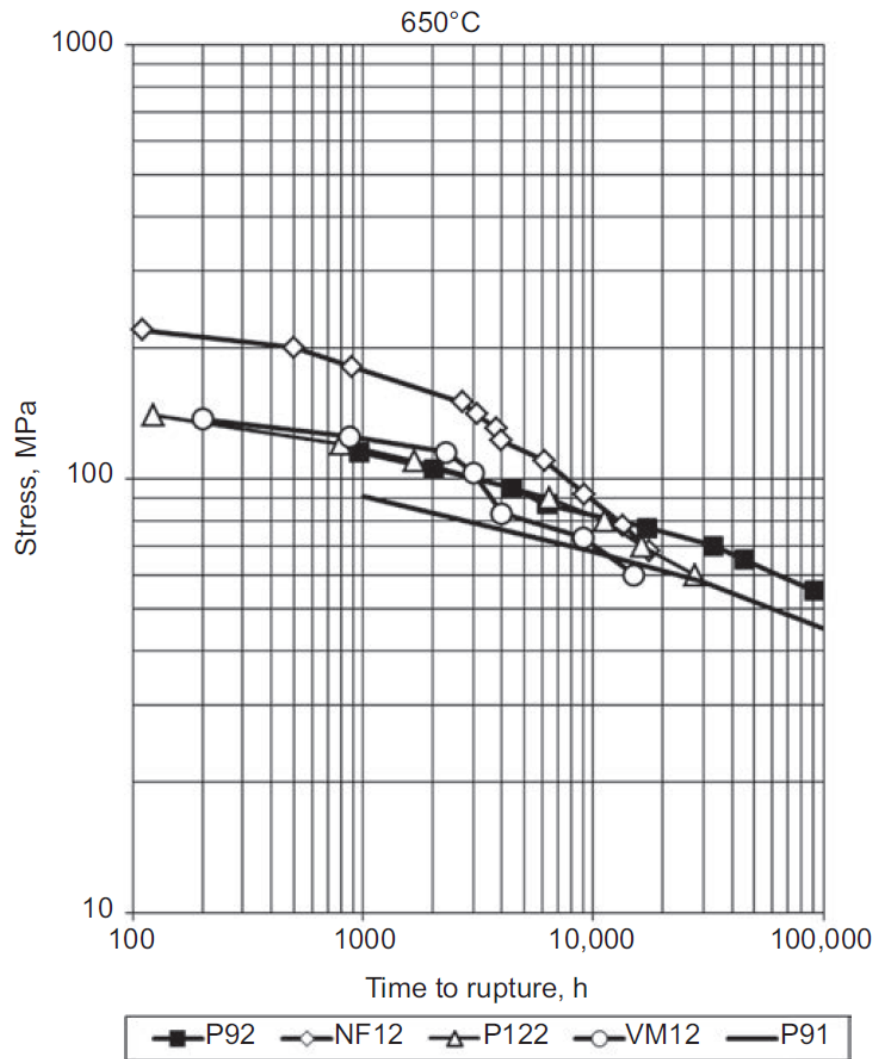


Abbildung 59.: Zeitstanddiagramm nach ECCC [81]

Als Referenzdaten wurden neben denen von ECCC auch welche von ASME und NIMS verwendet. In Abbildung 60 ist ein Simulationsergebnis eines Zeitstanddiagrammes abgebildet, welche die Daten von NIMS, ECCC und ASME im Hintergrund als Referenz beinhaltet.

4.4. Simulation der Mikrostrukturentwicklung und Kriechverformung - Endergebnisse (Matlab)

Unter genauerer Betrachtung der Referenzdaten von National Institute for Materials Science (NIMS), European Continuous Casting Conference (ECCC) und American Society of Mechanical Engineers (ASME) geht eine relativ große Abweichung der Experimentalwerte hervor, welche aufgrund der doppelt logarithmischen Darstellung eher gering wirken. Diese Streuung der Experimentalwerte zeigt die hohe Komplexität dieses Themengebietes auf.

Die Simulationsergebnisse, welche in Abbildung 60 in rot aufgetragen wurden zeigen in der Mitte des Verlaufes eine sehr gute Annäherung an die Experimentalwerte auf. Dies geht aufgrund der Einstellung der Fit - Parameter auf $80MPa$ hervor, welche für die Simulationen mit anderen Spannungen nicht verändert wurde. Die sehr hohe Abweichung der Kurve an den Enden ist durch diese Gegebenheit zu begründen. Aus diesem Umstand resultierend ist es möglich, dass dieses Matlab Modell für die Kriechmodellierung, unter verschiedenen Belastungen herangezogen werden kann, solange sich die zu simulierenden Randbedingungen ähnlich wie zu den Experimentalwerten verhalten, auf welche die Fit - Parameter eingestellt wurden. Ist die Abweichung der Randbedingung zu hoch, ist mit einer höheren Abweichung der Simulationsergebnisse im Gegensatz zur Realität zu rechnen.

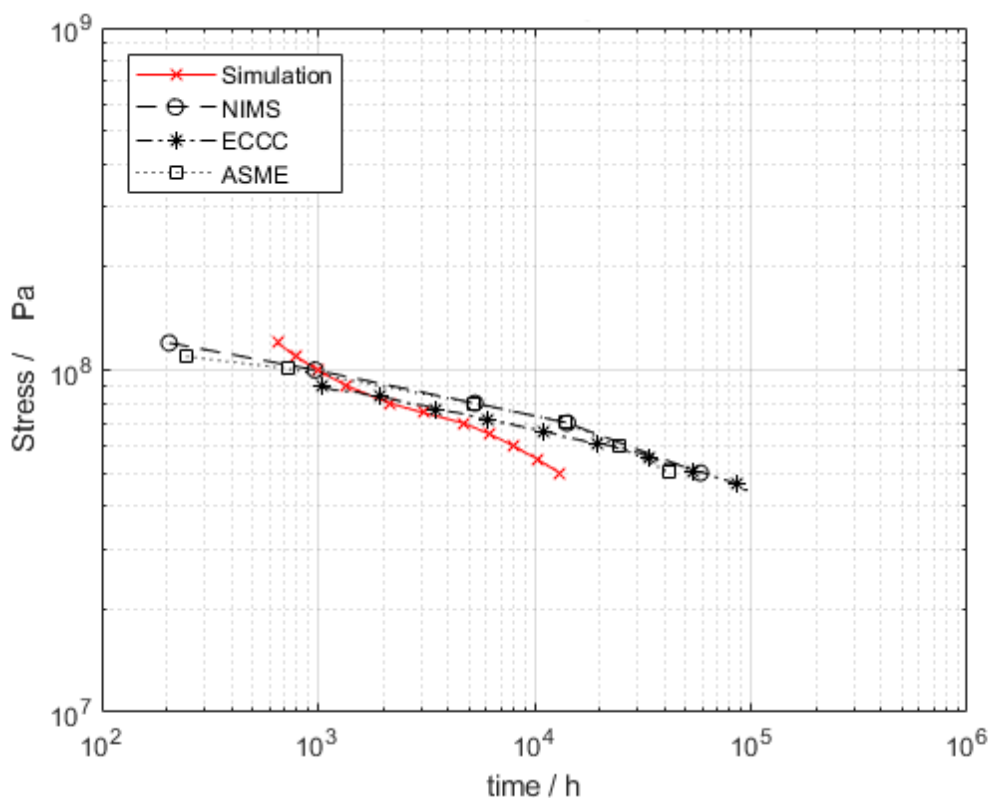


Abbildung 60.: Simulationsergebnisse Zeitstanddiagramm

5. Zusammenfassung, Fazit und Ausblick

5.1. Zusammenfassung

Die Zusammenfassung der vorliegenden Arbeit wird, um einen besseren Überblick zu bekommen, in die Kapitel 5.1.1, 5.1.2 und 5.1.3 eingeteilt.

5.1.1. Theoretische Grundlagen

Die theoretischen und mathematischen Grundlagen der vorliegenden Arbeit gehen größtenteils aus Ghoniem [4] und Yadav [3] hervor. Hervorzuheben ist hierbei eine fehlerhafte Annahme von Yadav [3], welcher den Term "Dislocation subgrain emission" in Gleichung 2.21 als vernachlässigbar bezeichnet. In der vorliegenden Arbeit wurde Gleichung 2.21 mit diesem Term als Fit-Parameter verwendet. Des Weiteren wurde die Klettergeschwindigkeit v_c , welche mit Gleichung 2.14 berechnet wird, von den Gleichungen 2.23, 2.21 und 2.22 entkoppelt und durch einen Fit - Parameter $v_{c_{konstant}}$ ersetzt, da diese Klettergeschwindigkeit als konstant angesehen wird. Außerdem wurde Gleichung 2.30 eingeführt, welche die effektive Geschwindigkeit von mobilen Versetzungen v_{eff} berechnet. Dadurch wird die bisherige Berechnungsmethodik um die Möglichkeit der Berechnung der effektiven Gleitgeschwindigkeit, unter Berücksichtigung der Mikrostruktur im Subkorninneren, erweitert.

5.1.2. MatCalc

Die Grundlage der MatCalc - Berechnung lieferte Riedlsperger [1], welcher die Grundstruktur des MatCalc - Codes im Rahmen eines bilateralen Industrieprojektes mit Mitsubishi Heavy Industries (MHI) 2016, erarbeitete. Dieses Modell wurde, aufgrund des enorm hohen Umfanges für die vorliegende Arbeit, vereinfacht. Die Ergebnisse der Ausscheidungsberechnung, welche dieser MatCalc - Code liefert, erscheinen sehr plausibel.

5.1.3. Matlab

Die Kriechmodellierung, welche im Rahmen der vorliegenden Arbeit, unter Verwendung des Programmes Matlab, erarbeitet wurde, beruht auf dem Matlab - Code von Krenmayr [2], welcher diesen im Rahmen eines bilateralen Industrieprojektes mit Mitsubishi Heavy Industries (MHI) 2017, erarbeitete. Dieses Modell wurde, nach dem Ausbessern von einigen Fehlern, erweitert. Zu den Erweiterungen zählen ein Schnittstelle, welche die Verwendung von Ausscheidungsdaten, welche mittels MatCalc berechnet wurden, ermöglicht. Aufgrund dieser Erweiterung war ein Umschreiben von diversen Codeabschnitten notwendig, da beispielsweise die Gleichungen 2.23 und 2.24 im ursprünglichen Matlab - Code nicht auf die Verwendung von diesen umfangreichen Daten vorbereitet waren. Eine weitere Erweiterung war, wie auch in Kapitel 5.1.1 erwähnt, die Berechnung der effektiven Geschwindigkeit von mobilen Versetzungen v_{eff} . Weiters wurde der bestehende Code um die Möglichkeit erweitert, die Kriechsimulation unter verschiedenen beaufschlagten Spannungen, in ein Zeitstanddiagramm aufzutragen. All diese Erweiterungen wurden mit grafischen Oberflächen unterstützt, welche aufgrund der zahlreichen Hinweise eine sehr einfache Bedienung ermöglichen.

5.2. Fazit

Das aus der vorliegenden Arbeit resultierende Kriechmodell weist einen hohen Funktionsumfang auf und liefert sehr gute und plausible Ergebnisse. Außerdem ist es möglich, dass dieses Matlab Modell für die Kriechmodellierung, unter verschiedenen Belastungen, herangezogen werden kann, solange sich die zu simulierenden Randbedingungen ähnlich wie zu den Experimentalwerten verhalten, auf welche die Fit - Parameter eingestellt wurden. Dadurch ist es möglich, in einem gewissen Rahmen Vorhersagen zu treffen, obwohl keine direkten Experimentalwerte vorliegen.

5.3. Ausblick

Der wichtigste Punkt, welcher in Bezug auf die Kriechmodellierung näher betrachtet werden muss, sind die Fit - Parameter a_1 , A , d_{anh} und β . Solange diese Parameter nicht durch einen physikalischen Hintergrund untermauert werden, kann ohne Experimentalwerte keine aussagekräftige Berechnung vollzogen werden.

Ein weiterer Punkt, welcher in Zukunft näher betrachtet werden sollte, ist wie in Abbildung 61 durch den Punkt "Anmerkung" gekennzeichnet, dargestellt. Hierbei sollte eine Kopplung bzgl. des Einflusses der Ausscheidungskinetik auf die Schädigung erfolgen und der Fit - Parameter, welcher verwendet wird, um die Schädigung zu berechnen, sollte physikalisch belegt werden.

Als weitere zukünftige Erweiterung würde sich ein umfangreicheres GUI anbieten, welches aus einem modifizierten und optimierten Matlab - Code dieser Arbeit hervorgehen könnte.

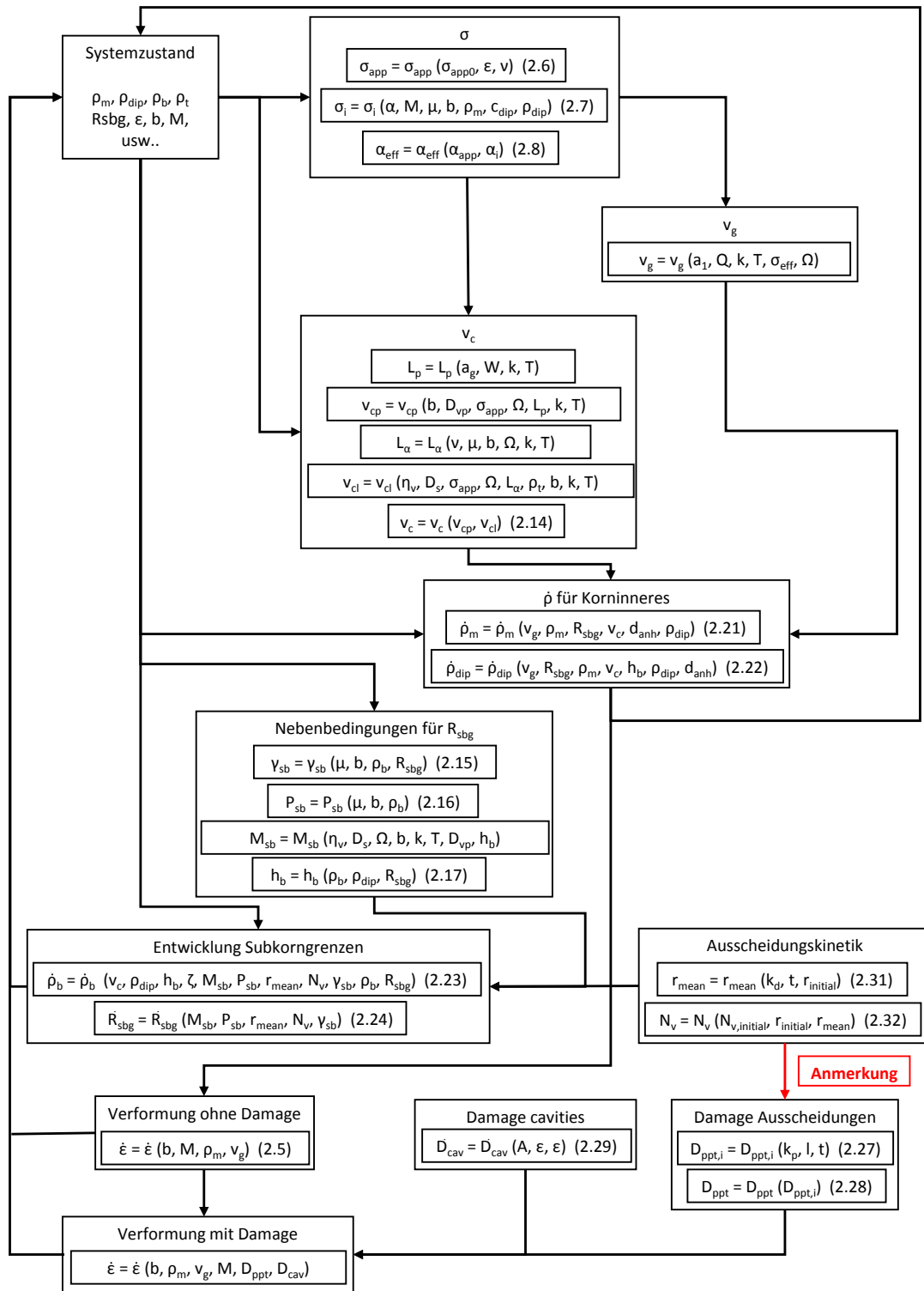


Abbildung 61.: Formelzusammenhang - Ausblick, Anmerkung siehe Kapitel 5.3

Quellen

- [1] F. Riedlsperger. *Thermodynamic Precipitation Kinetic Simulation in Martensitic Cr- Steels*. Master's thesis, Technische Universität Graz, 2016.
- [2] B. Krenmayr, B. Sonderegger, F. Riedlsperger, S. Yadav, and C. Sommitsch. *Development of a creep strength estimation method based on microstructural simulation in mod. 9Cr-1Mo steels*. Internal Report, Technische Universität Graz, 2017.
- [3] S. Yadav, B. Sonderegger, M. Stracey, and C. Poletti. *Modelling the creep behaviour of tempered martensitic steel based on a hybrid approach*. Mater. Sci. Eng A 662 (2016) 330-341.
- [4] N. Ghoniem, J. Matthews, and R. Amodeo. *A dislocation model for Creep in engineering materials*. Res. Mech. 29 (1990) 197-219.
- [5] C. Sommitsch. *Werkstoffkunde*. Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2012.
- [6] G. Schulze and HJ. Bargel. *Werkstoffkunde*. Springer Vieweg, 2012.
- [7] J. Rösler, H. Harders, and M. Bäker. *Mechanisches Verhalten der Werkstoffen*. Springer Vieweg, 2016.
- [8] H. Maier, T. Niendorf, and R. Bürgel. *Handbuch Hochtemperatur-Werkstofftechnik*. Vieweg + Teubner, 2011.
- [9] H. Maier, T. Niendorf, and R. Bürgel. *Handbuch Hochtemperatur-Werkstofftechnik*. Springer Vieweg, 2015.
- [10] T. Titova, V. Tsemenko, and D. Ratushev. *Structure and properties of a high-chromium steel of martensitic class after heat treatment*. Metal Science and Heat Treatment 55 (2013) 48-52.
- [11] ThyssenKrupp Materials International. *Werkstoffdatenblatt P91*. [Online] <http://www.s-k-h.com>, 2011.
- [12] D. Jara. *9-12% Cr heat resistant steels: alloy design, TEM characterisation of microstructure evolution and creep response at 650°C*. PhD thesis, Ruhr-Universität Bochum, 2011.
- [13] D. Schmid. *Industrielle Fertigung - Fertigungsverfahren*. Europa Lehrmittel, 2008.

- [14] J. Ruge and H. Wohlfahrt. *Technologie der Werkstoffe - Herstellung, Verarbeitung, Einsatz*. Springer Vieweg, 2013.
- [15] C. Pandey, M. Mahapatra, P. Kumar, and A. Giri. *Microstructure Characterization and Charpy Toughness of P91 Weldment for As-Welded, Post-Weld Heat Treatment and Normalizing & Tempering Heat Treatment*. *Met. Mater. Int.* 23 (2017) 900-914.
- [16] V. Paul, S. Saroja, and M. Vijayalakshmi. *Microstructural stability of modified 9Cr-1Mo steel during long term exposures at elevated temperatures*. *J. Nucl. Mater.* 378 (2008) 229-358.
- [17] B. Dutt, M. Babu, G. Shanth, S. Venugopal, and A. Bhaduri. *Influence of microstructural inhomogeneities on the fracture toughness of modified 9Cr-1Mo steel at 298-823 K*. *J. Nucl. Mater.* 421 (2012) 15-21.
- [18] T. Shrestha, M. Basirat, I. Charit, G. Potirniche, K. Rink, and U Sahaym. *Creep deformation mechanisms in modified 9Cr-1Mo steel*. *J. Nucl. Mater.* 423 (2012) 110-119.
- [19] C. Pandey, A. Giri, and M. Mahapatra. *Evolution of phases in P91 steel in various heat treatment conditions and their effect on microstructure stability and mechanical properties*. *Mater. Sci. Eng A* 664 (2016) 58-74.
- [20] G. Götz. *Langzeitentwicklung der Mikrostruktur neuer 9-12% Chromstähle für den Einsatz in Kraftwerken*. PhD thesis, Universität Erlangen-Nürnberg, 2004.
- [21] J. Hald. *TEM investigations in new 9-12% Cr steels for high temperature applications*. Technical University of Denmark, Department of Metallurgy, ELSAM/ELKRAFT, 1988.
- [22] P. Kelly and J. Nutting. *The martensite transformation in carbon steels*. *Proc. Roy. Soc. A* 259 (1961) 45-58.
- [23] G. Krauss. *Martensite in steel: strength and structure*. *Mater. Sci. Eng A* 273-275 (1999) 40-57.
- [24] I. Holzer. *Modelling and Simulation of Strengthening in Complex Martensitic 9-12% Cr Steel and a Binary Fe-Cu Alloy*. PhD thesis, Technische Universität Graz, 2010.
- [25] D. Barraclough and D. Gooch. *Effect of inadequate heat treatment on creep strength of 12Cr-Mo-V steel*. *Mater. Sci. Techn.* 1 (1985) 961-967.
- [26] R. Petri, E. Schnabel, and P. Schwaab. *Zum Legierungseinfluß auf die Umwandlungs- und Ausscheidungsvorgänge bei der Abkühlung warmfester Röhrenstähle nach dem Austenitisieren III. rom-Molybdän-Vanadin-Stähle*. *Arch. Eisenhüttenwes.* 52 (1981) 65-70.
- [27] G. Eggeler, N. Nilsvang, and B. Ilchner. *Microstructural changes in a 12% chromium steel during creep*. *Steel research.* 58 (1987) 97-103.

- [28] J. Janovec, B. Richarz, and HJ. Grabke. *Phase transformations and microstructure changes in a 12%Cr-steel during tempering at 1053 K*. Steel research. 65 (1994) 438-443.
- [29] G. Eggeler. *The effect of long-term creep on particle coarsening in tempered martensite ferritic steels*. Acta. Metall. 37 (1989) 3225-3234.
- [30] S. Nourbakhsh. *Pinning of grain boundaries by deformable particles*. Metall. Trans. A 23 (1992) 1181-1186.
- [31] G. Gottstein. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik - Physikalische Grundlagen*. Springer Vieweg, 2014.
- [32] E. Roos and K. Maile. *Werkstoffkunde für Ingenieure - Grundlagen, Anwendung, Prüfung*. Springer Vieweg, 2015.
- [33] W. Schatt and H. Worch. *Werkstoff-Wissenschaft*. Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie Stuttgart, 1996.
- [34] J. Collins. *Failure of Materials in Mechanical Design: Analysis, Prediction, Prevention*. John Wiley & Sons Inc, 1993.
- [35] J. Poirier. *Creep of Crystals: High-Temperature Deformation Processes in Metals, Ceramics and Minerals*. Cambridge University Press, 1985.
- [36] M. Ashby and D. Jones. *Engineering Materials 1: An Introduction to Properties, Applications and Design*. Elsevier Ltd, Oxford, 2005.
- [37] T. Courtney. *Mechanical Behaviour of Materials*. McGraw-Hill Education, 1990.
- [38] A. Troost, E. El-Magt, and A. El-Schennawi. *Mehrachsiges Druck-, Zug-, Schicht- und Behälterkriechen in elementarer und einheitlicher Darstellung*. Westdeutscher Verlag, 1981.
- [39] P. Phillips. *The Slow Stretch in Indiarubber, Glass, and Metal Wires when subjected to a Constant Pull*. Proc. Phys. Soc. London 19 (2002) 491-511.
- [40] F. Norton. *The creep of steel at high temperatures*. McGraw-Hill Book Company, 1929.
- [41] M. Basirat, T. Shrestha, G. Potirniche, I. Charit, and K. Rink. *A study of the creep behavior of modified 9Cr-1Mo steel using continuum-damage modelling*. Internal J. Plat. 37 (2012) 95-107.
- [42] S. Yadav. *Creep study of 9-12% Cr steels for power plants*. PhD thesis, Technische Universität Graz, 2015.
- [43] S. Wiese. *Verformung und Schädigung von Werkstoffen der Aufbau- und Verbindungstechnik - Das Verhalten im Mikrobereich*. Springer, 2010.

- [44] K. Böer. *Handbook of the Physics of Thin-Film Solar Cells*. Springer, 2013.
- [45] E. Orowan. *Problems of plastic gliding*. Proc. of Phys. Soc 52/1 (1940) 8-22.
- [46] S. Wiebke. *Entwicklung und Optimierung des Diffusionsschweissens von ODS Legierungen*. KIT Scientific Publishing, 2014.
- [47] J. Rösler, H. Harders, and M. Bäker. *Mechanisches Verhalten der Werkstoffen*. Springer Vieweg, 2006.
- [48] R. Reed-Hill and R. Abbaschian. *Physical Metallurgy Principles*. PWS Publishing Company, 1992.
- [49] B. Ilschner. *Hochtemperatur-Plastizität*. Springer, 1973.
- [50] F. Krumphals, T. Wlanis, C. Sommitsch, I. Holzer, B. Sonderegger, and V. Wieser. *Modelling of microstructure evolution in hot work tool steels during service*. Comput. Methods. Mater. Sci. 9/2 (2009) 228-233.
- [51] F. Krumphals. *Physical Based Modelling of Creep Fatigue in Hot Work Tool*. PhD thesis, Technische Universität Graz, 2014.
- [52] F. Krumphals, B. Reggiani, T. Donati, T. Wlanis, and C. Sommitsch. *Deformation behaviour of a ferritic hot-work tool steel with respect to the microstructure*. Comput. Methods. Mater. Sci. 52 (2012) 40-45.
- [53] S. Yadav, M. Schuler, C. Sommitsch, and C. Poletti. *Physical based creep strain modelling of 9Cr martensitic steel*. Proceedings of 3rd International ECCC- Creep & Fracture Conference (2014).
- [54] R. Singer and E. Arzt. *Structure, processing and properties of ODS superalloys*. High temperature alloys for gas turbines and other applications : proceedings of a conference held in Liège, Belgium (1986) 97-126.
- [55] T. Barker and J. Ägren. *Creep simulation of 9-12% steels using composite model with thermodynamically calculated input*. Mater. Sci. Eng A 395 (2005) 110-115.
- [56] R. Amodeo and N. Ghoniem. *Dislocation dynamics I. A proposed methodology for deformation micromechanics*. Phys. Rev. B 41 (1990) 6958-6967.
- [57] J. Hirth and J. Lothe. *Theory Of Dislocations*. Krieger Publishing Company Malabar, Florida, 1982.
- [58] S. Yadav, J. Rosc, B. Sartory, R. Brunner, B. Sonderegger, C. Sommitsch, and C. Poletti. *Investigation of Pre-Existing Pores in Creep Loaded 9Cr Steel*. 2nd International Congress on 3D Materials Science (2014) 85-90.

- [59] R. Amodeo and N. Ghoniem. *A review of experimental observations and theoretical models of dislocation cells and subgrains*. Res. Mech. 23 (1988) 137-160.
- [60] S. Takeuchi and A. Agon. *Steady state creep of single-phase crystalline matter at high temperature*. J. Mater. Sci. 11 (1976) 1542-1566.
- [61] N. Dudova, A. Plotnikova, D. Molodov, A. Belyakov, and R. Kaibyshev. *Structural changes of tempered martensitic 9%Cr–2%W–3%Co steel during creep at 650°C*. Mater. Sci. Eng A 534 (2012) 632-639.
- [62] K. Maruyama, K. Sawada, and JI. Koike. *Strengthening Mechanisms of Creep Resistant Tempered Martensitic Steel*. ISIJ Int. 41/6 (2001) 641-653.
- [63] S. Nandi, K. Vikrant, P. Ahv, K. Singh, and R. Gosh. *Creep modelling of P91 steel for high temperature power plant applications*. Procedia Eng. 55 (2013) 751-755.
- [64] H. Semba, B. Dyson, and M. McLean. *Microstructure-based creep modelling of a 9% Cr martensitic steel*. Mater. High. Temp. 25/3 (2008) 131-137.
- [65] Y. Kadoya, N. Nishimura, BF. Dyson, and M. McLean. *Origins of tertiary creep in high chromium steels*. J.C. Earthman, F.A. Mohamed (Eds.), Creep & Fracture of Engineering Materials & Structures, TMS, War-rendale, USA (1997) 343-352.
- [66] Y. Yin and R. Faulkner. *Continuum damage mechanics modelling based on simulations of microstructural evolution kinetics*. Mater. Sci. Technol. 22/8 (2006) 929-936.
- [67] B. Sonderegger and F. Riedlsperger. *Internal discussion*. Technische Universität Graz, 2018.
- [68] B. Sonderegger. *Charakterisierung der Substruktur in modernen Kraftwerkstoffen mittels der EBSD Methode*. Graz University of Technology (Februar 2004) 119-122.
- [69] J. Hald. *Microstructure and long-term creep properties of 9-12% Cr steels*. Internal J. Press. Vess. Pip. 85 (2008) 30-37.
- [70] H. Naoi, XL. Ohgami, and T. Fujita. *Effects of Aluminium Content on the Mechanical Properties of a 9Cr-0.5Mo-1.8W Steel*. Metall. Trans. A 28A (1997) 1195-1203.
- [71] H. Magnusson and R. Sandström. *Influence of aluminium on creep strength of 9-12% Cr steels*. Mater. Sci. Eng A 527 (2009) 118-125.
- [72] MA. El-Azim, O. Ibrahim, and O. El-Desoky. *Long term creep behaviour of welded joints of P91 steel at 650°C*. Mater. Sci. Eng A 560 (2013) 678-684.
- [73] B. Sonderegger. *Aspects on measurement, modeling and impact of precipitates in alloys*. Habilitationsschrift, Technische Universität Graz, 2012.

- [74] H. Riedel. *Fracture at High Temperatures*. Springer, 1987.
- [75] M. Klell. *Höhere Thermodynamik*. Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2016.
- [76] G. Stechauner and E. Kozeschnik. *Self-Diffusion in Grain Boundaries and Dislocation Pipes in Al, Fe, and Ni and Application to AlN Precipitation in Steel*. Journal of Mat. Eng. and Perf. 23 (2014) 1576-1579.
- [77] H. Mehrer, N. Stolica, and N. Stolwijk. *Diffusion in Solid Metals and Alloys*. Springer, 1990.
- [78] C. Pein. *Microstructural Modelling of Diffusional Creep in Polycrystals*. PhD thesis, Technische Universität Graz, 2011.
- [79] TU Wien Institut für Werkstoffwissenschaft und Werkstofftechnologie. *Matcalc - The Materials Calculator: Dokumentation*. [Online], <http://matcalc.tuwien.ac.at/index.php/documentation>, April 2018.
- [80] S. Bartels. *Numerik 3x9 - Drei Themengebiete in jeweils neun kurzen Kapiteln*. Springer Spektrum, 2014.
- [81] A. Gianfrancesco. *Materials for Ultra-Supercritical and Advanced Ultra-Supercritical Power Plants*. Elsevier Science & Technology, 2016.
- [82] K. Kimura. *NIMS Creep Data Sheet - Atlas of creep deformation property - Creep deformation properties of 9Cr-1Mo-V-Nb steel plates for boilers and pressure vessels*. National Institute for Materials Science, Japa, 2008.
- [83] K. Sawada, H. Kushima, M. Tabuchi, and K. Kimura. *Microstructural degradation of Gr.91 steel during creep under low stress*. Mater. Sci. Eng A 528 (2011) 5511-5518.

A. Anhang

Im folgenden Anhang, werden in Kapitel A.1 die verwendeten Materialparameter der Matlab - Simulationen, welche in Kapitel A.3 mit dem vollständigen Code abgebildet ist, näher erläutert. In Kapitel A.2 ist der vollständige MatCalc - Code abgebildet und die Endergebnisse der Matlab - Simulation werden in Kapitel A.4 aufzeigt.

A.1. Materialparameter

In der nachfolgenden Tabelle 7 werden all jene Materialparameter erläutert, welche in der vorliegenden Arbeit verwendet wurden. Alle verschiedenen Fit - Parameter werden im jeweiligen Unterkapitel von Kapitel A.4 erläutert.

Tabelle 7.: Materialparameter

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
a_g	$= 2,8665 \cdot 10^{-10}$	$[m]$	Größe der Elementarzelle
α	$= 0,042$	$[]$	Konstante zur Wechselwirkung der Versetzung
b	$= 2,866 \cdot 10^{-10}$	$[m]$	Burgersvektor
c_{dip}	$= 0,3$	$[]$	Gewichtungsfaktor
η_v	$= 0,02$	$[]$	Transferkoeffizient von Leerstellen
G	$= 63 \cdot 10^9$	$[Pa]$	Schubmodul
k	$= 1,3806504 \cdot 10^{-23}$	$[J/K]$	Boltzmann Konstante
$k_d(M_{23}C_6)$	$= 3 \cdot 10^{-28}$	$[\frac{m^3}{s}]$	Vergrößerungsrate
$k_d(MX)$	$= 2 \cdot 10^{-44}$	$[\frac{m^3}{s}]$	Vergrößerungsrate
$k_p(M_{23}C_6)$	$= 9,13 \cdot 10^{-7}$	$[\frac{1}{s}]$	Vergrößerungsrate
$k_p(MX)$	$= 1,39 \cdot 10^{-6}$	$[\frac{1}{s}]$	Vergrößerungsrate
M	$= 3$	$[]$	Taylor Faktor
ν	$= 0,3$	$[]$	Poissonzahl
Q	$= 4,00541155 \cdot 10^{-19}$	$[eV]$	Aktivierungsenergie
W	$= 7,96088231 \cdot 10^{-19}$	$[J]$	Aktivierungsenergie für die Diffusion an Versetzungslinien
ω	$= 1,149404032 \cdot 10^{-29}$	$[m^3]$	Atomvolumen
ζ	$= 0,55$	$[m^3]$	Konstante für den Effekt von Versetzungsdipolen auf Grenzflächenversetzungen

A.2. MatCalc - Code

```

$ *****
$ ***** GENERAL INFORMATION *****
$ *****
$
$ Script for simulation of multi-stage heat treatment of 9% Cr-steel (Gr. 91)
$
$
$ Database: mc_fe_v2.050.tdb, mc_fe_v2.008.ddb
$ Author: S. Vujic
$ Modified by: F. Riedlsperger and J. Schmid
$ Creation date: 07.04.2015
$ Last revision: 23.04.2018
$ Reason for update: new databases; changed input parameters
$ This is a script for MatCalc version 5.60 (rel 1.001)
$ *****
$ ***** SETUP INFORMATION *****
$ *****
$ make sure we work in the correct module
use-module core $ select core module for kinetic simulation
$ close any open workspace without asking for save
close-workspace f
new-workspace $ open new workspace
$ give some information about the script:
set-workspace-info + Selected elements:
set-workspace-info + C, Si, Mn, Cu, Ni, Cr, Mo, V, Nb, Al, N
set-workspace-info +
set-workspace-info + Matrix phases: Martensite (BCC_A2), Austenite (FCC_A1)
set-workspace-info +
set-workspace-info + Precipitate phases:
set-workspace-info + NbC, AlN, Cr2N, VN, M23C6, M7C3, Cementite, Laves, Z-phase
set-workspace-info +
set-workspace-info + Samples are quenched, tempered, welded, post weld heat treated and aged
set-workspace-info +
$ *****
$ ***** SYSTEM SETUP *****
$ *****
$ verify correct MatCalc version (is accessible as internal variable)
if (matcalc_version<5600001)
send-dialog-string "MatCalc version must be 5.60 (rel 1.001) or higher to run this script. Stopping."
stop_run_script $ stop script
endif
$ show console window and notify user to perform selection
move-gui-window c show $ bring console window to front
$ *****
$ GLOBAL VARIABLES
$ *****
$ The austenitic grain size (ags) was found from an analysis of EBSD data with OIM software, considering
$ dislocation angles between 18 and 50 degrees.
$ To account for prior austenitic grain boundaries that were not clearly visible, a correction factor was
$ introduced on the basis of Mackenzie distribution.
$ With this factor the PAGS values derived from linear intercept method (manual procedure) were corrected.
$ The equilibrium solution temperature of laves phase is close to the service temperature of 600C.
$ Therefore the interface between the matrix and laves phase becomes diffuse instead of sharp. To
$ handle this state, an interface correction temperature of 1452K for Raccord is applied.
$ Comment: a higher interface correction temp. like 1600K causes coarsening of laves phase, which is
$ not in agreement with experimental results.
$ A good estimation for the range of Laves interface correction temperature can be made by creating a
$ binary system of Fe-Mo or Fe-W (depending on the chemical composition of Gr. 91) and finding the maximum
$ dissolution temperature for Laves phase when varying Fe- and Mo-content [wt %], which in this case gave 1477 K.
$ Further optimization of this value led to 1452 K, which now can be used at any temperature level of service.
$ 600 degrees of service temperature in theory demand the same interface correction temperature as 650 degrees, e.g.
set-variable-string scale_range 1e10..1e23 $ unified scaling for histogram windows
set-variable-value npc 50 $ set number prec. classes (default is 25- lower value worsens accuracy dramatically!)
$ In general the number of required precipitation classes depends on the performance of CPU.

```

\$ On different computers, the same number of size classes can lead to slightly different results, especially when using low values.
 \$ Therefore, crosschecks are recommendable.
 \$ Also be aware that an increase of heating and cooling rates demands higher npc values to guarantee good accuracy.
 \$ Once heating and cooling rates are adjusted, also the number of size classes has to be checked critically.

```

set-variable-value npc_laves 25 $ set number prec. classes for laves phase
set-variable-value npc_m23c6 25 $ set number prec. classes for M23C6
set-variable-value npc_aln 25 $ set number prec. classes for AlN
set-variable-value npc_vn 25 $ set number prec. classes for VN(mart,s) + VN(aust,g)
set-variable-value npc_nbc 25 $ set number prec. classes for NbC(mart,d) + NbC(mart,s)
set-variable-value mdef 8 $ matrix diff. enhancement factor during PWHT and service is 1 (faster diffusion in FGHAZ)
set-variable-value eie_zet 1 $ equivalent interf. energy for Z-phase nucleation
set-variable-value nucl_const_zet 1e-12 $ nucleation constant for matrix-Z-phase
set-variable-value lav_ict 1452 $ interface correction temperature [K] for laves
set-variable-value dda 1e11 $ dislocation density in austenite
set-variable-value ddm 1.5e14 $ dislocation density in martensite after 0h service
set-variable-value ddm_100h 1.48e14 $ calculation of ddm reduction according to extrapolation formula from S. Yadav:
set-variable-value ddm_200h 1.47e14 $ ddm=2.39257*10^16*t^(-0.57315), where ddm= dislocation density and t= time.
set-variable-value ddm_300h 1.46e14 $ IMPORTANT: primary creep has to be neglected to receive good results
set-variable-value ddm_400h 1.45e14 $ Consequently, a start value of 1,5e14 m^(-2) for dislocation density is defined
set-variable-value ddm_500h 1.44e14
set-variable-value ddm_600h 1.43e14
set-variable-value ddm_700h 1.42e14
set-variable-value ddm_800h 1.41e14
set-variable-value ddm_900h 1.4e14
set-variable-value ddm_1000h 1.39e14
set-variable-value ddm_1250h 1.36e14
set-variable-value ddm_1500h 1.34e14
set-variable-value ddm_2000h 1.3e14
set-variable-value ddm_2500h 1.26e14
set-variable-value ddm_3000h 1.22e14
set-variable-value ddm_3500h 1.19e14
set-variable-value ddm_4000h 1.15e14
set-variable-value ddm_4500h 1.13e14
set-variable-value ddm_5000h 1.1e14
set-variable-value ddm_6000h 1.05e14
set-variable-value ddm_9000h 9.31e13
set-variable-value ddm_12000h 8.44e13
set-variable-value ddm_15000h 7.76e13
set-variable-value ddm_20000h 6.9e13
set-variable-value ddm_25000h 6.26e13
set-variable-value ddm_30000h 5.76e13
set-variable-value ddm_40000h 5.02e13
set-variable-value ddm_50000h 4.5e13
set-variable-value ddm_60000h 4.1e13
set-variable-value ddm_70000h 3.78e13
set-variable-value ddm_80000h 3.53e13
set-variable-value ddm_90000h 3.31e13
set-variable-value ddm_100000h 3.13e13 $ dislocation density in martensite after 100000h service
set-variable-value T_ms 400 $ martensite start temperature
set-variable-value T_weld_fgghaz 950 $ virtual welding peak temperature in FGHAZ
set-variable-value T_weld_bm 800 $ virtual welding peak temperature in base metal (BM)
set-variable-value hr_weld 1 $ multipass heating rate for virtual welding (only for selection "multipass!")
set-variable-value cr_weld 15 $ multipass cooling rate for virtual welding (only for selection "multipass!")
set-variable-value T_serv 650 $ service temperature
set-variable-value T_trans 833 $ martensite to austenite transformation temperature
set-variable-value ags 76e-6 $ austenitic grain size [=76µm]
set-variable-value sgs 0.56e-6 $ subgrain size in BM [=0,56µm]
set-variable-value sgef 5 $ subgrain elongation factor BM
set-variable-value agsfghaz 9e-6 $ austenitic grain size of FGHAZ [=9µm]
set-variable-value sgsgghaz 1.45e-6 $ subgrain size in FGHAZ [=1,45µm]
set-variable-value sgeffghaz 1 $ subgrain elongation factor in FGHAZ [=1]
set-variable-value T_aust 1050 $ normalizing temperature
set-variable-value time_aust 2*60*60 $ normalizing time (=2h)
set-variable-value T_temp 770 $ tempering temperature
set-variable-value time_temp 2*60*60 $ tempering time (=2h)
set-variable-value T_pwht 750 $ PWHT temperature
set-variable-value time_pwht 2*60*60 $ PWHT time (=2h)

```

```

$ *****
$ DATABASES, CHEMICAL COMPOSITION, SELECTED PHASES
$ *****
$ if you receive an error when executing the next line, please make sure you have the database
$ in your MatCalc/database folder. The mc_fe database available for registered MatCalc customers
open-thermodyn-database mc_fe_v2.050.tdb $ open thermodynamic database- ATTENTION: updated from 039 to 050 in February
2016
select-elements C Si Mn Ni Cr Mo V Nb Al N Co Cu $ select elements
select-phases liquid fcc_a1 bcc_a2 g_phase laves_phase $ select phases
select-phases sigma m23c6 aln zet hcp_a3 m7c3 cementite $ select phases
read-thermodyn-database $ read thermodynamic database
read-mobility-database mc_fe_v2.008.ddb $ read diffusion data- ATTENTION: updated from 005 to 008 in February 2016

enter-composition wp C=0,112 Si=0,48 Mn=0,37 Ni=0,37 Cu=0,13
enter-composition wp Cr=8,98 Mo=0,87 V=0,199 Nb=0,063 Al=0,016 N=0,0473

$ *****
$ CHANGE PHASE STATUS ETC.
$ *****
$ suspend fcc_a1#01 is replaced by simple phases NbC, and VN
change-phase-status fcc_a1#01 f s s
create-new-phase fcc_a1#01 C :Cr,Fe,Mo,Nb%:C%,N,VA: NbC $ create new phase NbC
create-new-phase fcc_a1#01 C :Cr,Mo,V%:C,N%,VA: VN $ create new phase VN
$ suspend hcp_a3 and kids, is replaced by simple phases Mo2C and Cr2N
change-phase-status hcp_a3 f s s
change-phase-status hcp_a3#01 f s s
change-phase-status hcp_a3#02 f s s
create-new-phase hcp_a3 C :CR%,MO,NB,V:C,N%,VA: Cr2N $ Cr2-nitride
$ *****
$ HEAT TREATMENTS, VARIABLES, TABLES & FUNCTIONS (1)
$ *****
$ ----- HEAT TREATMENTS -----
$ ----- PART I: HARDENING -----

$ ----- END OF PART I: HARDENING -----
create-heat-treatment hardening $ create heat treatment part I:
$ austenitization and quenching
append-ht-segment hardening $ casting process (START)
edit-ht-segment hardening . d n austenite $ define precipitation domain
edit-ht-segment hardening . s 1500 $ define start temperature
edit-ht-segment hardening . 1 T_ms 0.1 $ Tend + cooling rate
edit-ht-segment hardening . c cooling from solution treatment to martensite start $ comment
append-ht-segment hardening $ casting process- change to martensite (END)
edit-ht-segment hardening . d n martensite $ define precipitation domain
edit-ht-segment hardening . 1 25 0.1 $ Tend + cooling rate
edit-ht-segment hardening . c cooling from martensite start to room temperature $ comment

append-ht-segment hardening $ heating to normalize (START)
edit-ht-segment hardening . 1 40 0.0083 $ Point T2 (=Tend) + heating rate
edit-ht-segment hardening . c heating from room temperature 40 degrees $ comment
append-ht-segment hardening $ heating to normalize
edit-ht-segment hardening . 1 T_trans 0.0444 $ T_trans (=Tend) + heating rate
edit-ht-segment hardening . c heating from 40 degrees to A3 temperature $ comment
append-ht-segment hardening $ heating to normalize- change to austenite
edit-ht-segment hardening . d n austenite $ define precipitation domain
edit-ht-segment hardening . 1 920 0.0444 $ Point T3 (=Tend) + heating rate
edit-ht-segment hardening . c heating from A3 temperature to 920 degrees $ comment

append-ht-segment hardening $ heating to normalize
edit-ht-segment hardening . 1 T_aust 0.0181 $ T_aust (=Tend) + heating rate
edit-ht-segment hardening . c heating from 920 degrees to austenitization temperature $ comment
append-ht-segment hardening $ normalizing (HOLDING)
edit-ht-segment hardening . 2 0 time_aust $ Tdot + delta_t
edit-ht-segment hardening . c isothermal holding for 2 h at austenitization temperature $ comment

append-ht-segment hardening $ cooling process
edit-ht-segment hardening . 1 800 0.0694 $ Point T4 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment hardening . c cooling from austenitization temperature to 800 degrees $ comment

```

```

append-ht-segment hardening $ cooling process
edit-ht-segment hardening . l 600 0.0556 $ Point T5 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment hardening . c cooling from 800 degrees to 600 degrees $ comment

append-ht-segment hardening $ cooling process
edit-ht-segment hardening . l 460 0.0389 $ Point T6 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment hardening . c cooling from 600 degrees to 460 degrees $ comment
append-ht-segment hardening $ cooling process
edit-ht-segment hardening . l T_ms 0.0278 $ T_ms (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment hardening . c quenching to martensite start temperature $ comment
append-ht-segment hardening $ cooling process- change to martensite
edit-ht-segment hardening . d n martensite $ define precipitation domain
edit-ht-segment hardening . l 360 0.0278 $ Point T7 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment hardening . c cooling from martensite start temperature to 360 degrees $ comment

append-ht-segment hardening $ cooling process
edit-ht-segment hardening . l 320 0.0111 $ Point T8 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment hardening . c cooling from 360 degrees to 320 degrees $ comment

append-ht-segment hardening $ cooling process
edit-ht-segment hardening . l 260 0.0167 $ Point T9 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment hardening . c cooling from 320 to 260 degrees

append-ht-segment hardening $ cooling process (END)
edit-ht-segment hardening . l 25 0.013 $ T10 (=room temperature) + cooling rate (extrapolated)
edit-ht-segment hardening . c cooling from 260 degrees to room temperature
$ ----- PART II: TEMPERING -----
create-heat-treatment tempering $ second heat treatment
append-ht-segment tempering $ heating to temper (START)
edit-ht-segment tempering . s 25 $ define start temperature for HT
edit-ht-segment tempering . d n martensite $ define precipitation domain
edit-ht-segment tempering . l 80 0.0306 $ Point T2 (=Tend) + heating rate
edit-ht-segment tempering . c heating from room temperature to 80 degrees $ comment

append-ht-segment tempering $ heating to temper
edit-ht-segment tempering . l T_temp 0.0295 $ T_temp (=Tend) + heating rate
edit-ht-segment tempering . c heating from 80 degrees to tempering temperature
append-ht-segment tempering $ tempering (HOLDING)
edit-ht-segment tempering . 2 0 time_temp $ Tdot + delta_t
edit-ht-segment tempering . c annealing for 2 h $ comment

append-ht-segment tempering $ cooling process
edit-ht-segment tempering . l 550 0.0244 $ Point T3 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment tempering . c cooling from tempering temperature to 550 degrees $ comment
append-ht-segment tempering $ cooling process
edit-ht-segment tempering . l 420 0.0181 $ Point T4 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment tempering . c cooling from 550 degrees to 420 degrees $ comment
append-ht-segment tempering $ cooling process
edit-ht-segment tempering . l 360 0.0111 $ Point T5 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment tempering . c cooling from 420 degrees to 360 degrees $ comment

append-ht-segment tempering $ cooling process
edit-ht-segment tempering . l 250 0.0134 $ Point T6 (=Tend) + cooling rate
edit-ht-segment tempering . c cooling from 360 degrees to 250 degrees $ comment
append-ht-segment tempering $ append segment 2
edit-ht-segment tempering . d n martensite $ change precipitation domain
edit-ht-segment tempering . l 25 0.01 $ Tend + cooling rate (extrapolated)
edit-ht-segment tempering . c cooling to room temperature $ comment
$ ----- END OF PART II: TEMPERING -----

$ ----- PART III: SERVICE -----
create-heat-treatment service $ fifth heat treatment
append-ht-segment service $ append segment 1 "tempering"
edit-ht-segment service . s 25 $ define start temperature for HT
edit-ht-segment service . d n martensite $ define precipitation domain
edit-ht-segment service . l T_serv 0.033 $ Tend + heating rate
edit-ht-segment service . c Heating to service temperature $ comment

append-ht-segment service $ append segment 2
edit-ht-segment service . 2 0 100*60*60 $ Tdot + delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_100h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=100h

```



```

append-ht-segment service $ append segment 17
edit-ht-segment service . 2 0 500*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_3500h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=3500h

append-ht-segment service $ append segment 18
edit-ht-segment service . 2 0 500*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_4000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=4000h

append-ht-segment service $ append segment 19
edit-ht-segment service . 2 0 500*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_4500h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=4500h

append-ht-segment service $ append segment 20
edit-ht-segment service . 2 0 500*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_5000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=5000h

append-ht-segment service $ append segment 21
edit-ht-segment service . 2 0 1000*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_6000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=6000h

append-ht-segment service $ append segment 22
edit-ht-segment service . 2 0 3000*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_9000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=9000h

append-ht-segment service $ append segment 28
edit-ht-segment service . 2 0 10000*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_40000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=40000h

append-ht-segment service $ append segment 29
edit-ht-segment service . 2 0 10000*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_50000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=50000h

append-ht-segment service $ append segment 30
edit-ht-segment service . 2 0 10000*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_60000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=60000h

append-ht-segment service $ append segment 31
edit-ht-segment service . 2 0 10000*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_70000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=70000h

append-ht-segment service $ append segment 32
edit-ht-segment service . 2 0 10000*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_80000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=80000h

append-ht-segment service $ append segment 33
edit-ht-segment service . 2 0 10000*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_90000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=90000h

append-ht-segment service $ append segment 34
edit-ht-segment service . 2 0 10000*60*60 $ Tdot+delta_t
edit-ht-segment service . o +set-precipitation-parameter martensite t d e ddm_100000h $ change dislocation density
edit-ht-segment service . c isothermal service at 600C $ comment: sum=100000h
$$
$ ----- END OF PART V: SERVICE -----
$ *****
$ ***** PRECIPITATE SIMULATION FINISHED (BM) *****
$ ***** A 7

```

A.3. Matlab - Code

Wie bereits in Kapitel 3.3.1 erwähnt, besteht die Struktur des Matlab - Codes aus einem Hauptfile *Creep_model.m*, welches die eigentlichen Codeabschnitte, welche in verschiedene *Matlab.m* Files aufgesplittet sind, in der nachfolgenden Reihenfolge, lädt. Diese Files sind in den nachfolgenden Unterkapiteln vollständig abgebildet.

- *Creep_model.m*
- *Service_Conditions.m*
- *Experimental_Data.m*
- *Parameters.m*
- *microstructure_parameters.m*
- *model_parameters.m*
- *main_model.m*
- *processing_MatCalc_data.m*
- *plot_figures.m*
- *time_to_rupture_diagram.m*

A.3.1. Creep_model.m

```

% *_Creep Model_* according to "Modelling the creep behaviour
% of tempered martensitic steel based on a hybrid approach"
%
% Copyright 2017 Yadav, Krenmayr, Sonderegger, Riedlsperger, Schmid
%% Test conditions and related creepdata
% Clearing all variables except time_to_rupture_diagram_matrix
% to avoid erros

clearvars -except time_to_rupture_diagram_matrix

% default values experimental condition
defaultl1 = {'0', '1', '0', '0.1', '0'};

%% open subfile for service conditions
Service_Conditions

%% import of experimental data
Experimental_Data

%% General parametersettings

% Boltzmann constant
k = physconst('Boltzmann');
% maximal simulation hours [h]
TIME_MAX = max(CreepData(:,1))*3600;
% timestep [s]
TIME_STEP = 1;
% Calculation of the iterations
NUMBER_OF_ITERATIONS = round(TIME_MAX/TIME_STEP);
% Convert form °C in K
T = T+273;
% Convert form MPa in Pa
sigma_applied0 = sigma_applied0*10^6;
sigma_applied1 = sigma_applied1*10^6;

%% Material- and model-parameters
% load all parameter-data into a matrix
Parameters

% all variables from the matrix into their own variables
microstructure_parameters
model_parameters

%% Main model

main_model

%% Data visualisation

plot_figures

%% Time to rupture diagram

time_to_rupture_diagram

```


A.3.2. *Service_Conditions.m*

```

%% Open an input dialog window

% Some explanations of the dialog windows
disp('Note: In the following query windows you have to use');
disp('1/0 for the YES/NO ANSWERS');
disp('Note: In general:');
disp('Note: In the square brackets [] possible answers are shown');

% Dialog window, for choosing some calculation options
prompt1 = {'Use Matcalc data? [1][0]',...
'Calculation with Damage? [1][0]',...
'Use effective velocity v_eff for mobile dislocations? [1][0]',...
'Percent change per time step [%]',...
'Same parameters for different calculation options? [1][0]'};
dlg_title1 = 'Service Conditions';
num_lines1 = [0.8 45];
conditions1 = inputdlg(prompt1,dlg_title1,num_lines1,default1);

% Calculation options
matcalc = sscanf(sprintf('%s',conditions1{1,1}),'%f*');
damage_choice = sscanf(sprintf('%s',conditions1{2,1}),'%f*');
v_eff_choice = sscanf(sprintf('%s',conditions1{3,1}),'%f*');

% Allowed percentage change, each time step
percentage_change = sscanf(sprintf('%s',conditions1{4,1}),'%f*');

% Comparison of the calculation options
comparison_choice = sscanf(sprintf('%s',conditions1{5,1}),'%f*');

% Some explanations of the dialog windows
if v_eff_choice == 1 && matcalc == 0
    matcalc = 1;
    disp('Error: To calculate v_eff, Matcalc data is necessary');
    disp('Error: v_eff will be calculated automatically');
    disp('Error: with Matcalc data');
end

%% Different starting values for the different calculations
if comparison_choice == 0

    if v_eff_choice == 0 && damage_choice == 1
        default = {'650','80','BM','80','1000','350','5.9e-8','6e7',...
'3.87621077e-21','5.01000152e-18','4e14','5e13','2e14',...
'9.6e-14'};
    end

    if v_eff_choice == 0 && damage_choice == 0
        default = {'650','80','BM','80','1200','350','5.9e-8','6e7',...
'3.87621077e-21','5.01000152e-18','4e14','5e13','2e14',...
'1.05e-13'};
    end

    if v_eff_choice == 1 && damage_choice == 1

```

```

        default = {'650','80','BM','80','1000','350','5.9e-8','6e7',...
        '3.87621077e-21','5.01000152e-18','4e14','5e13','2e14',...
        '9.4e-14'};
    end

    if v_eff_choice == 1 && damage_choice == 0
        default = {'650','80','BM','80','1200','350','5.9e-8','6e7',...
        '3.87621077e-21','5.01000152e-18','4e14','5e13','2e14',...
        '1.05e-13'};
    end

end

if comparison_choice == 1
    default = {'650','80','BM','80','1000','350','5.9e-8','6e7',...
    '3.87621077e-21','5.01000152e-18','4e14','5e13','2e14','9.6e-14'};
end

%% Open an input dialog window

prompt = {'Temperature [°C]',...
'Experimental Stress Data [MPa] only [80][100] available',...
'Material','Applied Stress [MPa]','Damageparameter a1',...
'Damageparameter A','Annihilation length danh','Beta',...
'Ds','Dvp','disdens_m_start','disdens_dip_start',...
'disdens_b_start','vc_constant'};
dlg_title = 'Service Conditons';

%Size of the input window: heights of 0.8 letter, width of 45 letters
num_lines = [0.8 45];
conditions = inputdlg(prompt,dlg_title,num_lines,default);

% Service temperature [°C]
T = sscanf(sprintf('%s',conditions{1,1}),'%f*');

% Experimental data for different applied stress [Pa]
sigma_applied0 = sscanf(sprintf('%s',conditions{2,1}),'%f*');

% Applied stress [Pa]
sigma_applied1 = sscanf(sprintf('%s',conditions{4,1}),'%f*');

% Damage parameter a1
a1 = sscanf(sprintf('%s',conditions{5,1}),'%f*');

%Damage parameter A
A = sscanf(sprintf('%s',conditions{6,1}),'%f*');

% Annihilation length danh
d_anh = sscanf(sprintf('%s',conditions{7,1}),'%f*');

% Beta
beta = sscanf(sprintf('%s',conditions{8,1}),'%f*');

% Selfdiffusion coefficient

```

```
Ds = sscanf(sprintf('%s',conditions{9,1}),'%f*');

% Pipedissufion coefficient
Dvp = sscanf(sprintf('%s',conditions{10,1}),'%f*');

% Starting values of the different dislocation densities
disdens_m = sscanf(sprintf('%s',conditions{11,1}),'%f*');
disdens_dip = sscanf(sprintf('%s',conditions{12,1}),'%f*');
disdens_b = sscanf(sprintf('%s',conditions{13,1}),'%f*');

% Constant climb velocity
vc_neu = sscanf(sprintf('%s',conditions{14,1}),'%f*');
```

A.3.3. *Experimental_Data.m*

```

% Create the correct file- and spreadsheet name
spreadsheet = [sscanf(sprintf('%s',conditions{3,1}),'%s'),...
    '_',sprintf('%d',T),'C_',sprintf('%d',sigma_applied0),'MPa'];
name = [sscanf(sprintf('%s',conditions{3,1}),'%s'),...
    ' / ',sprintf('%d',T),'C / ',sprintf('%d',sigma_applied0),'MPa'];

% Import the data from the Excel-file
filename = 'Creep data.xlsx';
CreepData = xlsread(filename,spreadsheet,'C10:D5000');

% Smoothing of the creepdata
CreepData(:,2) = smooth(CreepData(:,2),5);

% Erase all CreepData more than 6% elongation
CreepData(CreepData(:,2)>6,:)=[];

% Evaluate the maximum time of the experimental data
rup_time_exp = max(CreepData(:,1));

% Import the data for the time to rupture diagrams from the Excel-file
time_to_rupture_experimental_data_NIMS = xlsread(...
'Zeitstandsdaten.xlsx','NIMS','A2:B6');
time_to_rupture_experimental_data_ECCC = xlsread(...
'Zeitstandsdaten.xlsx','ECCC','A2:B44');
time_to_rupture_experimental_data_ASME = xlsread(...
'Zeitstandsdaten.xlsx','ASME','A2:B7');

```

A.3.4. *Parameters.m*

```
%% Import the data from the Excel-file
filename = 'Parameters.xlsx';
micro_parameters = xlsread(filename, spreadsheet, 'C3:C25');
mod_parameters = xlsread(filename, spreadsheet, 'H3:H27');
```

A.3.5. *microstructure_parameters.m*

```

%% Starting values and parameters

% Total dislocation density [m^-2]
disdens_t = micro_parameters(4,1);

% Subgrain radius [m]
R_sbg = micro_parameters(6,1);

% M23C6 (T)
rp1 = micro_parameters(9,1); % mean radius [m]
rp01 = micro_parameters(9,1); % initial radius
Nvp01 = micro_parameters(10,1); % number density [m^-3]

% MX (martensite) (T)
rp2 = micro_parameters(13,1); % mean radius [m]
rp02 = micro_parameters(13,1); % initial radius
Nvp02 = micro_parameters(14,1); % number density [m^-3]

% MX (austenite) (T)
rp3 = micro_parameters(17,1); % mean radius [m]
rp03 = micro_parameters(17,1);
Nvp03 = micro_parameters(18,1); % number density [m^-3]
% Note: Is rp3 constant?

% Shear modulus [Pa] (T)
% in Ghoniem called  $\mu$ 
G = micro_parameters(20,1);

% Burgers vector [m]
b = micro_parameters(21,1);
% one lattice parameter

% Activation-energy for dislocations [eV]
Q = micro_parameters(22,1);
% Note: From where is it?

% Atomic Volume [m^3]
omega = micro_parameters(23,1);
% from Fritz Krumphals' PhD-Thesis - spheric volume with half atomic
% distance as radius

```

A.3.6. *model_parameters.m*

```

% Taylorfactor: Relation of the shear flow stress of a single crystal
% to the uniaxial flow stress of a polycrystal
M = mod_parameters(6,1);

% alpha: dislocation interaction constant from Abe?
alpha = mod_parameters(7,1);

% Weight factor for dislocation stress field
c_dip = mod_parameters(9,1);

% Size of the unit cell [m]
ag = mod_parameters(4,1);

rate_0 = mod_parameters(3,1);

% Coarsening parameter for M23C6
Kd1 = mod_parameters(12,1);
Kp1 = mod_parameters(13,1);

% Coarsening parameter for MX
Kd2 = mod_parameters(16,1);
Kp2 = mod_parameters(17,1);

% Activation energy for Pipediffussion
W = mod_parameters(19,1);

% Transfer coefficient of vacancies from the dislocation core to jogs
eta = mod_parameters(20,1);

% Constant that accounts for the fraction of dipoles that annihilate
% when transforming to boundary dislocations (for eq.(6) in Yadav)
zeta = mod_parameters(21,1);

% Spacing of dislocation boundary [m]
Hd = mod_parameters(22,1);

% Poisson's ratio
ny = mod_parameters(23,1);

```

A.3.7. *main_model.m*

```

%% Function for Matcalc data
%Transfers the following data:
%ND_Selected_unique:   Number density values of all precipitates except
%                      of the precipitates located in the inner of the
%                      subgrains
%MD_Selected_unique:   Mean diameter values of all precipitates except
%                      of the precipitates located in the inner of the
%                      subgrains
%ND_unSelected_unique: Number density values of all precipitates
%                      located in the inner of the subgrains
%MD_unSelected_unique: Mean diameter values of all precipitates
%                      located in the inner of the subgrains

if matcalc == 1
    [ND_Selected_unique,MD_Selected_unique,ND_unSelected_unique,...
    MD_unSelected_unique] = processing_MatCalc_data();
    testmatrix=[];
    [rows_ND_selected_int,columns_ND_unique] = ...
    size(ND_Selected_unique);
    [rows_ND_unselected_int,columns_ND_unselected_unique] =...
    size(ND_unSelected_unique);
end

%% Generating an empty matrix for time to rupture diagram data
% if there is no existing one because of earlier calculations

if exist('time_to_rupture_diagram_matrix')
else
    time_to_rupture_diagram_matrix = [];
end

%% Starting conditions

TIME_STEP = 10^(-5);
v_eff = 0;
Msb = 0;
time = 0;
strain = 0;
rate_Rsb = 0;
rate_b=0;
rate_m=0;

% Damage Parameters
D_cav=0;
D_prc1=0;
D_prc2=0;
D_prc=0;

% Generating an empty table for saving the simulation data
data = zeros(NUMBER_OF_ITERATIONS,22); % 22 variables

%% Main loop

for i=1:NUMBER_OF_ITERATIONS

```



```

%Corrected applied strain with lateral strain
sigma_applied = sigma_applied1*(1+strain*0.3);

% Internal stress (eq. (3) in Yadav)
sigma_i = alpha*G*M*b*sqrt(c_dip*disdens_dip+disdens_m);

% Effective stress (eq. (2) in Yadav)
sigma_effective = sigma_applied - sigma_i;

% Glide velocity (eq.(1) in Yadav or eq. (12) in Ghoniem)
vg = a1*exp((-Q)/(k*T))*sigma_effective*(omega/(k*T));

% Path length for diffusion along the core
% (eq.(15_125) in Theory of Dislocations)
Lp = ag*sqrt(2)*exp(W/(2*k*T));

% Climb velocity for pipe diffusion (eq. (34) in Ghoniem)
vcp = (2*pi*b*Dvp*sigma_effective*omega)/(Lp^2*k*T);

% Length that is governing the range of the elastic interaction between
% the dislocation and the defects (eq. (20) in Ghoniem)
L_alpha_v = ((1+ny)*G*b*0.5*omega)/(3*pi*(1-ny)*k*T);

% Climb velocity for lattice diffusion (eq. (27)+(26)+(24) in Ghoniem)
vcl = ((2*pi*eta*Ds*omega*sigma_effective)/...
        ((1-(eta*log(L_alpha_v*sqrt(disdens_t))))*b*k*T));

% Summed climb velocity of dislocations (Ghoniem)
vc =(vcp+vcl);

% Surface energy of the subgrain boundary (eq. (36) in Ghoniem)
Ysb = (G*b^2*disdens_b*R_sbg)/3;

% Subgrain-growth pressure (eq. (38) in Ghoniem)
Ps = (4*G*b^2*disdens_b)/3;

% Dislocation spacing within the subgrain walls (eq.(3) in Ghoniem)
Hb = 1/((disdens_b+disdens_dip)*R_sbg);

%% Saving the simulation data after every time step

data(i,1) = time;
data(i,2) = strain;
data(i,3) = disdens_m;
data(i,4) = disdens_dip;
data(i,5) = disdens_b;
data(i,6) = disdens_t;
data(i,7) = R_sbg;
data(i,8) = sigma_applied;
data(i,9) = rp1;
data(i,10) = rp2;
data(i,11) = sigma_effective;
data(i,12) = sigma_i;
data(i,13) = vg;

```

```

data(i,14) = vc;
data(i,15) = Ysb;
data(i,16) = Ps;
data(i,17) = Hb;
data(i,18) = Msb;
data(i,19) = D_cav;
data(i,20) = D_prc1;
data(i,21) = D_prc2;
data(i,22) = D_prc;
data(i,23) = v_eff;
data(i,24) = vc_neu;

%% Calculation of the number density without MatCalc data
Nvp1 = Nvp01*rp01^3/rp1^3;
Nvp2 = Nvp02*rp02^3/rp2^3;

%% Calculation with MatCalc data
% Because of the variable time step, an interpolation of the MatCalc
% data is necessary. For that interpolation the matlab function interp1
% is used.

if matcalc == 1

% for example the data of table "ND_Selected_unique" gets
% interpolated by using the function interp1 by using the first
% column (time), where the function is looking for the correct row
% (time / 3600 because of hours to seconds) and is interpolating
% the correct value in a linear way.

    ND_selected_int=interp1(ND_Selected_unique(:,1),...
    ND_Selected_unique,time/3600,'linear');
    MD_selected_int=interp1(MD_Selected_unique(:,1),...
    MD_Selected_unique,time/3600,'linear');

    ND_unselected_int=interp1(ND_unSelected_unique(:,1),...
    ND_unSelected_unique,time/3600,'linear');
    MD_unselected_int=interp1(MD_unSelected_unique(:,1),...
    MD_unSelected_unique,time/3600,'linear');

%starting values for the following loop

rN_selected = 0;
rN_eff_unselected = 0;
Nvp_eff_unselected = 0;

% loop for the calculation of the sum of Nvp_i*rp_i^2
% of the precipitates located in subgrains and subgrain boundaries
for m=2:columns_ND_unique
    rN_selected = rN_selected + ND_selected_int(1,m)*...
    (MD_selected_int(1,m)/(2*10^9))^2;
end

% loop for the calculation of the effective radius and
% number density of the precipitates located in dislocations
for n=2:columns_ND_unselected_unique
    rN_eff_unselected = rN_eff_unselected + ...

```

```

    ND_unselected_int(1,n)*(MD_unselected_int(1,n)/(2*10^9));
    Nvp_eff_unselected = Nvp_eff_unselected + ...
    ND_unselected_int(1,n);
end

r_eff_unselected = rN_eff_unselected / Nvp_eff_unselected;

% Constraint for Mobility of subgrains (eq.(41) in Ghoniem)
if Ps > 2*pi*(rN_selected)*Ysb
    % Mobility of subgrains (eq.(39)+(40) in Ghoniem)
    Msb = ((2*pi*eta*D_s*omega)/(b*k*T))+...
    ((2*pi*b*Dvp*omega)/(Hb^2*k*T));
end

% Constraint for Mobility of subgrains (eq.(41) in Ghoniem)
if Ps < 2*pi*(rN_selected)*Ysb
    % Mobility of subgrains (eq.(43) in Ghoniem)
    Msb = D_s*omega/(4*pi*(rp1^4+rp2^4)*(Nvp1+Nvp2)*k*T);
end

% Boundary dislocation rate (eq.(6) in Yadav)
rate_b = ((8-zeta)*disdens_dip*vc_neu/Hb)- ...
(disdens_b*Msb/R_sbg*...
(Ps-(2*pi*rN_selected)*Ysb));

% Subrain growth rate (eq.(7) in Yadav)
rate_Rsb = Msb*(Ps-(2*pi*(rN_selected)*Ysb));

% Effective velocity of mobile dislocations according to a
% consideration of Prof. Sonderegger.
v_eff = vg*vc/(vc+vg*(Nvp_eff_unselected*r_eff_unselected^3)*pi/2);
end

%% Calculation without MatCalc data

if matcalc == 0
    % Constraint for Mobility of subgrains (eq.(41) in Ghoniem)
    if Ps > 2*pi*(rp1^2*Nvp1+rp2^2*Nvp2)*Ysb

        % Mobility of subgrains (eq.(39)+(40) in Ghoniem)
        Msb = ((2*pi*eta*D_s*omega)/(b*k*T))+...
        ((2*pi*b*Dvp*omega)/(Hb^2*k*T));

    end

    % Constraint for Mobility of subgrains (eq.(41) in Ghoniem)
    if Ps < 2*pi*(rp1^2*Nvp1+rp2^2*Nvp2)*Ysb

        % Mobility of subgrains (eq.(43) in Ghoniem)
        Msb = D_s*omega/(4*pi*(rp1^4+rp2^4)*(Nvp1+Nvp2)*k*T);

    end

    % Boundary dislocation rate (eq.(6) in Yadav)
    rate_b = ((8-zeta)*disdens_dip*vc_neu/Hb)- ...

```

```

(disdens_b*Msb/R_sbg*...
(Ps-(2*pi*(rp1^2*Nvp1+rp2^2*Nvp2)*Ysb)));

% Subrain growth rate (eq.(7) in Yadav)
rate_Rsb = Msb*(Ps-(2*pi*(rp1^2*Nvp1+rp2^2*Nvp2)*Ysb));

% Calculation of v_eff is not possible without MatCalc data
v_eff = 0;
end

%% Calculation without v_eff

if v_eff_choice == 0

% Mobile dislocation rate (eq.(4) in Yadav)
rate_m = (vg*disdens_m^(3/2)-(vg*disdens_m/(2*R_sbg))-...
(8*disdens_m^(3/2)*vc_neu)+beta*vg*R_sbg/(Hb^2)-...
(d_anh*disdens_m*(disdens_m+disdens_dip)*vg));

% Dipole dislocation rate (eq.(5) in Yadav)
rate_dip = (vg*disdens_m/(2*R_sbg))-(8*disdens_dip*...
vc_neu/Hb)-(d_anh*disdens_m*disdens_dip*vg);

end

%% Calculation with v_eff

if v_eff_choice == 1

% Mobile dislocation rate (eq.(4) in Yadav)
rate_m = (v_eff*disdens_m^(3/2)-(v_eff*disdens_m/(2*R_sbg))-...
(8*disdens_m^(3/2)*vc_neu)+beta*v_eff*R_sbg/(Hb^2)-...
(d_anh*disdens_m*(disdens_m+disdens_dip)*v_eff));

% Dipole dislocation rate (eq.(5) in Yadav)
rate_dip = (v_eff*disdens_m/(2*R_sbg))-(8*disdens_dip*vc_neu/Hb)-...
(d_anh*disdens_m*disdens_dip*v_eff);

end

%% Calculation with the modified Orowan equation

if damage_choice == 1

if v_eff_choice == 0
rate_strain = disdens_m*vg*b/((1-D_prc)*(1-D_cav)*M);
end

if v_eff_choice == 1
rate_strain = disdens_m*v_eff*b/((1-D_prc)*(1-D_cav)*M);
end

end

%% Calculation with the Orowan equation

```

```

if damage_choice == 0

    if v_eff_choice == 0
        rate_strain = disdens_m*vg*b/M;
    end

    if v_eff_choice == 1
        rate_strain = disdens_m*v_eff*b/M;
    end

end

%% Preceipitate coarsening
% Note: No precipitation coarsening of rp3

rp1 = (Kd1*data(i,1)+rp01^3)^(1/3);
l = 4; % for M23C6

rp2 = (Kd2*data(i,1)+rp02^3)^(1/3);
l = 6; % for MX

%% Calculation of the damageparameter

% Coarsening of precipitates (eq.(10)+(11) in Yadav)
D_prc1 = 1-(Kp1*data(i,1)+1)^(1/(1-l));
D_prc2 = 1-(Kp2*data(i,1)+1)^(1/(1-l));
D_prc = 1-((1-D_prc1)^(-1)*(1-D_prc2)^(-1))^(-1);

% Cavitation softening (eq.(12) in Yadav)
rate_D_cav = (A*rate_strain*strain);

%% Calculation of the variable time step

Timestep_m = abs((percentage_change*disdens_m)/(100*rate_m));
Timestep_dip = abs((percentage_change*disdens_dip)/(100*rate_dip));
Timestep_b = abs((percentage_change*disdens_b)/(100*rate_b));
Timestep_Rsb = abs((percentage_change*R_sbg)/(100*rate_Rsb));
Timestep_strain = abs((percentage_change*strain)/(100*rate_strain));
Timestep_Dcav = abs((percentage_change*D_cav)/(100*rate_D_cav));

% Choosing the smallest step
TIME_STEP = min([Timestep_m Timestep_dip Timestep_b Timestep_Rsb ...
Timestep_strain Timestep_Dcav]);

if TIME_STEP == 0
    TIME_STEP = 10^(-5);
end

%% Time step
time = time + TIME_STEP;

%% Calculation after time step

disdens_m = disdens_m + rate_m*TIME_STEP;

```

```

disdens_dip = disdens_dip + rate_dip*TIME_STEP;
disdens_b = (disdens_b + rate_b*TIME_STEP);
disdens_t = disdens_m + disdens_dip + disdens_b;
R_sbg = R_sbg + rate_Rsb*TIME_STEP;
D_cav = D_cav + rate_D_cav*TIME_STEP;
strain = strain + rate_strain*TIME_STEP;

%% Break options

if disdens_m < 0
    disp('Error : disdens_m < 0');
    return
end

if disdens_dip < 0
    disp('Error : disdens_dip < 0');
    return
end

if disdens_b < 0
    disp('Error : disdens_b < 0');
    return
end

if D_cav >= 1 || D_prc >= 1
    data = data(1:i,:);
    break
end

if damage_choice == 1
    if strain >= 0.06
        data = data(2:i,:);
        break
    end
end

if damage_choice == 0
    if strain >= 0.025
        data = data(2:i,:);
        break
    end
end

end

data(:,1) = data(:,1)/3600; % convert time from [s] to [h]
data(:,2) = data(:,2)*100; % convert strain from [] to [%]
data(:,23) = data(:,23)*100; % convert strain from [] to [%]
rup_time_mod = time/3600;

```

A.3.8. *processing_MatCalc_data.m*

```

%% Function for Matcalc data
%Transfers the following data:
%ND_Selected_unique:   Number density values of all precipitates except
%                       of the precipitates located in the inner of
%                       the subgrains
%MD_Selected_unique:   Mean diameter values of all precipitates except
%                       of the precipitates located in the inner of
%                       the subgrains
%ND_unSelected_unique: Number density values of all precipitates located
%                       in the inner of the subgrains
%MD_unSelected_unique: Mean diameter values of all precipitates located
%                       in the inner of the subgrains

function [ND_Selected_unique,MD_Selected_unique,...
         ND_unSelected_unique,MD_unSelected_unique] = interpolation()

%% Matcalc input from Excel Files
% Suggestion for the names of the Excel files
default = {'mean_diameter.xlsx', 'number_density.xlsx'};

% Open an input dialog window

prompt = {...
'Name of the Excel file containing the mean-diameter-data',...
'Name of the Excel file containing the number-density-data'};
dlg_title = 'Excel - Input';
% Size of the input window: highth of one letter, width of 45 letters
num_lines = [1 45];
conditions = inputdlg(prompt,dlg_title,num_lines,default);

% Mean diameter data
filename2 = conditions{1,1};

% Numberdensity data
filename1 = conditions{2,1};

%% Correction of the arrangement of the columns
% There are some identical columns which contains the same time data.
% Every column, which includes time data, is named "auto"
% Therefore "auto" is used to compare the columns

s1='auto';

% [ND_num, ND_txt, ND_raw] is splitting the table by the following way:
% ND_num:   numerical data
% ND_txt:   text data
% ND_raw:   all data

% The text data is used for the labeling

[ND_num, ND_txt, ND_raw] = xlsread(filename1);
[MD_num, MD_txt, MD_raw] = xlsread(filename2);

% This size check is used to get the correct data for the calculation
% of the loops
[rows_ND,columns_ND] = size(ND_raw);

```

```

% Each first column of the data labels is the time
% for some easier arrangement the first column is picked up separately
ND_raw_sort = ND_raw(:,1);
MD_raw_sort = MD_raw(:,1);

ND_num_sort = ND_num(:,1);
MD_num_sort = MD_num(:,1);

% In the for loop, the columns of the tables are getting arranged like:
% Time (auto) | Precipitate data 1 |Prec. data 2| Prec. data 3|...

for p=1:columns_ND
    s2=ND_raw(1,p);
    tf = strcmp(s1,s2);

    if (tf==0)
        ND_raw_sort = [ND_raw_sort,ND_raw(:, p)];
        ND_num_sort = [ND_num_sort,ND_num(:, p)];

        MD_raw_sort = [MD_raw_sort,MD_raw(:, p)];
        MD_num_sort = [MD_num_sort,MD_num(:, p)];
    end
end

[rows_ND_neu, column_ND_new] = size(ND_raw_sort);

%the text data is used for the labeling of the GUI
Selection_of_Prec_txt = ND_raw_sort(1, 2:column_ND_new);

%% Suggestion for the positions of the precipitates
% By using the names of the vanadiumnitrides a suggestion for the
% positions of the precipitates is generated.
% The suggestion is getting inserted in the GUI

default_1 = {};
VN1 = 'VN(aust,g)';
VN2 = 'VN(mart,g)';
VN3 = 'VN(mart,d)';
VN4 = 'VN(mart,s)';

for d=1:column_ND_new-1

    VN = Selection_of_Prec_txt(1,d);
    tf_VN_1 = strcmp(VN1,VN);
    tf_VN_2 = strcmp(VN2,VN);
    tf_VN_3 = strcmp(VN3,VN);
    tf_VN_4 = strcmp(VN4,VN);

    if tf_VN_1 || tf_VN_2 || tf_VN_3 || tf_VN_4 == 1

        default_1 = [default_1, '0'];
    else

```



```

        default_1 = [default_1, '1'];
    end

end

%% Some explanations of the dialog windows

disp ('In the following window, the precipitates');
disp ('have to be classified according to their positions. ');
disp ('A suggestion has already been inserted, ');
disp ('however this is to be controlled by the user. ');

disp ('A distinction must be made between precipitates located at ');
disp ('the inner of the subgrains and the outer of the subgrains. ');
disp ('Precipitates located at the inner of the subgrains : 0 ');
disp ('Precipitates located at the outer of the subgrains : 1 ');

% correction of the row height because of a too large window
line_height = 17.8 / column_ND_new;

% Open an input dialog window for the classification of precipitates
prompt = Selection_of_Prec_txt;
dlg_title = 'Classification of Precipitates';
num_lines = [line_height 45];
conditions2 = inputdlg(prompt,dlg_title,num_lines,default_1,'on');

%% Selection of the positions of the precipitates

% One table containing the names of the precipitates, located
% at the outer of the subgrains, is generated
Selection_of_Prec = [Selection_of_Prec_txt.',conditions2]';

% The starting vector for the data of the precipitates located
% at the outer of the subgrains is generated for the number density
% and for the mean diameter. Each vector contains the time at the
% beginning
ND_Selected_Prec_num = ND_num_sort(:, 1);
MD_Selected_Prec_num = MD_num_sort(:, 1);

% The starting vector for the data of the precipitates located
% at the inner of the subgrains is generated for the number density
% and for the mean diameter. Each vector contains the time at the
% beginning

ND_unSelected_Prec_num = ND_num_sort(:, 1);
MD_unSelected_Prec_num = MD_num_sort(:, 1);

Selected_Prec_ND = [];

% In the for loop, the columns of the tables are getting arranged like:

% Precipitates located at the outer of the subgrains :
% Time (auto) | Precipitate data 1 |Prec. data 3| Prec. data 4|...

% Precipitates located at the inner of the subgrains :

```

```

% Time (auto) | Precipitate data 2 |Prec. data 5| Prec. data 6|...

for q=1:column_ND_new-1

    s3='0';
    s4=Selection_of_Prec(2,q);
    tf = strcmp(s3,s4);

    if (tf~=1)

        ND_Selected_Prec_num = [ND_Selected_Prec_num,ND_num_sort(:,q+1)];
        MD_Selected_Prec_num = [MD_Selected_Prec_num,MD_num_sort(:,q+1)];
        Selected_Prec_ND = [Selected_Prec_ND,Selection_of_Prec(:,q)];

    else

        ND_unSelected_Prec_num = ...
        [ND_unSelected_Prec_num,ND_num_sort(:, q+1)];
        MD_unSelected_Prec_num = ...
        [MD_unSelected_Prec_num,MD_num_sort(:, q+1)];

    end

end

% If there are some identical time steps, the table is getting corrected
% by using the matlab function "unique"

ND_Selected_unique = unique(ND_Selected_Prec_num,'rows');
MD_Selected_unique = unique(MD_Selected_Prec_num,'rows');

ND_unSelected_unique = unique(ND_unSelected_Prec_num,'rows');
MD_unSelected_unique = unique(MD_unSelected_Prec_num,'rows');

end

```

A.3.9. *plot_figures.m*

```
%% Plot the simulated data

figure('Name', spreadsheet, 'NumberTitle', 'off')
plot(data(:,1), data(:,2), '-k')
hold on
plot(CreepData(:,1), CreepData(:,2), '--k')
title(name)
xlabel('time / h'); ylabel('strain / %')
legend('Simulation', 'Experiment-MHI', 'location', 'northwest')
```

A.3.10. *time_to_rupture_diagram.m*

```

%% time to rupture diagram

% After a successful creep simulation the following question appears.
answer = questdlg(...
'Save data for the calculation of a time to rupture diagram?',...
'time to rupture diagram', 'Yes', 'No', 'Yes');

switch answer
    case 'Yes'
        disp(['saved'])
        time_to_rupture_diagram_choice = 1;

    case 'No'
        time_to_rupture_diagram_choice = 2;
end

% By pressing the "yes" button the data of the stress and time is saved
% to a table with some data from some past calculations

if time_to_rupture_diagram_choice == 1
    time_to_rupture_diagram_data = [sigma_applied1 time/3600];
    time_to_rupture_diagram_matrix = [time_to_rupture_diagram_matrix;...
    time_to_rupture_diagram_data];
end

%% Plott creep data

% After the saving the following question appears.
answer1 = questdlg(...
'Do you want to plot the time to rupture diagram?',...
'time to rupture diagram', 'Yes', 'No', 'Yes');

switch answer1
    case 'Yes'
        time_to_rupture_diagram_choice = 1;

    case 'No'
        time_to_rupture_diagram_choice = 2;
end

% By pressing the "yes" button the time to rupture diagram gets
% plotted.

if time_to_rupture_diagram_choice == 1

    time_to_rupture_diagram_matrix = ...
    unique(time_to_rupture_diagram_matrix,'rows');
    time_to_rupture_diagram_matrix = ...
    sortrows(time_to_rupture_diagram_matrix,1);

    % Generating the time to rupture figure
    figure
    loglog(time_to_rupture_diagram_matrix(:,2),...
    time_to_rupture_diagram_matrix(:,1),'-xr');
    title('time to rupture diagram')
    xlabel('time / h'); ylabel('Stress / MPa')

```

```
grid on
hold on
% For a better understanding of the simulated data, there is also
% some experimental data plotted.
loglog(time_to_rupture_experimental_data_NIMS(:,1),...
time_to_rupture_experimental_data_NIMS(:,2)*1000000,'--ok');
hold on
loglog(time_to_rupture_experimental_data_ECCC(:,1),...
time_to_rupture_experimental_data_ECCC(:,2)*1000000,'-.*k',...
'MarkerIndices',1:5:length(time_to_rupture_experimental_data_ECCC...
(:,2)));
hold on
loglog(time_to_rupture_experimental_data_ASME(:,1),...
time_to_rupture_experimental_data_ASME(:,2)*1000000,':sk');
legend('Simulation','NIMS','ECCC','ASME','location','northwest')

end
```

A.4. Matlab - Simulationsergebnisse

In den nachfolgenden Unterkapiteln werden einige unterschiedliche Simulationsergebnisse vorgestellt. Dabei wurde beispielsweise in Kapitel A.4.1 die Simulation ohne Berücksichtigung der MatCalc - Daten durchgeführt und somit die Ausscheidungsdaten mittels der Ostwaldgleichung (Gleichung 2.31) berechnet. Außerdem wurde die Simulation mittels der modifizierten Orowan Gleichung (Gleichung 2.25) und der Gleitgeschwindigkeit v_g (Gleichung 2.9) durchgeführt.

In Kapitel A.4.2 wurde die Simulation ebenfalls mittels der modifizierten Orowan Gleichung (Gleichung 2.25) und der Gleitgeschwindigkeit v_g (Gleichung 2.9) durchgeführt. Der Unterschied zu der in Kapitel A.4.1 aufgezeigten Simulation besteht in der Nutzung der MatCalc - Daten.

Die Simulationsergebnisse, welche in Kapitel A.4.3 aufgezeigt sind, werden mittels der modifizierten Orowan Gleichung (Gleichung 2.25) und im Gegensatz zu den Ergebnissen von Kapitel A.4.1 und A.4.2 mit der effektiven Geschwindigkeit von mobilen Versetzungen v_{eff} (Gleichung 2.30) durchgeführt.

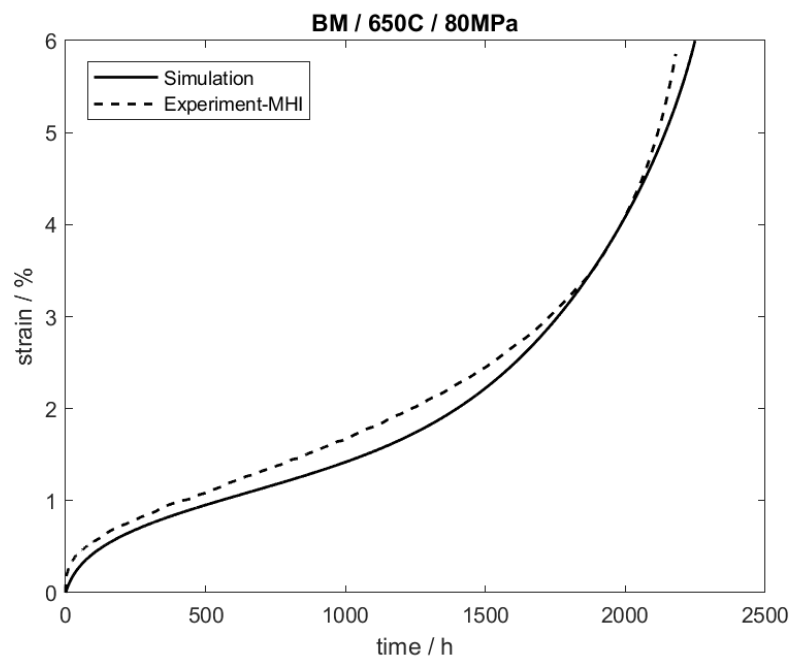
In Kapitel A.4.4 werden die Simulationsergebnisse veranschaulicht, welche mittels der originalen Orowan Gleichung (Gleichung 2.5) durchgeführt wurden. Die Ausscheidungsdaten werden hierbei mittels der Ostwaldgleichung (Gleichung 2.31) berechnet und die Berechnung wird unter der Nutzung der Gleitgeschwindigkeit v_g (Gleichung 2.9) durchgeführt

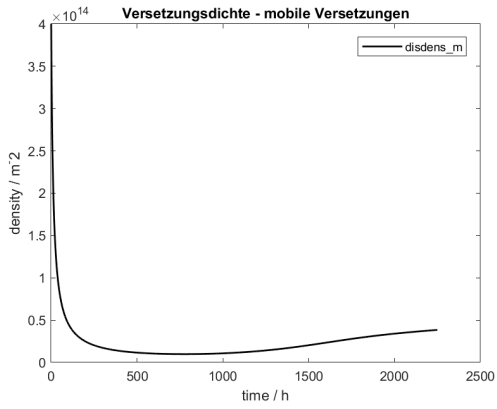
In den Tabellen 7, 8, 9, 10 und 11 sind jeweils die verwendeten Material- und Fit - Parameter der jeweils durchgeführten Simulation zusammengefasst.

A.4.1. Berechnung mittels Ostwald Gleichung, unter der Berücksichtigung von Damage mit v_g

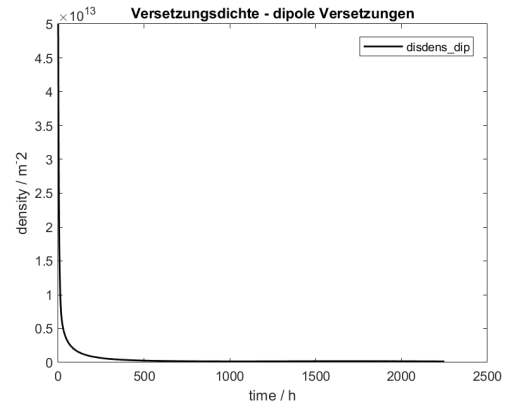
Tabelle 8.: Fit - Parameter

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
a_1	= 1000	[]	Parameter für die Geschwindigkeit von Versetzungsgleiten
A	= 350	[]	Materialkonstante
β	= $6 \cdot 10^7$	[]	Parameter zur Bestimmung der Quellstärke
d_{anh}	= $5,9 \cdot 10^{-8}$	[m]	Längenparameter
D_s	= $3,87621077 \cdot 10^{-21}$	$[\frac{m^2}{s}]$	Selbstdiffusionskoeffizient
D_{vp}	= $5,01000152 \cdot 10^{-18}$	$[\frac{m^2}{s}]$	Diffusionskoeffizient an den Versetzungslinien
$\rho_{m_{start}}$	= $4 \cdot 10^{14}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - mobile Versetzungen
$\rho_{dip_{start}}$	= $5 \cdot 10^{13}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - Dipole
$\rho_{b_{start}}$	= $4 \cdot 10^{14}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - Subkörner
v_{const}	= $9,6 \cdot 10^{-14}$	$[\frac{m}{s}]$	Konstante Klettergeschwindigkeit von Versetzungen

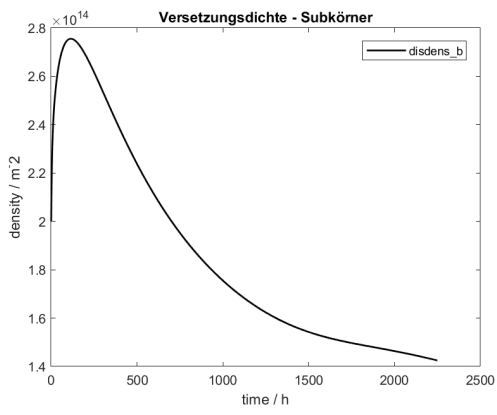
Abbildung 62.: Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650°



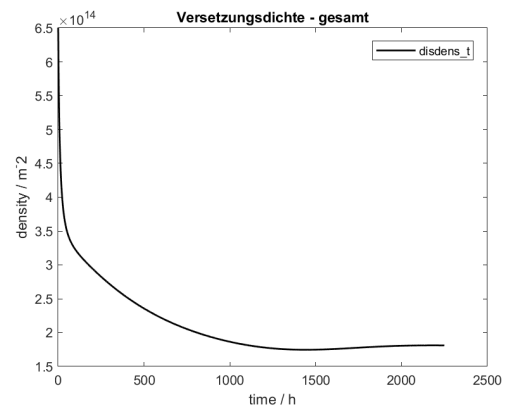
(a) ρ_m



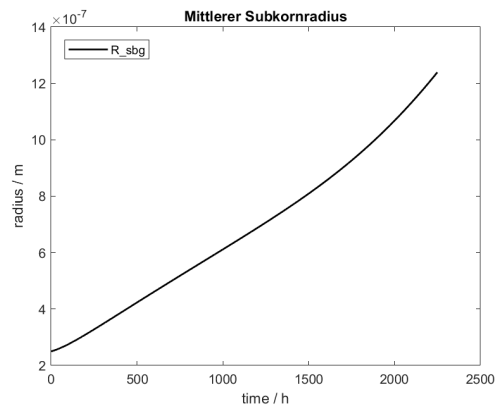
(b) ρ_{dip}



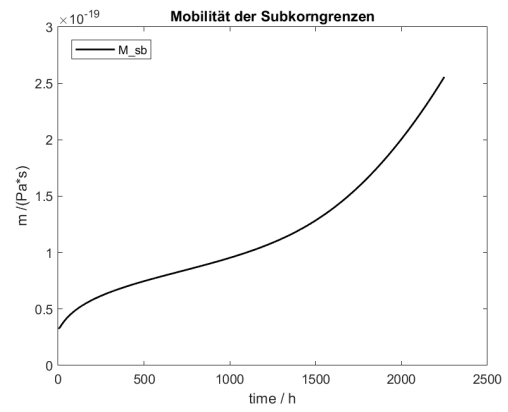
(c) ρ_b



(d) ρ_t

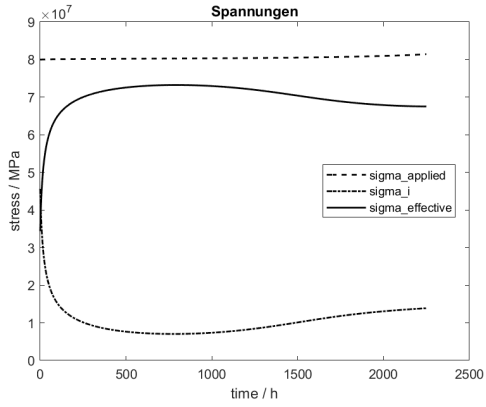


(e) R_{sbg}

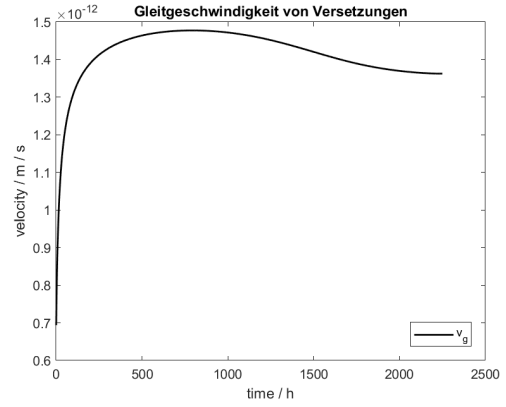


(f) M_{sb}

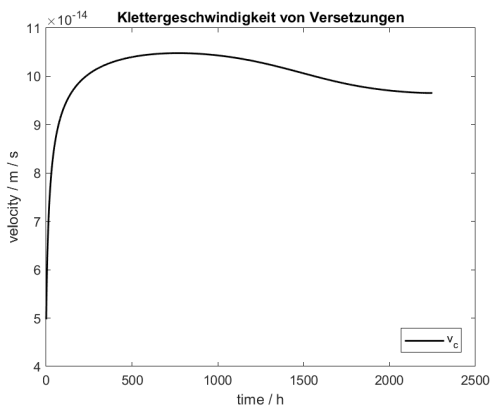
Abbildung 63.: Simulationsergebnisse



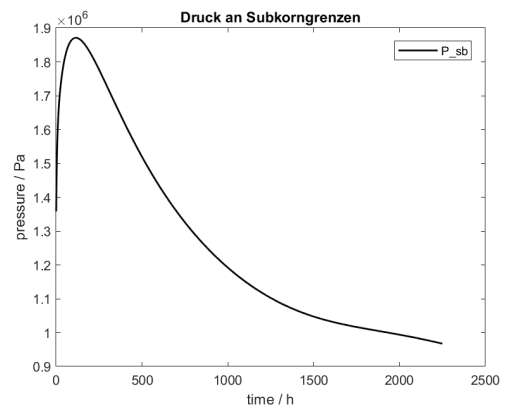
(a) σ_{app} , σ_i und σ_{eff}



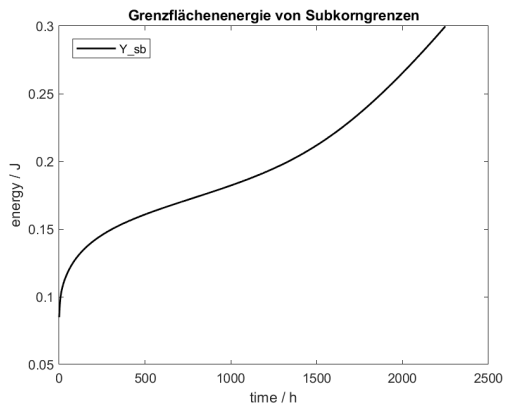
(b) v_g



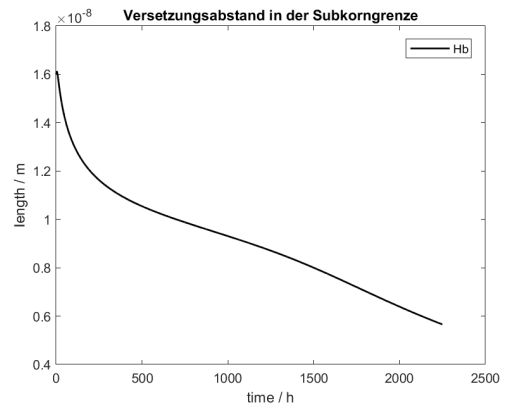
(c) v_c



(d) P_{sb}



(e) γ_{sb}



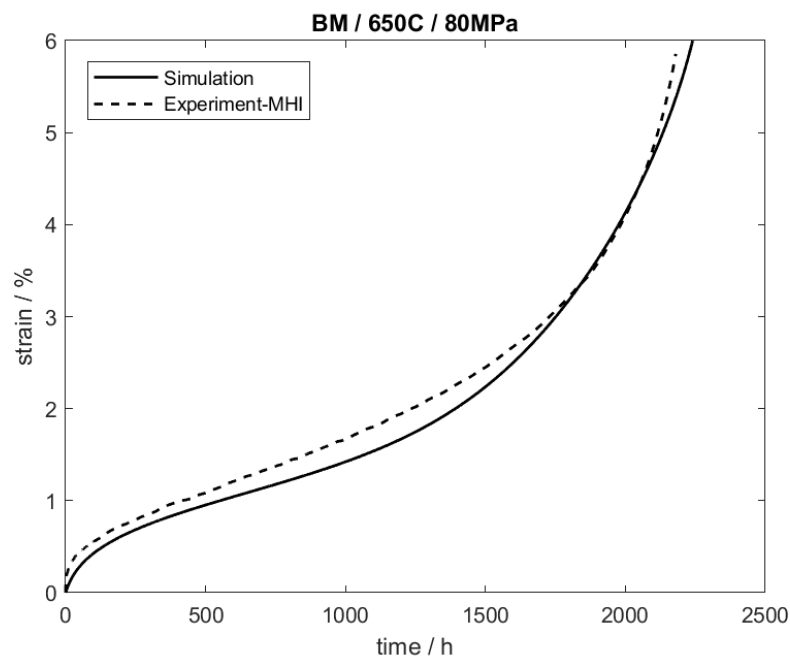
(f) h_b

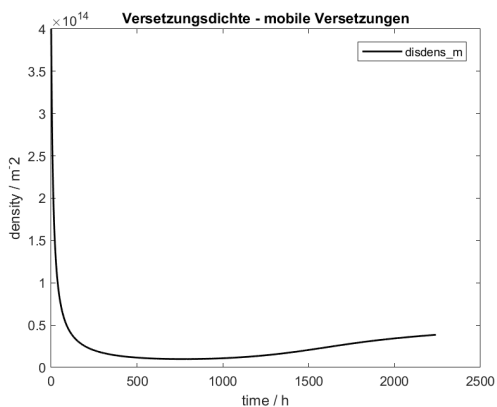
Abbildung 64.: Simulationsergebnisse

A.4.2. Berechnung mittels MatCalc - Daten, unter der Berücksichtigung von Damage mit v_g

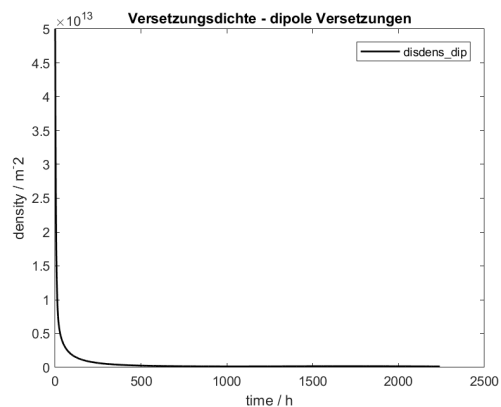
Tabelle 9.: Fit - Parameter

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
a_1	= 1000	[]	Parameter für die Geschwindigkeit von Versetzungsgleiten
A	= 350	[]	Materialkonstante
β	= $6 \cdot 10^7$	[]	Parameter zur Bestimmung der Quellstärke
d_{anh}	= $5,9 \cdot 10^{-8}$	[m]	Längenparameter
D_s	= $3,87621077 \cdot 10^{-21}$	$[\frac{m^2}{s}]$	Selbstdiffusionskoeffizient
D_{vp}	= $5,01000152 \cdot 10^{-18}$	$[\frac{m^2}{s}]$	Diffusionskoeffizient an den Versetzungslinien
$\rho_{m_{start}}$	= $4 \cdot 10^{14}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - mobile Versetzungen
$\rho_{dip_{start}}$	= $5 \cdot 10^{13}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - Dipole
$\rho_{b_{start}}$	= $2 \cdot 10^{14}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - Subkörner
v_{const}	= $9,6 \cdot 10^{-14}$	$[\frac{m}{s}]$	Konstante Klettergeschwindigkeit von Versetzungen

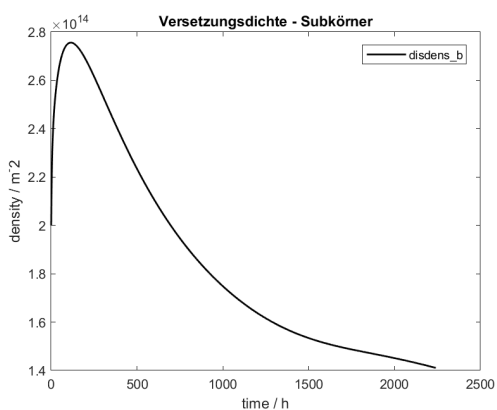
Abbildung 65.: Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von $80MPa$ und 650°



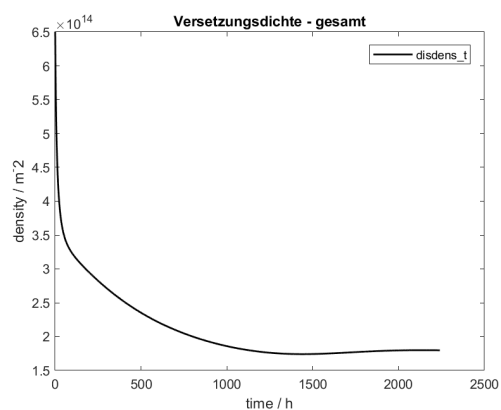
(a) ρ_m



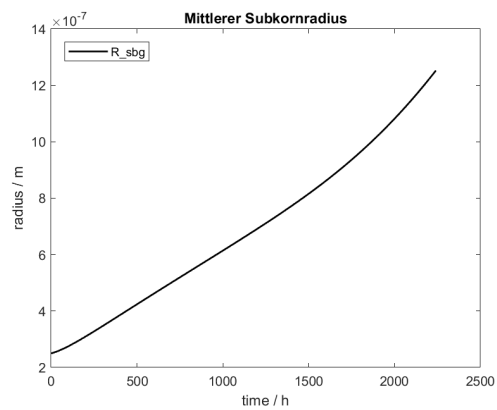
(b) ρ_{dip}



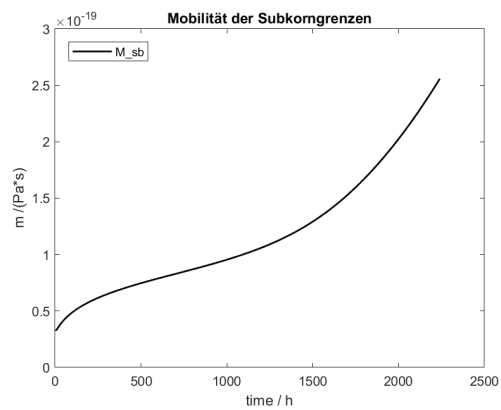
(c) ρ_b



(d) ρ_t

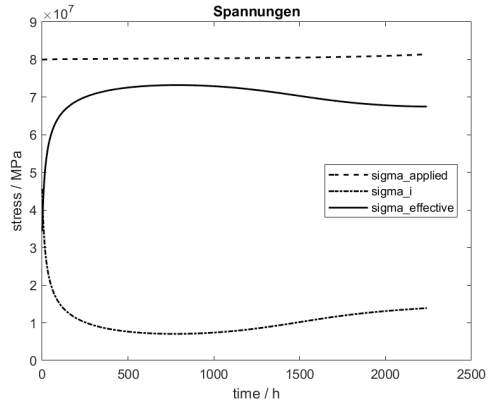


(e) R_{sbg}

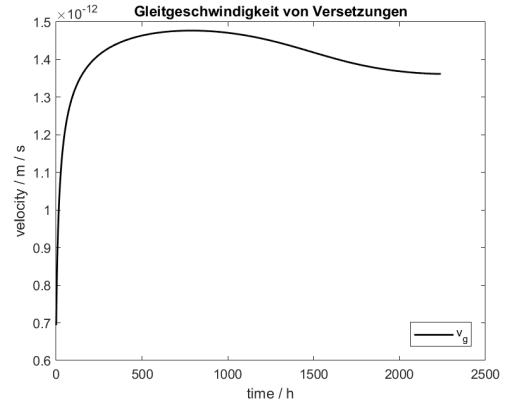


(f) M_{sb}

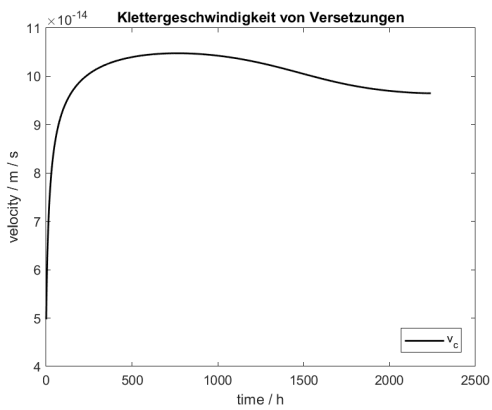
Abbildung 66.: Simulationsergebnisse



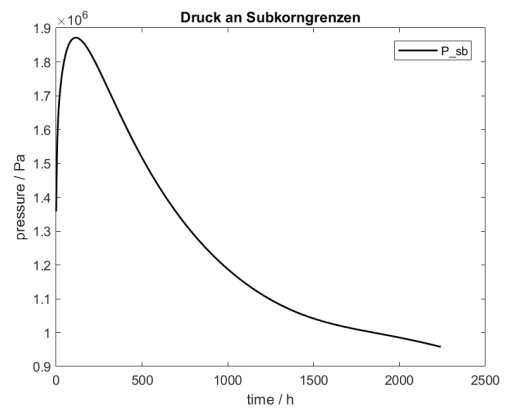
(a) σ_{app} , σ_i und σ_{eff}



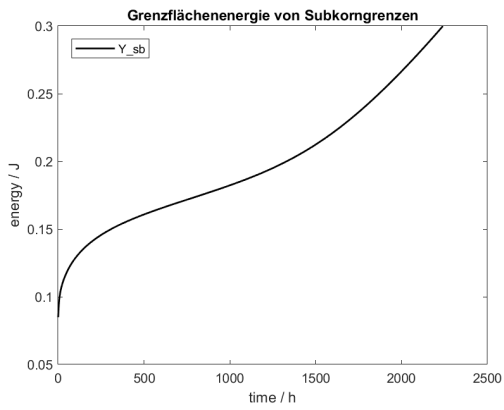
(b) v_g



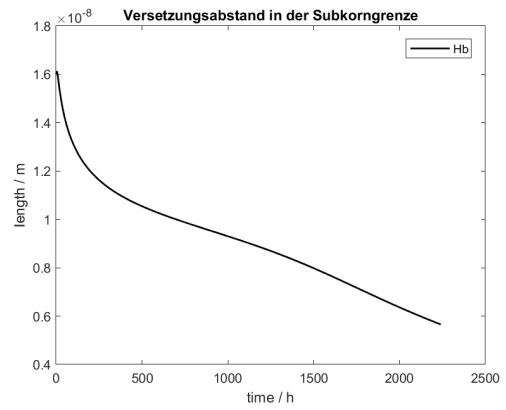
(c) v_c



(d) P_{sb}



(e) γ_{sb}



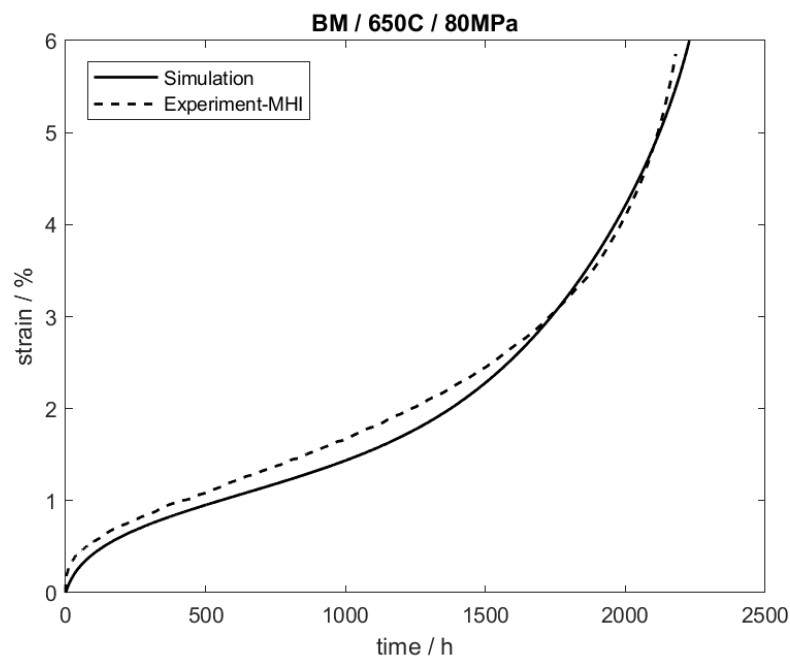
(f) h_b

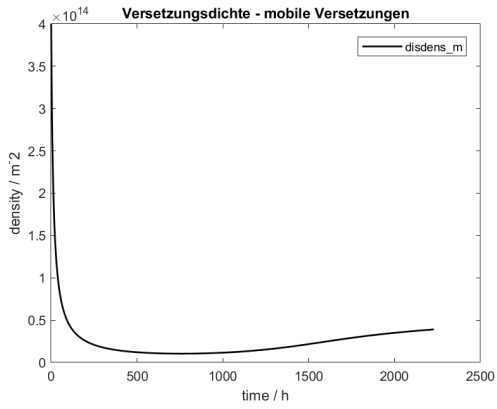
Abbildung 67.: Simulationsergebnisse

A.4.3. Berechnung mittels MatCalc - Daten, unter der Berücksichtigung von Damage mit v_{eff}

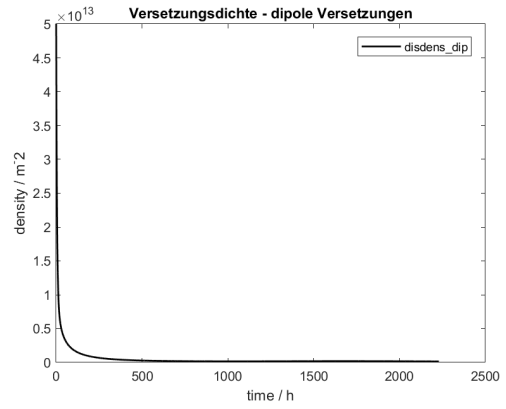
Tabelle 10.: Fit - Parameter

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
a_1	= 1000	[]	Parameter für die Geschwindigkeit von Versetzungsgleiten
A	= 350	[]	Materialkonstante
β	= $6 \cdot 10^7$	[]	Parameter zur Bestimmung der Quellstärke
d_{anh}	= $5,9 \cdot 10^{-8}$	[m]	Längenparameter
D_s	= $3,87621077 \cdot 10^{-21}$	$[\frac{m^2}{s}]$	Selbstdiffusionskoeffizient
D_{vp}	= $5,01000152 \cdot 10^{-18}$	$[\frac{m^2}{s}]$	Diffusionskoeffizient an den Versetzungslinien
$\rho_{m_{start}}$	= $4 \cdot 10^{14}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - mobile Versetzungen
$\rho_{dip_{start}}$	= $5 \cdot 10^{13}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - Dipole
$\rho_{b_{start}}$	= $2 \cdot 10^{14}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - Subkörner
v_{const}	= $9,4 \cdot 10^{-14}$	$[\frac{m}{s}]$	Konstante Klettergeschwindigkeit von Versetzungen

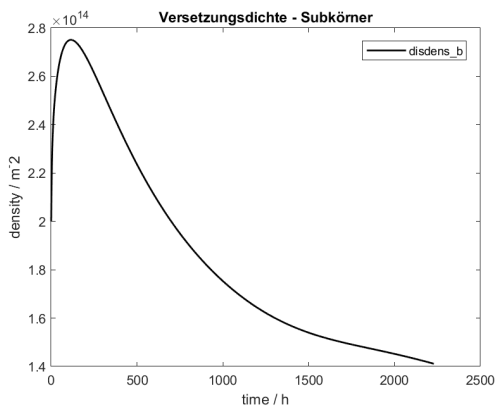
Abbildung 68.: Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von 80MPa und 650°



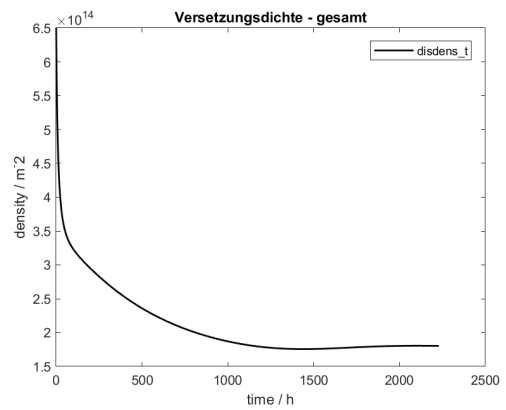
(a) ρ_m



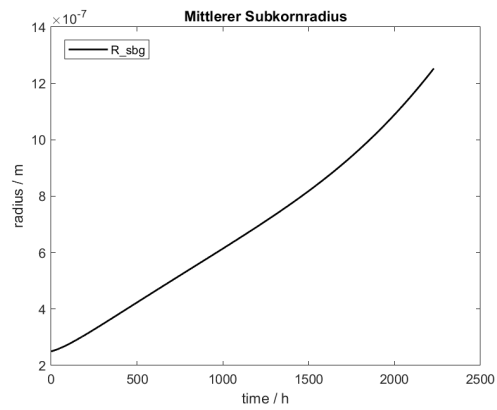
(b) ρ_{dip}



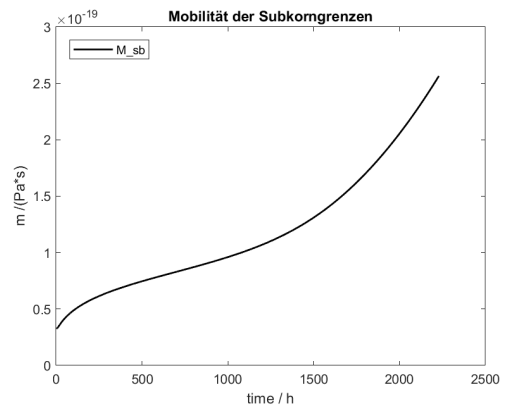
(c) ρ_b



(d) ρ_t

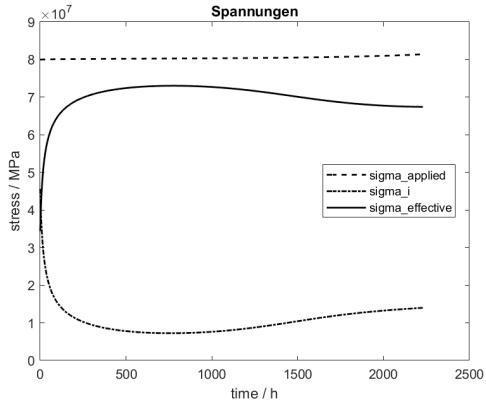


(e) R_{sbg}

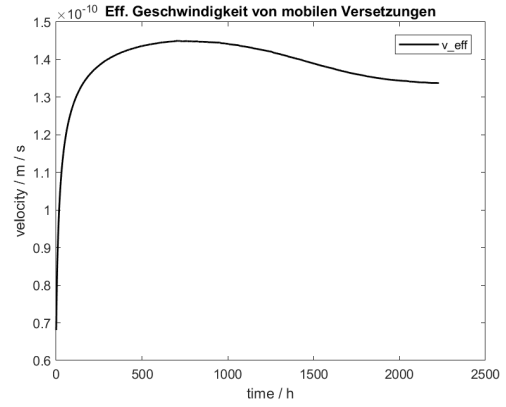


(f) M_{sb}

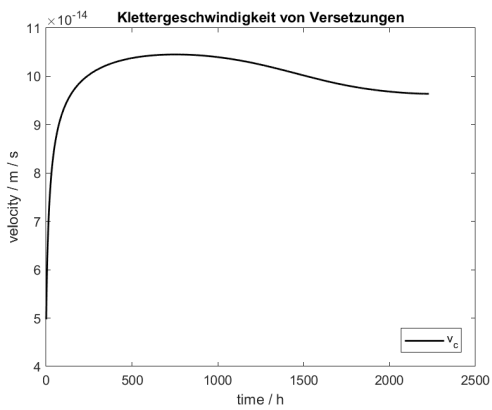
Abbildung 69.: Simulationsergebnisse



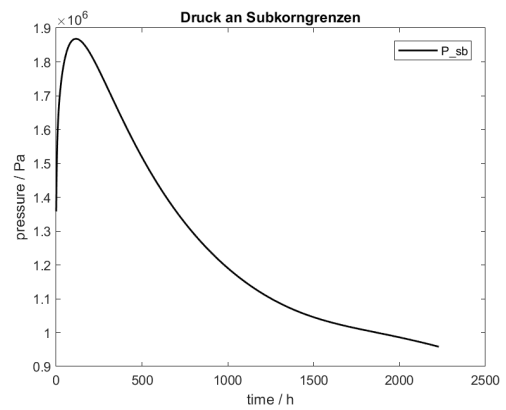
(a) σ_{app} , σ_i und σ_{eff}



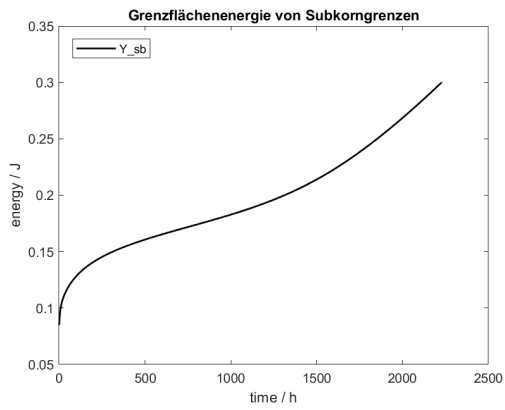
(b) v_{eff}



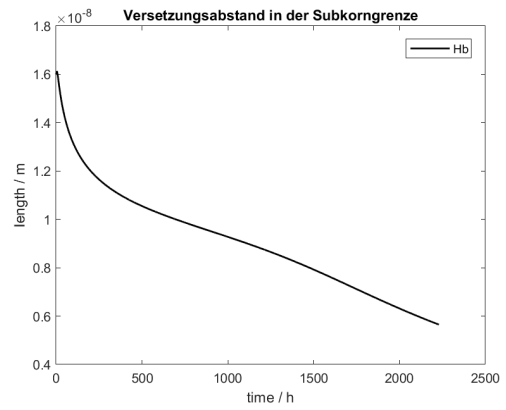
(c) v_c



(d) P_{sb}



(e) γ_{sb}



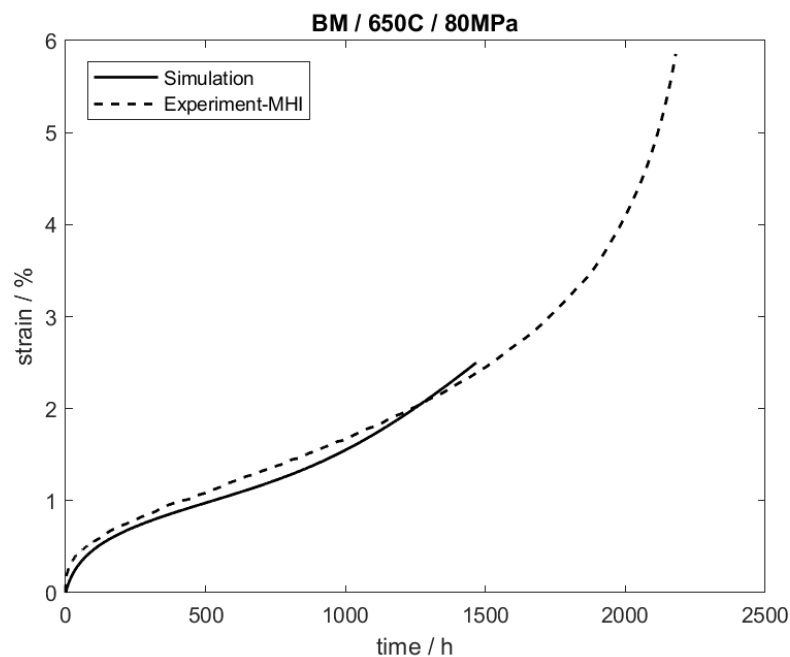
(f) h_b

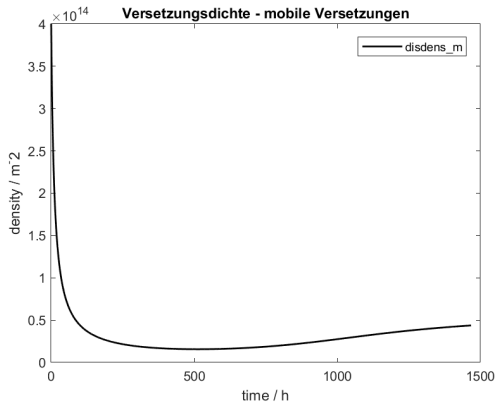
Abbildung 70.: Simulationsergebnisse

A.4.4. Berechnung mittels Ostwald Gleichung, und originaler Orowan - Gleichung mit v_g

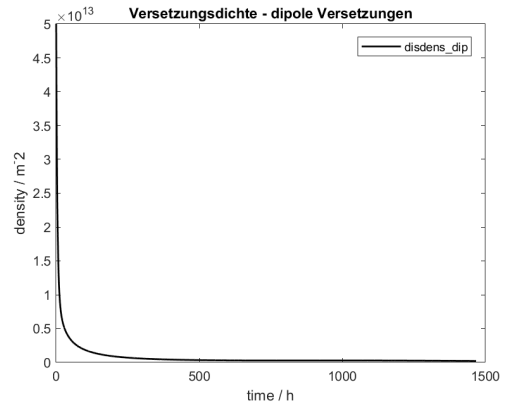
Tabelle 11.: Fit - Parameter

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
a_1	= 1200	[]	Parameter für die Geschwindigkeit von Versetzungsgleiten
A	= 350	[]	Materialkonstante
β	= $6 \cdot 10^7$	[]	Parameter zur Bestimmung der Quellstärke
d_{anh}	= $5,9 \cdot 10^{-8}$	[m]	Längenparameter
D_s	= $3,87621077 \cdot 10^{-21}$	$[\frac{m^2}{s}]$	Selbstdiffusionskoeffizient
D_{vp}	= $5,01000152 \cdot 10^{-18}$	$[\frac{m^2}{s}]$	Diffusionskoeffizient an den Versetzungslinien
$\rho_{m_{start}}$	= $4 \cdot 10^{14}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - mobile Versetzungen
$\rho_{dip_{start}}$	= $5 \cdot 10^{13}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - Dipole
$\rho_{b_{start}}$	= $2 \cdot 10^{14}$	$[m^{-2}]$	Startwert Versetzungsdichte - Subkörner
v_{const}	= $1,05 \cdot 10^{-13}$	$[\frac{m}{s}]$	Konstante Klettergeschwindigkeit von Versetzungen

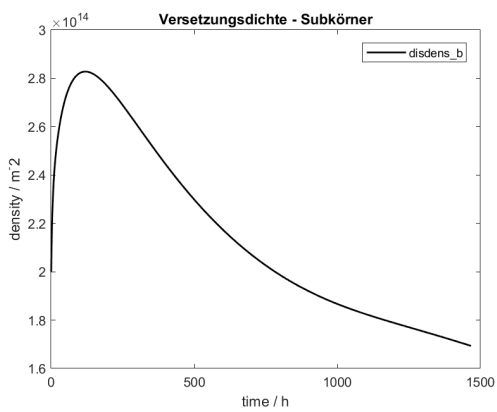
Abbildung 71.: Dehnung ε über Zeit t unter Belastung von 80MPa und 650°



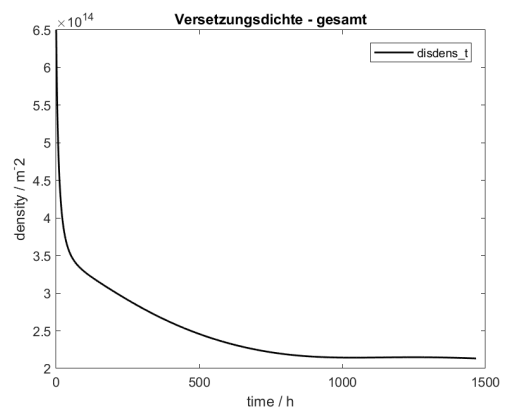
(a) ρ_m



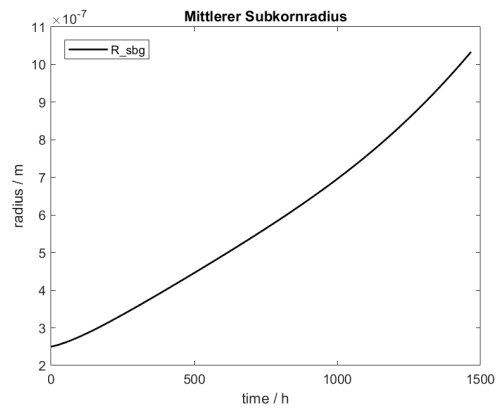
(b) ρ_{dip}



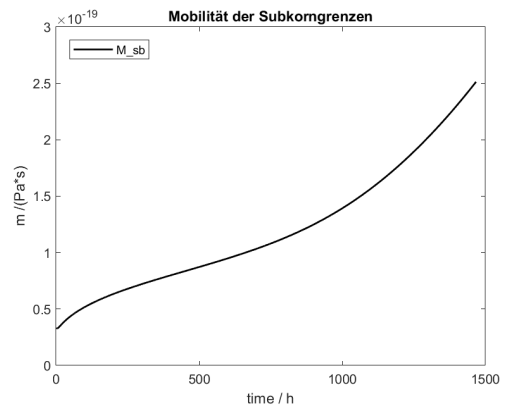
(c) ρ_b



(d) ρ_t

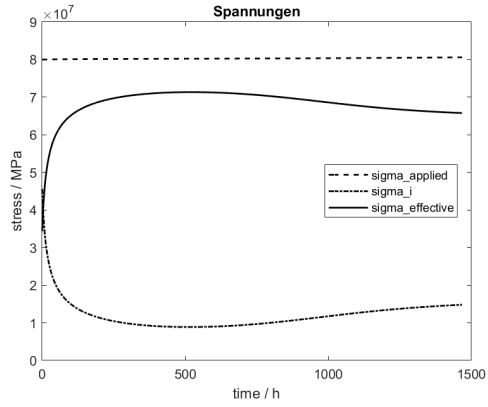


(e) R_{sbg}

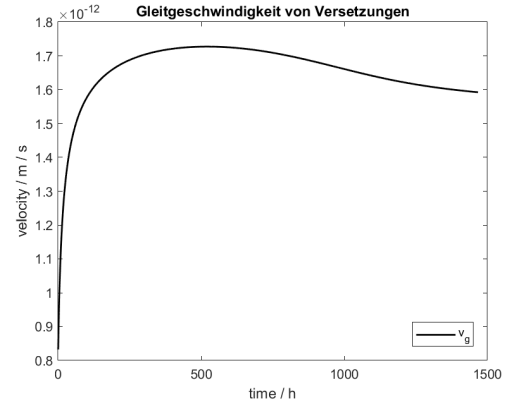


(f) M_{sb}

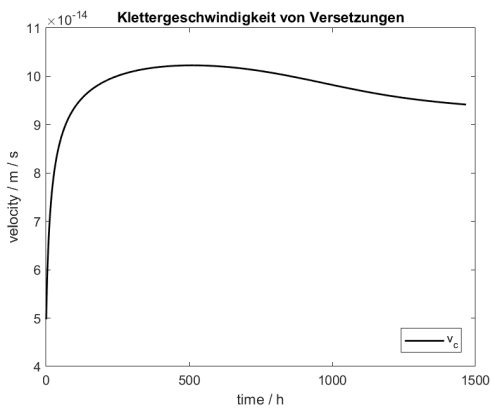
Abbildung 72.: Simulationsergebnisse



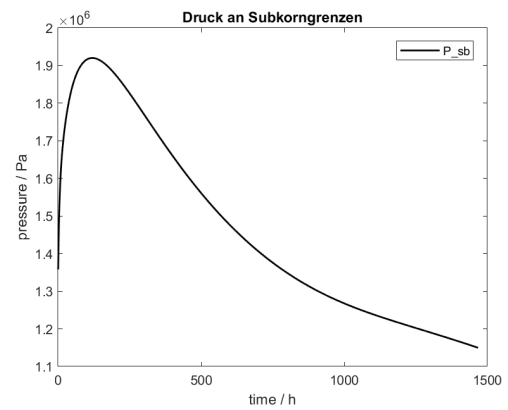
(a) σ_{app} , σ_i und σ_{eff}



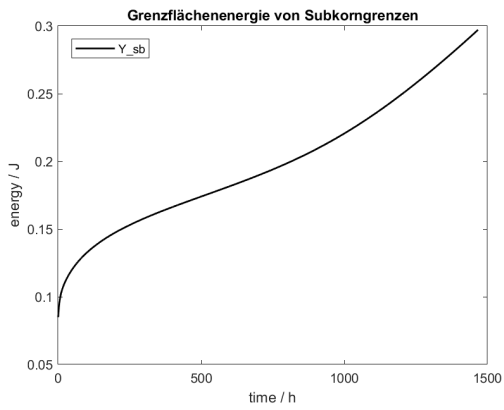
(b) v_g



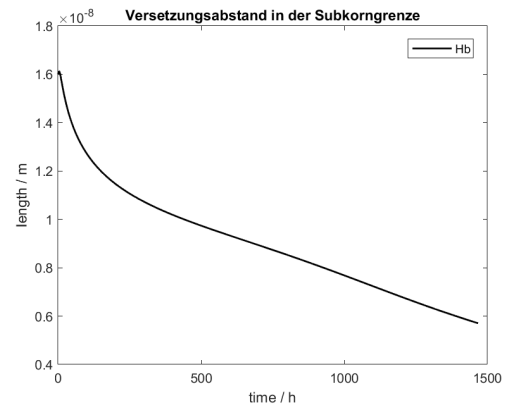
(c) v_c



(d) P_{sb}



(e) γ_{sb}



(f) h_b

Abbildung 73.: Simulationsergebnisse