

Mikrostruktursimulation in der Werkstofftechnik

Britta Nestler, Michael Selzer, Marcus Jainta

Die Simulationssoftware Pace3D zur computergestützten Materialentwicklung

Während der Herstellung und Fertigung von Bauteilen hat bei fast allen Materialien die Ausbildung der Mikrostruktur einen entscheidenden Einfluss auf die resultierenden mechanischen Eigenschaften. Abhängig von den Prozessbedingungen und Materialkenngrößen treten verschiedene Phasenumwandlungen und Wachstumsmorphologien auf. Die charakteristischen Gefügekenngößen der entstehenden Mikrostruktur bestimmen maßgeblich die Qualität des Werkstoffs z.B. hinsichtlich Dauerfestigkeit, Langlebigkeit und Belastbarkeit.

Moderne Simulationstechniken [1-4] stellen eine zeit- und ressourcensparende Technologie zur Entwicklung von Werkstoffen, zur systematischen Untersuchung von Gefüge-Eigenschafts-Korrelationen und zur Prüfung von Bauteilen dar. Simulationen ermöglichen den in-situ Einblick nicht nur in das Endgefüge,

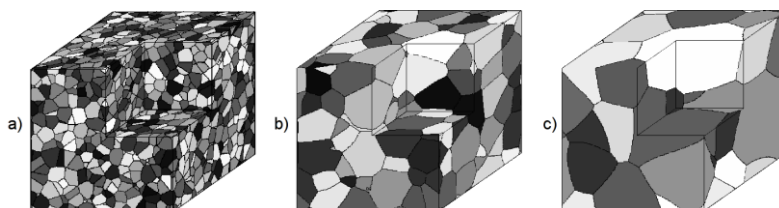


Abbildung 1: Drei Zeitschritte einer Simulation zur Kornvergrößerung eines polykristallinen Werkstoffs.

sondern auch in den dreidimensionalen Strukturbildungsprozess. Als ein Beispiel ist in vielen Herstellungsprozessen die Kornstruktur und die Korngrößenverteilung ein entscheidendes Kriterium für die Härte und Bruchfestigkeit des Materials. Abbildung 1 zeigt das Ergebnis einer Mikrostruktursimulation zur Kornreifung in einem polykristallinen Werkstoff. Eine detaillierte Bestimmung der Auswirkung auf einer externen Beanspruchung wie z.B. thermische, magnetfeldinduzierte und mechanische Belastung auf die Werkstoffeigenschaft leisten neue Softwarepakete zur Mikrostruktursimulation. Durch Berechnungen lässt sich gezielt die Bildung von Rissen unter kontinuierlicher oder zyklischer Belastung durch z.B. eine, von außen angelegte Kraft untersuchen. Bei der Simulation in Abbildung 2 wurde die Probe unter eine konstante Zugspannung in vertikaler Richtung gesetzt. Es bildet sich ein Riss aus, der bevorzugt entlang der Korngrenzen verläuft. Das Versagen von Materialien lässt sich durch Festigkeitsanalysen untersuchen. Hierbei werden Versuche mit unterschiedlichen Nennspannungen und Belastungsdauern durchgeführt. Bei den Gefügesimulationen in Abbildung 3 wurde der Zeitpunkt des Versagens für einen Werkstoff mit eingeschlossenen Partikelverteilungen unter zyklischer Belastung bestimmt. Als Ergebnis ergibt sich die abgebildete Wöhlerkurve. Durch eine gezielte Prozessführung lässt sich die Gefügeentstehung kontrolliert beeinflussen und Material mit spezifischen Eigenschaften computergestützt entwickeln. Die Berechnungen ersetzen zu einem hohen Maß die experimentelle, Gefügecharakterisierung, die oftmals eine Zerstörung der Bauteile erforderlich macht. Der Werkstoff, das Bauteil und der Prozessablauf der Zukunft lassen sich durch Verfahren der Werkstoffsimulation effizient am Computer entwerfen, so dass Schwachstellen bereits im Designstadium verhindert werden. Pace3D ist ein umfangreiches Softwarepaket für großskalige parallele 3D Simulationen auf Hochleistungsrechnern, für die Datenanalyse und qualitativ hochwertige Visualisierung der Mikrostrukturausbildungsprozesse in metallischen

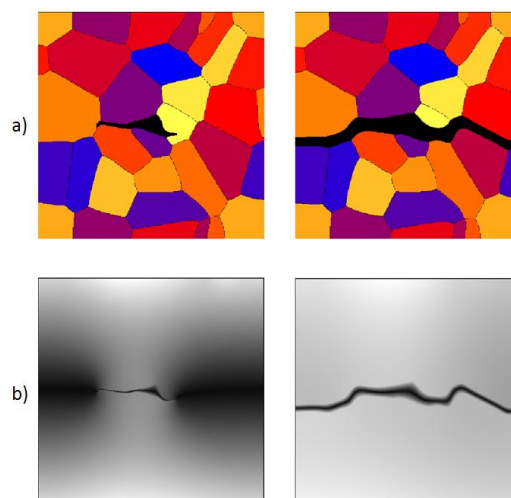


Abbildung 2: Rissbildung in einer Kornstruktur unter dem Einfluss einer Zugspannung, die vertikal am unteren und oberen Gebietsrand angelegt ist: a) Darstellung der zeitlichen Entwicklung des Risses in der Kornstruktur (schwarzer Farbbereich), b) Ausbreitung des Spannungsfeldes im Gefüge.

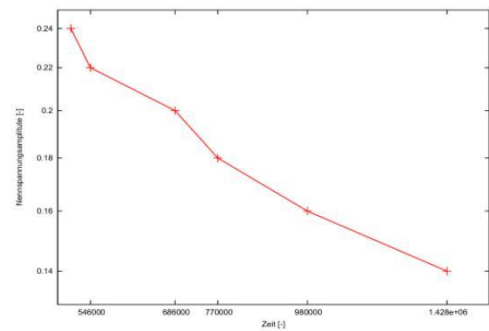
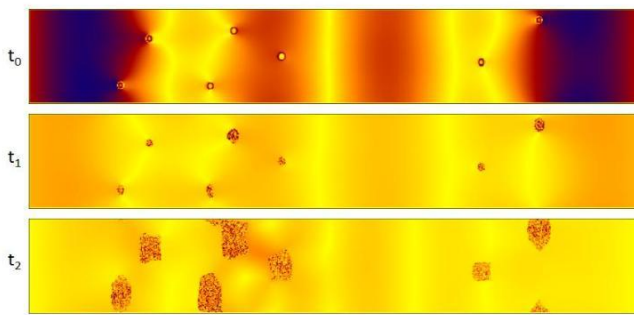


Abbildung 3: Zugversuch eines homogenen Materials mit einer Verteilung von Partikeln: Am linken und rechten Gebietsrand wurde eine zyklische Belastung angelegt. Für verschiedene Nennspannungsamplituden wurde der Zeitpunkt des Versagens ausgewertet und in dem Diagramm als Wohlerkurve festgehalten.

Legierungen und anderen Materialien wie Keramiken, Polymeren, biologischen oder geologischen Systemen. Bei der Entwicklung von Beschichtungen, Lacken, keramische Oberflächen etc. spielt das Benetzungsverhalten von Flüssigkeiten eine wichtige Rolle. Abbildung 4 zeigt die Relaxation zweier verschiedener Flüssigkeitstropfen auf einer Substratoberfläche in eine Gleichgewichtsform. Aufgrund unterschiedlichen Benetzungseigenschaften der beiden flüssigen Phasen bilden sich an den einzelnen Grenzflächen unterschiedliche Benetzungswinkel aus.

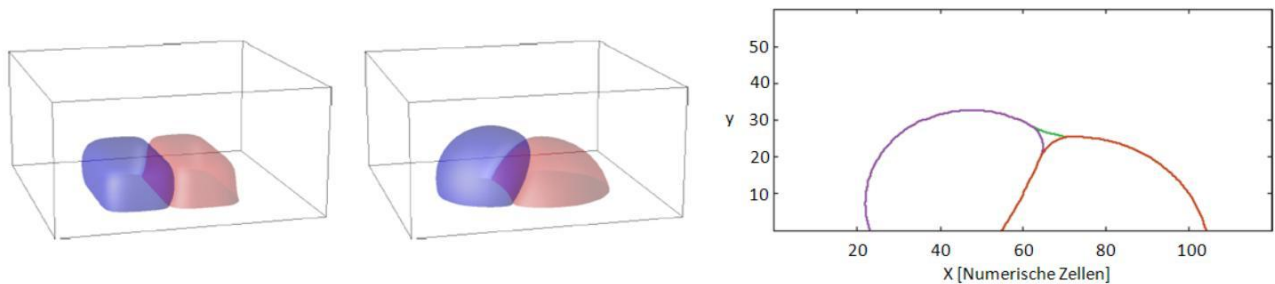


Abbildung 4: Simulation zweier Flüssigkeitstropfen auf einer Substratoberfläche. Abhängig von den physikalischen Eigenschaften der beiden flüssigen Phasen bilden sich charakteristische Benetzungswinkel aus. Das rechte Diagramm zeigt einen Querschnitt durch die dreidimensionalen Tropfen.

Der Simulator umfasst Methoden zur Berechnung von Phasenumwandlungsprozessen in vielkomponentigen Mehrphasen-systemen unter Berücksichtigung von Massen- und Wärmediffusion, Konvektion, Anisotropie und Elastizität. Abgestimmt auf die speziellen Anforderungen des zu beschreibenden Prozesses können Module für die Beschreibung der Phasenzustände, für Partikelsysteme, für Strömung auf Basis der Navier-Stokes Gleichungen oder des Lattice Boltzmann Modells und für die Behandlung elastischer Druck- und Zugspannungen geladen werden. Das Softwarepaket enthält folgende Komponenten:

- Pre-processing: Vorbereitung des Parameterraums durch Schnittstellen zu thermodynamischen Datenbanken, Konfiguration des Simulationsgebietes durch Konvertierung experimenteller Messungen oder Gefügebildungen
- Main-processing: Simulationsverfahren zur numerischen Lösung der Evolutionsgleichungen einschließlich paralleler und adaptiver Algorithmen zur Optimierung des Speicherbedarfs und der Rechenzeit
- Post-processing: Visualisierung und Bibliothek aus Tools zur Auswertung der Simulationsdaten

Die Software ist in C/C++ unter Linux implementiert. Simulationen können sequentiell und parallel auf Rechenclustersystemen unter Einbindung der MPI Bibliothek durchgeführt werden.

[1] Pace3D Softwarepaket: www.hs-karlsruhe.de/imp/Pace3D
 [2] B. Nestler, H. Garcke, B. Stinner, *Multicomponent alloy solidification: Phase-field modelling and simulations*, Phys. Rev. E 71, (2005) 041609-1 - 041609-6, B. Nestler, A. A. Wheeler, *A Multi-phase-field model of eutectic and peritectic alloys: numerical simulation of growth structures*, Physica D 138, (2000) 114 - 133

- [3] M. Selzer, M. Reichardt, B. Nestler, *Massive multi-phase-field simulations: Methods to compute large grain systems*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA ISBN 978-3-527-32367-8, (2008) 1251 – 1255
- [4] R. Spatschek, C. Müller-Gugenberger, E. Brener, B. Nestler, *Phase-field modeling of fracture and stress induced phase transitions*, Phys. Rev. E 75, (2007) 066111 - 066125