

Teilprojekt B7

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

Projektleitung/-bearbeitung

Apel, Markus; Laschet, Gottfried; Berger Ralf; Zhou, Bei
ACCESS e.V.

Aufgabenstellung

Schwerpunkt der Arbeiten war die selbstkonsistente Mehrskalensimulation der Erstarrung von Al-Kokillengussbauteilen, die Modellierung von quasi-inkompressiblen Phasen (Schmelze, amorphe Phase von teilkristallinen Polymeren) bei der Berechnung effektiver mechanischer Eigenschaften von Metallen und Polymeren, sowie die Weiterentwicklung von viskoplastischen Werkstoffgesetzen für den kompletten fest-flüssig Bereich. Für die Berechnung der Verformung des sich bildenden Gefüges während der Erstarrung durch externe Kräfte, wird die mechanische Modellierung im Multi-Phasenfeldansatz weiterentwickelt.

Vorgehensweise

Für eine Mehrskalensimulation der Erstarrung eines napfförmigen Al-Kokillengussbauteils wurden lokale thermische Bedingungen, d.h. Wärmeentzugsrate und Temperaturgradient aus einer makroskopischen thermomechanischen Gießsimulation (TP B9) extrahiert und als Randbedingungen für die mesoskopische Gefügesimulationen verwendet. Im Allgemeinen berechnet man damit auf der Gefügeskala einen anderen Temperaturverlauf, als auf der makroskopischen Bauteilskala. Die auf der Gefügesimulation berechnete Entwicklung des Festphasenanteils und die damit zusammenhängende Freisetzung der latenten Wärme wurden in einer erneuten Gießsimulation für die Modellierung des Erstarrungsintervalls verwendet, siehe Bild 1(a). Diese iterativen Simulationsdurchläufe auf den beiden Längenskalen werden solange durchgeführt, bis eine konsistente Beschreibung der Temperaturverläufe auf Mikro- und Makroskala erreicht wird. Bisherige Simulationen zeigen, dass dazu nur wenige (≤ 5) Iterationsschritte nötig sind.

Zwecks Modellierung quasi-inkompressibler Werkstoffe wurden gemischte, stabilisierte Finite Elemente im Homogenisierungstool implementiert. Die Druckstabilisierung erfolgt hierbei über eine doppelte Gaußintegration [1]. Darüber hinaus werden die periodischen Randbedingungen nicht mehr durch einen Penalty-Ansatz sondern mittels eines Master-Slave Projektionsalgorithmus abgebildet.

Bei der Umformulierung des viskoplastischen Werkstoffgesetzes für den kohärenten fest-flüssig Bereich [2] wurde darauf geachtet, dass der druckabhängige Term nun

kontinuierlich beim Übergang von einem Druck- in einen Zugzustand oder umgekehrt variiert.

Für die Weiterentwicklung des Phasenfeldmodells in Richtung Mechanik wurde eine theoretische Studie erstellt, worin ein gemischter Spannungs- Dehnungsansatz für die diffuse Grenzfläche untersucht wurde. Dieser Ansatz ermöglicht es, sowohl das mechanische Gleichgewicht der Oberflächenkräfte als auch die kinematische Kompatibilität des Dehnungstensors an der Grenzfläche zu gewährleisten.

Ergebnisse

Eine erste makroskopische Gießsimulation des Al-Napfes wird mit einer $f_s(T)$ -Kurve (Festphasenanteil) aus einer Materialdatenbank durchgeführt, die jedoch die lokale Gefügeentwicklung im Bauteil nicht berücksichtigt. Dies entspricht dem üblichen Vorgehen bei der Simulation auf Bauteilebene. Dann folgte eine erste lokale Gefügesimulation (in unserem Beispiel im Punkt A des Bauteils, Bild 1a) mit einer zunächst geschätzten konstanten Wärmeentzugsrate (iter1).

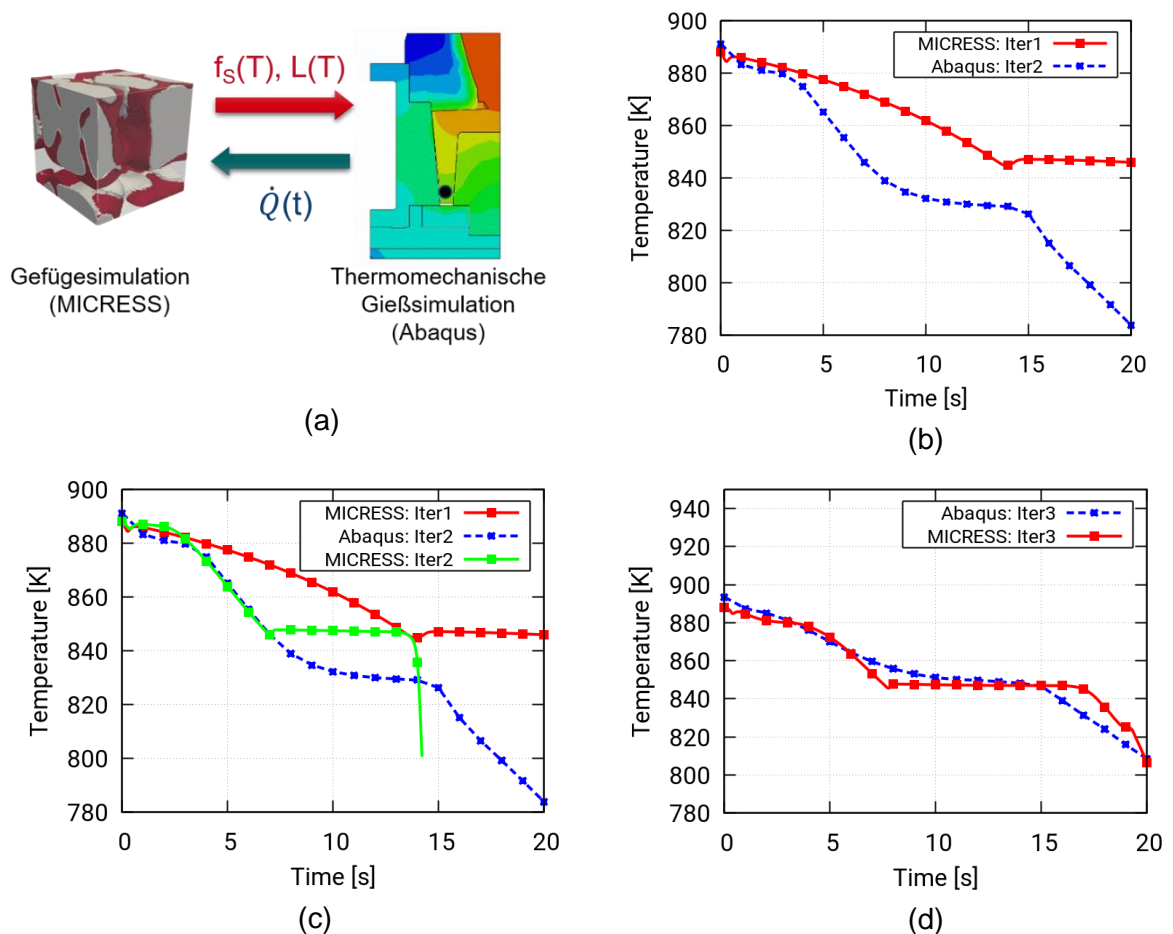


Bild 1: Darstellung der iterativen Simulation auf Gefüge- und Bauteilskala (a), und der Vergleich der lokalen Temperaturverläufe (im Punkt A) der Gefüge- und Gießsimulation nach der ersten (b), zweiten (c) und dritten (d) Iteration.

Wie im Bild 1b zu sehen ist, führt die Gefügesimulation zu einem Temperaturverlauf, der deutlich von der Abkühlkurve im Napf abweicht. Der zugehörige temperaturabhängige Verlauf des Festphasenanteils wurde dann in der zweiten Gießsimulation (iter2) anstelle der üblichen $f_s(T)$ -Kurve aus der Datenbank verwendet. Durch Verwendung der lokalen Wärmezugsrate aus dieser Gießsimulation in der nächsten Gefügesimulation (iter2) ist die Abweichung zwischen den Temperaturverläufen auf Mikro- und Makroskala schon deutlich kleiner, insbesondere die Gesamtzeit der Erstarrung stimmt bereits gut überein, siehe Bild 1c. Bereits nach der dritten Iteration wurde eine konsistente Beschreibung der Temperaturverläufe auf beiden Skalen erreicht, Bild 1d.

Um eine präzisere Vorhersage der lokalen mechanischen Eigenschaften in einer spritzgegossenen Polypropylene (PP) Platte zu erzielen, wurde in Zusammenarbeit mit dem IKV die existierende Mehrskalensimulation des Spritzgusses verbessert [1, 3]. Zwecks präziserer Abbildung der quasi-Inkompressibilität der amorphen Phase ($\nu = 0.499$) wurden gemischte, lineare Finite Elemente in das Homogenisierungstool implementiert. Homogenisierungs- und Lokalisierungsrechnungen für ein Benchmark RVE eines Verbundwerkstoffs, Epoxy-Harz mit einer Glaskugel, haben gezeigt, dass die Elementvariante P1+P1 die präziseste Variante ist. Neben der Druckstabilisierung von Typ Li-He kennzeichnet diese Elementvariante ein mit Volumenbubble angereichertes lineares Verschiebungsfeld. Diese Variante in Kombination mit dem neu implementierten Master-Slave Projektionsalgorithmus für periodischen Randbedingungen, führt zu erheblich verbesserten effektiven Eigenschaften der „cross-hatched“ PP Lamelle auf der Nanoskala, wie in Tabelle 1 zeigt. In dieser Tabelle wurden zu Vergleichszwecken auch die Vorhersagen mit klassischen linearen und quadratischen Elementen in Kombination mit dem Penalty-Ansatz für die Periodizität aufgelistet. Der Präzisionsgewinn für die berechneten Eigenschaften hat seine Ursache in der unrealistisch hohen Steifigkeit der klassischen Tetraeder für quasi-inkompressible Phasen, was zu einer starken Reduzierung der mikroskopischen Verschiebungen auf dem RVE und der Korrektur der volumengemittelten Hooke Matrix führt (siehe Bild 2).

Element	Nodes	E_1	E_2	E_3	G_{12}	G_{13}	G_{23}
P1	40264	1750.2	1854.2	8280.0	513.8	687.0	602.8
P2	280678	1687.8	1790.1	7486.3	489.5	658.8	580.2
P1+P1	40264	1411.8	1798.1	3958.7	262.3	321.5	297.0

Tabelle 1: Effektive Elastizitäts- und Schubmodule [MPa] des geraden Designs der „cross-hatched“ teilkristallinen PP Lamelle.

Auf der nächst höheren Mikroskala wurden mittels des radialen Sphärolithmodells vier unterschiedliche Erstarrungsgefüge über den 3 mm dicken Querschnitt der PP Stufenplatte homogenisiert. Es handelt sich um ein gröberes Gefüge, initiiert durch thermische Nukleation, und ein feines Gefüge, welches durch athermische Nukleation hervorgerufen wird. In beiden Gefügen wurde die Grenzschicht zwischen den einzelnen Sphärolithen einmal separat abgebildet und in einer zweiten Variante nicht.

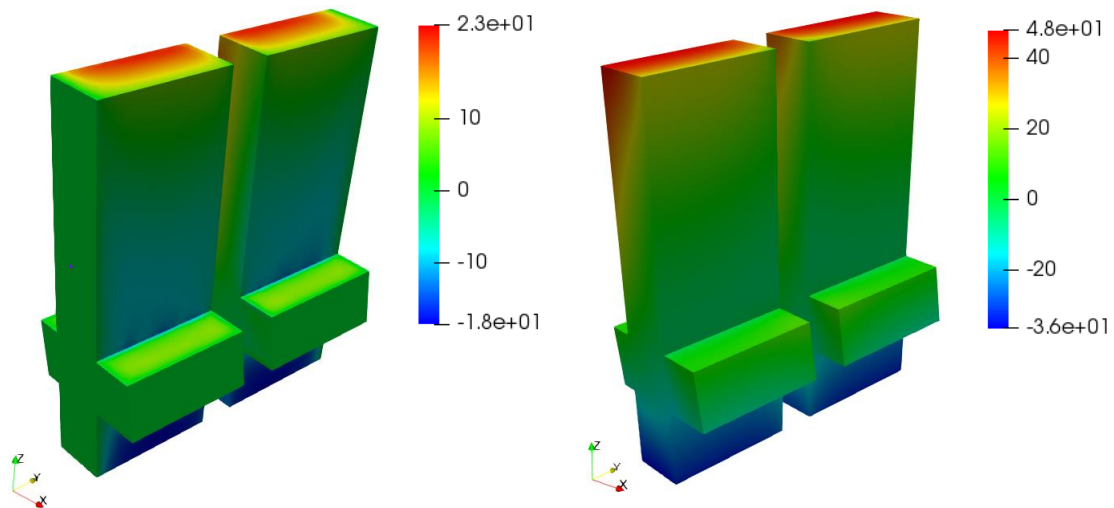


Bild 2: Mikroskopische Verschiebungen [nm] in der E_z -Richtung der kristallinen Phase der „cross-hatched“ PP Lamellen bei einer Beanspruchung in gleicher Richtung. Links: lineare P1 Elemente; rechts: gemischte, stabilisierte P1+P1 Elemente.

In Bild 3 ist die Variation des mittleren effektiven Elastizitäts- und Schubmoduls für die vier verschiedenen Gefügevarianten über den Plattenquerschnitt aufgetragen. Der Vergleich mit dem experimentell ermittelten mittleren E-Modul und dessen Konfidenzintervall zeigen, dass die athermische Variante ohne Grenzschicht die beste Beschreibung für den E-Modul liefert. Diese Variante liefert auch den größten mittleren Schubmodul. Erst wenn es möglich wird, die reale Interfacedicke von ca. 300 nm in der Gefügesimulation Sphärosim abzubilden und dessen Oberfläche zu glätten, wird die Variante mit Grenzschicht interessant für die Eigenschaftsvorhersage.

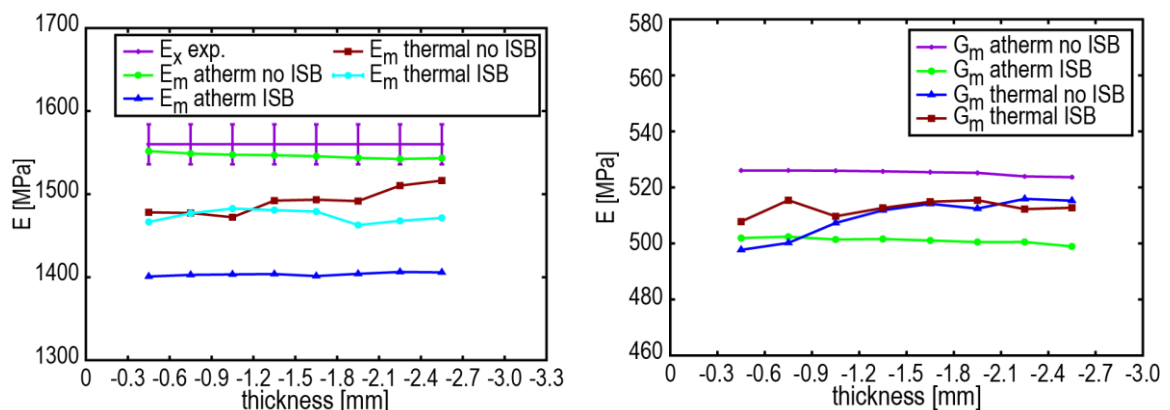


Bild 3: Variation der effektiven mittleren Elastizitäts- (links) und Schubmodule (rechts) über die Plattendicke für ein simuliertes Gefüge mit einem Modell für thermische oder athermische Nukleation bei Berücksichtigung/Nichtberücksichtigung einer Grenzschicht (ISB) zwischen den Sphärolithen.

Zusammenfassung und Ausblick

Der entwickelte iterative Mehrskalenansatz berücksichtigt die lokale Gefügeentwicklung bei der makroskopischen Bauteilsimulation und liefert eine konsistente Berechnung der Temperaturverläufe auf Makro- und Mikroskala für das Kokillengießen von Al-Legierungen. Damit ist es möglich sowohl den Einfluss der Legierungszusammensetzung als auch verschiedene Erstarrungsmorphologien (kolumnar, äquial, eutektisch, Korngröße, ...) in der Bauteilsimulation zu berücksichtigen. Die Anwendung dieses iterativen Mehrskalenansatzes für verschiedene Gussformen, z. B. Napf und F-Probe (TP B9), wird es uns ermöglichen nicht nur verfeinerte, mikrostrukturbasierte effektive Werkstoffgesetze herzuleiten, sondern auch den Einfluss lokaler Variationen des Gefüges auf die Bauteilpräzision (Verzug, Restspannungen) zu quantifizieren. Effektive viskoplastische Fließkurven von äquial und gerichtet erstarrten Gefügen der Al-Legierung A356 sollen durch virtuelle Tests ermittelt werden und eine Verfeinerung der viskoplastischen Werkstoffmodelle für den fest-flüssig Bereich ermöglichen.

Durch die Implementierung von gemischten, stabilisierten Elementen im Homogenisierungstool wurde die Vorhersage von effektiven elastischen Eigenschaften von Werkstoffen mit quasi-inkompressiblen Phasen, wie die amorphe Phase teilkristalliner Polymere oder die Restschmelze im fest-flüssig Bereich, deutlich verbessert. Als nächster Schritt sollen neue Lamellendesigns mit kürzeren bzw. fehlenden Seitenarmen für unterschiedliche Kristallisationsgrade über die Bauteildicke generiert und deren Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften bestimmt werden. Gemeinsam mit TP B4 soll der iterative Mehrskalenansatz auch auf die Erstarrung von teilkristallinen Polymeren übertragen werden.

Veröffentlichungen

- [1] G. Laschet, H. Nokhostin, S. Koch, M. Meunier, Ch. Hopmann: „Prediction of effective elastic properties of a polypropylene component by an enhanced multiscale simulation of the injection molding process”, *Mechanics of Materials*, under review, April 2019.
- [2] G. Laschet, H. Behnken: “Thermo-elasto-viscoplastic constitutive laws for metallic alloys during their solidification”, accepted for *IOP Conference Series: Mat. Science & Eng.*, June 2019.
- [3] G. Laschet, H. Nokhostin, S. Koch, Ch. Hopmann: “Microstructure dependent effective elastic properties of a polypropylene plate via a multiscale simulation of the injection molding process”, *Int. Workshop on Simulation Science*, 8th-10th May 2019, Clausthal, Springer book of extended abstracts, May 2019.