

Vom Bauteilkonzept zur Optimierung mechanischer Eigenschaften - Berücksichtigung der Mikrostruktur und Gussfehler bei der Simulation von Guss und der Wärmebehandlung

Ole Köser¹, Gael Couturier¹, Jiri Kovarik², Josef Barta³

¹CALCOM ESI, Lausanne, Switzerland,

²MECAS ESI, Pilzen, Czech Republic,

³VITKOVICE HEAVY MACHINERY, Ostrava, Czech Republic,

Stichworte: Simulation, Gießen, Wärmebehandlung, Eigenspannung, Verzug

Zusammenfassung

Dieser Artikel präsentiert eine Vorgehensweise, bei der die Modellierung von Wärmefluss und Spannung vollständig integriert mit der Vorhersage der Gefügeeigenschaften einhergeht. Der Einfluss von Mikrostruktur, Porosität und Heißrissverteilung auf die mechanischen Eigenschaften wird dabei berücksichtigt. Bei jedem Zeitschritt der Simulation werden Temperatur und Spannung modelliert. Dann werden Mikrostruktur, Porosität und optional Heißrissgefährdung ermittelt. Schließlich werden die lokalen mechanischen Eigenschaften als Funktion der Temperatur, des Gefüges und der Gussfehlerverteilung ermittelt und beim nächsten Schritt der Simulation berücksichtigt. Um den vollständigen Ablauf des Herstellungsprozesses aus Guss und Wärmebehandlung darzustellen, wurde die Funktionalität der Simulation weiterentwickelt so dass das Ausleeren und die Abtrennung von Gießsystem und Speiser einen natürlichen Teil der Simulationskette bilden.

Diese Vorgehensweise wurde in ProCAST und Sysweld implementiert. Im Folgenden wird diese zur Verdeutlichung des Konzepts zunächst auf den Guss und die Wärmebehandlung einer Aluminiumkomponente angewendet. Es folgt die Beschreibung einer groß-industriellen Anwendung aus dem Stahlbereich unter Berücksichtigung von Guss und Wärmebehandlung. Deutliches Ergebnis der Untersuchungen ist, daß die Veränderung der Mikrostruktur im Verlauf des Prozesses aus Gießen und Wärmebehandlung einen signifikanten Einfluss auf die resultierenden Eigenspannung und den Verzug aufweisen.

Einleitung

Die Verringerung der Fehlerrate bei der Produktion erfordert eine verlässliche Vorhersage von Verzug und Eigenspannungen nach dem Gießen und der Wärmebehandlung. Die Spannungssimulation wird daher in der industriellen Praxis immer häufiger angewendet und ist auf dem Weg eine Standardanwendung zu werden. Aus Mangel an verlässlichen Daten werden dabei jedoch oft mechanische Eigenschaften ausschließlich als Funktion der Temperatur verwendet, obwohl bekannt ist, dass diese stark von Mikrostruktur und Gussfehlern abhängen.

Technisch weitentwickelten Softwarepakete haben die Fähigkeit den Effekt von Gefügewandlungen bei der Spannungssimulation zu berücksichtigen [1]. Diese Modelle sind jedoch gewöhnlich nicht ausgelegt, um den Gießprozess darzustellen, welcher eine Simulation der Füllung und die thermo-mechanische Wechselwirkung erfordert. Der Einfluss der Mikrostruktur und der Gussfehler wird daher gewöhnlich erst bei der Wärmebehandlung berücksichtigt, wobei man den Eingangszustand aus dem Gießprozess als stark vereinfacht annimmt.

Dieser Artikel präsentiert eine Reihe von Ansätzen, die zur Erweiterung der derzeit limitierten Herangehensweise entwickelt wurden. Das Vorgehen beruht auf einer kombinierten Berechnung von Füllung, Wärmefluss und Spannung unter Berücksichtigung einer sich erst während des Prozesses ausbildenden Gefüge- und Gussfehlerverteilung. Die mechanischen Eigenschaften werden bei jedem Rechenschritt (Zeitschritt) als Funktion der lokalen Temperatur, Mikrostruktur und Gussfehlerverteilung aktualisiert. Zusätzlich wurde die Software zur Darstellung der Entformung sowie des Abtrennens von Gießsystem und Speisern erweitert. Im Folgenden wird diese zur Verdeutlichung des Konzepts zunächst auf den Guss und die Wärmebehandlung einer Aluminiumkomponente angewendet. Es folgt die Beschreibung einer groß-industriellen Anwendung aus dem Stahlbereich unter Berücksichtigung von Guss und Wärmebehandlung.

Erweiterte Spannungsvorhersage zur Modellierung von Guss und Wärmebehandlungsprozessen

Ein integriertes Vorgehen für die Vorhersage von Spannung und Verzug von gegossenen und danach wärmebehandelten Komponenten wurde entwickelt. Das Ziel war die Integration des Einflusses von Gefügestruktur und Gussfehlern sowie der Entformung und des Abtrennens von Gießsystem und Speisern. Die neue Softwarelösung setzt sich aus einem Gießsimulations-Standardpaket zusammen, welches um folgende neue Funktionen erweitert wurde:

- Funktionen für den Zusammenhang zwischen Mikrostruktur/Gussfehlern und mechanischen Eigenschaften,
- Funktionen für Entformung und Entfernen von Gießsystem und Speisern.

Die aufeinanderfolgenden technischen Schritte von Guss und Wärmebehandlung sind in Abbildung 1 dargestellt. Für jeden Einzelschritt wird der entscheidende spezifische Wirkungszusammenhang mit Hilfe des neuentwickelten Softwarepakets abgebildet:

- (1) Während des Gießprozesses werden Spannung und Verformung im Gussteil und der Form (inkl. Kerne, Kühlleisten, ..) ermittelt, Die gegenseitige mechanische und thermische Wechselwirkung wird durch angepasste Kontaktalgorithmen dargestellt (inkl. modifizierter Wärmeübergang durch Spaltbildung).
- (2) Eine "Extrakt"-Funktionalität wurde entwickelt, um den korrekten thermomechanischen Zustand zu Beginn jeden technischen Prozessabschnitts darstellen zu können. Nach dem Gießprozess wird das Gussteil beispielsweise ausgeleert. Da die Schwindungsbehinderung durch die Form wegfällt, kann das Teil sich zusammenziehen (Springback-Effekt) Dieser spannungsärmere und verformte Gussteilzustand wird als Anfangszustand (Spannungstensor an den Gausspunkten, Verformung an den Knoten, plastische Verformung an den Gausspunkten) bei der weiteren Simulation verwendet, die nunmehr ohne Form fortgesetzt wird.
- (3) Das Zurückschnappen des Teils durch Entfernung von Gießsystem und Speisern wird mit einer zu (2) äquivalenten Verfahrensweise abgebildet.
- (4) Nun kann die Wärmebehandlung simuliert werden. So kann sich beispielsweise durch Kriechen bei der Homogenisierung Spannung abbauen. Anlassen kann entsprechend simuliert werden, wobei in der Software eine Anlasstemperatur auszuwählen ist, bei der die sich vorher gebildete plastische Verformung abgebaut wird.

- (5) Die mechanischen Eigenschaften können in entscheidender Weise von der spezifischen Mikrostruktur und dem Auftreten von Gussfehlern abhängen. Entsprechend werden auch Spannung und Verzug von der Entwicklung und Veränderung dieser Größen abhängen. Aus diesem Grund wurden Algorithmen entwickelt, die eine vollständige Kopplung zwischen Mikrostruktur/Defektverteilung, mechanischen Eigenschaften und Spannungsausbildung ermöglichen. Dieser Aspekt ist im Weiteren in (7) im Detail erläutert.
- (6) Die Mikrostruktur welche sich bei der Wärmebehandlung ausbildet hängt von dem im Guss ausgebildeten anfänglichen Gefüge ab. Die Simulation muss daher mit der Möglichkeit ausgestattet sein, die Gefügeentwicklung in beiden Prozessabschnitten in einer geschlossenen Art und Weise darstellen zu können. Zu diesem Zweck wurde eine sogenannte metallurgische Bibliothek, mit unterschiedlichen metallurgischen Modellen und der Möglichkeit diese nacheinander abzurufen, erstellt. Sie enthält deterministische Modelle für eine equiaxiale Erstarrung [1] sowie Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami (KJMA) Modelle für Umwandlungen im Festkörperzustand [2,3,4]. Die Software-Bibliothek kann benutzerfreundlich an unterschiedliche thermische Solver gekoppelt werden.
- (7) Die Beziehung zwischen mechanischen Eigenschaften und der Mikrostruktur kann vielerlei Gestalt annehmen. Deshalb ist es in den meisten Fällen nicht möglich bereits im Vorfeld allgemeine Zusammenhänge zu postulieren. Solche Zusammenhänge werden daher vielfach empirisch, experimental oder durch sinnvolle Modelannahmen gesetzt. Um dem Nutzer größtmögliche Flexibilität bereitzustellen, wurde daher eine Umgebung aus sogenannten Nutzerfunktionen zur Definition der spezifischen Zusammenhänge bereitgestellt. Die Funktion hat Zugriff auf Größen wie Phasenanteil, Korngröße, primäre und sekundäre lamellarer Abstände, Porosität, etc.. auf Basis derer die mechanischen Eigenschaften definiert werden können. Im Verlauf der Simulation werden die Nutzerfunktionen dann lokal für jedem Integrationspunkt und Zeitschritt aufgerufen. Das herkömmliche Solverschema im Vergleich mit dem neu entwickelten ist Abbildung 2 dargestellt.

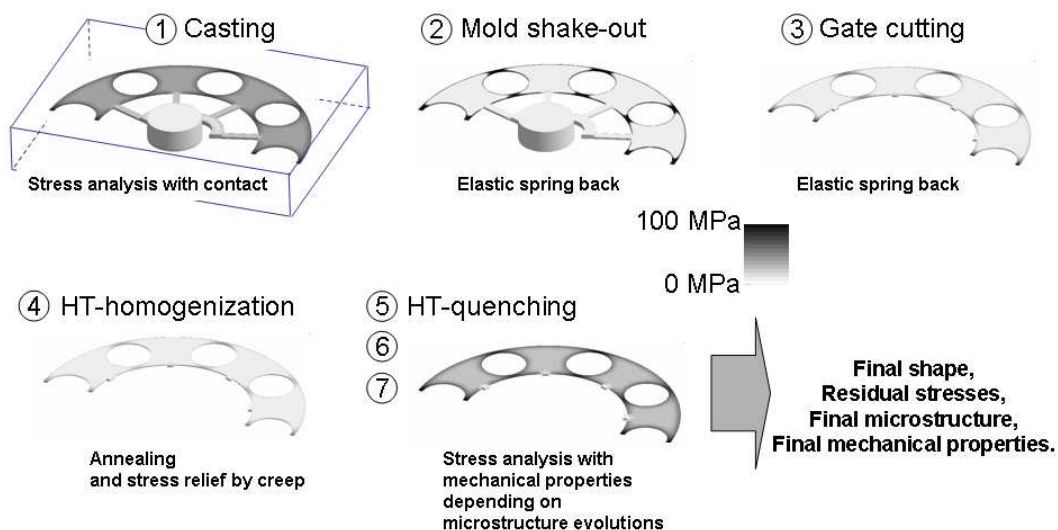


Abbildung 1. Beispiel für die simulierten Abschnitte eines Gusses mit anschließender Wärmebehandlung (Von Mises Spannungen).

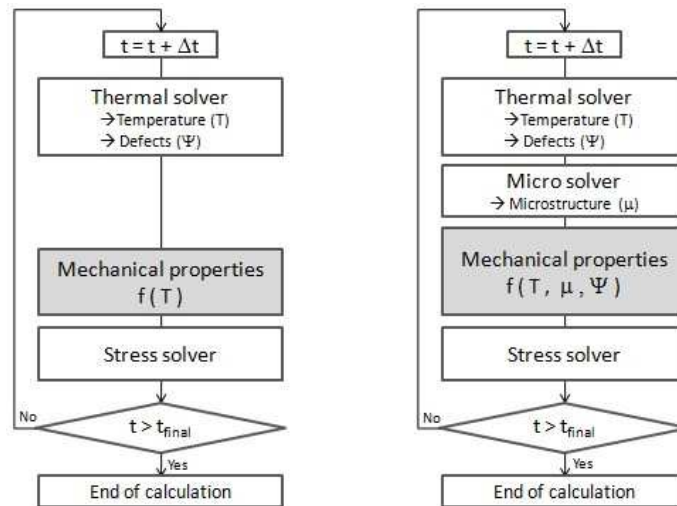
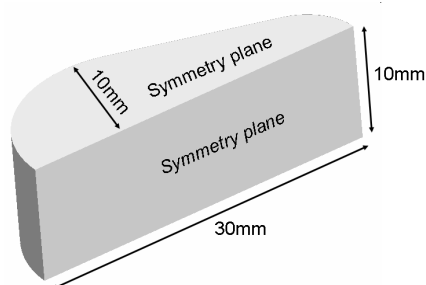


Abbildung 2. Original (links) und neue (rechts) Struktur des thermomechanischen Solvers.

Der nächste Abschnitt präsentiert zwei Anwendungen, welche in ProCAST und Sysweld integriert wurden. Zunächst handelt es sich um ein Beispiel für eine Festphasenumwandlung, mit Korngrößenwachstum (postuliert) während der Homogenisierung und abschließendem Abschrecken zwecks numerischer Validierung bei einer Aluminium Komponente (Anwendung 1). Im zweiten Fall wurde das Konzept für eine reale industrielle Anwendung benutzt, wobei die Effekte der Phasentransformation auf die Ausbildung von Eigenspannungen bei dem Guss und der Wärmebehandlung eines großen Stahlblocks untersucht wurde (Anwendung 2).

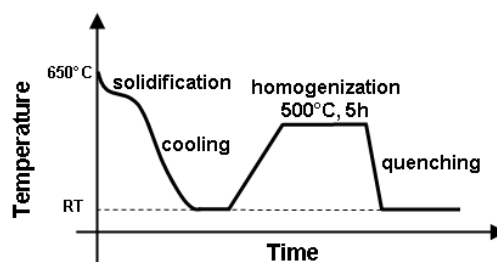
Anwendung 1: Einfluss von Korngrößenwachstum in der festen Phase auf die Ausbildung von Eigenspannungen

In diesem ersten Beispiel wird mit Hilfe von ProCAST der Effekt der Homogenisierung auf die Eigenspannungen anhand eines einfachen Al-Bauteils untersucht. Die Geometrie des Bauteils ist in Abbildung 3(a) dargestellt. Der thermische Verlauf während Guss und Wärmebehandlung zeigt (schematisch) Abbildung 3(b). Insbesondere ist eine Homogenisierungsphase enthalten, wobei das Bauteil während 5 Stunden auf 500°C gehalten wird.



(a)

Abbildung 3. (a) Bauteilgeometrie.



(b)

Abbildung 3. (b) Ablauf Guss - Wärmebehandlung.

Seit langem ist bekannt, dass die Korngröße im Fall polykristalliner Materialien einen Einfluss auf die Zugspannung hat (vergleiche Hall [5] und Petch [6]). Aus diesem Grund kann angenommen werden, dass das Kornwachstum während der Homogenisierung einen Einfluss auf die mechanischen Materialeigenschaften hat und daher die Spannungsverteilung nach der

Abschreckung beeinflussen wird. Um dies zu illustrieren wurden zwei Simulationen ausgeführt, und deren Ergebnisse miteinander verglichen:

- Der Einfluss des Kornwachstums auf die mechanischen Eigenschaften wird nicht berücksichtigt,
- Der Einfluss des Kornwachstums wird berücksichtigt.

Um die Simulation im Fall b) auszuführen wurde ein einfaches Kornwachstumsmodell verwendet. In der Abwesenheit von Partikeln einer zweiten Phase (keine Wechselwirkung zwischen Korngrenzen und Partikeln) und konstanter Temperatur kann die Kinetik des Kornwachstums folgendermaßen beschrieben werden [5,6]:

$$R^2(t) - R^2(0) \approx 0.5m\gamma t \quad (1)$$

wobei $R(t)$ und $R(0)$ die aktuelle beziehungsweise die ursprüngliche Korngröße ist. m entspricht der Mobilität der Korngrenzen und γ der Korngrenzenenergie. Der Koeffizient 0.5 wurde experimentell von Mullins [7] bestimmt, und bestätigt durch das Vertex-Modell entwickelt von Weygand und anderen [8]. Da m und γ von der Temperatur abhängen, wurde folgende differentielle Form von Gleichung (1) in die metallurgische Datenbank integriert, um die bei einer Wärmebehandlung auftretenden zeitlich und räumlich veränderliche Temperaturverteilungen darzustellen:

$$dR \approx 0.25 \frac{m\gamma}{R} dt \quad (2)$$

Der Hall-Petch Zusammenhang wurde für Darstellung der Beziehung zwischen Korngröße und Zugfestigkeit benutzt:

$$\sigma_0 = \sigma_0^s + \frac{K}{R^{1/2}} \quad (3)$$

wobei R der Mittelwert der Korngröße aus Formel 2, σ_0^s die Zugfestigkeit eines einzelnen Korns und K ein Koeffizient ist, welcher mit zunehmender Härte zunimmt und mit zunehmender Temperatur abnimmt.

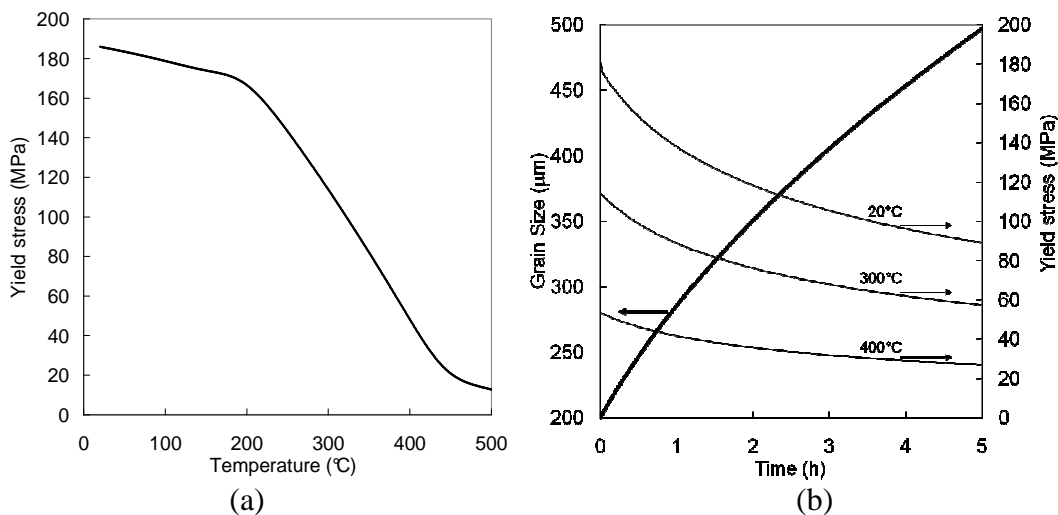


Abbildung 4. (a) Zugfestigkeit als Fkt. der Temperatur bei einer Korngröße von 200µm. (b) Entwicklung der Korngröße bei Homogenisierung (500°C während 5 Stunden) und entsprechende Zugfestigkeit bei 20°C, 300°C und 400°C.

Die ursprüngliche Korngröße nach dem Guss wurde mit 200µm angenommen. (Im Fall einer vollständigen Simulation kann die Korngröße von Ort zu Ort als Ergebnis einer Simulation des Gießprozesses variieren) Die Korngröße nach 5 Stunden bei 500°C wurde mit 500µm

angenommen, um realistische Werte für m und γ zu setzen. Für $200\ \mu\text{m}$ Korngrösse ist die Zugfestigkeit als Funktion der Temperatur (postuliert) in Abbildung 4 (a) dargestellt. Parameter für den Hall-Petch Zusammenhang (Formel (3)) wurden dann in einer Weise gesetzt, dass die Zugfestigkeit um den Faktor 2 verringert wird, wenn die Korngrösse von $200\ \mu\text{m}$ auf $500\ \mu\text{m}$ zunimmt. Der Wert einer Korngrösse von $500\ \mu\text{m}$ nach 5 Stunden bei 500°C ist postuliert wie die entsprechende Zugfestigkeit.

Die Entwicklung der Korngrösse im Verlauf der Homogenisierung ist in Abbildung 4 (b) dargestellt. Die Zugfestigkeit bei 20°C , 300°C und 400°C als Funktion der Homogenisierungstemperatur ist gleichermassen in Abbildung 4 (b) dargestellt.

Die entsprechenden Spannungen im Verlauf des Guss/Wärmebehandlungsprozesses sind in Abbildung 5 dargestellt. Die Spannungen während der Abkühlung (nach der Erstarrung) und beim Homogenisierungsschritt sind aus folgenden Gründen kaum vom Kornwachstum beeinflusst:

- Die Abkühlzeit bis auf Raumtemperatur ist klein im Vergleich mit den typischen Zeiten, die zu nennenswertem Kornwachstum im Festkörperzustand führen,
- Während der Homogenisierungsphase ist die Spannung niedrig.

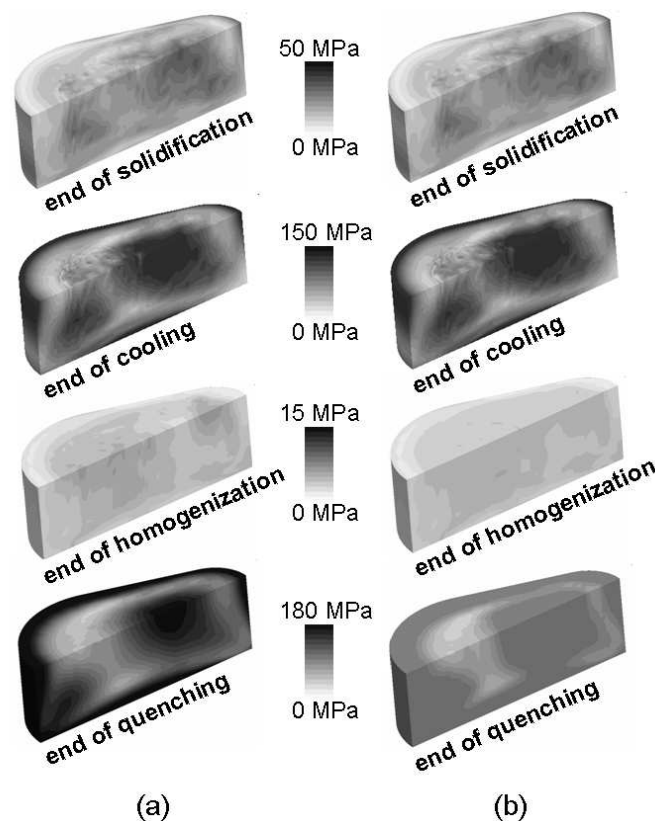


Abbildung 5. Entwicklung der Von Mises Spannungen im Verlauf des Giess/Wärmebehandlungsprozesses (simuliert mit ProCAST). (a) bei der Spannungssimulation wird das Kornwachstum im Festkörperzustand nicht berücksichtigt, (b) Kornwachstum im Festkörperzustand wird berücksichtigt.

Im Gegensatz dazu sind die Spannungen nach dem Abschrecken deutlich niedriger, wenn das Kornwachstum bei der Homogenisierung berücksichtigt wird. Da die Zugfestigkeit mit zunehmender Korngrösse abnimmt (Hall-Petch Formel (3)), ist hier beim Abschrecken eine umfangreichere plastische Verformung (Spannungen beim Abschrecken sind oberhalb der

Zugfestigkeit) zu beobachten. Damit zeigt sich, dass für eine realistischere Spannungsvorhersage, der Zusammenhang zwischen Mikrostruktur und mechanischen Eigenschaften bei der Spannungssimulation in Betracht gezogen werden muss.

Anwendung 2: Simulation des Guss - Wärmebehandlungsprozesses bei der industriellen Fertigung von zwei grossen Stahlblöcken

Die Bildung von Oberflächen und oberflächennahen Rissen während der Wärmebehandlung von Stahlblöcken ist ein bekanntes Problem. Eine vergleichende Studie vom Einfluss der Entwicklung der Gefügestruktur auf die Bildung solcher Risse wurde von Thomas und anderen [12] veröffentlicht. Die Arbeit zeigt, dass die Volumenänderung durch die $\alpha - \gamma$ Umwandlung und die lokalen mechanischen Eigenschaften eine entscheidende Rolle bei der Bildung innerer Spannungen bei der Wärmebehandlung spielen.

Eine vollständige Simulation des Guss/Wärmebehandlungsprozesses der Fertigung großer Stahlkomponenten wurde durchgeführt. Die beiden 27 Tonnen Stahlblöcke werden im Schwerkraftguss von unten gefüllt, entformt (Abbildung 6) und dann wärmebehandelt. Die Formgeometrie ist in Abbildung 7 (a) dargestellt, während die Abbildung 7 (b) das FEM-Netz eines Stahlblocks mit der Hälfte des Giesssystems zeigt.

Der Prozess ist im Detail in folgende Schritte unterteilt:

- Formfüllung von unten (18 Min),
- Erstarrung und Abkühlung (7 Stunden),
- Entformen (2 Stunden 30 Min),
- Verladen der heissen Blöcke in einen isolierten Eisenbahnwagen (15 Min),
- Transport mit dem isolierten Eisenbahnwagen zum Wärmebehandlungsofen (1 Stunde 10 Min),
- Wärmebehandlung bei 1200°C (15 Stunden).

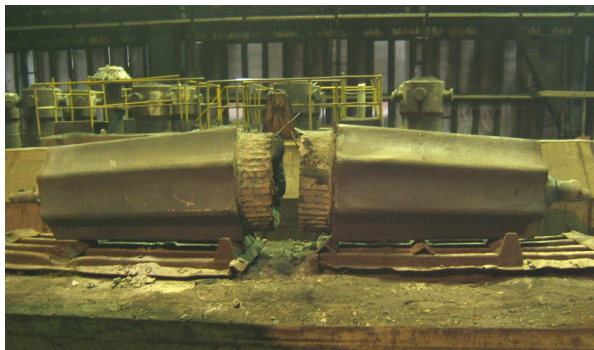


Abbildung 6. Zwei 27 Tonnen Stahlblöcke nach dem Entformen und vor der Wärmebehandlung.

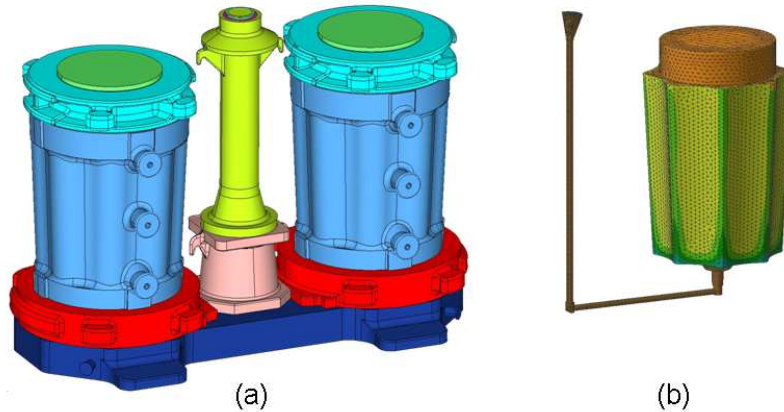


Abbildung 7. Schwerkraftguss-Formfüllung von unten von zwei 27 Tonnen Stahlblöcken: (a) Geometrie der Form, und (b) FEM Netz des Blocks und der Hälfte vom Giesssystem.

Alle diese Schritte wurden mit ProCAST und Sysweld simuliert. Abbildung 8 zeigt eine Reihe von Ergebnissen der Simulation. Die folgenden Einflussgrößen wurden berücksichtigt:

- Der Effekt der Füllung auf das Temperaturfeld,
- Betrachtung der mechanischen Eigenschaften als Funktion der lokalen Mikrostruktur bei der Modellierung der Eigenspannungen.

Der Wärmeausdehnungskoeffizient, die Zugspannung und das plastische Verhalten waren als nicht-lineare Funktionen in Abhängigkeit der Phasenanteile der unterschiedlichen Gefügeanteile definiert. Letztere wurden auf Basis von CCT Diagrammen und einem KJMA Ansatz [5] ermittelt.

Vom Ende der Erstarrung bis zum Beginn des Aufheizens kann beobachtet werden, dass der Ferritanteil in der Nähe der Blockoberfläche zunimmt, wenn die Blocktemperatur abnimmt. Dann während der Wärmebehandlung und ausgehend von der Oberfläche wird der Ferrit sukzessiv durch Austenit ersetzt. Diese Phasenumwandlung wird vollständig in der Spannungssimulation berücksichtigt: Die von Mises-Spannungen, dargestellt in Abbildung 8, resultieren hauptsächlich aus dem thermischen Gradienten und dieser Phasenumwandlung.

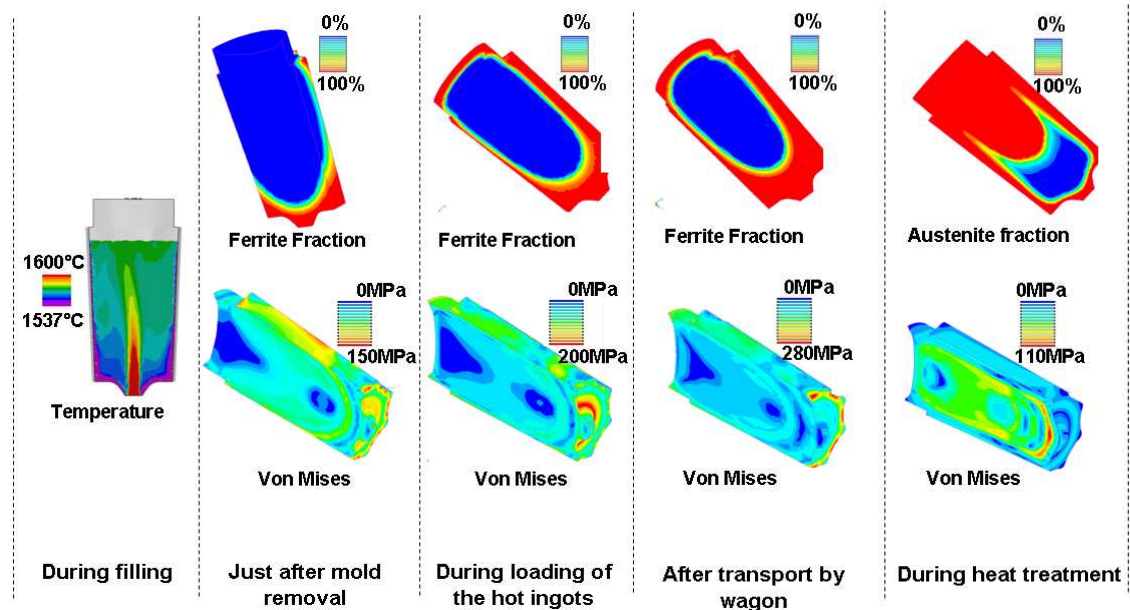


Abbildung 8. Ergebnisse der Simulation des Herstellungsprozesses aus Guss und Wärmebehandlung erzielt mit ProCAST und Sysweld.

Zusammenfassung

Eigenspannung und Verzug hängen in entscheidender Weise von den spezifischen thermischen, metallurgischen und mechanischen Bedingungen im Bauteil während des Herstellungsprozesses ab. Dieser Text hat aufgezeigt, wie ProCAST und Sysweld weiterentwickelt wurden, um all diese Aspekte in einer vollständig untereinander gekoppelten Weise abzubilden. Der neue Simulationsansatz ermöglicht im Besonderen:

- Die Simulation aller Schritte im Herstellungsprozess durch Übertragung der thermomechanischen Zustände von einem Zwischenschritt als Eingangszustand für den Nächsten.
- Die Durchführung einer Spannungssimulation unter Berücksichtigung des Einflusses von Mikrostruktur und Gussfehlern zur Definition von lokalen, zeitlich veränderlichen mechanischen Eigenschaften.

Diese neue Softwareumgebung ist einfach zu benutzen, da eine flexible Definition der Abhängigkeit von mechanischen Eigenschaften und Mikrostruktur zur Verfügung gestellt wird, die allgemein gebräuchliche klassische mechanischen Modelle verwendet (elastisch, elasto-plastisch, elasto-viscoplastisch).

References

1. M. Rappaz, Int Mat. Review, **34**, (1989), 93.
2. M. Avrami, J. Chem Phys., **8**, (1940), 212.
3. W.A. Johnson and R.F. Mehl, Trans AIME, **135**, (1939), 416.
4. J. B. Leblond and J Devaux, Acta Metall., **32**, (1984), 137.
5. J.E. Burke and D. Turnbull, Progr. Metal Phys., **3** (1952), 220.
6. H.V. Atkinson, Acta Metall., **36** (1988), 469.
7. W. W. Mullins, Acta Metall., **37** (1957), 2979.
8. D. Weygand, Y. Brechet, J. Lépinoux, Phil. Mag. B, **78** (1998), 329.
12. B. G. Thomas, I. V. Samarasekera, J. K. Brimacombe, Met. Trans., **19B** (1988), 289.