Neue Wege in der Simulation von Warmumformung und Wärmebehandlung aushärtbarer Kupferlegierungen

Kertsch, L.; Helm, D. (1)

Für die Simulation von Umform- und Wärmebehandlungsprozessen wurde ein neues Materialmodell entwickelt, welches das thermomechanische Verhalten des Werkstoffs mit seinem Gefüge und dessen Entwicklung verknüpft. Es beruht auf physikalischen Prinzipien, sodass die meisten Modellparameter physikalische Größen sind. Für die Anpassung an einen bestimmten Werkstoff ist somit nur ein überschaubarer Aufwand notwendig. Das Modell ist als eigenständiges Simulationswerkzeug numerisch implementiert. Verschiedene Anwendungsbeispiele verdeutlichen dessen praktischen Nutzen bei der Untersuchung, Auslegung und Optimierung von Fertigungsprozessen.

Die Simulation ist ein wichtiges Hilfsmittel bei der Entwicklung bedarfsgerechter Bauteileigenschaften und neuer Werkstoffe sowie der Optimierung von Fertigungsprozessen. Herkömmliche Materialmodelle, die dabei eingesetzt werden, bilden das komplexe Verhalten technischer Legierungen während der Prozesskette vom Ausgangsmaterial über Halbzeuge bis zum fertigen Bauteil jedoch häufig nur unzureichend ab bzw. basieren auf rein empirischen Erkenntnissen und erfordern eine Vielzahl an experimentellen Daten zur Modellanpassung. Grund dafür sind die vielfältigen und stark gekoppelten Vorgänge auf der Gefügeebene wie Erholung, Rekristallisation und Kornvergröberung sowie die Bildung und Auflösung von Ausscheidungen. Für das Verständnis und die Auslegung der Prozessführung bei der Warmumformung und Wärmebehandlung ist es daher notwendig, die prozessabhängige Entwicklung des Gefüges und dessen Einfluss auf das thermomechanische Materialverhalten zu berücksichtigen. Dafür wurde ein neuartiger Modellierungsansatz entwickelt, der mithilfe thermodynamischer Prinzipien die Kopplung zwischen dem thermomechanischen Werkstoffverhalten und der Gefügeentwicklung erfasst. Dies ermöglicht die physikalisch basierte Beschreibung und Vorhersage des Verhaltens von Kupferlegierungen bei der Kalt- und Warmumformung sowie der Wärmebehandlung. Mit diesem Ansatz kann eine ganze Prozesskette abgebildet werden, ohne dass zwischen den Teilschritten Daten von einem Modell in ein anderes übertragen werden müssen.

Effizientes Gefügemodell

Um das Gefüge detailliert in Modellen zu beschreiben, werden oft ortsaufgelöste Ansätze verwendet wie beispielsweise die Phasenfeldmethode oder Zelluläre Automaten. Dabei wird ein ausreichend großes repräsentatives Volumenelement aufgebaut, das die Kornmorphologie und Textur sowie bei mehrphasigen Werkstoffen die räumliche Anordnung der Phasen genau wiedergibt. Dem Vorteil einer wirklichkeitsgetreuen Abbildung der Realität steht bei derartigen Methoden allerdings der Nachteil des hohen numerischen Aufwands zur Lösung technisch relevanter Probleme entgegen. Dies motiviert die Verwendung räumlich nicht aufgelöster Modelle, die das Gefüge nur näherungsweise abbilden, aber aufgrund ihrer Effizienz auch für große Probleme geeignet sind. Bild 1 veranschaulicht das hier verwendete Gefügemodell: Die Variablen R_i (i=1, …, N) beschreiben die Kornradien einer Verteilung von N als kugelförmig angenommenen Körnern. Dabei werden deren räumliche Anordnung und Nachbarschaftsbeziehungen nicht berücksichtigt. Jedes Korn kann im Laufe seiner Lebenszeit eine plastische Vergleichsdehnung ε_i entwickeln und besitzt zudem eine innere Variable $\varepsilon_i^{\mathrm{d}}$, die mit plastischen Dissipationsvorgängen in Verbindung steht. Bei Legierungen, die Ausscheidungen anderer Phasen bilden können, wird zudem eine Verteilung von M Ausscheidungen mit den Teilchenradien r_j (j=1, …, M) berücksichtigt. Infolge thermomechanischer Belastungen, die durch die aufgebrachte Dehnung $\boldsymbol{\varepsilon}$ und Temperatur θ beschrieben werden, können die einzelnen Körner und Ausscheidungen wachsen, schrumpfen sowie sich auflösen, ihre Anzahl kann durch Rekristallisation und Ausscheidungsnukleation zunehmen und die inneren Variablen ε_i und $\varepsilon_i^{\mathrm{d}}$ entwickeln sich in Abhängigkeit der Lastgeschichte.

Thermodynamische Modellbildung

Eine wesentliche Herausforderung bei der Modellbildung lag darin, für die Vielzahl an Variablen geeignete Entwicklungsgleichungen zu formulieren, die einerseits in der Lage sind, das in Versuchen beobachtete Werkstoffverhalten präzise zu beschreiben, und andererseits den wesentlichen

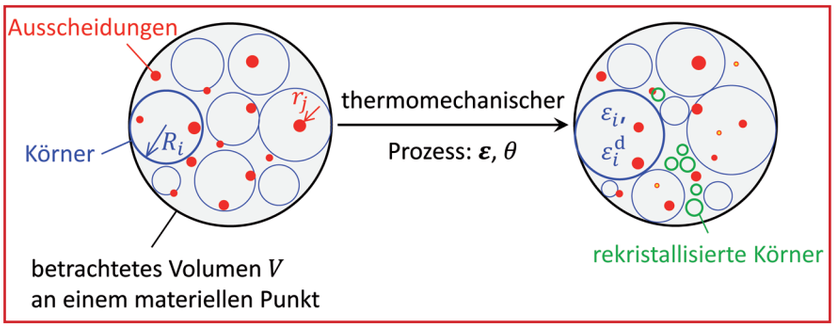

Bild 1: Veranschaulichung des Gefügemodells. Eine Struktur aus als kugelförmig angenommenen Körnern und Ausscheidungen entwickelt sich infolge der aufgebrachten Dehnung $\boldsymbol{\varepsilon}$ und Temperatur θ.

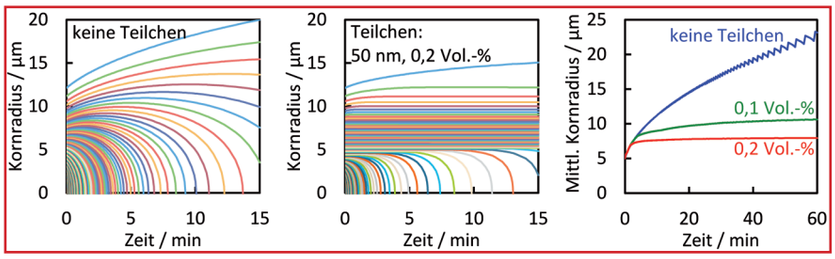

Bild 2: Simulation der Kornvergröberung in reinem Kupfer und in Kupferlegierungen mit Ausscheidungsteilchen einer zweiten Phase bei 600 °C

Grundsätzen der Physik gehorchen. Denn nur so ist sichergestellt, dass die auf vielfältige Weise miteinander gekoppelten Modellgleichungen zu jeder Zeit physikalisch sinnvolle Ergebnisse liefern. Dies konnte durch eine konsequente thermodynamische Beschreibung erreicht werden. Hierbei werden die physikalischen Erhaltungsgrößen wie Masse, Energie und Impuls bilanziert sowie der zweite Hauptsatz der Thermodynamik ausgewertet, der Aussagen darüber liefert, in welche Richtung sich das System in Abhängigkeit seines aktuellen Zustands entwickelt. Mithilfe der Methode der Lagrange-Multiplikatoren [Liu72] wurden aus diesen Bilanzgleichungen Bedingungen gewonnen, die die Wahl thermodynamisch konsistenter Modellgleichungen einschränken.

Als zentrale thermodynamische Größe zur Modellierung der Energiespeicherungsphänomene wurde die Funktion der freien Energie in der Form

$$\psi = \psi_{\mathrm{el}} + \psi_{\mathrm{pl}} + \psi_{\mathrm{KG}} + \psi_{\mathrm{GF}} + f_{\mathrm{P}}\psi_{\mathrm{P}} + (1 - f_{\mathrm{P}})\psi_{\mathrm{M}}$$

formuliert. Hierin hängen die elastische und plastische Energie ψ_{el} und ψ_{pl} von der Gesamtdehnung, der Temperatur und den Größen ε_i sowie $\varepsilon_i^{\mathrm{d}}$ ab, die Korngrenzenergie ψ_{KG} von den Korngrößen R_i und die Grenzflächenenergie ψ_{GF} von den Teilchengrößen r_j. Die letzten beiden Terme geben die chemische Energie ψ_{P} und ψ_{M} der Ausscheidungsteilchen und der Matrix an, die von der chemischen Zusammensetzung und der Temperatur abhängt, wobei f_{P} der Volumengehalt der ausgeschiedenen Partikel ist. Aus dem beschriebenen thermodynamischen Prinzip folgt nun direkt die Bestimmungsgleichung für den Spannungstensor und es lassen sich Entwicklungsgleichungen für die Größen R_i, $\varepsilon_i^{\mathrm{d}}$ und r_j sowie für den plastischen Verzerrungstensor ableiten. Besonders deutlich wird der Nutzen dieser Strategie bei der Berechnung der Temperaturentwicklung in Bauteilen unter thermomechanischen Lasten. Während bei vielen Simulationsmodellen der Anteil der in Wärme umgewandelten Verformungsenergie rein empirisch durch eine Konstante abgeschätzt wird, kann hier die Entwicklung der Temperatur unmittelbar aus der Bilanz der Gesamtenergie berechnet werden. Schließlich vervollständigt die Nukleationstheorie für die Ausscheidungsteilchenbildung sowie für die Rekristallisation das Werkstoffmodell.

Parameteranpassung

Die wesentlichen Gleichungen des Materialmodells sind in [Ker18] dargestellt. Details zur Berechnung der Ausscheidungsentwicklung finden sich in [Svo04]. Trotz der Komplexität des Modells erfordert die Parameterbestimmung nur einen begrenzten Aufwand. Tatsächlich sind die meisten Parameter physikalische Größen und daher gut bekannt. Zur Bestimmung der fehlenden Größen sind ausgewählte thermomechanische Versuche und Gefügeanalysen notwendig. Thermodynamische Datenbanken für die chemische Energie sind für die meisten technisch relevanten Legierungssysteme frei verfügbar oder kommerziell erhältlich. Zudem ist eine Vielzahl an thermodynamischen Daten unter dem Schlagwort CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams) [Spe08] in Fachzeitschriften publiziert. Für die Anwendung auf Cu-Ni-Si-Legierungen kommen die thermodynamischen Daten aus [Mie05] und [Din91] und die Diffusionsdaten aus [Li13] zum Einsatz.

Anwendungsbeispiele

Das Modell ist als eigenständiges Programm in Python implementiert und kann für die Untersuchung, Auslegung und Optimierung von Umform- und Wärmebehandlungsprozessen verwendet werden. Ein einfacher Anwendungsfall ist die Simulation der Kornvergröberung in Kupferlegierungen. In Bild 2 ist die Kornvergröberung in reinem Kupfer (links) und in einer Kupferlegierung mit Ausscheidungen (Mitte) gegenüber gestellt. Dabei sind jeweils die einzelnen Größen von anfangs 100 Körnern über der Zeit aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass durch die Teilchen insbesondere die Entwicklung der Körner mittlerer Größe stark verlangsamt wird. Im rechten Bild ist die Entwicklung der mittleren Korngröße bei verschiedenen Volumengehalten an Ausscheidungsteilchen dargestellt. Deutlich ist zu erkennen, dass die Kornvergröberung mit zunehmendem Teilchengehalt langsamer abläuft.

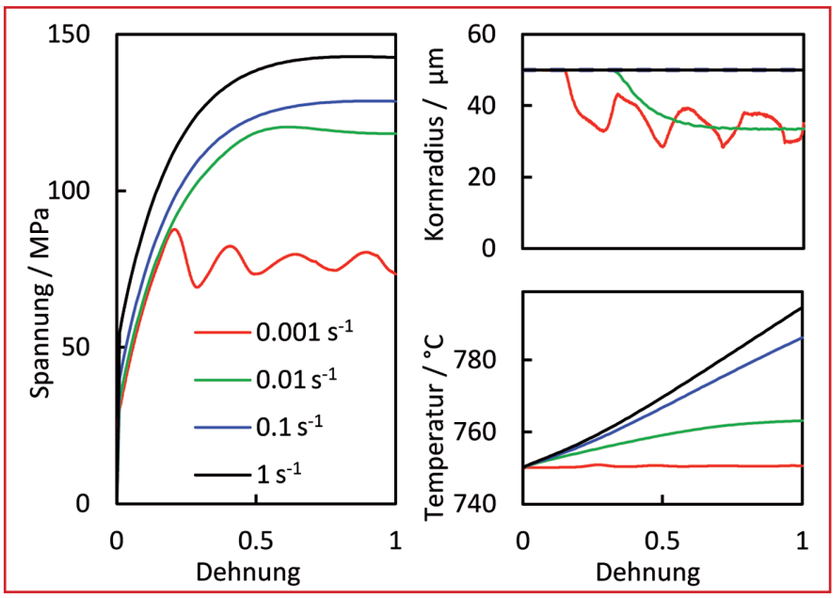

Bild 3: Berechnete Warmfließkurven bei verschiedenen Dehnraten sowie Entwicklung der Korngröße und der Temperatur während der Verformung

Im Zusammenhang mit Verformungsprozessen zeigt sich die Leistungsfähigkeit des Modells besonders. Allein durch Kenntnis der Verformungsgeschichte eines Bauteils, Halbzeugs oder einer Werkstoffprobe können die auftretenden Spannungen, die Gefügeveränderung und die Entwicklung der Temperatur berechnet werden. Bild 3 (links) zeigt die berechneten Fließkurven für Warmstauchversuche bei verschiedenen Dehnraten. Neben einer grundsätzlichen Dehnratenabhängigkeit ist das Vermögen des Werkstoffs zu dynamischer Rekristallisation zu erkennen. Dies geht auch deutlich aus der Entwicklung der mittleren Korngröße hervor, die rechts oben dargestellt ist. Bei einer Dehnrate von 0,001 s^{-1} ist der Versuch langsam genug, dass sich die Spannung und Korngröße infolge wiederkehrender Rekristallisationsvorgänge periodisch verändern. Schließlich sagt das Modell auch eine zunehmende Selbsterwärmung der Probe bei ansteigender Dehnrate voraus. Wird der Versuch schnell gefahren, kann die entstehende Wärme durch plastische Dissipation nicht vollständig abfließen, wodurch es zu einem Temperaturanstieg kommt.

Um auch die Anwendbarkeit des Simulationsmodells auf mehrstufige Fertigungsprozesse zu zeigen, ist in Bild 4 (oben) eine beispielhafte Prozesskette für die Blechfertigung aus einer Cu-Ni-Si-Legierung dargestellt. Darunter ist für diese Prozesskette die berechnete Entwicklung von Temperatur, Spannung und Gefügeeigenschaften über der Zeit aufgetragen. Während des Warmwalzens sind deutlich die periodische Kornfeinung und -vergröberung infolge dynamischer Rekristallisation zu erkennen. Während des Walzens erwärmt sich das Blech durch plastische Arbeit und die Spannung steigt durch die Kaltverfestigung stark an. Im letzten Schritt, während des Auslagerns, bilden sich Ausscheidungsteilchen einer Ni-Si-Phase, die das Gefüge des fertigen Halbzeugs stabilisieren und dessen Streckgrenze erhöhen.

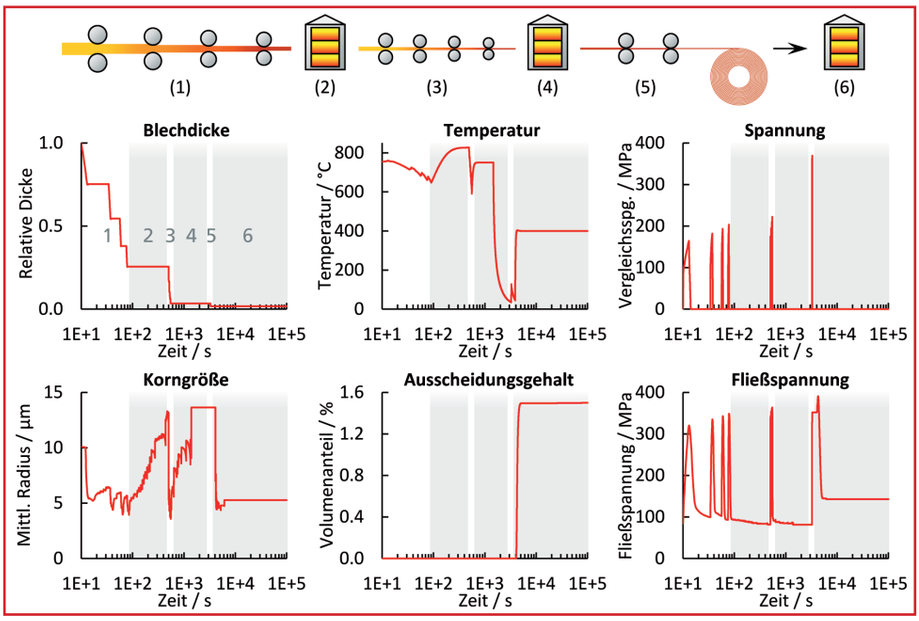

Bild 4: Beispielhafte Prozesskette für die Blechfertigung aus einer Cu-Ni-Si-Legierung und Simulation der Entwicklung von Temperatur, Spannung und Gefüge. (1) Warmwalzen, (2) Zwischenglühen, (3) Warmwalzen, (4) Lösungsglühen, (5) Kaltwalzen, (6) Auslagern

Zusammenfassung

Ein neues physikalisch basiertes Modell ermöglicht die Simulation des Werkstoffverhaltens bei Umform- und Wärmebehandlungsprozessen durch die konsistente Verknüpfung der thermomechanischen Eigenschaften mit dem Gefüge und dessen Entwicklung. Die Anwendbarkeit des in Python implementierten Simulationswerkzeugs und dessen praktischer Nutzen bei der Untersuchung, Auslegung und Optimierung von Fertigungsprozessen werden in verschiedenen Anwendungsbeispielen deutlich. Für die Anpassung des Modells an einen bestimmten Werkstoff ist nur eine moderate Anzahl an Versuchen notwendig.

Danksagung

Die Autoren danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Förderung im Rahmen des Schwerpunktprogramms 1713 „Strong coupling of thermo-chemical and thermo-mechanical states in applied materials“ unter den Geschäftszeichen HE 3096/7-1 und HE 3096/7-2.

Literatur

[Din91] A. T. Dinsdale, Calphad 15, 1991, 317–425, doi:10.1016/0364-5916(91)90030-N
[Ker18] L. Kertsch, D. Helm: International Journal of Solids and Structures 152-153, 2018, 185-195
[Li13] J. Li et al.: Journal of Phase Equilibria and Diffusion 34, 2013, 484–492, doi:10.1007/s11669-013-0264-8
[Liu72] I-S. Liu: Archive for Rational Mechanics and Analysis 46, 1972, 131–148, doi:10.1007/BF00250688
[Mie05] J. Miettinen: Calphad 29, 2005, 212–221, doi:10.1016/j.calphad.2005.08.001
[Spe08] P. J. Spencer: Calphad - Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry 32, 2008, 1–8, doi:10.1016/j.calphad.2007.10.001
[Svo04] J. Svoboda et al.: Materials Science and Engineering A 385, 2004, 166–174, doi:10.1016/j.msea.2004.06.018

(1) Lukas Kertsch, Dirk Helm, Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM, Freiburg

Die Trinkwasserverordnung – Stand 2018

Seit 9. Januar 2018 ist die lange erwartete 4. Änderungsverordnung zur Trinkwasserverordnung (TrinkwV) in Kraft und bringt eine Reihe von wichtigen Änderungen und Anpassungen im Gesetzestext mit sich. Dieses Buch hilft dabei, die komplexen Sachverhalte sowie teilweise verschachtelten Änderungen transparent und verständlich darzustellen. Es unterstützt bei der rechtssicheren Integration von Bestimmungen und Regeln. Dazu sind auch die Begründungen von Gesetzgeber und Bundesrat enthalten.

U. Borchers, Beuth 3. Aufl. 2018, 330 S., br., 52,00 Euro, ISBN 978-3-410-27977-8