

## Kopplung einer makroskopischen Erstarrungssimulation mit einem Modell zur Vorhersage der Mikrostruktur bei on-line Berechnung von Phasendiagramminformationen

Thorsten Hofmeister, Klaus Greven, Andreas Ludwig, Peter R. Sahn  
Giesserei-Institut, RWTH Aachen

### 1. Einleitung

Die numerische Simulation von Gießprozessen findet heutzutage neben der makroskopischen auch auf der mikroskopischen Ebene statt. Derzeit beschränkt sich die industrielle Anwendung meist auf rein makroskopische Simulationen. Diese erlaubt die Vorhersage der Formfüllung, des Erstarrungsvorganges und des Spannungsaufbaus. Mit Hilfe von Kriteriumsfunctonen kann bei der makroskopischen Simulation eine grobe Einschätzung der Mikrostruktur durchgeführt werden (1). Auf der mikroskopischen Ebene wurden einige numerische Modelle zur Vorhersage der Entwicklung der Mikrostruktur und der Bildung von Mikrosegierungen entwickelt. Einen Überblick über die analytischen, empirischen und numerischen Methoden liefert (2, 3). Die am weitesten fortgeschrittenen Modelle ziehen dabei verschiedene Effekte wie Festkörperdiffusion, Dendritenarmvergrößerung und Grenzflächenunterkühlungen mit in Betracht. Für die Simulation von mehrkomponentigen Legierungen ist, wie von Boettinger et. al. (4) dargestellt, die on-line Verwendung von Unterprogrammen zur Berechnung thermodynamischer Gleichgewichte ratsam. Ihre Einbindung steigert die Genauigkeit der vorhergesagten Phasen und Phasenanteile. Um die wechselseitigen Einflüsse zwischen Mikrostrukturentwicklung und Temperaturänderung berücksichtigen zu können, sollten Mikro- und Makro-Modelle idealerweise eng gekoppelt sein. Diese Arbeit stellt ein solches gekoppeltes Modell vor.

### 2. Simulationsverfahren

Die beschriebenen Simulationen wurden mit Hilfe des hauseigenen 3D-FEM-Programmes CASTS durchgeführt. Eine genaue Beschreibung des Programmes und Anwendungsbeispiele sind in (6) nachzulesen.

#### 2.1 Mikrostrukturmodell

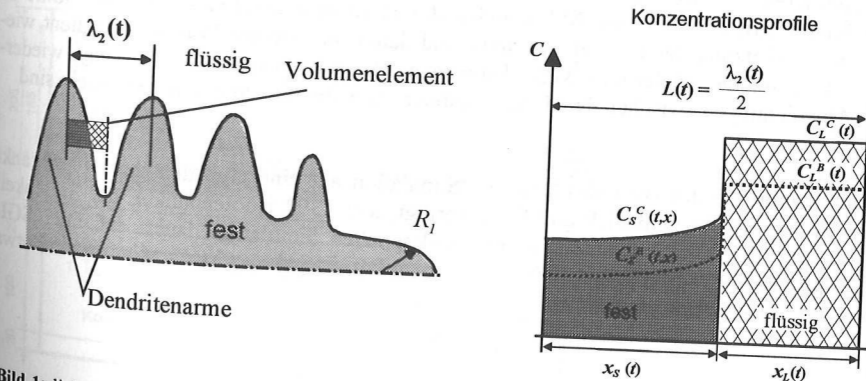


Bild 1: links: Skizze des Plattenmodells, rechts: qualitative Konzentrationsprofile zweier Legierungskomponenten B und C

Das Mikrostrukturmodell erlaubt eine Vorhersage des Dendritenabstandes  $\lambda_d$ , des Dendritenarmabstandes  $\lambda_a$  und der Phasenanteile. Es basiert auf einem Modell von Roósz (7), in welchem die komplexe Dendritenstruktur durch ein Plattenmodell angenähert wird, **Bild 1**. Trotz dieser einfachen Näherung wird von einer guten Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment berichtet (7, 8, 9). Die Berechnung der Dendritenarmvergrößerung erfolgte auf der Basis einer empirischen Gleichung für die zeitliche Entwicklung von  $\lambda_d$  (7). Dabei wird in der flüssigen Phase ein vollständiger Konzentrationsausgleich und in dem betrachteten Volumenelement eine einheitliche Temperatur  $T$  vorausgesetzt. Im Festkörper wird der Konzentrationsverlauf beider Legierungselemente jeweils durch Lösung des 2. Fick'schen Gesetzes berechnet.

Thermodynamische Berechnungen wurden direkt in der numerischen Simulation vorgenommen. Dabei wurde das kommerzielle Programm ChemApp<sup>®</sup> zur Berechnung der thermodynamischen Gleichgewichtszustände benutzt. Dieses Programm ermöglicht über ein Interface eine on-line Kopplung zu dem FEM-Programm CASTS. Nach der entsprechenden Initialisierung liefert ChemApp<sup>®</sup> hinreichend genau und schnell alle thermodynamischen Daten, die ein Phasendiagramm beinhaltet.

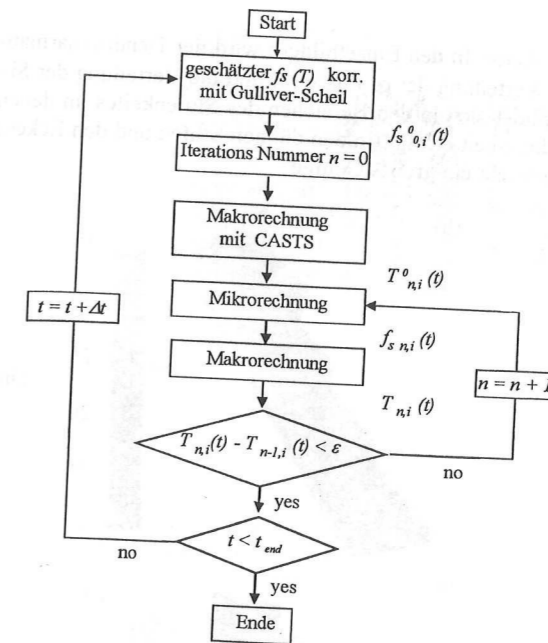
Das Plattenmodell ist nur im Bereich der  $\alpha$ -Erstarrung, also bis zum Erreichen der eutektischen Temperatur  $T_e$  zulässig. Im nachfolgenden Bereich, der Erstarrung längs der eutektischen Rinne, wird vorausgesetzt, daß die sekundären  $\alpha$ - und  $\beta$ -Phasen mit einem dem Gulliver-Scheil-Modell entsprechenden Verhalten erstarren. Die Unterkühlung  $\Delta T^*$  der Dendritenspitze, die sich aus krümmungsbedingter und solutaler Unterkühlung zusammensetzt, wird auf der Basis des KGT-Modells berechnet und im Mikrostrukturmodell nach der Methode von Voller und Sundarraj (11) berücksichtigt. Die Unterkühlung des binären und ternären Eutektikums wurde vernachlässigt. Der Primärabstand wird unter Verwendung der Näherungsgleichung aus (12) berechnet. Eine genaue Beschreibung des numerischen Prozesses ist in (13) zu finden.

### 2.2 Kopplungsmethode

Das Mikro- und das Makro-Programm sind an jedem FE-Punkt über die Bestimmung der freigegebenen latenten Wärme verbunden. Das Flußdiagramm dieser Kopplung wird in **Bild 2** dargestellt. Sie ist mit der Methode von Sasikumar (14) vergleichbar. Zu Beginn jedes Zeitschrittes  $t$  startet die Iterationsschleife mit einem geschätzten Anteil fester Phase  $f_s$  an allen Knotenpunkten  $i$ . Dabei wird die Freigabe der latenten Wärme durch die Makrorechnung festgelegt. Mit dieser geschätzten Temperaturverteilung  $T_{n,i}^0(t)$  simuliert das Mikromodell die Mikrostrukturentwicklung. Dies führt zu einer besseren Abschätzung des Festphasenanteils, und damit der latenten Wärme, und dient wiederum als Eingabe für die wiederholte Makroberechnung. Dieses Vorgehen wird solange wiederholt, bis die Abweichungen zwischen den Temperaturen zweier Iterationen hinreichend klein sind.

### 2.3 Simulation

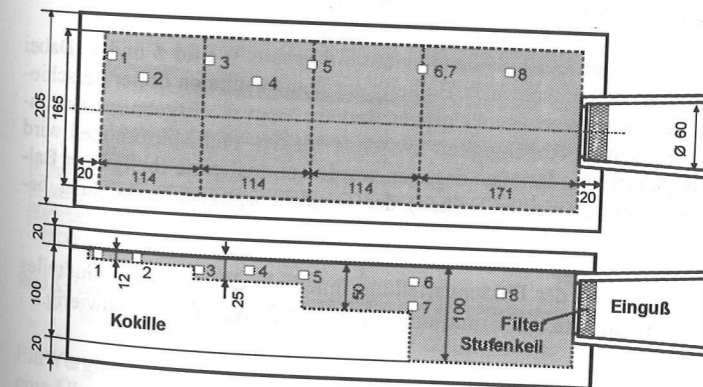
Aufgrund der Symmetrie des Bauteiles kann die Simulation auf eine Gußstückhälfte beschränkt werden. Das FEM-Netz für Gußstück und Form verfügt über 1392 Knotenpunkte, der Stufenkeil allein über 400 Punkte. Die Berechnung einer ungekoppelten Simulation dauert auf einer SGI-Workstation mit R10000 Prozessor ungefähr 24 Stunden. Für die gekoppelte Simulation muß etwa die doppelte Zeit veranschlagt werden.



**Bild 2:** Flußdiagramm zur Kopplung von Makro- und Mikromodell

### 3. Experimentelle Arbeiten

Um die Übereinstimmung der berechneten Werte mit experimentell ermittelten Mikrostrukturparametern überprüfen zu können, wurden Gußteile in Form von Stufenkeilen abgegossen. Der Abguß erfolgte in eine Kokille. **Bild 3** zeigt die Maße des Gießsystems. Durch diesen Versuchsaufbau entsteht, jeweils in Abhängigkeit von den Abkühlbedingungen, sowohl eine feine als auch eine grobe Mikrostruktur. Zur Temperaturüberwachung wurden an 10 Stellen Thermolemente angebracht. Als Gußlegierung wurde AlCu5Si5 eingesetzt, da für diese Legierung erprobte thermodynamische Daten vorlagen. Die Gießtemperatur betrug 700°C.



**Bild 3:** Außenmaße des Stufenkeils

4. Ergebnisse und Diskussion

Bild 4 zeigt die Verteilung der berechneten Werte. In den Einzelbildern wird der Dendritenarmabstand  $\lambda_a$  (a), der Dendritenabstand  $\lambda_d$  (b), die Verteilung der  $\alpha$ -Phase (c) und die Verteilung der Si-reichen Phase (d) dargestellt. Wie erwartet bildet sich in den Bereichen des Stufenkeiles, in denen die Erstarrung mit hoher Wachstumsgeschwindigkeit erfolgt (in den dünnen Stufen und den Ecken) ein feines Gefüge aus. In den hohen Stufen entsteht ein grobes Gefüge.

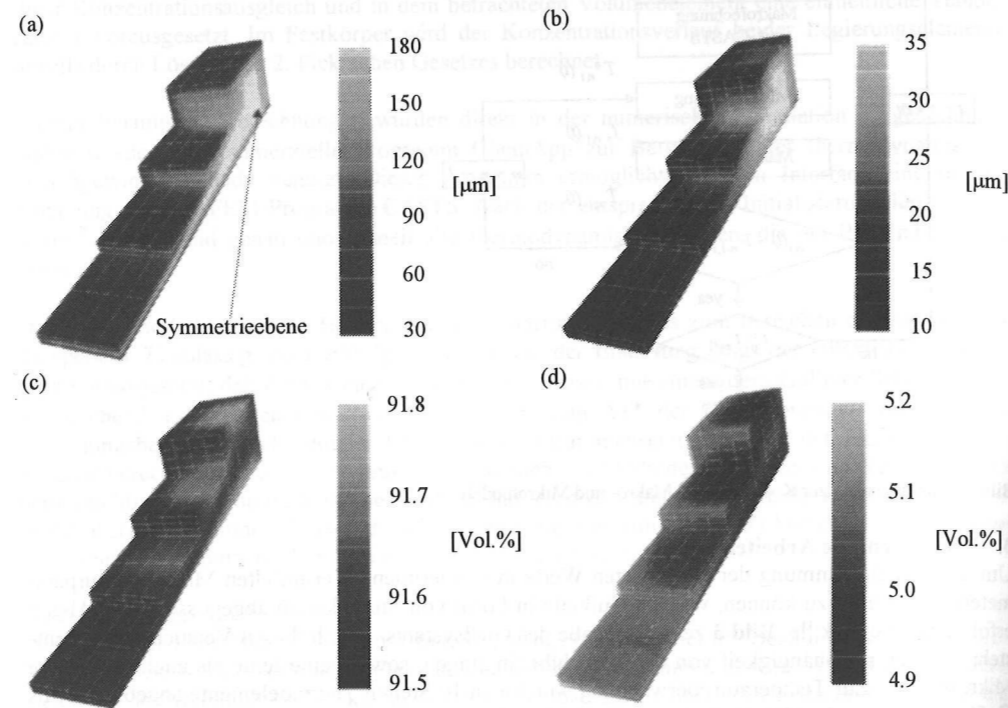


Bild 4: Berechnete Verteilung von a) Dendritenabstand und b) Dendritenarmabstand und die Phasenanteile der c) Al-reichen  $\alpha$ -Phase und d) Si-reichen  $\beta$ -Phase.

Die Ergebnisse werden jeweils für  $\lambda_a$  und  $\lambda_d$  als Säulendiagramm dargestellt, Bild 5 und 6. Dabei werden die experimentell ermittelten Werte (schwarze Balken) mit den Resultaten dreier verschiedener Simulationen verglichen. Der erste Wert (dunkelgrauer Balken) zeigt die Ergebnisse der ungekoppelten Methode. Jede wechselseitige Abhängigkeit zwischen Makro- und Mikromodell wird vernachlässigt. Die beiden gekoppelten Simulationen dagegen wurden einmal ohne (hellgrauer Balken) und einmal unter Berücksichtigung (weißer Balken) der Dendritenspitzenunterkühlung berechnet.

Aufgrund der sehr geringen Unterschiede der Phasenverteilung innerhalb des gesamten Gußteiles erwies sich die Auswertung der Experimente, zur Ermittlung der  $\alpha$ - und  $\beta$ -Anteile, als schwierig.

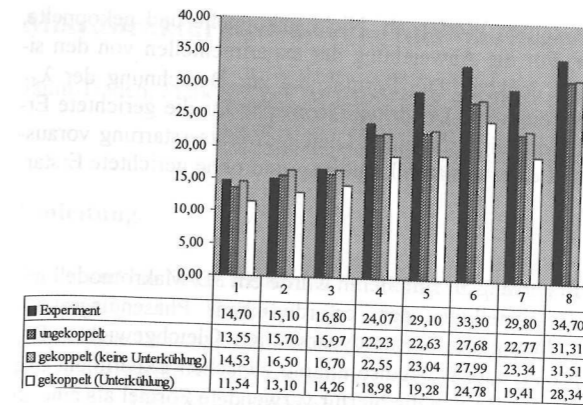


Bild 5: Vergleich der experimentell ermittelten und der berechneten Werte des Dendritenarmabstandes  $\lambda_a$ . Alle Werte sind in  $\mu\text{m}$  angegeben.

Generell besteht für die experimentell ermittelten und die simulierten  $\lambda_a$ -Werte eine gute Übereinstimmung, Bild 5. Vor allem die Proben aus den Bereichen mit hoher Erstarrungsgeschwindigkeit zeigen eine sehr gute Deckung mit den simulierten Werten. Als Ursachen für die Abweichungen können Unsicherheiten bei der Auswertung der Schlißbilder und unzureichende Materialdaten bei der Simulation angesehen werden. Das beste Ergebnis wird mit der, ohne Berücksichtigung der Unterkühlung, gekoppelten Simulation erzielt. Die Unterschiede zwischen der ohne Unterkühlung gekoppelten Simulation und der ungekoppelten Simulation sind gering. Ein Vergleich der zwei gekoppelten Simulationen zeigt, daß die unter Berücksichtigung der Dendritenspitzen-Unterkühlung berechneten Werte eine schlechtere Annäherung an die experimentellen Beobachtungen darstellen. Die Fehlerursache liegt in dem angewendeten Gesetz. Da es nur für verdünnte binäre Legierungen gilt, führt die benutzte  $V$ - $AT$ -Beziehung zu einer Überschätzung der Unterkühlung.

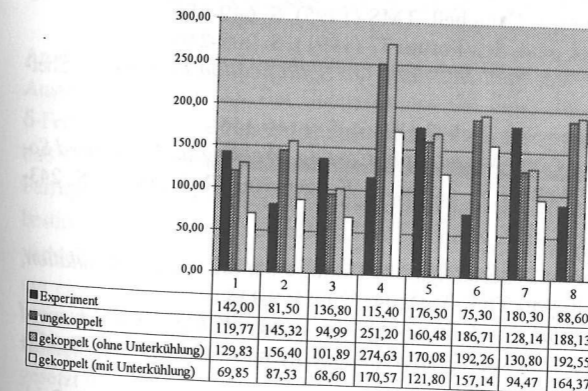


Bild 6: Vergleich der experimentell ermittelten und der berechneten Werte des Dendritenabstandes  $\lambda_d$ . Die Werte gelten in  $\mu\text{m}$ .

Ein Vergleich der  $\lambda_d$ -Werte zeigt leider keine eindeutige Tendenz, Bild 6. Es besteht zwar teilweise eine Übereinstimmung der Werte, doch liegt die Simulation meist stark über den experimentellen Beobachtungen. Die unter Berücksichtigung der Unterkühlung berechneten Werte weichen auch bei

$\lambda_d$  stark von den ohne Berücksichtigung erlangten Werten ab. Nicht gekoppelte und gekoppelte, ohne Unterkühlung, liegen nah beieinander. Für die Abweichung der experimentellen von den simulierten  $\lambda_d$ -Werten sind folgende Gründe denkbar: Die Formel, die zur Berechnung der  $\lambda_d$ -Werte dient, berücksichtigt nur eine stark vereinfachte Dendriten-Geometrie für die gerichtete Erstarrung binärer Legierungen. Des weiteren wird eine stationäre Gleichgewichtserstarrung vorausgesetzt. Dagegen wurden die Experimente mit einer ternären Legierung und ohne gerichtete Erstarrung durchgeführt.

### 5. Zusammenfassung

Um die Bildung der Mikrostruktur bei der Erstarrung zu simulieren wurde ein 3D-Makromodell mit einem Mikromodell gekoppelt. Die Bereitstellung der erforderlichen Phasendiagramm-Informationen erfolgte durch on-line Berechnung der thermodynamischen Gleichgewichte. Der Ergebnisvergleich zeigt bei den  $\lambda_a$ -Werten eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Für die Berechnung der  $\lambda_d$ -Werte erwies sich die hierfür verwendete Formel als eine zu grobe Näherung für die komplexen Vorgänge in der Realität.

### Danksagung

Die Autoren danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Unterstützung dieser Arbeit im Rahmen des SFB 370 „Integrative Werkstoffmodellierung“ und dem Graduiertenkolleg „Schmelze, Erstarrung, Grenzflächen“.

### 6. Literatur

- (1) P.R. Sahn, P.N. Hansen, *Numerical Simulation and Modeling of Casting Processes for Foundry and Cast-House* (Zürich, Int. Committee of Technical Foundry Association CIATF 1984)
- (2) M. Rappaz, *Int. Mater. Rev.* 34 (1989), S. 93-123
- (3) T. Kraft, H.E. Exner, *Z. Metallkd.* 87 Nr. 8 (1996), S. 598-611 und S. 652-660
- (4) W.J. Boettinger et al., in *Proc. of Int. Conf. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VII*, ed. M. Cross, J. Campbell, TMS (1995), S. 649-656
- (5) H.E. Exner, M. Rettenmayr, A. Roosz, *Mat. Sci. Forum* 77 (1991), S. 205-210
- (6) M. Fackeldey et al., in *Proc. of 4th Decennial Int. Conf. On Solidification Processing*, Sheffield (1997), S. 41-44
- (7) A. Roosz, E. Halder, H.E. Exner, *Mater. Sci. Tech.* 2 (1986), S. 1149-1155
- (8) A. Roosz, H.E. Exner, in *Proc. of Int. Conf. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI*, ed. T.S. Piwonka, V. Voller, L. Katgerman, TMS (1993), S. 243-250
- (9) T. Kraft, *Int. J. Cast Metals*, 9 (1996), S. 51-61
- (10) Eriksson G., Spencer P.J., Sippola H, in *Proceedings 2nd Colloquium on Process Simulation*, Helsinki University of Technology, Report TKK-V-B104, (1995), S.113
- (11) V.R. Voller, S. Sundarraj in *Proc. of Int. Conf. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI*, ed. T.S. Piwonka, V. Voller, L. Katgerman, TMS (1993), S. 251-258
- (12) W. Kurz, D.J. Fisher, *Fundamental of Solidification*, 3<sup>th</sup> edition (Schweiz, Trans Tech Publ. 1992)
- (13) K. Greven, M. Fackeldey, A. Ludwig, T. Kraft, M. Rettenmayr, P. R. Sahn, in *Proc. of Int. Conf. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VIII*, ed. B.G. Thomas, C. Beckermann, TMS (1998), S. 187-194
- (14) R. Sasikumar, H.E Exner, *Modeling Simul. Mater. Sci. Eng* 1 (1992), S. 19-27