

## Teilprojekt B7

### **Titel**

Mehrskalige thermomechanische Simulation der fest-flüssig Interaktion bei der Erstarrung

### **Projektleitung/-bearbeitung**

Apel, Markus; Laschet, Gottfried; Zhou, Bei; Budnitzki, Michael  
ACCESS e.V.

### **Aufgabenstellung**

Schwerpunkt der Arbeiten im laufenden Jahr waren Untersuchungen zu den Mechanismen hinter der Heißrissbildung beim Kokillenguss von Al-Legierungen, sowie deren Modellierung auf der Gefügeskala. Um ein verbessertes Verständnis der Heißrissentstehung gegen Ende der Erstarrung zu gewinnen, wurden 3D Gefügesimulationen für heißrissempfindliche Al-Cu Legierungen, die im TP B08 experimentell untersucht wurden, durchgeführt und der Einfluss der Erstarrungsmorphologie auf die Permeabilität des schmelzegefüllten Dendritenskeletts analysiert. Basierend auf dem in 2019 entwickelten iterativen Mehrskalenansatz, wurden gefügeabhängige Eigenschaften (z.B. Festphasenanteil, Permeabilität, Elastizität) entlang des Erstarrungsverlaufs ermittelt, die anschließend in die thermomechanischen Gießsimulationen des TP B09 einfließen, um verbesserte Vorhersagen der Heißrissentstehung in kritischen Stellen eines Demonstratorbauteils (F-Probe) treffen zu können. Parallel dazu wurde für die Berechnung der Verformung des Erstarrungsgefüges durch externe Kräfte, die mechanische Modellierung im Multi-Phasenfeldansatz weiterentwickelt.

### **Vorgehensweise**

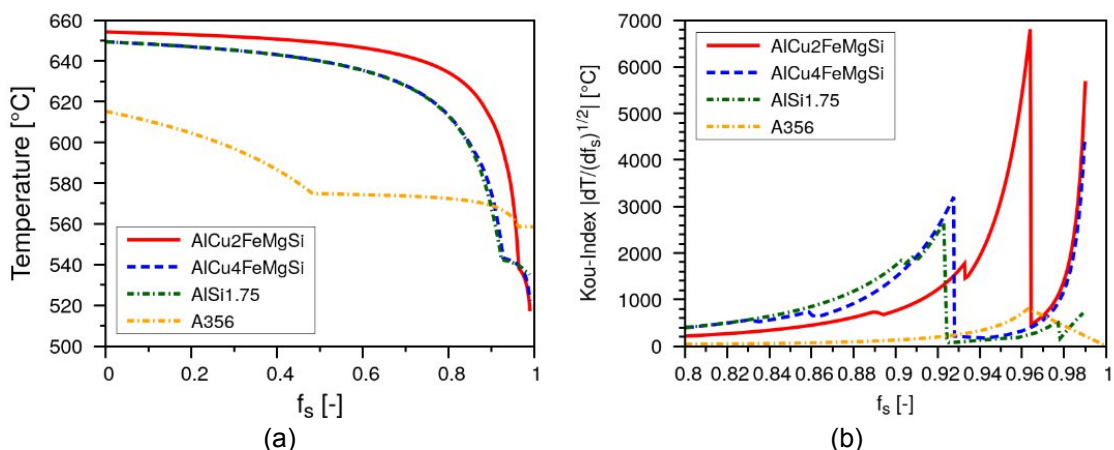
Um die Wechselwirkung zwischen Schmelzeströmung und Erstarrungsmorphologie abhängig von der Legierungszusammensetzung zu untersuchen, wurden 3D Gefügesimulationen für die Aluminium-Kupfer Legierungen AlCu2wt% und AlCu4wt% durchgeführt. Beide Legierungen haben eine verglichen mit A356 größere Heißrissempfindlichkeit. Durch Auswertungen der Heißrissanfälligkeit mittels des von Kou entwickelten Kriteriums [4], wurde zuerst der Zusammenhang zwischen Legierungszusammensetzung und Heißrissneigung analysiert. Für unterschiedliche Gefügezustände entlang der simulierten Erstarrung wurde der Permeabilitätstensor für die Strömung der Restschmelze durch das Dendritenskelett durch das Lösen der Stokes Gleichung berechnet. Die berechnete Permeabilität lässt sich als Funktion des Festphasenanteils  $f_s$  durch modifizierte Carman-Kozeny Modelle beschreiben,

die in den letzten Jahren neu entwickelt wurden um speziell die Permeabilität zum Ende der Erstarrung präziser beschreiben zu können. Es wurden drei verschiedene Varianten des Carman-Kozeny Modells verglichen.

Das mechanische Phasenfeldmodell wurde dahingehend erweitert, dass im diffusen Interface nun ein gemischter Spannungs-Dehnungsansatz berücksichtigt wird, der es ermöglicht sowohl das mechanische Gleichgewicht der Oberflächenkräfte, als auch die Kompatibilität der Dehnung eines äquivalenten scharfen Interfaces abzubilden. Einfache Benchmark Tests mit analytischer Lösung (sphärischer Einschluss in kubischer Matrix) validieren den implementierten gemischten Ansatz. Darüber hinaus wurde der Einfluss der konzentrationsabhängigen Eigendehnungen auf die Floßbildung einer Ni-Superlegierung mittels eines neuentwickelten chemo-mechanischen Phasenfeldansatzes bestimmt [1].

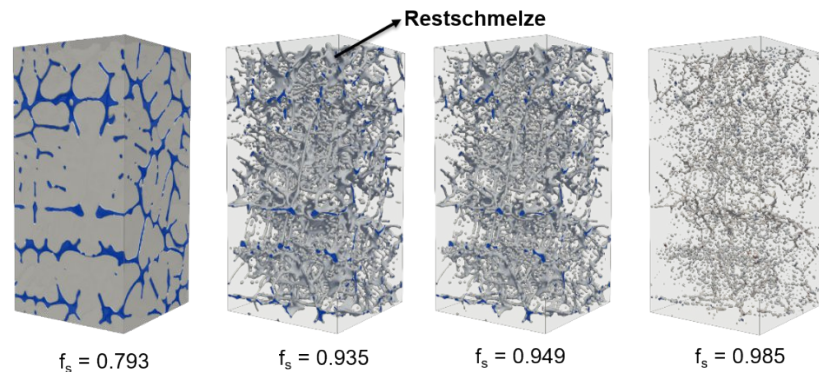
## Ergebnisse

Basierend auf dem Erstarrungsmodell nach Gulliver-Scheil, wurden Temperatur-Festphasenanteil Kurven für die in den Kokillengussexperimenten von TP B08 untersuchten Al-Legierungen ermittelt und die Heißrissanfälligkeit mittels Kou-Kriterium ausgewertet (siehe Abbildung 1). Im Vergleich zur Legierung A356 (AlSi7wt%Mg0.7wt%) weisen die Legierungen AlCu2FeMgSi (AlCu2wt%Fe0.078wt%Mg0.002wt%Si0.13wt%), AlCu4FeMgSi (AlCu4wt%Fe 0.08wt%Mg0.002wt%Si0.11wt%) und AlSi1.75 eine höhere Heißrissanfälligkeit auf. Diese Voraussagen mittels des Kou Indexes stimmen sehr gut mit den experimentellen Beobachtungen überein.



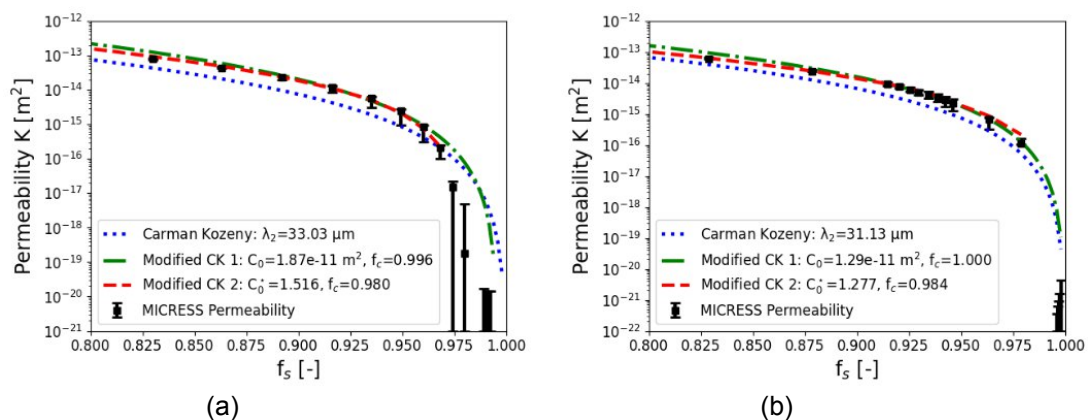
**Abbildung 1:** (a) Scheil-Berechnungen für vier verschiedene Al-Legierungen; (b) Auswertung des Kou-Kriteriums, basierend auf den Scheil Berechnungen.

Der äquiaxiale Erstarrungsprozess der beiden heißrissempfindlichen Al-Cu Legierungen, AlCu2wt% und AlCu4wt%, wurde anschließend mit dem Phasenfeldmodell simuliert. Als Beispiel zeigt Abbildung 2 die simulierte Entwicklung der Erstarrungsmorphologie der AlCu2wt% Legierung gegen Ende der Erstarrung.

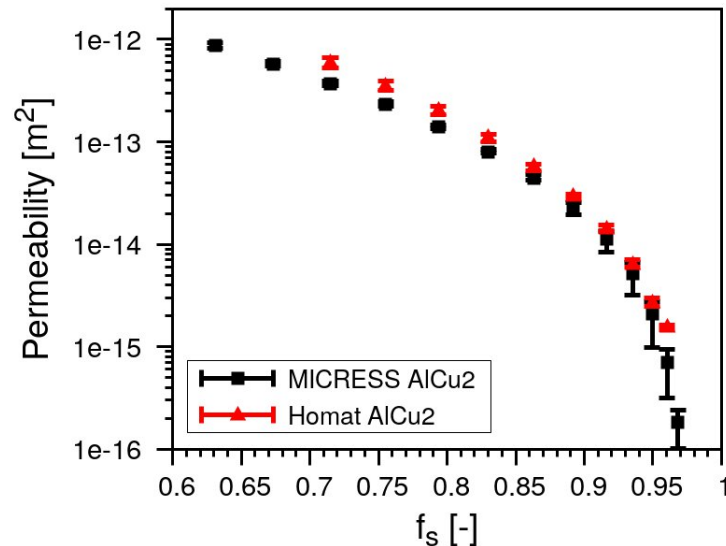


**Abbildung 2:** Erstarrungssimulation von 2 Körnern der Legierung AlCu2wt% in einem  $150 \times 150 \times 300 \mu\text{m}^3$  großen RVE. Dargestellt ist die fest-flüssig Phasengrenze mit der umschlossenen Restschmelze (blau).

Während der Erstarrung wurde für ausgewählte Zeitschritte die Permeabilität des jeweiligen erstarrten Gefüges mit Restschmelze durch das Lösen der Stokes Strömung auf dem mit Finiten Differenzen diskretisierten RVE unter vorgegebenem Druckgradienten berechnet, siehe Abbildung 3. Die Permeabilität als Funktion des Festphasenanteils wurde mit dem klassischen und zwei modifizierten Carman-Kozeny (CK) Modellen [2] gefittet. Wie in Abbildung 3(a) dargestellt, sind der klassische Carman-Kozeny Ansatz, trotz Anpassung des sekundären Armabstands, und das modifizierte CK Modell 1 mit Anpassung der Parameter  $C_0$  und  $f_c$  nicht in der Lage, die Permeabilität bei hohem Festphasenanteil  $f_s$  korrekt zu beschreiben. Das modifizierte CK Modell 2 berücksichtigt explizit die spezifische Oberfläche der fest-flüssig Grenzfläche und deren Tortuosität und liefert eine bessere Beschreibung der Permeabilität der Restschmelze bei großen  $f_s$ . Außerdem wurde der kritische Festphasenanteil  $f_c$ , bei dem sich die letzten offenen Schmelzekanäle schließen, im Modell berücksichtigt. Das neuentwickelte CK Modell 2 wird jetzt in der thermomechanischen Gießsimulation (TP B09) genutzt, um eine Aussage bezüglich der lokalen Heißrissbildung beim Kokillenguss der F-Probe treffen zu können.



**Abbildung 3:** Berechnete mittlere Permeabilität im  $f_s$ -Bereich von  $0.8 < f_s < 1.0$  mit dem Fit des klassischen und von zwei modifizierten Carman-Kozeny Modellvarianten für (a) AlCu2 und (b) AlCu4.



**Abbildung 4:** Vergleich der Permeabilitätsvorhersagen zwischen MICRESS (Finite-Differenzen-Ansatz) und Homat (gemischter Finite Elemente Ansatz).

Als alternative Methode zur Berechnung der Permeabilität, wurde das Homogenisierungstools HOMAT weiterentwickelt und die Ergebnisse mit denen der Stokes-Lösung von MICRESS verglichen (siehe Abbildung 4). In HOMAT kommt ein gemischter Finiten-Elemente-Ansatz mit angereichertem Geschwindigkeitsfeld pro Element und Druckstabilisierung zum Einsatz. Unabhängig vom  $f_s$ , liegen die mittleren HOMAT Permeabilitäten leicht über den finiten Differenzen Ergebnissen von MICRESS, die pro Zelle nur konstante Geschwindigkeiten annimmt.

### Zusammenfassung und Ausblick

Mittels einer 3D Phasenfeld-Simulation der äquiaxialen Erstarrung wurden für die heißrissanfälligen Legierungen AlCu2wt% und AlCu4wt% morphologische Eigenschaften z.B. temperaturabhängiger Festphasenteil  $f_s$ , spezifische Oberfläche der fest-flüssig Grenzfläche,  $S_V$  und die Tortuosität ermittelt und die gefügeabhängige Permeabilität während des Erstarrungsprozesses berechnet. In Zukunft soll der Einfluss der aus den makroskopische Simulationen (TP B09) extrahierten lokalen Spannungs- und Dehnungszustände auf das Wachstum des Gefüges mittels des erweiterten thermomechanisch Multi-Phasenfeld Modells analysiert werden. Darüber hinaus ist geplant, das Erstarrungsgefüge der AlCu2 Legierung unter Laser-Schweißprozess Bedingungen (TP A02) zu simulieren. Die Permeabilität der feineren Gefüge im Schweißprozess (gerichtete Dendriten) soll ermittelt und ebenfalls mittels des modifizierten CK Modells 2 beschrieben werden. Die daraus abgeleiteten Morphologie-

Parameter werden dann mit denen der äquiaxialen Erstarrung unter Gießbedingungen verglichen.

### Veröffentlichungen

- [1] B. Böttger, M. Apel, M. Budnitzki, J. Eiken, G. Laschet, and B. Zhou, "Calphad coupled phase-field model with mechano-chemical contributions and its application to rafting of  $\gamma'$  in CMSX-4," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 184, no. June, p. 109909, 2020.
- [2] R. Berger, M. Apel, and G. Laschet, "An analysis of the melt flow permeability for evolving hypoeutectic Al-Si mushy zone microstructures by phase field simulations," *Materialia*, vol. 15, no. November, 2021.
- [3] B. Zhou, G. Laschet, J. Eiken, H. Behnken, and M. Apel, "Multiscale solidification simulation of Sr-modified Al-Si-Mg alloy in die casting," *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.*, vol. 861, no. 012034, 2020.

### Literatur

- [4] S. Kou: "A criterion for cracking during solidification", *Acta Materialia*, vol. 88, p. 36-374, 2015.