Simulation des Abkühlungsverzuges von Stahlprofilen

R. Pietzsch

Die vorliegende Arbeit setzt sich mit den Möglichkeiten der Modellierung des Verzuges von Langprofilen aus Stahl bei der Abkühlung auseinander. Es wird ein komplexes thermomechanisches Modell vorgestellt, das den speziellen Anforderungen phasenumwandlungsmechanischer Vorgänge gerecht wird. Beispielhaft wird die zeitliche Entwicklung von Temperaturfeld, Gefüge, Spannungen, Dehnungen und Verzug während des Abschrekkens der Arbeitsfläche eines Drückwerkzeuges berechnet. Die Grundlage des thermomechanischen Materialgesetzes bildet eine erweiterte Plastizitätstheorie nach von Mises mit temperatur- und gefügeabhängiger Fließgrenze. Koppeleffekte wie Dissipation, Phasenumwandlungsplastizität und Phasenumwandlungsenthalpie finden ihre Berücksichtigung.

1 Einführung

Bei der Abkühlung nach Warmform- und Wärmebehandlungsprozessen treten an technischen Werkstücken unerwünschte Gestaltänderungen (Verzug) auf, deren Beseitigung kostenaufwendige Nachbearbeitung erfordert oder gar Werkstücke unbrauchbar macht. Der Verzug tritt bei Langprofilen deutlich sichtbar und besonders negativ in Erscheinung. Für die Modellierung dieser Geometrien bieten sich Vorteile durch die Reduzierung der Problemdimensionalität auf die Querschnittsebene. Die Berechnung der Gestaltänderung eines Werkstücks während einer phasenumwandlungsbegleiteten Abkühlung erfordert, mindestens fünf Feldgrößen im Zusammenhang zu betrachten: Temperatur, Spannungen, Dehnungen, Verschiebungen und Gefüge. Die Berechnungsgleichungen für die physikalischen Feldgrößen werden nachfolgend hergeleitet.



Bild 1: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen zwischen den hauptsächlichen physikalischen Feldgrößen des Verzugsproblems

Auf die Aufbereitung der kontinuumsmechanischen Gleichungen für numerische Lösungsverfahren wird in dieser Publikation aus Platzgründen verzichtet. Weitere Ausführungen dazu findet man in Pietzsch, (2000). Ziel dieser Arbeit ist es, mit einer spezialisierten Kontinuumsmechanik die mikroskopischen Vorgänge während der Phasenumwandlungen makroskopisch zu erfassen und insbesondere die Gestaltänderung von Werkstücken aus Stahl bei der Abkühlung effizient zu berechnen.

2 Wärmeleitung mit Festkörperphasenumwandlungen

Der Zugang zur Temperaturfeldberechnung führt über die Bilanz der inneren Energie v, die dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik entspricht, und dem Massenerhaltungssatz. Es wird die vollständige Änderung der Größen im gesamten Volumen erfasst:

$$\int_{V} (\rho \upsilon dV) = -\int_{A} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_{A} dA + \frac{1}{2} \int_{V} \mathbf{T} \cdot \mathbf{E} dV + \int_{V} \rho \mu dV$$
(1)

$$\int_{V} (\rho dV) = 0$$
⁽²⁾

Die Bilanzterme der linken Seiten lassen sich mit der substanziellen Ableitung des Volumenelementes

$$(dV) = div\mathbf{v}dV \tag{3}$$

weiter aufbereiten. Der Massenerhaltungssatz (2) lautet damit:

$$\int_{V} (\dot{\rho} + \rho \, div \mathbf{v}) dV = 0 \tag{4}$$

und die substanzielle Ableitung der inneren Energiedichte (1):

$$\int_{V} (\rho \upsilon dV) = \int_{V} \rho \upsilon dV$$
(5)

Um den Übergang von der inneren Energie als Bilanzgröße zur Temperatur zu vollziehen, sind zwei Materialgleichungen nötig. Die kalorische Zustandsgleichung:

$$\omega = \upsilon(\Theta, \dots) \tag{6}$$

und das Fouriersche Wärmeleitgesetz, in diesem Fall für isotrop wärmeleitendes Material:

$$\mathbf{q} = -\lambda \mathbf{I} grad\Theta \tag{7}$$

Der grundlegende Zusammenhang zwischen Temperatur Θ und innerer Energie v ist die Definitionsgleichung der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Volumen c_v :

$$c_v = \frac{\partial v}{\partial \Theta}\Big|_{\rho = const}$$
(8)

Ein analoger Zusammenhang besteht zwischen der Enthalpie h und der Temperatur. In diesem Falle ist der Druck oder besser der Spannungszustand konstant:

$$c_p = \frac{\partial h}{\partial \Theta} \bigg|_{\mathbf{T} = const}$$
⁽⁹⁾

Diese partielle Ableitung wird als spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck bezeichnet. Zwischen innerer Energie und Enthalpie besteht der bekannte Zusammenhang

$$\upsilon = h + \frac{1}{\rho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{E}^{re\upsilon} \tag{10}$$

 E^{rev} ist der reversible (z.B. der elastische) Anteil des Dehnungstensors. Die substanzielle Zeitableitung aus (5) lässt sich durch die Beziehung (10) weiter entwickeln:

$$\dot{\rho \upsilon} = \dot{\rho h} + \rho \left(\frac{1}{\rho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{E}^{re\upsilon}\right) = \dot{\rho h} + di\upsilon \mathbf{v} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{E}^{re\upsilon}) + \mathbf{T} \cdot \mathbf{E}^{re\upsilon} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{E}^{re\upsilon}$$
(11)

Die substanzielle Ableitung der Enthalpiedichte für ein Gemisch aus *n* Phasen, die mit der Geschwindigkeit ξ_i ineinander umwandeln, ist

$$\rho \dot{h} = \rho \left[\frac{\partial h}{\partial \Theta} \dot{\Theta} + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial h}{\partial \xi_{i}} \dot{\xi}_{i} \right]$$
(12)

 ξ_i sind die Fraktionsanteile der *n* Komponenten

-

.

$$\sum_{i=1}^{n} \xi_{i} = 1$$
(13)

aus denen das Stoffgemisch besteht. Vorteilhafterweise berechnet man die Mischungsdichte und die Mischungsenthalpie aus einer linearen Mischungsregel, also mittels

$$h = \xi_1 h_1 + \xi_2 h_2 + \dots + \xi_n h_n \qquad \text{und} \qquad \rho = \xi_1 \rho_1 + \xi_2 \rho_2 + \dots + \xi_n \rho_n \tag{14}$$

Setzt man diese Beziehungen in (12) ein, so erhält man unter Berücksichtigung von (9) und (13)

$$\rho \dot{h} = \bar{\rho} \overline{c_p} \dot{\Theta} + \bar{\rho} \sum_{i \neq j}^{n} (h_i - h_j) \dot{\xi}_i$$
(15)

Die partielle Ableitung der Enthalpie, die mit Hilfe von (13) als Enthalpiedifferenz dargestellt werden kann

$$\frac{\partial h}{\partial \xi_i} = \Delta h_{ij} = h_i - h_j \tag{16}$$

wird als Phasenumwandlungsenthalpie bezeichnet. Das ist die partielle Ableitung der Enthalpie nach den Phasenanteilen. Die Umwandlungskinetik ξ_i muss bekannt sein, Θ ist der gesuchte Beitrag zur Temperaturfeldgleichung. An dieser Stelle endet die Aufbereitung des ersten Materialgesetzes (6). Es bleibt die Aufgabe, das Oberflächenintegral aus (1) mit Hilfe des Fourierschen Wärmeleitgesetzes (7) zu detaillieren. Die integrale Darstellung der Energiebilanz ermöglicht die Einbeziehung der Randbedingungen in die Gleichung. Bei lokaler Formulierung ist die Definition zusätzlicher Gleichungen erforderlich. Ingenieurtechnisch unterscheidet man im Hinblick auf die Randbedingungen zwischen der Wärmeübertragung durch Strahlung auf die Körperaußenfläche A_s und durch Konvektion an der Fläche A_k , die durch folgende Beziehungen modelliert werden können:

$$\int_{A_s} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_A dA = \int_{A_s} (k_1 (\Theta + 273)^4 + k_2) dA$$
(17)

$$\int_{A_k} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_A dA = \int_{A_k} \alpha(\Theta - \Theta_u) dA \tag{18}$$

Die Konstanten k_1 und k_2 hängen davon ab, ob die Flächenteile nur mit der Umgebung, oder auch untereinander im Strahlungsaustausch stehen. Das in (1) verbleibende Oberflächenintegral kann mit Hilfe des Gaußschen Satzes in ein Volumenintegral umgeformt werden:

$$\int_{A} \lambda grad\Theta \cdot \mathbf{n}_{A} dA = \int_{V} div(\lambda grad\Theta) dV$$
⁽¹⁹⁾

Die Bilanzgleichung (1) lässt sich nun als eine Berechnungsgleichung für das Temperaturfeld darstellen:

$$\int_{V} \left(\bar{\rho} c_{p} \dot{\Theta} + \bar{\rho} \sum_{i \neq j}^{n} (h_{i} - h_{j}) \dot{\xi}_{i} \right) dV = \int_{V} div (\lambda grad\Theta) dV + \int_{V} (\mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{E}}^{irr} - (\mathbf{T} div\mathbf{v} + \dot{\mathbf{T}}) \cdot \mathbf{E}^{rev}) dV + \dots$$
(20)
+
$$\int_{V} \bar{\rho} \mu dV + \int_{A_{s}} (k_{1} (\Theta + 273)^{4} + k_{2}) dA + \int_{A_{k}} \alpha (\Theta - \Theta_{u}) dA$$

Der elastische Koppelterm $-(Tdivv + T) \cdot E^{rev}$ kennzeichnet z.B. den Sachverhalt, dass eine adiabate elastische Expansion zur Abkühlung des Körpers führt. Nach Sluzalec, (1992) muss er nur dann aktiviert werden, wenn sehr schnelle thermoelastische Vorgänge unter hohen Spannungen modelliert werden sollen. Die Spannungsleistung der irreversiblen Dehnungen $T \cdot E^{irr} \ge 0$ bezeichnet man als Dissipation mechanischer Energie.

3 Phasenumwandlungskinetik

Die Notwendigkeit der Modellierung der Phasenumwandlungskinetik folgt bereits aus den Erläuterungen des vorangehenden Abschnittes. Doch auch für die Modellierung der mechanischen Vorgänge während der Umwandlung ist die Kenntnis der Umwandlungskinetik Bedingung. Die Umwandlungstemperaturen für Stahl bei unendlich langsamer Abkühlung sind durch das FeC- Gleichgewichtsdiagramm gegeben. Diese Temperaturen können mit Hilfe der Gleichgewichtsthermodynamik berechnet werden. Dagegen ist die Berechnung der Umwandlungszeitpunkte bei erheblich forcierter Abkühlung praktisch nicht mehr möglich.



Bild 2: Das Fe-M₃C- Gleichgewichtsdiagramm als zeitlicher Grenzzustand für die Lage der Umwandlungstemperaturen bei unendlich langsamer Abkühlung.

Gleichgewichtsumwandlungen sind von einer vollständig ablaufenden Diffusion des Kohlenstoffs von den Stellen in der kfz- Gittermodifikation zu den Stellen in der krz- Gittermodifikation gekennzeichnet. Bei beschleunigter Abkühlung wird die Diffusion immer mehr gebremst. Um die Lage der Umwandlungsgrenztemperaturen für die technische Anwendung zu dokumentieren, haben sich die experimentell erstellten Zeit- Temperatur- Umwandlungsschaubilder (ZTU) mit logarithmischer Zeitachse durchgesetzt. Die Einbeziehung der Umwandlungskinetik in das thermomechanische Modell

•

$$\xi = \xi(\Xi, \Xi, \Theta, \Theta, \mathbf{T}, \mathbf{E}^p)$$
⁽²¹⁾

bewirkt, dass das gekoppelte Feldproblem geschichtsabhängig wird, d.h. der aktuelle Temperatur- Spannungs-Dehnungszustand kann nur durch Zeitintegration gewonnen werden. Die Lage der Umwandlungstemperaturen im ZTU wird durch Legierungselemente, thermische und mechanische Vorbehandlung beeinflusst. Darüber hinaus beeinflussen die Größen Spannung, plastische Verformung und Abkühlungsweg die Umwandlungskinetik.

Das mathematische Modell einer diffusiven Phasenumwandlung benötigt als Referenzzustand für jeden Stahl und jede thermische Vorbehandlung eine isotherme Umwandlungskinetik. Für die isotherme Prozessführung ist es möglich, eine diffusive Umwandlung durch die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung zu beschreiben:

$$\xi_i = \xi_i^G (1 - \mathbf{e}^{-a_i \tau^o}) \tag{22}$$

 $\xi_i^G \leq 1$ ist der Fraktionsanteil im Gleichgewichtszustand. Dieser Parameter, wie auch $a_i(\Theta)$ und $b_i(\Theta)$ werden in der Materialdatenbank hinterlegt. Trägt man (22) für alle Fraktionen in ein $\Theta/\log \tau$ -Diagramm ein, erhält man eine räumliche Kurvenschar, wie in Bild 3 links dargestellt.

Aus der isothermen Referenzkinetik wird die Kinetik der kontinuierlichen Abkühlung errechnet. Das Modell besteht wie der natürliche Vorgang aus zwei Phasen: der Inkubation und dem Kornwachstum. Die Inkubation ist nach Scheil, (1935) abgeschlossen, wenn gilt

$$\int_{0}^{\tau} \frac{1}{\tau^{s}(\Theta)} d\tau = 1$$
⁽²³⁾

 τ^s ist die Zeit bis zum Erreichen der 1%- Grenzkurve im ZTU für die isotherme Umwandlung. Den Zuwachs der neuen Fraktion zum Zeitpunkt $\tau + \Delta \tau$ während der Kornwachstumsphase berechnet man folgendermaßen: aus dem Fraktionsanteil zum Zeitpunkt τ wird aus Gleichung (22) eine fiktive Reaktionszeit τ' bestimmt. Die kinetischen Konstanten gelten für die Temperatur zum aktuellen Zeitpunkt $\tau + \Delta \tau$:

$$\tau' = \left[-\frac{1}{a_i} \ln \left(1 - \frac{\tau_{\xi_i}}{\xi_i^G} \right) \right]^{\frac{1}{b_i}}$$
(24)

Die fiktive Zeit τ' wird um die aktuelle Schrittweite vergrößert und ein fiktiver Fraktionsanteil berechnet:

$$\tau + \Delta \tau \xi_i' = 1 - \mathbf{e}^{-a_i(\tau' + \Delta \tau)'}$$
(25)

Der Wert muss noch korrigiert werden, denn der Zuwachs wird durch die Abnahme des Restaustenits ξ_A und durch die eigene Zunahme zusätzlich gebremst:

$${}^{\tau+\Delta\tau}\xi_i = (\xi_i^G \cdot {}^{\tau+\Delta\tau}\xi_i' - {}^{\tau}\xi_i)(\xi_A + {}^{\tau}\xi_i) + {}^{\tau}\xi_i$$
(26)

Die Einbeziehung des Spannungszustandes in die Kinetik der diffusiven Umwandlung wird in Denis u.a., (1987) erläutert.

Einfacher ist die Berechnung des Fraktionszuwachses bei martensitischer Umwandlung. Die Inkubationsschwelle ist überschritten, wenn die Temperatur die Martensitbildungstemperatur Θ_{Ms} unterschreitet. Die Menge des gebildeten Martensits hängt nicht mehr von der Zeit, sondern nur noch von der Temperatur und von der Menge der bereits gebildeten ferritischen Fraktionen ab. Berechnet wird der Martensitanteil mittels der Gleichung nach Koistinen und Marburger (1959). ξ_f ist die Summe der Anteile an Bainit, Ferrit und Perlit.

$$\xi_{M} = (1 - \xi_{f})(1 - e^{-a(\Theta_{Ms} - \Theta)})$$
(27)



Bild 3: Darstellung einer Kinetik bei isothermer Umwandlung (li) und bei kontinuierlicher Abkühlung

4 Fließgrenzen- Plastizität nach von Mises bei Temperatur- und Gefügeänderungen

Für eine effiziente Modellierung phasenumwandlungsmechanischer Probleme hat sich die additive Zerlegung des Dehnratentensors durchgesetzt :

$$\dot{\mathbf{E}} = \dot{\mathbf{E}}^e + \dot{\mathbf{E}}^{\Theta,\Xi} + \dot{\mathbf{E}}^p + \dot{\mathbf{E}}^{PUP}$$
(28)

 \mathbf{E}^{e} bezeichnet den elastischen, $\mathbf{E}^{\Theta,\Xi}$ den umwandlungsthermischen, \mathbf{E}^{p} den plastischen und \mathbf{E}^{PUP} den phasenumwandlungsplastischen Anteil des Dehnungstensors. Die ersten beiden Anteile sind reversible, die restlichen irreversible Verformungen.

Um plastisches Materialverhalten infolge des Überschreitens der globalen Spannung über eine Fließgrenze zu modellieren, werden drei grundlegende Modellkomponenten benötigt:

• eine Fließkurve $\sigma_y(\mathbf{T}, \mathbf{E}^p, \Theta, \Xi)$ und eine Fließbedingung (nach Huber-Hencky-von Mises, HMH)

$$F(\mathbf{T}, \mathbf{E}^{p}, \Theta, \Xi) = \sqrt{\frac{3}{2}}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) - \sigma_{y}(\mathbf{T}, \mathbf{E}^{p}, \Theta, \Xi) = 0$$
⁽²⁹⁾

• eine Fließregel, die die Richtung des Fließens festlegt. (Normalenregel)

$$\dot{\mathbf{E}}^{p} = \dot{\eta} \sqrt{\frac{3}{2}} \mathbf{N} = \dot{\eta} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{S}}{||\mathbf{S}||} \quad \text{mit } \dot{\eta} \text{ als plastischem Multiplikator}$$
(30)

• ein Verfestigungsgesetz, das die Verschiebung der Fließfläche in Abhängigkeit von der Belastungsgeschichte dokumentiert.

Im Fall plastischen Fließens muss neben (29) auch die Konsistenzbedingung (isotropes Verfestigungsverhalten)

$$\dot{F} = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \dot{\mathbf{T}} + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{E}^{p}} \dot{\mathbf{E}}^{p} + \frac{\partial F}{\partial \Theta} \dot{\Theta} + \sum_{i} \frac{\partial F}{\partial \xi_{i}} \dot{\xi}_{i} = 0$$
(31)

gelten. Mit der plastischen HMH- Vergleichsverzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\epsilon}^{p}$ nach Gleichung (34) und dem isotherm- isonären Verfestigungsparameter

$$\zeta = \frac{\partial \sigma_y}{\partial \varepsilon^p} \bigg|_{\Theta, \Xi = const}$$
(32)

kann die Fließregel für den umwandlungsthermischen Fall formuliert werden:

$$\dot{\mathbf{E}}^{p} = \frac{3}{2\zeta} \left(\mathbf{N} \cdot \dot{\mathbf{T}} - \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{\partial \sigma_{y}}{\partial \Theta} \dot{\Theta} + \sum_{i} \frac{\partial \sigma_{y}}{\partial \xi_{i}} \dot{\xi}_{i} \right) \right) \mathbf{N}$$
(33)

Man erkennt, dass das Fließverhalten durch die Temperatur und die Gefügezusammensetzung gleichermaßen direkt beeinflusst wird.

5 Verfestigungsverhalten bei Gefügeumwandlungen im Stahl

Die Gefügebestandteile des Stahls weisen unterschiedliches Verfestigungsverhalten auf. Austenit neigt mehr zu isotropem, die ferritischen Fraktionen eher zu kinematischem Verhalten. Für die Formulierung der Fließregel (33) wurde isotrope Verfestigung angenommen. Um kinematisches Verhalten zu modellieren, ist die Zuhilfenahme einer tensoriellen Geschichtsvariablen Σ (Rückspannungstensor) notwendig, die die Verschiebung der Fließfläche dokumentiert. Für ein kombiniertes Verfestigungsmodell, bestehend aus dem Satz Entwicklungsgleichungen:

$$\dot{\varepsilon}^{p} = \vartheta \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\mathbf{E}}^{p} \cdot \dot{\mathbf{E}}^{p}} \quad \text{und} \qquad \dot{\Sigma} = (1 - \vartheta) f(\sigma_{y}) \dot{\mathbf{E}}^{p}$$
(34)

bedeutet das, dass sich der Parameter ϑ während der Austenit- Perlitumwandlung von 1 zu 0 verändert. Die bedeutenden gestaltändernden plastischen Verformungen bei einer Abkühlung erfährt das Material im austenitischen Zustand. Dabei wird jedoch keine Rückspannung akkumuliert, denn Austenit weist isotropes Verfestigungsverhalten auf. Kommt es nun zum Rückfließen im ferritischen Zustand, so hat das Material zwar kinematisches Verfestigungsverhalten, aber trotz der vorangegangenen Belastungsgeschichte wurde keine Rückspannung akkumuliert. Aus diesem Grund ist die Annahme des isotropen Verfestigungsmodells realitätstreuer als die des kinematischen, sofern nicht die Kombination beider Modelle (34) zur Anwendung kommt.

6 Umwandlungsthermische Dehnung

. ____

Zur Berechnung der thermischen Dehnung verwendet man im Allgemeinen einen linearen Zusammenhang zwischen Temperatur und Dehnungstensor. Der tensorielle Proportionalitätsfaktor β wird als Temperaturdehnungskoeffizient bezeichnet. Im Falle isotroper Thermodillatation ist es ein Kugeltensor βI .

$$\mathbf{E}^{\Theta} = \boldsymbol{\beta}(\Theta - \Theta^0)\mathbf{I} \tag{35}$$

Dieses Berechnungsverfahren der thermischen Dehnung beinhaltet eine Linearisierung (Betten, 1993) und erfordert unter Umständen eine Umrechnung auf unterschiedliche Referenztemperaturen.

Ein alternatives Berechnungsverfahren bedient sich der Temperaturabhängigkeit der Dichte (Pietzsch, 2000). Die Beziehung erfasst gleichermaßen die thermische und die Umwandlungsdehnung :

$$\mathbf{E}^{\Theta} = \left(\sqrt[3]{\left(\frac{\rho^{0}}{\rho}\right)} - 1 \right) \mathbf{I}$$
(36)

Die zeitliche Änderung der Dehnung setzt sich aus dem thermischen und dem gefügebezogenen Anteil zusammen. Für ein Dreistoffgemisch $\Xi = \langle \xi_1, \xi_2, \xi_3 \rangle$ und mit einer nach dem linearen Mischungsgesetz (14) ermittelten Dichte ρ ist die umwandlungsthermische Dehnrate

$$\dot{\mathbf{E}}^{\Theta,\Xi} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial \mathbf{E}^{\Theta}}{\partial \xi_{i}} \dot{\boldsymbol{\xi}}^{i} - \frac{\partial \mathbf{E}^{\Theta}}{\partial \Theta} \dot{\boldsymbol{\Theta}}$$
(37)

oder konkreter:

$$\dot{\mathbf{E}}^{\Theta,\Xi} = -Y_{\rho} \left[\dot{\xi}_{1}\rho_{1} + \dot{\xi}_{2}\rho_{2} + \dot{\xi}_{3}\rho_{3} - \left(\xi_{1} \frac{d\rho_{1}}{d\Theta} + \xi_{2} \frac{d\rho_{2}}{d\Theta} + \xi_{3} \frac{d\rho_{3}}{d\Theta} \right) \dot{\Theta} \right] \mathbf{I} \quad \text{mit} \quad Y_{\rho} = \frac{1}{3} \frac{\rho^{0}}{\rho^{0}} \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho^{0}} \right)^{2}$$
(38)

7 Umwandlungsplastische Dehnung

Die Phasenumwandlungsplastizität (PUP) ist eine zusätzliche irreversible Verformung, die beim Durchlaufen einer Phasenumwandlung in Erscheinung tritt. Die Verformung tritt selbst dann auf, wenn die globale Spannung keine der Fließgrenzen der Einzelphasen überschreitet. Die PUP hat den Charakter einer mechanischen Plastizität, das Fließen erfolgt in Richtung des Spannungsdeviators **S**. Die Fließgeschwindigkeit ist proportional zur Phasenumwandlungsrate:

$$\dot{\mathbf{E}}^{PUP} = P(\boldsymbol{\xi})\dot{\boldsymbol{\xi}}\mathbf{S}$$
(39)

Die Gleichung charakterisiert das makroskopische Materialverhalten, das durch mikromechanische Vorgänge bestimmt wird. Der Proportionalitätsfaktor ist zusätzlich funktionell von der Umwandlungsfraktion und vom Greenwood-Johnson-Koeffizienten Λ (Greenwood und Johnson, 1965) abhängig, der im Allgemeinen experimentell bestimmt werden muss. Beispielhaft kann die Beziehung für den Proportionalitätsfaktor mit

$$P(\xi) = -\frac{3}{2} \cdot \Lambda \cdot \ln \xi \qquad \text{mit} \quad \Lambda = \frac{5}{6} \frac{\delta}{\sigma_{\nu A}} \quad \text{und} \qquad \delta = \frac{\rho_A - \rho_P}{\rho_A} \tag{40}$$

angegeben werden, wobei δ das Volumenverhältnis der umwandelnden Phasen A, P (z.B. Austenit, Perlit) ist und σ_{vA} die Fließgrenze der weicheren Phase (zumeist Austenit) bei der Umwandlungstemperatur. Mikromechanisch lässt sich die Erscheinung an einer idealisierten kugelförmigen Ausscheidung der neuen Phase in der weichen Ursprungsmatrix erklären. Im Fall der martensitischen Umwandlung handelt es sich grundsätzlich um den gleichen mikromechanischen Vorgang, auch wenn die Martensitausscheidungen eher längliche Form haben und dadurch mikroskopische Anisotropien bewirken. Die entstehende Phase hat ein größeres Volumen und eine höhere Festigkeit als die Grundmatrix. Um die Ausscheidung, die nicht plastisiert, bildet sich eine plastische Zone aus. Wird nun eine makroskopische Spannung überlagert, so kommt eine messbare plastische Verformung des makroskopischen Umwandlungsgebietes zustande. Der Erscheinung der PUP kommt eine herausragende Bedeutung bei der Modellierung umwandlungsmechanischer Prozesse zu. Die größten irreversiblen Gestaltänderungen bei einer Abkühlung mit Phasenumwandlungen werden durch diese Erscheinung hervorgerufen. Mit einem einfachen Experiment kann man den Effekt der Phasenumwandlungsplastizität visualisieren. Ein ca. 200mm langer Vierkantstab 🗆 10 aus Schmiedestahl wird auf eine Temperatur oberhalb der Austenitisierungsgrenze erwärmt und bei dieser Temperatur kurzzeitig austenitisiert. Ein Ende des Stabes wird fest, das andere Ende in eine Verdreheinrichtung eingespannt. Die Enden kühlen sofort ab, die Mitte des Stabes bleibt glühend. Nun wird der Stab mehrmals um die Stablängsachse tordierd, die Temperatur in Stabmitte darf dabei die Phasenumwandlungstemperatur noch nicht unterschreiten. Nach der Abkühlung kann man die Dichte der Verwindungen betrachten. Die Verwindungsdichte ist symmetrisch zur Stabmitte. Beginnend von der Mitte erweitern sich die Windungen zunächst, denn die Temperatur sinkt zu den Stabenden hin ab und die Fließgrenze steigt. Am Stabende finden sich Bereiche mit hohen Verwindungsdichten. Diese Bereiche befanden sich zum Zeitpunkt der Torsion in der Phasenumwandlung.



Bild 4: Demonstration der Umwandlungsplastizität am Beispiel eines glühend verdrillten Rechteckstabes

8 Thermo-elasto-umwandlungsplastisches Materialgesetz

Die Beziehungen zwischen Spannungen T und Dehnungen E dienen dazu, das mechanische Materialverhalten zu modellieren. Mit der Zerlegung des Dehnratentensors (28) lässt sich das elastische Stoffgesetz $T = C^{e} \cdot E^{e}$ geschwindigkeitsbezogen aufstellen:

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^{e} \cdot (\dot{\mathbf{E}} - \dot{\mathbf{E}}^{p} - \dot{\mathbf{E}}^{\Theta,\Xi} - \dot{\mathbf{E}}^{PUP}) + \dot{\mathbf{C}}^{e} \cdot \mathbf{E}^{e}$$
(41)

Der Korrekturterm berücksichtigt die Änderungen der elastischen Eigenschaften :

$$\mathbf{T}^* = \dot{\mathbf{C}}^e \cdot \mathbf{E}^e = \left[\frac{\partial \mathbf{C}^e}{\partial \Theta} \dot{\Theta} + \sum_i \frac{\partial \mathbf{C}^e}{\partial \xi_i} \dot{\xi}_i\right] \mathbf{E}^e$$
(42)

Die weitere Entwicklung eines konsistenten Materialgesetzes wird in Sluzalec, (1992) und Pietzsch, (2000) gezeigt. Man erhält im Ergebnis das Materialgesetz für den Fall plastischen Fließens in der Form

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^{ep} [\dot{\mathbf{E}} - \dot{\mathbf{E}}^{\Theta,\Xi} - \dot{\mathbf{E}}^{PUP}] + K_L \left(\frac{2}{3}\sigma^{HM}D\sigma_y - \mathbf{S}\cdot\mathbf{T}^*\right) + \mathbf{T}^* \quad \text{mit} \quad K_L = \frac{3G}{\left(\sigma^{HM}\right)^2 \left(2G + \frac{2}{3}\zeta\right)}$$
(43)
und dem Zuwachs der Fließspannung $D\sigma_y = \frac{\partial\sigma_y}{\partial\Theta} + \sum_i \frac{\partial\sigma_y}{\partial\xi_i} \dot{\xi}_i$.

Für den elastischen Fall gilt Gleichung (41) ohne plastischen Dehnungsanteil. C^{*ep*} ist der elastoplastische Stoffoperator, der auf die elastische Stofftetrade zurückgreift und vom aktuellen Spannungszustand abhängt:

$$\mathbf{C}^{ep} = \mathbf{C}^{e} - 2GK_{L}(\mathbf{S} \otimes \mathbf{S}) \tag{44}$$

9 Verzerrungs-Verschiebungsbeziehungen und Verzug

Der Verzug ist ein Ergebnis der Lösung der linearisierten Verzerrungs-Verschiebungs-Beziehungen

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(grad\mathbf{u} + grad^{t}\mathbf{u}) \tag{45}$$

mit Hilfe eines Finite-Elemente-Ansatzes. Die Linearisierung ist trotz der großen Verschiebungen statthaft, sofern die Belastungen (Temperaturfeld etc.) über die Länge des Stabes hinweg konstant sind (Pietzsch, 2000). Der Dehnungstensor erhält in diesem Falle eine Form, die als verallgemeinerter ebener Verzerrungszustand bezeichnet wird:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & 0\\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \mathbf{e}_{i \otimes \mathbf{e}_{i}}$$
(46)

Der Verzug selbst wird als Parabel in Stablängsrichtung z angegeben:

$$w_x = a_x z^2 \qquad \text{und} \qquad w_y = a_y z^2 \tag{47}$$

In Diagrammen, die die zeitliche Entwicklung des Verzuges über einen Zeitraum hinweg darstellen, werden die Parabelvorfaktoren a_x und a_y in der Einheit [1/m] eingetragen, Bild 8. In Pietzsch, (2000) wird gezeigt, wie aus den Parabelvorfaktoren der Krümmungskreis ermittelt wird.

10 Simulation eines Härtevorgangs, Ermittlung des Verzuges

Als praktisches Beispiel dient der Vorgang des Wasserbadhärtens der Arbeitsfläche eines Drückwerkzeuges, wie es in Blechabkantmaschinen zum Einsatz kommt. Der Querschnitt ist aus dem nachfolgenden Bild ersichtlich, als Material wird ein perlitischer, niedriglegierter Stahl XC80 angenommen. Das Abschrecken beginnt nach vollständiger Austenitisierung bei 800°C. Dazu wird die Schiene, wie im Bild 5 links angedeutet, in ein Wasserbad getaucht.



Bild 5: Querschnitt mit Betrachtungspunkten und Eintauchtiefe im Wasserbad (links), Temperaturabhängigkeit des Wärmeübergangs beim Abschrecken im Wasserbad (rechts)

Für eine realitätstreue Simulation des Härtens in Flüssigkeitsbädern ist es außerordentlich wichtig, die Abhängigkeit des Wärmeübergangskoeffizienten von der Oberflächentemperatur zu kennen. Dieser hängt entscheidend von den Wärmeleiteigenschaften des Dampffilmes und von der Temperatur seines Zusammenbruchs (Leidenfrostpunkt) ab. Eine weitgehend realistische Kurve wird im Bild 5 rechts wiedergegeben. Das Bild 6 zeigt den Temperaturverlauf in den gekennzeichneten Punkten des Querschnitts. Bereits nach ca. 4s beginnt an der gesamten Eintauchfläche die martensitische Umwandlung. Aus dem rechten Teilbild erkennt man die Einhärtetiefe oder den Martensitgehalt im Querschnitt.

Interessant ist die Entwicklung der plastischen Zonen in Zusammenhang mit der Achslängsspannung (Bild 7). Vorzugsweise bilden sich plastische Zonen im Austenit direkt neben einer umwandelnden Zone aus. Dadurch liegen diese Gebiete parallel zu den Umwandlungszonen. Nach Beendigung des Abkühlvorgangs befindet sich kein Punkt mehr im Zustand plastischen Fließens. Die dominierende Spannung ist jene in Achslängsrichtung. Das Restspannungsmaximum liegt bei 500MPa (Zug), das Minimum bei 600MPa (Druck).



Bild 6: Temperaturverlauf in den Betrachtungspunkten (links) und Martensitgehalt im Gefüge (rechts)



Umwandlung des Gefüges (Konturen), umwandelnde Zonen (schwache Punkte), plastische Zonen (dicke Punkte)



Das berechnete Verzugsverhalten entspricht den Erwartungen. Beim Eintauchen des glühenden Profils in das Wasserbad krümmt es sich zunächst in Badrichtung. Mit dem Einsetzen der Martensitumwandlung wird das Profil bleibend nach oben gebogen. In Pietzsch, (2000) werden mit dem vorgestellten Berechnungsmodell verschiedene weitere Profile auf ihre Verzugsneigung bei natürlicher und forcierter Abkühlung untersucht.



Bild 8: Form der Werkzeugschiene nach dem Härten (links), zeitliche Entwicklung des Verzuges (rechts)

Danksagung

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die finanzielle Unterstützung meiner Arbeit im Graduiertenkolleg Modellierung, Berechnung und Identifikation mechanischer Systeme (GRK 203).

Formelzeichen

- 1) innere Energie
- h Enthalpie
- ρ Dichte
- innere Wärmequelle μ
- Θ Temperatur
- spezifische Wärmekapazität C_v, C_p
- ξE Volumen-Fraktionsanteil
- Gefügezusammensetzung $\langle \xi_1, \xi_2, ..., \xi_n \rangle$
- Λ Greenwood- Johnson- Faktor
- α Wärmeübergangskoeffizient
- β Temperaturdehnungskoeffizient
- F Fließbedingung

- Т Cauchyscher Spannungstensor
- E linearisierter Verzerrungstensor S
 - Deviator des Spannungstensors
- N Normale zur Fließfläche
- Ι Einheitstensor
- C Stoffoperatoren
- Verschiebungsvektor u
- Geschwindigkeitsvektor v
- Wärmestromvektor q
- Flächennormale n
- ε^p plastische Vergleichsdehnung
- σ_y Fließspannung

Literatur

- 1. Betten, J.: Kontinuumsmechanik: Elasto- Plasto- und Kriechmechanik. Springer, (1993).
- 2. Greenwood, G.W.; Johnson, R.H.: The deformation of metalls under small stress during phase transformation. Proced. R. S. London A283, (1965), 403-422.
- 3. Koistinen, D.P.; Marburger, R.E.: A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite traformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. Acta metallica, 7, (1959), 59-60.
- 4. Olschewski, J.: Script Plastizitätstheorie II. BAM-1.31 92/4, (1992).
- 5. Denis, S.; Gautier, E.; Sjöström, S.; Simon, A.: Influence of stress on the kinetics of pearlitic transformation during continuous cooling. Acta metallica, 35, (1987), 1621-1632.
- Pietzsch, R.: Simulation und Minimierung des Verzuges von Stahlprofilen bei der Abkühlung. Shaker, 6. (2000).
- 7. Scheil: Archiv Eisenhüttenwesen, 8, (1935), 565.
- 8. Sluzalec, A.: Introduction to nonlinear thermomechanics. Springer, (1992).

Anschrift: Dr.-Ing. Robert Pietzsch, Institut für Strömungstechnik und Thermodynamik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg