

Die Nutzung von KI in der Werkstoffsimulation: Abbildung von Phasenumwandlungsvorgängen in Umformprozessen und Wärmebehandlungen

Utilizing AI in Materials Simulation: Modeling Phase Transformation in Forming Processes and Heat Treatments

Dipl.-Ing. Doris Wehage¹

¹GMT Gesellschaft für metallurgische Technologie- und Softwareentwicklung mbH
doris.wehage@gmt-berlin.com

Abstract

Alle aus Stahl produzierten Erzeugnisse erfahren im Verlauf der Produktion mehrfach Temperaturänderungen. Damit sind Eigenschaftsänderungen verbunden, die zum Teil durch Umwandlungen von Gefügebestandteilen hervorgerufen werden. Die datengestützte Simulation dieser Mikrostruktur und der dazugehörigen Eigenschaften spielt eine wichtige Rolle für die realitätsnahe Abbildung von Umformprozessen und Wärmebehandlungen im Rahmen einer FEM-Simulation. Je genauer die hinterlegten Werkstoffdaten und -modelle sind und desto besser deren Prozessfenster aus den experimentellen Untersuchungen zu den Bedingungen im Industrieprozess passen, umso höher wird die Übereinstimmung der Ergebnisse aus der Simulation und den realen Produktionsprozessen sein.

Im Beitrag wird die Nutzung von neuronalen Netzen für die Simulation der Phasenumwandlungsvorgänge in Stahllegierungen bei der Abkühlung aus der Umformhitze gezeigt. Dabei ergeben sich neue Möglichkeiten gegenüber der gewohnten Nutzung von ZTU-Diagrammen: Einerseits kann der Einfluss der Veränderung der chemischen Analyse und der Austenitisierungsbedingungen, die für ein ZTU-Diagramm konstant sind, durch den Einsatz der KI abgeleitet werden. Andererseits besteht die Möglichkeit, dass die Temperatur-Zeit-Verläufe variablen Abkühlgeschwindigkeiten folgen. Der Einsatz dieser neuronalen Netze im Rahmen der Umformsimulation wird im Beitrag anhand eines Praxisbeispiels vorgestellt. Insgesamt ermöglicht der Einsatz der KI zur Simulation der Phasenumwandlung eine exakte und individuelle Abbildung der vorliegenden Bedingungen im Industrieprozess und damit eine hohe Genauigkeit des digitalen Zwillings.

All steel products undergo multiple temperature changes during production, which lead to changes in properties due to transformations in the microstructure. The data-based simulation of the microstructure and associated properties is critical to realistically simulate forming processes and heat treatments within a FEM simulation. The more precise the stored material data and models are and the better the process windows from experimental investigations align with the conditions in the industrial process, the greater the level of agreement between the results from the simulation and the real production processes will be.

This contribution demonstrates the use of neuronal networks to simulate phase transformation processes in steels during cooling from the forming heat. This approach offers new possibilities compared to traditional CCT diagrams. Firstly, the influence of chemical analysis and austenitization conditions, which are constant for a CCT diagram, can be derived using AI. Secondly, temperature-time curves that follow variable cooling rates can be simulated. The use of these neuronal networks in the context of forming simulation is demonstrated with a practical example. Overall, the use of AI for the simulation of phase transformation enables an accurate and individualized mapping of the existing conditions in the industrial process, resulting in high accuracy for the digital twin.

1 Einleitung

Umwandlungsschaubilder wie ZTU- oder UZTU-Diagramme sind Standardwerkzeuge, um die ablaufenden Umwandlungen und die entstehenden Phasenzusammensetzungen in Abhängigkeit von der zur Verfügung stehenden Zeit für die Umwandlung abzulesen. Die Ausbildung und Position der Phasenfelder im ZTU-Diagramm hängt von zahlreichen Faktoren ab, wie dem Vorbehandlungszustand, der chemischen Zusammensetzung, den Austenitisierungsbedingungen, der Austenitkorngröße, den Abkühlbedingungen, von sekundären Phasen und auch von dem Umformzustand. Jedoch gelten die ablesbaren Phasenanteile und Härtewerte nur für die konkreten Bedingungen, z. B. in Hinblick auf die chemische Analyse, Austenitisierungstemperatur und -zeit, unter denen das jeweilige Umwandlungsschaubild aufgenommen wurde.

Data Mining-Methoden, einschließlich neuronaler Netze, ermöglichen die Analyse von zuvor aufbereiteten experimentellen Daten aus großen Datenbanken, um Abhängigkeiten zwischen den Einflussgrößen aufzudecken. Daher ist der Einsatz von KI-Methoden an dieser Stelle äußerst hilfreich: Aufgrund der Komplexität zwischen den Eingangsgrößen (technologische Parameter, Materialkennwerte) sowie den Zielgrößen (entstehendes Gefüge) im betrachteten Merkmalsraum wurde das computergestützte Lernen aus Daten zur Modellbildung gewählt. Die Vorteile von neuronalen Netzen bei diesem Anwendungsfall sind:

- Erlernen unbekannter Zusammenhänge zwischen Eingangs- und Zielgrößen
- Beschreibung nichtlinearer Zusammenhänge
- Identifikation und Filterung von Fehlern
- kurze Rechenzeiten und somit ein schnelles Ergebnis

2 Modellierung der Phasenumwandlung und Gefügemengenberechnung

Basierend auf einer umfangreichen Auswertung von ZTU-Daten (über 4000 ZTU-Schaubilder) wurden neuronale Netze angeleitet, um abhängig von der chemischen Analyse und der Austenitisierungstemperatur für ausgewählte Stahlgruppen die Phasenanteile und Härtewerte zu bestimmen, die sich bei der Abkühlung nach der Umformung einstellen. Für die Konfiguration des neuronalen Netzes muss je nach Aufgabenstellung eine geeignete Netzarchitektur gefunden werden. Dies umfasst die Anzahl der verdeckten Schichten, die Anzahl der Neuronen pro Schicht und die Transferfunktionen der jeweiligen Schichten. Bezüglich der Netzarchitektur ergibt sich die Anzahl der Ein- und Ausgangsneuronen durch die Anzahl der Eingangs- und Zielgrößen. Für die verdeckten Schichten gibt es dagegen nur heuristische Regeln, wie die Anzahl der Neuronen zu wählen ist.

Bild 1 zeigt schematisch den Aufbau eines neuronalen Netzes zur Vorhersage der Phasenanteile nach der Abkühlung von der Austenitisierungstemperatur. Eingangsgrößen sind die chemische Zusammensetzung (C, Si, Mn, Cr, Mo usw. in Masse-%), die Austenitisierungstemperatur in °C und die logarithmierte Kühldauer $t_{8/5}$ in s. Zielgrößen sind einerseits die prozentualen Anteile der Gefügebestandteile Ferrit, Perlit, Bainit und Martensit und andererseits die Start- und Endtemperatur der Phasenumwandlung sowie die Härte HV. Das datenbasierte Modell ist für verschiedene Stahlgruppen in definierten Analysebereichen parametrisiert.

Unter Nutzung der erarbeiteten neuronalen Netze lassen sich somit die Einflüsse von Legierungselementen im Stahl auf die Gefügeausbildung analysieren. In Bild 2 ist für die Stahllegierung 16MnCr4 der Einfluss eines geänderten C-Gehaltes auf die Ausbildung der einzelnen Phasen dargestellt.

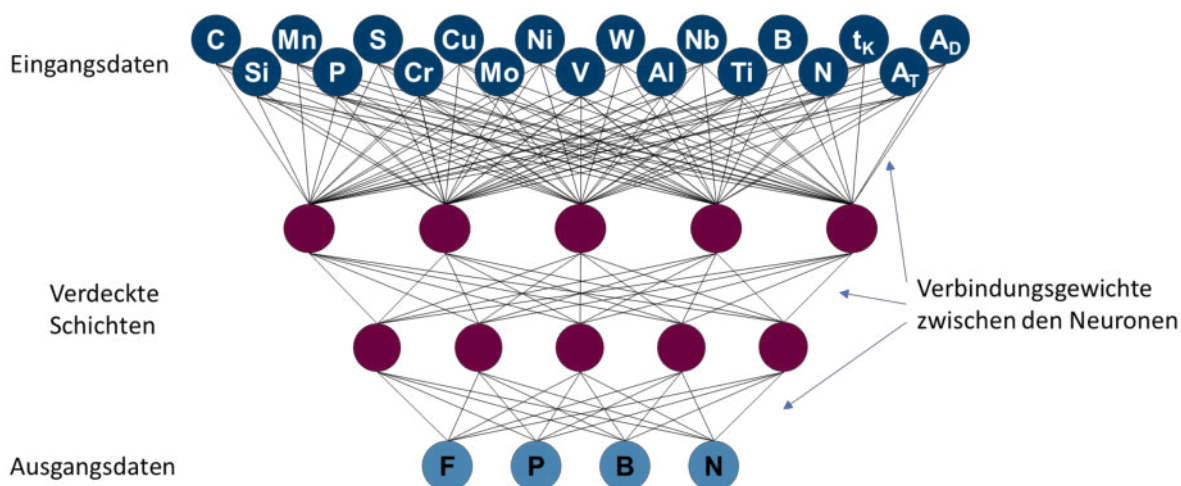


Bild 1: Aufbau des Multilayer Perceptrons zur Vorhersage der Phasenanteile von Stählen [1]

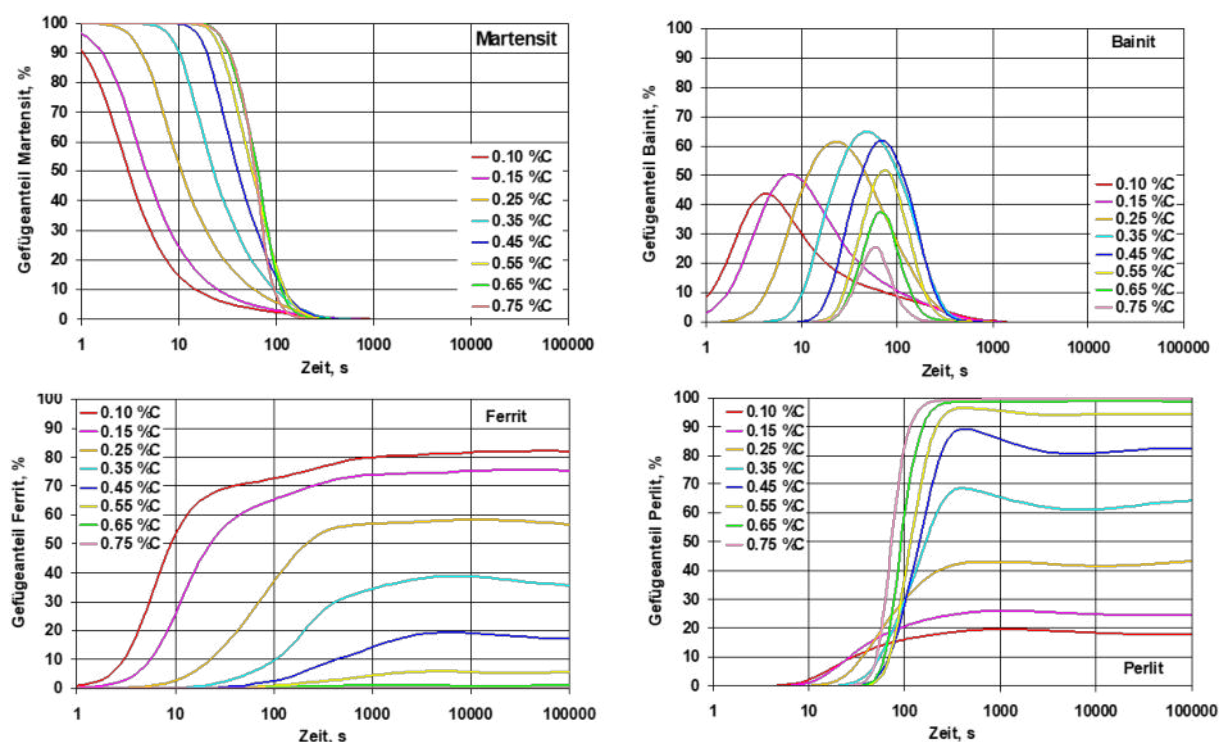


Bild 2: Analyse des Einflusses vom Kohlenstoffgehalt auf die Phasenumwandlungskinetik für 16MnCr4 (Si = 0,20 %; Mn = 1,00 %; Cr = 0,80 %; Cu = 0,03 %; Ni = 0,02 %; Austenitisierungstemperatur = 870°C) [1]

Solch eine Sensitivitätsanalyse der Eingangsgrößen im neuronalen Netz auf die Zielgrößen kann vorteilhaft genutzt werden für:

- eine schnelle Optimierung von Stahlzusammensetzung und Fertigungsbedingungen ohne aufwendige Labor- und Betriebsversuche,
- die Identifizierung wesentlicher und unwesentlicher Einflussgrößen sowie
- die Verkürzung der Testphase bei der Entwicklung neuer Stähle.

Die Visualisierung der neuronalen Netze erfolgt in der Werkstoffdatenbank MatILDa[®]. Als Beispiel zeigt Bild 3 die Netze der unlegierten Kohlenstoffstähle für die Phasenanteile, die Umwandlungstemperaturen und die Härtewerte sowie ein aus dem Gesamtnetz zurückgerechnetes Abkühl-ZTU-Diagramm.

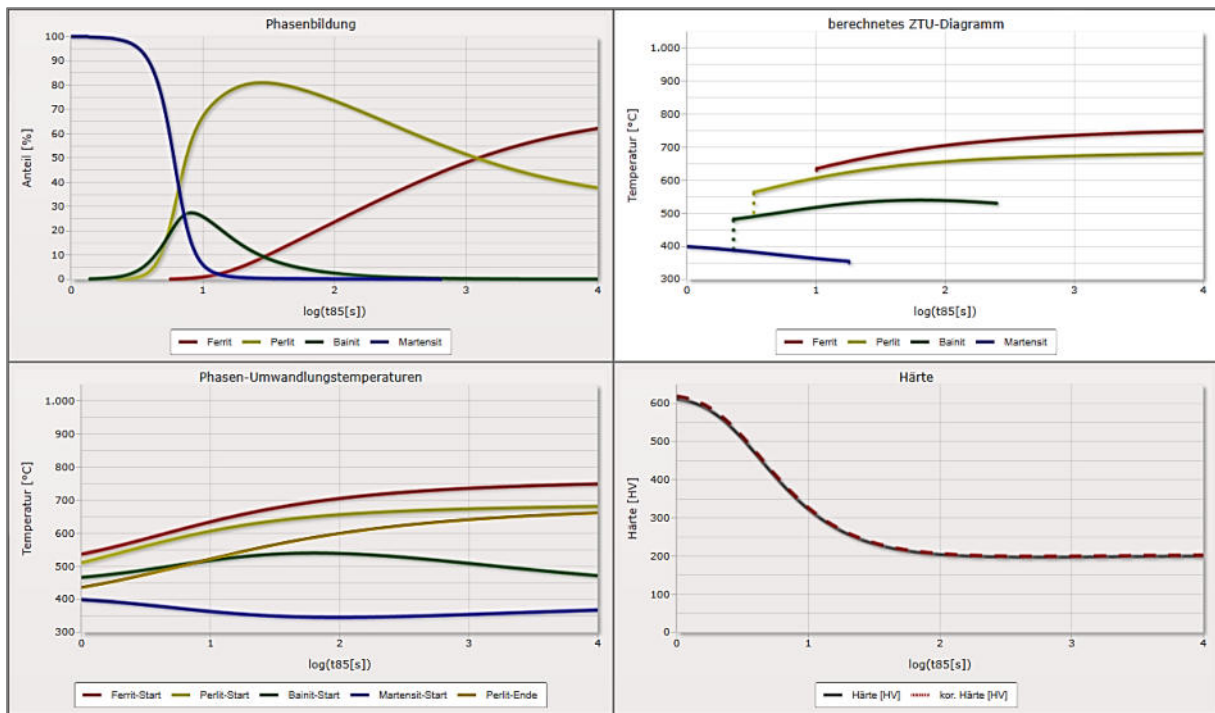


Bild 3: Visualisierung des parametrisierten neuronalen Netzes für Kohlenstoffstähle

Bild 4 zeigt am Beispiel der gleichen Stahlgruppe die hervorgerufenen Änderungen bei Erhöhung der C- und Mn-Gehalte unter anderem auf die Phasenanteile und die Härte HV. Somit können Einflüsse wie Austenitisierung und chemische Analyse schnell überprüft oder Veränderungen durch Abwandlungen der chemischen Zusammensetzung verglichen werden. Eine Abschätzung der sich einstellenden Phasenzusammensetzung bei der Abkühlung mit konstanter Abkühlgeschwindigkeit wird ermöglicht.

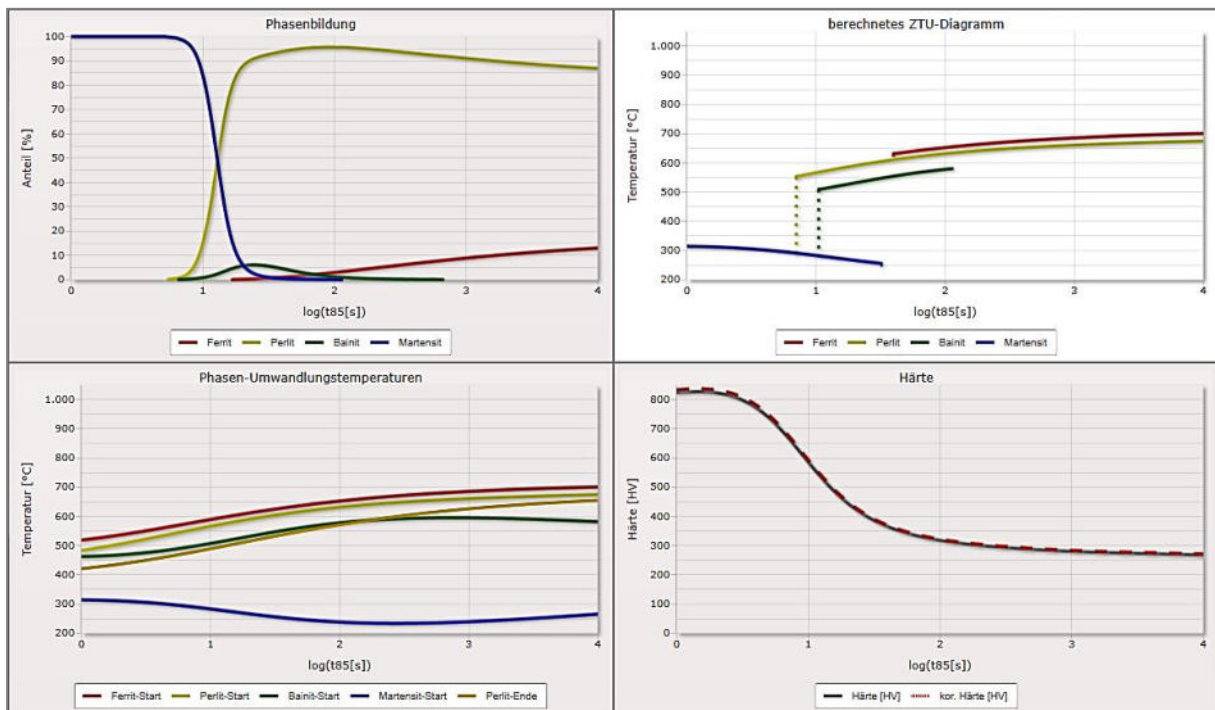


Bild 4: Visualisierung des parametrisierten neuronalen Netzes für Kohlenstoffstähle mit gegenüber Bild 3 höheren C- und Mn-Gehalten

Darüber hinaus können durch die inkrementelle Betrachtungsweise auch bei diskontinuierlichen Zeit-Temperaturverläufen die Phasenbildungen zum jeweils aktuellen Zeitpunkt simuliert werden. Mit dem Modul *PhasTrans* können Abkühlvorgängen mit beliebigem Zeit-Temperaturverlauf analysiert werden, beispielhaft in Bild 5 dargestellt: Anfangs wird schnell abgekühlt, dann verläuft die Zeit-Temperaturkurve flacher, ab ca. 400 °C steigt die Abkühlgeschwindigkeit wieder. Mit dem Schieberegler kann die Abkühlkurve verfolgt werden und für die jeweilige Temperatur-Zeit-Koordinate wird die aktuelle Phasenzusammensetzung dargestellt.

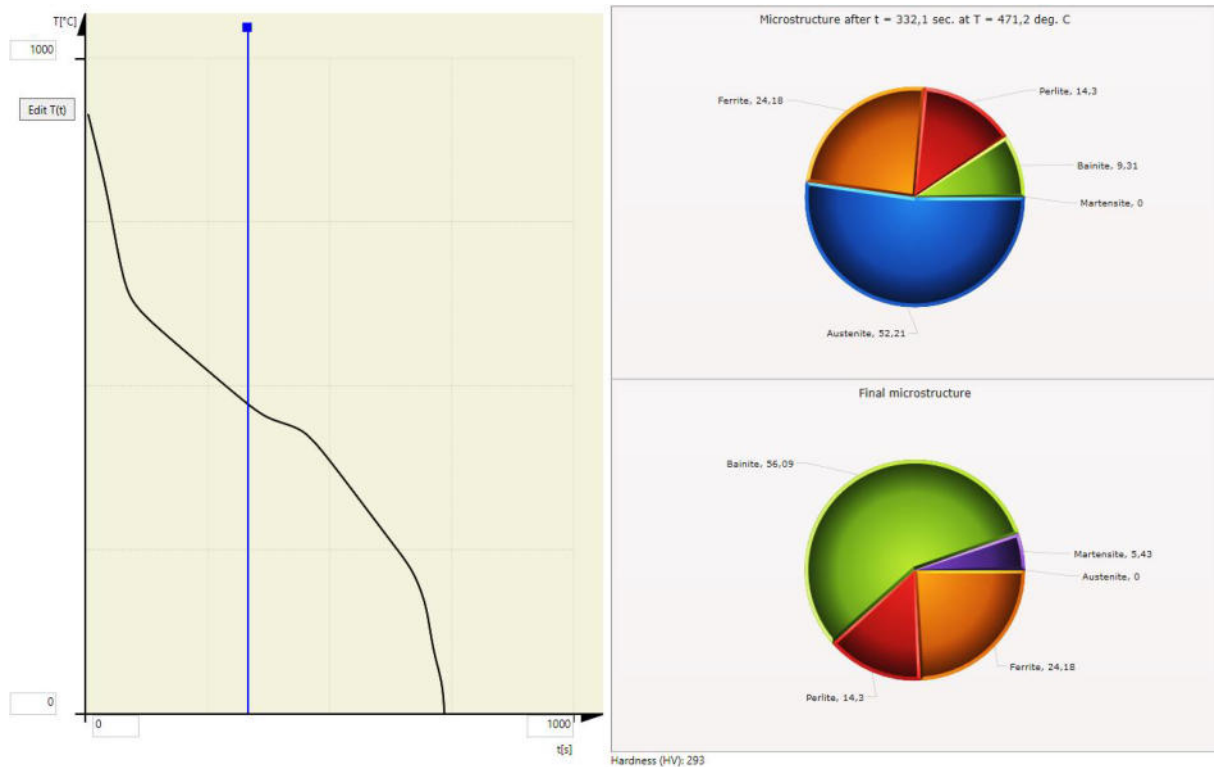


Bild 5: Definierter diskontinuierlicher Zeit-Temperaturverlauf und Phasenzusammensetzung bei Raumtemperatur (unteres Kreisdiagramm) sowie bei ausgewählter Zwischentemperatur (oberes Kreisdiagramm) für einen niedriglegierten Stahl

3 Anwendungsbeispiele der KI zur Prognose der Phasenumwandlung

Die Simulation von kontinuierlichen und diskontinuierlichen Abkühlprozessen werden eingesetzt, um optimale Endmaterialeigenschaften bei verschiedensten Umform- und Abkühlungsprozessen einzustellen. So kann beispielsweise ermittelt werden, wie sich die Variation von Prozessparametern, z. B. durch eine Anpassung des Zeit-Temperatur-Verlaufs, auf die Ausbildung der Gefügebestandteile sowie der Härte auswirkt. Dieses Vorgehen findet auch beim Kocks Mikrostruktursimulator (KMS) Anwendung. Das Software kann verwendet werden, um die individuelle Walz- und Kühlprozesse entlang eines Walzwerks für die Herstellung von beispielsweise Draht- oder Stangenmaterial zu simulieren. Die folgenden zwei Beispiele nach [2] veranschaulichen die Mikrostrukturbildung bei der Herstellung von Langprodukten unter Verwendung des digitalen Zwillings der Produktionsprozesse in zwei verschiedenen Walzwerken als Analyse- und Vorhersagewerkzeug.

Das erste Beispiel beschreibt einen thermomechanisch verarbeiteten Cr-legierten Federstahl auf einem hochmodernem Stabstahlwalzwerk. Bild 6 zeigt den dazugehörigen digitalen Zwilling einschließlich der Simulation eines bei niedrigen Temperaturen gewalzten Federstahls 55Cr3. Die simulierten und realen Ergebnisse für die Ausprägung der Mikrostruktur werden in Bild 7

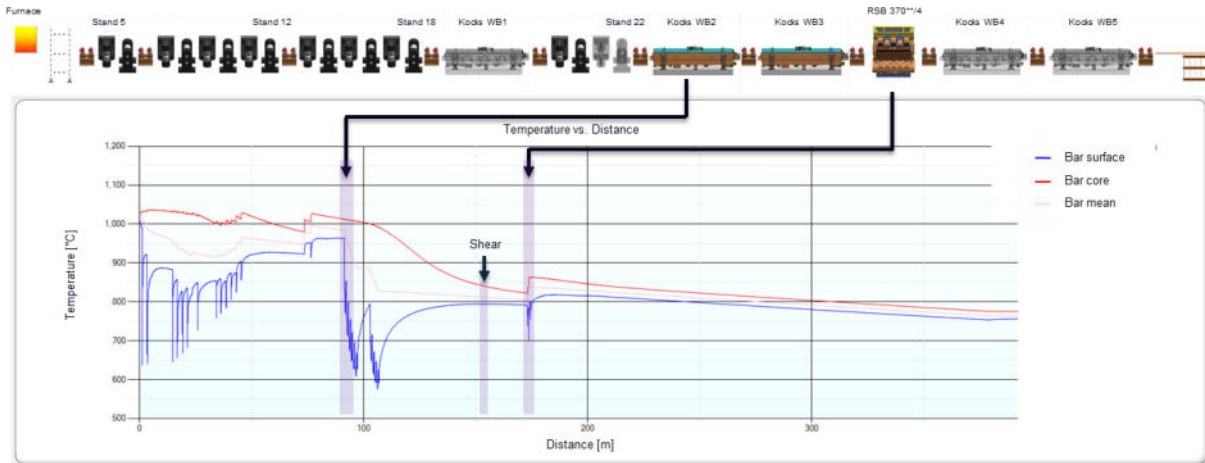


Bild 6: Aufbau einer modernen Stabstahlstraße - Simulation von Federstahl 55Cr3 [2]

gegenübergestellt. Die Kreisdiagramme zeigen die für die oberflächennahen und Kernbereiche des Stabes simulierte Phasenzusammensetzung. Durch die schnellere Abkühlung an der Oberfläche entsteht mehr Perlit als im Kern, für welchen eine geringere Abkühlgeschwindigkeit gilt. Dieses Ergebnis wird durch die metallographischen Untersuchungen bestätigt.

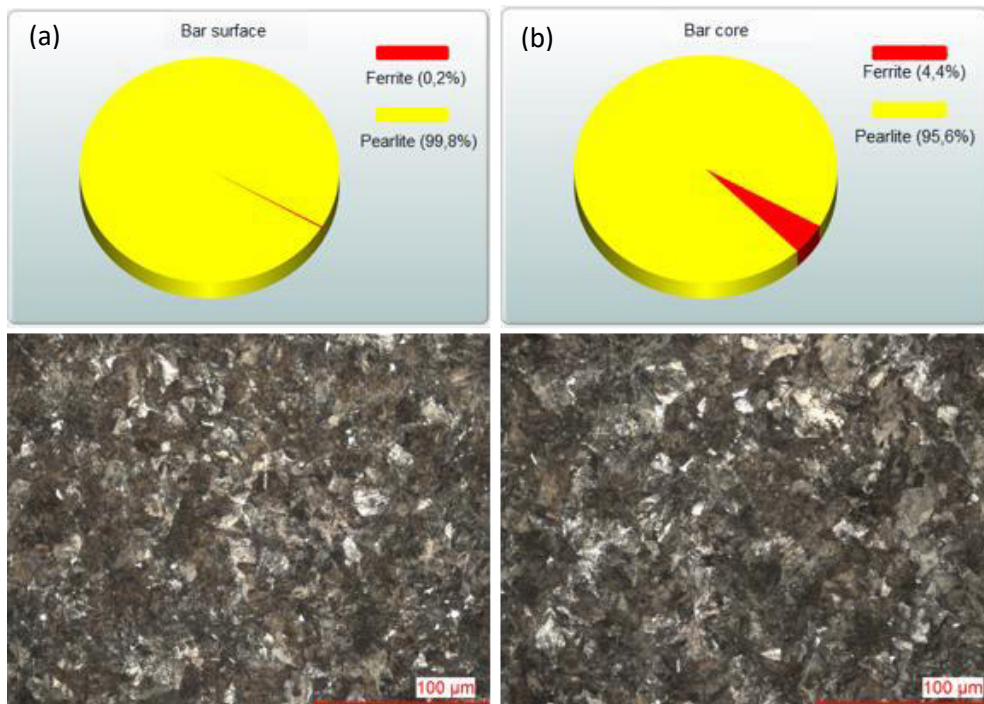


Bild 7: Vergleich der Ergebnisse aus Simulation (oben) und Mikroskopie-Ergebnissen (Vergrößerung 500x) (unten) (a) 2 mm unter der Oberfläche, (b): Kern [2]

Das zweite Beispiel betrifft einen verarbeiteten Schweißwerkstoff, der auf einem Drahtwalzwerk hergestellt wurde und zur Erfüllung der Marktanforderungen eine Prozessoptimierung erforderte. Es verdeutlicht, dass der Einsatz der Mikrostruktur-Simulation besonders vorteilhaft ist, wenn Prozessparameter für bestehende Anlagen untersucht und optimiert werden müssen, um spezifischen Anforderungen gerecht zu werden. Das Ziel der Simulation in diesem Beispiel war die Vermeidung unerwünschter Martensitanteile im Gefüge, welche je nach der verfügbaren Zeit für die Abkühlung auf dem Stelmor-Band auftreten können, insbesondere in den überlappenden Windungsbereichen. Bild 8 zeigt den digitalen Zwilling des Layouts des Walzwerks

einschließlich der Prozesstemperaturen. Zur Optimierung des Gefüges wurde in der Simulation die Geschwindigkeit des Windungs-Kühltransporters sowie die Anzahl der geschlossenen Abdeckhauben variiert. Bild 9 stellt die simulierten Ergebnisse bezüglich der Entwicklung des Mikrogefüges dar. Im Allgemeinen sollte das Gefüge des MnSi-Schweißdrahts hauptsächlich ferritisch mit geringen Anteilen von Perlit sein.

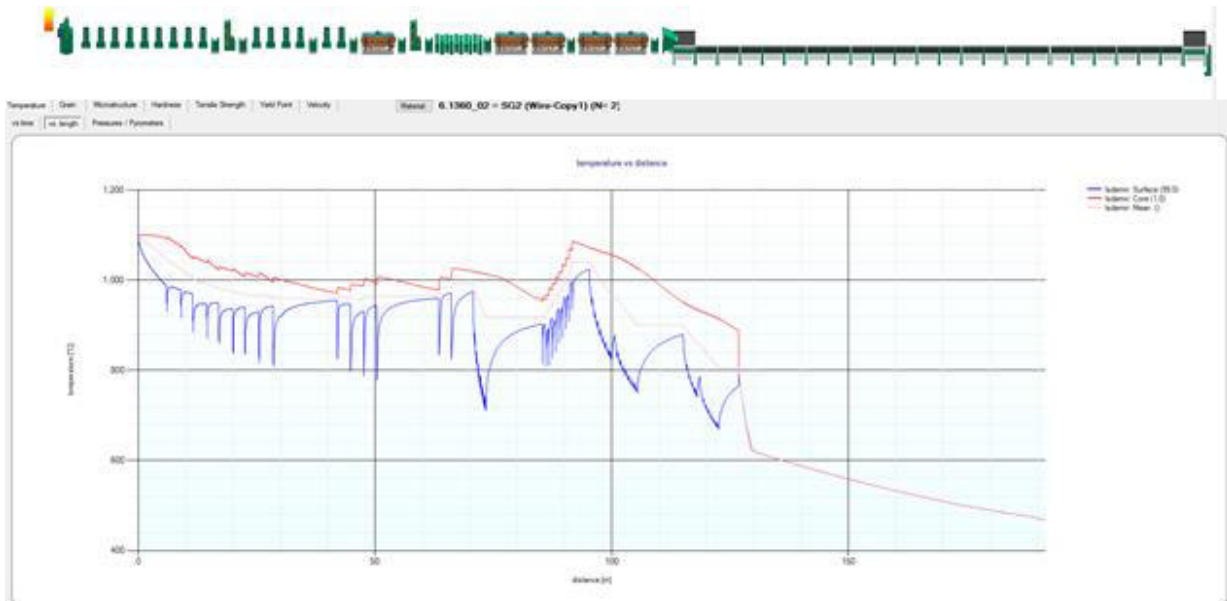


Bild 8: Aufbau einer Drahtstraße: Simulation von MnSi-SG2-Schweißdraht [2]

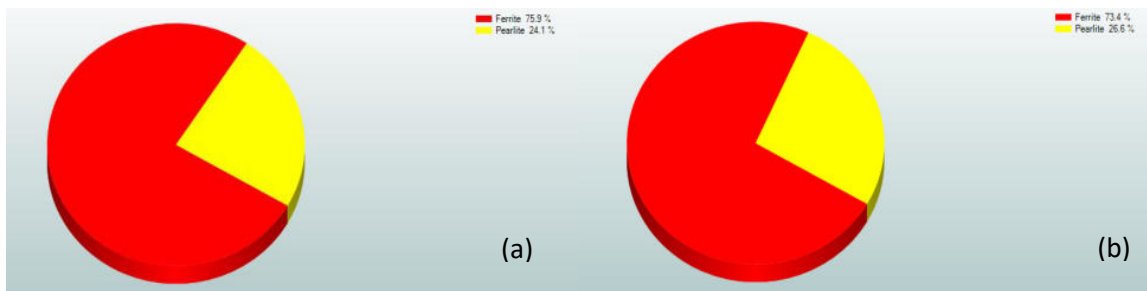


Bild 9: Simulierte Phasenzusammensetzung von MnSi-SG2-Schweißdraht für (a) den oberflächennahen Bereich und (b) den Kern des Drahtes [2]

Diese Simulation findet auch Anwendung in einem Prozessmodell einer Grobblechstraße, wobei auch Pendelphasen und die sehr unterschiedlichen Kühlgeschwindigkeiten über die Grobblechdicke berücksichtigt werden. So können Gefügemengenanteile für die verschiedenen Positionen im Grobblech simuliert werden (s. Bild 10).

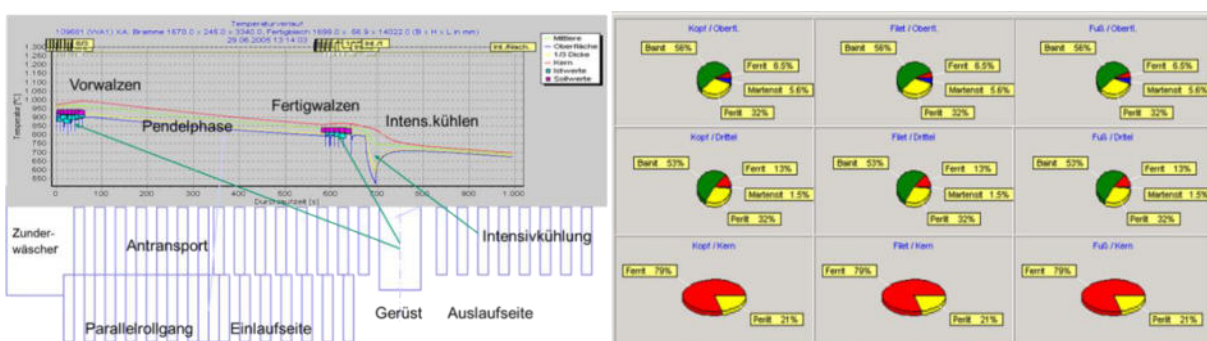


Bild 10: Realitätsnahes Abbild einer Grobblechstraße und berechnete Gefügeanteile nach Abkühlung des Bleches an verschiedenen Blechpositionen [3]

Diese Beispiele verdeutlichen, wie diese Prozessmodelle bei der präzisen Simulation und Optimierung von Walzprozessen unter Berücksichtigung werkstoffspezifischer Aspekte wie Umwandlungsprozessen, resultierendem Gefüge und Eigenschaften wertvolle Unterstützung bieten, bevor es zu Anpassungen in der tatsächlichen Produktion kommt.

Ein weiterer wichtiger Anwendungsfall ist die Nutzung der neuronalen Netze zur Phasenumwandlungssimulation in Rahmen einer FEM-Simulation. Beispielhaft wird in Bild 11 das Abschrecken einer Turbinenwelle im Ölbad gezeigt. Die FEM-Simulation kann durch hinterlegen des Phasenumwandlungsmodells auch die Verteilung der Gefügebestandteile simulieren.

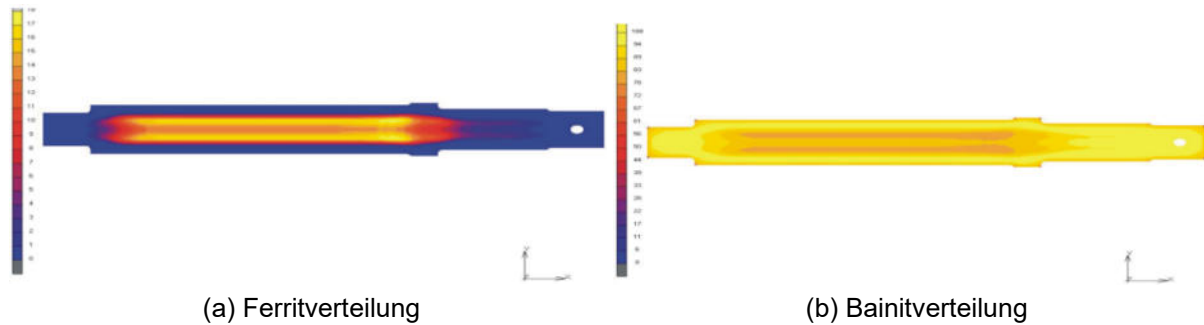


Bild 11: Mittels FEM-Software simulierte Gefügeanteile einer Turbinenwelle beim Abschrecken im Ölbad [4]

4 Schlussfolgerungen

Die Anwendung von Künstlicher Intelligenz (KI) in der Werkstoffsimulation wurde umfangreich beleuchtet, insbesondere die Modellierung von Phasenumwandlungsprozessen in Umformprozessen und Wärmebehandlungen. Diese Anwendung ermöglicht eine präzisere und individuellere Simulation von Industriebedingungen, wodurch realitätsnahe digitale Zwillinge entstehen können. Ein Schwerpunkt liegt auf der Verwendung von neuronalen Netzen, die gegenüber herkömmlichen Umwandlungsschaubildern (ZTU-Diagrammen) neue Möglichkeiten bieten. KI ermöglicht die Ableitung des Einflusses von Veränderungen in der chemischen Analyse und den Austenitisierungsbedingungen, die normalerweise in ZTU-Diagrammen konstant sind. Darüber hinaus können variable Abkühlgeschwindigkeiten simuliert werden.

Praktische Beispiele zeigen die Anwendung dieser Methode zur Optimierung von Umform- und Abkühlungsprozessen. Diese Anwendungsfälle ermöglichen die schnelle Optimierung von Stahlzusammensetzungen und Fertigungsbedingungen ohne aufwendige Labor- und Betriebsversuche sowie die Identifizierung wesentlicher Einflussfaktoren. Der Artikel stellt auch den Einsatz von neuronalen Netzen in einer Finite-Elemente-Methode (FEM) Simulation vor. Ein Beispiel zeigt die Simulation des Abschreckens einer Turbinenwelle im Ölbad, was die Analyse der Verteilung der Gefügebestandteile ermöglicht. Diese Methoden tragen zur Effizienzsteigerung und Verbesserung der Produktqualität bei und bieten die Möglichkeit, internes Qualitäts-Knowhow aufzubauen und zu erweitern.

Literatur

- [1] A. Doktorowski, Datenbasierte Modellierung des Umwandlungsverhaltens bei Stählen Vortrag MetalNet-Treffen, Berlin 2004.
- [2] M. Kruse, A. Fakih, M. Schuck, SEW 082, "Advances in Equipment Design for Temperature-controlled Rolling and Comparison of Operational with Simulated Results through Thermo-mechanical Processing of Long Products", 90. AIKW Konferenz, Dresden 2022.
- [3] A. Borowikow D. Wehage: Online monitoring of microstructure and mechanical properties, Conference High Technologies in advanced Metal Science and Engeneering, Petersburg, 2006
- [4] A. Borowikow u.a.: Integrierte Gefügemodellierung bei der FEM- Simulation mit Hilfe der Werkstoffdatenbank "MATILDA", XXIII. Verformungskundliches Kolloquium 2004