Grundlagen der gefügeabhängigen Modellierung von Warmumformprozessen

D. Ponge, Z. Huang, F. Roters, D. Raabe

vorgetragen auf der
VDI Tagung Massivumformung
am 27. September 2007, Leonberg

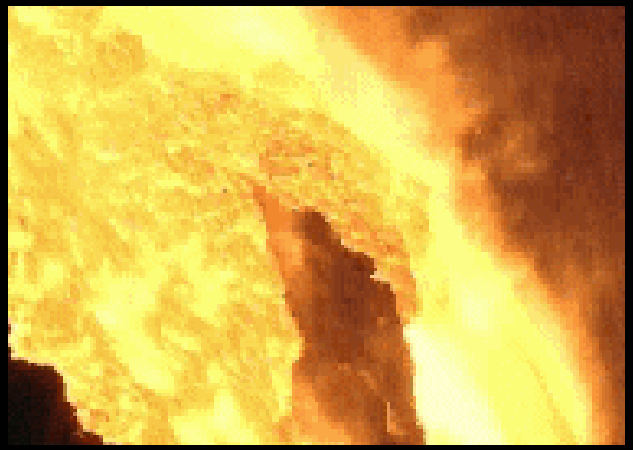
Überblick

- Einleitung, Konzept der inneren Variablen
- Thermodynamik
- Plastizität
- Beispiele
- Zusammenfassung

Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

- Einleitung, Konzept der inneren Variablen
- Thermodynamik
- Plastizität
- Beispiele
- Zusammenfassung

- **Werkstoffe sind Nicht-Gleichgewichtsstrukturen bei denen Gefüge und Zusammensetzung die Eigenschaften bestimmen**
- **Struktur-Eigenschaftsbeziehungen müssen daher auf Basis des Gefüges geschichtsabhängig modelliert werden**

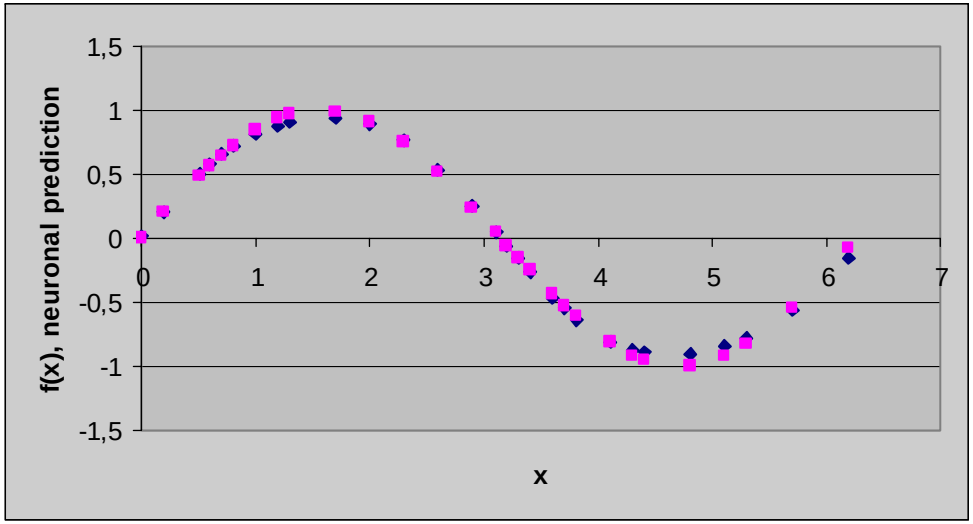


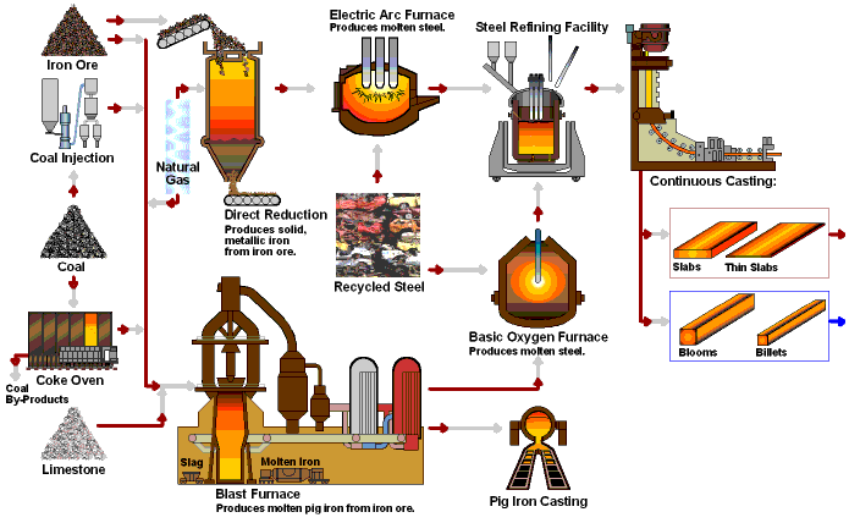
Was ist Modellierung mit inneren Variablen?

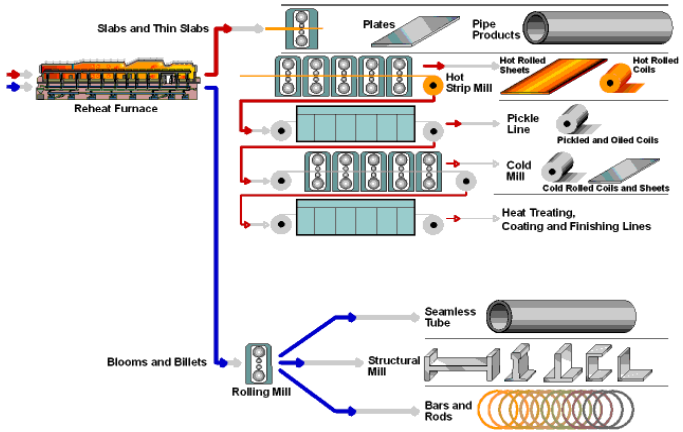
Problematik bei empirischen Materialmodellen

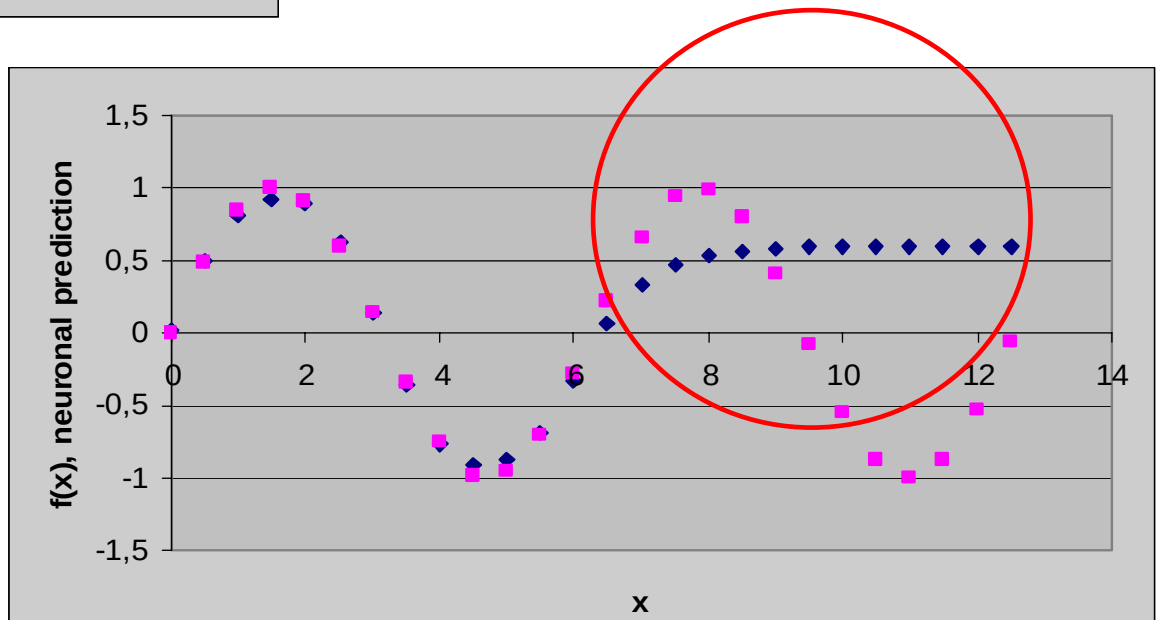
- FEM Standardwerkzeug –konstitutive Modelle jedoch ungenau
- Keine materialphysikalische Prozesssimulation (Materialbeschreibung empirisch, daher keine Vorhersagekraft außerhalb der angepassten Wertebereiche)
- Keine Informationen über Gefügeentwicklungen (Gefüge bestimmt Eigenschaften)
- Probleme bei komplexen Bauteilen und mehrstufigen Prozessen (empirische Modelle sind nicht geschichtsabhängig)
- Hoher Versuchsaufwand

Schwäche empirischer Modelle









Anwendung

- Verkürzung der Prozesskette durch exaktere Simulation
- Vorhersage lokaler Gefügeentwicklung
- Erkennen von Gefahrenherden, Eliminierung von potentiellen Produktfehlern
- Reduzierung von Versuchen
- Gezielte lokale Einstellung der Bauteileigenschaften (”local engineering“)
- Einsparung von Produktgesamtkosten, Verringerung von Entwicklungskosten
- Erhöhung/Optimierung der Werkstückqualität auch von bereits im Einsatz befindlichen Bauteilen aufgrund der Gefügekenntnisse aus der Simulation (Einflussnahme während der Simulation)

Typische Einzelziele der Modellierung

1. Simulation der Evolution der Versetzungsdichten

   (Berücksichtigung Verfestigung, Entfestigung durch statische und dynamische Erholung und statische, dynamische und metadynamische Rekristallisation)

2. Beschreibung der Evolution der Austenitkorngröße

3. Beschreibung des Ausscheidungszustandes

4. Bestimmung Fließspannung basierend auf 1-3

Module

- Versetzungsevolutionsgleichungen
- Modell für statische Rekristallisation
- Modell für Kornvergröberung
- Modell für dynamische Rekristallisation
- Modell für metadynamische Rekristallisation
- Modell für Ausscheidungszustand
- Berechnung der lokalen Fließspannung aus Gefügezustand

$$\sigma = f\left(Versetzungsd., Korngr., Ausscheidungen, ...\right)$$

Hauptaspekte in der Massivumformung

- Homogenisierungsgrad des konstitutiven Modells
- Wechselwirkung der Module

Hauptproblem in der Massivumformung

Homogenisierungsgrad des konstitutiven Modells am Beispiel der Plastizität

Überblick

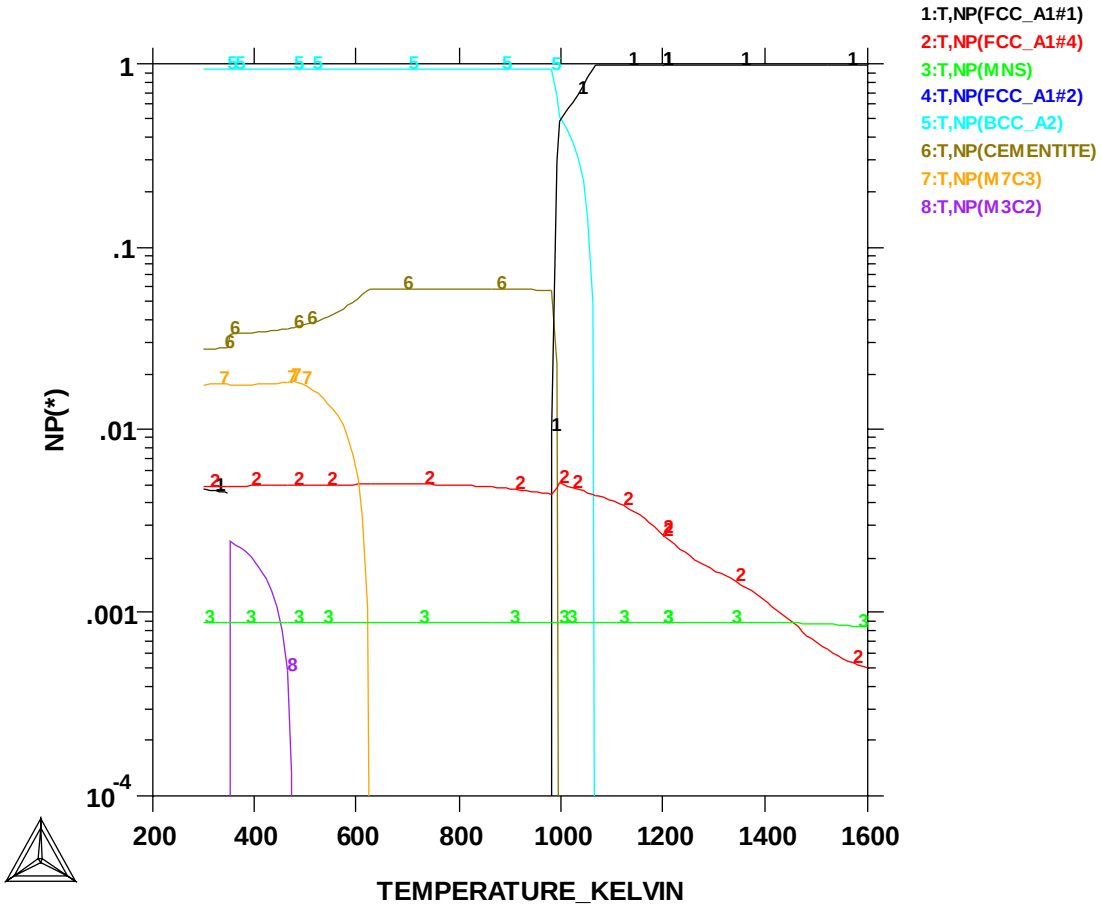
- Einleitung, Konzept der inneren Variablen
- Thermodynamik
- Plastizität
- Beispiele
- Zusammenfassung

Thermodynamik

- Minimierung der Gibbs Energie (z.B. Thermo-Calc, MTDATA)
- Datenbasis sehr wichtig
- Meist Datenbasis direkt benutzt, sondern z.B. die treiben Kräfte für Umwandlungsreaktionen
- Nicht-Gleichgewichts-Phänomene

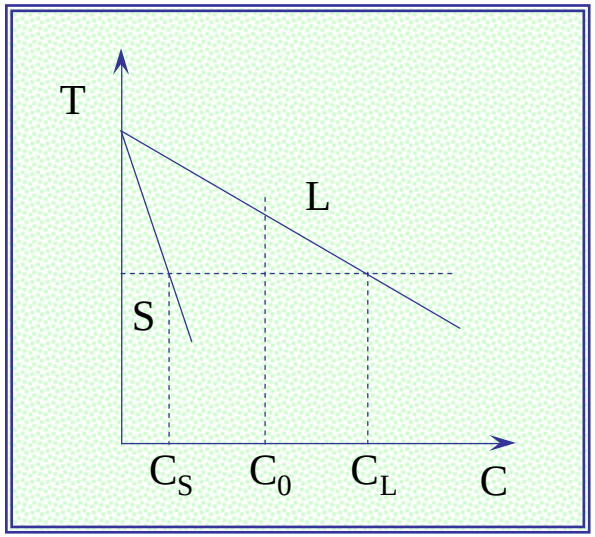
Thermodynamik

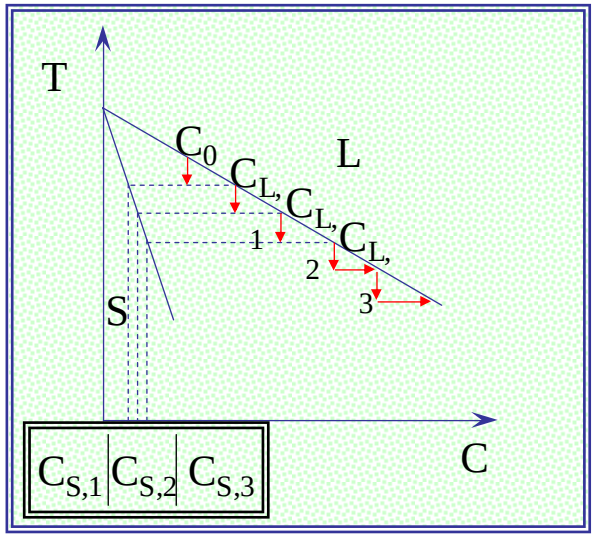
THERMO-CALC (2007.09.24:14.23) :

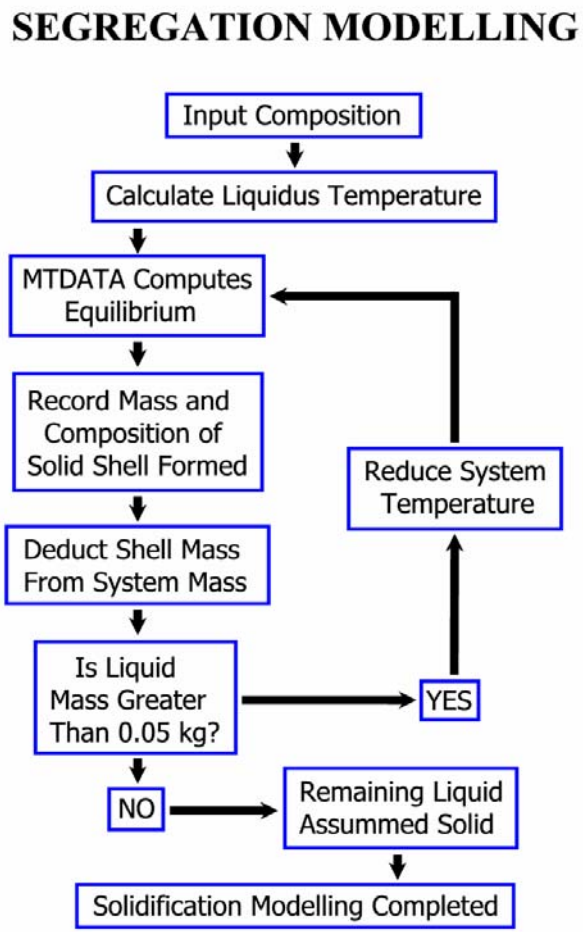


Seigerung

- **Scheil Modell (worst case Seigerung)**
- **Nicht-GG**
- **Konstitutionelle Unterkühlung**



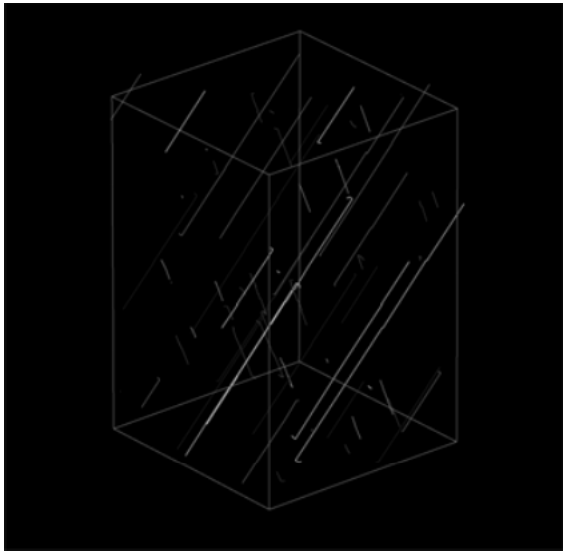




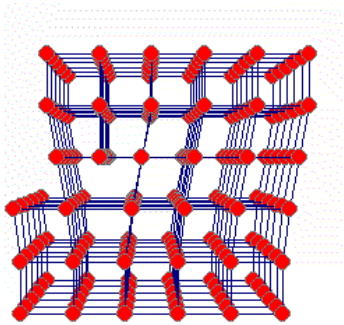
Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

- Einleitung, Konzept der inneren Variablen
- Thermodynamik
- Plastizität
- Beispiele
- Zusammenfassung

Motivation: Fundamentals of mesoscale crystal mechanics

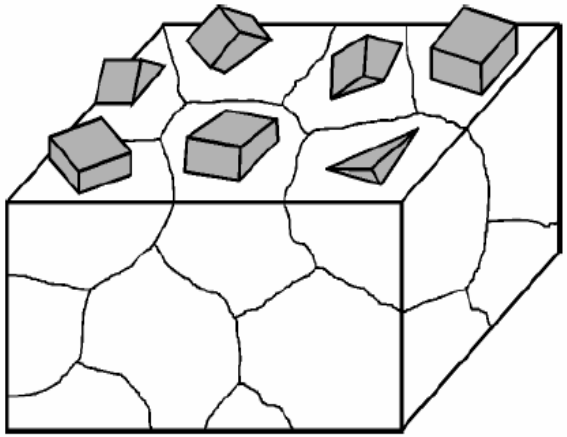


parallel loops

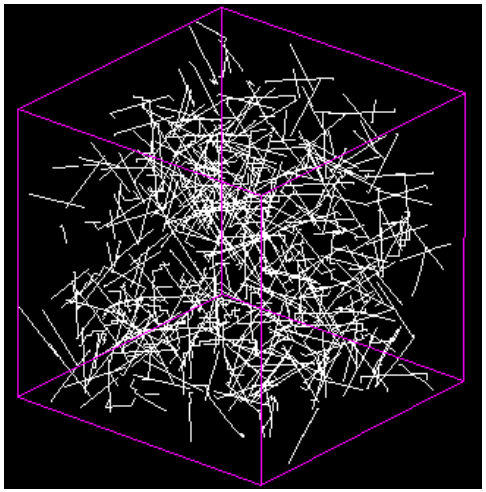


one dislocation

mesoscopic boundary conditions
(grain / orientation neighborhood)



reactions



spin (orientation change)

Diskrete Modellierung

1

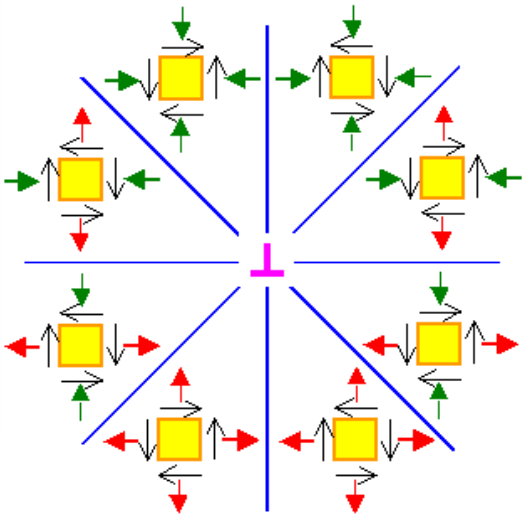
$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 0$$

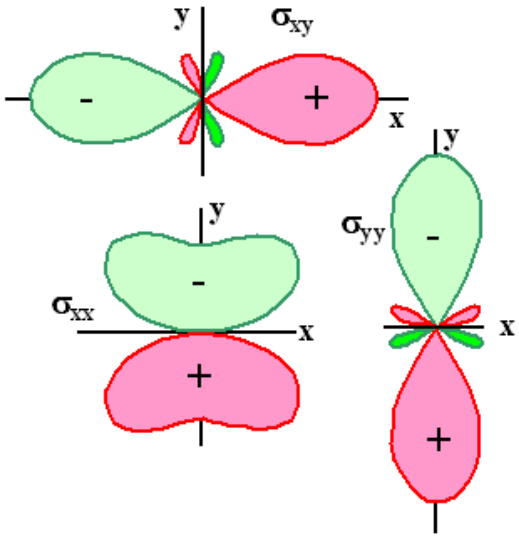
$$\sigma_{xx} = -D\,y\,\frac{3x^2 + y^2}{\left(x^2 + y^2\right)^2}, \qquad \text{with:} \quad D = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}$$

$$\sigma_{yy} = D\,y\,\frac{x^2 - y^2}{\left(x^2 + y^2\right)^2}$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = D\,x\,\frac{x^2 - y^2}{\left(x^2 + y^2\right)^2}$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$$





2

$$\vec{F}_a = \left(\underline{\underline{\sigma}}^{\text{all}\to a}\ \vec{b}_a\right) \times \vec{t}_a$$

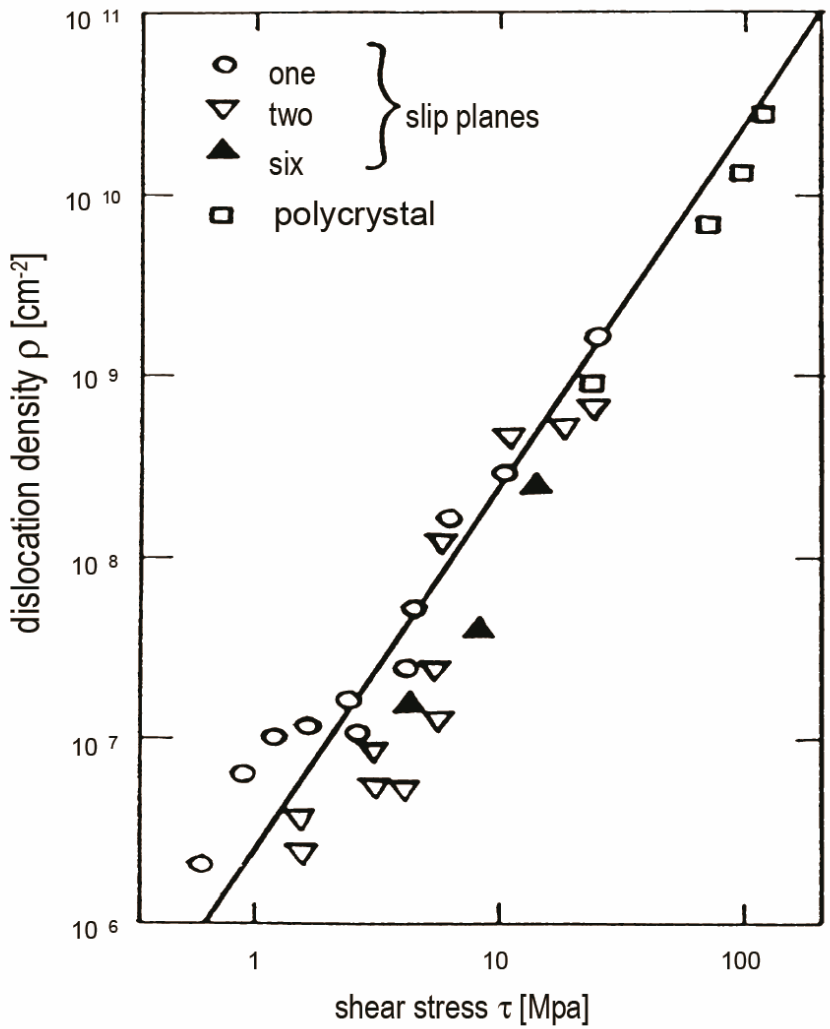
3

$$\vec{F} = B\dot{\vec{x}}$$

Homogenisierung, Plastizität

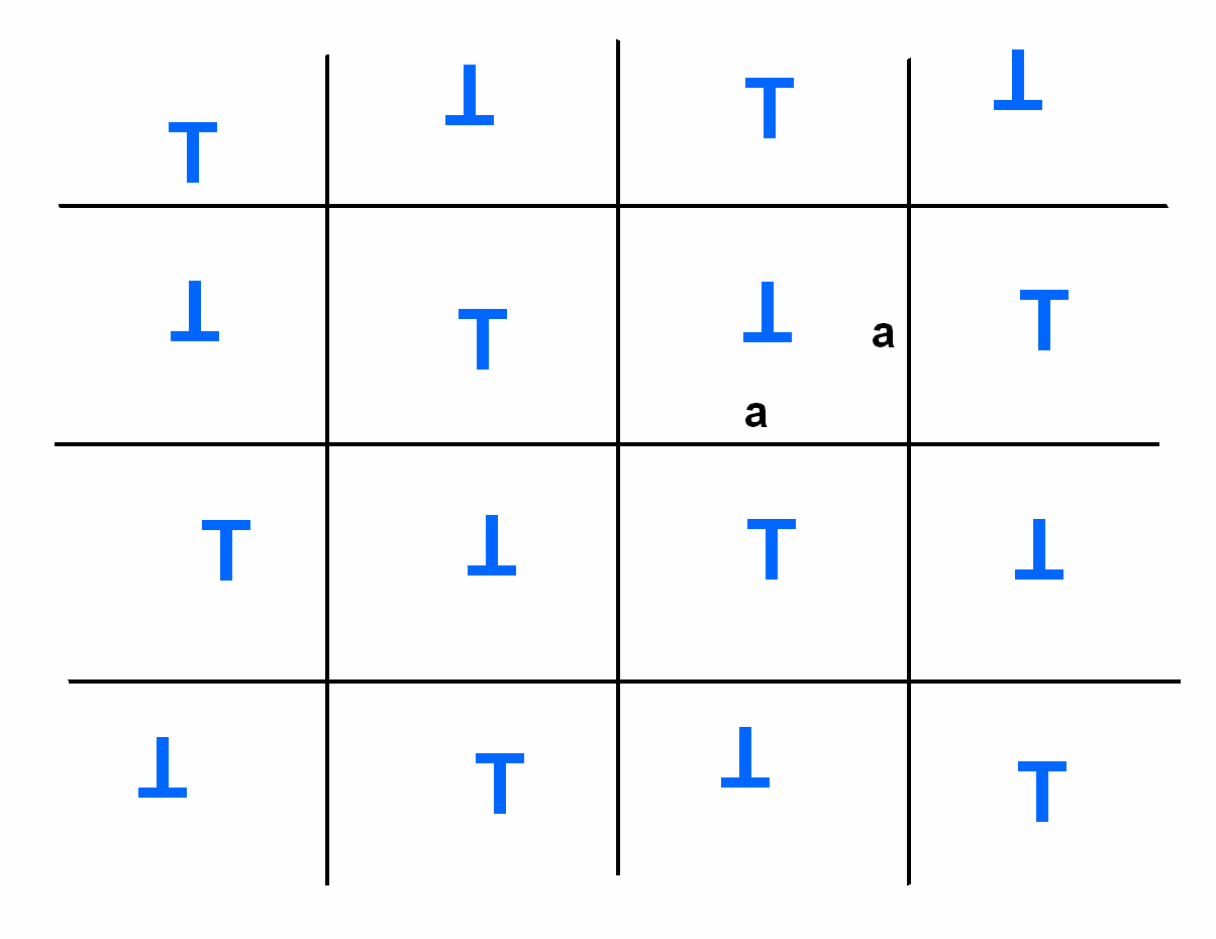
- Kinetische Zustandsgleichung
- Strukturevolutionsgleichungen
- Kopplung an Umformkinematik

Kinetische Zustandsgleichung



$$\tau = \alpha G b \sqrt{\rho}$$

Kinetische Zustandsgleichung



$$\rho = \frac{1}{a^2}$$

$$\tau = \frac{Gb}{2\pi a} = \frac{Gb}{2\pi}\sqrt{\rho}$$

Strukturevolutionsgleichungen

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = A\rho^{+} + B\rho^{-}$$

Strukturevolutionsgleichungen

Beispiel: Immobile Versetzungen

$$\dot{\rho}_{\mathrm{SSD}} = (\dot{\rho}_{\mathrm{I}}^{+})_{\mathrm{SSD}} + (\dot{\rho}_{\mathrm{II}}^{+})_{\mathrm{SSD}} + (\dot{\rho}_{\mathrm{I}}^{-})_{\mathrm{SSD}} + (\dot{\rho}_{\mathrm{II}}^{-})_{\mathrm{SSD}}$$

4 Mechanismen

1 : lock-Bildung

2 : Dipole

3 : Athermische Annihilation

4 : Thermische Annihilation durch Klettern

Ma, Roters, Raabe: Acta Materialia 54 (2006) 2169 – 2179 and 2181 – 2194

Strukturevolutionsgleichungen

1 : lock-Bildung

$$\dot{\rho}_{\mathrm{I}}^{+} \propto \rho_{\mathrm{m}} \cdot v \cdot \frac{1}{\lambda}$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_{\mathrm{dis}}} + \frac{1}{\lambda_{\mathrm{other}}} + \ldots$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\rho}_{\mathrm{I}}^{+} = c_4 \sqrt{\rho_{\mathrm{F}}} \cdot \dot{\gamma}$$

2 : Dipole

$$\dot{\rho}_{\mathrm{II}}^{+} \propto \rho_{\mathrm{m}} \cdot \rho_{\mathrm{m}} \cdot v \cdot d_{\mathrm{dipole}}$$

$$d_{\mathrm{dipole}} = \frac{\sqrt{3}Gb}{16\pi(1-\upsilon)} \cdot \frac{1}{\tau}$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\rho}_{\mathrm{II}}^{+} = c_6 d_{\mathrm{dipole}} \rho_{\mathrm{m}} \dot{\gamma}$$

3 : Athermische Annihilation

$$\dot{\rho}_{\mathrm{I}}^{-} \propto \rho_{\mathrm{m}} \cdot \rho \cdot v \cdot d$$

$$d = const$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\rho}_{\mathrm{I}}^{-} = -c_5 \rho \cdot \dot{\gamma}$$

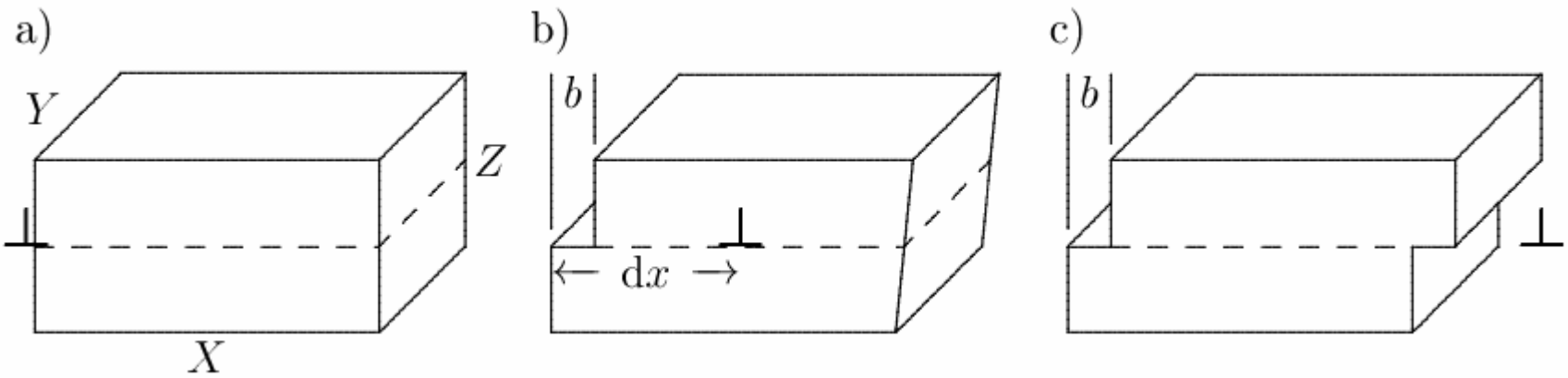
4 : Thermische Annihilation durch Klettern

$$\dot{\rho}_{\mathrm{II}}^{-} \propto \rho \cdot \rho \cdot v_{\mathrm{climb}} \cdot d$$

$$v_{\mathrm{climb}} \propto \frac{DS}{K_B \theta} \tau \dot{\gamma}^{c_8}$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\rho}_{\mathrm{II}}^{-} = -c_7 \exp\left(-\frac{Q_{\mathrm{bulk}}}{K_{\mathrm{B}}\theta}\right) \frac{|\tau|}{K_{\mathrm{B}}\theta} \rho^2 \dot{\gamma}^{c_8}$$

Kopplung an Umformkinematik



$$\dot{\gamma} = \frac{\mathrm{d}\gamma}{\mathrm{d}t} = n\frac{\mathrm{d}x}{X}\frac{b}{Z}\frac{1}{\mathrm{d}t} = \rho_{\mathrm{m}} b v$$

Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

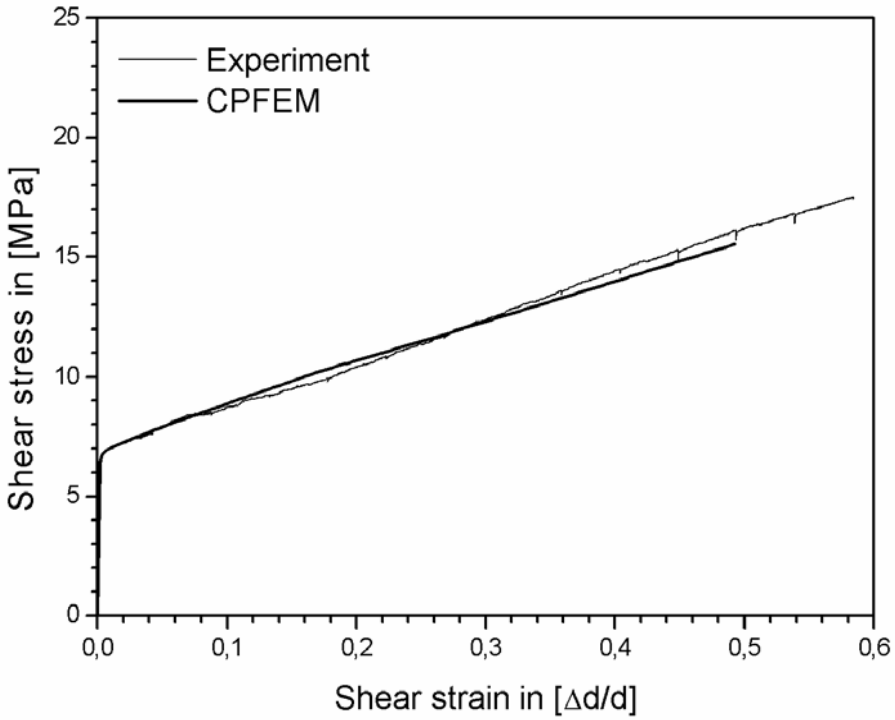
- Einleitung, Konzept der inneren Variablen
- Thermodynamik
- Plastizität
- Beispiele
- Zusammenfassung

Beispiele, unterschiedlicher Homogenisierungsgrad

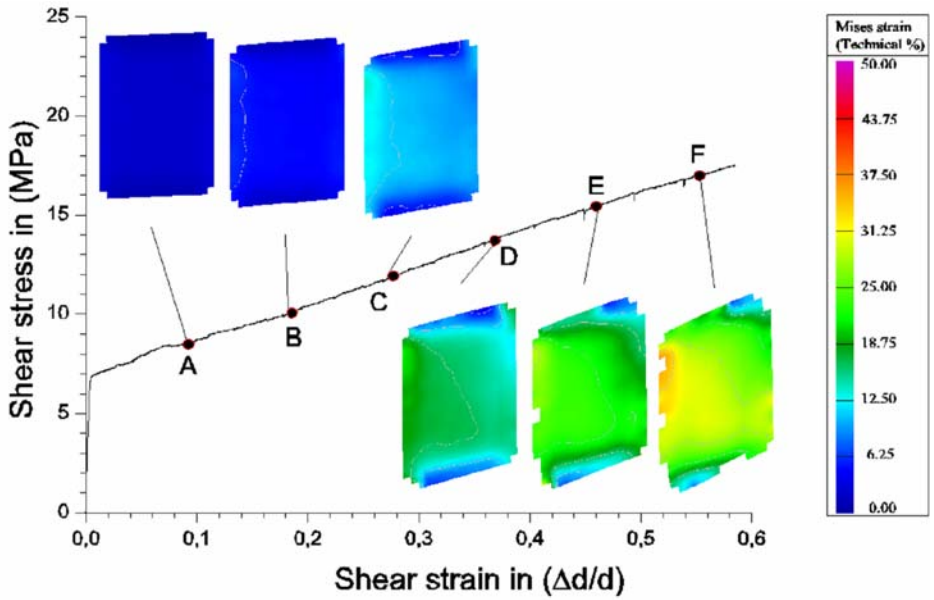
Beispiele

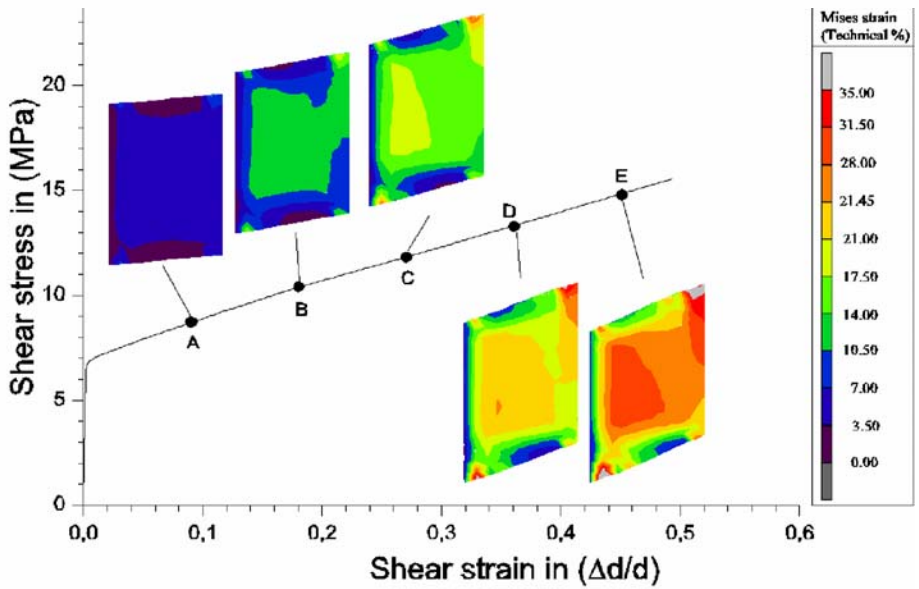
- Plastizität
- Rekristallisation

Al Einkristalle, Scherversuch



Experiment



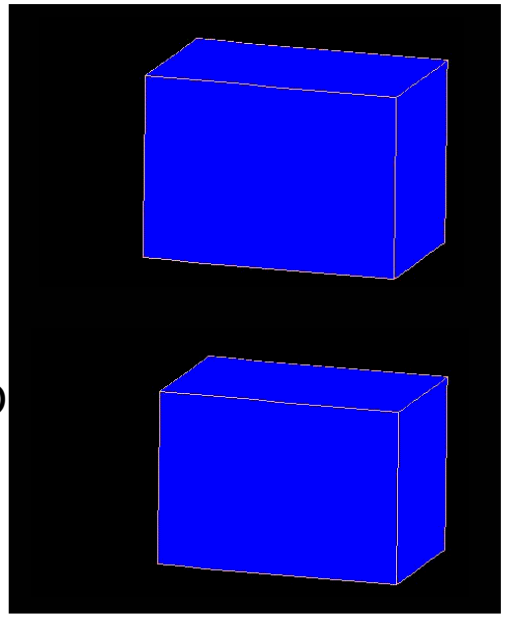


Simulation

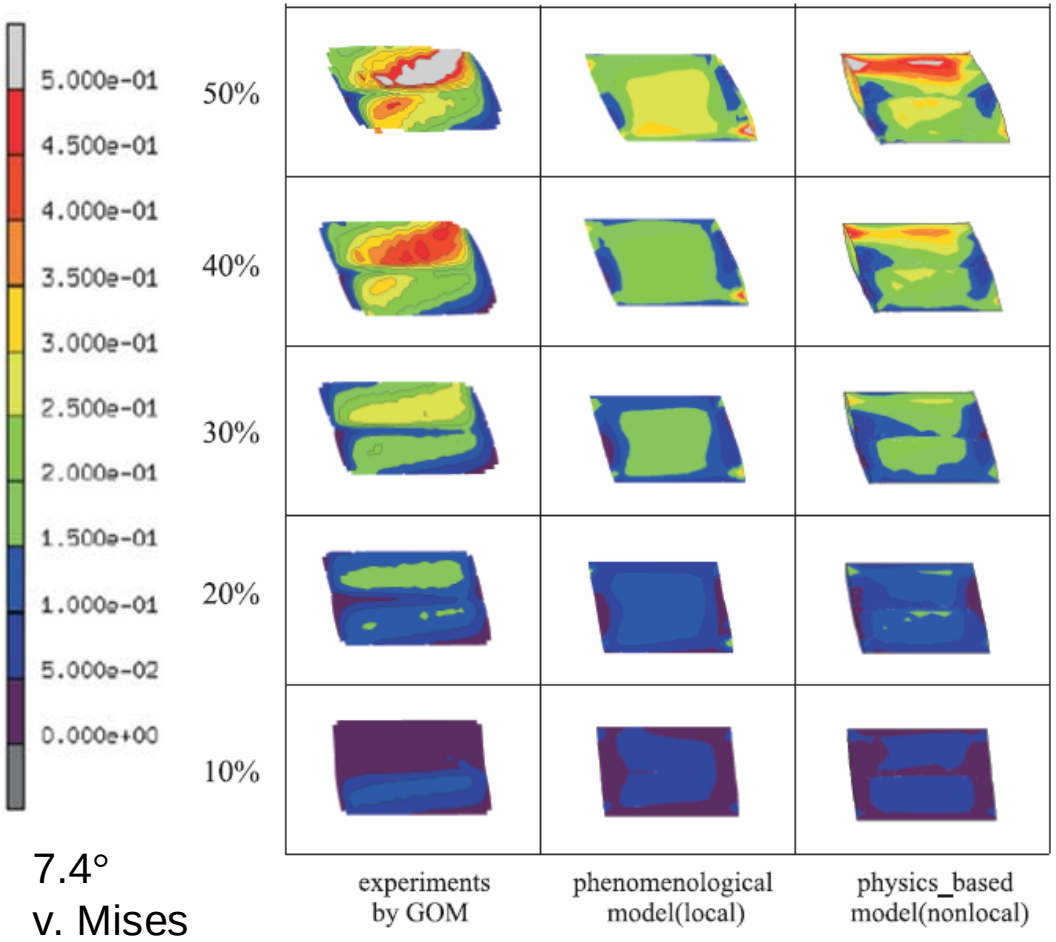
Bikristalle

SSD

GND

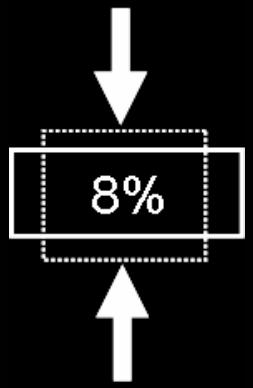


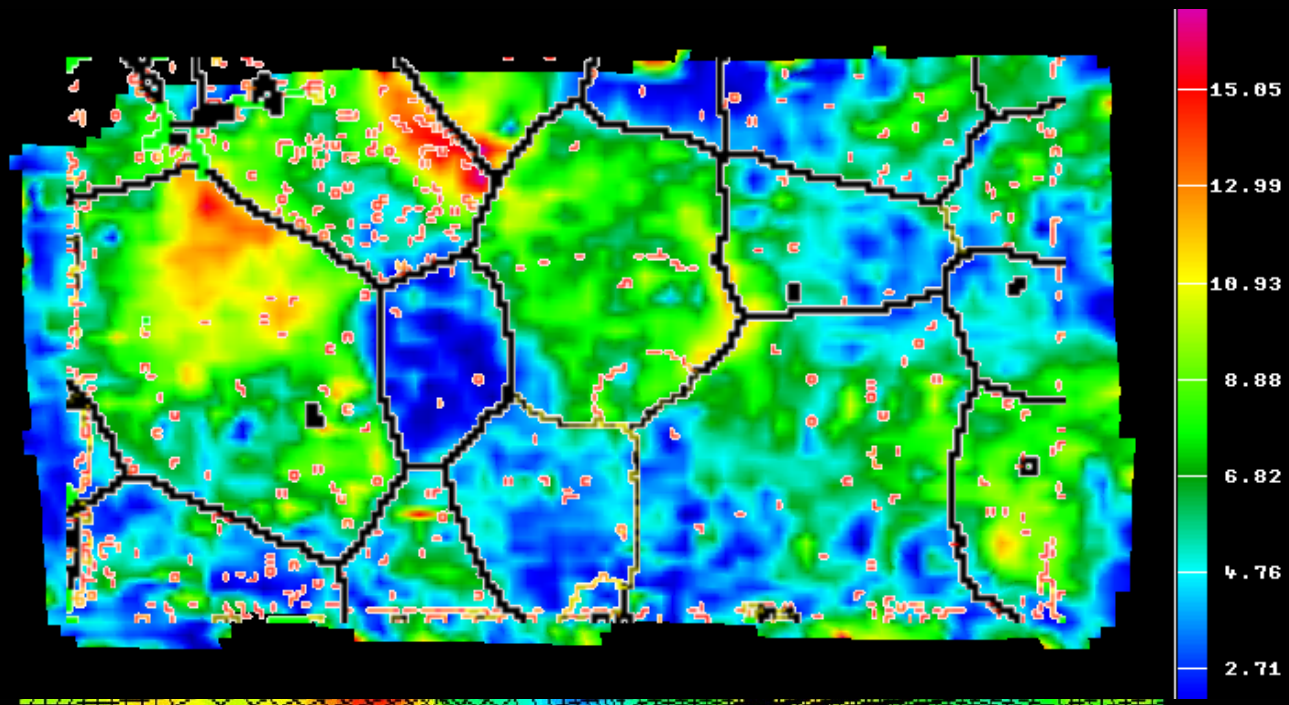
Korngrenzenmechanik



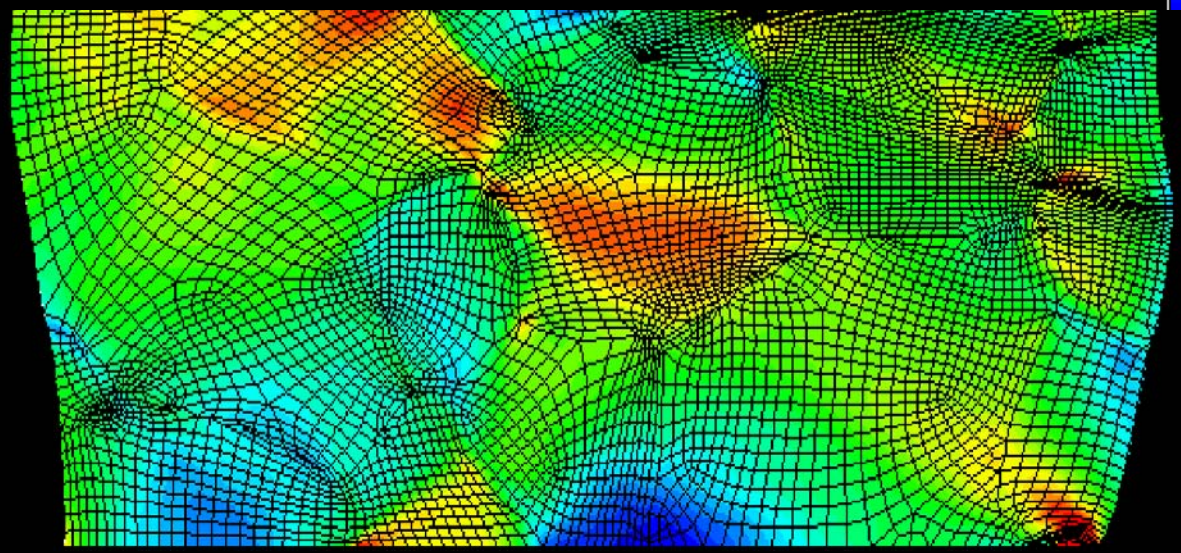
7.4°
v. Mises

Crystal Mechanics FEM, grain scale mechanics (2D)

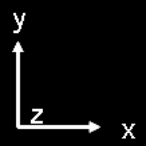




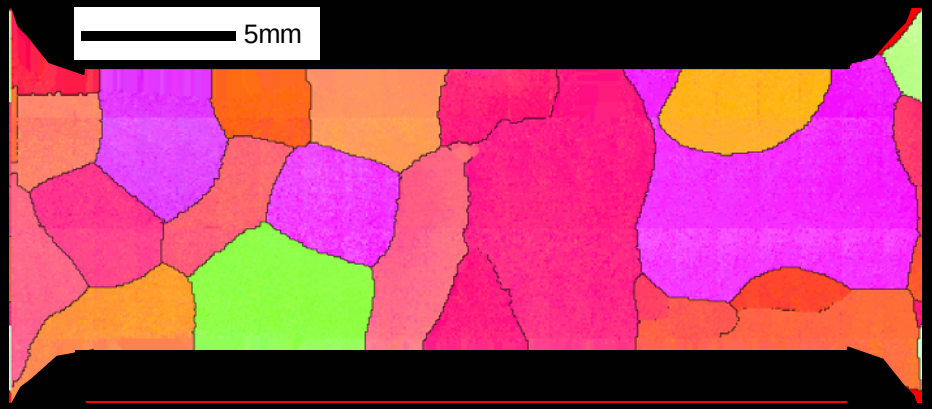
Experiment
(DIC, EBSD)
v Mises strain

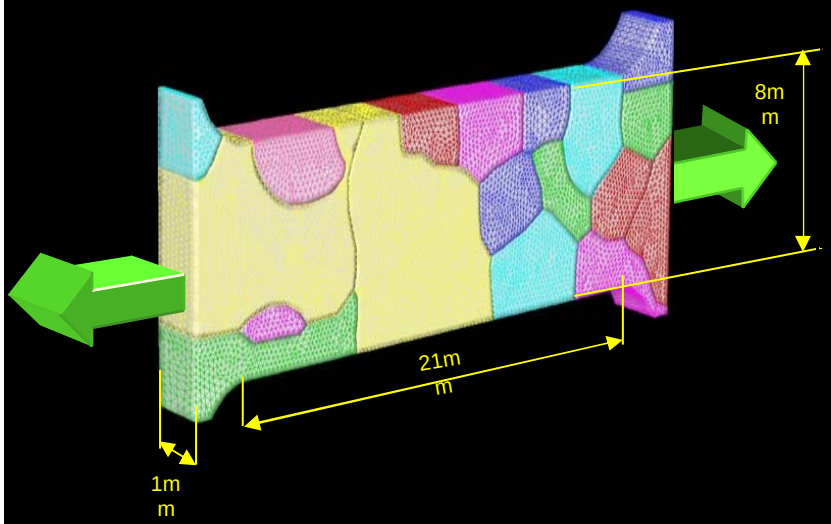


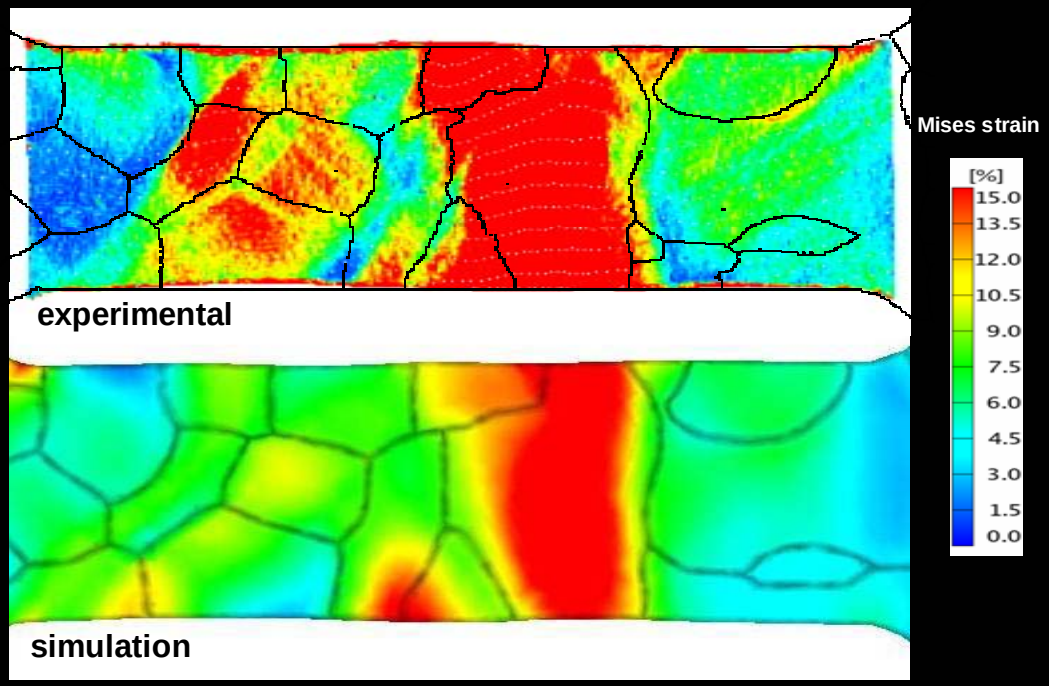
Simulation
(CP-FEM)
v Mises strain



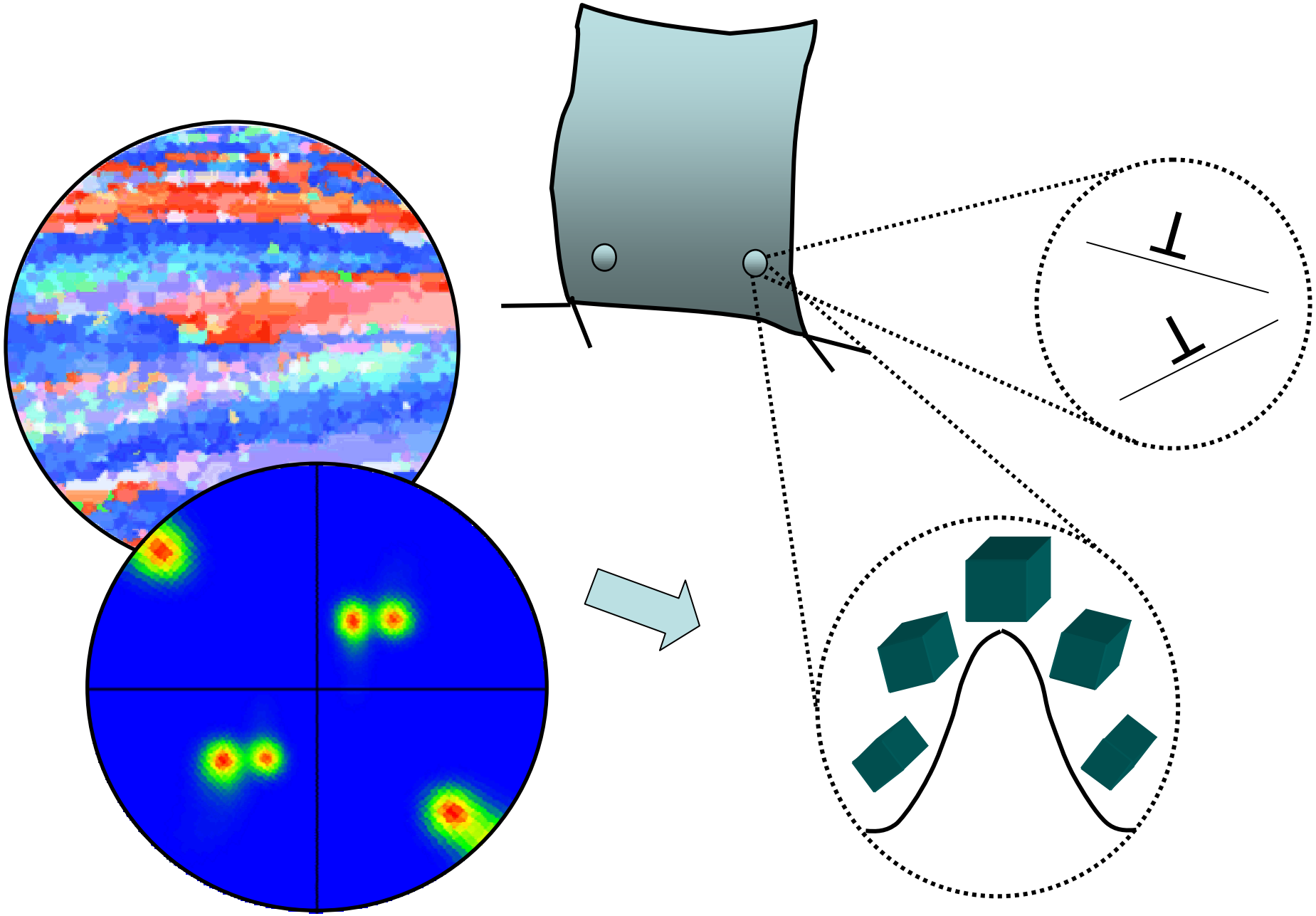
Crystal Mechanics FEM, grain scale mechanics (3D)



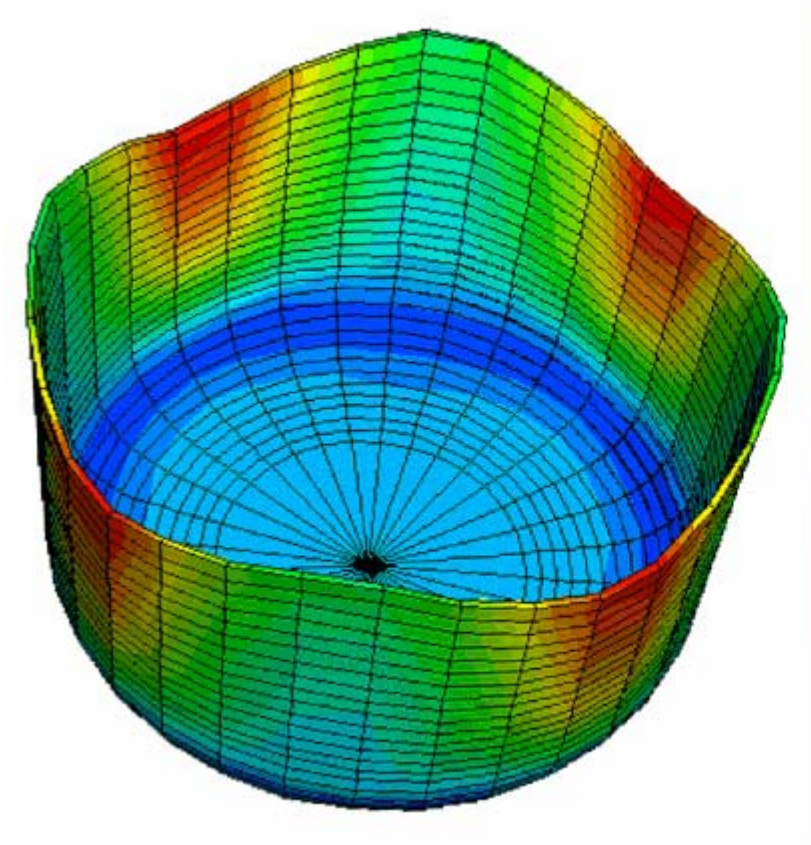




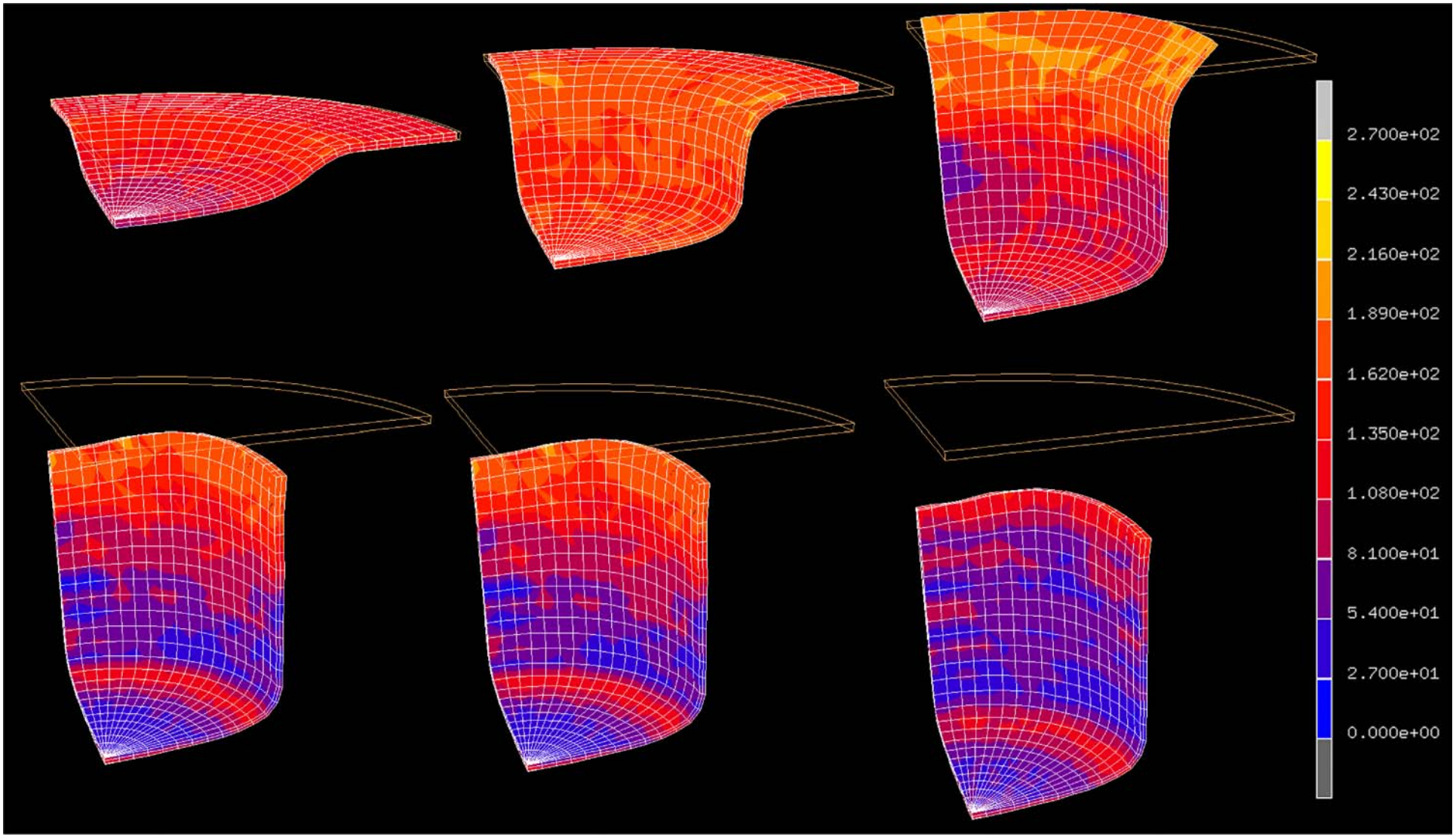
map texture functions into FEM



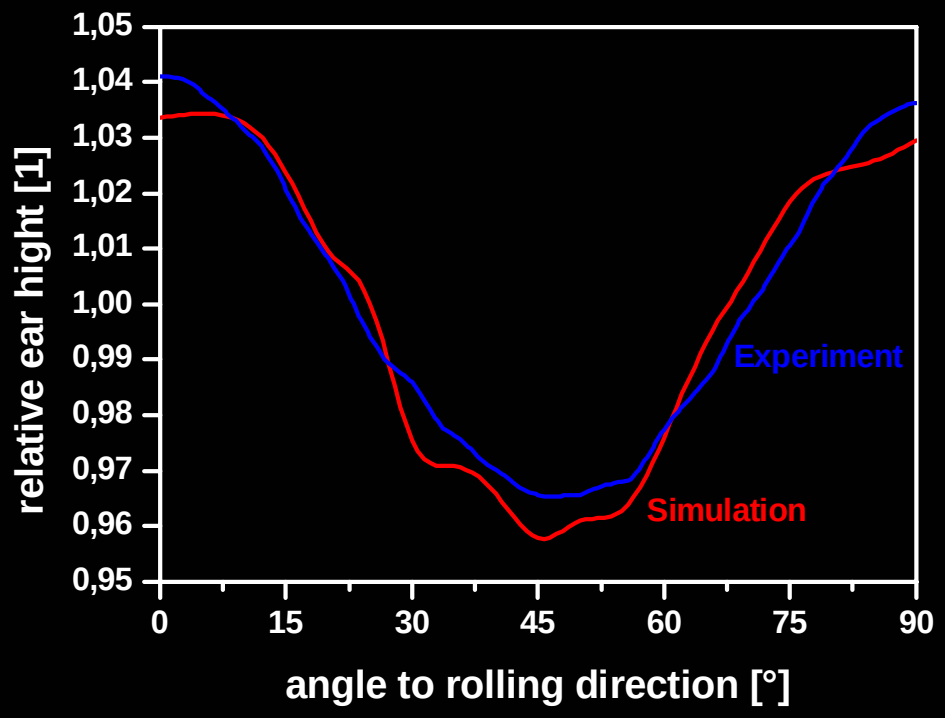
Crystal Plasticity FEM



Crystal Plasticity FEM

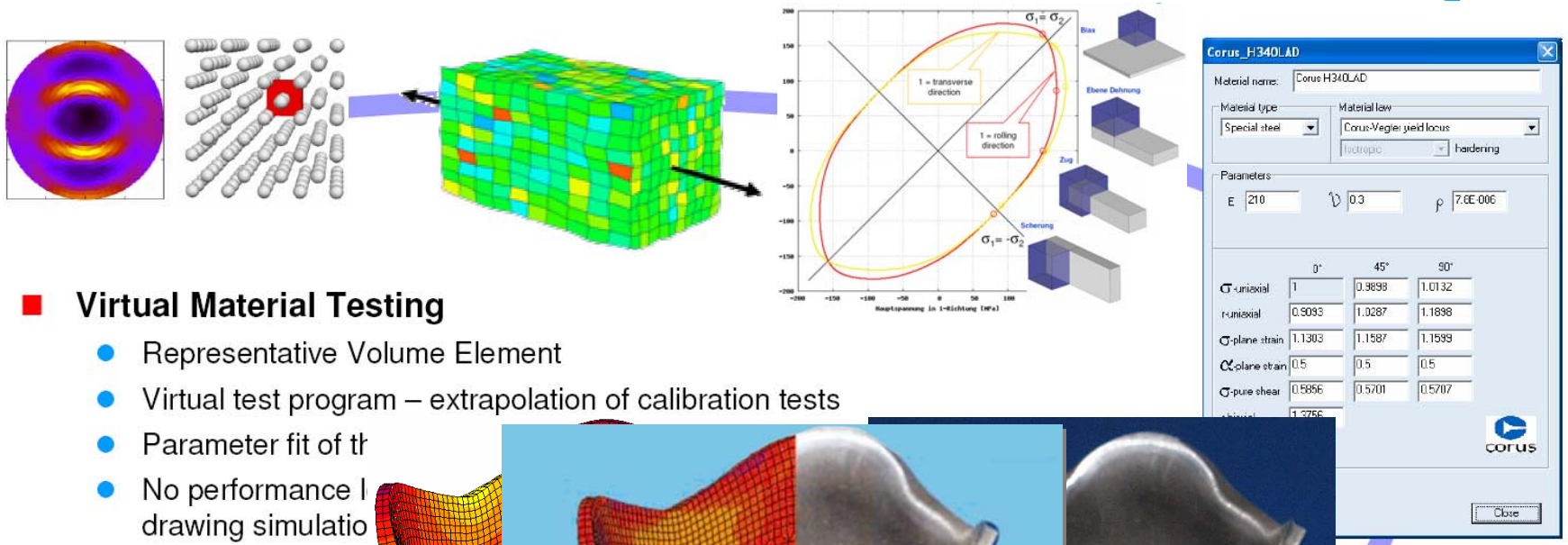


Crystal Plasticity FEM

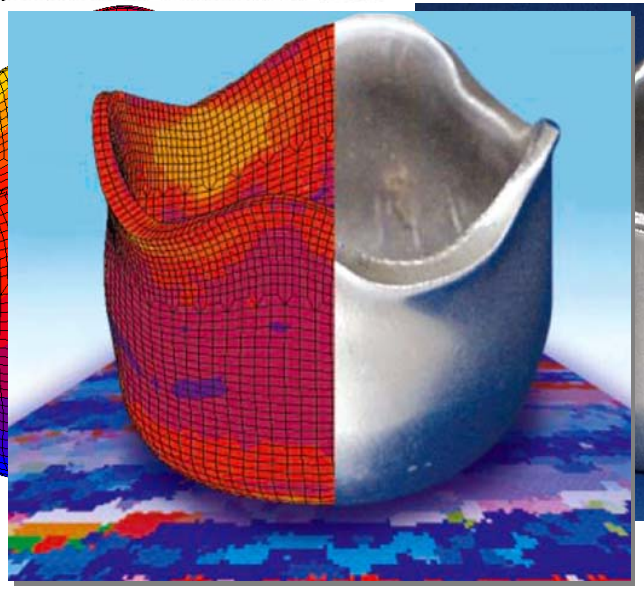


Fallbeispiel: Automobil

From Crystal Plasticity to Deep Drawing

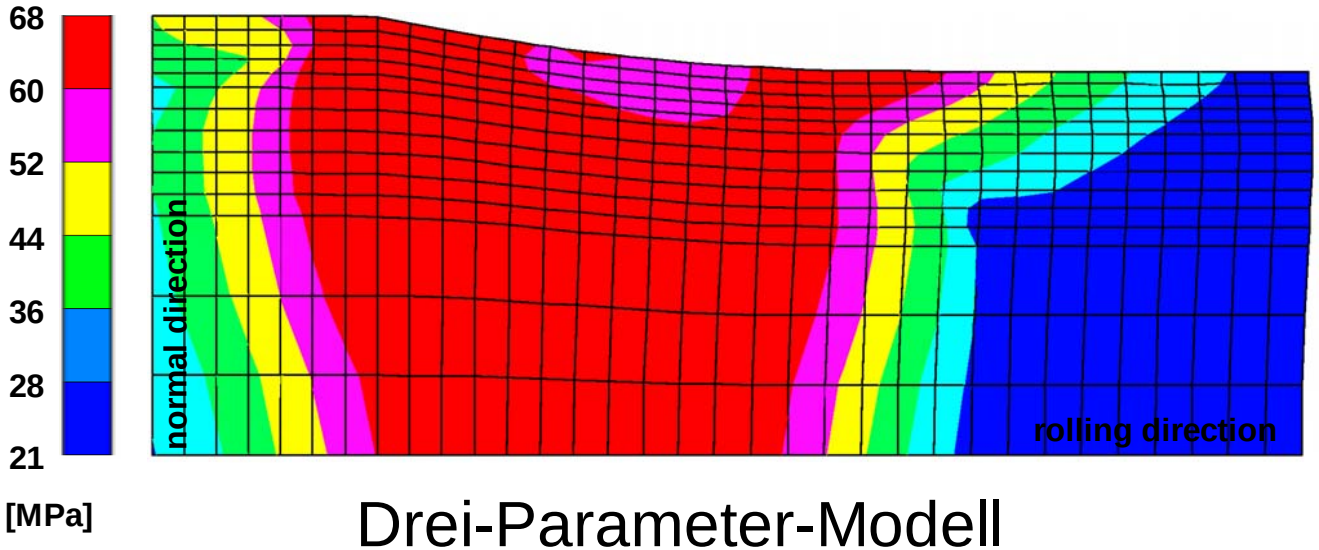


- **Virtual Material Testing**
  - Representative Volume Element
  - Virtual test program – extrapolation of calibration tests
  - Parameter fit of th
  - No performance l
    drawing simulatio

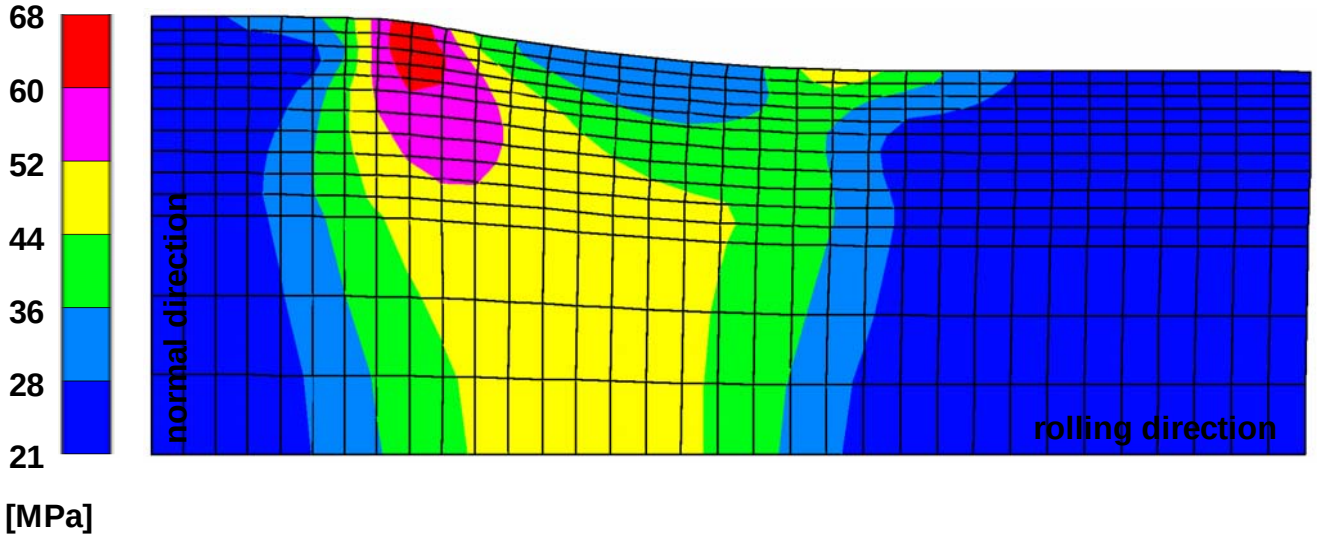


Walzsimulation, v. Mises Spannung

empirisches Modell

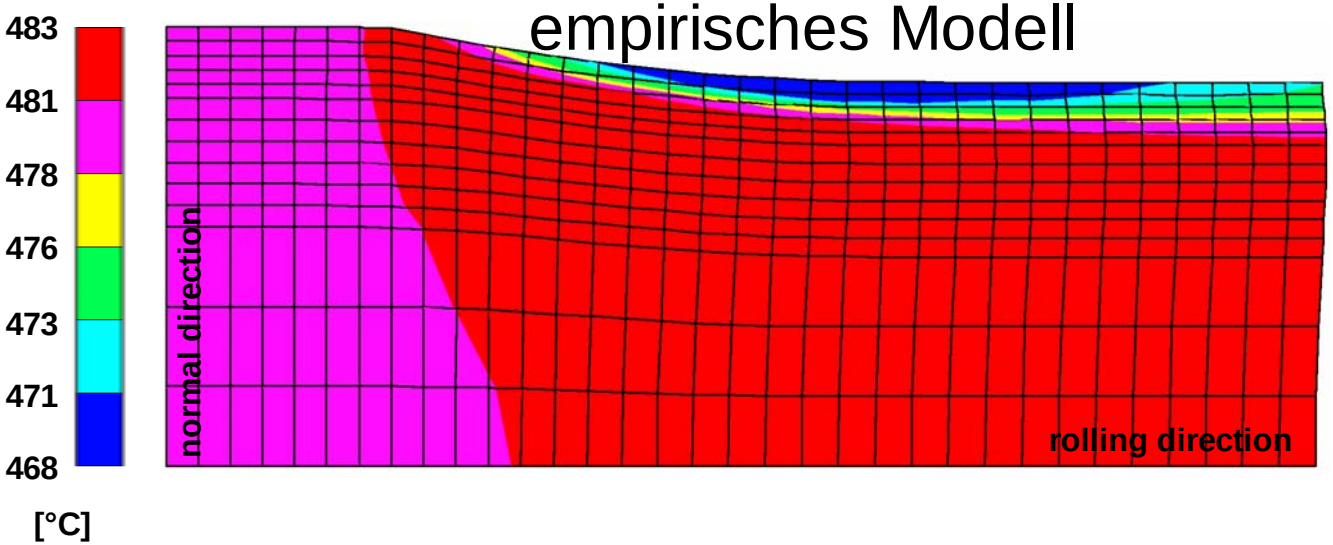


Drei-Parameter-Modell

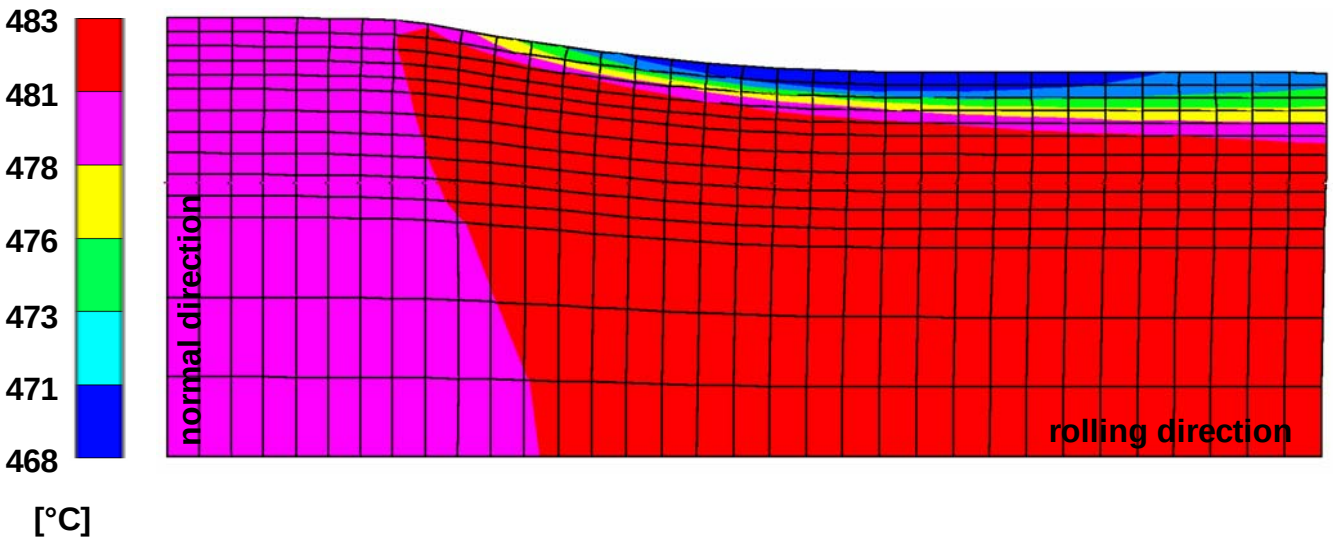


Walzsimulation, Temperatur

empirisches Modell

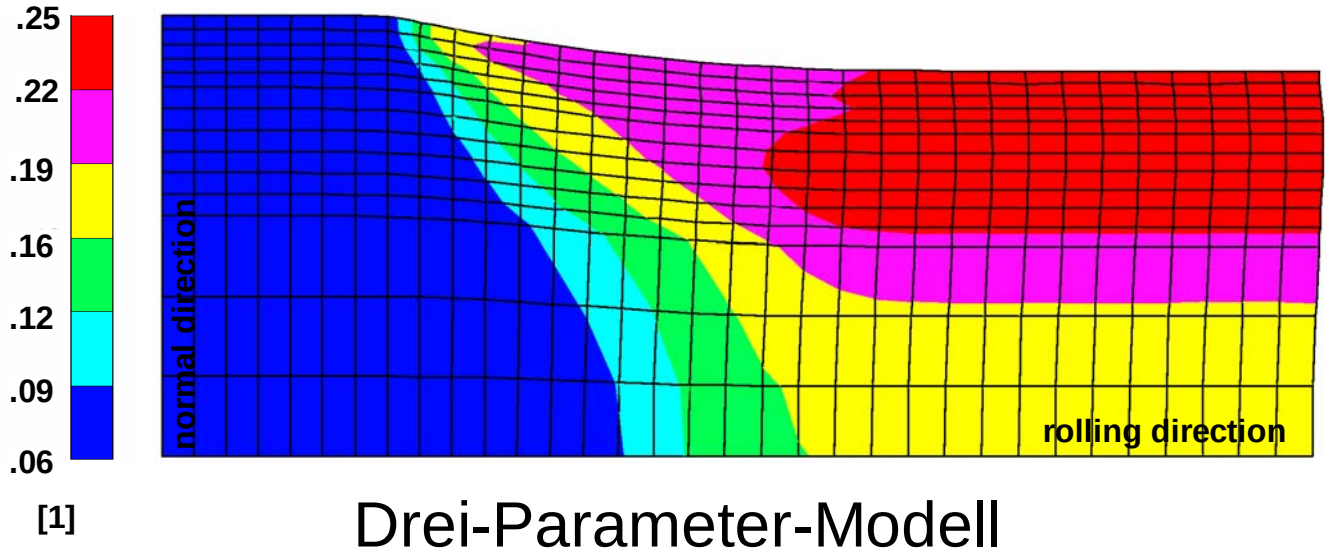


Drei-Parameter-Modell

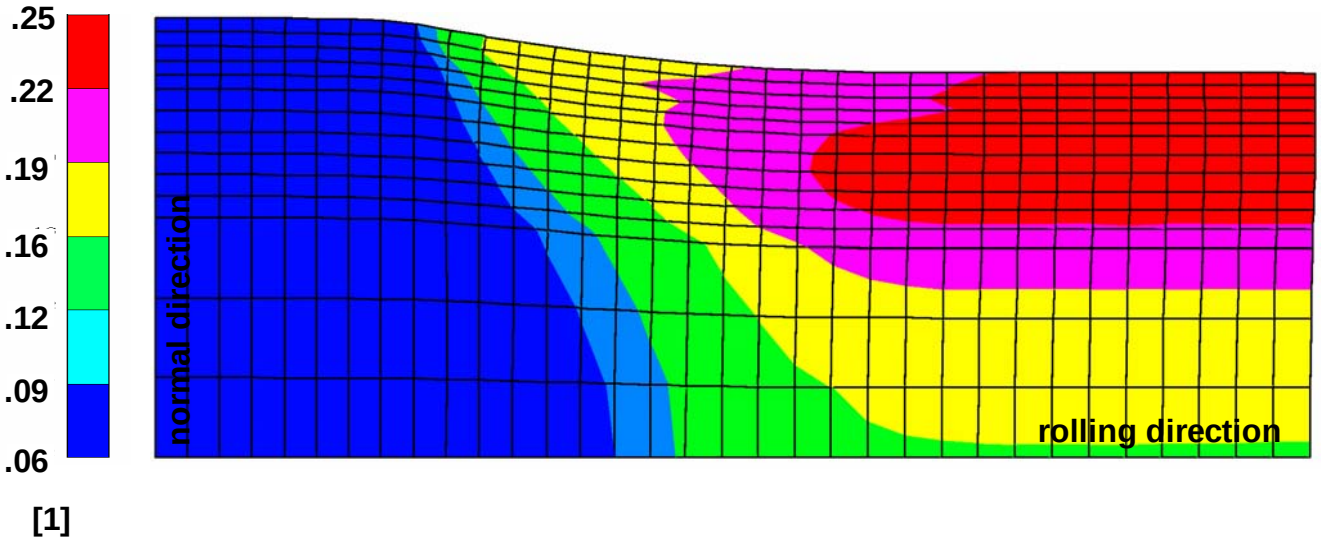


Walzsimulation, Vergleichsdehnung

empirisches Modell

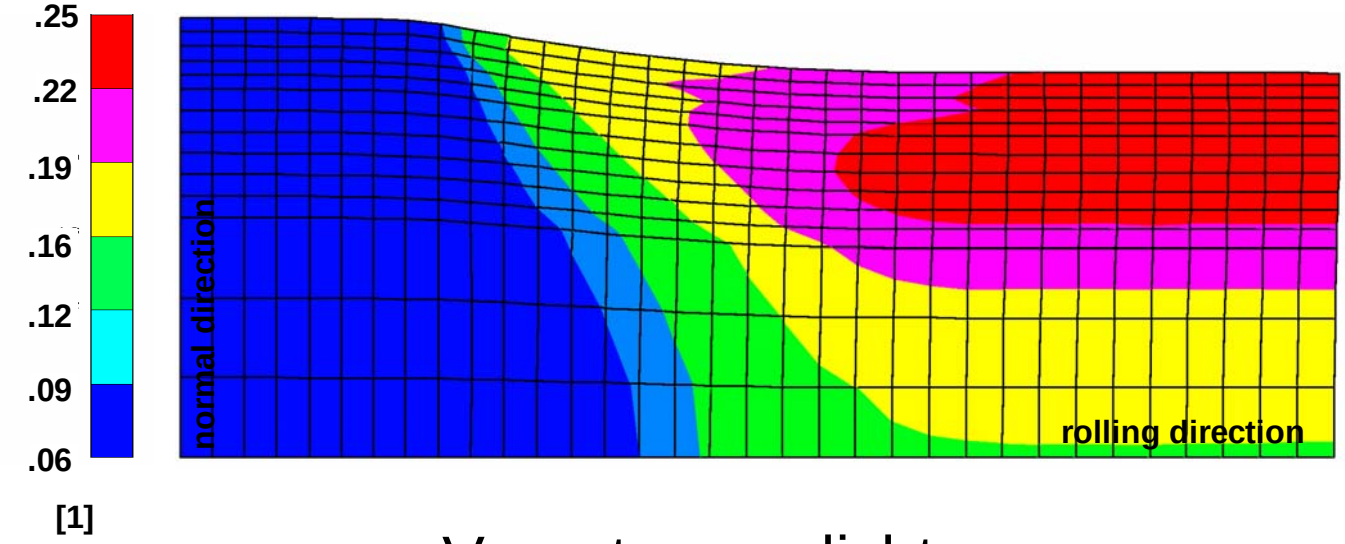


Drei-Parameter-Modell

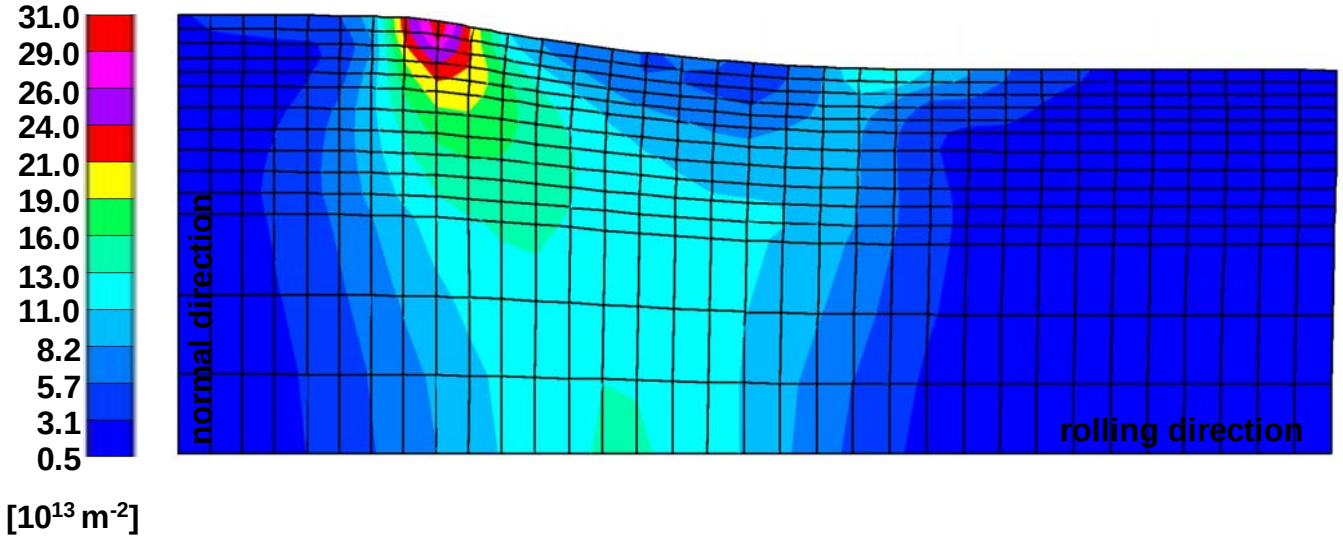


Walzsimulation, Vergleichsdehnung u. Versetzungen

Vergleichsdehnung



Versetzungsdichte



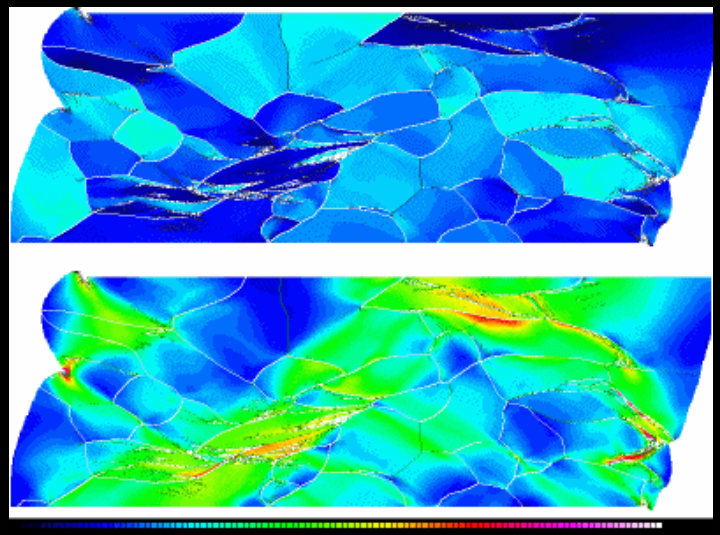
Grundlagen der Rekristallisation

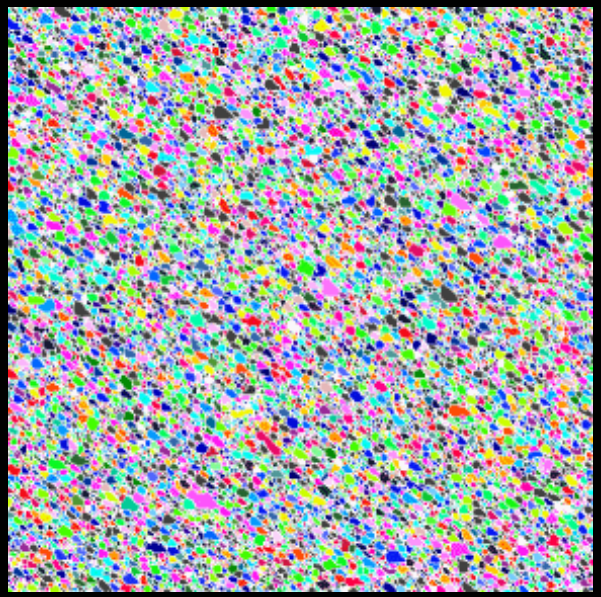
Kinetiken

1) Keimentstehung
2) Keimwachstum
3) Erholung

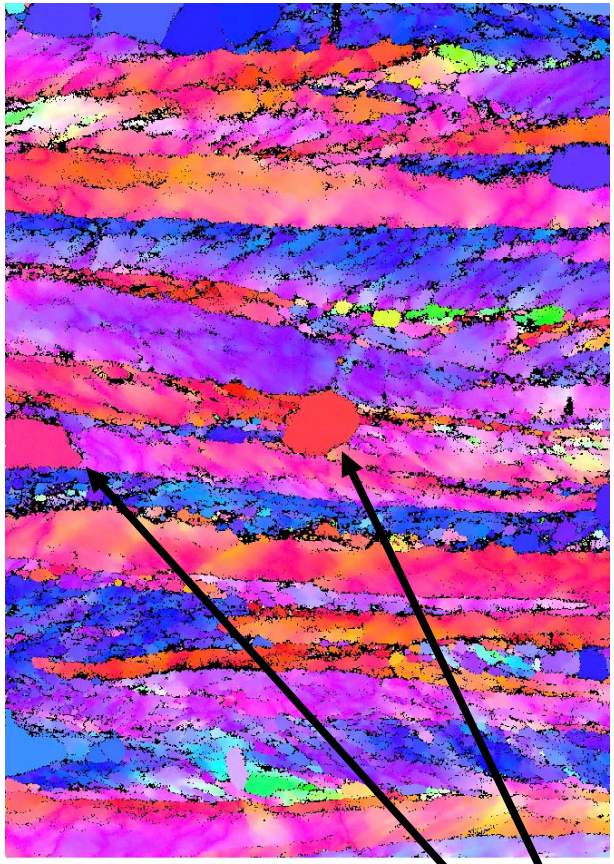
Aktivierungsenergie
1) hoch (starke Variation)
2) mittel (starke Variation)
3) niedrig (geringe Variation)

Simulationen, ortsdiskret





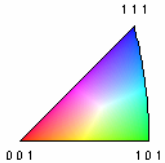
Keimbildung

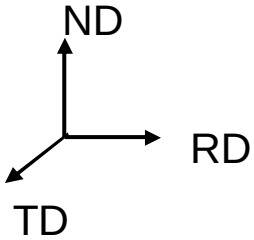


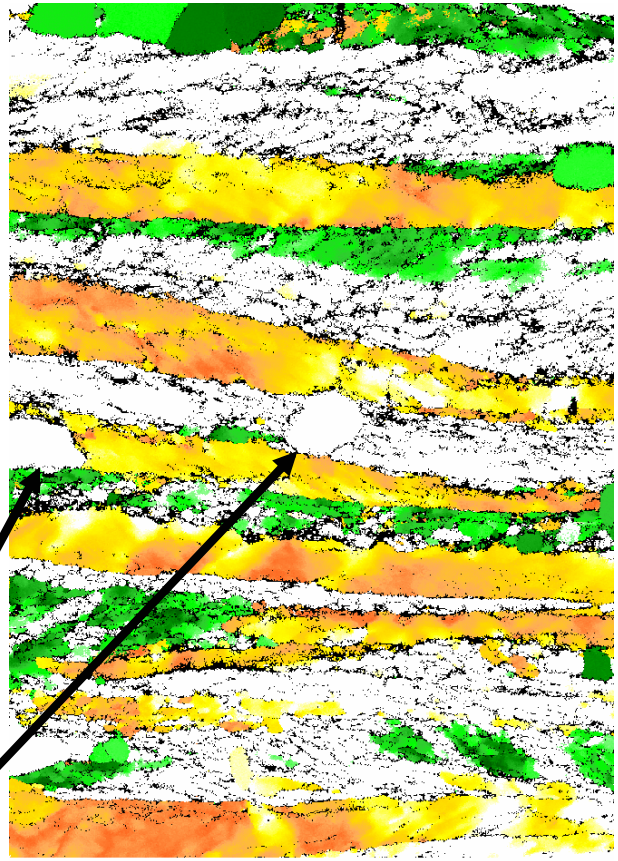
10.00 µm = 100 steps IPF [001]

Color Coded Map Type: Inverse Pole Figure [001]

Iron (Alpha)







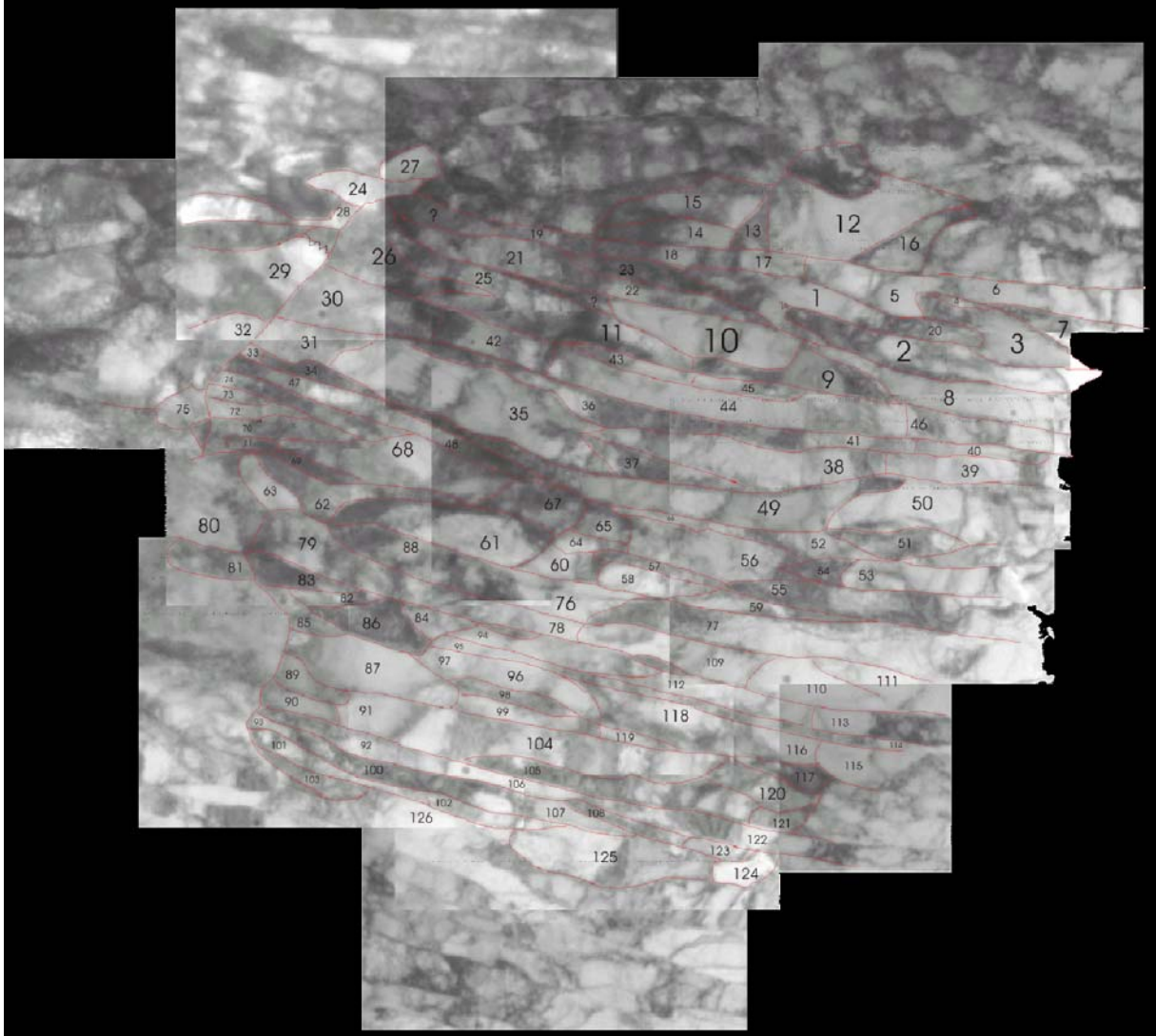
10.00 µm = 100 steps Direction

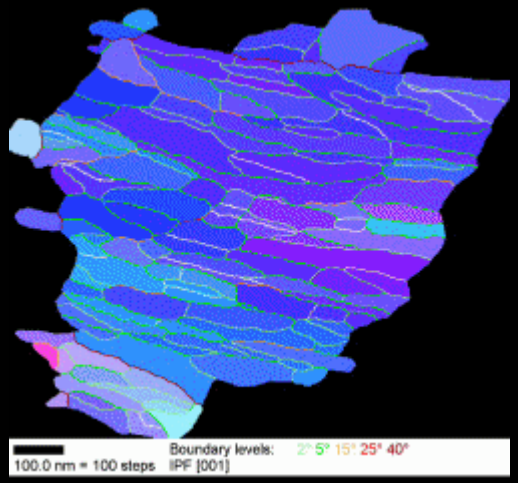
Color Coded Map Type: Crystal Direction

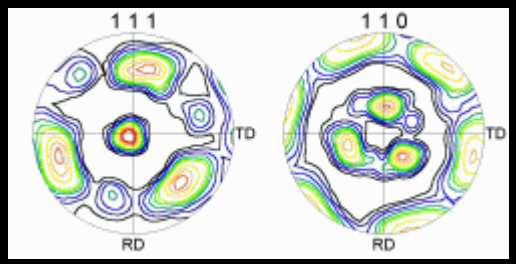
Direction	Min	Max	Total Fraction	Partition Fraction
<1 1 0>||[1 0 0]	0°	10°	0.367	0.367
<1 1 1>||[0 0 1]	0°	10°	0.154	0.154

- beginnende Rekristallisation

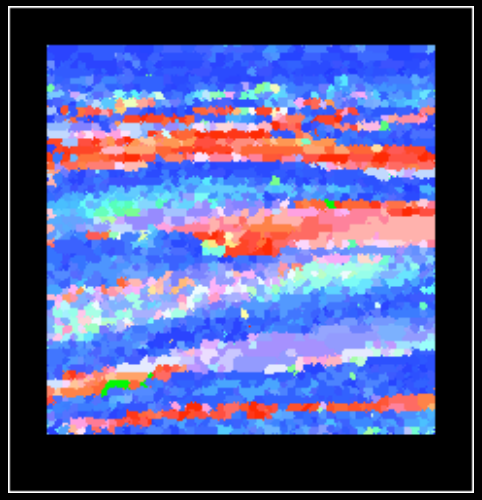
Textur im TEM und Simulation der Keimbildung

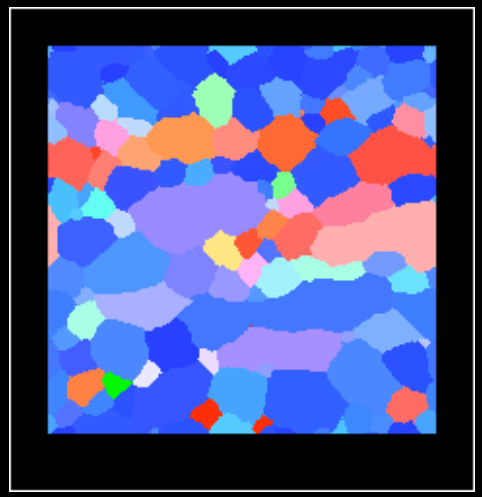


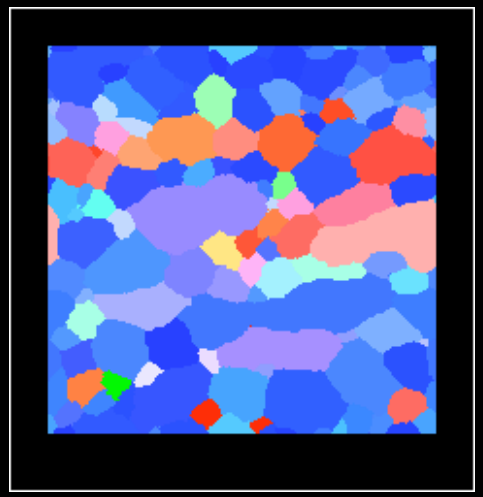




Grundlagen der Rekristallisation, MC - Potts







Statistisches Modell der Rekristallisation

Texture component-Avrami machine for recrystallization

Grain boundary velocity

$$\mathrm{v} = m\,p = m_0 \exp\left(-\frac{Q^{\mathrm{mob}}}{k_{\mathrm{B}}T}\right) p$$

free and corrected volume for homogeneous microstructure

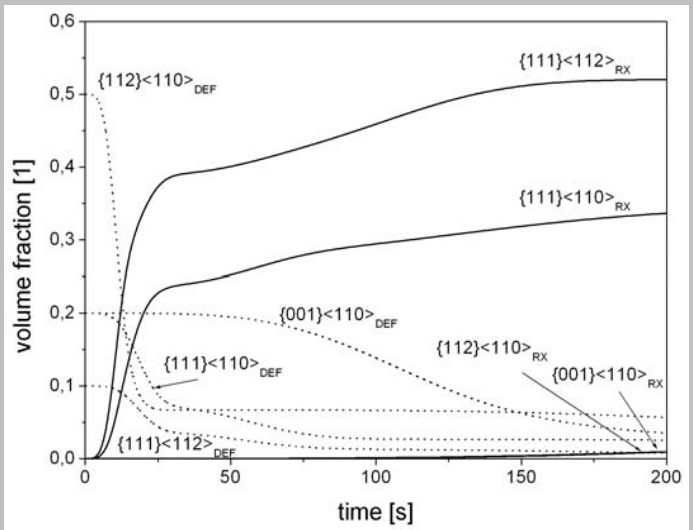
$$\Delta V^{\exp} = N \frac{4}{3}\pi\left((r+\Delta r)^3 - r^3\right) \qquad N = \dot{N}\,\Delta t \qquad \Delta r = \mathrm{v}\,\Delta t$$

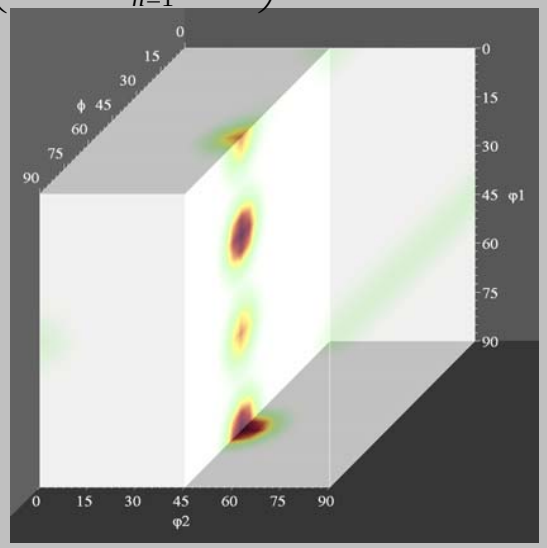
$$X^{\mathrm{RX}} = \left(1-\exp\left(-K\,\dot{N}\,\mathrm{v}^3 t^4\right)\right) = \left(1-\exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^n\right)\right) \qquad \Delta V^{\mathrm{RX}} = X^{\mathrm{def}}\,\Delta V^{\exp} = \left(1-X^{\mathrm{RX}}\right)\Delta V^{\exp}$$

free and corrected volume for heterogeneous microstructure

$$\Delta V_{ij}^{\exp} = N_{ij}\frac{4}{3}\pi\left(\left(\langle r_{ij}\rangle + \langle \Delta r_{ij}\rangle\right)^3 - \langle r_{ij}\rangle^3\right), \quad N_{ij} = \langle \dot{N}_{ij}\rangle \Delta t, \quad \langle \Delta r_{ij}\rangle = \langle \mathrm{v}_{ij}\rangle \Delta t$$

$$\Delta V_{ij}^{\mathrm{RX}} = \left(X_{0\,j}^{\mathrm{def}} - \sum_{n=1}^{n_{\max}} X_{nj}^{\mathrm{RX}}\right)\Delta V_{ij}^{\exp} \qquad *)$$





*) $f^{c}(g) = N^{c}\exp\left(S^{c}\cos\tilde{\omega}\right)$

$$S^{c} = \frac{\ln 2}{1-\cos(b^{c}/2)}$$

$$\mathrm{N}^{c} = \frac{1}{\mathrm{I}_0(\mathrm{S}^{c}) - \mathrm{I}_1(\mathrm{S}^{c})}$$

Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

- Einleitung, Konzept der inneren Variablen
- Thermodynamik
- Plastizität
- Rekristallisation
- Beispiele
- Zusammenfassung

Zusammenfassung

- Materialmodelle auf Basis innerer Variablen
- Gefügesimulation
- Nutzung von Beziehungen zwischen Gefüge und Eigenschaften
- Geschichtsabhängigkeit / Gedächtnis des Werkstoffs
- Grad der Homogenisierung metallkundlich entscheiden
- Numerische Experimente
- Vorhersage auch außerhalb des Anpassungsbereiches
- Kopplung an andere Modelle auf der Basis von Gefügeparametern
- Konstantenfit über Datenfelder physikalisch sinnvoll
- Experimentelle Überprüfbarkeit durch Gefügebeobachtung
- Lokales Engineering
- Schädigung
- Kopplung mehrere Modelle nötig: Thermodynamik / Kinetik + Plastizität + RX / KW

Danksagung und Verbundpartner

- Hirschvogel Umformtechnik GmbH (HiVo)
- Max-Planck-Institut für Eisenforschung (MPIE)
- Georgsmarienhütte GmbH (GMH)
- CDP Bharat Forge GmbH (CDP)
- CPM Gesellschaft für Computeranwendung Prozess- und Materialtechnik mbH (CPM)
- Industrieverband Massivumformung e.V. (IMU)
- BMBF