



IST DIE VORHERSAGE PROZESS- ABHÄNGIGER MIKROSTRUKTUR- ENTWICKLUNG SCHON REALITÄT?

Homogenisiertes Walzbarrengefüge 6xxx

6xxx-Legierung nach Warmwalzen

Mit Beginn des Jahres 2011 wurde Prof. Ernst Kozeschnik in den wissenschaftlichen Beirat der AMAG berufen. AluReport spricht mit ihm über das Thema: „Physikalisch-basierte Modellierung der Ausscheidungsbildung während der Herstellung und Verarbeitung von Al-Legierungen“.

„Die Erkenntnisse aus der Simulation spiegeln sich heute bei AMAG in verbesserten, stabilen Prozessrouten wider.“

Prof. Ernst Kozeschnik, TU Wien

Herr Professor Kozeschnik, Sie leiten seit drei Jahren das Institut für Werkstoffwissenschaft und Werkstofftechnologie an der Technischen Universität in Wien. Welches Fachgebiet repräsentieren Sie dort hauptsächlich?

EK: Ich besetze an der TU Wien den Lehrstuhl für Werkstofftechnik. In diesem weiten Gebiet beschäftige ich mich mit der Modellierung und Simulation von metallkundlichen Prozessen und hier vor allem mit der Ausscheidungsbildung und deren Wechselwirkung mit der Mikrostrukturentwicklung im Werkstoff.

Im Rahmen meiner bisherigen wissenschaftlichen Tätigkeit ist als wesentlicher Output die thermo-kinetische Software MatCalc entstanden, die heute in vielen meiner Forschungsprojekte eine zentrale Rolle spielt.

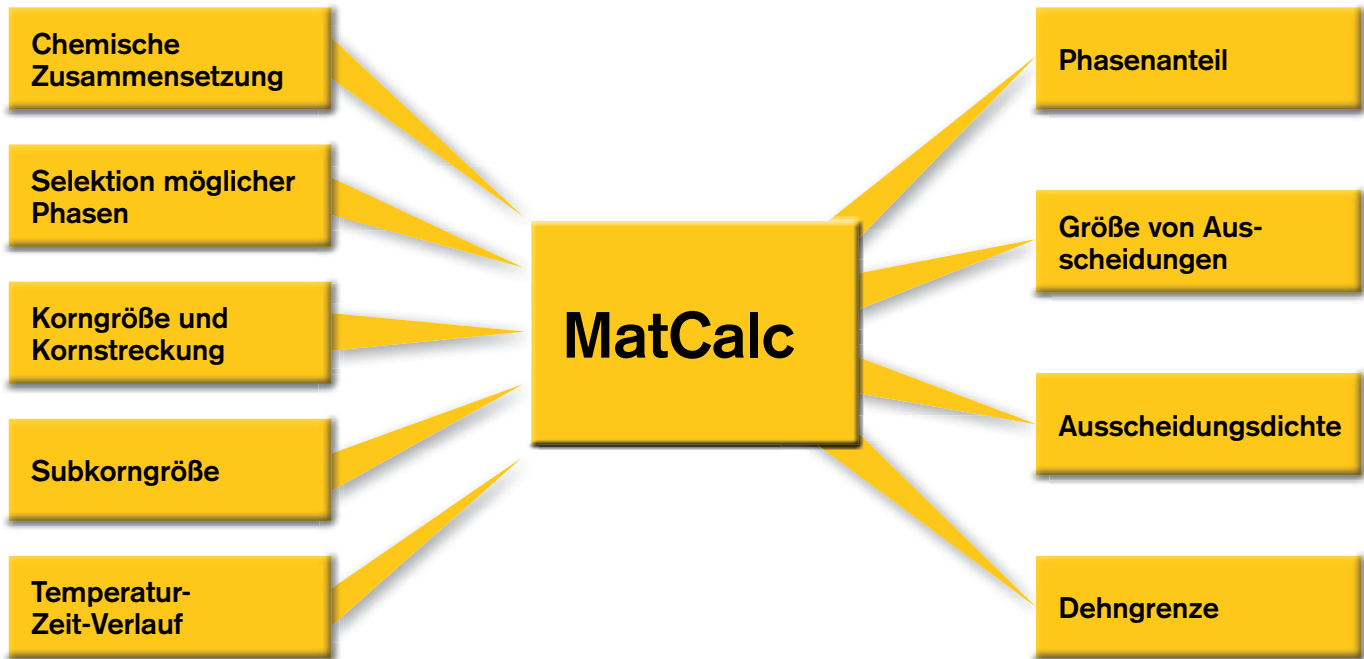
Können Sie in kurzen Worten beschreiben, was man sich unter MatCalc vorzustellen hat?

EK: MatCalc steht für „Materials Calculator“. Der Name bezeichnet die ursprüngliche Vision, die Entwicklung der Mikrostruktur metallischer Werkstoffe im Zuge ihrer Herstellung und ihres Einsatzes mit Hilfe theoretischer Modelle universell beschreiben und vorhersagen zu können. Die Betonung liegt dabei auf „Vorhersage“. Diese wollen wir durch den Einsatz physikalisch-basierter Modelle erreichen, im Gegensatz zu phänomenologischen Beschreibungen.

Wie definieren Sie „physikalisch-basierte Modellierung“? Wie unterscheidet sich Ihr Ansatz von herkömmlichen Simulationstechniken für die Ausscheidungssimulation?

EK: Um einen metallkundlichen Prozess zu simulieren, können einerseits Modelle eingesetzt werden, die mit möglichst einfachen Beziehungen und unter Verwendung von phänomenologischen Parametern den betrachteten Prozess abbilden. Die Bestimmung der Modellparameter geschieht durch experimentelle Ermittlung direkt am abzubildenden Prozess. Ein phänomenologisches Modell beschreibt genau den einen Prozess und muss für jede Abweichung der Prozessparameter wieder neu kalibriert werden. Physikalisch-basierte Modelle können mit elementaren physikalischen Beziehungen und unabhängig von bestimmten Parametern den Prozess beschreiben, ohne das entsprechende Experiment selbst durchführen zu müssen.

Eingaben:



Können Sie uns ein Beispiel nennen, wie eine „physikalisch-basierte Modellierung“ bei der Ausscheidungssimulation vor sich geht?

EK: Um die Ausscheidungsbildung zu beschreiben, ist ein wesentlicher Teil der Modellierung das Wissen über die Beweglichkeit der Atome im Werkstoff. Ausscheidungen wachsen durch Transport von Atomen zu den Ausscheidungen. In der physikalisch-basierten Modellierung wird zuerst die Beweglichkeit der Atome in entsprechenden, unabhängigen Experimenten ermittelt. Danach wird diese Größe in einem Modell eingesetzt, das das Wachstum basierend auf dieser Größe beschreiben kann.

In unserem Fall ist das das parabolische Wachstums-Gesetz. Die Entwicklung der Ausscheidungsgröße kann nun ganz allgemein durch die Mobilität der beteiligten Elemente beschrieben werden, unabhängig davon, um welche Ausscheidung es sich im Detail handelt.

Im Gegensatz dazu wird im phänomenologischen Ansatz ein Gesetz herangezogen, das den Fortschritt eines Umwandlungsprozesses ganz allgemein beschreibt. Im Gegensatz zur Beschreibung des Mechanismus im physikalisch-basierten Ansatz wird

im phänomenologischen lediglich der Fortschritt des Ausscheidungsprozesses beschrieben, ohne auf die zugrunde liegenden Mechanismen einzugehen. Letztlich wird das gewünschte Experiment durchgeführt und die phänomenologischen Parameter so lange variiert, bis Experiment und Simulation in Deckung gebracht wurden.

Wo sehen Sie jetzt den Vorteil Ihres Ansatzes?

EK: Die physikalisch-basierte Modellierung hat als wesentliches Ziel das Erlangen eines genauen Verständnisses über die Vorgänge im Inneren des Werkstoffes. Dadurch kann der direkte Einfluss von Prozessparametern, z. B. der Homogenisierungstemperatur, der Verformungsrate beim Warmwalzen oder der chemischen Zusammensetzung, beschrieben und vorhergesagt werden. Ein phänomenologischer Ansatz ist zwar oft deutlich einfacher anzuwenden, er erlaubt aber diese Form von Introspektion nicht.

Wie wirkt sich der Einsatz Ihres Modellierungsansatzes für die Produktentwicklung bei der AMAG aus?

EK: Als ich vor mehr als drei Jahren angesprochen wurde, den MatCalc Ansatz bei der Prozessmodellierung

von Aluminium einzusetzen, hat sich herausgestellt, dass der grundlegende Einfluss von Abschreckkleeinstellen in allen herkömmlichen Modellierungsansätzen gefehlt hat. Unsere Theoriegruppe hat innerhalb eines Jahres ein entsprechendes theoretisches Modell entwickelt, welches in die MatCalc Software implementiert und schlussendlich auf Prozesse bei AMAG angewendet wurde. Es war uns dadurch möglich, den Einfluss von z. B. Zwischenglühungen auf die kinetischen Prozesse im Werkstoff vorherzusagen zu beschreiben und dadurch grundlegendes Prozessverständnis zu entwickeln. Dieses Know-how spiegelt sich heute in verbesserten, stabilen Prozessrouten wider, die bei der Halbzeugherstellung zum Einsatz kommen.

Wie sehen Sie Ihre Rolle im wissenschaftlichen Beirat der AMAG?

EK: Ich bin kein Werkstofftechnologe, ich bin ausgebildeter Metallphysiker. Dieses Wissen bringe ich in die Diskussionen innerhalb des Beirats, mit AMAG-Mitarbeitern und in AMAG-Projekten beschäftigten Doktoranden ein. Ich neige dazu, auch etablierte Meinungen mit „Ist das wirklich so?“ zu hinterfragen. Dafür ist für mich die physikalisch-basierte Modellierung mit MatCalc das ideale Werkzeug. ■



Prof. Ernst Kozeschnik