

Numerisk modellering av tilbakeglødingsoppførsel i utvalgte aluminiumslegeringer

Mads Reiten

Materialteknologi
Oppgaven levert: Juli 2011
Hovedveileder: Knut Marthinsen, IMTE

Forord

Jeg erklærer herved at arbeidene i denne rapporten har blitt utført selvstendig og i samsvar med eksaminasjonsreglementet hos Norges Naturvitenskapelige Universitet, NTNU.

Jeg vil gjerne takke min veileder Knut Marthinsen for all hjelp og gode innspill i forbindelse med utførelse av arbeidene i denne rapporten.

Mads Reiten
Trondheim, June 2011

Sammendrag

I denne rapporten er det tatt for seg modellering av mykningsreaksjoner etter deformasjon for AA1200- og AA3103-legeringer. Grunnleggende teori rundt mykningsreaksjonene for disse legeringene er presentert. Det er hentet inn eksperimentelle data for sammenlikning av modellerte data, og resultatene er presentert i form av grafer for flytspenning og tabeller for rekrytallisert kornstørrelse. Det er brukt to matematiske modeller som bakgrunn for simuleringene. Den ene, Alsoft, dekker mikrostrukturelle endringer, og den andre, Presipal, dekker presipitering under varmebehandling.

Resultatene for flytspenninger viser at simulering av varmebehandlingsforløp for AA1200-legeringer gjøres enkelt ved hjelp av Alsoft på grunn av fravær av presipitering som har innvirkning på varmebehandlingsforløpet. Simulering for AA3103-legeringer er mer krevende på grunn av den bremsende kraften som utøves på rekrytalliserte kim og rekrytalliserte korn som vokser på grunn av samtidig presipitering under varmebehandling. Her viser resultatene at en direkte kobling av modellene Alsoft og Presipal gir akseptabel tilpasning mellom eksperimentelle data og simulerte data for flytspenninger.

Modellering av kornstørrelser viser, ved en sammenlikning med eksperimentelle resultater, at modellen har endel utfordringer med hensyn til dette. Verken størrelser eller trend er i alle tilfeller realistiske. Dette kan skyldes usikkerhet i parametere som brukes.

Konklusjonen av arbeidet er at modellene i seg selv fungerer, men det kreves endel arbeid rundt fastsetting av parametere for at disse skal være anvendelige. Per dags dato blir det mye synsing for at resultatene skal vise akseptable avvik i forhold til eksperimentelle data.

Innholdsfortegnelse

Sammendrag	iii
1 Innledning	1
2 Teoretisk bakgrunn	3
2.1 Aluminiumlegeringer:	3
2.1.1 Termomekanisk bearbeiding:	5
2.2 Varmebehandling/gløding:	7
2.2.1 Recovery/gjenvinning:	7
2.2.2 Rekrystallisasjon:	8
2.2.3 Legeringssammensetning:	8
2.2.4 Presipitering:	9
2.3 Modellering av rekrystallisasjon:	11
2.3.1 Kinetikk:	11
2.3.2 Nukleasjon av rekrystallisasjon:	11
2.4 Alsoft:	14
2.5 Presipal:	18
3 Eksperimentelt	21
3.1 Materialkarakterisering:	21
3.1.1 Gløding/varmebehandling:	23
3.2 Matlab:	23
3.3 Sigmaplot:	24
3.4 Kobling av Alsoft og Presipal - Conpal:	24
4 Resultater	25
4.1 Eksperimentelle resultater:	25
4.2 Parameteranalyse:	28
4.2.1 Recovery:	28
4.2.2 Rekrystallisasjon:	32
4.3 Modelleringer:	36
4.3.1 Alsoft:	37
AA1200:	37
CP3103:	38

	LP3103:	41
4.3.2	Conpal:	43
	CP3103:	43
	LP3103:	45
4.4	Andre analyser:	49
4.4.1	Fast-løsning-konsentrasjon:	49
4.4.2	Initielt Zener drag:	49
5	Diskusjon	51
5.1	Parameteranalyse:	51
5.2	Modelleringer:	51
5.2.1	AA1200:	51
5.2.2	CP3103:	52
5.2.3	LP3103:	52
5.2.4	Zener drag:	52
5.2.5	Inputparametere:	54
5.3	Modelleringsprogrammene:	54
6	Konklusjon	57
	Referanser	58
A	Parametere	A
B	Zener drag:	G
C	Andre vedlegg:	K
C.1	Matlab:	L
C.2	Conpal:	U
C.3	Presipal:	V

Kapittel 1

Innledning

Varmebehandling av aluminium etter bearbeiding er en nødvendighet i industrien, både for å øke styrke for noen legeringer og for å lette videre bearbeiding for noen. Eksperimentelle metoder for å bestemme hvordan varmebehandlingen skal foregå for å oppnå ønsket resultat, er både tungvint og tidkrevende. Derfor utvikles det metoder for å forutse resultater basert på teori rundt mekanismene som inngår i mikrostrukturelle endringer under varmebehandling. Den enkleste måten å forutse resultater er iterative datamodeller som ved hjelp av teorien beregner diverse ønskede verdier.

I denne oppgaven undersøkes et sett av 1xxx- og 3xxx-legeringer. Disse legeringsgruppene har forskjellige industrielle bruksområder. For 1xxx-gruppen inkluderer dette emballasje, elektronisk utstyr, belysning og dekorasjon. 3xxx-serien vil med sin kombinasjon av styrke og god formbarhet ha et annet sett av bruksområder, som inkluderer brusbokser, rør og loddemateriale i varmevekslere og plater til bygningsformål.

1xxx- og 3xxx-legeringer vil også oppføre seg forskjellig under varmebehandling. En av de viktigste forskjellene kommer av presipitering under varmebehandling for 3xxx-legeringer. Dette fører til vanskeligheter med å prediktere resultatene av varmebehandling for disse legeringene på grunn av kompleksiteten til modellering av samtidigpresipitering med gjenvinning og rekrystallasjon under varmebehandling.

I denne oppgaven er det hentet inn eksperimentelle data fra to doktoravhandlinger av Stian Tangen[1] og Knut Sjølstad[2]. Dette er gjort for å kunne sammenlikne eksperimentelle data med modellerte data. Modellene som er brukt heter Alsoft og Conpal, og er begge utviklet på NTNU. Bakgrunnen for oppgaven er dermed, i beste fall, å kunne forbedre kunnskapen om fenomenene som modellen beskriver og modellen i seg selv.

Kapittel 2

Teoretisk bakgrunn

I denne delen presenteres litt bakgrunn for aluminium og fenomenene som er studert, både fenomenologisk og teoretisk. I tillegg blir konseptene rundt matematisk modellering av rekrytallisasjon også presentert.

2.1 Aluminiumlegeringer:

Aluminium deles oftest inn i to hovedgrupper, støpelegeringer og knalegeringer. Disse deles også inn i to undergrupper, herdbare og ikke-herdbare legeringer. I gjennomsnitt har Støpelegeringer lavere flytspenning enn knalegeringer på grunn av arbeidsharding under bearbeiding.

Forskjellen mellom herdbare og ikke-herdbare legeringer ligger i aluminiumens egenskaper til å løse legeringselementer ved høye temperaturer. For herdbare legeringer vil aluminiumen løse legeringselementer når temperaturen økes. Når legeringen utsettes for bråkjøling vil legeringselementene låses i krystallgitteret, enten som substitusjonelt løste atomer eller som interstitielt løste atomer. I aluminium er substitusjonelt løste atomer den vanligste mekanismen. Etter at bråkjølingen har funnet sted kan legeringen utherdnes ved at legeringselementer samles i koherente og/eller inkoherente partikler i krystallgitteret, eller som presipitater som bidrar til styrken av materialet. Styrkebidraget er på grunn av at disse partiklene hindrer dislokasjonsbevegelse.

Herding i ikke-herdbare legeringer er i hovedsak grunnet kornstørrelse, deformasjonsharding og elementer i fast løsning[3].

Økningen i flytspenning grunnet kornstørrelse er gitt ved Hall-Petch-sammenhengen. Denne er gitt ved likning 2.1. Her er σ_y flytspenning, σ_0 er en materialkonstant for utgangspunkt for flytspenning, k_y er herdingskoeffisienten til materialet og d er

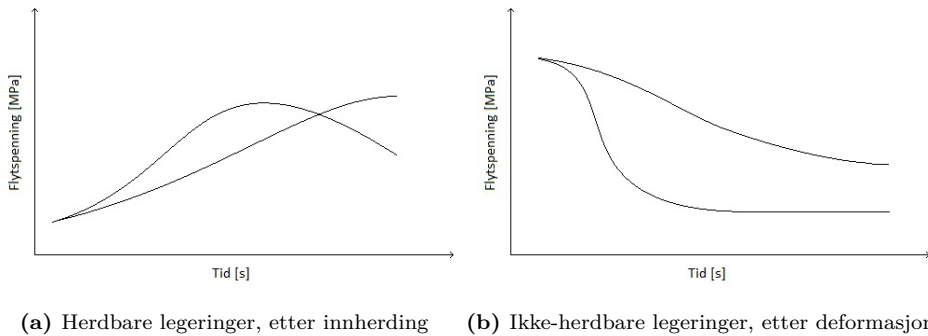
kornstørrelse.

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{k_y}{\sqrt{d}} \quad (2.1)$$

Deformasjonsherding er grunnet en økning i dislokasjoner i materialet. Denne økningen i dislokasjoner resulterer i en økende hindring, *pinning*, av dislokasjonene. En allment akseptert sammenheng mellom flytspenning og dislokasjonstetthet er gitt i likning 2.2, hvor α er en materialkonstant, G er skjærmodulen, b er Burgers vektor og ρ er dislokasjonstetthet.

$$\sigma_y = \alpha G b \sqrt{\rho} \quad (2.2)$$

Fast-løsnings-herding skyldes interaksjon mellom mobile dislokasjoner og fast løste atomer i krystallgitteret. Her vil elastiske spenninger på grunn av mistilpasning mellom atomer med forskjellig størrelse bremse eller hindre dislokasjonsbevegelse og bidra til styrken til materialet. I tillegg vil tilstedeværelse av fast løste atomer i matriksen hemme utgløding av dislokasjoner under varmebehandling.



Figur 2.1.1: Prinsipiell forskjell på herdbare og ikke-herdbare aluminiumslegeringer

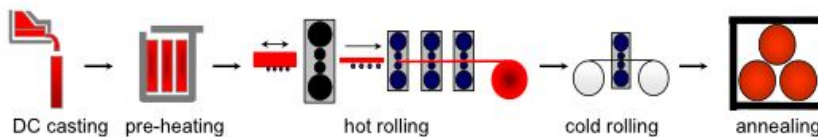
Figur 2.1.1 viser en skisse over typiske varmebehandlingsforløp for herdbare og ikke-herdbare legeringer. Disse to tilfellene har forskjellig forhistorie og kan dermed ikke sammenliknes direkte.

For herdbare legeringer viser figuren utharding etter innherding, mekanismen for dette er utfelling av partikler, presipitasjonsherding, som beskrevet ovenfor. For ikke-herdbare legeringer beskriver figuren varmebehandlingsforløp etter varm-/kald-deformasjon hvor det lagres en mengde dislokasjoner i strukturen. Kurvene i figur 2.1.1 beskriver reduksjonen i flytspenning ved gløding av en slik deformert struktur og skyldes i hovedsak utgløding av dislokasjoner, subkornvekst og rekrySTALLISASJON. Dette er beskrevet i nærmere detalj senere i teoridelen.

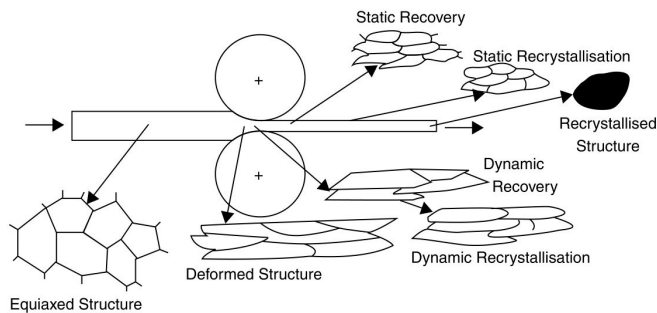
2.1.1 Termomekanisk bearbeiding:

Termomekanisk bearbeiding er en prosess som kombinerer ulike mekaniske og termiske bearbeidingsprosesser, med alternerende plastisk deformasjon med resulterende arbeidsharding, og varmebehandling/mykningsprosesser langs én prosessrute. Materialet støpes, varmes opp og kjøres gjennom en valseprosess, varm- og kaldvalsing, med etterfølgende varmebehandling/mykgløding. Dette er en typisk prosessrute for fremstilling av plater og vises skjematisk i figur 2.1.2.

Valsingen skjer ofte i form av en reversibel valseprosess, hvor valsene reverserer og valser materialet videre for hver omgang, fulgt av sluttvalsing som oftest er flere valser etter hverandre med minkende tykkelse. Under valseprosessen vil det forekomme en endring i mikrostruktur. Figur 2.1.3 viser skjematisk hvordan valsing foregår og hvordan mikrostrukturen endrer seg under prosessen.

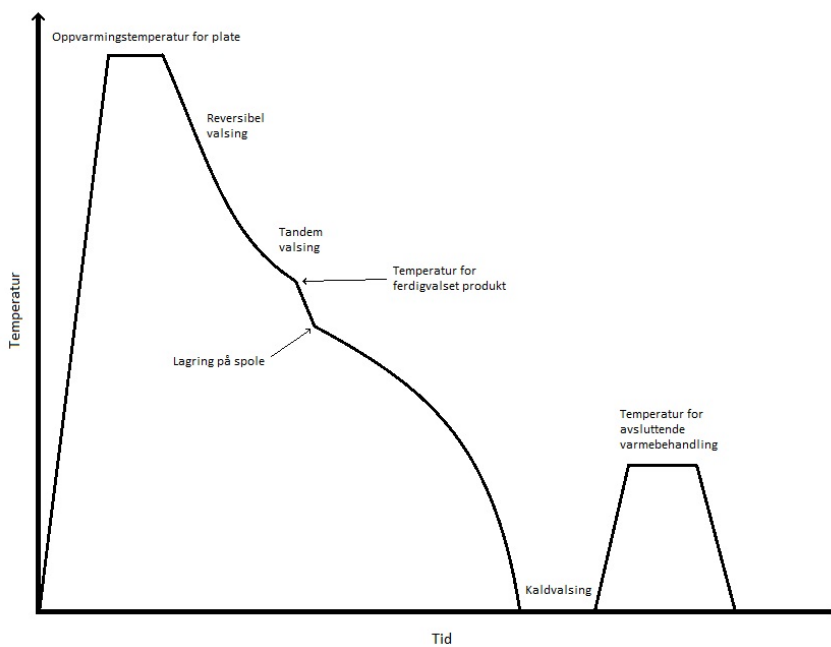


Figur 2.1.2: Skissert prosessrute for valset aluminium



Figur 2.1.3: Termomekanisk valseprosess[4]

Figur 2.1.4 viser et typisk temperaturforløp for termomekanisk bearbeiding av ikkeherdbare aluminiumslegeringer.

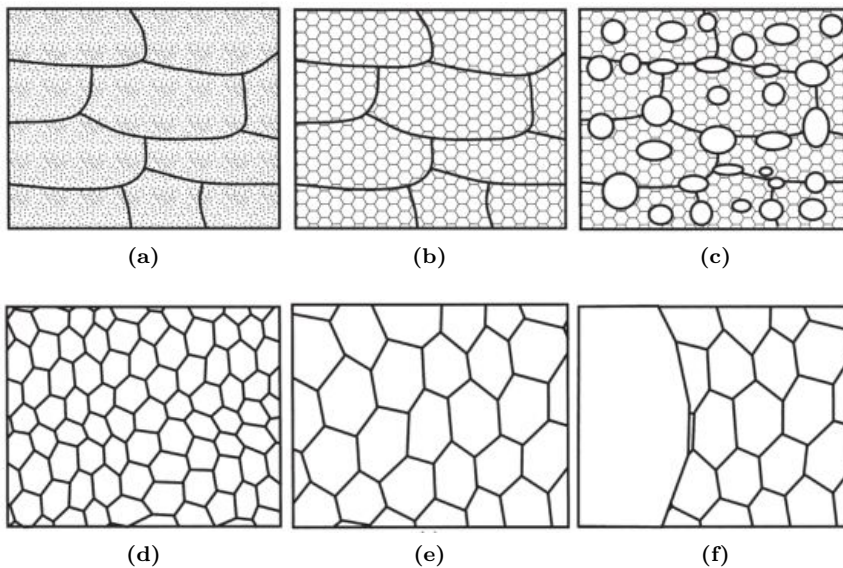


Figur 2.1.4: Temperaturforløp for termomekanisk bearbeiding av ikke-herdbare aluminiumslegeringer

2.2 Varmebehandling/gløding:

Flere fenomener kan observeres under varmebehandling etter plastisk deformasjon. De vanligste er recovery/gjenvinning, rekrystallasjon og presipitering.

Recovery innebærer at dislokasjoner annihileres, reorganiseres inn i mer stabile konfigurasjoner og subkornvekst. Under rekrystallasjon vil nye tøyingsfrie korn vokse inn i den deformerte matriksen. Presipitering går ut på at nye dispersoider dannes, som igjen kan hemme de to andre mekanismene.



Figur 2.2.1: Varmebehandlingsforløp[5]

Figur 2.2.1 viser skjematisk typisk endring i mikrostruktur under varmebehandling av aluminium etter deformasjon.

2.2.1 Recovery/gjenvinning:

Materialer blir ofte varmebehandlet etter deformasjon for å oppnå de ønskede egenskaper til for eksempel videre forming av materialet. Recovery består av annihiling av dislokasjoner og subkornvekst og skjer i hovedsak før rekrystallasjonsprosessen starter.

Både recovery og rekrystallasjon er prosesser drevet av lagret energi etter deformasjon, ligning 2.3, slik at disse prosessene er konkurrerende prosesser. Dette

betyr igjen at en høy mengde recovery vil påvirke rekrystallasjonsprosessen på grunn av en betydelig reduksjon i lagret energi, dette fordi den totale tettheten av dislokasjoner, ρ i likning 2.3, reduseres. Recovery i form av subkornvekst spiller også en stor rolle i nukleasjon av rekrystalliserte korn, slik at det ofte er vanskelig å skille mellom recovery og tidlige stadier av rekrystallasjon.

Lagret energi i form av dislokasjoner i et materiale er gitt som:

$$E_s = \frac{1}{2}Gb\rho \quad (2.3)$$

2.2.2 Rekrystallasjon:

Rekrystallasjon er definert som prosessen ved at et deformert materiale danner et nytt sett med udeformerte korn. Et rekrystallasjonsnuklei er definert som en krystallitt, eller pseudokrystall, med lav indre energi som vokser inn i deformert materiale, adskilt av en høyvinkel-korngrense. Disse dannes på korngrenser, deformasjonssoner rundt store partikler eller fra deformasjonsbånd. Nuklei med foretrukne retninger vil lettere vokse på grunn av gode forutsetninger for å minimere indre energi.

Nukleasjon i aluminium oppstår i hovedsak på tre forekomster i materialet. Disse er kube-bånd, korngrenser generelt og deformasjonssoner rundt store partikler. Prosessen er delt inn i to hoveddeler, nukleasjon og vekst, og er sterkt avhengig av deformasjonshistorien til materialet. Dette fordi drivkraften til rekrystallasjonen ligger i den lagrede energien etter deformasjon. Mengden av lagret energi bestemmer både antall nuklei og vekstraten til de rekrystalliserte kornene. Her vil økende lagret energi gi et økende antall nuklei fordi den kritiske størrelsen på nukleuset minker. I tillegg til lagret energi vil prosessen også avhenge av størrelsen på partikler i materialet. Store partikler vil fungere som egnede nukleasjonssteder, mens små partikler vil utøve en bremsende kraft på den høyvinkel-korngrensen som beveger seg innover i det deformerte materialet, se kapittel 2.2.4 og 2.3.2 for nærmere beskrivelse.

2.2.3 Legeringssammensetning:

Legeringssammensetningen til den aktuelle aluminiumslegeringen vil ha en sterk innvirkning på rekrystallasjonsoppførselen til materialet. Dette vil i hovedsak inntreffe som enten *Solute Drag* eller som presipiterte dispersoider.

Mangan vil etter deformasjon forekomme som løste atomer. Selv etter homogenisering vil krystallgitteret i aluminiumen være overmettet på mangan, noe

som kan resultere i at mangan presipiterer som dispersoider, ved etterfølgende varmebehandling.

Jern vil, ifølge Furu et al. [6] ha en stor effekt på glødeoppførselen til kommersielt rent aluminium. Furu rapporterte at små variasjoner i konsentrasjon, størrelsesorden 10^{-2} , vil ha effekt på glødetiden med en økning av størrelsesorden 10^1 .

Silisium har i utgangspunktet liten eller ingen innvirkning på glødeoppførselen til aluminium, men i kombinasjon med jern vil det kunne ha en effekt. I dette tilfellet vil silisium fremskynde dannelsen av store partikler under varmebehandling. Dette resulterer i primærpartikler med slik størrelse at nukleasjon rundt partikler, Partikkel stimulert nukleasjon, kan fremmes.

2.2.4 Presipitering:

Presipitering er en termodynamisk aktivert prosess som drives av konseptet om minimalisering av fri energi. Siden de fleste legeringer av aluminium er i en metastabil fase vil denne prosessen kreve en viss aktiveringsenergi for å nå global stabilitet.

Det finnes to hovedgrupper av dispersoider, koherente og inkoherente dispersoider. Koherente dispersoider er hvor matriks og dispersoiden deler krystallgitter, mens inkoherente ikke gjør dette. I begge tilfeller vil det oppstå en grenseflate mellom matriks og dispersoide.

Veksten av dispersoidene er bestemt av diffusjonshastigheten av legeringselementer inn i grenseflaten og hoppefrekvensen av atomer gjennom grenseflaten. Hvis diffusjonshastigheten er høy, vil veksten av dispersoidet være kontrollert av grenseflaten, og omvendt være kontrollert av diffusjon og området rundt dispersoiden vil være utarmet på legeringselementer. Fullt koherente dispersoider vil vanligvis ha en grenseflate med vesentlig lavere mobilitet enn motstykket, og her vil veksten være kontrollert av normal gitterdiffusjon.

Zener Drag er en kraft som utøves av små presipitater i materialet. Denne kraften bremser en korngrænse i bevegelse, og resultatet er at recovery- og rekrySTALLISASJONSprosessen bremses.



Figur 2.2.2: Illustrasjon av Zener Drag på korngrænse

Kreftene som påvirker korn grensen i figur 2.2.2 når sitt maksimum når vinkelen mellom korn grensen og partikkelen er 45° og er gitt ved:

$$F_z = \pi r \gamma \quad (2.4)$$

hvor r er partikkelens radius og γ er grenseflate-energien mellom partikkel og korn grense.

Den bremsende kraften til en fordeling av partikler regnes ut ved å først finne antallet partikler per areal som påvirker korn grensen. Det totale antall partikler per volum er gitt ved:

$$N_v = \frac{3f_r}{4\pi r^3} \quad (2.5)$$

hvor f_r er volumfraksjon av partikler og r er midlere radius på partiklene.

Ved å anta at korn grensen er gitt i et plan innenfor en avstand r på hver side, blir derfor antallet partikler per areal som påvirker korn grensen:

$$N_s = 2r N_v = \frac{3f_r}{2\pi r^2} \quad (2.6)$$

Den totale bremsende kraften som utøves basert på en partikkelfordeling blir derfor:

$$P_z = N_s \cdot F_z = \frac{3f_r \gamma}{2r} \quad (2.7)$$

2.3 Modellering av rekrytallisasjon:

2.3.1 Kinetikk:

En kvantitativ beskrivelse av rekrytallisasjon er gitt av JMAK-teorien, *Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov*. Denne gir en matematisk beskrivelse av det generelle transformasjonsproblemet med nukleasjon og vekst av rekrytallisasjonskornene. Denne sammenhengen er gitt i ligning 2.8.

$$X_v = 1 - \exp(-kt^n) \quad (2.8)$$

Her er X_v fraksjon rekrytallisert, t er glødetid og k og n er situasjons- og materialspesifikke konstanter.

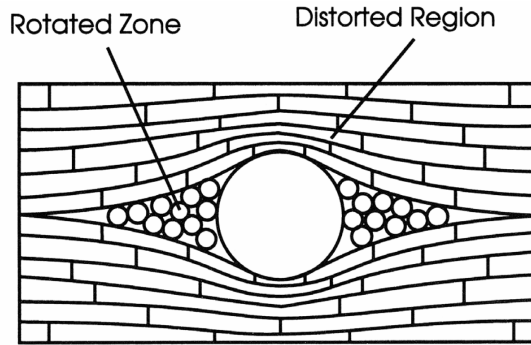
Problemet med denne sammenhengen er at den bare er gyldig hvis vekstraten er konstant og at fordelingen av nuklei er tilfeldig fordelt. Det er likevel funnet tilfeller hvor ligning 2.8 er gyldig, dette inkluderer såkalte *site-saturation-tilfeller*, hvor det antas at alle nuklei skapes på samme tidspunkt, ved $t=0$. I dette tilfellet er eksponenten $n=3$.

Det finnes også en enkel analytisk løsning på samme form for det tilfellet hvor nuklei blir aktivert med en konstant rate gjennom hele transformasjonen, såkalt *Johnson-Mehl* nukleasjons-kinetikk. I dette tilfellet er eksponenten $n=4$.

2.3.2 Nukleasjon av rekrytallisasjon:

Det er for modelleringsformål allment akseptert at nukleasjon av rekrytallisasjon skjer ved tre mekanismer, Vatne et al. [7]. Disse er PSN, *Particle Stimulated Nucleation*, nukleasjon på kube-korn og ved korn grenser.

PSN, partikkel stimulert nukleasjon, tar for seg nukleasjon i deformasjonssonen som opptrer rundt ikke-deformerbare partikler under deformasjon. Denne mekanismen har siden arbeidene Humphreys [8] og Humphreys [9] vært akseptert som den viktigste og ofte dominerende nukleasjonsmekanismen i aluminiumslegeringer med store ikke-deformerbare partikler. Slike deformasjonssoner er illustrert i figur 2.3.1.



Figur 2.3.1: Deformasjonszoner rundt ikke-deformerbare partikler

Den kritiske partikkelstørrelsen for slik nukleasjon er gitt ved Gibbs-Thompson, ligning 2.9.

$$\eta^* = \frac{4\gamma_{GB}}{P_D - P_Z} \quad (2.9)$$

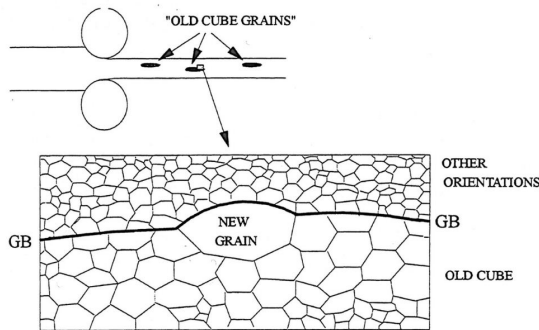
Her er $P_D - P_Z$ den effektive drivkraften for rekrytllisasjon og γ_{GB} den spesifikke korn grense-energien. Ifølge Murr [10] er γ_{GB} av størrelsesorden 0.3 J/m^2 .

I aluminiumslegeringer kan fordelingen av disse partiklene beskrives matematisk ved ligning 2.10, Vatne et al. [7].

$$f(\eta) = \text{Hexp}(-L\eta) \quad (2.10)$$

Nukleasjon på kube-korn skjer hvor kubiske korn har overlevd deformasjonen og hvor kriterier for regenerering av kube-korn er etablert. Grunnen til at kube-korn har gode betingelser for rekrytllisasjon er at subkornene har en størrelsesfordeling som er fordelaktig i forhold til subkorn med andre orienteringer. Dette vises i en størrelsesfordeling, som for subkorn i kube-korn viser en lang hale av store subkorn.

Siden de rekrytlliserte kornene fra kube-korn dannes ved SIBM, *Strain-Induced-Boundary-Migration*, vil veksten være avhengig av at nabokornene har en gunstig orientering, for eksempel S-tekstur. Dette fordi at tilstedeværelsen av høyvinkel *Cube-S*-korn grenser, $\sim 40^\circ <111>$ orienteringssammenheng, promoterer nukleasjon fra kube-korn. Figur 2.3.2 viser en skisse over nukleasjon fra kube-korn.



Figur 2.3.2: Nukleasjon fra kube-korn

Den siste av de tre nukleasjonsmekanismene er nukleasjon på gamle korn grenser. Denne mekanismen er en mer generell versjon av nukleasjon fra kubekorn. Den generelle forskjellen er at kube-korn oftest har en størrelsesfordel for subkorn og ofte gode betingelser for misorientering mot nabokorn i forhold til ”normale” korn grenser.

Bakgrunnen for denne mekanismen er at under deformasjon er det nødvendig med flere slip-systemer i periferiet av et korn for å skape kompatibilitet mellom stabile korn med forskjellige orienteringer, jfr. teorien om relaxed constraints. Dette resulterer i en deformasjonssone med store rotasjoner og opphopning av tøyning mellom de forskjellige teksturkomponentene. Målinger har påvist store misorienteringer mellom subkorn i disse sonene[11]. Dermed gir disse tilfeldig orienterte subkornene rundt gamle korn grenser gode nukleasjonsbetingelser for en tilfeldig tekstur. Eksperimentelle arbeider har sannsynliggjort denne nukleasjonsmekanismen[11][12].

2.4 Alsoft:

Alsoft er en modell som beskriver mykgløding av aluminium. Modellen har flytspenning, rekrystallisert kornstørrelse og fraksjon rekrystallisert som de viktigste utverdiene. Innverdiene i modellen er normalt gjennomsnittlig misorientering, gjennomsnittlig subkornstørrelse, dislokasjonstetthet, tøyning, temperatur, kjemisk sammensetning og en matematisk beskrivelse av størrelsesfordeling av partikler.

Modellen regner ut verdiene for hver enkel t , for deretter å gjenta prosessen for neste $t + \Delta t$.

For å regne ut en startverdi for ρ_i kan likning 2.11 benyttes, med forbehold om at det finnes data for subkornstørrelse fra eksperimentelle forsøk. C_1 er av størrelsesorden 2-4.

$$\rho_i = \left(\frac{C_1}{\delta} \right)^2 \quad (2.11)$$

$$\frac{d\rho_i(t)}{dt} = -\nu_D b A_\rho B_\rho \rho_i(t)^{3/2} \exp\left(-\frac{U_a}{RT(t)}\right) 2 \sinh\left(\frac{A_\rho G b^4}{kT(t)} \sqrt{\rho_i(t)}\right) \quad (2.12)$$

$$\frac{d\delta(t)}{dt} = \nu_D b A_\delta B_\delta \exp\left(-\frac{U_a}{RT(t)}\right) 2 \sinh\left(\frac{A_\delta G b^4}{kT(t)} \frac{1}{\delta(t)}\right) \quad (2.13)$$

$$\frac{dr(t)}{dt} = V(t) \quad (2.14)$$

Her er $\frac{d\rho_i(t)}{dt}$, $\frac{d\delta(t)}{dt}$ og $\frac{dr(t)}{dt}$ henholdsvis endring i dislokasjonstettheten, subkornstørrelse og radius til rekrystalliserte korn ved tiden t .

Konstantene A_δ og A_ρ i ligning 2.12 og 2.13 er gitt ved:

$$A_\delta = \omega_\delta c_{ss}^{-e_\delta} \quad (2.15)$$

$$A_\rho = \omega_\rho c_{ss}^{-e_\rho} \quad (2.16)$$

hvor den effektive konsentrasjonen av fast løste atomer er definert som c_{ss} . Denne sier noe om konsentrasjonen av fast løste atomer som påvirker varmebehandlingsforløpet.

Ligning 2.12 og 2.13 beskriver recovery under varmebehandling. Denne delen av Alsoft har noen modellparametere som ikke er veldefinerte. Pågående arbeider av Sindre Bunkholt[13] tar for seg vekst av subkorn for å kunne forbedre prediksjonen i denne delen av modellen.

Opphavet til ligning 2.12 ligger i endring av gjennomsnittlig avstand mellom dislokasjonene. Ved å introdusere migrasjonshastigheten til Dislokasjonene vil resultatet være ligning 2.12. Dette forbeholdt at prosessen er kontrollert av termisk aktivering av løsningsatomer vekk fra dislokasjoner som beveger seg, Sæter et al. [14].

Radial veksthastighet når det antas sfæriske rekrystalliserte korn er gitt ved ligning 2.17, hvor mobiliteten er gitt ved ligning 2.18.

$$V(t) = M(t)[P_D(t) - P_Z(t)] \quad (2.17)$$

$$M(t) = \frac{M_0}{c_{ss}RT(t)} \exp\left(-\frac{U_X}{RT(t)}\right) \quad (2.18)$$

Her er P_Z den bremsende kraften fra små partikler i materialet, *Zener Drag*, P_D er drivkraften for rekrystallasjon, c_{ss} er konsentrasjon av legeringselementer i fast løsning og U_X er aktivierungsenergi for rekrystallasjon.

Drivkraften for rekrystallasjon er gitt ved ligning 2.19:

$$P_D(t) = \alpha \frac{\gamma_{SB}}{\delta(t)} + \frac{1}{2} Gb^2 \rho_i(t) \quad (2.19)$$

$$\gamma_{SB} = \frac{Gb\theta}{4\pi(1-\nu)} \left(1 + \ln \frac{\theta_c}{\theta}\right) \quad (2.20)$$

Skjærmodulen ved en gitt temperatur er gitt av:

$$G = G_0 \exp(-G_1 T) \quad (2.21)$$

Fraksjon rekrystallisert regnes ut ved hjelp av fraksjon rekrystalliser ved utvidet volum. Ligning 2.23 er basert på en antakelse om *site saturation* nukleasjonskinetikk.

$$X = 1 - \exp(-X_{ext}) \quad (2.22)$$

$$X_{ext} = \frac{4\pi r^3}{3} N_{tot} \quad (2.23)$$

Gjennomsnittlig størrelse for rekrystalliserte korn er gitt ved:

$$D = \left(\frac{X}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.24)$$

Den totale tettheten av nukleasjonspunkter regnes ut ved $t = 0$ og $T = T_{def}$, og er gitt ved:

$$N_{tot} = N_{Cube} + N_{PSN} + N_{GB} \quad (2.25)$$

Tettheten av nukleasjonspunkter for kubekorn, figur 2.3.2, er gitt ved likningssettet;

$$N_{Cube} = C_c \bar{\delta}_c A(\epsilon) R_s (1 - R_c) S_c^* \quad (2.26)$$

$$A(\epsilon) = 2 \frac{R_c}{D_0} (e^\epsilon + e^{-\epsilon} + 1) \quad (2.27)$$

$$R_c = R_c^0 R_{cA} (R_{cB} + R_c C \epsilon)^{R_{cD}} (R_{cE} \ln(Z) + R_c F)^{R_{cG}} \quad (2.28)$$

$$R_s = \begin{cases} R_{sA} + R_{sB} \epsilon, & \epsilon < R_{sC} \\ R_{sA} + R_{sB} R_{sC}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.29)$$

$$S_c^* = \begin{cases} \frac{\exp(-5\delta^*/\bar{\delta}_c)}{\bar{\delta}_c^3} \sum_{n=0}^4 \frac{(5\delta^*/\bar{\delta}_c)^n}{n!}, & 0 \leq \delta^*/\bar{\delta}_c \leq 15 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.30)$$

$$\bar{\delta}_c = f_c \delta(0) \quad (2.31)$$

$$\delta^* = \frac{4\gamma_{GB}}{P_D(0) - P_Z(0)} \quad (2.32)$$

hvor $A(\epsilon)$ er overflateareal per volum av kube-korn med initiell størrelse D_0 som har blitt deformert til en effektiv tøyning ϵ , $\bar{\delta}_c$ er gjennomsnittlig subkornstørrelse for kube-korn gitt ved Zener-Hollomon parameteren (Z) , R_s er fraksjon kube-korn som er omringet av korn med S-tekstur, S_c^* er tettheten av subkorn i kube-kornene med diametere større enn δ^* og R_c er volumfraksjonen av kube-korn i det udeformerte materialet. R_{cA} - R_{cG} og R_{sA} - R_{sC} er modellkonstanter. C_c er en tilpasningskonstant for antall nukleasjonspunkter fra kube-korn.

Tettheten av nukleasjonspunkter ved korgrenser er gitt av:

$$N_{GB} = 2 \frac{C_{GB} \delta(0) (1 - R_c) S_{GB}^*}{D_0} (e^\epsilon + e^{-\epsilon} + 1) \quad (2.33)$$

$$S_{GB}^* = S_c^* \quad (2.34)$$

Tettheten av nukleasjonspunkter for deformasjonssoner rundt ikke-deformerbare partikler gis ved;

$$N_{PSN} = C_{PSN} N_0 \exp(-C_{PE} L \eta^*) \quad (2.35)$$

$$\eta^* = \frac{4\gamma_{GB}}{P_D(0) - P_Z(0)} \quad (2.36)$$

hvor η^* er den minste partikkelstørrelsen som kan gi nukleasjon.

Tettheten av nukleasjonspunkter er sterkt avhengig av Zener drag. Dette medfører at ved et betydelig Zener drag i starten av modelleringen vil antallet nukleasjonspunkter begrenses. Dette påvirker varmebehandlingsoppførselen sterkt, spesielt rekrystallisert kornstørrelse, se likning 2.24.

Til slutt regnes flytspenningen til materialet etter en tid t ut ved hjelp av likning 2.37:

$$R_{p0.2}(t) = R_{FLP} + \left[\alpha_1 M G b \sqrt{\rho_i(t)} + \alpha_2 M G b \frac{1}{\delta(t)} \right] [1 - X(t)] \quad (2.37)$$

2.5 Presipal:

Presipal er en enkel presipiteringsmodell som tar for seg nukleasjon og vekst av dispersoider og vekst av primærpartikler. Modellen diskriminerer mellom presipitering i deformert tilstand, delvis rekrySTALLISERT tilstand og fullstendig rekrySTALLISERT tilstand, basert på effektiv diffusivitet av mangan. Denne modellen er basert på eksperimentelle undersøkelser av presipiteringskinetikk gjort av Z.J. Lok[15].

Modellen er laget på bakgrunn av noen antakelser om presipitering av dispersoider i AA3103-legeringer. Disse er gitt i sin helhet i Lok [15], og sier kort fortalt følgende:

- Utarming av Mn er forårsaket av diffusjonskontrollert nukleasjon og vekst av α -Al₁₂Mn₃Si-dispersoider og vekst av eksisterende Al₆(Fe,Mn) partikler.
- Kun dispersoider og partikler fra en enkelt mekanisme blir betraktet. Dette betyr i denne rapporten at kun dispersoider og partikler dannet på subkorn-grenser blir modellert.
- Størrelsesfordelingen av disse dispersoider og partikler blir ikke tatt med i betraktningen, kun gjennomsnittsverdier for størrelse av dispersoider og partikler blir benyttet. Disse regnes også som sfæriske. I tillegg regnes fast-løsningskonsentrasjonen å være homogen.
- Effekten av rekrySTALLISASJON på den generelle presipiteringskinetikken introduseres som en overgang fra rask subkorn-grense-diffusjon i deformert tilstand til treg fast-løsnings vakansdiffusjon i krystallgitteret i fullstendig rekrySTALLISERT tilstand.

$$\frac{dN_d}{dt} = Xj_d(D_{Mn}^L) + (1 - X)j_d(D_{Mn}^{eff}) \quad (2.38)$$

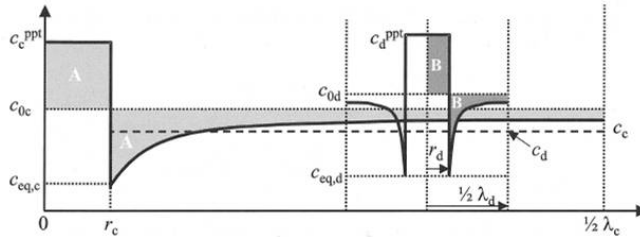
$$\frac{dr_d}{dt} = Xv_d(D_{Mn}^L) + (1 - X)v_d(D_{Mn}^{eff}) \quad (2.39)$$

$$\frac{dr_c}{dt} = Xv_c(D_{Mn}^L) + (1 - X)v_c(D_{Mn}^{eff}) \quad (2.40)$$

I likningene 2.38, 2.39 og 2.40 beskrives nukleasjonstettheten av dispersoider og vekst av henholdsvis α -Al₁₂Mn₃Si-dispersoider og Al₆(Fe,Mn)-partikler. Radius av disse dispersoidene betegnes som r_c og r_d . Variablene som inngår er fraksjon rekrySTALLISERT, X, diffusjonskoeffisient for krystallgitterdiffusjon, D_{Mn}^L , nukleasjon-sraten for dispersoider, j_d , og effektiv diffusjonskoeffisient for diffusjon langs subkorn-grenser, D_{Mn}^{eff} .

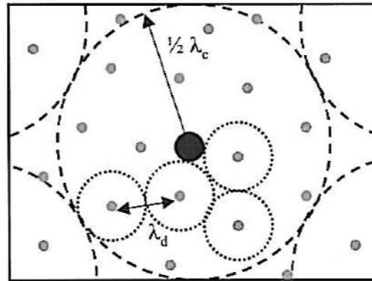
$$v_d = \frac{D C_{Mn,d}^\lambda - C_{Mn,d}^i}{r_d C_{Mn,d}^p - C_{Mn,d}^i} \quad (2.41)$$

$$v_c = \frac{D C_{Mn,c}^\lambda - C_{Mn,c}^i}{r_c C_{Mn,c}^p - C_{Mn,c}^i} \quad (2.42)$$



Figur 2.5.1: Skisse for konsentrasjonsprofil ut fra partikkel eller dispersoide

Veksthastigheten for dispersoider og partikler er gitt i henholdsvis likning 2.41 og 2.42. Variablene $C_{Mn,d}^\lambda$, $C_{Mn,d}^i$ og $C_{Mn,d}^p$ i likning 2.41 er henholdsvis konsentrasjonen av mangan i en avstand $\frac{\lambda}{2}$ fra dispersoiden hvor λ er avstanden mellom dispersoidene, likevektsløselighet for Mn og konsentrasjonen av Mn i dispersoiden. For likning 2.42 er definisjonen den samme, bare for partikler, *constituents*. Skisser for definisjon av konsentrasjonene og λ er gitt i henholdsvis figur 2.5.1 og 2.5.2.



Figur 2.5.2: Skisse for definisjon av avstander mellom partikler og dispersoider

Kapittel 3

Eksperimentelt

Alle eksperimentelle data er hentet fra doktoravhandlingene til Knut Sjølstad[2] og Stian Tangen[1].

3.1 Materialkarakterisering:

Det er blitt brukt 3 forskjellige aluminiumslegeringer gjennom denne oppgaven. Av disse legeringene er det også valgt ut visse forskjellige forbehandlinger for dekke flere tilfeller av variasjon under varmebehandling. Tabell 3.1 viser en oversikt over hvilke legeringer som er brukt, og den kjemiske sammensetningen til disse.

Tabell 3.1: Materialer brukt og kjemisk sammensetning

Materialer	<i>wt%Si</i>	<i>wt%Fe</i>	<i>wt%Mg</i>	<i>wt%Mn</i>	<i>wt%Cu</i>	<i>wt%Al</i>
AA1200	0.13	0.52				Balanse
LP3103	0.12	0.57	0.015	1.0	0.012	Balanse
CP3103	0.06	0.49	0.009	1.03	0.003	Balanse

AA1200 legeringen er en kommersielt ren aluminiumslegering som er blitt homogenisert og valset av Alcan.

LP3103 er dc-støpt aluminium som er videre homogenisert og valset på laboratoriet. Homogeniseringsforløpene til denne legeringen er vist i tabell 3.2.

Tabell 3.2: Homogeniseringsforløp for LP3103

Materiale	Homogeniseringsforløp
Homogenisert - A	Varmet opp til 650°C og holdt der i 14 timer før bråkjøling

Det vil være en lavere konsentrasjon av fast løst Mn etter denne typen homogenisering, men dette er ikke tatt høyde for i størsteparten av resultatene.

Tabell 3.3: Tøyning, subkornstørrelse og misorientering for LP3013, Sjølstad [2]

Materialtilstand	ϵ	$\delta_{RD}[\mu m]$	$\delta_{ND}[\mu m]$	$\phi[^\circ]$
Homogenisert - A	1.5	0.82	0.53	4.0

Eksperimentelle resultater etter varmebehandling for LP3103 er oppgitt i VHN, Vickers Hardness Number, noe som gjør sammenlikningen med data fra modelleringer noe vanskeligere. Dette betyr nemlig at det må estimeres verdier for $R_{p0.2}$ basert på VHN. Dette er gjort ved hjelp av to empiriske sammenhenger fra Sjølstad [2]. Disse sammenhengene er vist i likning 3.1 og 3.2.

$$\sigma_y = 4.8 \cdot VHN - 100 \quad (3.1)$$

$$\sigma_y = C \cdot VHN - 10 \cdot C \quad (3.2)$$

CP3103 er en industrielt prosessert aluminiumslegering av Hydro Aluminium Deutschland GmbH, hvor den er homogenisert og valset.

Tabell 3.4: Tøyning, subkornstørrelse og misorientering for CP3013, Sjølstad [2]

Materialtilstand	ϵ	$\delta_{RD}[\mu m]$	$\delta_{ND}[\mu m]$	$\phi[^\circ]$
Homogenisert - A	1.25	0.71	0.45	4.2

Forbehandlingen før varmebehandling for CP3103, som gjort av Sjølstad[2], er som følger:

Materialet ble varmet opp til mellom 520°C og 600°C og holdt der i mer enn 5 timer. Deretter kjølt ned til omtrent 450°C. Etter denne homogeniseringen ble materialet valset i en *Breakdown mill*, så varmvalset og til slutt, etter nedkjøling, kaldvalset til en tykkelse på omtrent 1.2 mm.

Mangankonsentrasjonen i materialet i fast løsning etter homogenisering for LP3103 og homogenisering og varmvalsing for CP3103 vises i tabell 3.5.

Tabell 3.5: Mangankonsentrasjon for LP3103 og CP3103

Materialtilstand	wt%Mn
Homogenisert - LP3103	0.50
Homogenisert - CP3103	0.44

For alle materialene er dislokasjonstettheten, ρ_i , kalkulert på bakgrunn av eksperimentelle data ved hjelp av likning 2.11. Dette er gjort ved å bruke subkornstørrelse fra doktoravhandlingene av Tangen [1] og Sjølstad [2]. Konstanten C er tilpasset slik at flytspenningen, $R_{p0.2}(0)$, stemmer overens med eksperimentelle verdier.

3.1.1 Gløding/varmebehandling:

Glødeeksperimentene i tidligere verk av Stian Tangen[1] og Knut Sjølstad[2] ble utført ved isotherm gløding, flash-annealing. Prøvene ble utsatt for direkte nedsenking i saltbad eller *fluidized oxide beds* ved temperaturer fra 250°C til 500°C i ulike tidsintervaller, etterfulgt av bråkjøling.

Prøvene ble omrørt de første sekundene for å sikre rask temperaturøkning i prøvene. Dette for å minimere oppvarmingstiden opp til den isoterme glødetemperaturen.

3.2 Matlab:

Implementasjonen av Alsoft som er brukt i denne oppgaven er skrevet i Matlab, og er skrevet av Tomas Manik som et sommerprosjekt. Den er komplett med brukergrensesnitt for innhenting av input-fil og endring av noen av disse parameterene. Kjemisk sammensetning og temperaturforløp må også legges inn før modelleringene kan kjøres.

Når utregningene er gjort kan resultatene lagres i en tekstfil som videre kan bearbeides av Excel, Sigmaplot etc. Data som kan hentes ut ved hjelp av denne implementasjonen er fraksjon rekrystallisert, gjennomsnittlig størrelse på rekrystalliserte korn, flytspenning, dislokasjonstetthet, subkornstørrelse og radius på rekrystalliserte korn.

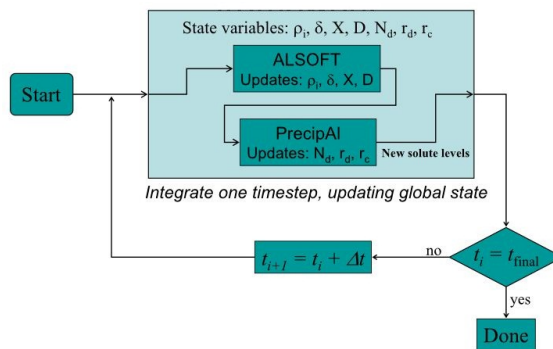
Hovedkoden og komplette inputfiler for utgangsparametere for denne implementasjonen av Alsoft ligger vedlagt i kapittel C.1.

3.3 Sigmaplot:

Alle grafene som er inkludert i resultatdelen av denne rapporten er laget i Sigmaplot. Det er et vitenskapelig program utviklet for å lette både avanserte og enklere plotting av data. Det er brukt plotting med kurveglatting for modellerte data og punktplotting for eksperimentelle data. Punktplottingen er på grunn av usikkerhet i verdiene for eksperimentelle data.

3.4 Kobling av Alsoft og Presipal - Conpal:

For å kunne modellere presipitering under varmebehandling samtidig som rekrystallisasjon er Alsoft og Presipal koblet sammen som vist i figur 3.4.1.



Figur 3.4.1: Kombinering av Alsoft og Presipal

Presipal og Alsoft dekker hvert sitt felt under varmebehandling. Presipal tar seg av presipitering under varmebehandling, mens Alsoft tar seg av mikrostrukturelle endringer, se tidligere kapittel. Koblingen av disse to materialiserer seg i et program kalt Conpal som setter figur 3.4.1 ut i praksis. Alsoft oppdaterer de mikrostrukturelle parameterene for en gitt tid. Disse verdiene hentes inn i Presipal som oppdaterer parameterene som beskriver dispersoider og partikler og sender disse tilbake til Alsoft.

Conpal er skrevet av Jesper Friis i forbindelse med Moreal-prosjektet. Det er skrevet i Linux og kompilert ved hjelp av Fortran.

Kapittel 4

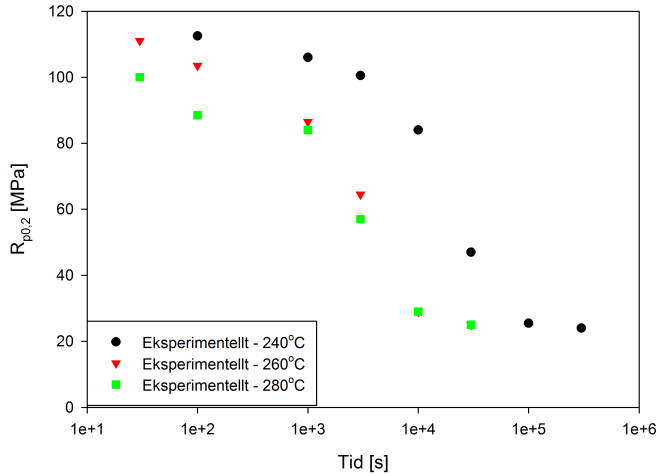
Resultater

I dette kapitlet presenteres resultatene som er hentet fra doktoravhandlingene til Tangen[1] og Sjølstad[2] i kombinasjon med modellerte resultater. Resultatene er i hovedsak presentert i form av grafer for flytspenning. Dette for å skape et visuelt bilde over resultatene i oppgaven.

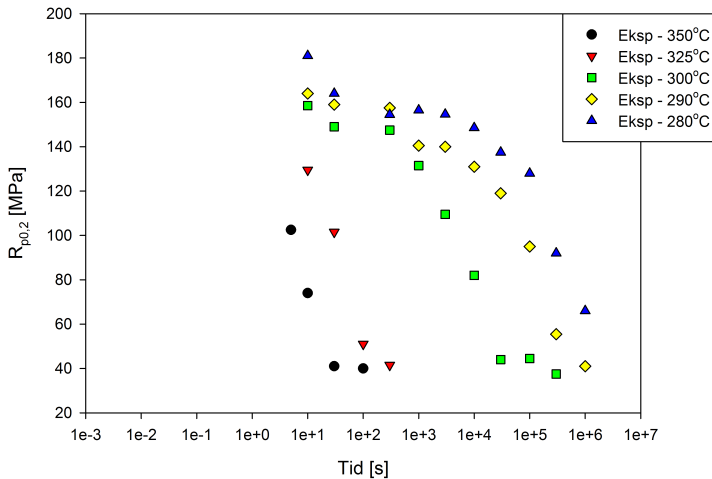
4.1 Eksperimentelle resultater:

De eksperimentelle resultater som er hentet fra doktoravhandlingene til Tangen[1] og Sjølstad[2] og brukt i sammenlikningene senere i resultatene er gitt i dette underkapitlet.

Figur 4.1.1 viser eksperimentelle resultater for AA1200-legeringen. Disse resultatene er hentet fra doktoravhandlingen til Sjølstad[2]. Resultatene viser at denne legeringen har et definert transformasjonsregime som varierer lite mellom temperaturrene. Dette tilsier at problemer med presipitering under varmebehandling ikke er et problem.



Figur 4.1.1: Eksperimentelle resultater for AA1200-legeringen



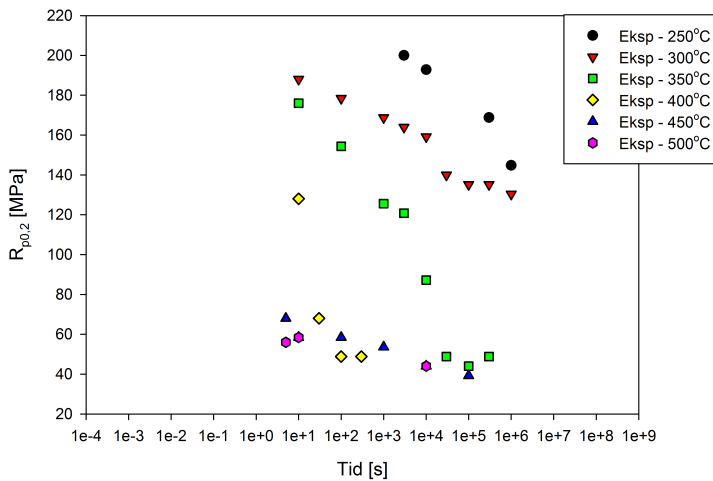
Figur 4.1.2: Eksperimentelle resultater for CP3103-legeringen

For CP3103-legeringen viser resultatene i figur 4.1.2 at transformasjonen for høye temperaturer, nærmere bestemt over 300°C, skjer omtrent på samme måte som for AA1200. Dette indikerer at disse temperaturene er over den kritiske temperaturen for presipitering under varmebehandling. For temperaturer under 300°C vil transformasjonen være preget av at rekrystallisasjonsreaksjonen, nukleasjon og vekst, bremses.

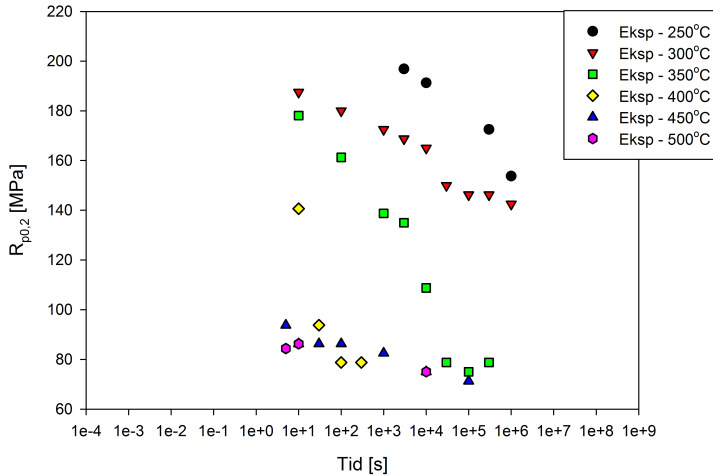
Eksperimentelle resultater for LP3103-legeringen er delt inn i to figurer. Dette på grunn av at det er brukt to forskjellige likninger for omregning mellom VHN og flytspenning. Figur 4.1.3 og 4.1.4 viser eksperimentelle resultater beregnet med henholdsvis likning 3.1 og 3.2.

De eksperimentelle resultatene gitt i figur 4.1.3 viser liknende oppførsel som for CP3103-legeringen. Dette fordi verdiene ender opp på omtrent samme nivå, i fullstendig rekrystallisert tilstand, etter endt varmebehandling. Derfor er i hovedsak disse verdiene brukt til sammenlikningen mellom eksperimentelle og modellerte resultater senere i resultatene.

I motsetning til dette ender verdiene beregnet med likning 3.2, gitt i figur 4.1.4, på et mye høyere nivå etter varmebehandling enn for likning 3.1. Verdiene viser samme trender og det er derfor også utført sammenlikninger mellom disse verdiene og modellerte resultater senere i resultatene.



Figur 4.1.3: Eksperimentelle resultater for LP3103-legeringen, beregnet med likning 3.1



Figur 4.1.4: Eksperimentelle resultater for LP3103-legeringen, beregnet med likning 3.2

4.2 Parameteranalyse:

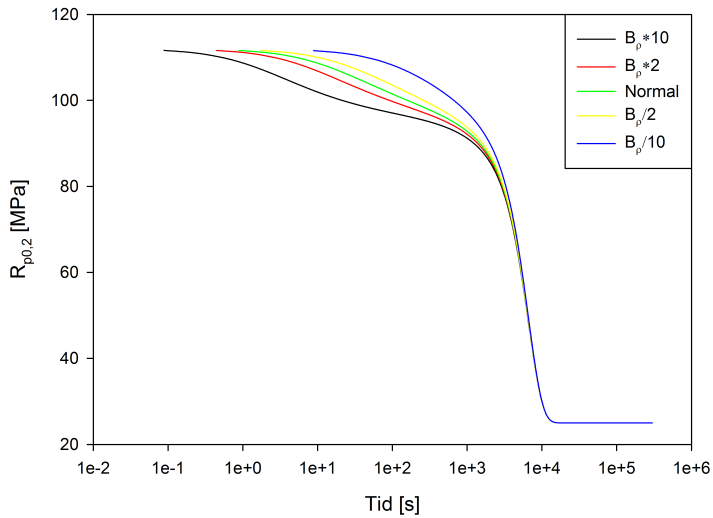
I første omgang er det utført en sensitivitetsanalyse av recoveryparameterene og de viktigste rekrystallasjonsparameterene. Dette er gjort for å se hvilken innvirkning de har på varmebehandlingsforløpet. Resultatene er presentert i form av flytspenningskurver som viser hvordan flytspenningen varierer iløpet av varmebehandlingen.

Utgangspunktet, normalnivå, for analysen er beste tilpasning for AA1200. Parameterene for denne er gitt i tabell A.1.

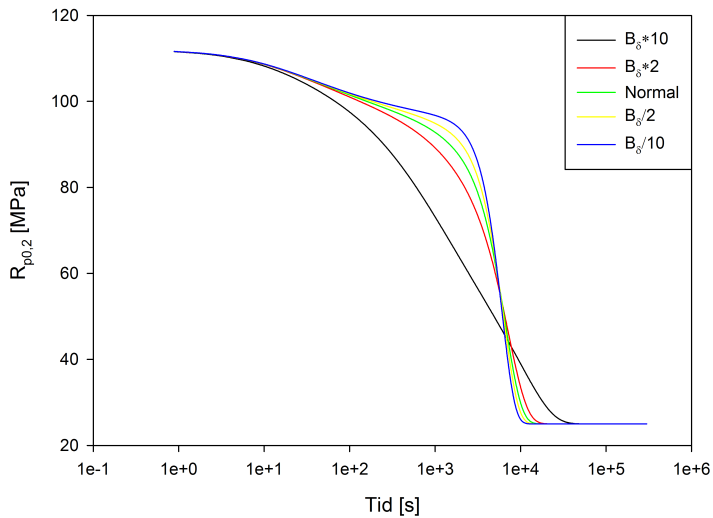
4.2.1 Recovery:

Recoveryparameterene som er blitt analysert er B_{rho} , ω_{rho} , B_{δ} og ω_{δ} . I tillegg har mobiliteten, M_0 blitt plassert her, siden den går under de parameterene som er brukt til å endre, til en viss grad, varmebehandlingsforløpet i denne oppgaven.

Recoveryparameterene er i utgangspunktet temperatuavhengige og relativt vil de oppføre seg likt under andre temperaturer, så analysen er gjort på én temperatur, 260°C.



Figur 4.2.1: Sensitivitetsanalyse av B_ρ

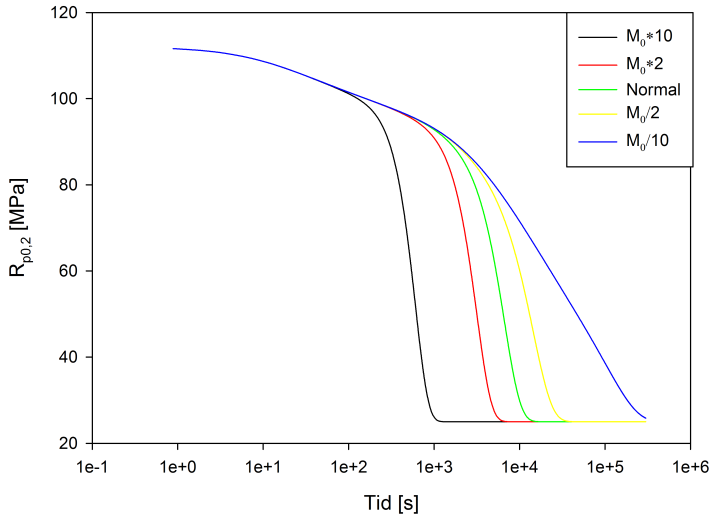


Figur 4.2.2: Sensitivitetsanalyse av B_δ

B_ρ sier noe om hastigheten for utgløding av dislokasjoner, likning 2.12. Lavere verdi for B_ρ vil da resultere i en høyere dislokasjonstetthet før rekrySTALLISASJON enn for en høyere verdi. Dette vises godt i figur 4.2.1, hvor lavere B_ρ gir høyere

flytspenning.

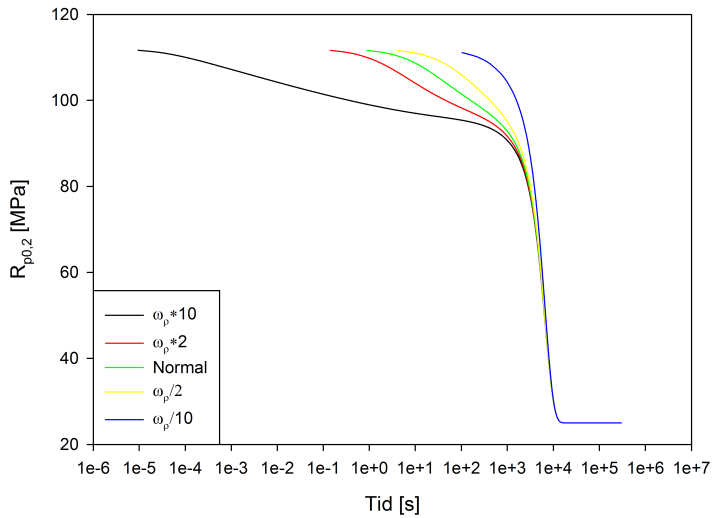
For B_δ er situasjonen den samme, men for en annen mekanisme. Høyere verdi for B_δ vil da resultere i høyere hastighet for subkornvekst, likning 2.13, som igjen resulterer i lavere flytspenning og motsatt for lavere verdi. Dette vises i figur 4.2.2.



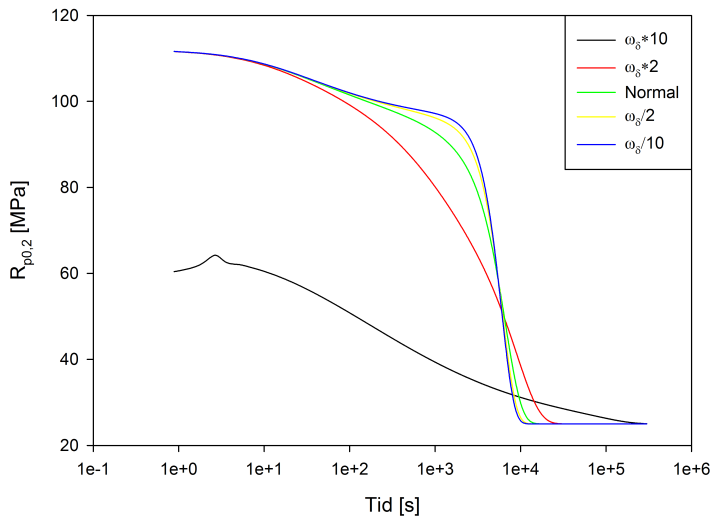
Figur 4.2.3: Sensitivitetsanalyse av M_0

Variasjon i utgangsverdi for mobilitet vil gi forskjellige resultater for rekrystallasjon. Dette fordi en lavere mobilitet begrenser veksthastigheten for rekrystallasjon, likning 2.17. Siden $M(t) \propto M_0$ og $\exp(-\frac{U_x}{RT})$, hvor U_x er aktiveringsenergien for rekrystallasjon, vil en lavere verdi for mobilitet gi omtrent samme resultat som en passende økning i aktiveringsenergi for rekrystallasjon. I praksis betyr dette at en lavere mobilitet utsetter startpunktet for rekrystallasjon, mens en høyere verdi vil framskynde denne prosessen. Dette er igjen avhengig av temperatur, slik at en endring i aktiveringsenergien også vil påvirke avstanden langs tidsaksen mellom start av rekrystallasjon ved forskjellige temperaturer. En annen effekt av variasjon av disse parameterene er at transformasjonstidene endres drastisk under en kritisk verdi. Dette vises i figur 4.2.3.

Parameterene ω_ρ og ω_δ vil ha samme påvirkning på varmebehandlingsforløpet som henholdsvis B_ρ og B_δ , henholdsvis figur 4.2.4 og 4.2.5. På grunnlag av likning 2.15 og 2.16 vil dette derimot være i en annen størrelsesorden. Dette fordi parameterene A_ρ og A_δ er vektet for konsentrasjon legeringselementer i fast løsning og henholdsvis eksisterende dislokasjonstetthet og subkornstørrelse.



Figur 4.2.4: Sensitivitetsanalyse av ω_ρ



Figur 4.2.5: Sensitivitetsanalyse av ω_δ

Det er imidlertid verdt å kommentere at over en viss kritisk verdi for ω_δ vil resultatene bli svært ufsikalske. Dette vises godt i figur 4.2.5.

Oppsummert vil recoveryparameterene påvirke varmebehandlingsforløpet på følgende måte:

Konstantene som inngår i ligning 2.12, B_ρ og ω_ρ , vil enten hemme eller framskynde annhivering eller reorganisering av dislokasjoner. Ved hemming av denne prosessen vil ikke lagret energi reduseres i like stor grad, jamfør teorien. Av kurvene observeres det at endringer i dislokasjonstetthet i hovedsak påvirker kurvene før rekrystallasjon starter.

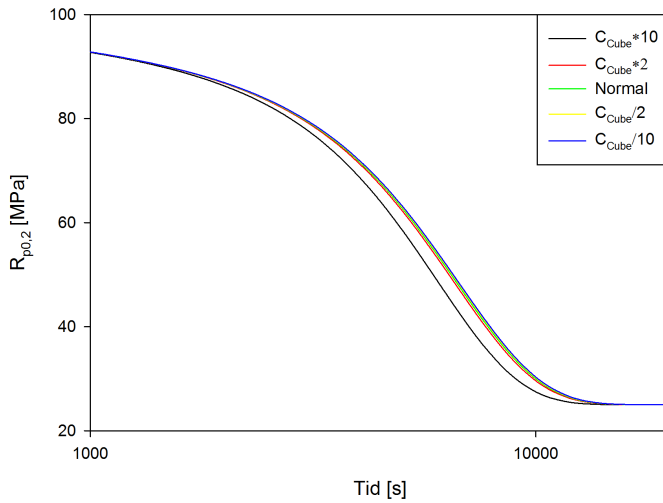
For konstantene i ligning 2.13, B_δ og ω_δ , vil en endring enten hemme eller framskynde subkornvekst, noe som i stor grad påvirker styrken til materialet, transformasjonstid og startpunktet for rekrystallasjon.

Endring av utgangsverdien for mobilitet vil påvirke startpunktet for rekrystallasjon på grunn av effekten parameteren har på veksthastigheten til rekrystalliserte korn.

4.2.2 Rekrystallasjon:

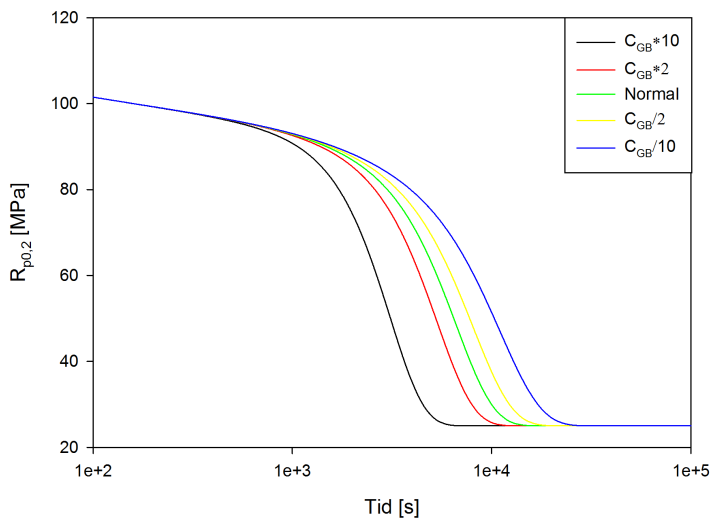
For rekrystallasjonsparameterene er det gjort analyse på prefaktorene for rekrystallasjon for de forskjellige nukleasjonsmekanismene. I mange av disse tilfellene vil man få ufykalske resultater, i form av teksturer og kornstørrelser, etter varmebehandling, som vil være urealistiske. Derimot er intensjonen for analysen er å visualisere bidraget til de forskjellige parameterene, noe som er enklest ved å variere fra det ene ekstremitet til det andre.

Figur 4.2.6 viser resultatene når prefaktoren for nukleasjon fra kube-korn, C_{Cube} , er variert. Dette endrer antallet nukleasjonspunkter for nukleasjon av rekrystallasjon for denne mekanismen. Resultatene viser at denne mekanismen ikke er svært utslagsgivende, da forskjellene fra normalen er små.



Figur 4.2.6: Sensitivitetsanalyse av C_{Cube}

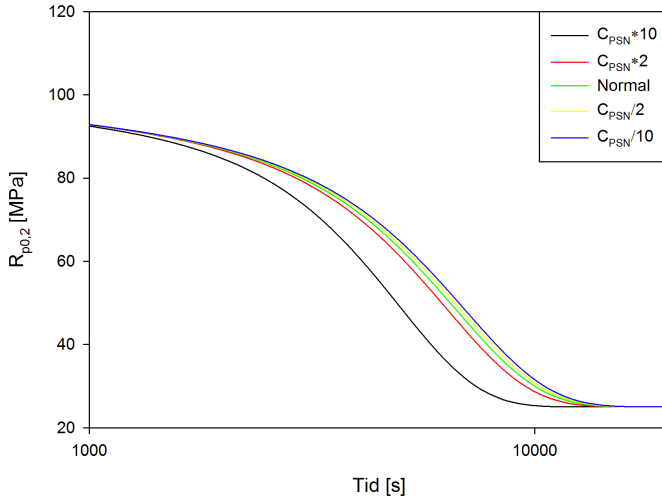
For modellering der prefaktoren for nukleasjon på korngrenser, C_{GB} , viser resultatene større avvik fra normalen. Disse resultatene er presentert i figur 4.2.7.



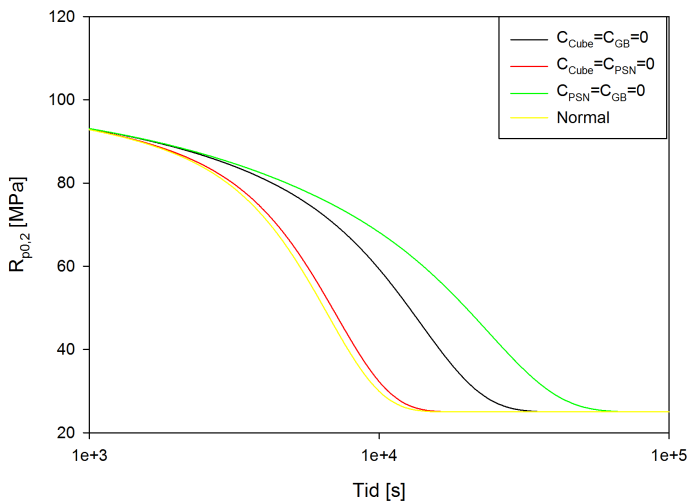
Figur 4.2.7: Sensitivitetsanalyse av C_{GB}

Resultater for modellering hvor prefaktor for nukleasjon i deformasjonssoner rundt

ikke-deformerbare partikler, C_{PSN} , er variert vises i figur 4.2.8. Disse resultatene viser noe av samme trenden som for C_{Cube} og C_{GB} . Resultatene for C_{PSN} legger seg midt imellom de to andre i forhold til avvik fra normalen.



Figur 4.2.8: Sensitivitetsanalyse av C_{PSN}



Figur 4.2.9: Sammenlikning av rekrytalisasjonspåvirkning av C_{PSN} , C_{GB} og C_{Cube}

I figur 4.2.9 presenteres resultater der to og to av prefaktorene er eliminerte. Dette medfører at resultatene vil være meget ufysiske. Sannsynligheten for at nukleasjon av rekrytllisasjon kun finner sted på kornrensere, kube-korn eller rundt partikler er tilnærmet lik null. Derimot er resultatet en god presentasjon av bidraget til de forskjellige mekanismene på glødeforløpet.

Oppsummert viser resultatene at variasjon i prefaktorene i hovedsak påvirker tidspunktet når rekrytllisasjon skjer, men også hvor raskt prosessen går. Av figurene kommer det frem at C_{GB} påvirker kurven mest, deretter C_{PSN} og til slutt C_{Cube} .

4.3 Modelleringer:

Resultatene som presenteres i denne delen er sammenlikninger mellom eksperimentelle resultater og modellerte resultater. I noen tilfeller er det gjort forenklinger og antakelser for å lette modelleringen.

Den viktigste forenklingen er for Zener drag, i de tilfellene dette er implementert. For forsøkene som inkluderer Zener drag, er dette påført som en konstant bremsende kraft. Det er i tillegg ikke tatt høyde for variasjoner i legeringselement i fast løsning under varmebehandlingsforløpet.

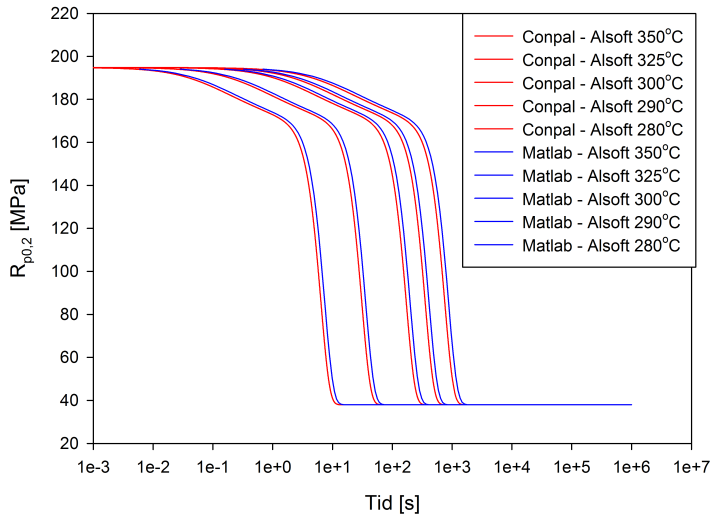
I resultatene er det lagt vekt på flytspenning, $R_{p0.2}$, og kornstørrelser, med hovedvekt på flytkurver. Dette er gjort på grunn av viktigheten av disse parameterene under videre prosessering av materialet.

Legering	$\delta(0)$	$\rho_i(0)$, likning 2.11	C, likning 2.11
AA1200	$0.81 \cdot 10^{-6} \text{m}$	$1.2 \cdot 10^{13} \text{m}^{-2}$	2.8
CP3103	$0.45 \cdot 10^{-6} \text{m}$	$2.0 \cdot 10^{13} \text{m}^{-2}$	2
LP3103	$0.53 \cdot 10^{-6} \text{m}$	$1.4 \cdot 10^{13} \text{m}^{-2}$	2

Tabell 4.1: Inputparametere for modellering, δ , ρ_i og C.

Verdiene for initiell subkornstørrelse i tabell 4.1 er hentet fra Sjølstad [2]. Verdiene for initiell dislokasjonstetthet er regnet ut ved likning 2.11 med C som oppgitt i tabellen. Konstanten C er bestemt ved prøving og feiling i Alsoft. Verdiene for flytspenning med varierende C er sammenliknet med eksperimentelle resultater for å finne et realistisk utgangspunkt for flytspenning.

Før modelleringene for CP3103 og LP3103 ble startet ble det utført en sammenlikning av Conpal sin versjon av Alsoft og Matlab-implementasjonen av Alsoft. Dette for å være sikker på at avvikene ikke var så store at de gjorde store utslag på resultatene. Sammenlikningen vises i figur 4.3.1.



Figur 4.3.1: Sammenlikning av de forskjellige modellene for CP3103-legering. I begge tilfeller ble Case 1 brukt, A.3a.

Avvikene skyldes mest sannsynlig ikke modellmessige forskjeller, men forskjeller i oppbygningen av koden i Matlab og Linux.

4.3.1 Alsoft:

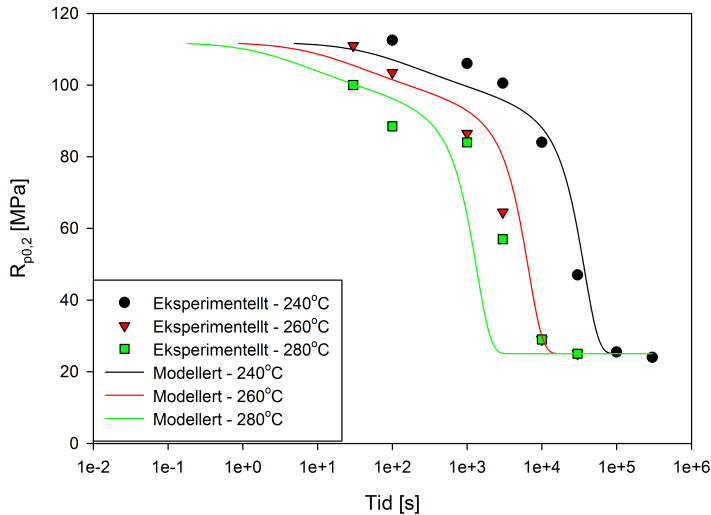
I dette underkapittelet presenteres de viktigste modelleringene gjort i Alsoft.

Det presiseres at for hvert modelleringstilfelle er modelleringsparametere konstante for alle temperaturene. For tilfeller hvor det er påført et stivt Zener drag, er dette gjort for temperaturene under den kritiske temperaturen for dannelse av dispersoider.

AA1200:

Modellering for legering AA1200 er i hovedsak gjort ved å bruke utgangsparametere som et utgangspunkt, og deretter tilpasse recoveryparametere og mobilitet ved hjelp av sensitivitetsanalysen. Sluttresultatet vises i figur 4.3.2.

Modelleringene er gjort med samme parametere for alle temperaturer. En oversikt over de viktigste parameterene brukt i dette tilfellet er oppført i tabell A.1.



Figur 4.3.2: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for AA1200-legering

Det er noen avvik mellom eksperimentelle resultater, spesielt da for 280°C, men dette kan ligge i usikkerhet i modellerte resultater. I tillegg kan modellparametere justeres noe for å oppnå bedre tilpasning, i hovedsak recoveryparametere. Uavhengig av dette er avvikene innenfor et akseptabelt område.

Tabell 4.2: Rekrystalliser kornstørrelse for AA1200

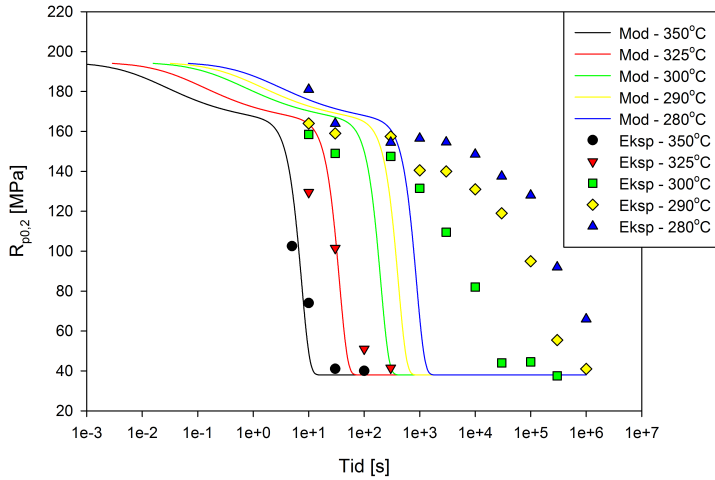
Case	240°C	260°C	280°C
Modellert [μm]	48.9	48.9	48.9

Eksperimentelle resultater for rekrystalliserte kornstørrelser var desverre ikke å oppdrive for AA1200, men de modellerte verdiene ligger innenfor et realistisk område.

CP3103:

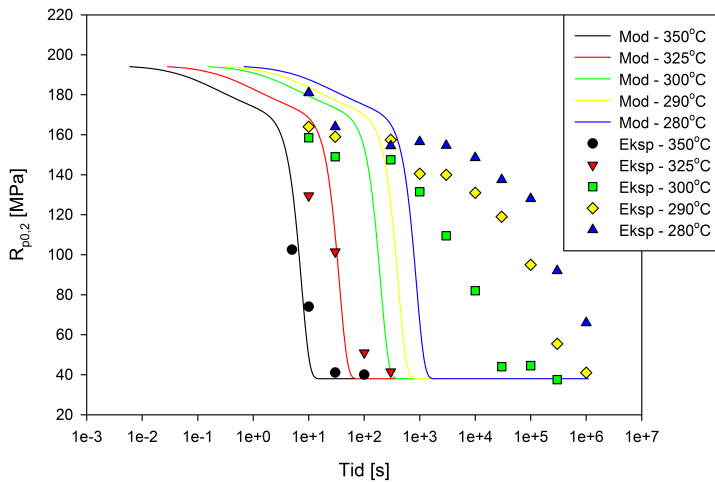
Modelleringer for CP3103 er gjort ved 5 forskjellige temperaturer, 280°C, 290°C, 300°C, 325°C og 350°C. Som for AA1200 er det gjort noen modelleringer ved utgangsparametere for å skape et utgangspunkt og for å visualisere hvor langt fra realiteten modellen befinner seg.

Tilpasninger er gjort først ved å ta utgangspunkt i parameteranalysen, og deretter ved andre tilpasninger, i hovedsak Zener drag.



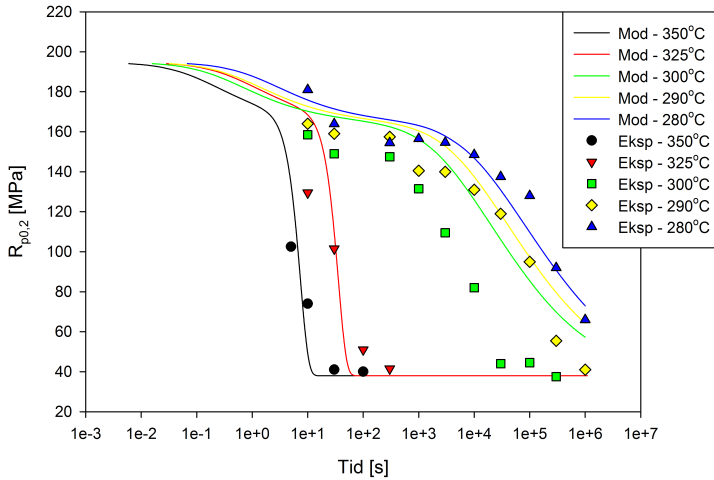
Figur 4.3.3: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for CP3103-legering, utgangsparementere.

Figur 4.3.3 viser sammenlikningen for utgangsparementere. Over den kritiske temperaturen for dannelse av dispersoider, T_c , nærmere bestemt for temperaturene 500°C og 450°C, er avvikene akseptable. Over dette er det klart at videre tilpassninger er nødvendige.



Figur 4.3.4: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for CP3103-legering, case 1, tabell A.3a.

Det ble så gjort små endringer for recoveryparameterene. Dette vises i figur 4.3.4. Hvilke parametere som er endret og til hvilken verdi er gitt i tabell A.3a. Dette er gjort fordi initielle modelleringer med Zener drag viste at avvikene for recoverydelen av varmebehandlingsforløpet var utenfor akseptabelt område.



Figur 4.3.5: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for CP3103-legering, case 3, tabell A.4a.

Den siste modelleringen for CP3103 i Alsoft innebar å legge til et stivt Zener drag under modelleringen for temperaturene under T_c . Resultatet av dette vises i figur 4.3.5. Her er det benyttet samme parametere som i figur 4.3.4 i tillegg til et Zener drag på $7,5 \cdot 10^5$ Pa. Bakgrunnen for og realismen i denne verdien er diskutert senere i rapporten. Disse endringene resulterer i at modellerte resultater stemmer bedre overens med eksperimentelle resultater, selv om variasjonen med temperatur ikke er tilfredstillende.

Tabell 4.3: Rekrystalliser kornstørrelse for CP3103

Figur	280°C	290°C	300°C	325°C	350°C
4.3.3 [μm]	14.1	14.1	14.1	14.1	14.1
4.3.4 [μm]	14.1	14.1	14.1	14.1	14.1
4.3.5 [μm]	2.6	2.7	2.9	14.1	14.1

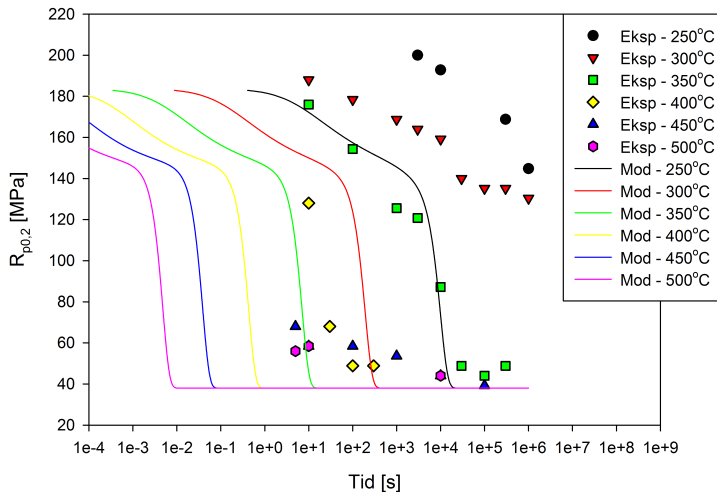
Tabell 4.3 viser rekrystalliserte kornstørrelser ved endt varmebehandling. Tabellen er referert til figurer, som igjen er referert til modellerings-caser.

Det kan diskuteres om disse kornstørrelsene er realistiske, og det må muligens andre metoder til for å bedre modellere kornstørrelser for denne legeringen.

LP3103:

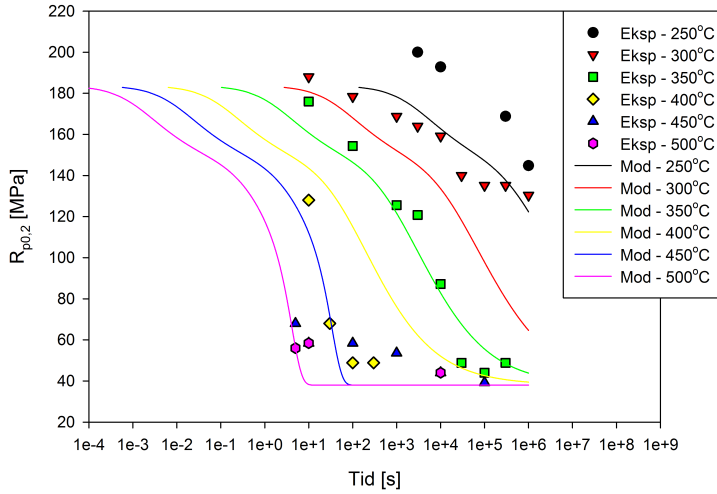
Modelleringer for LP3103 er gjort ved 6 forskjellige temperaturer, 250°C, 300°C, 350°C, 400°C, 450°C og 500°C.

Første forsøk for modellering viser at også for denne legeringen kreves det noe ekstra for å beskrive varmebehandlingsforløpet, figur 4.3.6. Verdiene har store avvik og konstantene for recovery/gjenvinning og rekrystallasjon er ikke nok for å få modelleringene til å stemme med eksperimentelle resultater.



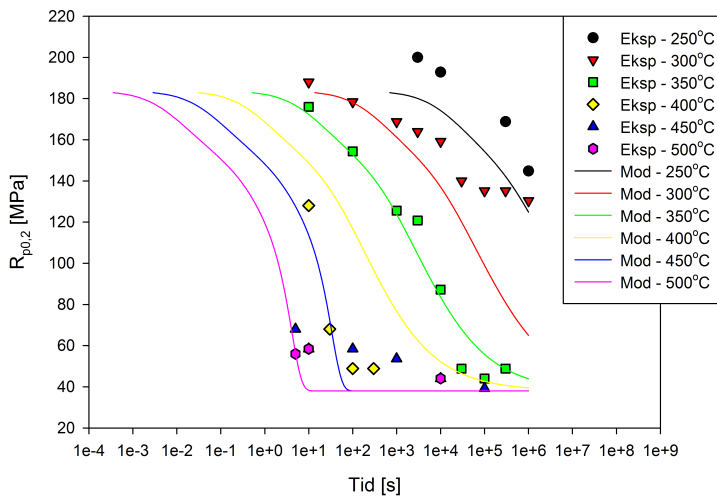
Figur 4.3.6: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for LP3103-legering modellert ved utgangsparametere i Alsoft.

Figur 4.3.7 viser resultatet av endring i modellparametere og et stivt Zener drag. Størrelsen på dette Zener draget er $5.85 \cdot 10^5$. Modelleringene gir en akseptabel tilpasning til de eksperimentelle resultatene, med unntak for 280°C.



Figur 4.3.7: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for LP3103-legering modellert i Alsoft med stivt Zener drag, parametere vist i tabell A.3b.

I den siste modelleringen for LP3103 i Alsoft er B_ρ redusert med en faktor 10 fra utgangsverdien. Dette i et forsøk på å bedre tilpasse modellerte resultater for 280°C. Dette vises i figur 4.3.8. Figuren viser at det enda ikke er en akseptabel tilpasning til de eksperimentelle resultatene.



Figur 4.3.8: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for LP3103-legering modellert i Alsoft med stivt Zener drag, parametere vist i tabell A.6a.

Sammenlikning mellom modellert rekrystallisert kornstørrelse og eksperimentelle resultater vises i tabell 4.4. Trenden for modellerte resultater er en stigende kornstørrelse ved lavere temperatur, noe som ikke stemmer overens med trenden for de eksperimentelle verdiene.

Tabell 4.4: Rekrystalliser kornstørrelse for LP3103

Figur	250°C	300°C	350°C	400°C	450°C	500°C
4.3.6 [μm]	14.0	14.0	14.0	14.0	14.0	14.0
4.3.7 [μm]	14.8	3.5	4.7	9.2	34.8	34.8
Eksperimentelle resultater	-	-	40.1	10.4	9.6	10.1

Oppsummert viser kurvene at et stivt Zener drag gjør at modelleringene stemmer bedre overens med eksperimentelle resultater. Ved sammenlikning av figur 4.3.7 og figur 4.3.11 observeres det at sensitivitetsanalysen kan brukes til å estimere et overslag over konstanter for recovery/gjenvinning.

4.3.2 Conpal:

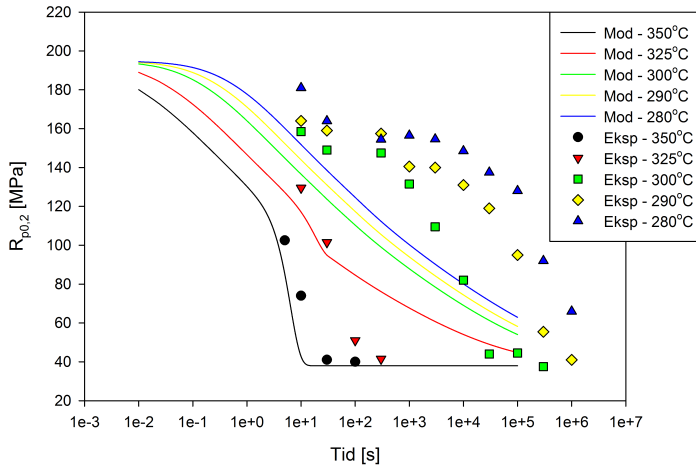
I dette underkapittelet presenteres de viktigste modelleringene gjort i den kombinerte Alsoft-Presipal-modellen Conpal.

Det presiseres at for hvert modelleringstilfelle er modelleringsparametere konstante for alle temperaturene. I denne modellen regnes det for hvert tidssteg ut et Zener drag i Presipal basert på mikrostrukturelle verdier fra Alsoft, som igjen brukes av Alsoft for å regne ut mikrostrukturelle endringer.

CP3103:

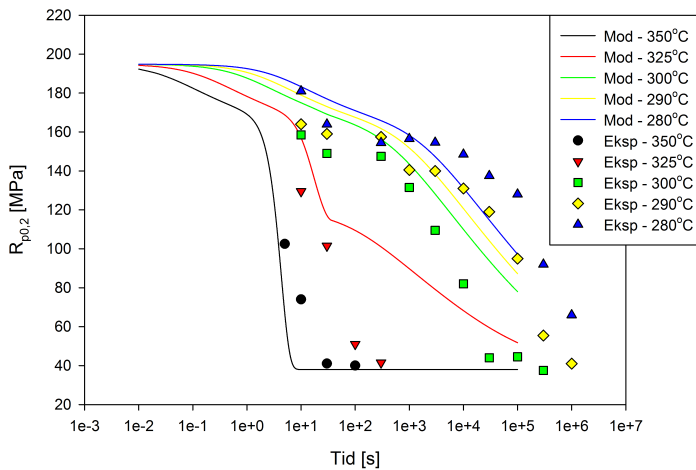
Modelleringene for CP3103 i Conpal er gjort etter samme fremgangsmåte som for Alsoft. Det vil si at det er modellert ved 5 temperaturer, og parameterene som i hovedsak er variert er recoveryparametere og mobilitet.

Første modellering for CP3103 i Conpal viser at denne modellen ligger nærmere realiteten enn Alsoft, figur 4.3.9. Dette var forventet siden Conpal inkluderer et økende Zener drag i Alsoft delen, som forklart tidligere. Et eksempel på hvordan dette Zener draget varierer er gitt i figur B.1 og B.3. Alikevel er modellen et stykke unna en akseptabel tilpasning mellom modellerte resultater og eksperimentelle verdier.



Figur 4.3.9: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for CP3103-legering, modellert i Conpal med utgangsparametere, A.2.

Figur 4.3.10 viser modellering etter case 1. Parametere i case 1 vises i tabell A.3a. Her er recoveryparameterene halvert i forhold til utgangsparametere. Det observeres at flytspenningskurvene for de tre laveste temperatuere har et rimelig tidsforløp, men variasjonene som funksjon av temperatur er ikke tilfredsstillende. Med dette menes det at spredningen mellom kurvene ikke er stor nok. For 325°C stopper rekrySTALLISASJON opp for tidlig.



Figur 4.3.10: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for CP3103-legering, modellert i Conpal med parametere fra Case 1, A.3a.

De rekrystalliserte kornstørrelsene for de respektive modelleringene vises i tabell 4.5. Disse verdiene ligger langt fra realistiske verdier. Trenden med økende kornstørrelser for økende temperatur er heller ikke realistisk i forhold til eksperimentelle forsøk.

Tabell 4.5: Rekrystalliser kornstørrelse for CP3103 fra Conpal

Figur	280°C	290°C	300°C	325°C	350°C
4.3.9 [mm]	0.7	1.1	1.7	6.2	17.8
4.3.10 [mm]	0.7	1.2	1.8	7.6	15.5

Oppsummert er modellering ved hjelp av en kombinert Alsoft og presipiteringsmodell, Conpal, vist i figur 4.3.9 og 4.3.10. Denne modellen tar også for seg presipitering av dispersoider under varmebehandlingsforløpet, noe som gir utslag på de modellerte verdiene.

Figur 4.3.9 tar for seg sammenlikningen av modellerte og eksperimentelle resultater ved utgangsparametere vist i tabell A.2, mens figur 4.3.10 viser varmebehandlingsforløpet modellert i Conpal ved case 1, mot eksperimentelle resultater.

LP3103:

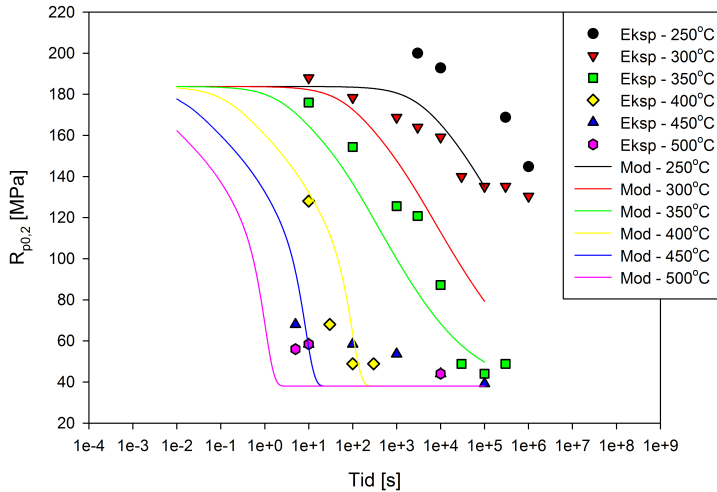
Modelleringer for LP3103 i Conpal er, i likhet med modelleringene for denne legeringen i Alsoft, gjort ved 6 forskjellige temperaturer, 250°C, 300°C, 350°C, 400°C, 450°C og 500°C.

Det er for denne legeringen ikke tatt med figur for modellering ved utgangsparametere i Conpal, fordi dette viser samme trend som for CP3103. Resultatene ligger nærmere eksperimentelle resultater ved utgangsparametere enn for kun Alsoft. Grunnen til dette er som beskrevet tidligere for CP3103.

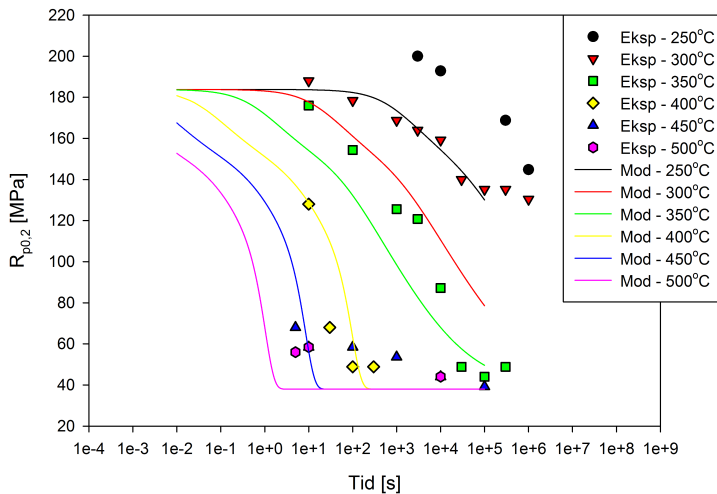
Figur 4.3.11 viser resultater for modellering ved parametere gitt i tabell A.4b. Disse resultatene har rimelig akseptable avvik for temperaturer over 250°C. Grunnen til dette kan igjen være som tidligere forklart for CP3103.

I tillegg vises hvordan P_Z varierer i forhold til P_D i figur B.1. Disse kurvene for drivkraft for rekrystallasjon og Zener drag sier noe om når rekrystallasjon er mulig. Når P_Z blir større enn P_D vil ikke rekrystallasjon lengere være mulig. Kurvene viser at dette intreffer for temperaturer under 400°C ved omtrent 10^4 sekunder. For LP3103 er disse kurvene like, uavhengig av modelleringscase. Dette viser at mikrostrukturelle parameterene i Alsoft ikke påvirker Zener drag.

Sammenhengen mellom volumfraksjon og størrelse av dispersoider vises i figur B.2. Til slutt vises det hvordan c_{ss} varierer under varmebehandlingsforløpet i figur B.5.



Figur 4.3.11: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for LP3103-legering modellert i Conpal, parametre vist i tabell A.4b.

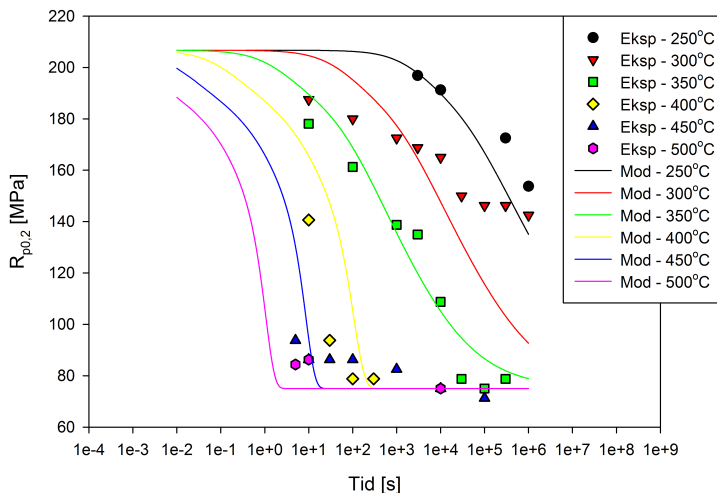


Figur 4.3.12: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for LP3103-legering modellert i Conpal, parametre vist i tabell A.6b.

I et forsøk på å få en akseptabel tilpasning for 250°C ble parameterene justert som

vist i tabell A.6b. Dette vises i figur 4.3.12. Resultatet av dette var ubetydelige forskjeller på varmebehandlingsforløpet. Avvikene for temperatur under 300°C er fremdeles ikke akseptable. Som for case 4 i figur 4.3.11, er det i tillegg inkludert figurer for P_Z og P_D , volumfraksjon og størrelse av dispersoider og til slutt c_{ss} henholdsvis i figur B.3, B.2 og B.6.

I figur 4.3.11 og 4.3.12 er likning 3.1 brukt til å beregne flytspenning fra eksperimentelle resultater. Den siste modelleringen for LP3103 skiller seg fra de andre på bakgrunn av at det for de eksperimentelle resultater er brukt en annen likning for omregning av hardhet i VHN til flytspenning i MPa, nærmere bestemt likning 3.2. Resultatet av dette er overraskende god tilpasning mellom modellerte og eksperimentelle verdier. Dette vises i figur 4.3.13.



Figur 4.3.13: Sammenlikning av modellerte og eksperimentelle resultater for LP3103-legering modellert i Conpal, parametere vist i tabell A.5b.

Tabell 4.6 viser en oversikt over de rekrystalliserte kornstørrelsene for modellering etter case 4, figur 4.3.11. Atter en gang viser disse en trend som ikke er i samsvar med eksperimentelle resultater. Rekrystalliserte kornstørrelser for de andre modelleringene for LP3103 i Conpal viser samme trend og ligger innenfor samme område.

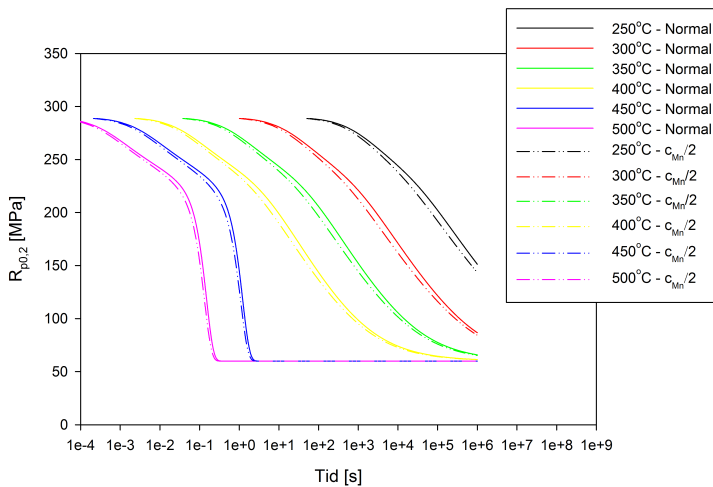
Tabell 4.6: Rekrystalliser kornstørrelse for LP3103 fra Conpal

Figur	250°C	300°C	350°C	400°C	450°C	500°C
4.3.11 [μm]	4.4	5.8	7.5	12.3	34.8	34.8
Eksperimentelle resultater	-	-	40.1	10.4	9.6	10.1

4.4 Andre analyser:

4.4.1 Fast-løsning-konsentrasjon:

For å visualisere hvordan legeringselementer i fast løsning varierer ble det gjort modelleringer hvor nominell konsentrasjon av Mn, c_{Mn} , ble variert. Dette vises i figur 4.4.1. Dette ble gjort på grunnlag av de forskjellige homogeniseringene i doktoravhandlingene til Tangen[1] og Sjølstad[2]. Forskjellene mellom de to utgangspunktene er små, og ikke vesentlige for varmebehandlingsforløpet.



Figur 4.4.1: Sammenlikning av modellerte resultater for LP3103-legering, hvor c_{Mn} er variert. Andre parametere som varierer fra utgangsparemetere er vist i tabell A.5a.

4.4.2 Initielt Zener drag:

Ved å påføre et initielt Zener drag vil antall nukleasjonspunkter reduseres. Dette påvirker kinetikken og spesielt gjennomsnittlig kornstørrelse se likning 2.24. Knut Sjølstad[2] implementerte dette i sin doktoravhandling, og fikk gode resultater.

I denne oppgaven ble dette også utprøvd, med hell. Det viser seg at rekrystallisert kornstørrelse kan manipuleres i Alsoft ved et initielt Zener drag. Det som derimot må overveies er den endringen i kinetikk som intrefrer når dette Zener drag påføres. Rekrystallasjonshastigheten reduseres kraftig på grunn av et redusert antall rekrystallasjonsskim, noe som sterkt påvirker flytspenningskurvene og rekrystallisert kornstørrelse.

Kapittel 5

Diskusjon

I denne delen er resultatene diskutert. Dette inkluderer mulige feilkilder og mulige forklaringer på hvorfor resultatene ser ut som de gjør.

5.1 Parameteranalyse:

Sjølstad[2] rapporterte at B_δ til å være rundt 10^4 og B_ρ til å være rundt 10^5 , mens resultatene i denne rapporten tilsier noe helt annet. Dette gjør det vanskelig å tilpasse modellen til andre legeringer enn den man har eksperimentelle data for.

Dermed er modellen, per dags dato, avhengig av eksperimentelle data for å kunne tilpasse til en viss legering.

5.2 Modelleringer:

5.2.1 AA1200:

Modelleringene for AA1200 gir en god tilpasning til eksperimentelle resultater ved utgangsparametere og ved $P_Z=0$. Dette fordi presipitering av partikler som bidrar til Zener drag ikke forekommer i særlig grad på grunn av lite legeringselementer, i hovedsak Mn, i fast løsning før tilbakeglødingen.

For denne legeringstypen, svært lavlegert, vil parameteranalysen komme til sin fulle rett. Parameteranalysen viser hvordan varmebehandlingsforløpet påvirkes av

de forskjellige parameterene, slik at det ved hjelp av empiri kan fastsettes ett sett med fastsatte parametere for hver enkel av disse legeringene.

5.2.2 CP3103:

For CP3103 under $T_c=325^\circ$ vil et stivt Zener drag i Alsoft ta seg av effekten av presipitering under varmebehandling, slik at avviket opp mot de eksperimentelle dataene blir akseptabelt. Det som er viktig da er at T_c bestemmes, noe som igjen skaper et behov for eksperimentelle data.

For Conpal, som direkte kobler Alsoft og Presipal, vil modelleringene være akseptable uten tilpasning. Derimot vil en viss tilpasning føre til et meget akseptabelt resultat.

Tilpasningene i både Alsoft og Conpal er gjort ved studering av parameteranalysen, slik at usikkerheten fra denne analysen videreføres til disse modelleringene.

5.2.3 LP3103:

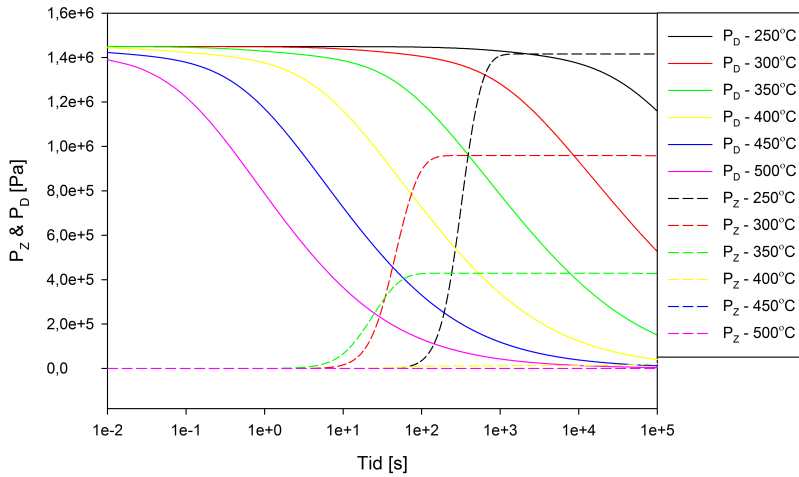
For sammenlikningen mellom eksperimentelle data er det viss usikkerhet med tanke på omregning fra VHN til flytspenning. Dette er en empirisk sammenheng siden det ikke finnes en strengt teoretisk sammenheng. Dermed er det vanskelig å fastslå verdier for flytspenning for LP3103.

Dette medfører vanskeligheter med å verifisere modell og modellparametere for denne legeringen. Derimot kan det, på bakgrunn av resultatene, sies at resultatene basert på likning 3.2 er de som passer best overens med modellen.

5.2.4 Zener drag:

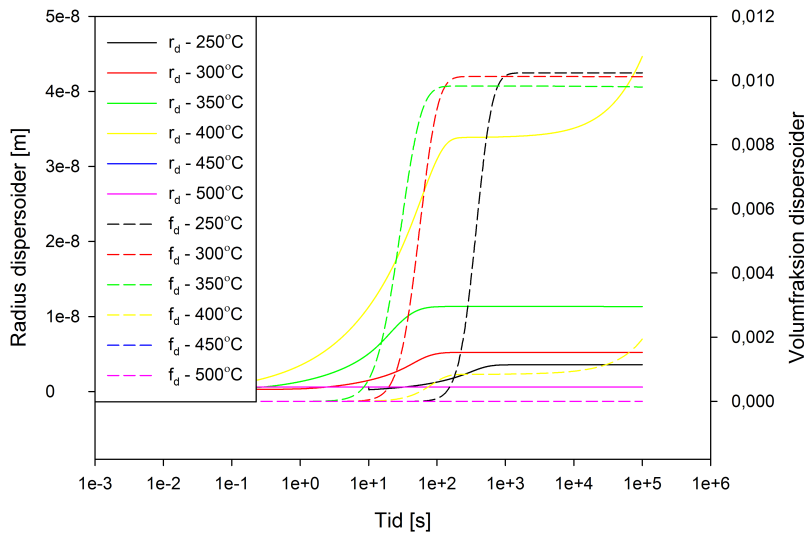
I modelleringene som er presentert i resultatdelen er det for CP3103 og LP3103 inkludert modelleringer med et Zener drag. Dette på grunn av presipitering under varmebehandling.

Figur 5.2.1 viser hvordan Zener drag, P_Z , og drivkraften for rekrystallasjon, P_D , varierer under varmebehandlingsforløpet. Disse resultatene er hentet fra Conpal for case 4. Grunnen til at dette tas med i diskusjonen er det faktum at konsekvensen av at P_Z blir større enn P_D er at rekrystallasjonen stopper opp. Når dette skjer vil videre fall i flytspenning være et produkt av recoveryprosesser. Problemet med dette er fortrinnsvis at påvirkningen presipitering har på recovery ikke er inkludert i Alsoft per dags dato.



Figur 5.2.1: Grafisk fremstilling av P_Z og P_D , case 4

Figur 5.2.2 viser hvordan dispersoidetettheten varierer i forhold til radius på dispersoidene. Figurene er identiske for de forskjellige modelleringscaser, figur B.1, B.3, B.2 og B.4, noe som forteller at P_Z , P_D , r_d og f_d ikke er avhengig av modelleringsparameterene i Alsoft. Dette stemmer overens med måten Presipal og Alsoft er koblet.



Figur 5.2.2: Grafisk fremstilling av dispersoidetetthet og volumfraksjon av dispersoider, case 4

For de tilfellene av modellering med stivt Zener drag i Alsoft, ligger P_Z på $5.85 \cdot 10^5$ og $7,5 \cdot 10^5$. Dispersoidestørrelse og volumfraksjon som er utgangspunkt for disse verdiene er gitt i tabell A.3b og A.3b. Ved sammenlikning av disse verdiene med verdier fra Conpal, observeres det at dette er realistisk for temperaturer under 350°C . Bakgrunnen for disse verdiene er prøving og feiling i Alsoft i et forsøk på å få realistiske kurver for flytspenning.

Naturlig nok vil c_{ss} variere likt med hensyn på tid for disse to tilfellene av Zener drag. Dette fordi utgangskonsentrasjonen og dispersoidutviklingen er lik. Dette vises i figur B.5 og B.6.

5.2.5 Inputparametere:

Tabell A.2 og A.1 viser noen av parameterene som betraktes som inputparametere i Alsoft. Disse parameterene er det, naturlig nok, en viss usikkerhet rundt. Det denne tabellen ikke sier noe om er dislokasjonstetthet og subkornstørrelse. Disse er oppgitt i tabell 4.1. Her er det en viss usikkerhet rundt konstanten, C , som kan variere fra 2-4. Dette betyr at den må tilpasses startverdier for flytspenning for det aktuelle materialet.

For subkornstørrelse er det blitt brukt størrelse i xx retning og ikke et gjennomsnitt mellom RD og ND. Dette er valgt fordi det etter mye prøving og feiling var det som stemte best overens med eksperimentelle data. Her er det et spørsmål om dette vil passe for framtidige forsøk, eller om det er et spesialtilfelle. I den konsekvens av at dette passer for fremtidige forsøk, kan det diskuteres om den *effektive* subkornstørrelsen begrenses av laveste gjennomsnittlige diameter på subkornene.

Modelleringsparameteren M_0 er en parameter som er brukt i kombinasjon med Zener drag for å utsette rekrytallisasjon. Usikkerheten forbundet med denne parameteren er stor, og derfor er det også store avvik i verdiene som er brukt i modelleringene.

Det er gjort en analyse på varierende konsentrasjon av fast løst Mn. Dette fordi det etter homogenisering vil være en lavere konsentrasjon i fast løsning enn i det opprinnelige materialet. I hovedsak sier resultatene at dette ikke spiller en vesentlig rolle i varmebehandlingsforløpet. Dette kan diskuteres på grunnlag av at dette vil påvirke utviklingen av Zener drag under varmebehandlingsforløpet.

5.3 Modelleringsprogrammene:

For Matlabimplementasjonen av Alsoft er det per dags dato et problem med bestemming av T_c . Det er derfor nødvendig med eksperimentelle data for legeringene. Det er også vanskelig å anslå nødvendig Zener drag for tilfellene hvor temperaturen er under T_c . Derimot vil presipiteringsmodellen Presipal kunne gi disse data, slik at

koblingen mellom Alsoft og Presipal er svært nyttig.

Conpal kobler presipitering og mikrostrukturelle endringer i materialet. Dette betyr at det, for temperaturer hvor presipitering spiller inn, vil tas høyde for bremsing/hindring av rekrystallasjon. Derimot er kornstørrelsene som beregnes i Conpal ikke realistiske, noe som delvis kan relateres til parametere i Alsoft-delen av Conpal. Det er mulig at urealistiske kornstørrelser kan ligge i programmeringen av Conpal, siden kornstørrelsene som modelleres i Alsoft alene ikke er like urealistiske. Uavhengig av dette viser kornstørrelsene en trend som ikke er realistisk i forhold til modellerte data, noe som må ses nærmere på i videre arbeid.

Kapittel 6

Konklusjon

Modelleringene for de forskjellige legeringsene har et nokså forskjellig utgangspunkt. Alsoft har en utmerket prediksjonsevne av varmebehandlingsforløp for legeringer med svært lavt legeringsinnhold, da disse legeringene ikke er påvirket av samtidig presipitering under tilbakeglødingen, som nåværende versjon av Alsoft ikke tar høyde for. Derfor er det for AA1200 en enkel jobb å tilpasse modellen for flytspenninger i forhold til eksperimentelle data. For modellering av kornstørrelser viser modellerterestulter en for dårlig tilpasning til eksperimentelle resultater, og utviklingen av rekrystalliserte kornstørrelser i forhold til temperatur er svært urealistisk i forhold til eksperimentelle resultater. De viser en økende trend mot høyere temperaturer, noe som er stikk motsatt for de eksperimentelle resultatene. Dette kan være en "bug" i koden for Conpal, som trenger nærmere avklaring. Det ble til slutt funnet et sett med kjøreparametere for denne legeringen som ble lagt inn som standard i Conpal.

For CP3103 og LP3103 er modellering endel vanskeligere. Dette på grunn av presipitering av dispersoider under varmebehandling. Alsoft tar ikke høyde for denne presipiteringen, men ved hjelp av et stivt Zener drag er det mulig å få akseptable resultater. Conpal, som er en koplet versjon av Presipal og Alsoft, tar høyde for denne presipiteringen ved en direkte kobling av mikrostrukturelle endringer og presipitering under varmebehandling. Dette fører til en akseptabel prediksjonsevne for varmebehandling av relativt høy-legert aluminium, som CP3103 og LP3103. Det siste resultatet for LP3103 viser hvor bra modellen faktisk kan være, og for dette tilfellet er prediksjonsevnen for flytspenninger meget bra.

Det konkluderes med, etter sammenlikningen av data fra flere forskjellige modeller, at isolert sett er modellene matematisk sett gode. Problemet ligger i parametere som må fastsettes individuelt for hver legering. Koblingen av modellene fungerer bra, men brukergrensesnittet for Conpal må perfektioneres for å lette bruk, nærmere bestemt endring av parametere, temperatur og varmebehandlingsmodell.

Dette kan muligens gjøres ved å lage et *isothermal* og *non-isothermal* grensesnitt, hvor det i det første tilfellet ikke er mulig å variere temperatur under varmebehandling, mens det for det siste tilfellet er muligheter for dette. Siden det i hovedsak, hvertfall for denne rapporten, gjøres modelleringer for isoterme varmebehandlinger, vil dette lette modelleringen. Dette er et praktisk forslag med tanke på grensesnittet, og har ingenting med selve modellen å gjøre.

Videre arbeid burde inkludere bedre estimering av modelleringsparametere for forskjellige legeringer og tilfeller. Dette for å lette bruk av modellen industrielt, og for bedre automatisering av modellen. Målet må være å kunne bare ha kjemisk analyse og deformasjonshistorie som input-parametere, og likevel få akseptable resultater uavhengig av legeringstype.

Referanser

- [1] Stian Tangen. *PhD Thesis*. NTNU, 2004.
- [2] Knut Sjølstad. *PhD Thesis*. NTNU, 2003.
- [3] Øyvind Ryen, Bjørn Holmedal, Oscar Nijs, Erik Nes, Emma Sjölander, and Hans-Erik Ekström. Strengthening mechanisms in solid solution aluminum alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 37(6):1999–2006, 2006.
- [4] John Jonas, Matthew Barnett, and Peter Hodgson. *Thermomechanical Processing*, pages 29–1–29–26. CRC Press, 2007.
- [5] F. J. Humphreys and M. Hatherly. *Introduction*, pages 1–10. Elsevier, Oxford, 2004.
- [6] T. Furu, R. Ørsund, and E. Nes. Subgrain growth in heavily deformed aluminium—experimental investigation and modelling treatment. *Acta Metallurgica et Materialia*, 43(6):2209–2232, 1995.
- [7] H. E. Vatne, T. Furu, R. Ørsund, and E. Nes. Modelling recrystallization after hot deformation of aluminium. *Acta Materialia*, 44(11):4463 – 4473, 1996.
- [8] F. J. Humphreys. Local lattice rotations at second phase particles in deformed metals. *Acta Metallurgica*, 27(12):1801–1814, 1979.
- [9] F. J. Humphreys. The nucleation of recrystallization at second phase particles in deformed aluminium. *Acta Metallurgica*, 25(11):1323–1344, 1977.
- [10] L.E. Murr. *Interfacial phenomena in metals and alloys*. Addison-Wesley, 1975.
- [11] H.E. Vatne. *PhD Thesis*. NTNU, 1995.
- [12] R. Shahani H.E. Vatne, S. Benum and E. Nes. *Risø Symposium*, 16:215, 1995.
- [13] Sindre Bunkholt. Personlig kommunikasjon, 2011.
- [14] J.A. Sæter, B. Forbord, H.E. Vatne, and E. Nes. Modelling recovery and recrystallisation, applied to back-annealing of aluminium sheet alloys. *Aluminium Alloys*, 1:113–126, 1998.
- [15] Z.J. Lok. *PhD Thesis*. Netherlands Institute of Metals Research, NIMR, 2005.

Vedlegg A

Parametere

Tabell A.1: Oversikt over de viktigste inputparameterene i alsoft, modelleringsparameterene for AA1200

Parameternavn	Verdi	Forklaring
B_{rho}	8.00E+06	Constant in evolution eq. for dislocation density
ω_{rho}	0.50	Constant in evolution eq. for dislocation density
$Bdelta$	10000	Constant in evolution eq. for subgrain size
ω_{δ}	1.00	Constant in evolution eq. for subgrain size
M_0	1.00E+07	Prefactor for mobility (m^4/s)
N_0	0.60E+16	Constant in expr. for density of particle stimulated nucleation sites (m^3)
L	2.20E+06	Constant in particle size distribution ($1/m$)
D_0	1.00E-04	Initial (as-cast) grain size (m)
C_{PE}	1.20	Constant in expr. for density of particle stimulated nucleation sites
C_{PSN}	0.20	Prefactor for density of particle stimulated nucleation sites
C_{GB}	0.12	Constant in expr. for density of grain boundary nucleation sites
θ	4.00	Missorientation (Deg.)
C_{Cube}	0.40	Constant in expr. for density of cube nucleation sites
R_{FLP}	25	Friction stress (MPa)

Tabell A.2: Oversikt over de viktigste inputparameterene i alsoft, utgangsparetere for CP3103 og LP3103

Parameter navn	Verdi	Forklaring
B_{rho}	8,00E+06	Constant in evolution eq. for dislocation density
ω_{rho}	0,50	Constant in evolution eq. for dislocation density
B_{delta}	10,00	Constant in evolution eq. for subgrain size
ω_{δ}	5,00	Constant in evolution eq. for subgrain size
M_0	3,00E+05	Prefactor for mobility (m^4/s)
N_0	7,00E+15	Constant in expr. for density of particle stimulated nucleation sites (m^3)
L	8,40E+05	Constant in particle size distribution ($1/m$)
D_0	1,00E-04	Initial (as-cast) grain size (m)
C_{PE}	1,20	Constant in expr. for density of particle stimulated nucleation sites
C_{PSN}	0,20	Prefactor for density of particle stimulated nucleation sites
C_{GB}	0,12	Constant in expr. for density of grain boundary nucleation sites
θ	3,00	Missorientation (Deg.)
C_{Cube}	0,40	Constant in expr. for density of cube nucleation sites
R_{FLP}	38	Friction stress (MPa)

Tabell A.3: Inputparametre for case 1 og 2

(a) Case 1		(b) Case 2	
Parameternavn	Verdi	Parameternavn	Verdi
B_{rho}	$4,00 \cdot 10^6$	B_{rho}	$4,00 \cdot 10^6$
ω_{rho}	0,25	ω_{rho}	0,05
$Bdelta$	5,00	$Bdelta$	5,00
ω_{δ}	2,50	ω_{δ}	2,50
		M_0	$1,00 \cdot 10^4$
		P_Z	$5,85 \cdot 10^5$
		Volumfraksjon	$1,0 \cdot 10^{-2}$
		Partikkelstørrelse	$7,69 \cdot 10^{-9}$

Tabell A.4: Inputparametre for case 3 og 4

(a) Case 3		(b) Case 4	
Parameternavn	Verdi	Parameternavn	Verdi
B_{rho}	$4,00 \cdot 10^6$	B_{rho}	$4,00 \cdot 10^6$
ω_{rho}	0,25	ω_{rho}	0,05
$Bdelta$	5,00	$Bdelta$	5,00
ω_{δ}	2,50	ω_{δ}	2,50
P_Z	$7,5 \cdot 10^5$	M_0	$1,00 \cdot 10^4$
Volumfraksjon	$1,0 \cdot 10^{-2}$		
Partikkelstørrelse	$6,0 \cdot 10^{-9}$		

Tabell A.5: Inputparametre for case 5 og 6

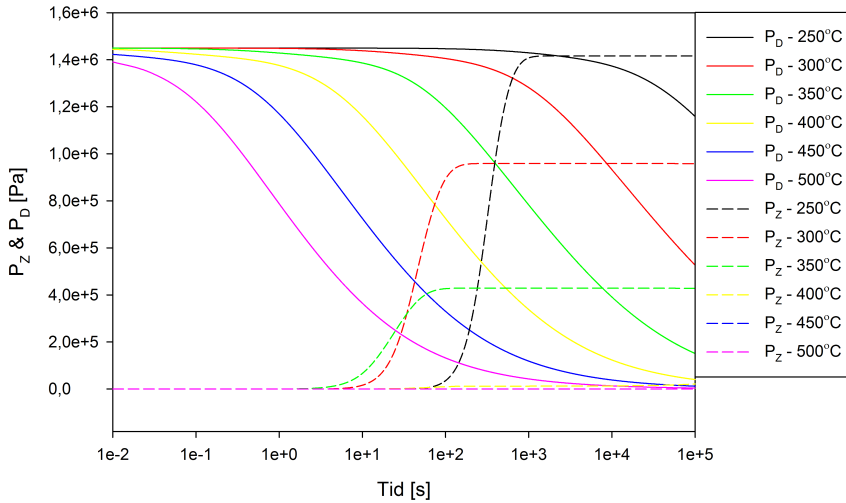
(a) Case 5		(b) Case 6	
Parameternavn	Verdi	Parameternavn	Verdi
B_{rho}	$4,00 \cdot 10^6$	B_{rho}	$4,00 \cdot 10^6$
ω_{rho}	0,05	ω_{rho}	0,05
$Bdelta$	5,00	$Bdelta$	5,00
ω_{δ}	2,50	ω_{δ}	2,50
P_Z	$7,5 \cdot 10^5$	M_0	$1,00 \cdot 10^4$
Volumfraksjon	$1,0 \cdot 10^{-2}$		
Partikkelstørrelse	$6,0 \cdot 10^{-9}$		

Tabell A.6: Inputparametre for case 7 og 8

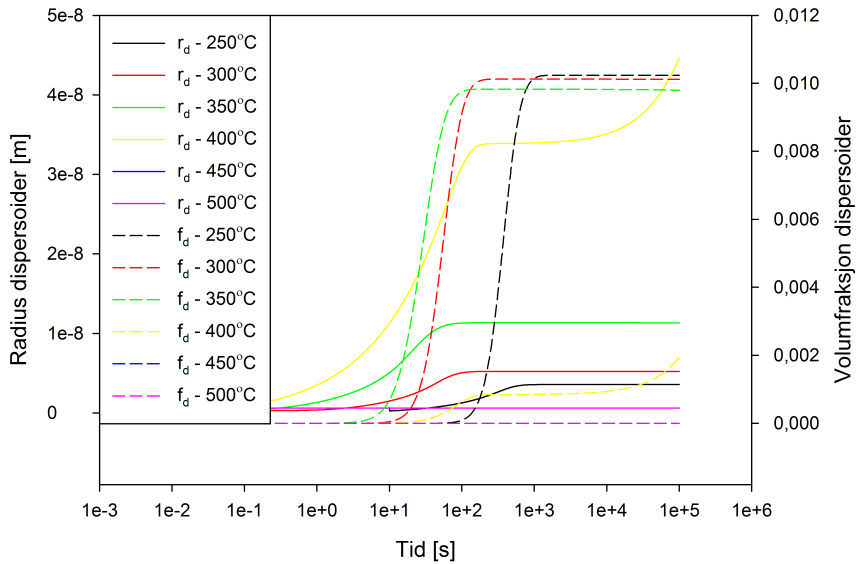
(a) Case 7		(b) Case 8	
Parameternavn	Verdi	Parameternavn	Verdi
B_{rho}	$8,00 \cdot 10^5$	B_{rho}	$8,00 \cdot 10^5$
ω_{rho}	0,05	ω_{rho}	0,05
$Bdelta$	5,00	$Bdelta$	5,00
ω_{δ}	2,50	ω_{δ}	2,50
M_0	$1,00 \cdot 10^4$	M_0	$1,00 \cdot 10^4$
P_Z	$5,85 \cdot 10^5$		
Volumfraksjon	$1,0 \cdot 10^{-2}$		
Partikkelstørrelse	$7,69 \cdot 10^{-9}$		

Vedlegg B

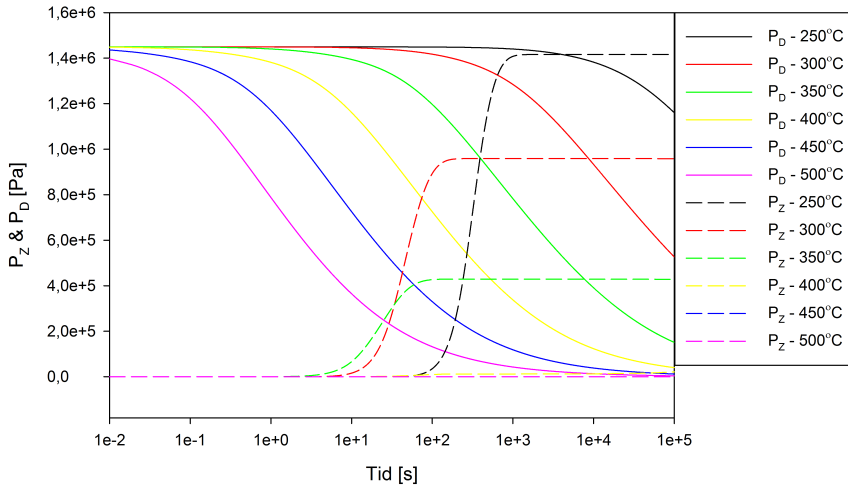
Zener drag:



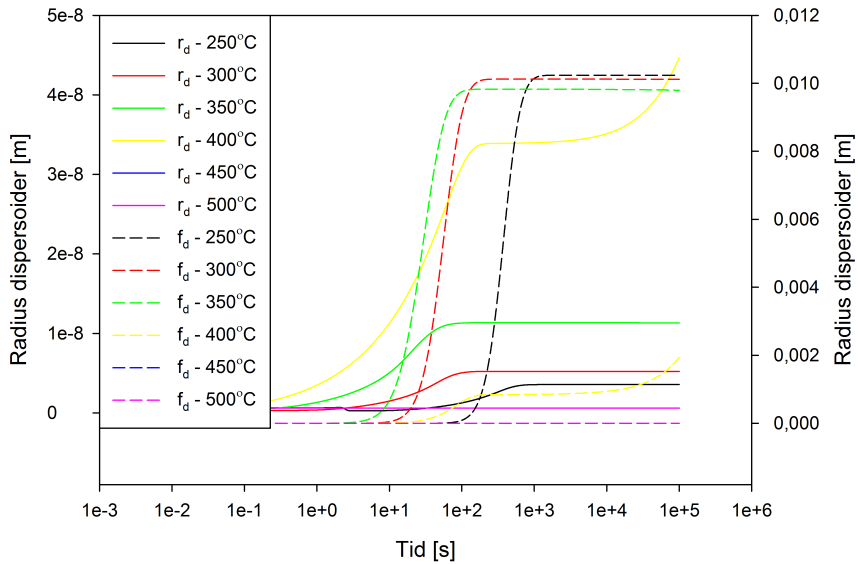
Figur B.1: Grafisk fremstilling av P_Z og P_D , case 4, som funksjon av gløtetid



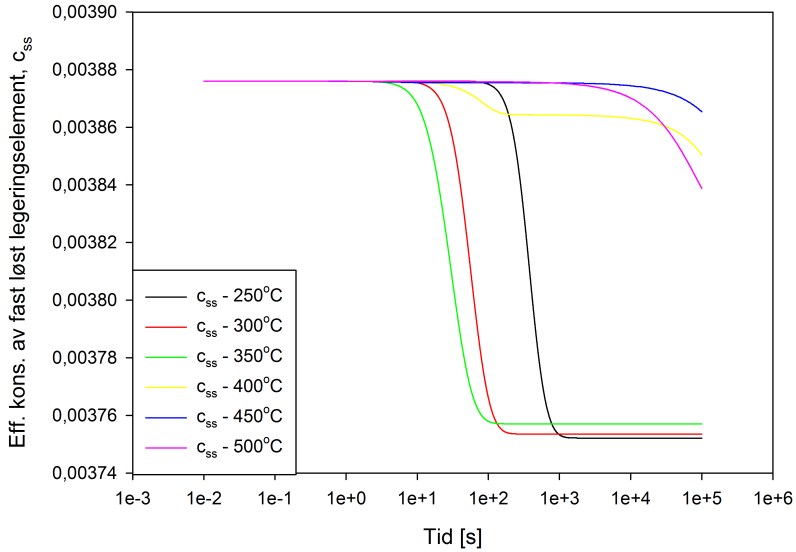
Figur B.2: Grafisk fremstilling av midlere radius og volumfraksjon av dispersoider, case 4, som funksjon av gløtetid



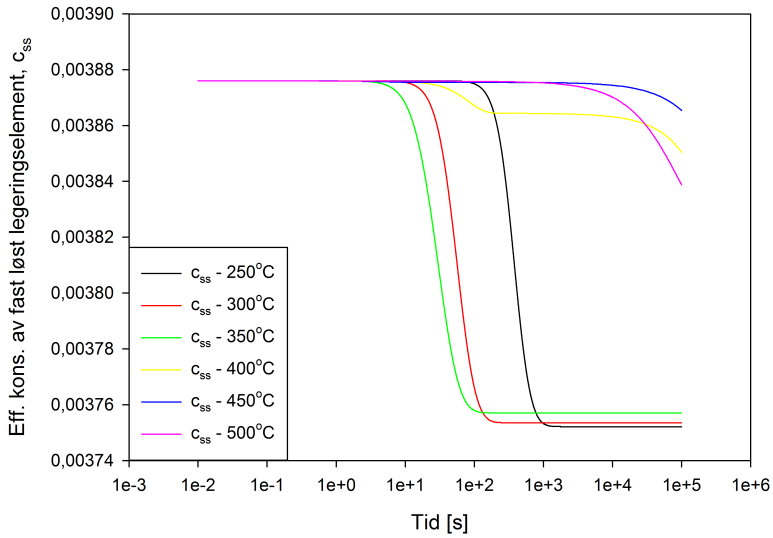
Figur B.3: Grafisk fremstilling av P_Z og P_D , case 8, som funksjon av gløtetid



Figur B.4: Grafisk fremstilling av midlere radius og volumfraksjon av dispersoider, case 8, som funksjon av gløtetid



Figur B.5: Oversikt over hvordan fast-løsningskonsentrasjonen, c_{ss} , varierer gjennom varmebehandlingsforløpet for case 4, verdier hentet fra Conpal



Figur B.6: Oversikt over hvordan fast-løsningskonsentrasjonen, c_{ss} , varierer gjennom varmebehandlingsforløpet for case 8, verdier hentet fra Conpal

Vedlegg C

Andre vedlegg:

C.1 Matlab:

Koden som er inkludert i dette vedlegget er hovedkoden i Matlabimplementasjonen av Alsoft. Det som er skrevet med grønn tekst er enten informasjon eller kode som ikke er inkludert i dagens versjon. Dette kan ha mange grunner, oftest at det ikke er perfektjonert og derfor utelatt.


```

data

tabdat = get(handles.uitable1, 'Data');
fT      = tabdat(:,1);
T       = tabdat(:,2);
Ceff    = tabdat(:,3);
PZ      = tabdat(:,4);

T = T + 273.15;

Z = fZ; % ZenerHollomon parameter
calculation
if get(handles.radiobutton3, 'Value') % only if radiobutton1 for ZH is
on
    [rho_i0ZH delta0ZH] = finitZH(Z); % initial conditions from ZH eq
    rho_i = rho_i0ZH; % initial conditions from ZH eq
    delta = delta0ZH; % initial conditions from ZH eq
else
    rho_i = rho_i0; % initial conditions without ZH
from edit51
    delta = delta0; % initial conditions without ZH
from edit52
end

r = r0; % initial conditions

N_Cube = fN_Cube(rho_i, delta, T_def, PZ_def, strain_def, Z);
N_GB = fN_GB(rho_i, delta, T_def, PZ_def, strain_def, Z);
N_PSN = fN_PSN(rho_i, delta, T_def, PZ_def, strain_def, Z);

Ntot = N_Cube + N_GB + N_PSN;

% options = odeset('RelTol',1e-8,'AbsTol',[1e-16 1e-16 1e-16]);
[t,Y] = ode45(@ (t,y) evolution(t,y,fT,T,Ceff,PZ), [0 max(fT)], [rho_i delta r]);

rho_i = Y(:,1);
delta = Y(:,2);
r = Y(:,3);

T = interp1(fT,T,t);
Ceff = interp1(fT,Ceff,t);
PZ = interp1(fT,PZ,t);

[X D Rp02] = calc(T, Ntot, rho_i, delta, r);

colors = ['b' 'g' 'r' 'c' 'm' 'k' 'y'];

```

```

semilogx(handles.axes4,t,100*X, colors(col))
title(handles.axes4,'Fraction Recrystallized','Interpreter','Latex')
xlabel(handles.axes4,'time [s]','Interpreter','Latex');
ylabel(handles.axes4,'X [%]','Interpreter','Latex');
set(handles.axes4,'NextPlot','add')

semilogx(handles.axes5,t, D*1e6, colors(col))
title(handles.axes5,'Mean size of recrystallized
grains','Interpreter','Latex')
xlabel(handles.axes5,'time [s]','Interpreter','Latex');
ylabel(handles.axes5,'D [ $\mu\text{m}$ '],'Interpreter','Latex');
set(handles.axes5,'NextPlot','add')

semilogx(handles.axes6,t,Rp02*1e-6, colors(col))
title(handles.axes6,'Yield strength  $R_{p02}$ ','Interpreter','Latex')
xlabel(handles.axes6,'time [s]','Interpreter','Latex');
ylabel(handles.axes6,' $R_{p02}$  [MPa]','Interpreter','Latex');
set(handles.axes6,'NextPlot','add')

semilogx(handles.axes7,t,rho_i, colors(col))
title(handles.axes7,'Dislocation density','Interpreter','Latex')
xlabel(handles.axes7,'time [s]','Interpreter','Latex');
ylabel(handles.axes7,' $\rho_i$  [ $\text{m}^{-2}$ '],'Interpreter','Latex');
set(handles.axes7,'NextPlot','add')

semilogx(handles.axes8,t,delta*1e6, colors(col))
title(handles.axes8,'Subgrain size','Interpreter','Latex')
xlabel(handles.axes8,'time [s]','Interpreter','Latex');
ylabel(handles.axes8,' $\delta$  [ $\mu\text{m}$ '],'Interpreter','Latex');
set(handles.axes8,'NextPlot','add')

semilogx(handles.axes9,t,r*1e3, colors(col))
title(handles.axes9,'Radius of recrystallized grains','Interpreter','Latex')
xlabel(handles.axes9,'time [s]','Interpreter','Latex');
ylabel(handles.axes9,'r [mm]','Interpreter','Latex');
set(handles.axes9,'NextPlot','add')

% if PD<PZ then warn = 1 and the warning message appears
if warn == 1
    set(handles.text36,'Visible','on')
end
warn = 0;

% handling the colors to alternate 7 colors
if col < 7
    col = col+1;
else
    col = 1;
end

global fout
fout = [t X D Rp02 rho_i delta r]';

```

```

% function which calculates set of differential equations
function dy = evolution(t,y,fT,T,Ceff,PZ)
data

T      = interp1(fT,T,t);
Ceff   = interp1(fT,Ceff,t);
PZ     = interp1(fT,PZ,t);

Mobility = M0/(Ceff*Rgas*T)*exp(-U_rex/(Rgas*T));
PD = fP_D(T, y(2), y(1));
if PD < (PZ+1)
    warn = 1;
    PD = PZ+1;
end
G = ff_G(T);
A_rho = w_rho*Ceff^(-e_rho);
A_delta = w_delta*Ceff^(-e_delta);

dy = zeros(3,1);    % a column vector

dy(1) = -2*nu_D*b*B_rho*A_rho*y(1)^(1.5)*exp(-
U_a/(Rgas*T))*sinh(A_rho*G*b^4*sqrt(y(1))/(kB*T));
dy(2) = 2*nu_D*b*B_delta*A_delta*exp(-
U_a/(Rgas*T))*sinh(A_delta*G*b^4/(y(2)*kB*T));
dy(3) = Mobility*(PD - PZ);

% calculation of output quantities X, D, Rp02
function [X D Rp02] = calc(T, Ntot, rho_i, delta, r)
data

Xext = 4/3*pi*r.^3*Ntot;
X     = 1 - exp(-Xext);
D     = (X/Ntot).^ (1/3);

G = ff_G(T);
Rp02 = R_FLP + (1-X)*M.*G*b.*(alpha1*sqrt(rho_i) + alpha2./delta);

% Density of nucleation sites for cube grains
function N_Cube = fN_Cube(rho_i, delta, T, PZ, strain, Z)
data

Rc = fR_Cube(Z, strain);
deltaCritical = feta_c(rho_i, delta, T, PZ);
deltaMean     = delta*fCube;
Rs = fR_s(strain);
Sc = fS_Cube(deltaCritical, deltaMean);
N_Cube = 2*C_Cube*deltaMean*Rc*(1-Rc)*Rs*Sc/D0*(exp(strain) + exp(-strain)+
1);

```

```

% Density of grain boundary nucleation sites
function N_GB = fN_GB(rho_i, delta, T, PZ, strain, Z)
data

Rc = fR_Cube(Z, strain);
deltaCritical = feta_c(rho_i, delta, T, PZ);
deltaMean = delta;
S_GB = fS_Cube(deltaCritical, deltaMean);
N_GB = 2*C_GB*deltaMean*(1-Rc)*S_GB/D0*(exp(strain) + exp(-strain)+ 1);

% Density of particle stimulated nucleation sites
function N_PSN = fN_PSN(rho_i, delta, T, PZ, strain, Z)
data

eta_c = feta_c(rho_i, delta, T, PZ);
if (eta_c < 0)
    N_PSN = 0;
elseif (L*eta_c > 30)
    N_PSN = 0;
else
    N_PSN = C_PSN*N0*exp(-L*CPE*eta_c);
end

function R_Cube = fR_Cube(Z, strain)
data

R_Cube = R_c0*R_cA*(R_cB+R_cC*strain)^(R_cD)*(R_cE*log(Z)+R_cF)^(R_cG);

function eta_c = feta_c(rho_i, delta, T, PZ)
data

PD = fP_D(T, delta, rho_i);
eta_c = (4*gamma_GB)/(PD - PZ);

function P_D = fP_D(T, delta, rho_i)
data

G = ff_G(T);
gamma_SB = G*b*theta/(4*pi*(1-nu))*log(exp(1)*theta_c/theta);
P_D = alpha0*gamma_SB/delta + 0.5*G*b*b*rho_i;

function f_G = ff_G(T)
data

% G = 2.99e10*exp(-5.4e-4*T);
f_G = G0*exp(-G1*T);

```

```

function R_s = fR_s(strain)
data

if(strain < R_sC)
    R_s= R_sA + R_sB*strain;
else
    R_s= R_sA + R_sB*R_sC;
end

function S_Cube = fS_Cube(deltaCritical, deltaMean)
data

A = deltaCritical/deltaMean;

if((A < 0) || (A > 15))
    S_Cube = 0;
else

summ = 1;
fact = 1;

A = 5*deltaCritical/deltaMean;
for i=1:4
    fact = fact*i;
    term = A^i/fact;
    summ = summ + term;
end
integral = exp(-A)*summ;
S_Cube = integral/deltaMean^3;
end
% Zener Drag calculation
function P_Z = fP_Z()
data

P_Z = C_PZ*3*gamma_GB*f_p/(2*r_p);

% Effective concentration calculation
function Ceff = fCss()
data

wss = tabchem(:,1);
wss(6) = 100-sum(wss(1:5));
Ar = tabchem(:,2);
U = tabchem(:,3);

wss = wss*0.01;

% KM 4. Nov. 2010 (for 6xxx alloys)
% wss(1) = wss(1) - (wss(2)+wss(4))/3;
% wss(2) = 0;
% wss(4) = 0;

```

```

wss(1) = wss(1);           % - (wss(2)+wss(4))/3;
wss(2) = wss(2);
wss(4) = wss(4);

wss(6) = 1-wss(1)-wss(2)-wss(3)-wss(4)-wss(5);
temp = dot(wss,1./Ar);
ass = wss./(Ar*temp);
Ceff = Css_0 + dot(ass,exp(-U_a./U));

function Z = fZ()
data

Z = strainRate*exp(U_ZH/(Rgas*T_def));

% initial rho_i and delta calculation
function [rho_i delta] = finitZH(Z)
data

delta = 1e-8;              % starting value for iteration
epsilon = 1e-4;
rel_diff = 1;

while abs(rel_diff) > epsilon      % Newton's method
    f = 1/delta-(Rgas*T_def/As)*log(Z*delta^2/Bs);
    df = -1/(delta^2)-2*B_s*Rgas*T_def/(As*Z*delta);
    delta_new = delta - f/df;
    rel_diff = (delta_new - delta)/delta;
    delta = delta_new;
end

rho_i = (C1/delta)^2;

```

```

0          PF as_mode      Bitflag for mode selection, currently unused...
1.2e13    SV rho_i        Initial dislocation density (#/m^2)
8.1e-7    SV delta       Initial subgrain size (m)
0.0       SV r           Initial recrystallised grain size (m)
2.5e1     PF R_FLP       Friction stress (MPa)
8.0e6     AI B_rho       Constant in evolution eq. for dislocation density
0.5       AI w_rho       Constant in evolution eq. for dislocation density
10000     AI B_delta     Constant in evolution eq. for subgrain size
1         AI w_delta     Constant in evolution eq. for subgrain size
0.6e16    AD N0          Constant in expr. for density of particle stimulated
nucleation sites (m^3)
2.2e6     AD L           Constant in particle size distribution (1/m)
1.0e7     AI M0          Prefactor for mobility (m^4/s)
100.E-6   AD D0          Initial (as-cast) grain size (m)
0.6667    AI e_delta     Constant in evolution eq. for subgrain size
0.6667    AI e_rho       Constant in evolution eq. for dislocation density
0.3       AI alpha1      Constant in strength model
2.5       AI alpha2      Constant in strength model
3.0       AI Mtaylor     Taylor factor
2.86e-10  HC b           Burgers vector (m)
1.0e13    HC nu_D        Debye frequency (1/s)
0.3       HC gamma_GB   Grain boundary energy (J/m^2)
1.2       AD CPE         Constant in expr. for density of particle stimulated nucleation sites
0.2       AD C_PSN       Prefactor for density of particle stimulated nucleation sites
0.12      AD C_GB        Constant in expr. for density of grain boundary nucleation sites
2.5       AI alpha       Geometric constant in driving pressure for recrystallisation
4.0       HC theta       Missorientation (Deg.)
15.0     HC theta_c     Constant for missorientation (Deg.)
0.33      HC nu          Poisson number
0.04      AI R_c0        Initial volume fraction of cube grains
0.4       AD C_Cube      Constant in expr. for density of cube nucleation sites
1.3       AD fCube       Scale factor for mean cube grain size
2.6       AD R_cA        Constant in expr. for volume fraction cube grains
1.0       AD R_cB        Constant in expr. for volume fraction cube grains
0.3       AD R_cC        Constant in expr. for volume fraction cube grains
-2.       AD R_cD        Constant in expr. for volume fraction cube grains
0.1       AD R_cE        Constant in expr. for volume fraction cube grains
-1.4     AD R_cF        Constant in expr. for volume fraction cube grains
-1.8     AD R_cG        Constant in expr. for volume fraction cube grains
0.04      AD R_sA        Constant in expr. for fraction S deformation texture
0.173    AD R_sB        Constant in expr. for fraction S deformation texture
2.0       AD R_sC        Constant in expr. for fraction S deformation texture
200.e3    AD U_a         Eff. activation energy for solute diffusion (J/mol)
200.e3    AI U_rex       Activation energy for recrystallisation (J/mol)
2.65e10  AI G0          Prefactor in expr. for shear modulus (Pa) [2.99e10]
0.        AI G1          Exp. factor in expr. for shear modulus (K^-1) [5.4e-4]
124.     AI T_def       Temperature during initial deformation (C)
0.        AD PZ_def     Zener drag during initial deformation (Pa)
1.5      PF strain_def   True strain after initial deformation
4e21     PF Z           Zener-Holomon parameter (1/s)

```

Figur C.1: Komplet inputfil med utgangsparametere for AA1200

```

0          PF as_mode      Bitflag for mode selection, currently unused...
2.0e13    SV rho_i        Initial dislocation density (#/m^2)
0.45e-6   SV delta        Initial subgrain size (m)
0.0       SV r            Initial recrystallised grain size (m)
3.8e1     PP R_FLP        Friction stress (MPa)
8.0e6     AI E_rho        Constant in evolution eq. for dislocation density
.5        AI w_rho        Constant in evolution eq. for dislocation density
10.0     AI E_delta       Constant in evolution eq. for subgrain size
5.        AI w_delta       Constant in evolution eq. for subgrain size
0.7e16    AD N0           Constant in expr. for density of particle stimulated
nucleation sites (m^3)

0.84e6    AD L            Constant in particle size distribution (1/m)
3.0e6     AI M0           Prefactor for mobility (m^4/s)
100.E-6   AD D0           Initial (as-cast) grain size (m)
0.6667    AI e_delta      Constant in evolution eq. for subgrain size
0.6667    AI e_rho        Constant in evolution eq. for dislocation density
0.3       AI alpha1       Constant in strength model
2.5       AI alpha2       Constant in strength model
3.0       AI Mtaylor      Taylor factor
2.86e-10  HC b            Burgers vector (m)
1.0e13    HC nu_D         Debye frequency (1/s)
0.3       HC gamma_GB    Grain boundary energy (J/m^2)
1.2       AD CPE          Constant in expr. for density of particle stimulated
nucleation sites

0.2       AD C_PSN        Prefactor for density of particle stimulated nucleation
sites

0.12     AD C_GB          Constant in expr. for density of grain boundary nucleation
sites

2.5       AI alpha        Geometric constant in driving pressure for recrystallisation
4.0       HC theta        Missorientation (Deg.)
15.0     HC theta_c       Constant for missorientation (Deg.)
0.33     HC nu            Poisson number
0.04     AI R_c0          Initial volume fraction of cube grains
0.4       AD C_Cube       Constant in expr. for density of cube nucleation sites
1.3       AD fCube        Scale factor for mean cube grain size
2.6       AD R_cA         Constant in expr. for volume fraction cube grains
1.0       AD R_cB         Constant in expr. for volume fraction cube grains
0.3       AD R_cC         Constant in expr. for volume fraction cube grains
-2.       AD R_cD         Constant in expr. for volume fraction cube grains
0.1       AD R_cE         Constant in expr. for volume fraction cube grains
-1.4     AD R_cF         Constant in expr. for volume fraction cube grains
-1.8     AD R_cG         Constant in expr. for volume fraction cube grains
0.04     AD R_sA          Constant in expr. for fraction S deformation texture
0.173    AD R_sB          Constant in expr. for fraction S deformation texture
2.0       AD R_sC          Constant in expr. for fraction S deformation texture
200.e3    AD U_a          Eff. activation energy for solute diffusion (J/mol)
200.e3    AI U_rex        Activation energy for recrystallisation (J/mol)
2.65e10   AI G0           Prefactor in expr. for shear modulus (Pa) [2.99e10]
0.        AI G1           Exp. factor in expr. for shear modulus (K^-1) [5.4e-4]
20.       AI T_def        Temperature during initial deformation (C)
0.        AD PZ_def        Zener drag during initial deformation (Pa)
1.5       PP strain_def   True strain after initial deformation
4e21     PP Z             Zener-Holomon parameter (1/s)

```

Figur C.2: Komplet inutfil med utgangsparetere for CP3103 og LP3103

C.2 Conpal:

```

1.42E+13      ST  rho_i      Initial dislocation density (1/m^2)
0.536144E-06 ST  delta      Initial subgrain size (m)
4.0           ST  theta      Initial missorientation (deg) (0.001)
0.            ST  X          Initial volume fraction recrystallised
0.            ST  S          Initial surface fraction recryst. (1/m)
0.            ST  Dext       Initial extended recrystallised grain
              size (m)
0.            ST  N_d        Initial dispersoid number density
              (1/m^3)
0.            ST  f_d        Initial dispersoid volume fraction
0.0406        ST  f_c        Initial constituent volume fraction
0.            AI  strain0     Initial true strain
100e-6        AI  D0         Initial grain size (m)
3.0           AD  M_Taylor   Taylor factor
0.33          AI  gamma_GB   Grain boundary energy (J/m^2)
1.0           AI  Cd_PZ      Prefactor for Zener drag for
              dispersoids
0.0           AI  Cc_PZ      Prefactor for Zener drag for
              constituents

```

```

#-----
# TREATMENT TABLE
#time(s)  T(C)  strainRate(1/s)  modules  nsteps  process_step
0.0       250.  0.              -        0        init
1.0       250.  0.              PS       100      softening
5.0       250.  0.              PS       100      softening
10.0      250.  0.              PS       100      softening
20.0      250.  0.              PS       100      softening
50.0      250.  0.              PS       100      softening
100.0     250.  0.              PS       100      softening
360.0     250.  0.              PS       100      softening
720.0     250.  0.              PS       100      softening
1080.0    250.  0.              PS       100      softening
1440.0    250.  0.              PS       100      softening
1800.0    250.  0.              PS       100      softening
2160.0    250.  0.              PS       100      softening
2520.0    250.  0.              PS       100      softening
2880.0    250.  0.              PS       100      softening
3240.0    250.  0.              PS       100      softening
3600.0    250.  0.              PS       100      softening
3960.0    250.  0.              PS       100      softening
4320.0    250.  0.              PS       100      softening
4680.0    250.  0.              PS       100      softening
5040.0    250.  0.              PS       100      softening
10000.0   250.  0.              PS       100      softening
100000.0  250.  0.              PS       100      softening
1000000.0 250.  0.              PS       100      softening

#
0         250.  0              -        0        init
1         20.  0              SP       100      cooling
120      20.  0              SP       100      cooling
3600     20.  0              SP       100      cooling
36000    20.  0              SP       100      cooling

#

```

Figur C.1: Input for Conpal for CP3103 ved 250°C

C.3 Presipal:

0	<u>PF_mode</u>	Mode bit flag. 1=phenomenological model.
0.	<u>IV_N_d0</u>	Initial <u>dispersoid</u> density, 1/m ³
0.	<u>IV_f_d0</u>	Initial <u>dispersoid</u> volume fraction
0.041	<u>IV_f_c0</u>	Initial constituents volume fraction
4.0496e-10	<u>AI_a0</u>	Lattice parameter of matrix (<u>assuming fcc</u>), m
6.87e15	<u>AD_N_c</u>	Number density of constituents, 1/m ³
9.68e-6	<u>AI_Vm_d</u>	Molar volume of <u>dispersoids</u> , m ³ /mol
0.05	<u>AI_Zeldovic</u>	<u>Zeldovic</u> factor
4.0496e-10	<u>AI_t_SGB</u>	Effective <u>subgrain</u> boundary thickness, m
0.324	<u>AI_gamma_d</u>	<u>Dispersoid-matrix interface</u> energy, J/m ²
1.05	<u>AI_eta</u>	Factor expressing that only nuclei's <u>larger</u> than <u>rcrit</u> will grow
1.6603e-29	<u>AI_V_at</u>	Atomic volume of matrix (= a0 ³ /4 for <u>fcc</u>), m ³
0.6	<u>AI_xi</u>	Interface energy modifier (0 < xi < 1)
1.	<u>AI_s_d</u>	Factor accounting for the width of the <u>constituent</u> size distribution
1.	<u>AI_s_c</u>	Factor accounting for the width of the <u>dispersoid</u> size distribution
200e3	<u>AI_Qa</u>	Eff. activation energy for solute <u>diffusion</u> (J/mol)
0.00393	<u>AI_CO_as</u>	Base level concentration (<u>Alsoft</u>), at. <u>fraction</u>

Figur C.1: Generelle inputparametere for Presipal

```

#-----
ELEMENT TABLE
Element CO (wt%) M(g/mol) D0_I (m-2/s) Qd_I (J/mol) D0_SGB (m-2/s) Qd_SGB (J/mol) Cs Qc (J/mol) Qd_PBE (at%) Qc_PBE (at%) W_ref
Ma 1.0 54.9380 1.04e-2 210.9e3 1.04e-2 126.5e3 77.16 71.5e3 18.75 14.286 0.34
Fe 0.57 55.847 0. 195.e3 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.33
Si 0.12 28.0855 0. 140.e3 0. 0. 0. 0. 6.25 0. 0.33
Al 0. 26.98154 0. 0. 0. 0. 0. 0. 75. 85.714 0.00
#-----

```

Figure C.2: Input av kjemisk sammensetning og parametere for LP3103 i Presipal