

Optimierung und Sensitivitätsanalyse zur Parameteridentifikation in der numerischen Simulation der Gefügekinetik im Schweißprozess

Dirk Roos, Clemens Groth & Andreas Junk
CAD-FEM GmbH, Grafing

Dirk Brinkmann
Robert Bosch GmbH, Schwieberdingen

Zusammenfassung

Die numerische Schweißsimulation ist mittlerweile ein unverzichtbares Hilfsmittel für die technologische Weiterentwicklung der Schweißtechnik. Die Schweißsimulation setzt sich zusammen aus einer Kombination verschiedener nichtlinearer Problemstellungen wie z.B. der Prozess-Simulation, der Strukturmechanik und der Simulation der Gefügekinetik.

Ein Hauptziel der Gefügekinetik-Simulation ist die Berechnung der zeitabhängigen Gefügeverteilung. Die numerische Berechnung der diffusionsgesteuerten und der diffusionslosen Gefügeumwandlung und deren Einfluss auf die sich einstellenden Eigenspannungen erfordert umwandlungskinetische Modelle. Dabei sind die zahlreichen in diesen Modellen vorhandenen Parameter so anzupassen, dass die numerischen Ergebnisse möglichst gut mit den experimentell gewonnenen Daten für die verschiedenen Stahlsorten übereinstimmen.

Um zukünftig die zeitaufwändigen und teuren Parameterstudien zur Ermittlung der Modellparameter zu vermeiden, werden in diesem Beitrag mögliche Methoden der Optimierung und Sensitivitätsanalyse für eine computergestützte Parameteridentifikation vorgestellt. Die Eignung dieser Methoden zur Lösung des entstehenden Optimierungsproblems wird am Beispiel der Parameteridentifikation eines Gefügeumwandlungsmodells für eine Stahlsorte untersucht. Dabei kommt das Programmsystem OptiSLang zur multidisziplinären Optimierung und Robustheitsanalyse zum Einsatz.

Keywords

Parameteridentifikation, Optimierung, Sensitivitätsanalyse, Gefügekinetik, Schweißprozess, OptiSLang

1 Einleitung

Die Schweißtechnik besitzt eine große technische, als auch wirtschaftliche Bedeutung und gehört zu den wichtigsten Füge-Techniken, denn mittlerweile werden 60-70% aller Metall-Verbindungen durch Schweißen hergestellt.

Die numerische Schweißsimulation kombiniert die gekoppelten nichtlinearen Einzelprozesse: Prozesssimulation, Simulation der Strukturmechanik und Gefügeumwandlungssimulation. Im Rahmen des BMBF-Projektes "Schweißsimulationstool" (SST) werden numerische Methoden und Software-Technologien entwickelt, die diese komplexe Interaktion verschiedener physikalischer Phänomene wie Umwandlungskinetik, transiente Temperaturfeldberechnung und nichtlineare Spannungs- und Formänderung beschreiben.

Die numerischen Modelle der Umwandlungskinetik beschreiben die diffusionsgesteuerte und die diffusionslose Gefügeumwandlung. Dabei sind die Modell-Parameter so anzupassen, dass die numerischen Ergebnisse möglichst gut mit den experimentell gewonnenen Ergebnissen für die verschiedenen Stahlsorten übereinstimmen. Bisher wurden diese Modellparameter durch zeitaufwändige und teure Parameterstudien von Hand ermittelt. Im Folgenden wird die Möglichkeit einer automatischen computergestützten Parameteridentifikation durch die Anwendung der Optimierung und Sensitivitätsanalyse vorgestellt.

2 Simulation der Gefügeumwandlung

2.1 Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubilder

Grundlage einer Gefügekinetiksimulation sind i.A. Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubilder (ZTU). Die Beschreibung des Umwandlungsverhaltens ferritischer Stähle erfolgt durch isotherme sowie kontinuierliche ZTU-Schaubilder.

Isotherme ZTU-Schaubilder werden unter der Voraussetzung einer möglichst schnellen Abkühlung nach der Austenitisierung auf die entsprechende Umwandlungstemperatur erstellt. Anschließend wird der Stahl abgeschreckt und abgekühlt, damit der Gefügestand stationär ist (Dilthey (1995)).

Kontinuierliche ZTU-Schaubilder werden unter der Maßgabe bestimmter Temperatur-Zeit-Abkühlkurven erstellt und sind nur entlang der Abkühlkurven zu lesen. Die Funktionen der Gefügegrenzen entstehen durch Verbinden der Punkte gleichen Umwandlungszustands der Abkühlkurven. An den Enden der Abkühlkurven werden die bei Raumtemperatur auftretenden Härtewerte eingetragen.

Kontinuierliche ZTU-Schaubilder können die Verhältnisse im Schweißprozess nicht vollständig wiedergeben. Z.B. führen hohe Spitzentemperaturen zu einer Vergrößerung der Austenitkörner und zur Auflösung keimwirksamer Ausscheidungen. Die Verzögerung der Umwandlung führt zu einer Verschiebung des Umwandlungsgebietes im S-ZTU-Diagramm zu längeren Zeiten und zu tieferen Temperaturen (vgl. Seyffarth u. a. (1992)).

Schweiß-ZTU-Schaubilder (S-ZTU) werden unter der Maßgabe unterschiedlicher Abkühlgeschwindigkeiten, z.B. im Umwandlungsbereich zwischen 800°C und 500°C erstellt. Sie werden mit den für das Schweißen charakteristischen Austenitisierungsbedingungen aufgenommen und ermöglichen somit Aussagen über die Gefügeveränderungen in der Wärmeeinflusszone von Schweißverbindungen. Die Abbildung 1 zeigt ein S-ZTU-Diagramm für einen Stahl-Werkstoff S355J2G3. Die Umwandlungskurven markieren die Grenzen der Bereiche Austenit, Ferrit, Perlit, Bainit (Zwischenstufengefüge) und Martensit.

2.2 Numerische Modelle der Gefügekinetik

2.2.1 Einleitung

Die numerische Berechnung der Gefügekinetik und deren Einfluss auf die resultierenden Eigenspannungen erfolgt durch umwandlungskinetische Modelle. Bei Schweißverbindungen muss zwischen der diffusionsgesteuerten und der diffusionslosen Umwandlung unterschieden werden.

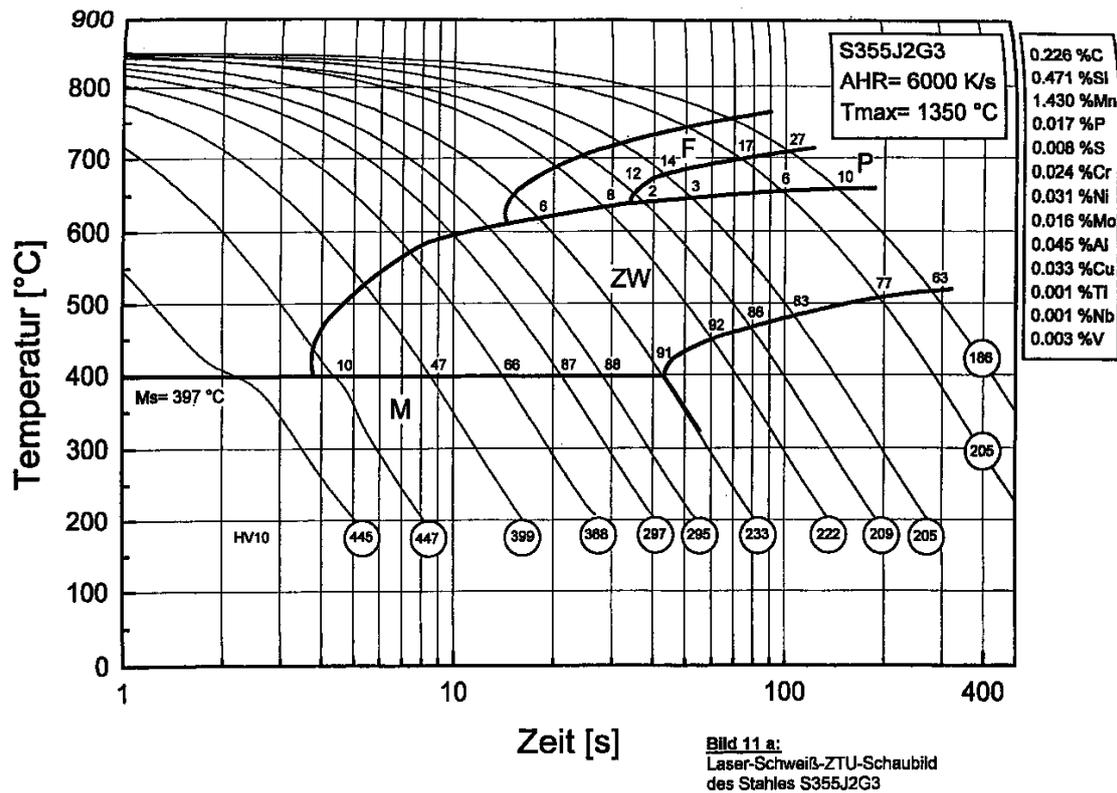


Abbildung 1: S-ZTU-Diagramm für den Stahl-Werkstoff S355J2G3 (Seyffarth u. a. (1992)).

Die mathematische Beschreibung der diffusionsgesteuerten Umwandlung (austenitische, ferritisch-perlitische und bainitische Umwandlung) begann mit der Arbeiten von Avrami (1939) und Kolmogorov (1937).

Später zeigte Cahn (1956), dass die additiven Regeln, wie sie Scheil (1935) zur Vorhersage der Eintrittszeit der Austenit-Umwandlung entwickelte, auch für eine komplette Beschreibung der nicht-isothermen Umwandlung Anwendung finden könnten. Jedoch ist diese Näherung dann nicht mehr gültig, wenn die Umwandlung unvollständig abläuft und der Volumenanteil der neuen Phase asymptotisch gegen einen Wert von 1 steigt (vgl. Leblond und Devaux (1984)).

2.2.2 Modellierung der diffusionsgesteuerten Umwandlung

Das halbempirische, mathematische Modell von (Leblond und Devaux (1984)) ist ein häufig verwendeter Ansatz zur Beschreibung des diffusionsgesteuerten Umwandlungsverhaltens von Stählen. Das Modell basiert auf der Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung für isotherme Umwandlung, wobei eine integrierte Form für die Berechnung eines Phasenanteiles $p_i(T, t)$

$$p_i(T, t) = p_{i,eq}^{j_i}(T) \left(1 - e^{\left(\frac{-t}{\tau^{j_i}(T)} \right)^{n(T)}} \right) \quad (1)$$

infolge der Umwandlung einer Phase j nach i verwendet werden kann. In der Gleichung (1) ist $p_{i,eq}^{j_i}(T)$ der Phasenanteil im metallurgischen Gleichgewichtszustand, welcher nach einer vollständig abgelaufenen isothermen Umwandlung bestimmt werden kann. Der Exponent

$$0.66 \leq n(T) \leq 4.0$$

und die Verzögerungszeit $\tau^{ji}(T)$ beeinflussen die Umwandlungskinetik und werden experimentell bestimmt. Die Verzögerungszeit berücksichtigt, dass $p_i(T, t)$ verzögert gegen $p_{i,eq}^{ji}(T)$ geht. Differenziert man die Gleichung (1) bei konstanter Temperatur nach der Zeit so erhält man

$$\frac{dp_i(T, t)}{dt} = n(T) \left(\frac{p_{i,eq}^{ji}(T) - p_i(T, t)}{\tau^{ji}(T)} \right) \left(\ln \left(\frac{p_{i,eq}^{ji}(T)}{p_{i,eq}^{ji}(T) - p_i(T, t)} \right) \right)^{\frac{n(T)-1}{n(T)}} \quad (2)$$

Für die Beschreibung einer nicht-isothermen Umwandlung kann die Temperaturabhängigkeit der Parameter $n(T)$ und $\tau^{ji}(T)$ berücksichtigt werden. Unter der Annahme, dass diese Parameter nicht von der Abkühlgeschwindigkeit abhängig sind, ist die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung für die kontinuierliche Abkühlung infolge der numerischen Integration der Gleichung (2) (vgl. [Hunkel u. a. \(1999\)](#)) nicht ausreichend. Somit ist die Einführung eines Korrekturwertes $f_{ij}(\dot{T})$ notwendig, um den vorhandenen Einfluss der Abkühlgeschwindigkeit \dot{T} berücksichtigen zu können. Für den Spezialfall ($n(T) = 1$) vereinfacht sich die Gleichung (2) zu

$$\frac{dp_i(T, \dot{T}, t)}{dt} = \frac{p_{i,eq}^{ji}(T) - p_i(T, t)}{\tau^{ji}(T)} f_{ji}(\dot{T})$$

Finden n sich gegenseitig beeinflussende Phasen-Umwandlungsvorgänge im Werkstoff gleichzeitig statt, dann kann die Umwandlungskinetik durch

$$\frac{dp_i(T, \dot{T}, t)}{dt} = - \sum_{j \neq i} A_{ij} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3)$$

mit

$$A_{ij} = \begin{cases} \underbrace{\left(-\frac{p_{j,eq}^{ij}(T)}{\tau^{ij}(T)} p_i(T, t) + \frac{1 - p_{j,eq}^{ij}(T)}{\tau^{ij}(T)} p_j(T, t) \right)}_{l_{ij}} f_{ij}(\dot{T}) & \forall l_{ij} > 0, (i \rightarrow j) \\ \underbrace{\left(-\frac{p_{i,eq}^{ji}(T)}{\tau^{ji}(T)} p_j(T, t) + \frac{1 - p_{i,eq}^{ji}(T)}{\tau^{ji}(T)} p_i(T, t) \right)}_{l_{ji}} f_{ji}(\dot{T}) & \forall l_{ji} > 0, (j \rightarrow i) \\ 0 & \forall l_{ij} \leq 0 \wedge l_{ji} \leq 0 \end{cases} \quad (4)$$

beschrieben werden.

2.2.3 Einfluss des Kornwachstums auf die Umwandlungskinetik

Die Austenitkorngröße beeinflusst das Umwandlungsverhalten so, dass bei unvollständiger Austenitierung die diffusionsgesteuerten Umwandlungsvorgänge bei höheren Temperaturen einsetzen (vgl. dazu [Leblond und Devaux \(1984\)](#)). Die Korngrößenänderung D lässt sich in Abhängigkeit der Aktivierungsenergie Q , einer Konstanten C , die die Zahl der möglichen Keimbildungsplätze angibt, durch einen Exponenten a und durch die Gaskonstante R durch die folgende Beziehung

$$\frac{dD^a}{dt} = C e^{\left(-\frac{Q}{R t} \right)} \quad (5)$$

angeben. Durch die Kopplung der Entwicklungsgleichungen (5), (3) und (4) entsteht ein Differentialgleichungssystem für die Modellierung der diffusionsgesteuerten Umwandlungskinetik.

2.2.4 Modellierung diffusionsloser Umwandlungen

Hohe Abkühlungsgeschwindigkeiten verschieben die Gleichgewichtsumwandlungen durch eine Diffusionsbehinderungen zu tieferen Temperaturen hin. Ist bei diesen Temperaturen keine Diffusion mehr möglich,

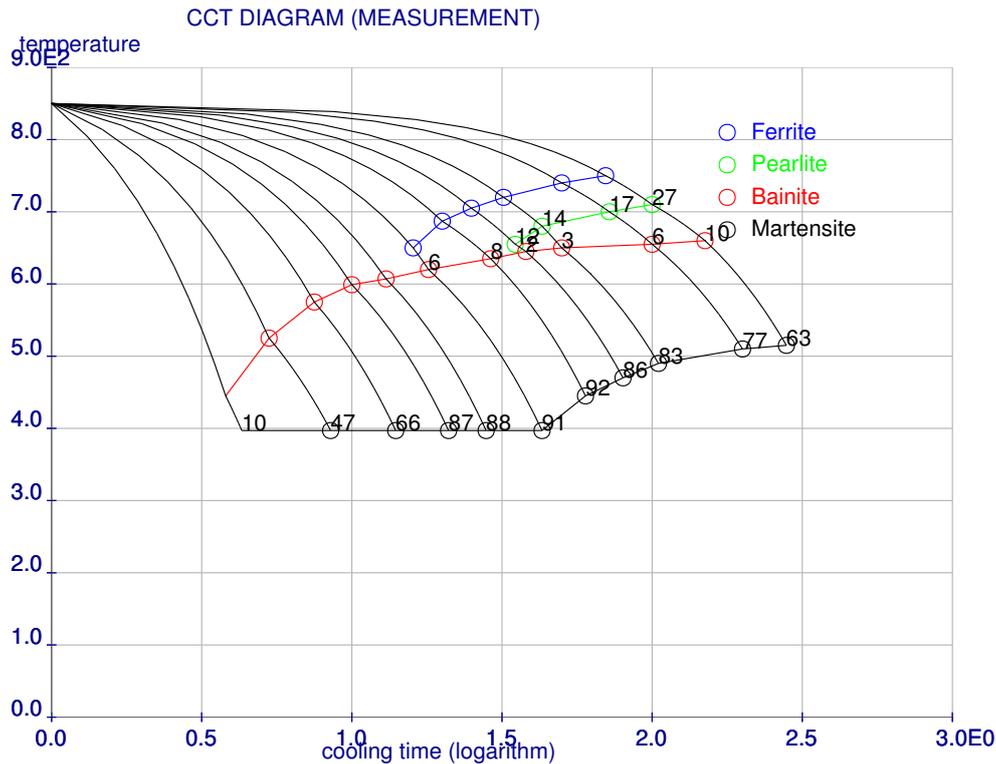


Abbildung 2: Modell des gemessenen S-ZTU-Diagramms für den Stahl-Werkstoff S355J2G3.

kommt es anstelle der diffusionsgesteuerten Umwandlung zur Bildung von Martensit. Das Modell von Koistinen und Marburger (1950) beschreibt die Entstehung des Martensit-Phasenanteiles $p_i(T)$ mit

$$p_i(T) = p_{i,eq}(T) \left(1 - e^{-b(M_s - T)}\right) \quad (6)$$

in Abhängigkeit der Martensit-Starttemperatur M_s , der Temperatur $T \leq M_s$, der Umwandlungskonstanten b und des Phasenanteiles bei vollständiger Umwandlung $p_{i,eq}(T)$, der im Allgemeinen mit 1 angenommen werden kann.

3 Parameteridentifikation des Modells der Gefügekinetik

3.1 Modell des gemessenen S-ZTU-Diagramms

Die Überführung des S-ZTU-Diagramm in ein numerisches Ergebnis erfolgt über eine tabellarische Eingabe der Abkühlungskurven in eine ASCII-Eingabedatei. Das folgende Beispiel demonstriert die Eingabe am Beispiel des Stahl-Werkstoff S355J2G3 der Abbildung 1. Das Ergebnis der Modelleingabe eines gemessenen S-ZTU-Diagramms ist in der Abbildung 2 dargestellt. Die nachfolgenden Eingangsgrößen sind dabei einzugeben:

- Anfangstemperatur
- Endtemperatur
- Beginn der Zeitachse
- Ende der Zeitachse
- Schrittweite der Temperaturänderung

- Anzahl der Abkühlkurven
- Anzahl und Bezeichnung der Phasen
- Temperatur-Zeitverläufe für die geg. Abkühlkurven mit
 - Anzahl der Phasengrenzen
 - Nummer der Phasengrenze
 - Endgefügeanteil von Austenit an der Phasengrenze
 - Zeitpunkt
 - Temperatur

```
INIT_TEMP 850
FINAL_TEMP 2
INIT_TIME 1
FINAL_TIME 400
DELTA_TEMP -1
```

```
NUMBER_OF_COOLING_CURVES 11
```

```
NUMBER_OF_PHASES 4
```

```
PHASE_NAMES
```

```
FERRITE      1
PEARLITE     2
BAINITE      3
MARTENSITE   4
```

```
COOLING_CURVES
```

```
4
  1  99  70  750
  2  27  100 710
  3  10  150 660
  4  63  280 515

4
  1  99  50  740
  2  17  72  700
  3   6  100 655
  4  77  200 510

4
  1  99  32  720
  2  14  43  680
  3   3   50 650
  4  83  105 490

4
  1  99  25  705
  2  12  35  655
  3   2   38 645
  4  86  80  470

3
  1  99  20  687
  3   8   29 635
  4  92  60  445

3
```

1	99	16	650
3	6	18	620
4	91	43	397
2			
3	99	13	607
4	88	28	397
2			
3	99	10	599
4	87	21	397
2			
3	99	7.5	575
4	66	14	397
2			
3	99	5.3	525
4	47	8.5	397
2			
3	99	3.8	445
4	10	4.3	397

3.2 Implementation und Modell-Parameter für die Gefügekinetik

Das Modell für die diffusionsgesteuerten bzw. diffusionslosen Umwandlung ist durch die Robert Bosch GmbH in FORTRAN-Subroutines implementiert. Das Modell beschreibt die Aufheiz- und Abkühlvorgänge unter Vernachlässigung der Korngrößeneffekte.

Tabelle 1: Zu identifizierende Modell-Parameter für die Gefügekinetik

Austenit,Ferrit,Perlit,Bainit,Martensit: $i = 1, 2, 3, 4, 5$; Einheiten in °C und s					
Parameter-nummer	Variablen-bezeichnung	Bezeichnung in der ASCII-Eingabedatei	Parameter in der Optimierung	untere Grenze	obere Grenze
1	$T_1 \rightarrow p_{2,eq}^{12}(T_1)$	Zeq21 Au->Fe	Fe_Zeq_T.1	100.0	440.0
2	$T_2 \rightarrow p_{2,eq}^{12}(T_2)$		Fe_Zeq_T.2	100.0	500.0
3	$T_3 \rightarrow p_{2,eq}^{12}(T_3)$		Fe_Zeq_T.3	700.0	800.0
4	$T_1 \rightarrow p_{3,eq}^{13}(T_1)$	Zeq21 Au->Pe	Pe_Zeq_T.1	400.0	500.0
5	$T_2 \rightarrow p_{3,eq}^{13}(T_2)$		Pe_Zeq_T.2	500.0	650.0
6	$T_3 \rightarrow p_{3,eq}^{13}(T_3)$		Pe_Zeq_T.3	650.0	750.0
7	$T_1 \rightarrow p_{4,eq}^{14}(T_1)$	Zeq21 Au->Ba	Ba_Zeq_T.1	100.0	300.0
8	$T_2 \rightarrow p_{4,eq}^{14}(T_2)$		Ba_Zeq_T.2	300.0	400.0
9	$T_3 \rightarrow p_{4,eq}^{14}(T_3)$		Ba_Zeq_T.3	400.0	700.0
10	$T_1 \rightarrow p_{5,eq}^{15}(T_1)$	Zeq21 Au->Ma	Ma_Zeq_T.1	0.0	10.0
11	$T_2 \rightarrow p_{5,eq}^{15}(T_2)$		Ma_Zeq_T.2	300.0	350.0
12	$T_3 \rightarrow p_{5,eq}^{15}(T_3)$		Ma_Zeq_T.3	350.0	400.0
13	$p_{5,eq}^{15}(T_1)$		Ma_Zeq_P.1	0.0	1.0
14	$p_{5,eq}^{15}(T_2)$		Ma_Zeq_P.2	0.0	1.0
15	$p_{5,eq}^{15}(T_3)$		Ma_Zeq_P.3	0.0	1.0
16	$T_1 \rightarrow \tau^{12}(T_1)$	Tau21 Au->Fe	Fe_Tau_T.1	600.0	650.0
17	$T_2 \rightarrow \tau^{12}(T_2)$		Fe_Tau_T.2	650.0	750.0
18	$\tau^{12}(T_1)$		Fe_Tau_1	20.0	50.0
19	$\tau^{12}(T_2)$		Fe_Tau_2	0.0	30.0
20	$T_1 \rightarrow \tau^{13}(T_1)$	Tau21 Au->Pe	Pe_Tau_T.1	400.0	650.0
21	$T_2 \rightarrow \tau^{13}(T_2)$		Pe_Tau_T.2	650.0	750.0
22	$\tau^{13}(T_1)$		Pe_Tau_1	100.0	200.0

Fortsetzung nächste Seite ...

Parameter- nummer	Variablen- bezeichnung	Bezeichnung in der ASCII-Eingabedatei	Parameter in der Optimierung	untere Grenze	obere Grenze
23	$\tau^{13}(T_2)$		Pe_Tau_2	20.0	50.0
24	$T_1 \rightarrow \tau^{14}(T_1)$	Tau21 Au->Ba	Ba_Tau_T_1	300.0	400.0
25	$T_2 \rightarrow \tau^{14}(T_2)$		Ba_Tau_T_2	500.0	700.0
26	$\tau^{14}(T_1)$		Ba_Tau_1	10.0	40.0
27	$\tau^{14}(T_2)$		Ba_Tau_2	0.0	30.0
28	$f_{12}(\dot{T}_1)$	Rat21 Au->Fe	Fe_Rat_t_1	-200.0	-6.0
29	$f_{12}(\dot{T}_2)$		Fe_Rat_t_2	-40.0	0.0
30	$f_{13}(\dot{T}_1)$	Rat21 Au->Pe	Pe_Rat_t_1	-20.0	-5.0
31	$f_{13}(\dot{T}_2)$		Pe_Rat_t_2	-5.0	0.0
32	$f_{14}(\dot{T}_1)$	Rat21 Au->Ba	Ba_Rat_t_1	-600.0	-100.0
33	$f_{14}(\dot{T}_2)$		Ba_Rat_t_2	-100.0	0.0
34	$f_{15}(\dot{T}_1)$	Rat21 Au->Ma	Ma_Rat_t_1	-100.0	0.0

Die in den Gleichungen (6), (3) und (4) vorhandenen Modell-Parameter (vgl. Tabelle 1) sind in einer ASCII-Datei festgelegt mit:

```

!
#FILE LbfnCR.txt
!
#FORMAT (f10.2,f10.5)
!
!
#IDENTITY Leblond data
!
MxInc
200.0
KM
400.00 0.011
!*****
Fe
Zeq21 Au->Fe
400.00 0.00000
500.00 1.00000
800.00 0.00000
Zeq12 Fe->Au
0.00 0.00000
800.00 0.00000
900.00 1.00000
1500.00 1.00000
Tau21 Au->Fe
650.00 40.00000
705.00 20.00000
Tau12 Fe->Au
0.00 1.00000
1500.00 1.00000
Rat21 Au->Fe
-200.00 0.00000
0.00 1.00000
Rat12 Fe->Au
0.00 1.00000
1500.00 1.00000
!*****

```

```

Pe
Zeq21 Au->Pe
  450.00  0.00000
  510.00  1.00000
  700.00  0.00000
Zeq12 Pe->Au
  0.00  0.00000
  800.00  0.00000
  900.00  1.00000
 1500.00  1.00000
Tau21 Au->Pe
  500.00  170.000
  650.00  40.0000
Tau12 Pe->Au
  0.00  1.00000
 1500.00  1.00000
Rat21 Au->Pe
  -20  0.00000
  0.00  1.00000
Rat12 Pe->Au
  0.00  1.00000
 1500.00  1.00000
!*****
Ba
Zeq21 Au->Ba
  300.00  0.00000
  500.00  1.00000
  600.00  0.00000
Zeq12 Ba->Au
  0.00  0.00000
  800.00  0.00000
  900.00  1.00000
 1500.00  1.00000
Tau21 Au->Ba
  400.00  30.00000
  590.00  10.00000
Tau12 Ba->Au
  0.00  1.00000
 1500.00  1.00000
Rat21 Au->Ba
  -550  0.10000
  0.00  1.00000
Rat12 Pe->Au
  0.00  1.00000
 1500.00  1.00000
!*****
Ma
Zeq21 Au->Ma
  0.00  0.99000
  300.00  0.50000
  500.00  0.00000
 1500.00  0.00000
Zeq12 Ma->Au
  0.00  0.00000

```

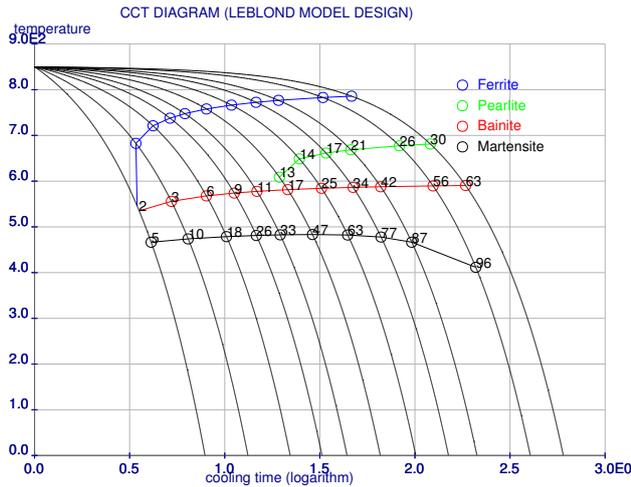


Abbildung 3: Start-Design: Temperatur-Zeitverläufe $T_k(t)$ mit den entsprechenden Endgefügeanteilen von Austenit an den Phasengrenzen, Phasengrenzfunktionen für Ferrit $F(T, t)$, Perlit $P(T, t)$, Bainit $B(T, t)$ und Martensit $M(T, t)$ in Abhängig der Abkühlgeschwindigkeiten \dot{T}_k , ($k = 1, \dots, 11$).

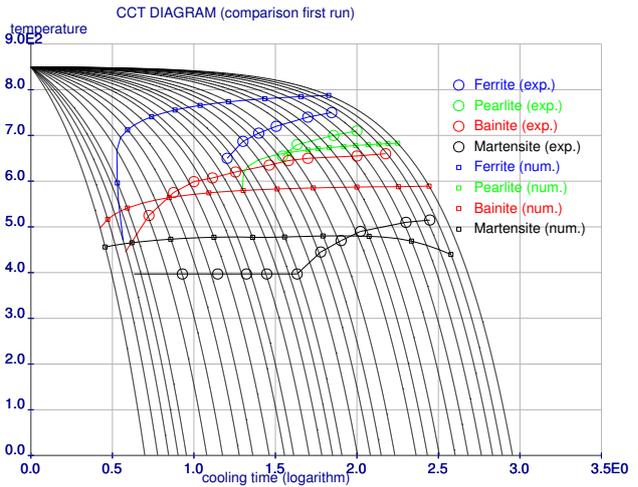


Abbildung 4: Abweichungen der numerisch berechneten zu den gemessenen Kurvenverläufe im Start-Design der Optimierung.

```

800.00  0.00000
900.00  1.00000
1500.00 1.00000
Tau21 Au->Ma
  0.00  1.00000
 1500.00 1.00000
Tau12 Ma->Au
  0.00  1.00000
 1500.00 1.00000
Rat21 Au->Ma
  0.00  1.00000
 1500.00 1.00000
Rat12 Ma->Au
  0.00  1.00000
 1500.00 1.00000
!*****

```

Die Abhängigkeit der Parameter von der Temperatur T kann durch beliebig viele Stützstellen abgebildet werden. Die Daten definieren für jeden, beim Abkühlen entstehenden Gefügebestandteil (Ferrit, Perlit, Bainit, Martensit), die Funktionen $p_{i,eq}^{ij}(T)$ und $\tau^{ij}(T)$ und die Abkühlratenfunktion $f_{ij}(\dot{T})$.

Ergebnis der Gefügekinetik-Berechnung sind die Temperatur-Zeitverläufe $T_k(t)$ mit den entsprechenden Gefügebestandteilen für Austenit, Ferrit, Perlit, Bainit und Martensit in Abhängig der, im Modell des gemessenen S-ZTU-Diagramms (vgl. Abbildung 2) ablesbaren, n_a Abkühlgeschwindigkeiten \dot{T}_k , ($k = 1, \dots, n_a$) (vgl. Abbildung 3). Die ($k \leq n_a$)-Stützstellen der Phasengrenzfunktionen für die n_p -Phasen Ferrit $F(T, t)$, Perlit $P(T, t)$, Bainit $B(T, t)$ und Martensit $M(T, t)$ ermittelt man typischerweise als 1%-Grenze aus den Gefügebestandteilen der Temperatur-Zeitverläufe. Desgleichen werden die Endgefügeanteile von Austenit $A(T, t)$ an insgesamt ($l \leq n_a n_p$)-Stützstellen ermittelt.

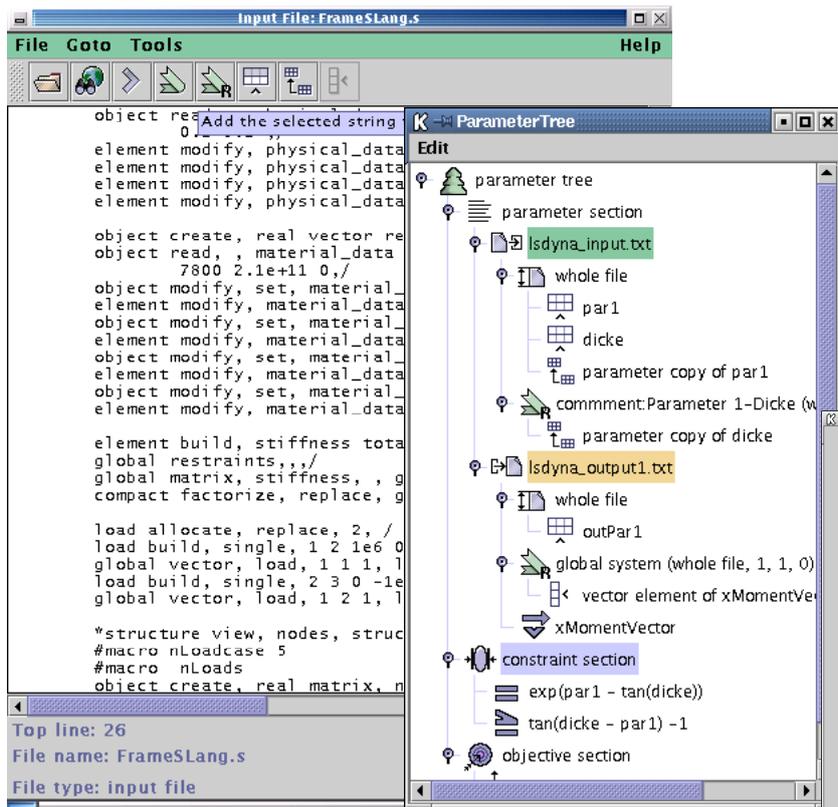


Abbildung 5: Grafischer Editor für die Parametrisierung von ASCII-Input/Output-Dateien beliebiger Solver.

Abbildung 6: Parameterbaum in OptiSLang zur Definition der Design-Variablen, Ausgabe-parameter und stochastischen Variablen.

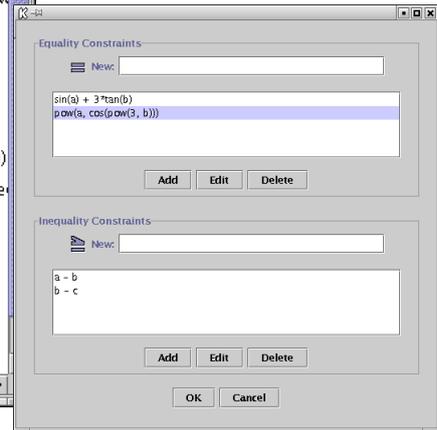


Abbildung 7: Beispiel eines Dialoges zur Definition der Restriktionen und Zielfunktion in OptiSLang.

4 Parameteroptimierung und Sensitivitätsanalyse

4.1 OptiSLang – Softwareplattform für die Parameteroptimierung und Sensitivitätsanalyse

Der virtuelle Entwurfsprozess ist im Allgemeinen gekennzeichnet durch das komplexe Zusammenspiel interdisziplinärer Prozesse miteinander, verschiedener Analyse- und Entwurfs-Programme und durch unterschiedliche Restriktionen und Zielfunktionen.

Dies erfordert robuste mathematische Optimierungsmethoden einerseits und sichere, effiziente Workflow-Konzepte andererseits zur Optimierung und Robustheitsbewertung dieser multidisziplinären u.U. schlecht-gestellten, d.h. nicht-differenzierbaren, nicht-konvexen und nicht-glaten Aufgabenstellungen.

Die Optimierungsplattform OptiSLang (vgl. Will (2002)) setzt nicht auf eine Methode, sondern auf einen möglichst kompletten Satz robuster Algorithmen zur Auswahl geeigneter Methoden für die vielfältigen multidisziplinären Aufgabenstellungen. In OptiSLang können zur allgemeinen Parameteroptimierung Gradientenverfahren (Schittkowski (1985/86)), Genetische Algorithmen und Evolutionsstrategien (Riedel (2000)) sowie Response-Surface-Methoden (Box und Draper (1987); Myers (1971); Myers und Montgomery (1995)), die mit verschiedenen globalen und adaptive Design of Experiments verwendet werden können. Zudem steht ein umfangreicher Satz von stochastischen Sampling-Methoden (Plain-Monte-Carlo, Latin Hypercube) und statistischen Verfahren (Histogramm, Anthill-Plot, Principal-Component-Analysis) zur Sensitivitätsanalyse zur Verfügung.

Eine moderne Software-Architektur muss nicht nur über verschiedene robuste und sichere Optimierungs- und Sensitivitätsmethoden verfügen, sondern muss darüber hinaus diese möglichst nutzerfreundlich

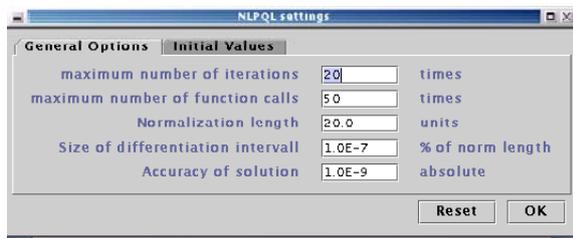


Abbildung 8: Dialog zur Einstellung der NLPQL-Parameter.

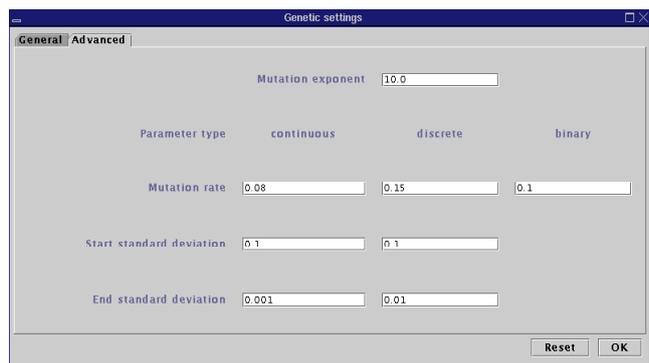


Abbildung 9: Dialog zur Einstellung der Parameter der Genetik/Evolutionsstrategie.

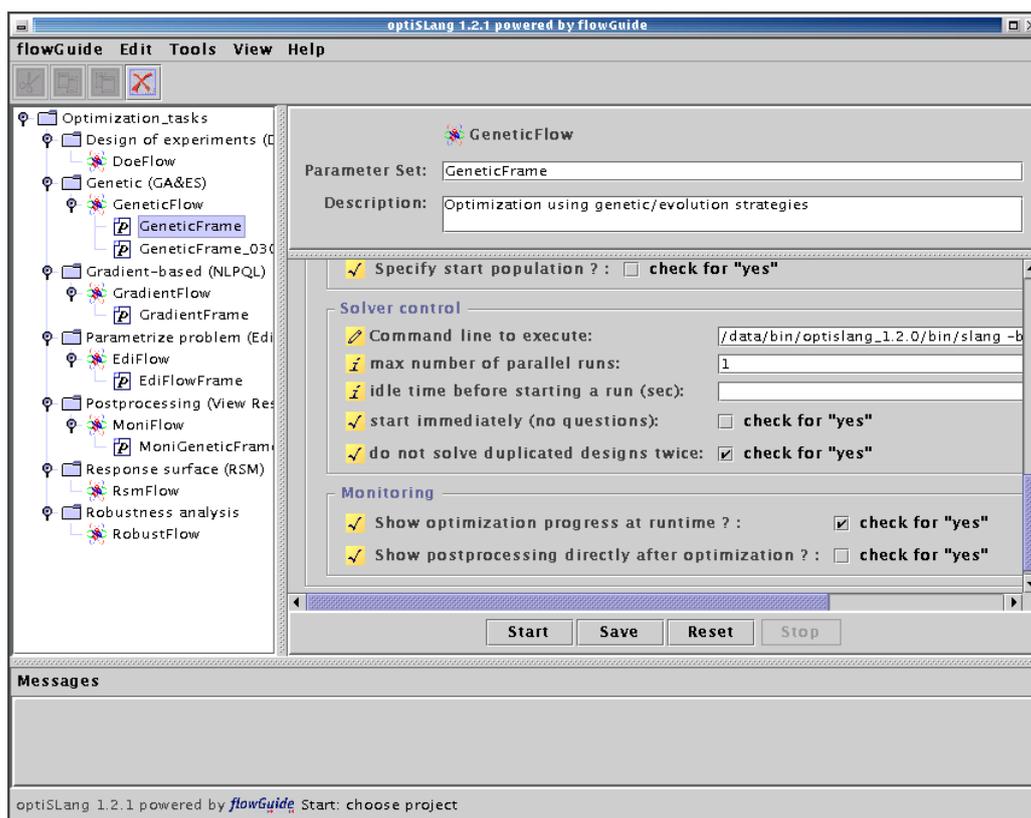


Abbildung 10: Definition von Workflows zur multidisziplinären Parameteroptimierung und Sensitivitätsanalyse in OptiSlang/flowGuide.

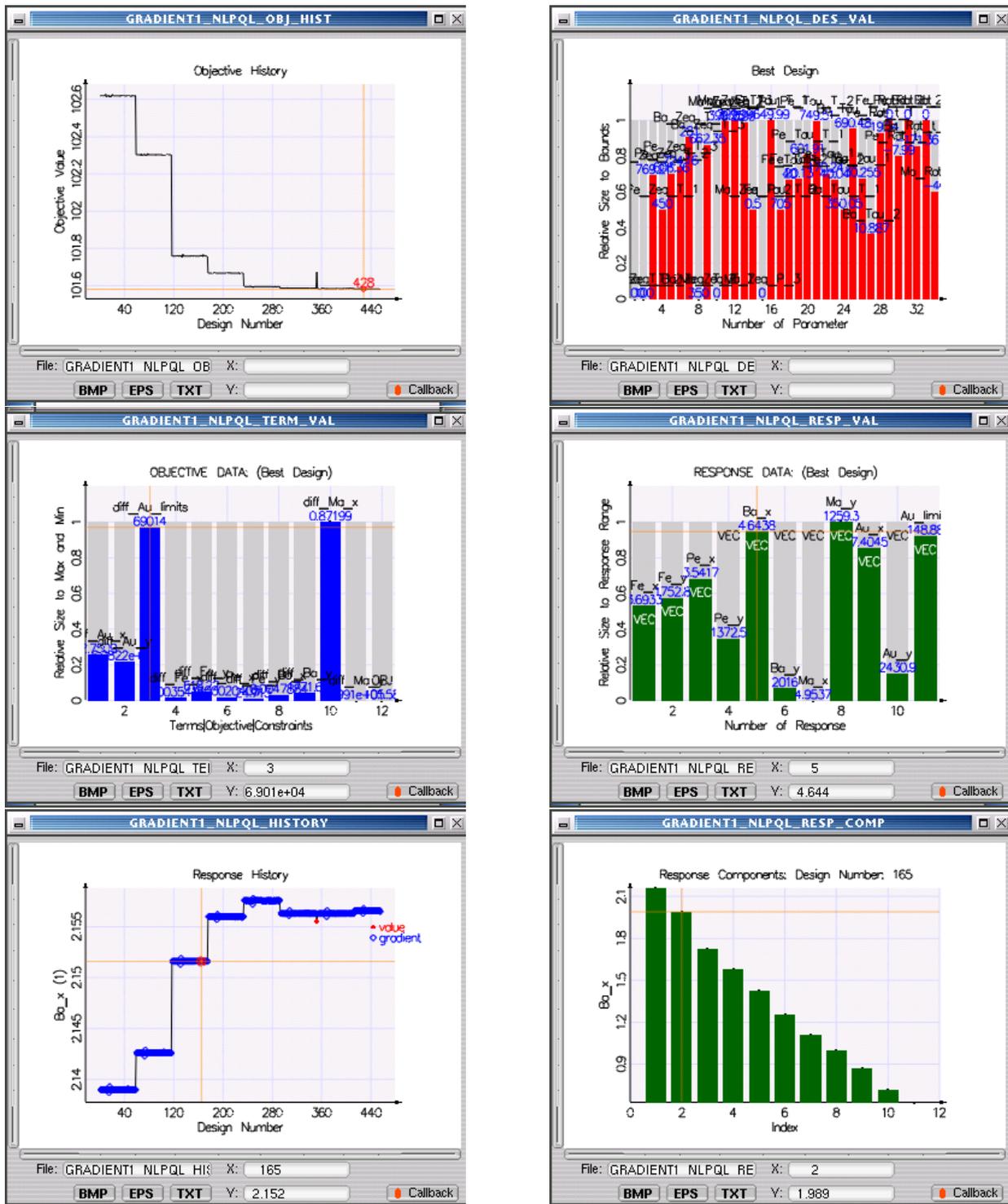


Abbildung 11: Postprocessing für die multidisziplinäre Parameteroptimierung in OptiSLang. Die sechs interaktiven Fenster visualisieren den Verlauf der Zielfunktion, Design-Variablen, Strukturantworten und Restriktionen.

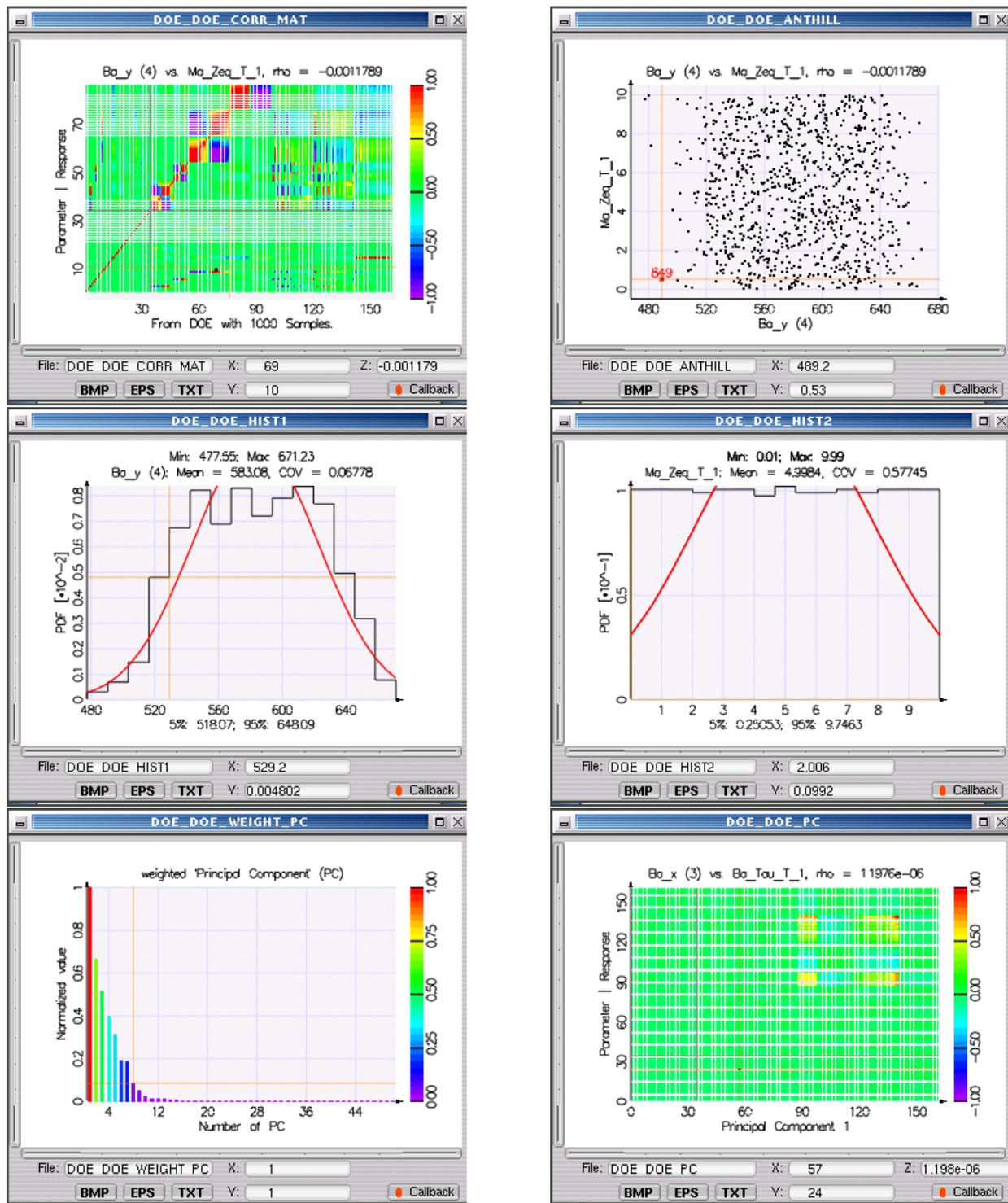


Abbildung 12: Postprocessing einer Sensitivitätsanalyse in OptiSLang. Die sechs interaktiven Fenster visualisieren (von oben links nach unten rechts): (I) Lineare Korrelationen zwischen den Parametern. Von Null verschiedene Werte verweisen auf Eingabe-Parameter mit großem Einfluss auf Ausgabe-Parameter. (II) Anthill-Plot zweier ausgewählter Parameter. Mögliche Ausreißer eines nicht-robusten Designs können identifiziert werden. (III-IV) Histogramme der ausgewählten Parameter. (V) Principal Values der Korrelationsmatrix, geordnet nach der Einflussgröße einer Gruppe von Parametern. (VI) Mit Hilfe der Principal Components der Korrelationsmatrix können nichtlineare Korrelationen zwischen Gruppen von Parameter identifiziert werden.

und ggf. für den heterogenen Netzwerkeinsatz geeignet zur Verfügung stellen.

OptiSLang ist eine Optimierungsplattform, die mittels eines grafischen Editors (siehe Abb. 5) beliebige Solver über ASCII-Input/Outputdeck integrieren kann. OptiSLang bietet damit die Möglichkeit, multidisziplinäre Optimierung und stochastische Analyse auch vom "Nicht-Optimierungs-Spezialisten" einfach und sicher anzuwenden. Mit Hilfe eines übersichtlichen Parameterbaumes (siehe Abb. 6) können Variablentyp, Grenzen, usw. der Design-Variablen und stochastischen Variablen definiert werden. Die Abb. 7 zeigt ein Beispiel eines Dialoges zur einfachen Festlegung der Restriktionen und der Zielfunktion.

Wichtigste Innovation von OptiSLang sind einfach zu bedienende, vordefinierte Workflows (siehe Abb. 10) zur Problemdefinition, zur Optimierung bzw. stochastischen Analyse und zum Postprocessing (siehe Abb. 11 und 12). Die numerischen Parameter der Optimierungsverfahren sind mit stabilen Default-Werten belegt und müssen im Normalfall nicht modifiziert werden (siehe Abb. 8 bis 9).

Durch die Einbindung in flowGuide (Von Montigny u. a. (2002)) ist es möglich, beliebig komplexe Berechnungsabläufe externer Solver in heterogenen Netzwerken oder auf Unix-Cluster anzuschließen.

4.2 Bildung der Zielfunktion

Das Optimierungsproblem wird als Suche nach den besten Design-Variablen x_i definiert, die eine Zielfunktion $f(x_1, x_2, \dots, x_N)$

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2, \dots, x_N) &\rightarrow \min \\ g_k(x_1, x_2, \dots, x_N) &= 0; \quad k = 1, m_e \\ h_l(x_1, x_2, \dots, x_N) &\geq 0; \quad l = 1, m_u \\ x_l &\leq x_N \leq x_u \end{aligned}$$

mit den Gleichheits- und Ungleichheitsbedingungen $g_k(x_1, x_2, \dots, x_N)$ und $h_l(x_1, x_2, \dots, x_N)$ minimiert. Multikriterien-Optimierung wird in vielen praktischen Aufgabenstellungen definiert als Minimierungsaufgabe für die Euklidische Distanzfunktion

$$c(f_j(x_1, x_2, \dots, x_N)) = \left(\sum_{j=1}^m W_j \left(\frac{|f_j(\mathbf{x}) - F_j|}{\Gamma_j} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7)$$

mit insgesamt ($i = 1, \dots, m$) unterschiedlich gewichteten, einzelnen Zielfunktionen mit den Wichtungen W_j , den Modellantworten f_j , den Vergleichswerten F_j und gegebenenfalls den Normalisierungsfaktoren Γ_j .

Die Zielfunktion für die Parameteridentifikation ergibt sich unter Verwendung der Gleichung (7) zu

$$c = \|A - A_F\|_2 + \|T^A - T_F^A\|_2 + \|t^A - t_F^A\|_2 + \dots + \|T^M - T_F^M\|_2 + \|t^M - t_F^M\|_2 \quad (8)$$

als Minimierung der Euklidischen Distanzfunktion zwischen den numerisch berechneten und den gemessenen Kurvenverläufe der Phasengrenzfunktionen der Temperaturen und der Zeiten für die 5 Phasen Austenit, Ferrit, Perlit, Bainit und Martensit und der Endgefügeanteile von Austenit. Die Wichtungen wurden mit 1.0 gewählt und die Normierungsfaktoren sind automatisch innerhalb von OptiSLang berechnet worden.

4.3 Parameteridentifikation durch Optimierung mittels OptiSLang

Für Identifikationsaufgaben sind gradientenbasierte Optimierungsverfahren häufig besonders effizient. Insbesondere das Verfahren SQP (Sequential Quadratic Programming) implementiert als NLPQL (Non-linear Programming Quadratic Line Search) (Schittkowski (1985/86)) weist für diese Aufgabenstellungen mit bis zu $n = 50$ Optimierungsparameter eine sehr hohe Konvergenzgeschwindigkeit auf. Ausgehend von einem willkürlich gewählten Start-Design ergeben sich die Verläufe der Phasengrenzfunktionen wie sie in der Abbildung 3 zu sehen sind. Abbildung 4 zeigt die Abweichungen dieser numerisch berechneten zu den gemessenen Kurvenverläufe.

Nach insgesamt nur 428 Modellauswertungen einschließlich der Berechnung der Vorwärtsdifferenzenquotienten wurde die vorgegebene Genauigkeit erreicht. Der Verlauf der gewichteten Zielfunktion c ist in

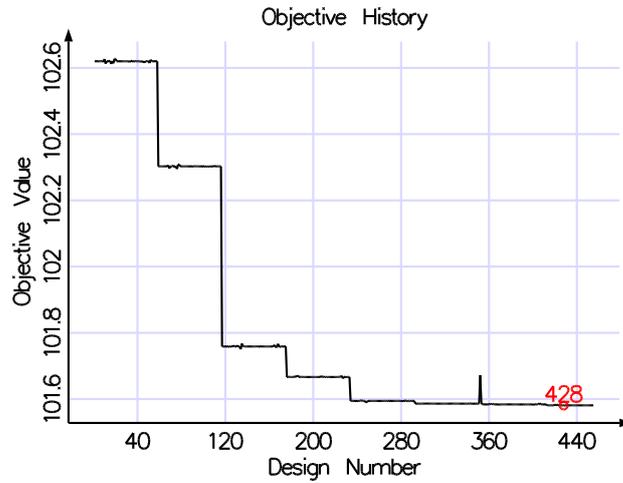


Abbildung 13: Konvergenz der gewichteten Zielfunktion c .

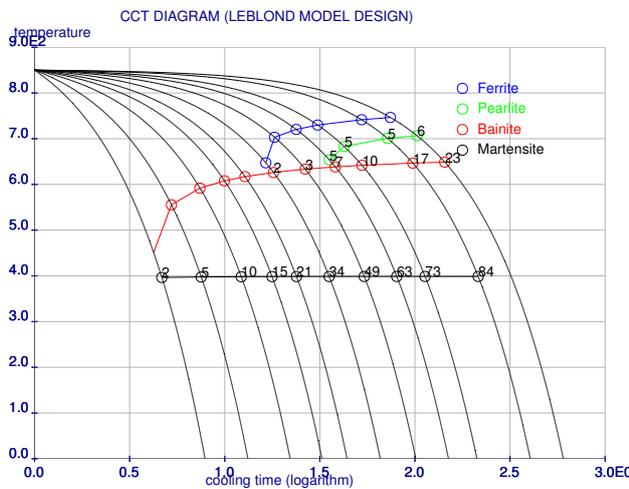


Abbildung 14: Optimiertes Design: Temperatur-Zeitverläufe $T_k(t)$ mit den entsprechenden Endgefügeanteilen von Austenit an den Phasengrenzen, Phasengrenzfunktionen für Ferrit $F(T, t)$, Perlit $P(T, t)$, Bainit $B(T, t)$ und Martensit $M(T, t)$ in Abhängig der Abkühlgeschwindigkeiten \dot{T}_k , ($k = 1, \dots, 11$).

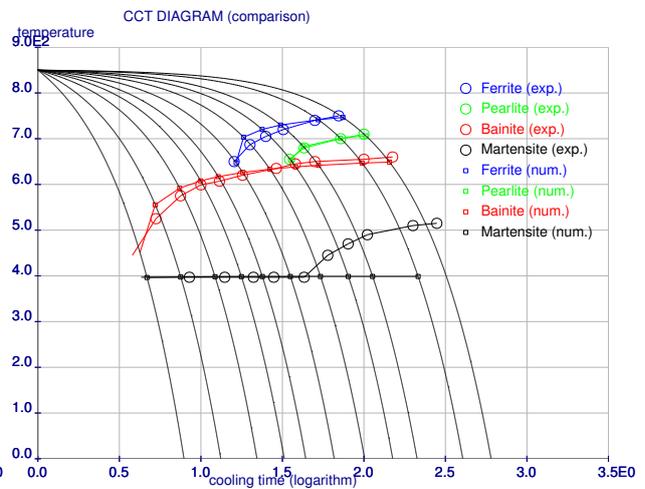


Abbildung 15: Geringe Abweichungen der optimierten zu den gemessenen Kurvenverläufe im End-Design der Optimierung.

der Abbildung 13 dargestellt. Die identifizierten Modell-Parameter ergeben sich entsprechend der Tabelle 2. Der Verlauf der Phasengrenzfunktionen für die Phasen Austenit $A(T, t)$ Ferrit $F(T, t)$, Perlit $P(T, t)$, Bainit $B(T, t)$ und Martensit $M(T, t)$ und die Endgefügeanteile von Austenit zeigt die Abbildung 14 und die geringen Abweichungen im Kurvenverlauf zeigt die Abbildung 15.

Tabelle 2: Identifizierte Modell-Parameter der Gefügekinetik

Einheiten in °C und s		
Parameter- nummer	Parameter in der Optimierung	Wert
1	Fe_Zeq_T.1	100
2	Fe_Zeq_T.2	100
3	Fe_Zeq_T.3	769.21
4	Pe_Zeq_T.1	450
5	Pe_Zeq_T.2	608.36
6	Pe_Zeq_T.3	724.16
7	Ba_Zeq_T.1	281
8	Ba_Zeq_T.2	350
9	Ba_Zeq_T.3	662.35
10	Ma_Zeq_T.1	0
11	Ma_Zeq_T.2	399.25
12	Ma_Zeq_T.3	399.99
13	Ma_Zeq_P.1	0.99
14	Ma_Zeq_P.2	0.5
15	Ma_Zeq_P.3	0
16	Fe_Tau_T.1	649.99
17	Fe_Tau_T.2	705
18	Fe_Tau_1	40
19	Fe_Tau_2	20.13
20	Pe_Tau_T.1	601.91
21	Pe_Tau_T.2	749.51
22	Pe_Tau_1	170.24
23	Pe_Tau_2	40.04
24	Ba_Tau_T.1	350.05
25	Ba_Tau_T.2	690.48
26	Ba_Tau_1	30.255
27	Ba_Tau_2	10.887
28	Fe_Rat_t.1	-19.54
29	Fe_Rat_t.2	0
30	Pe_Rat_t.1	-7.99
31	Pe_Rat_t.2	0
32	Ba_Rat_t.1	-171.36
33	Ba_Rat_t.2	0
34	Ma_Rat_t.1	-40

4.4 Sensitivitätsanalyse

Ziel der Sensitivitätsanalyse (vgl. dazu [Will u. a. \(2003\)](#)) ist es, die Sensitivität von streuenden Input-Variablen auf die Streuungen von Modellantworten zu untersuchen. Zur Bewertung der Sensitivität werden sowohl ingenieurmäßige (deterministische) Maße wie:

- Grenzwerte werden überschritten
- unerwünschte plötzliche Änderungen in den Antwortgrößen treten auf

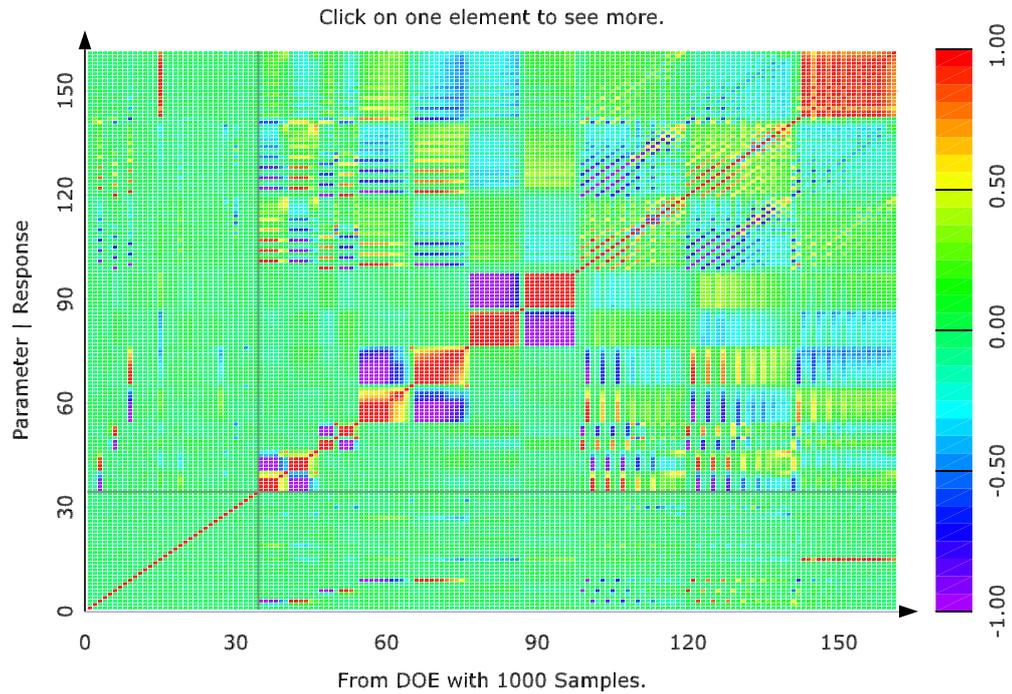


Abbildung 16: Korrelationsmatrix: Lineare Korrelationen zwischen den Parametern. Von Null verschiedene Werte verweisen auf Eingabe-Parameter mit großem Einfluss auf Ausgabe-Parameter.

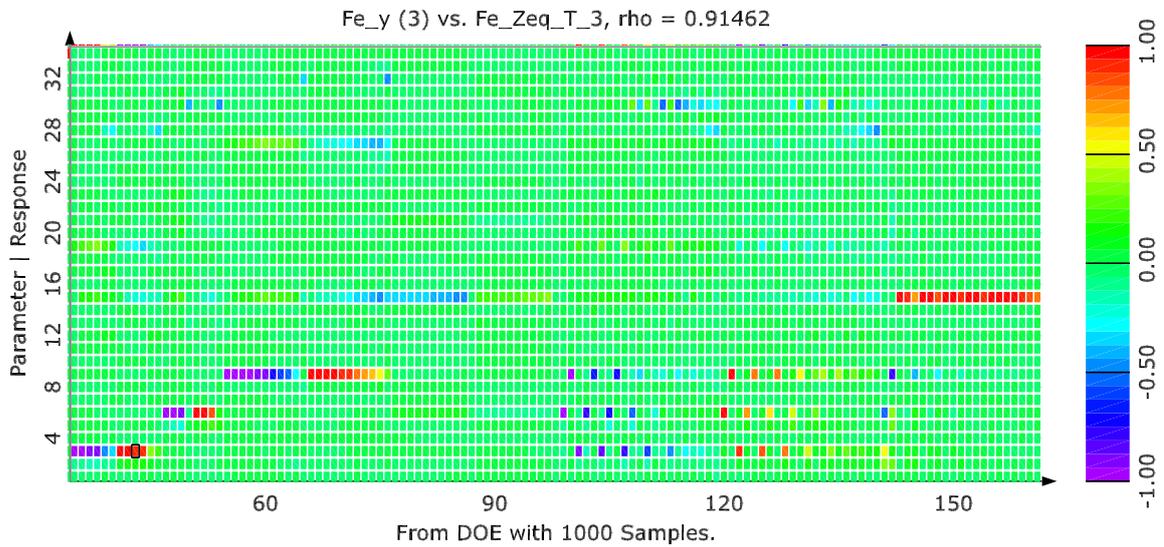


Abbildung 17: Ausschnitt aus der Korrelationsmatrix für die Verknüpfung der Eingabe-Parameter mit den Ausgabe-Parameter.

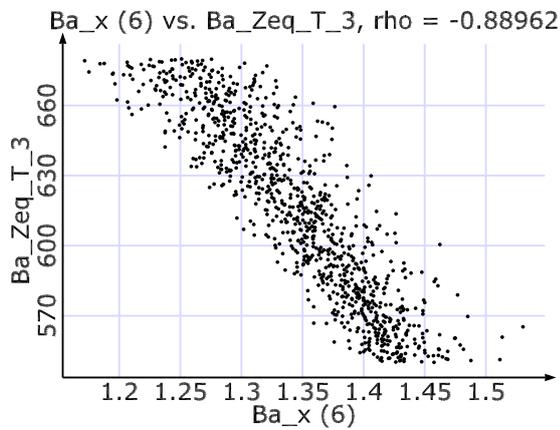


Abbildung 18: Anthill-Plot der ausgewählten Parameter Ba.Zeq.T.3 (Eingabe) und Ba.x(6). (Modellantwort: $t(6) : B(T, t)$).

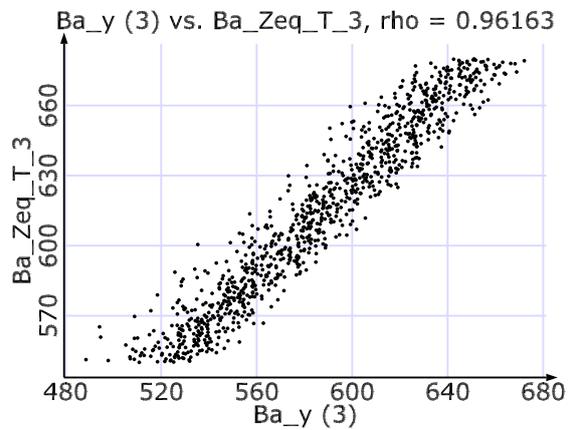


Abbildung 19: Anthill-Plot der ausgewählten Parameter Ba.Zeq.T.3 (Eingabe) und Ba.y(3). (Modellantwort: $T(3) : B(T, t)$).

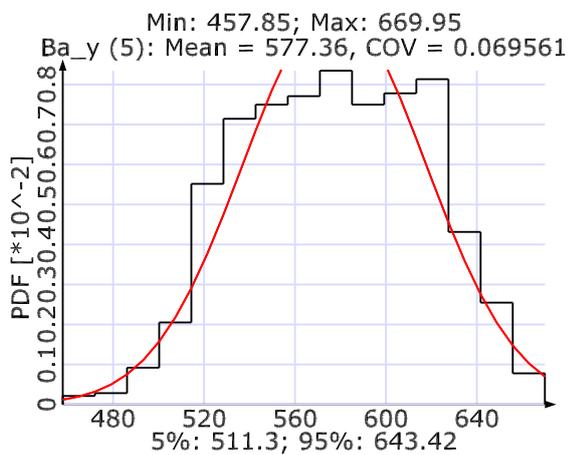


Abbildung 20: Histogramm der ausgewählten Modellantwort Ba.y(5).

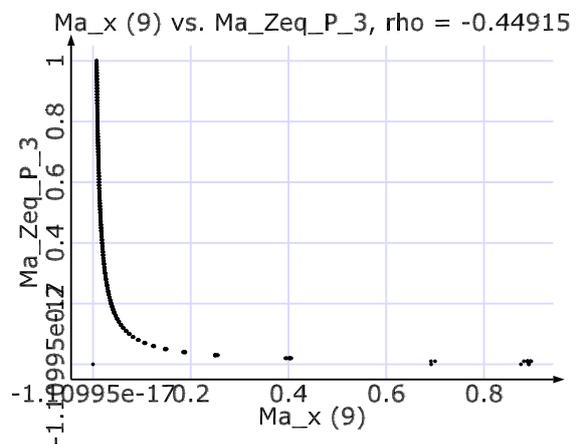


Abbildung 21: Anthill-Plot der ausgewählten Parameter Ma.Zeq.P.3 (Eingabe) und Ma.x(9). (Modellantwort: $t(9) : M(T, t)$).

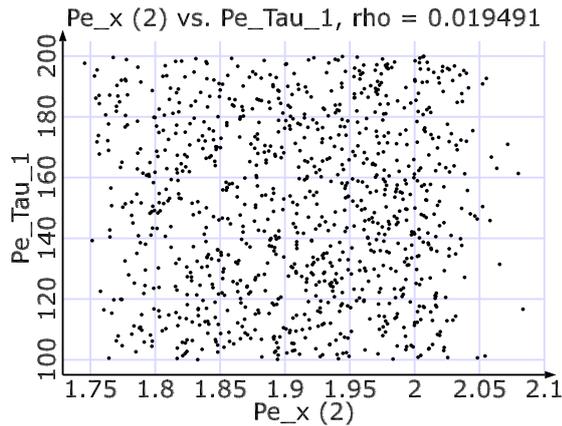


Abbildung 22: Anthill-Plot der ausgewählten Parameter Pe_Tau_1 (Eingabe) und $Pe_x(2)$. (Modellantwort: $T(2) : P(T, t)$).

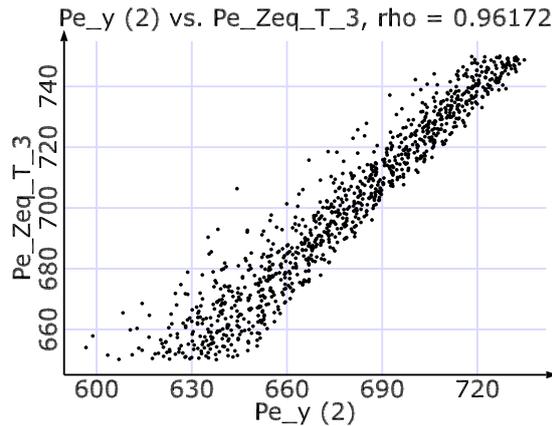


Abbildung 23: Anthill-Plot der ausgewählten Parameter $Pe_Zeq_T_3$ (Eingabe) und $Pe_y(2)$. (Modellantwort: $t(2) : P(T, t)$).

als auch statistische Maße wie z.B.:

- Mittelwerte verschieben sich zu sehr
- Variationskoeffizienten werden zu groß

untersucht.

Neben der Bewertung einzelner Modellantworten, können auch die Verknüpfungen von Inputparameter und Modellantworten aus den Korrelationsstrukturen bestimmt werden. Die Sensitivitätsuntersuchungen erfolgen im Allgemeinen mittels einer Berechnung extremer Parameter-Kombinationen, analytischer Ableitungen, verschiedener Design of Experiments (DOE) oder Response-Surface-Approximationen. In diesem Beispiel wurde ein Latin-Hypercube-Sampling als DOE gewählt.

Die Korrelationsmatrix zwischen den Parametern der Gefügekinetik zeigen die Abbildungen 16 und 17. Auffällig sind die stark unterschiedliche Parametersensitivitäten. Nur wenige Eingabeparameter haben für dieses Beispiel einen großen Einfluss, wie z.B.:

- $Fe_Zeq_T_3$
- $Pe_Zeq_T_3$ (Einfluss z.B. auf $Pe_y(2)$ vgl. Abb. 23)
- $Ba_Zeq_T_3$ (Einfluss z.B. auf $Ba_x(6)$ und $Ba_y(3)$ vgl. Abb. 18 und 19)
- $Ma_Zeq_P_3$ (Einfluss z.B. auf $Ma_x(9)$ vgl. Abb. 21)
- Fe_Tau_2
- Ba_Tau_2
- $Fe_Rat_t_1$
- $Pe_Rat_t_1$
- $Ba_Rat_t_1$

Die Bereiche in der Korrelationsmatrix mit kleinem Korrelationskoeffizienten kennzeichnen die Parameter, die nur einen geringen Einfluss auf den Verlauf der Modellantworten haben. Beispielsweise hat der Parameter Pe_Tau_1 wenig Einfluss auf die Modellantworten (vgl. z.B. Abbildung 22).

5 Ausblick

Mit der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, dass eine Identifikation der Modellparameter der Gefügekinetik mit relativ geringem numerischen Aufwand gelingt. Auch können immer die relevanten Parameter identifiziert werden, so dass der numerische Aufwand der Optimierung und die Bestimmung der Parametergrenzen verbessert werden kann. Auf der Seite der Modellierung der Gefügekinetik ist noch zu klären, ob die Berücksichtigung der Korngrößeneffekte zu einer besseren Übereinstimmung der Kurvenverläufe mit den experimentell bestimmten S-ZTU-Diagrammen führt.

Für eine nutzerfreundliche Anwendung der Identifikation der Modellparameter ist die von Hand durchzuführende Parametrisierung der ASCII-Dateien zu automatisieren. Weiterhin ist die Gefügeumwandlungssimulation und die Systemidentifikation zu kombinieren mit den anderen Einzelprozessen der Schweißsimulation: Prozesssimulation und Simulation der Strukturmechanik in ein ANSYS-Addone.

Literatur

- AVRAMI, M.: Kinetics of phase change I. In: *J. Chem. Phys.* 7 (1939), S. 1103–1112
- AVRAMI, M.: Kinetics of phase change II. In: *J. Chem. Phys.* 8 (1940), S. 212–224
- AVRAMI, M.: Kinetics of phase change III. In: *J. Chem. Phys.* 9 (1941), S. 177–184
- BOX, G. E. P. ; DRAPER, N. R.: *Empirical Model Building and Response Surfaces*. New York, USA : John Wiley and Sons, 1987
- CAHN, J.W.: Transformation kinetics during continuous cooling. In: *Acta Met* 4 (1956), S. 572–575
- DILTHEY, D.: *Schweißtechnische Fertigungsverfahren, Band2, Verhalten der Werkstoffe beim Schweißen*. VDI- Verlag, Düsseldorf, 1995
- HUNKEL, M. ; LÜBBEN, T. ; HOFFMANN, F. ; MAYR, P.: Modellierung der bainitischen und perlitischen Umwandlung bei Stählen / IWT Bremen. HTM 6, 1999. – Forschungsbericht
- KOISTINEN, D. P. ; MARBURGER, R. E.: A general equation prescribing the extend of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. In: *acta metallurgica* 7 (1950)
- KOLMOGOROV, A.: Statistical theory of crystallization of metals. In: *Bull. Acad. Sci. USSR Mat. Sci.* 1 (1937), S. 355–359
- LEBLOND, J.B. ; DEVAUX, J.: A New Kinetic Model for Anisothermal Metallurgical Transformations in Steel Including Effect of Austenite Grain Size. In: *Acta Met* 32 (1984), S. 137–146
- MYERS, R. H.: *Response Surface Methodology*. Boston USA : Allyn and Bacon Inc., 1971
- MYERS, R. H. ; MONTGOMERY, D. C.: *Response Surface Methodology - Process and Product Optimization Using Designed Experiments*. New York : John Wiley & Sons, Inc., 1995
- RIEDEL, J.: Gewichtsoptimierung eines Schiffes unter Spannungsrestriktionen. Weimar, Germany, 2000
- SCHEIL, E.: Anlaufzeit der Austenitumwandlung. In: *Arch. Eisenhüttenwesen* 12 (1935), S. 565–567
- SCHITTKOWSKI, K.: NLPQL: A FORTRAN subroutine solving constrained nonlinear programming problems. In: *Annals of Operations Research* 5 (1985/86), S. 485–500
- SEYFFARTH, P. ; MEYER, B. ; SCHARFF, A.: *Großer Atlas, Schweiß-ZTU-Schaubilder*. Düsseldorf : Fachbuchreihe Schweißtechnik, DVS-Verlag, 1992
- VON MONTIGNY, C. ; SCHWITALA, J. ; SEIPP, I. ; NIEMEIER, R.: Integrated Workflow Management. Friedrichshafen, Lake Constance, Germany, October 9-11, 2002

WILL, J.: OptiSLang 1.0 – benutzerfreundliche Softwareplattform zur Parameteroptimierung und Robustheitsbewertung. Friedrichshafen, Lake Constance, Germany, October 9-11, 2002

WILL, J. ; ROOS, D. ; RIEDEL, J. ; BUCHER, C: Robustheitsbewertung in der stochastischen Strukturmechanik. Wiesbaden, Germany, May 7-8, 2003