

Aachen, 17. Juli 2019



Copyright OpenPhase Solutions GmbH

## AMAP Kolloquium

# Simulation der Mikrostrukturentwicklung ermöglicht neue Einblicke in den Werkstoff

- Multiphysik-Simulationslösung für Metalle mit Phasenfeldmethode
- Evolution von Werkstoffmikrostrukturen lassen sich effizient berechnen
- Optimierung der Mikrostruktur zentrales Ziel der Werkstoffentwicklung

Die Optimierung der Mikrostruktur eines Werkstoffs ist eines der zentralen Ziele der Werkstoffentwicklung und Prozessoptimierung, da sie die Eigenschaften des Werkstoffs auf entscheidende Weise beeinflusst. Die Simulation der Mikrostrukturentwicklung hilft, dieses Ziel zu erreichen, indem sie neue Einblicke in den Werkstoff ermöglicht und den gezielten Einsatz von Experimenten unterstützt. Eine innovative Multiphysik-Simulationslösung für metallische Materialien, basierend auf der Phasenfeldmethode, bietet die Software OpenPhase Studio. Dr. Johannes Görler, Managing Director OpenPhase Solutions GmbH, stellte in seinem Vortrag „OpenPhase – Microstructure simulation in metallic materials“ die neue Lösung im Rahmen der Veranstaltungsreihe AMAP Kolloquium am 4. Juli 2019 in Aachen der Fachöffentlichkeit vor. Eingeladen hatte zu dem Vortrag mit anschließender Diskussion das Open-Innovation Forschungscluster AMAP an der RWTH Aachen University.

Die Phasenfeldmethode wurde bereits vor mehr als 20 Jahren entwickelt, erhält jedoch in letzter Zeit verstärkt Aufmerksamkeit in Materialwissenschaft, Physik und angewandter Mathematik, da sie wie sonst keine andere Methode die Evolution von Werkstoffmikrostrukturen effizient berechnen und vorhersagen kann. Das namensgebende Phasenfeld beschreibt die örtliche und zeitliche Entwicklung der Phasenverteilung in der Mikrostruktur basierend auf dem zentralen freien Energiefunktional. Die Kombination der Phasenfeld-Methode mit der Simulation weiterer physikalischer Effekte, wie z.B. Diffusion, Elastizität, Plastizität und Fluidodynamik ermöglicht die Simulation vielfältiger Materialien und Prozesse. Die gegenseitigen Einflüsse der physikalischen Effekte aufeinander sowie auf das Phasenfeld werden im freien Energiefunktional evaluiert und führen zu einer ganzheitlichen Betrachtung der Materialphysik.

OpenPhase macht sich diese Methode zu Nutze und integriert über einen modularen Aufbau die Simulation der einzelnen physikalischen Phänomene. So ermöglicht das Multikomponenten-Diffusionsmodul z.B. die Simulation von Diffusionsflüssen mit beliebig vielen Elementen und die Verwendung thermodynamischer und kinetischer Daten aus Thermo-Calc® und Open Calphad, sowie aus linearisierten Phasendiagrammen. Das umfangreiche Mechanik Modul löst das mechanische Problem unter Berücksichtigung plastischer Deformation und Schädigung. Weitere Module zur Simulation der Fluidodynamik, des Temperaturfeldes sowie der Nukleation sind außerdem in der Software integriert. Die Funktionalität von OpenPhase steht in zwei unterschiedlichen Softwarelösungen zur Verfügung, OpenPhase Studio und OpenPhase Core. OpenPhase Studio ist eine umfassende Anwendersoftware, die durch ihre intuitive graphische Benutzeroberfläche ein unkompliziertes Setup von OpenPhase Simulationen ermöglicht. Mit der C++-Softwarebibliothek OpenPhase Core erhalten ambitionierte Anwender die Möglichkeit, ihren eigenen OpenPhase Code zu schreiben und die Flexibilität des modularen Aufbaus der Bibliothek zu nutzen.

Die Anwendungen von OpenPhase reichen von der Simulation von Erstarrungsprozessen über Wärmebehandlung bis hin zu mechanischen Tests bzw. Umformprozessen. Ein Beispiel ist die Simulation der Erstarrung in der Magnesiumlegierung AM50. Hier ist die Morphologie der Mikrostruktur, bestehend aus der magnesiumreichen  $\alpha$ - und der aluminiumreichen  $\beta$ -Phase, entscheidend für mechanische Eigenschaften und Korrosionsbeständigkeit. Die Voraussetzung für die Korrosionsbeständigkeit des Materials ist, dass  $\alpha$ -Körner von einer nicht durchbrochenen Schicht der korrosionsbeständigen  $\beta$ -Phase umschlossen werden. Gleichzeitig soll so viel  $\alpha$ -Phase wie möglich in möglichst kleinen Körnern vorliegen, um vorteilhafte mechanische Eigenschaften zu erhalten. Dieses Optimierungsproblem wird durch OpenPhase Simulationen gelöst, indem zunächst die dendritische Erstarrung der  $\alpha$ -Phase aus der Schmelze und anschließend die eutektische Erstarrung zwischen den  $\alpha$ -Dendriten simuliert wird. Hier ergibt sich abhängig von der Abkühlrate eine unterschiedliche  $\alpha$  Korngröße sowie ein unterschiedlich ausgeprägtes Eutektikum und davon abhängig eine ausreichende oder nicht ausreichende Korrosionsbeständigkeit.

Im Anschluss an den Vortrag entwickelte sich eine anregende Diskussion mit den AMAP-Kolloquiums-Teilnehmern. Die Entwicklung neuer hochleistungsfähiger metallischer Leichtbauwerkstoffe ist auch und gerade unter NE-Metallexperten ein zentrales Thema. Die Simulation von Mikrostrukturen ist daher relevanter denn je. Mit immer mehr Material- und Prozessdaten sowie effizienteren Computern lassen sich Phasenfeldsimulationen schnell und effizient einsetzen. Damit ermöglicht OpenPhase die Simulation metallischer Werkstoffe auf Mikrostrukturebene. Basierend auf OpenPhase bietet die OpenPhase Solutions GmbH Softwarelösungen und Services vom Einstieg in Mikrostruktursimulation bis zur Simulation hochkomplexer Prozesse.

Diese Presseinformation sowie Pressebilder (Copyright: OpenPhase Solutions GmbH) finden Sie unter: [www.amap.de/aktuelles](http://www.amap.de/aktuelles)

### **Kontakt für Journalisten:**

Dr. Rolf Weber: [RWeber@metallurgie.rwth-aachen.de](mailto:RWeber@metallurgie.rwth-aachen.de)

Dr. Peter von den Brincken: [vdb@ime-aachen.de](mailto:vdb@ime-aachen.de)

### **AMAP Kolloquium**

Mit regelmäßigen Kolloquien lädt AMAP Mitglieder und Gäste zu einem fachlichen Gedankenaustausch. Terminankündigungen sind der AMAP-Website zu entnehmen. **Anmeldung erforderlich unter [info@amap.de](mailto:info@amap.de)**

### **AMAP GmbH**

AMAP - Das Aluminium-Cluster an der RWTH Aachen University. Das Konsortium aus Industrie und Instituten der RWTH Aachen University deckt mit Forschung , Entwicklung und Anwendung die gesamte Wertschöpfungskette von Aluminium ab. Vom Rohstoff bis zum Produkt. Die AMAP GmbH ist eine 100 %-ige Tochter des gemeinnützigen eingetragenen Vereins Aluminium Engineering Center e.V. (aec), dem die Leiter von 10 Instituten der RWTH Aachen University angehören.

**[www.amap.de](http://www.amap.de)**