

Teilprojekt B7

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

Projektleitung/-bearbeitung

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

Aufgabenstellung

Die Schwerpunkte der Arbeiten lagen in der Entwicklung von Modellen für die Simulation der dynamische Gefügebildung im Verlauf der Erstarrung, der Berechnung zugehöriger effektiver Eigenschaften (Permeabilität, thermoelastische Eigenschaften) und der Herleitung von viskoplastischen Werkstoffgesetzen für den kompletten fest-flüssig Übergangsbereich.

Vorgehensweise

Für die Ermittlung schwer messbarer thermophysikalischer Eigenschaften des fest-flüssig Zustandes wurde ein Mehrskalensatz durch die Kopplung eines Multiphasen und -komponenten Phasenfeldmodells mit der Homogenisierungsmethode und der makroskaligen Gießsimulation (B9) entwickelt und an Hand von experimentellen Messdaten validiert. Ausgangspunkt der Mehrskalensimulation sind lokal berechnete Wärmeflüsse im Bauteil (Al-Napf), die als Randbedingungen an die Gefügesimulation übergeben wurden. Mittels des Phasenfeldmodells wurde für zwei typische Erstarrungsszenarien (gerichtete und äquiaxiale Erstarrung) die Gefügeentwicklung entlang des kompletten Erstarrungspfades berechnet. Anschließend ergab eine Morphologieanalyse der simulierten Gefüge charakteristische Größen, wie den Festphasenanteil, die spezifische Oberfläche und die Tortuosität. Diese Größen beeinflussen direkt die Permeabilität der Dendritennetzwerke bezüglich durchströmender Schmelze [1]. Zwecks Validierung der Permeabilitätsvorhersagen wurden Permeabilitätsmessungen an skalierten, 3D gedruckten Modellstrukturen durchgeführt. Ergänzend zu diesen Arbeiten wurden neue viskoplastische Werkstoffgesetze für den nicht-kohärenten und den kohärenten fest-flüssig Bereich formuliert, mit dem Ziel einen kontinuierlichen Übergang bei der Zugkohärenz und T_{sol} zu gewährleisten [2]. Die viskoplastischen Modellparameter wurden an Hand von Zug- und Druckversuchen der A356 Legierung identifiziert.

Ergebnisse

Die Morphologie der in 2016 simulierten äquial und gerichtet erstarrten Gefüge wurde analysiert und der Festphasenanteil f_s , die spezifische Oberfläche S_V und die Tortuosität τ dieser Gefüge bestimmt (siehe Bild 1). Die spezifische Oberfläche des gerichtet erstarrten Gefüges ist größer als die des äquialen Gefüges, weil es feinere Seitenarme aufweist. Alle drei Größen beeinflussen die Permeabilität und fließen in eine modifizierte Carman-Kozeny Modellierung ein [1].

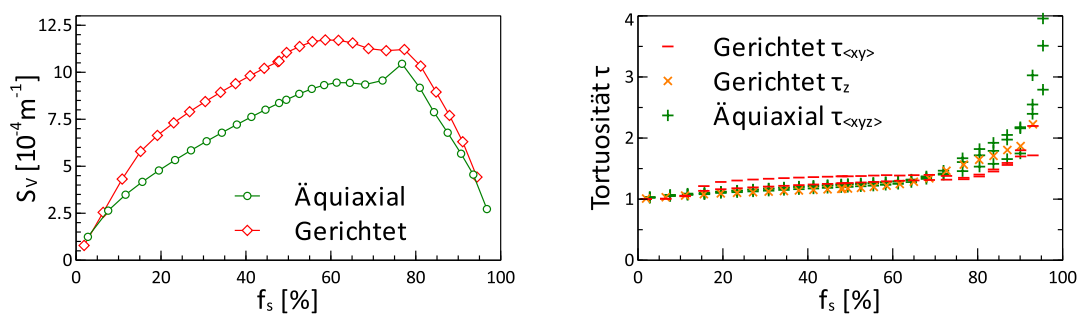


Bild 1: Aus den Erstarrungsgefügen abgeleitete spezifische Oberfläche (links) und Tortuosität als Funktion des Festphasenanteils f_s .

Im Bild 2 (links) sind die berechneten Permeabilitäten der beiden Gefüge, ein einfaches Carman-Kozeny Gesetz sowie eine Variante dieses Modells als Funktion des Festphasenanteils f_s aufgetragen. Man sieht, dass bei Festanteilen über 80% das Carman-Kozeny Modell von den ermittelten Werten abweicht; wohingegen folgendes modifiziertes Modell eine bessere Beschreibung der Variation der Permeabilität mit f_s gewährleistet:

$$k_i = c_0 \cdot \frac{(f_c - f_s)^3}{\tau_i^2 \cdot S_V^2}$$

In diesem modifizierten Modell wurde ein Parameter f_c eingeführt. Dieser bezeichnet den Feststoffanteil bei dem sich die letzten offenen Schmelzkanäle schließen und die verbleibende Schmelze eingeschlossen wird. Carman-Kozeny entspricht $f_c = 1$.

Aus Zusatzmitteln wurde in Zusammenarbeit mit B4 und dem AIA der RWTH Aachen ein Messaufbau realisiert, mit dem die Permeabilität für Modellstrukturen gemessen wurde. Eine Größenskalierung der simulierten Gefüge und eine entsprechende Anpassung der Viskosität eines Glycerin-Wasser Gemischs erlaubten den Vergleich mit den berechneten Permeabilitätswerten (Bild 2, rechts). Die Übereinstimmung zwischen gemessener und berechneter Permeabilität ist sehr gut mit nur einer größeren Abweichung bei $f_s = 68\%$.

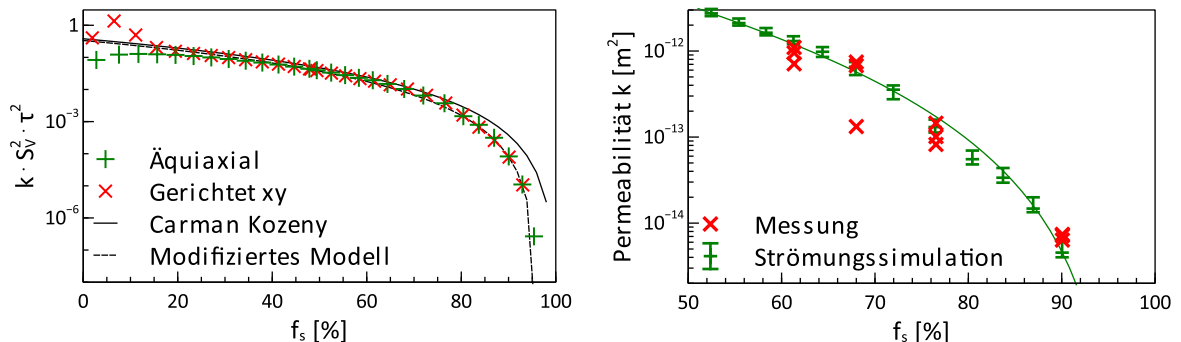


Bild 2: Berechnete dimensionslose Permeabilität (Symbole, hier aufgetragen $k \cdot S_V^2 \cdot \tau^2$) verglichen mit zwei Carman-Kozeny Modellvarianten: $C_0 = 0.38$, $f_c=1$ (Carman-Kozeny) oder $f_c = 0.96$ (mod. Modell) (links). Vergleich der simulierten mit gemessener Permeabilität von äquiaxialen Gefügen mit unterschiedlichem Feststoffgehalt (rechts).

Darüber hinaus wurde mit Hilfe der Phasenfeldsimulation der dendritisch-planar Übergang im fest-flüssig Bereich einer Al-Cu Legierung quantitativ simuliert. Es konnte gezeigt werden, dass die Kinetik durch das Phänomen des sog. TGZM („Thermal Gradient Zone Melting“) bestimmt wird. TGZM ist ein universelles Phänomen bei der Erstarrung metallischer Legierungen und führt zu einer Bewegung von dendritischen Seitenarmen oder Schmelze-Einschlüssen im Temperatur-gradienten mit einer Geschwindigkeit $v \sim \nabla T$. Diese Simulationsergebnisse wurden in Zusammenarbeit mit Arbeitsgruppen in Nancy (Institut Jean Lamour, CNRS) und Hamilton (McMaster University) genutzt, um ein neu entwickeltes „volume-average“ Modell [3] zu überprüfen. Dieser neue Ansatz, basierend auf einem Nicht-Gleichgewichtsübergangsbereich zwischen fest-flüssig und reiner Schmelze, und verspricht verbesserte Gieß- und Erstarrungssimulationen auf Bauteilskala, insbesondere hinsichtlich der Vorhersage von Makroseigerungen.

Die thermoelastische Homogenisierung der äquiaxial und gerichtet erstarrten Gefüge lieferte u. a. die in Bild 3 dargestellten Resultate. Es zeigt den Verlauf der effektiven Elastizitätsmodule pro Raumrichtung, deren Mittelwert und den des volumengemittelten E-Moduls. Dank der Berechnung von Korrekturtermen, indiziert durch implizite Kräfte an der fest-flüssig Grenzflächen, korrigiert die Homogenisierung die Volumenmittelungswerte substantiell. Das rechte Bild 3 zeigt die Temperaturvariation des mittleren homogenisierten E-Moduls, eines experimentell ermittelten E-Moduls aus Heißzugversuchen und der Elastizität des Al-Einkristalls über den kompletten Erstarrungs- und Abkühlbereich. Der Unterschied ist gerade bei hohen Temperaturen ($T > 300^\circ\text{C}$) sehr groß und ist darauf zurückzuführen, dass es im Experiment nicht möglich ist, die viskose Dehnung von der elastischen zu trennen, wohl jedoch in der Homogenisierungsrechnung, welche rein elastische E-Module liefert. Diese liegen unter dem Einkristallwert und nähern sich, bei niedrigeren Temperaturen, den experimentellen Werten an.

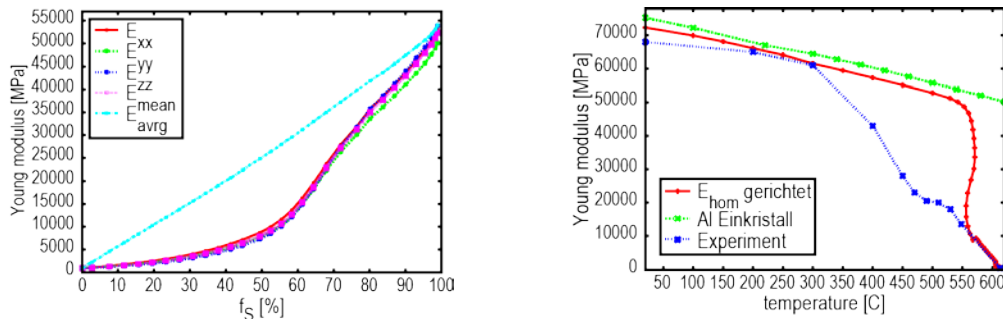


Bild 3: Variation der E-Module mit dem Festphasenanteil (links) sowie Variation des mittleren, homogenisierten und experimentellen E-Moduls mit der Temperatur (rechts).

Der Einfluss unterschiedlicher E-Module (E_{hom} vs. E_{exp}) auf das thermo-mechanische Verhalten beim Abguss eines Al Napfes wurde ebenfalls ermittelt. Die Verteilung der plastischen Dehnung im Querschnitt des Napfes nach 18 s (Bild 4) zeigt, dass diese Dehnung am unteren Rand längs des Kerns in der Simulation mit dem aus der Homogenisierungsmethode bestimmten E-Modul E_{hom} deutlich größer ist, als wenn man den experimentellen Wert E_{exp} verwendet. Dieses größere plastische Fließen wird durch das schnellere Erreichen der Fließgrenze verursacht, da die E_{hom} Variante eine größere Steifheit aufweist als die E_{exp} Variante.

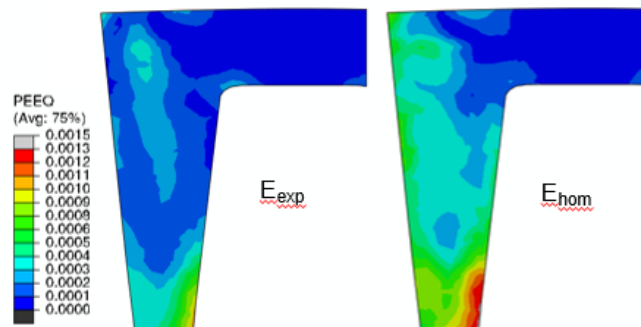


Bild 4: Vergleich von Gießsimulationen (E_{hom} vs. E_{exp}): Verteilung der plastischen Dehnung nach 18 s in einem Querschnitt des Al-Napfes.

Das Bild 5 links zeigt, exemplarisch, experimentelle und gefittete Fließkurven unter einachsiger Zug- und Druckbelastung der A356 Legierung bei $T = 560^\circ\text{C}$ ($f_s = 91.5\%$). Unter Zug besitzt das fluidgesättigte Skelett eine höhere Fließgrenze als unter Druck, jedoch eine geringe Verfestigung bevor die nicht abgebildete Entfestigung eintritt und sich Poren bzw. Warmrisse bilden. Unter Druckbelastung weist das Skelett kaum eine Fließgrenze auf, zeigt jedoch eine markante Verfestigung bevor ein Spannungsplateau erreicht wird. Bild 5 rechts stellt Fließkurven unter Scherbelastung im nicht kohärenten Bereich ($T = 583^\circ\text{C}$, $f_s = 35\%$) dar. Das Spannungsniveau ist dort

sehr niedrig: [kPa] anstatt [MPa] und der Einfluss des Materialparameters w auf das Kriechverhalten wird verdeutlicht.

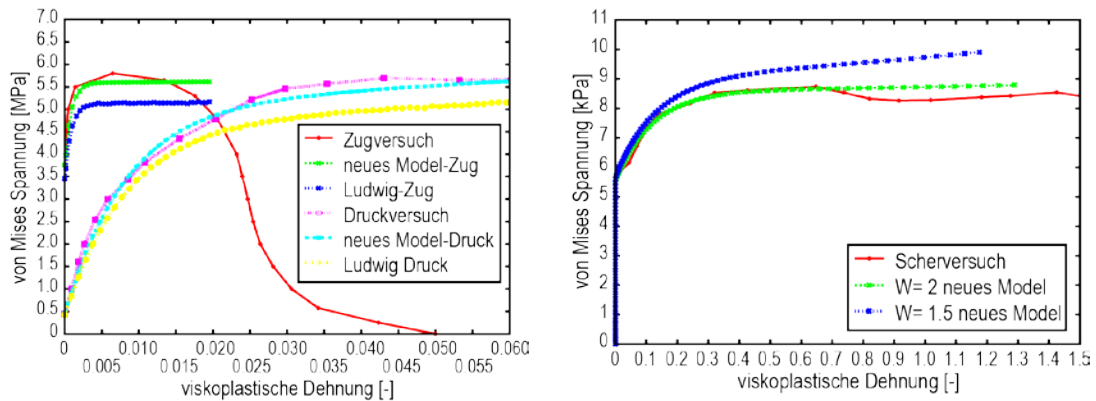


Bild 5: Experimentelle und gefittete Fließkurven im kohärenten fest-flüssig Bereich unter Druck- und Zugbelastung (links) und im nicht-kohärenten Bereich unter Scherbelastung (rechts).

Zusammenfassung und Ausblick

Für unterschiedliche Gefügemorphologien konnten effektive thermoelastische Eigenschaften sowie der Permeabilitätstensor für den kompletten fest-flüssig Bereich erfolgreich ermittelt und mit experimentellen Daten validiert werden. Die Zusammenhänge zwischen Morphologie und effektiven Eigenschaften von simulierten Gefügen konnten quantifiziert werden. Die Permeabilität lässt sich mittels eines modifizierten Carman-Kozeny Modells beschreiben. Die thermoelastische Homogenisierung ermöglicht, im Gegensatz zu Zugversuchen, rein elastische E-Module zu bestimmen. Der Vergleich von thermomechanischen Gießsimulationen mit verschiedenen temperaturabhängigen E-Modulen, respektive mit E_{hom} und E_{exp} , zeigt einen deutlichen Einfluss des E-Moduls auf das plastische Fließen. Da gerade die plastische Dehnung bei hohen Temperaturen zum Bauteilverzug beiträgt, ist die verbesserte Modellierung des E-Moduls wichtig für die zukünftige Minimierung des Bauteilverzugs beim Kokillenguss.

Die zusammen mit B9 (Metalle) und B4 (teilkristalline Thermoplaste) entwickelte, spezifische Mehrskalenmodellierung soll zukünftig durch einen iterativen Ansatz erweitert werden, der eine starke Kopplung der Erstarrungssimulation auf Makro- und Mikroskala und die Herleitung von selbstkonsistenten Lösungen ermöglicht. Verfeinerte, mikrostrukturbasierte effektive Werkstoffgesetze werden für unterschiedliche Erstarrungsszenarien simulativ ermittelt, um den Einfluss lokaler Variationen des Gefüges auf die Bauteilpräzision (Verzug und Heißrissbildung) zu quantifizieren. Effektive viskoplastische Fließkurven eines A356 Gefüges sollen durch virtuelle Tests

ermittelt werden und eine Verfeinerung der viskoplastischen Werkstoffmodelle für den fest-flüssig Bereich ermöglichen.

Veröffentlichungen

- [1] Berger, R., Apel, M., Laschet, G., 2017. "Evolution of permeability during solidification in simulated A356 micro-structures", Proc. of the 6th Decennial Int. Conf. on Solidification Processing (SP17), Old Windsor, UK, July 2017, S. 272-275, SS Media, U.K., ISBN 978-1-90854929-7.
- [2] Laschet, G., Behnken, H. and Apel, M., 2017. „Thermo-elasto-viscoplastic constitutive laws for semi-solid alloys during solidification“, Proc. of XIV Int. Conf. on Comput. Plasticity (COMPLAS-17), Barcelona, Spain, 5th-7th September 2017.
- [3] Phillion, A. B., Založnik, M., Spindler, I., Aledo, C.-A., Nguyen Thi, H., Reinhart, G., Boussinot, G., Apel, M., Combeau, H., 2017. „Evolution of a mushy zone in a static temperature gradient using a volume average approach“, Acta Materialia, 141, S. 206-216.
- [4] Laschet, G., Vossel, T., Wolff, N., Apel, M., Bührig-Polaczek, A., 2017. "Multiscale solidification simulation of an axisymmetric A356 component in die casting", Proc. of the 6th Decennial Int. Conf. on Solidification Processing (SP17), Old Windsor, UK, July 2017, S. 576-580., SS Media, U.K., ISBN 978-1-90854929-7.
- [5] Wolff, N., Pustal, B., Vossel, T., Laschet, G., Bührig-Polaczek, A., 2017. "Development of an A356 Die Casting Setup for Determining the Heat Transfer Coefficient Depending on Cooling Conditions, Gap Size, and Contact Pressure", Materials Science and Engineering Technology, 48 (12), mawe.201700151.
- [6] Laschet, G., Wipperfurth, J., Spekowius, M., Spina, R., Hopmann, C. and Apel, M., 2017. "Effective thermal properties of an α -iPP injection moulded part by a multiscale approach", Materials Science and Engineering Technology, 48 (12), mawe.201700148.
- [7] Bobzin, K., Öte, M., Wiesner, S., Schmidt, A., Apel, M., Berger, R., Aretz, A., Mayer, J., 2017. "Formation of the reaction zone between tin-copper brazing fillers and aluminium-silicon-magnesium alloys: experiments and thermodynamic analysis", Materials Science and Engineering Technology, mawe.201700152
- [8] Mokrov, O., Lysnyi, O., Simon, M., Reisgen, U., Laschet, G. and Apel, M., 2017. "Numerical Investigation of Droplet Impact on the Welding Pool in Gas Metal Arc Welding", Materials Science and Engineering Technology, 48 (12), mawe.201700147.