

Kombinierter Einsatz von Modellierung und Experiment

Effizientere Werkstoffentwicklung durch innovative Gefügesimulation

Vor dem Hintergrund steigender Anforderungen an Produkteigenschaften und Prozesseffizienz ist ein umfassendes Verständnis des Zusammenhangs zwischen Werkstoffeigenschaften und Mikrostruktur unerlässlich. Die Phasenumwandlungen stellen einen entscheidenden Schritt der Mikrostrukturentwicklung dar und haben einen maßgeblichen Einfluss auf die Produkteigenschaften. Wir setzen daher verschiedene Modellierungswerkzeuge ein, die eine Untersuchung des Einflusses der Prozessparameter und der Stahlzusammensetzung auf das Gefüge ermöglichen. Im Auftrag unserer Kunden nutzen wir diese Werkzeuge, um diese Einflüsse unter Berücksichtigung der realen Produktionsprozesse zu untersuchen. Dabei werden grundsätzlich Simulationen und gezielte Versuche kombiniert. Die Ergebnisse dienen sowohl als Eingangsparemeter als auch zur Validierung der Simulation. Die Modellierung ermöglicht eine gezielte Reduzierung der erforderlichen Experimente durch die Auswahl geeigneter Parametervariationen.

Die eingesetzten Simulationswerkzeuge lassen sich in unterschiedliche Gruppen einteilen.

Zur ersten Gruppe gehören die „Gibbs-Energie-Minimizer“, die basierend auf dem CALPHAD-Ansatz (*CAL*culat*ion of PH*ase *D*iagrams) zum Beispiel eine Vorhersage zur Phasenstabilität unter thermodynamischen Gleichgewichtsbedingungen ermöglichen. Solche Ansätze wurden erfolgreich eingesetzt, um Erstarrungsvorgänge unter betrieblichen Bedingungen vorherzusagen: siehe „A Scheil-Gulliver model dedicated to the solidification of steel“ (doi.org/10.1016/j.calphad.2015.01.002) und Abbildung 1. Die Genauigkeit dieser Vorhersage erlaubt eine optimierte Prozessführung, wodurch bessere Produkteigenschaften erreicht werden und auch bereits bestehende Anlagen deutlich effizienter getrieben werden. Diese haben sehr positive Auswirkungen auf die Ökobilanz.

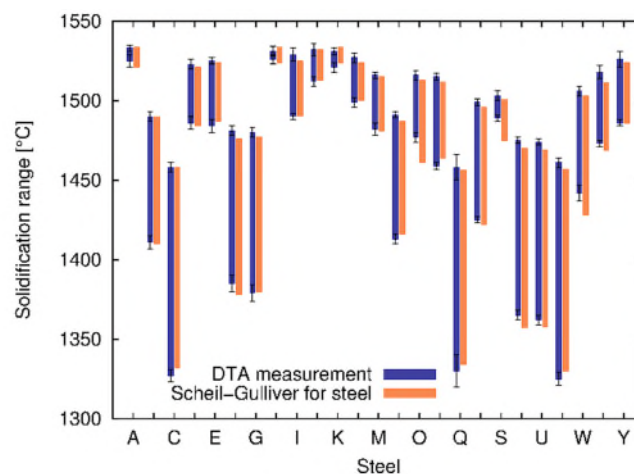


Abbildung 1: Gegenüberstellung von Erstarrungsintervalle von technischen Stählen - gemessen und berechnet mit dem in dieser Veröffentlichung beschriebenen Modell

Um Gefügevorgänge zu beschreiben, für die Diffusionskinetik entscheidend ist, kommen zum u. a. Ansätze zum Tragen, die auf die Phasen-Feld-Methode basieren. Dabei werden häufig experimentelle Elementverteilungen eingelesen; wie zum Beispiel für die Modellierung der Bainitbildung bei der Herstellung von längsgeschweißten Rohren: „Phase Field Modeling of the Phase Transformation in the Coarse-Grained Heat-Affected Zone of Large Diameter Linepipes“ (Schaffnit, P.; Stallybrass, C.; Schaar, H.; Steinbach, I.; Schröder, J.; 11th International Seminar on Numerical Analysis of Weldability, Seggau, Österreich, 29.09.2015) und Abbildung 2. Dieser Ansatz ermöglicht es bspw. ein umfangreiches „Screening“ durchzuführen, um die Zusammensetzung und die Prozessführung gemeinsam zu optimieren.

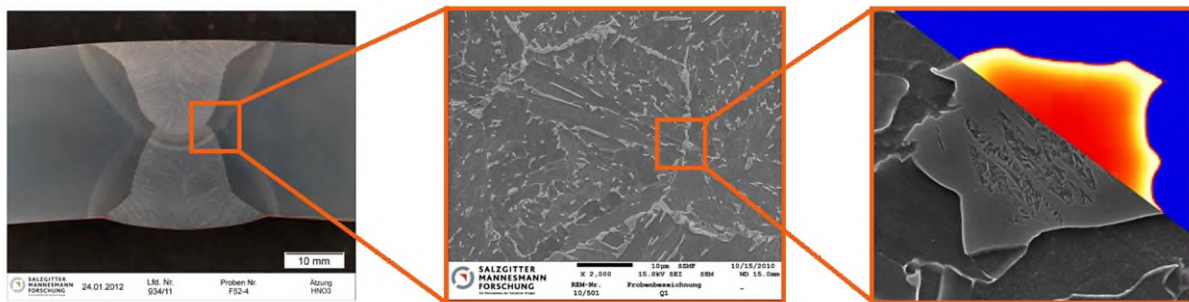


Abbildung 2: von links nach rechts: licht-optische Metallographie-Aufnahme einer UP-Schweißnaht, mittels Rasterelektronmikroskopie (REM) aufgenommene Gefügebild und „Digital-Twin“ einer Martensite-Austenit-Insel: unten links REM-Aufnahme und oben links simulierte Kohlenstoffverteilung.

Weiterhin werden noch ausführlichere Ketten von Modellierungsmethoden eingesetzt, die noch unter den Begriff „Integrated Computational Materials Engineering“ (ICME) fallen. Modellierungswerkzeuge aus den Anwendungsbereichen Metallurgie, Umformung, Thermodynamik, Gefügesimulation sowie Bauteileigenschaften werden miteinander verknüpft. Dadurch wird zum Beispiel eine numerische Bewertung über die gesamte Prozesskette der Großrohrherstellung von der Erstarrung bis zum fertigen Rohr ermöglicht. Hier werden konkrete Vorschläge für eine Optimierung der Walzpläne bewertet, zum Beispiel hinsichtlich verbesserter Festigkeit und Zähigkeit bestehender und neuer Güten insbesondere in der Wandmitte, die durch Austenitkornstruktur optimiert werden.

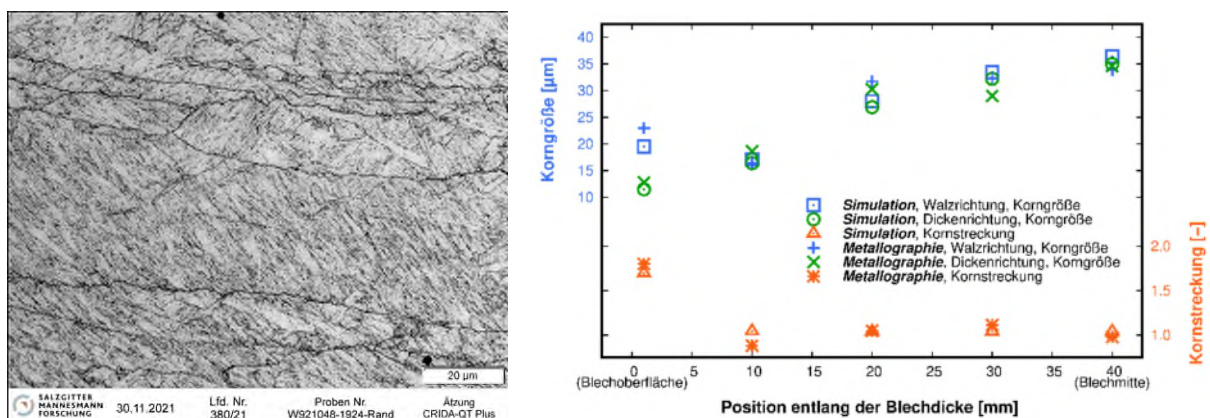


Abbildung 3: Links: Metallographische Untersuchung am Längsschliff aus 80 mm Blech „89“ für die Blechposition „Rand“; es sind deutliche ehemalige Austenitkorn Grenzen sichtbar. Rechts: Vergleich der Ergebnisse von der Metallographie und Simulationskette für die Korngröße in Walz- und Dickenrichtung sowie die Kornstreckung.