

Teilprojekt/Arbeitskreisgruppe B7

Titel: Mehrskalige thermomechanische Simulation der fest-flüssig Interaktionen bei der Erstarrung

Projektleitung/-bearbeitung

Laschet, Gottfried; Apel, Markus; Berger Ralf, Boussinot, Guillaume; Böttger Bernd
ACCESS e.V.

Aufgabenstellung

Der Schwerpunkt der Arbeiten lag sowohl auf die Entwicklung relevanter Simulationsmodelle für die Berechnung von unterschiedlichen Erstarrungsmorphologien beim Kokillenguss eines A356 Napfs als auch auf die Berechnung effektiver Eigenschaften (Permeabilität, Wärmeleitfähigkeit, thermoelastische Eigenschaften) der sich bildenden Gefüge über den kompletten fest-flüssig Bereich.

Zur Verbesserung der Präzision der Modellvorhersagen sollte die Numerik beim Homogenisierungsansatz verbessert werden sowie finite Differenzen Netze aus der Phasenfeldsimulation geglättet werden.

Vorgehensweise

Zwecks Ermittlung schwer messbarer thermophysikalischer Größen im fest-flüssig Bereich wurde ein Mehrskalenansatz, basierend auf der Kopplung eines allgemeinen Multiphasen und Multikomponenten Phasenfeldmodells mit der mathematischen Homogenisierungsmethode entwickelt und an Hand von experimentellen Messdaten validiert. Aus der thermomechanischen Erstarrungssimulation des A356 Napfs, wurden die thermischen Randbedingungen für zwei typische Erstarrungsszenarien (gerichtete und gleichachsige Erstarrung) auf der Mikroskala bestimmt. In Phasenfeld-Simulationen wurde die Herausbildung der Mikrostruktur bis hin zur vollständigen Erstarrung berechnet (siehe Abb 1). Um den Einfluss des sich bildenden feinen eutektischen Gefüges auf die Eigenschaften besser quantifizieren zu können, wurden zusätzlich zu Phasenfeld-Simulationen auf der Längenskala der Kornstruktur Simulationsergebnisse auf der Längenskala des feineren eutektischen Gefüges genutzt. Die homogenisierten Eigenschaften für das fein aufgelöste eutektische Gefüge wurden dann bei der Homogenisierung auf der gröberen Längenskala der

Kornstruktur als effektive Eigenschaften des eutektischen Phasengemischs berücksichtigt auf zwei Skalen durchgeführt und anschließend separat homogenisiert. Die mit oder ohne ~~einem~~ effektiven eutektischen PhasePhasenmodell ermittelten fest-flüssig Eigenschaften werden miteinander und mit experimentellen Messdaten verglichen.

Der Permeabilitätstensor wurde durch Mittelung von Strömungsfeldern bei unterschiedlich gerichteten Druckgradienten bestimmt. Die Strömungsfelder wurden durch eine Navier-Stokes Strömungssimulation ermittelt. Zwecks Validierung der Permeabilitätsvorhersagen für dendritische Gefüge und den Vergleich mit Sphärolitgefügen der teilkristallinen Kunststoffen wurde eine Kooperation mit dem TP B4 (3D Druck skaliertes Gefüge) und dem AIA der RWTH Aachen (Permeabilitätsmessungen) eingegangen.

Die Numerik des entwickelten Homogenisierungstools wurde durch die Implementierung eines Master/Slave Algorithmus für die periodischen Randbedingungen auf der Einheitszelle und den Einbau des „Sparse Matrix“ Formats zur Benutzung eines direkten Solver verbessert. Zwecks Glättung und lokaler Vergrößerung der komplexen 3D FD Phasenfeldmodelle wurde eine Kooperation mit C. Sandström (Chalmers University, Göteborg, Schweden) und mit Prof. L. Madej (Cracow, Polen) eingegangen.

Ergebnisse

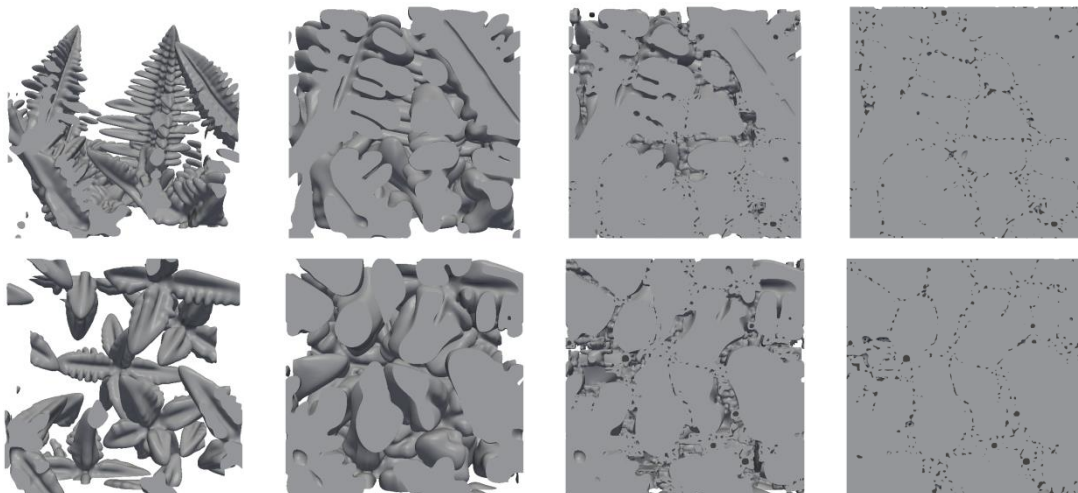


Abb 1: Simulierte Mikrostruktur während der Erstarrung mit (oben) und ohne (unten) Temperaturgradient. Aus der Schmelze der AlSi7Mg0.3-Legierung (transparent dargestellt) scheiden sich zunächst Primärdendriten aus FCC-Aluminium aus (Spalten 1, 2). Silizium wird in dieser Phase kaum aufgenommen und reichert sich in der Schmelze an bis zum Einsetzen eutektischer Erstarrung, bei der sich parallel zur FCC-Al-Phase Silizium in Diamantstruktur bildet (Spalten 3, 4).

Beispielhaft sind in Abb. 1 simulierte dendritische Gefüge für verschiedene Temperaturgradienten dargestellt. Sie bilden die Grundlage für die Homogenierungsrechnungen auf der Mesoskala.

Die effektive Wärmeleitfähigkeit des gerichtet und gleichachsig erstarrten Gefüges wird in Abb. 2.a mit Laser Flash Messungen verglichen. Durch Rekaleszenz verursachte Unterschiede in der eff. Wärmeleitfähigkeit der beiden Morphologien kann die Messmethode nicht auflösen. In Abb. 2.b wird das effektive mittlere Elastizitätsmodul als Funktion des Feststoffgehalts f_s für beide Erstarrungsmorphologie dargestellt. Die Resultate zeigen dass gegenüber der aufwendigeren Direktsimulation der einzelnen Si/Partikeln das effektive eutektische Phasenmodell akzeptable Ergebnisse für $f_s > 67\%$ liefert. Lediglich am Anfang der eutektischen Erstarrung weichen beide Modelle markant voneinander ab. Der Grund für die Abweichung liegt im großen Oberflächen zu Volumenverhältnis der dünnen eutektischen Schicht um die primär erstarrten Dendriten aus FCC-Al.

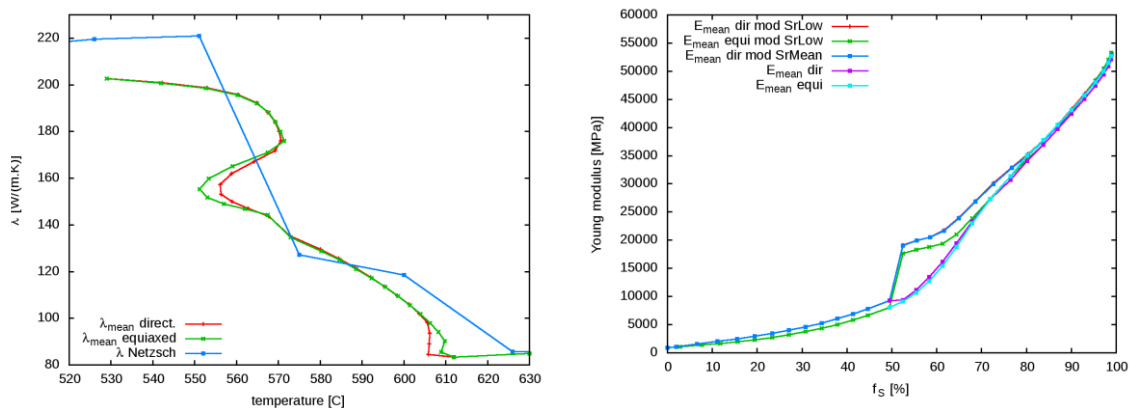


Abb. 2: a) Effektive Wärmeleitfähigkeit für verschiedene Erstarrungsgefüge verglichen mit einer Laser flash Messung. b) Effektives mittleres Elastizitätsmodul dieser Gefüge als Funktion des Festphasenanteils. Vergleich des effektiven eutektischen Phasenmodells mit einer aufwändigen Detailsimulation aller Si-Partikeln.

Das Bild 3.a zeigt die FD Diskretisierung eines gerichtet erstarrten Dendriten am Ende der Primärerstarrung. Das Bild 3.b zeigt den geglätteten und mit Tetraeder-Elementen vernetzten Dendriten, welcher mittels des Vox2Tet Algorithmus generiert wurde.

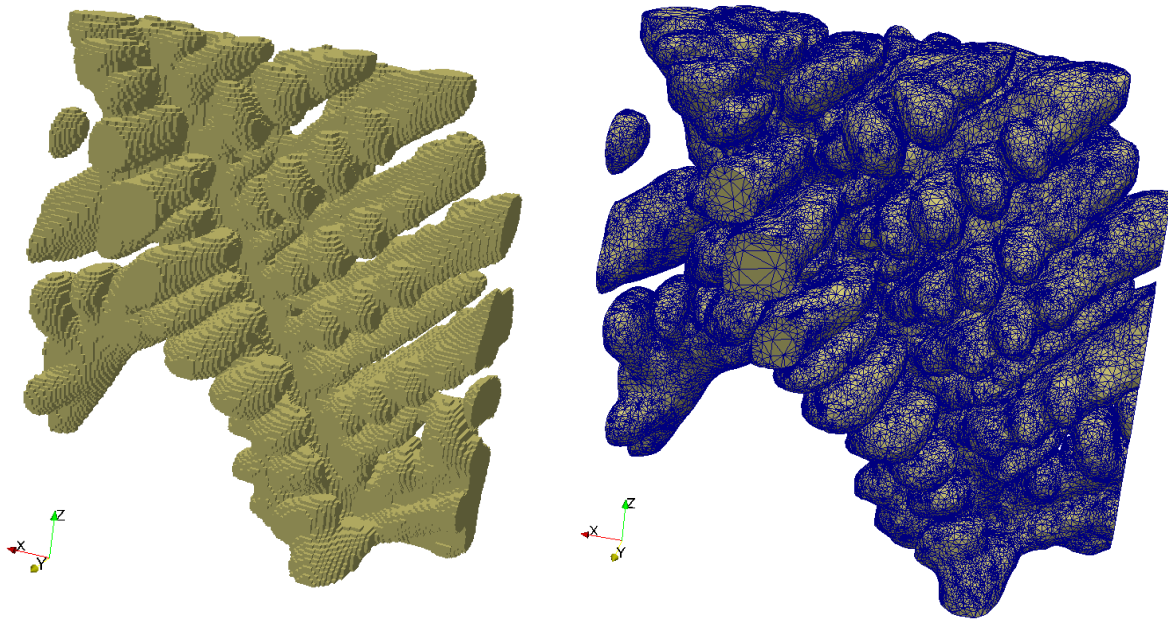


Abbildung 3: Gerichtet erstarrter Dendrit: a) FD Vernetzung b) geglättete Tetraeder-Vernetzung mittels Vox2Tet (in Zusammenarbeit mit C. Sandström).

Die Permeabilität der simulierten Mikrostrukturen weicht bei Festanteilen über 80% deutlich von Carman-Kozeny ab (siehe Abb 4). Eine bessere Beschreibung liefert der gefittete Ausdruck (blau=Fitparameter):

$$K = 2 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \frac{(0.96 - f_S)^{3.13}}{f_S^{0.95}}$$

Dieser Ausdruck beinhaltet im Gegensatz zu Carman-Kozeny keine Abhängigkeit von der spezifischen Oberfläche, jedoch gehen die Längenskalen des Gefüges (SDAS, Korngröße) in Form eines dimensionsbehafteten Vorfaktors ein.

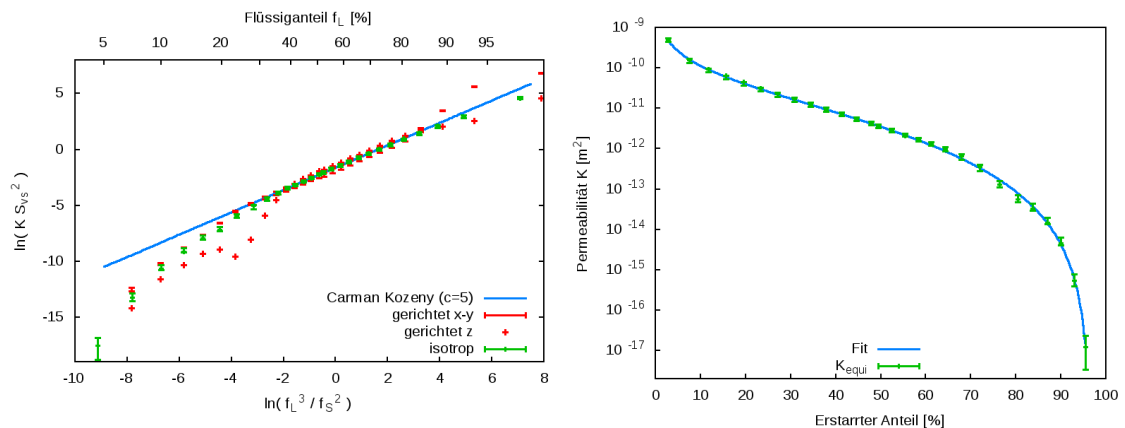


Abb 4: Links – Vergleich der Abhängigkeit der Permeabilität von Festanteil und spezifischer Oberfläche mit Carman-Kozeny. Rechts – Beschreibung der Abhängigkeit der Permeabilität vom Festanteil mittels eines gefitteten Ausdrucks.

Zusammenfassung und Ausblick

Für unterschiedliche Gefügemorphologien konnten effektive thermische und thermoelastische Eigenschaften sowie der Permeabilitätstensor für den kompletten fest-flüssig Bereich erfolgreich ermittelt werden. Die Zusammenhänge zwischen Morphologie und den effektiven Eigenschaften konnten quantifiziert werden. Für die effektive Wärmeleitfähigkeit und den mechanischen Eigenschaften ist der Festphasenanteil und nicht mehr die Temperatur die bestimmende Größe, da sie wegen der Rekaleszenz nicht eindeutig im fest-flüssig Bereich definiert ist. Die Permeabilität ließ sich für die simulierte Erstarrung in Abhängigkeit vom Festphasenanteil beschreiben. Eine Verallgemeinerung dieser Beschreibung für andere Gefügeparameter (Korngröße/SDAS) wird durch die Auswertung von Simulationen bei anderen Prozessparametern angestrebt.

In Zusammenarbeit mit dem TP 9, sollen die mittels des Mehrskalensatzes ermittelten effektiven Eigenschaften in die thermomechanische Gießsimulation des A356 Napfes einfließen und mit herkömmlichen Simulationen mit temperaturabhängigen Eigenschaften verglichen werden. Dieser Vergleich soll aufzeigen, in welchem Maße die Eigenschaften der Mikrostruktur im fest-flüssig Bereich zu einer präziseren Prozesssimulation beitragen werden.

Veröffentlichungen

G. Boussinot and M. Apel: "Phase field and analytical study of mushy zone solidification in a static thermal gradient: from dendrites to planar front", Acta Materialia, vol. 122, pp. 310-321, 2017.

B. Böttger, C. Haberstroh, N. Giesselmann: "Cross-permeability of the semi-solid region in directional solidification: a combined phase-field and lattice-Boltzmann simulation approach", JOM, Vol. 68, n° 1, pp. 27-36, 2016.

G. Laschet, R. Berger, M. Apel and J. Eiken: „Effective thermal and mechanical properties of semi-solid 3D microstructures of A356 alloy, derived from phase-field simulations“, proc. of EMMC-15, 7th-9th September 2016, Brussels, Belgium.