

Sachbericht zum Verwendungsnachweis

zum Teilvorhaben: Virtuelles Prozessieren und KMI-basierte Mikrostrukturanalyse

im Verbundprojekt: Intelligent-datengeführtes Prozessdesign für ermüdungsresistente Stahlbauteile am Beispiel bainitischer Mikrostruktur (iBain)

Zuwendungsempfänger: Ruhr Universität Bochum

Förderkennzeichen: 13XP5118A 4103590002

Laufzeit des Vorhabens: 1.5. 2021 – 31. 7. 2023

Berichtszeitraum: 1.5. 2021 – 31. 7. 2023

Teil I: Kurzbericht (max. 2 Seiten)

1. Ursprüngliche Aufgabenstellung sowie wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Bainitische Stähle stellen technologisch wichtige Werkstoffe dar, deren Ermüdungseigenschaften stark von der Mikrostruktur abhängen, die wiederum höchst sensitiv vom Herstellungsprozess abhängt. Dabei sind bainitische Mikrostrukturen hierarchisch mehrskalig und weisen Struktureigenschaften bis hinunter zur Nanoskala auf. Deshalb ist bereits die experimentelle Charakterisierung höchst komplex und stark von der subjektiven Erfahrung des Experimentators abhängig. Demzufolge stellen bainitische Stähle ein optimales Fallbeispiel dar, das sich sehr einfach auf einfachere Fälle übertragen lässt. Mittels KMI soll ein substanzieller Fortschritt in mehrerer Hinsicht erzielt werden:

- Einen systematischen Zugang zur Charakterisierung der Mikrostrukturen.
- Reduzierung des „menschlichen Faktors“.
- Aufdeckung unbekannter Zusammenhänge außerhalb des Kanons klassischer Metallurgie.
- Korrelation Prozess → Mikrostruktur → Materialeigenschaften / Lebensdauer.
- Schaffung der Voraussetzungen für intelligent-datengeführtes Prozessdesign.

Ein kurzfristiger Mehrwert für die Industrie besteht in dem automatisierten Workflow-Managementsystem, das auch ohne tieferes Expertenwissen auf eigene Material-Prozess Systeme anwendbar sein wird und damit bestehenden und zukünftigen Datensammlungen einen erheblichen Wert verschafft. Ein langfristiger Mehrwert in der signifikanten Verkürzung von Entwicklungszeiten neuer Prozesse und Materialien.

Motivation und Ziel des Teilvorhabens

Das Teilvorhaben des Projektpartners ICAMS, Ruhr Universität Bochum „Virtuelles Prozessieren und KMI-basierte Mikrostrukturanalyse“ gliedert sich in zwei Schwerpunkte. Zum einen die Herstellung virtueller bainitischer Mikrostrukturen mittels Phasen-Feld Simulationen, zum zweiten die Verbindung dieser Mikrostrukturen mit experimentellen Mikrostrukturen der Projektpartner, die Extraktion mikrostruktureller Eigenschaften, die Einbettung in eine geeignete Materialontologie sowie die Weitergabe der Informationen für die Lebensdaueranalyse. Als übergreifende Aufgabe gilt die Einbindung in die Initiative MaterialDigital and Ergebnisverwertung. Im ersten Teil (Virtuelles Prozessieren) wird gegenüber dem verbreiteten Stand der Technik mit sogenannten synthetischen Mikrostrukturen das mechanische Problem anzugehen, versucht den komplexen Prozess der Bainitbildung von der Nukleation über das Wachstum der Bainitlamellen aus dem Austenit gemeinsam mit Umverteilung und Diffusion von Kohlenstoff komplett abzubilden. Eigene Arbeiten zu martensitischer Umwandlung und angelassenem Martensit als „Bainitsurrogat“ [Sh2016, Bo2016] zeigen die Möglichkeit diese Effekte konsistent zu berücksichtigen.

Einzug der künstlichen Intelligenz zur Etablierung automatisierte Datenanalyse und computer-geschützte Optimierung

Die ersten Schritte bei der Anwendung datengesteuerter Methoden sind das Sammeln, Bereinigen und Aufbereiten von Rohdaten für die weitere Anwendung statistischer und maschineller Lernmethoden. In der Regel ist dieser Teil der Datenanalyse recht zeitaufwendig, und daher wird die Entwicklung automatisierter Werkzeuge für die Datenaufbereitung zu einem der wesentlichen Bestandteile einer effizienten Anwendung der KMI-Strategie. In [Zo2020] wurden drei statistische Methoden zur Änderungspunktanalyse für die automatisierte Auswahl repräsentativer Kriechexperimente angewandt, was ein großes Potential zur Beschleunigung des Datenaufbereitungsprozesses bietet. Eine alternative Strategie zur Datenbereinigung und -aufbereitung auf der Basis von Methoden des maschinellen Lernens, angewandt auf Produktionsdaten von warm- und kaltgewalzten Stahlcoils in der SMS group GmbH, wird in [Ah2020] für die Vorhersage und Optimierung mechanischer Eigenschaften wie Zugfestigkeit, Streckgrenze und Bruchdehnung bei der Durchlaufherstellung von Stahlcoils vorgestellt. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass experimentelle und simulative Daten, aufgrund von Messfehlern und angewandten Modellierungsannahmen, immer noch von der Realität abweichen, können Unsicherheitsquantifizierungen und Sensitivitätsanalysen vor der Anwendung datengetriebener Modellierungsansätze durchgeführt werden. Trotz einer wachsenden Zahl erfolgreicher Anwendungen von Methoden der Künstlichen Intelligenz auf werkstoffwissenschaftliche Teilprobleme fehlt es noch an den Rahmenbedingungen, die erfolgreiche Praxisbeispiele mit vorhandenen Werkstoffdaten so zu

kombinieren, dass sie von den Werkstoffwissenschaftlern als Werkzeug ohne Expertise in der Datenbankentwicklung, dem maschinellen Lernen und Data-Mining-Methoden eingesetzt werden können.

2. Ablauf des Vorhabens

Die Projektarbeit ist für zwei Jahre geplant Jahre mit 8 Meilensteinen als Ankerpunkte zwischen den Teilprojekten geplant

- M1 Fertigstellung angepasst Simulationssoftware (month 6)
- M2 Sammlung und Anpassung Modelldaten, Verifikation (month 9)
- M3 Erstellung Referenzdatensatz bainitischer Mikrostrukturen (month 15)
- M4 Integration in den Workflow (month 24)
- M5 Automatisches Bildanalyse mittels Image Mining (month 6)
- M6 Eigenschaftsanalyse für KMI basierte Weiterverarbeitung (month 12)
- M7 KMI Integration in den Workflow (month 12)
- M8 Multikriterielle Optimierung (month 24)

Während der Projektlaufzeit wurden fast alle Projektziele erreicht. Insbesondere die Meilensteine M1-M4 (virtuelle Mikrostrukturen), die die Phasenfeldmodellierung von bainitischen Mikrostrukturen betreffen, wurden erfolgreich erreicht. Die Meilensteine N5-M7 (KMI-Integration), die sich auf die Datenanalyse und die Workflow-Integration beziehen, wurden ebenfalls erfolgreich erreicht. Der Meilenstein M8 wurde durch die Entwicklung des Modells zur Vorhersage der Ermüdungslebensdauer ersetzt, da es während der Projektlaufzeit zu personellen Veränderungen kam: Die anleitende Wissenschaftlerin und Expertin für AMI und multikriterielle Optimierung hat das Institut nach dem ersten Projektjahr verlassen. Dies führte zu einer kostenneutralen Projektverlängerung um 5 Monate und zu einer Substitution der Gewichtung der Arbeiten in der letzten Projektphase, in der anstelle der multikriteriellen Optimierung ein Modell zur Vorhersage der Ermüdungslebensdauer vorgeschlagen wurde.

3. Wesentliche Ergebnisse sowie ggfs. Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen

Während der Projektlaufzeit wurden mehrere wichtige Ergebnisse erzielt: Für eine Reihe von Wärmebehandlungsszenarien für verschiedene Legierungen wurde eine Reihe von Simulationen der Bainit-Mikrostrukturbildung mit vollem Funktionsumfang durchgeführt. Dies wurde durch erhebliche Verbesserungen der Modellierungsfähigkeiten der im Rahmen des Projekts entwickelten OpenPhase-Software möglich. Der Unterauftragnehmer OpenPhase Solution GmbH hat in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern und der Workflow-Gruppe der PMD-Plattform eine wichtige Python-Erweiterung zur OpenPhase-Software hinzugefügt, die eine direkte Integration in den Projekt-Workflow auf der Grundlage des pyiron Workflow Managers ermöglicht. In Zusammenarbeit mit den Projektpartnern an der RWTH Aachen und beim Fraunhofer Institut IWM wurde ein Arbeitsablauf für die Mikrostrukturanalyse entwickelt. Simulierte Mikrostrukturen wurden an die Projektpartner geliefert, um die Extraktion von Merkmalen aus experimentellen Ergebnissen mit Hilfe der in den Simulationen erhaltenen Informationen zu erleichtern.

Teil II: Eingehende Darstellung

1. Darstellung der Verwendung der Zuwendung sowie der erzielten Ergebnisse

Das Teilprojekt ICAMS hat zwei Hauptziele. Das erste Ziel ist die numerische Simulation der Bainit-Mikrostruktur als Teil der makroskopischen Prozesssimulationskette unter Verwendung der atomistisch informierten Materialgesetze (WP2.1 - WP2.3 und WP2.5). Diesem Teil des Teilprojekts wurden im ersten Jahr zwei Meilensteine zugewiesen. Meilenstein M1 betrifft die Entwicklung eines maßgeschneiderten Softwaretools, das auf der OpenPhase-Phasenfeldsimulationsbibliothek basiert, und seine Integration in eine der vorgeschlagenen PMD-Workflow-Plattformen, pyiron. Diese Arbeit wird in Zusammenarbeit mit der OpenPhase Solutions GmbH im Rahmen des WP2.5 durchgeführt. Der Meilenstein M2 bezieht sich auf die Erfassung und Anpassung der Modellparameter und wird in WP2.1 und WP2.2 bearbeitet, wo eine gleichzeitige Anpassung des Simulationsalgorithmus und der Simulationsparameter durchgeführt wird.

Phasen-Feld Simulation Bainitischer Umwandlung

Gemäß dem Arbeitsplan (WP2.1 - 2.2) wurde im ersten Teil des Projekts eine numerische Suche nach den optimalen Simulationsparametern durchgeführt. Basierend auf den vorhandenen Materialparametern aus der Literatur und von Projektpartnern wurden die optimalen Werte für das mikromechanische Modell gefunden. Erste Simulationsergebnisse der Mikrostruktursimulationen unter Verwendung der ermittelten Parameter sind in Abb. 1 dargestellt. Hier wurde die Gefügebildung des vergüteten Martensits als vorläufiger Ersatz für den Bainit durchgeführt.

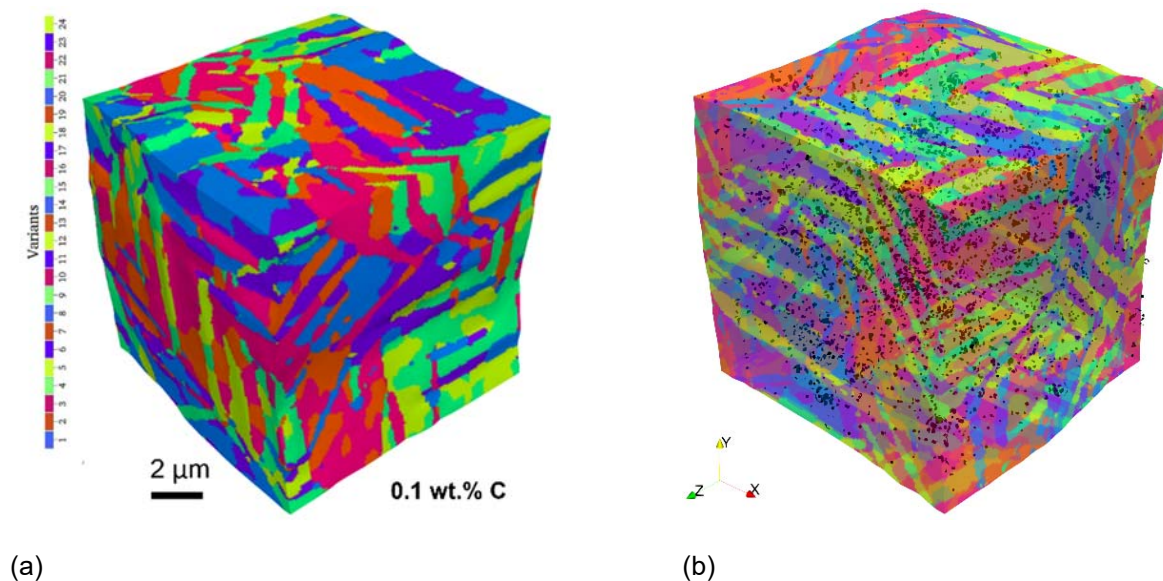


Abbildung 1. Martensitisches Gefüge nach dem Abschrecken (a) und angelassenes Martensitgefüge mit Zementitpartikeln (b) nach isothermem Halten.

Als nächster Schritt wurde eine realistische Simulation im polykristallinen System durchgeführt. Es wurde ein System mit fünf zufällig orientierten Austenitkörnern simuliert. Vorläufige Ergebnisse sind in Abb. 2 zu sehen, wo die früheren Austenitkorgrenzen deutlich markiert sind, was die Verknüpfung mit der Erkennung von früheren Austenitkörnern (PAG) aus den experimentellen Ergebnissen im Rahmen des automatischen Datenanalysealgorithmus erleichtern wird. Diese Ergebnisse erfüllen die Anforderungen des Meilensteins M2.

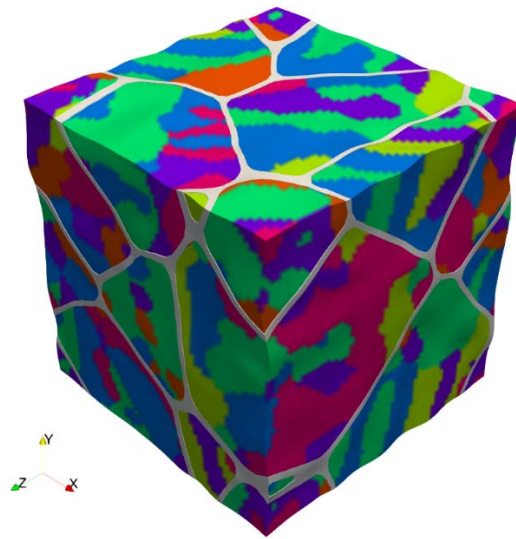


Abbildung 2. Martensit-Mikrostruktursimulation in einem polykristallinen System.

Die Ergebnisse von WP2.1 und WP2.2 bilden die Grundlage für WP2.3, in dem die simulierten Daten in ähnlicher Weise wie die experimentellen Techniken analysiert werden. Der erste Schritt in WP2.3 ist die Übertragung der simulierten Mikrostrukturen in Bildformate, die den experimentell gewonnenen Daten ähnlich sind, z.B. optische Mikrografien in Graustufen und EBSD-Mikrografien. Dies geschieht mit Hilfe der ParaView-Software mit angepassten Python-Skripten. Gleichzeitig wird eine direkte Nutzung der VTK-Bibliothek, die die Grundlage der ParaView-Software bildet, erforscht. Wenn sich die direkte Verwendung der VTK-Bibliothek als machbar erweist, kann sie die simulierte Datentransformation und ihre weitere Analyse im Rahmen des integrierten Arbeitsablaufs erheblich vereinfachen.

Als nächstes wird die Software an die Simulation der Bainitbildung angepasst (WP2.5). Als Ausgangsbedingung wurde ein zuvor entwickeltes Simulationswerkzeug für die Martensit-Mikrostrukturbildung, gefolgt von der Anlaßsimulation, verwendet. Als Ergebnis wurde eine maßgeschneiderte Software entwickelt und an unseren Projektpartner OpenPhase Solutions GmbH übergeben.

Die OpenPhase Solutions GmbH beschäftigt sich im Zuge des iBain-Projekts mit der Einbettung der Phasen-Feld-Simulations-Software OpenPhase in ein effizientes Workflow-Konzept. Dies soll das einfache Verknüpfen mehrerer Simulationsschritte, automatisierte Parameterstudien sowie Auswertung der Simulationsergebnisse und Hochladen in eine Datenbank ermöglichen.

Im Zuge dessen wurde sich entschieden OpenPhase in das pyiron-Framework einzubinden, da es eine hohe Flexibilität bietet und andere Simulationswerkzeuge wie DAMASK, die im Workflow mit OpenPhase genutzt werden sollen, ebenfalls in pyiron integriert werden.

OpenPhase wurde erweitert mit der Unterstützung des hierarchischen HDF5 Dateiformats, das auch von pyiron genutzt wird. Es erlaubt die Kombination von Simulationseinstellungen, Ergebnissen, Metadaten, Visualisierungsdaten sowie Simulationszuständen für Neustarts und weitere Simulationen in eine Datei.

Laut Arbeitsplan sollen im zweiten Projektjahr die Simulationen der bainitischen Gefüge durchgeführt und die erhaltenen Gefüge im Rahmen des WP2.3 analysiert werden. Basierend auf den im ersten Projektjahr durchgeführten Simulationen von angelassenen Martensitgefügen wurden realistische Bainitgefüge erhalten, die den korrekten Trend in der Menge des Restaustenits und der Kohlenstoffaufteilung zeigen. Abbildung 3 zeigt die Ergebnisse der Phasenfeldsimulationen für zwei verschiedene Haltetemperaturen für die Legierung mit 0.2 wt.-% Kohlenstoff. Sie zeigt die Bainit- und Restaustenitverteilung sowie den Effekt der Kohlenstoffverteilung für zwei verschiedene Haltetemperaturen, die sich an den Experimenten der Projektpartner orientieren. Die erzielten Ergebnisse zeigen das richtige qualitative Verhalten mit einer stärkeren Kohlenstoffverteilung und einem höheren Restaustenitanteil bei höherer Haltetemperatur.

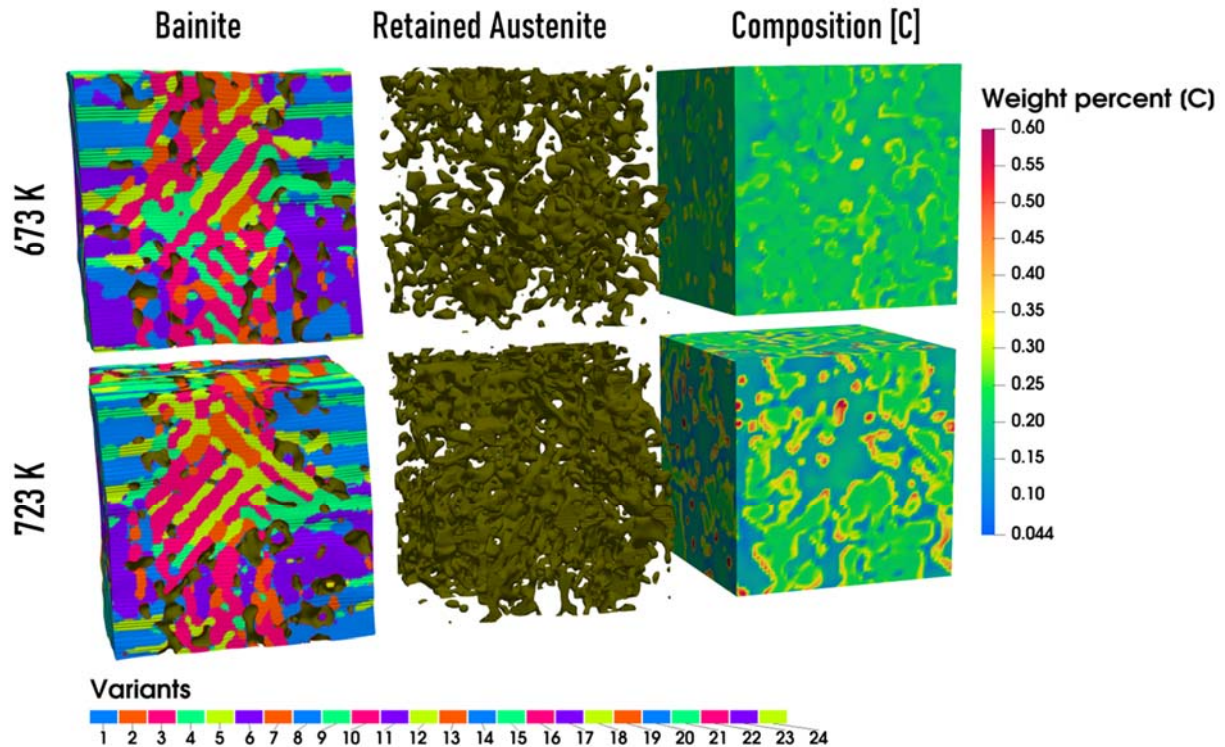


Abbildung 3. Phasenfeldsimulation des Bainit-Mikrogefüges und des Zusammensetzungsprofils bei 673 K und 723 K Haltetemperatur

Abbildung 4 zeigt die Entwicklung des Bainit-Volumenanteils und der Abkühlungskurve für zwei Haltetemperaturen. Wie oben beschrieben, zeigen beide Abbildungen das richtige qualitative Verhalten, das in den Experimenten der Projektpartner beobachtet wurde. Diese Ergebnisse erfüllen die Anforderungen des Meilensteins M3.

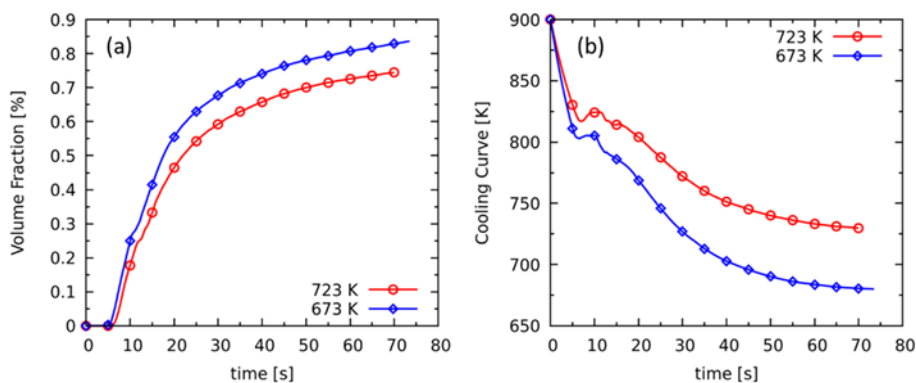


Abbildung 4. Entwicklung des Volumenanteils (a) und Abkühlungskurve (b) bei der Phasenfeldsimulation von Bainit.

Die Ergebnisse von WP2.1 und WP2.2 bilden die Grundlage für WP2.3, in dem die simulierten Daten in ähnlicher Weise wie die experimentellen Techniken analysiert werden. Der erste Schritt in WP2.3 ist die Übertragung der simulierten Mikrostrukturen in Bildformate, die den experimentell gewonnenen Daten ähnlich sind, z.B. optische Mikrografien in Graustufen und EBSD-Mikrografien. Dies geschieht mit Hilfe der ParaView-Software mit angepassten Python-Skripten. Gleichzeitig wird eine direkte Nutzung der VTK-Bibliothek, die die Grundlage der ParaView-Software bildet, erforscht. Wenn sich die direkte Verwendung der VTK-Bibliothek als machbar erweist, kann sie die simulierte Datentransformation und

ihre weitere Analyse im Rahmen des integrierten Arbeitsablaufs erheblich vereinfachen.

Als nächstes wird die Software an die Simulation der Bainitbildung angepasst (WP2.5). Als Ausgangsbedingung wurde ein zuvor entwickeltes Simulationswerkzeug für die Martensit-Mikrostrukturbildung, gefolgt von der Anlaßsimulation, verwendet. Als Ergebnis wurde eine maßgeschneiderte Software entwickelt und an unseren Projektpartner OpenPhase Solutions GmbH übergeben.

Automatisierter Workflow

OpenPhase kann nun sowohl durch ein OpenPhase Inputfile als auch durch eine HDF5-Datei mit entsprechenden Simulationseinstellungen gestartet werden. Im Laufe der Simulation werden eine HDF5-Datei und eine XDMF-Datei erstellt. Dabei ist die XDMF-Datei notwendig, um dem Visualisierungsprogramm ParaView die Datenstruktur in der HDF5-Datei zu erklären.

Die Integration von OpenPhase in pyiron wurde sich zunächst auf die Simulation von Martensit beschränkt. Dazu wurden mittels Subklassen für das pyiron-Modul von OpenPhase implementiert, die die verschiedenen Aspekte einer beispielhaften Simulation steuern. Zu diesen Subklassen gehören:

- RunTimeControl (u.a. Zeitschrittweite, Abbruchkriterien sowie Häufigkeit der Datenausgabe)
- Grid (u.a. Größe der Simulationsgebiets, Gitterweite, Randbedingungen)
- Temperature (u.a. Starttemperatur, Abkühlrate, Latente Wärme)
- ChemicalProperties (u.a. Startkonzentration, Konzentrationslimits)
- ElasticProperties (u.a. Elastizitätsmodell, Elastizitätstensor)

Im weiteren Verlauf des Projekts wird die Anzahl der Klassen und ihrer Funktionen noch erweitert werden, um weitreichende Möglichkeiten für verschiedene Simulation, wie etwa Erstarrung, Wärmebehandlung oder Schädigung, zu schaffen. Dabei wird das pyiron-Modul von OpenPhase an Entwicklungen vom Projektpartner ICAMS angepasst.

Für das pyiron-Modul von OpenPhase wurde ein conda-Paket erstellt, welches das Martensitbeispiel enthält, automatisch Abhängigkeiten auflöst und ohne weitere Installation von OpenPhase lauffähig ist. Das pyiron-Modul von OpenPhase soll im weiteren Verlauf des Projektes um Auswertungsroutinen sowie der Möglichkeit des Exports von bereinigten HDF5-Daten, die nur Ergebnisse, Simulationsparameter und Metadaten enthalten, ohne die Zwischenergebnisse, Programmzustände und Visualisierungsdaten zu speichern. Dies ist notwendig, da die Dateien sonst mehrere Gigabyte groß werden können, was sowohl zu Speicherproblemen als zu Bandbreitenproblemen führen würde. Die Entwicklungen im WP2.5 erfüllen die Anforderungen des Meilensteins M1.

Die OpenPhase Solutions GmbH beschäftigt sich im Zuge des iBain-Projekts mit der Einbettung der Phasen-Feld-Simulations-Software OpenPhase in ein effizientes Workflow-Konzept. Um eine erhöhte Flexibilität zu ermöglichen wurde OpenPhase um Python-Bindings erweitert. Dies erlaubt die direkte Nutzung von OpenPhase Klassen und Funktionen in python beziehungsweise pyiron und ermöglicht es erfahrenen Nutzern Simulationen an ihre Bedürfnisse anzupassen. Derzeit beschränkt sich die Funktionalität auf Klassen und Funktionen aus dem Bereich der Martensit- und Bainit-Simulationen, soll aber in Zukunft auf die gesamte OpenPhase Bibliothek erweitert werden. Die Python-Bindings wurden mittels pybind11 (<https://github.com/pybind/pybind11>) implementiert, welches ein Bibliothek erstellt, die direkt in python importiert und genutzt werden kann. Die erhöhte Flexibilität erlaubt komplexere Simulationsanweisungen als die ursprüngliche Black-box-Implementation in pyiron. Außerdem wird die Einbindung von Analyse-Methoden, wie zum Beispiel die Mikrostrukture-Analyse, die in WP2.3 entwickelt wurde, in eine laufende Simulation ermöglicht. Die ursprünglichen Black-Box-Implementierungen werden durch zusammenfassende Funktionen ersetzt, welche die Python-Bindings nutzen, aber die gleiche Funktionalität besitzen.

KI basierte Mikrostrukturanalyse

Das zweite Ziel des ICAMS-Teilprojekts ist die Entwicklung und Anwendung von AMI-Methoden zur Kombination von experimentellen Daten mit entsprechenden Simulationen, unterstützt durch datengesteuerte Modelle (WP4.1 und WP4.2). Der Meilenstein M5 befasst sich mit der automatischen Bildanalyse unter Verwendung von Image-Mining-Techniken zur Erkennung und Analyse von Mikrostrukturen sowohl aus Experimenten als auch aus Simulationen im Rahmen des WP4.1. Diese Arbeit wird in Zusammenarbeit mit dem IEHK Aachen durchgeführt. Meilenstein M6 befasst sich mit der Eigenschaftsanalyse für die AMI-basierte Weiterverarbeitung und wird in WP4.2 und WP4.3 bearbeitet, wo die mikrostrukturelle Merkmalsextraktion durchgeführt wird.

Gemäß WP4.1 soll ein Image Mining zur automatischen Erkennung und Analyse von experimentellen und simulierten Bainitgefügen durchgeführt werden. Da die Bainitgefüge aus den Phasenfeldsimulationen in Arbeit sind, wird in einem ersten Schritt das Martensitmodell mit 24 Varianten für die Gefügeanalyse herangezogen. Das Phasenfeldsimulationsmodell verfügt über die Kenntnis der Phaseninformationen, was einen zusätzlichen Vorteil gegenüber den experimentellen Schlibfbildern darstellt, bei denen die Phaseninformationen von den experimentellen Experten identifiziert und segmentiert werden müssen. Dank dieses zusätzlichen Vorteils kann die automatische Erkennung der verschiedenen Phasen im Simulationsmodell übersprungen werden.

Da die Gefügeanalyse für die Experimente auf 2D-Schlibfbildern durchgeführt wurde, wird ein ähnlicher Ansatz für die Simulationsergebnisse verwendet. Daher wird ein Vorgang namens Slicing (Aufnahme eines 2D-Bildes aus dem 3D-Phasenfeldmodell) durchgeführt, wie in Abbildung 5 dargestellt. Der automatische Slicing-Vorgang wird mit der Software Paraview und einem Python-Skript durchgeführt. Für die Mikrostrukturanalyse wird eine der Martensitvarianten als Pseudomikrostruktur betrachtet, indem die anderen Martensitvarianten ausgeblendet werden, wie in Abbildung 3b dargestellt. Die Analyse wurde an diesem Pseudomikrogefüge durchgeführt.

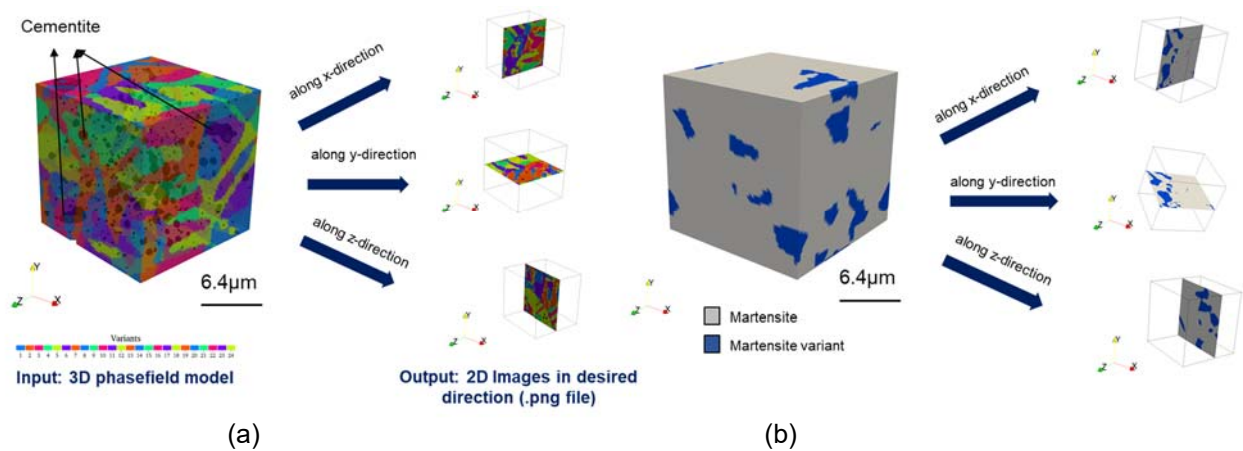


Abbildung 5: Schnitt entlang der x-, y- und z-Richtung (a) Martensit mit 24 Varianten (b) eine der Martensitvarianten durch Ausblenden der anderen Varianten

Die mikrostrukturelle Analyse umfasst die Untersuchung der Morphologie und der räumlichen Korrelationen. Da die Morphologie der Mikrostruktur die mechanischen Eigenschaften des Materials beeinflusst, wurden einige der wichtigsten morphologischen Merkmale aus dem 2D-Bild extrahiert. Ein Beispiel der extrahierten Merkmale für ein bestimmtes Mikrogefüge ist in Abbildung 6 dargestellt. Dieselben Techniken werden auch für die Berechnung jedes einzelnen Objekts im Bild verwendet. Diese morphologischen Merkmale wurden mit der OpenCV-Bibliothek von Python berechnet.

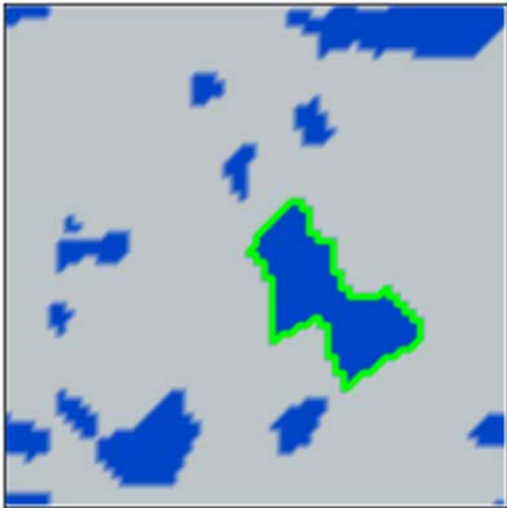


Image cropped to 668 x 668 pixels

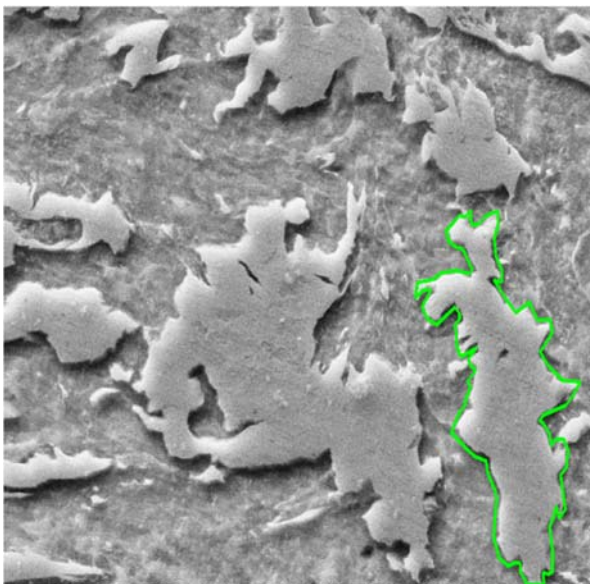
(a)

Morphological features	Simulation microstructure
Area (pixels)	23326.5
Perimeter (pixels)	934.74
MajorAxislength (pixels)	267.5
MinorAxislength (pixels)	143.05
Direction (degrees)	136.43
Compactness	0.335
Shape factor	1.726
Equivalent diameter	172.337
Eccentricity	0.35
Solidity	0.72
Roundness	0.587

(b)

Abbildung 6: (a) Einzelne Instanz des Mikrogefüges aus dem 2D-Simulationsbild (b) Tabelle der extrahierten morphologischen Merkmale

Der gesamte Arbeitsablauf/die gesamte Methodik wurde so entwickelt, dass er/sie auf Bainitgefüge ausgedehnt werden kann, die in der nächsten Phase des Projekts simuliert werden sollen. Gleichzeitig wurde dieselbe Methodik auf die experimentellen Gefügebilder angewandt und die morphologischen Parameter wurden extrahiert (siehe Abb. 7).



Experimentelle Aufnahme der "MA islands"

(a)

Morphological features	Experimental Image
Area (pixels)	60048.5
Perimeter (pixels)	1785.9
MajorAxislength (pixels)	477.14
MinorAxislength (pixels)	192.84
Direction (degrees)	106.04
Compactness	0.236
Shape factor	2.055
Equivalent diameter	276.5
Eccentricity	0.452
Solidity	0.695
Roundness	0.512

(b)

Abbildung 7: (a) Einzelner Fall einer Martensit-Austenit-Insel (MA) aus einem experimentellen Schlifffbild (b) Tabelle der extrahierten morphologischen Merkmale

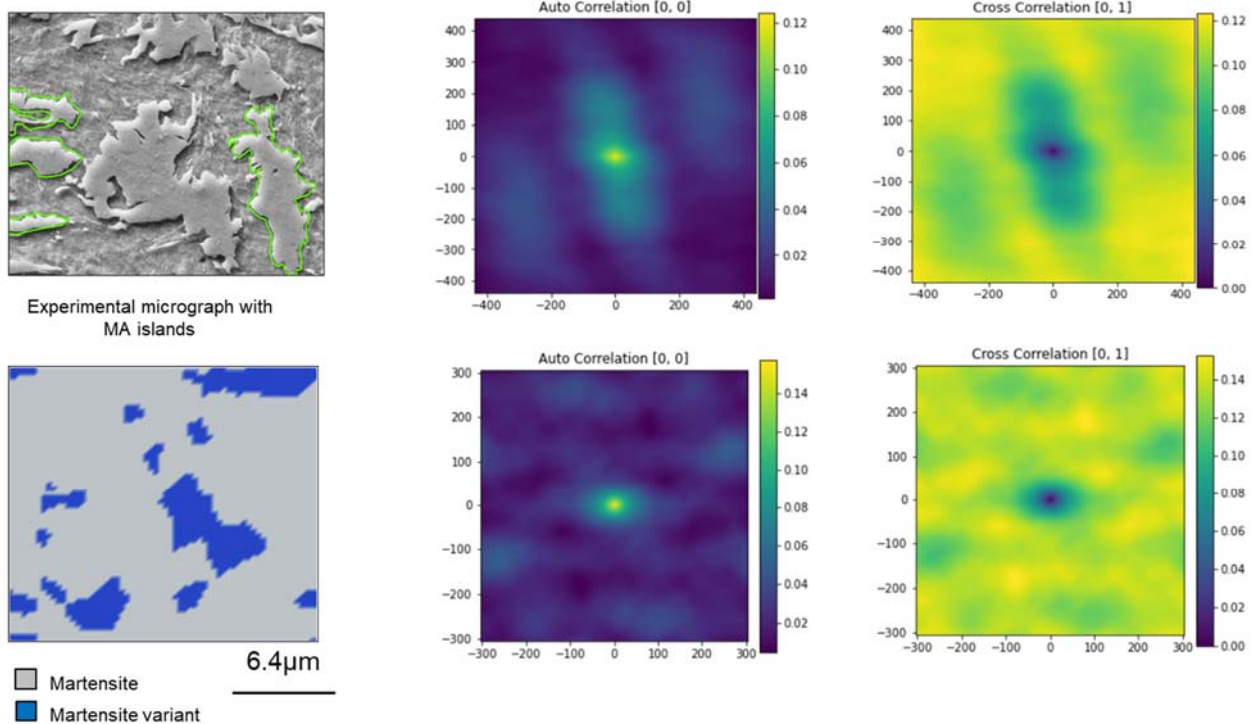


Abbildung 8: Räumliche Korrelation, die die Autokorrelation und die Kreuzkorrelation für experimentelle und Simulationsbilder zeigt

In den meisten Fällen wurde die Gefügeanalyse anhand von morphologischen Merkmalen durchgeführt, ohne dass Informationen über die räumliche Verteilung vorlagen. Um dies zu ergänzen, wurden 2-Punkt-Statistiken berechnet, um die räumliche Verteilung der Mikrostruktur zu untersuchen. Die 2-Punkt-Statistiken wurden mit der Python-Bibliothek PyMks berechnet. Die in Abb. 8 gezeigten Auto- und Kreuzkorrelationskarten geben die Wahrscheinlichkeit an, dieselbe Mikrostruktur und andere Mikrostrukturen im Bild/Mikrofoto zu finden. Die weitere Anwendung der PCA (Principal Component Analysis) ergibt die Darstellung reduzierter Ordnung, die als Merkmal verwendet werden kann. Diese Ergebnisse erfüllen somit die Anforderungen des Meilensteins M5 und bilden die Grundlage für den Meilenstein M6.

Morphologische 3D-Analyse

Ein umfassendes Verständnis zahlreicher Werkstoffphänomene erfordert die Beschreibung dreidimensionaler (3D) Mikrostrukturen und ihrer signifikanten Merkmale. Die meisten experimentellen Beobachtungen sind auf zwei Dimensionen (2D) beschränkt. Der Zugang zu mikrostrukturellen 3D-Informationen durch Methoden wie Serienschritte ist teuer und zeitaufwändig. Häufig angewandte phänomenologische Modelle, wie die Phasenfeldmethode (PF), haben sich als realistischer erwiesen als die experimentellen Beobachtungen. Sie liefern direkt Informationen über die 3D-Mikrostrukturen und ihre hervorstechenden Merkmale.

3D-Merkmale jedes Kornes wie Schwerpunkt, Volumen des Kornes, maximale Länge und minimale Länge des Kornes werden mit Hilfe von Python-Routinen extrahiert. Das Volumen des Kornes wird berechnet, indem die Anzahl der Voxel gezählt wird, die denselben Phasenfeldindex haben, der für jedes Korn eine eindeutige Nummer ist. Radius und Schwerpunkt des Kornes werden durch Einpassen der Kornvoxel in ein Ellipsoid berechnet. Vor der ellipsoidischen Anpassung wird eine Analyse zur Berechnung der Mindestanzahl von Voxeln durchgeführt, die für eine ellipsoidische Anpassung erforderlich sind. Um dies zu bewerten, wird der Mittelwert der maximalen Länge der Körner (Hauptachse) als Untersuchungsparameter herangezogen. In einem ersten Schritt werden Körner mit einer minimalen Volumengröße von 14 Voxeln betrachtet und in ein Ellipsoid eingepasst. Dann wird die maximale Länge des Kornes (aus dem angepassten Ellipsoid) extrahiert. Der gleiche Prozess wird für die Körner mit einer Mindestvolumengröße von 15 bis 30 Voxeln wiederholt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 9 dargestellt.

Nach 26 Voxeln ist keine signifikante Veränderung der Kurve mehr festzustellen. Die gleiche Analyse wird für verschiedene Körnervarianten durchgeführt, wie in Abbildung 4 dargestellt.

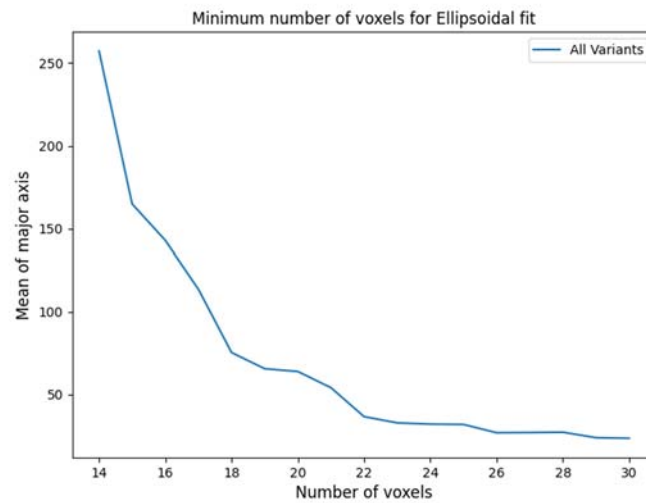


Abbildung 9: Mindestanzahl von Voxeln, die für eine ellipsoidische Anpassung unter Berücksichtigung aller Körnervarianten erforderlich ist.

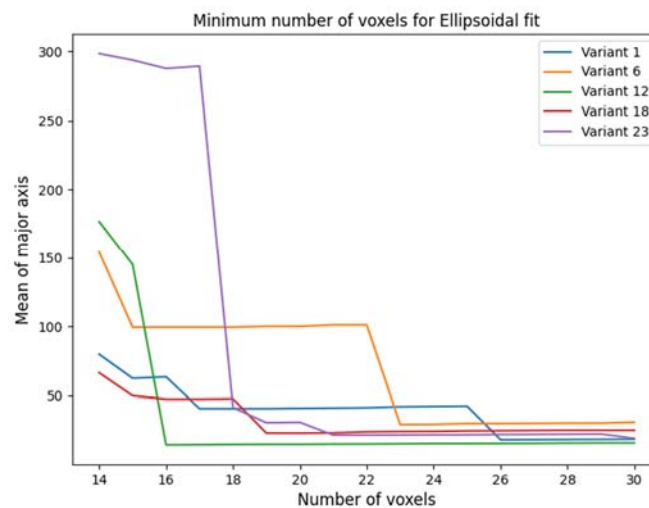
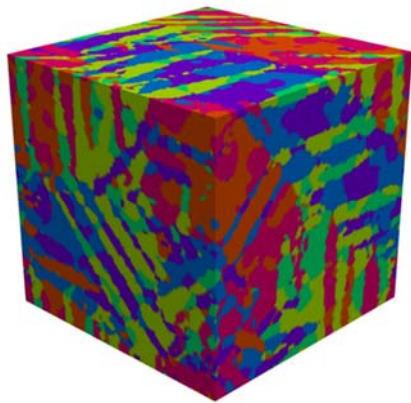


Abbildung 10: Mindestanzahl von Voxeln, die für eine ellipsoide Anpassung unter Berücksichtigung von 1, 6, 12, 18 und 23 Körnervarianten erforderlich ist.

Aus Abbildung 10 ist ersichtlich, dass sich die Kurvenform nach 26 Voxeln bei allen Varianten nicht mehr ändert. Aus diesem Ergebnis geht hervor, dass die Körner mit einer Mindestvolumengröße von 26 Voxeln für eine ellipsenförmige Anpassung in Betracht gezogen werden. Nach der Anpassung an das Ellipsoid werden für jedes Korn morphologische 3D-Merkmale extrahiert, wie in Abbildung 11 dargestellt.

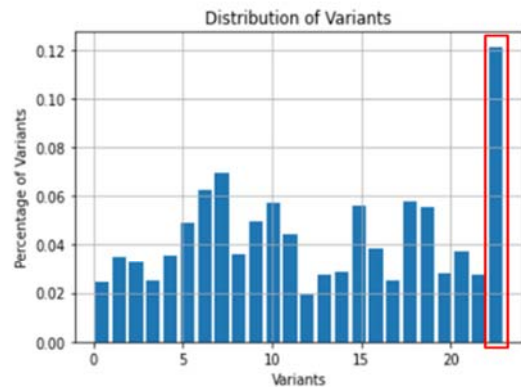
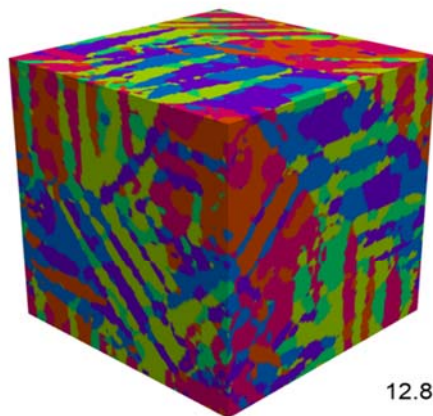


phase_field	cent_x	cent_y	cent_z	max_rad	min_rad	volume	Variants
3.0	81.234411	86.489777	24.605102	7.235297	1.717089	219.0	1
12.0	42.628661	11.472163	46.923284	96.402533	3.592407	1225.0	4
14.0	27.038932	33.702263	78.854053	5.346982	1.859305	568.0	5
15.0	28.315259	48.787830	72.882555	42.126338	4.133657	3490.0	11
20.0	66.723110	32.937067	77.551234	13.738867	3.217755	1585.0	7
...
95596.0	35.449857	70.296445	58.073742	3.617885	1.966101	151.0	2
95681.0	18.081363	67.406249	20.380270	100.587132	2.290964	479.0	16
95731.0	30.274478	-0.419067	8.364504	6.552537	1.283431	38.0	23
95768.0	64.408217	64.641435	48.649092	69.961748	11.318261	3083.0	14
95833.0	119.536742	30.344694	84.129476	3.837597	1.246422	42.0	11

Abbildung 11: Extrahierte morphologische 3D-Merkmale für die einzelnen Körner.

Räumliche 3D-Korrelation

Da die Mikrostrukturanalyse anhand morphologischer Merkmale durchgeführt wurde, fehlen Informationen über räumliche Korrelationen/Verteilung der Körner. Zur Untersuchung der räumlichen Verteilung der Mikrostruktur wurde die 2-Punkt-Statistik verwendet. Die 2-Punkt-Statistiken wurden mit der Python-Bibliothek PyMks berechnet. In dem Modell sind 24 Varianten von gehärtetem Martensit vorhanden. Die Analyse der Variantenverteilung wurde wie in Abbildung 6 dargestellt durchgeführt.



Martensite variants

Abbildung 12: Verteilung der Martensitvarianten.

Aus Abbildung 12 ist ersichtlich, dass die Variante 23 (im roten Kasten dargestellt) gegenüber den anderen Varianten dominiert. Da die Variante 23 den höchsten Volumenanteil aufweist, wurde sie ausgewählt, um die räumliche Korrelationsbeziehung der Körner zu untersuchen, die zur Variante 23 gehören. Die Autokorrelationskarte gibt die Wahrscheinlichkeit an, die gleiche Mikrostruktur in einem bestimmten Abstand zu finden.

Die 3D-Autokorrelationen für Variante 23 wurden berechnet. Um diese Autokorrelationen zu analysieren, wird die Ebene in der Mitte betrachtet, da sie Informationen über den Volumenanteil enthält. Die Mittelebene ist auch deshalb wichtig, weil alle Korrelationsvektoren von der Mitte ausgehen. Die Autokorrelationskarte der YZ-Ebene in der Mitte ist in Abbildung 13 dargestellt. Die Wahrscheinlichkeitswerte in der Autokorrelationskarte werden in horizontaler Richtung aufsummiert und in Abbildung 13b dargestellt. Es ist zu erkennen, dass zwischen den Körnern regelmäßige Abstände bestehen. Bei der Analyse des Abstands zwischen den Spitzenpunkten (dargestellt durch die Markierung "x" in Abbildung 13b) wird festgestellt, dass der durchschnittliche Abstand zwischen den Körnern in der YZ-Ebene 1.89 µm beträgt.

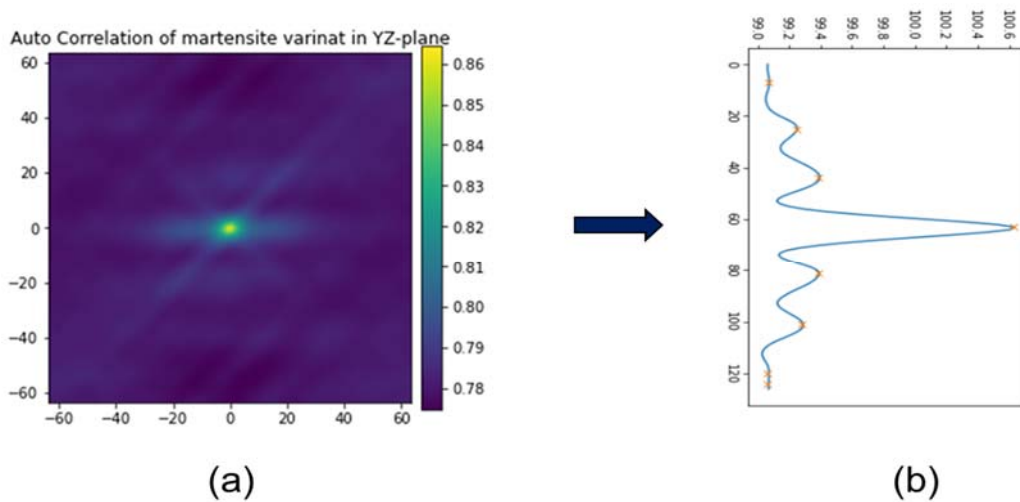


Abbildung 13: Autokorrelationskarte der Variante 23 in YZ-Richtung.

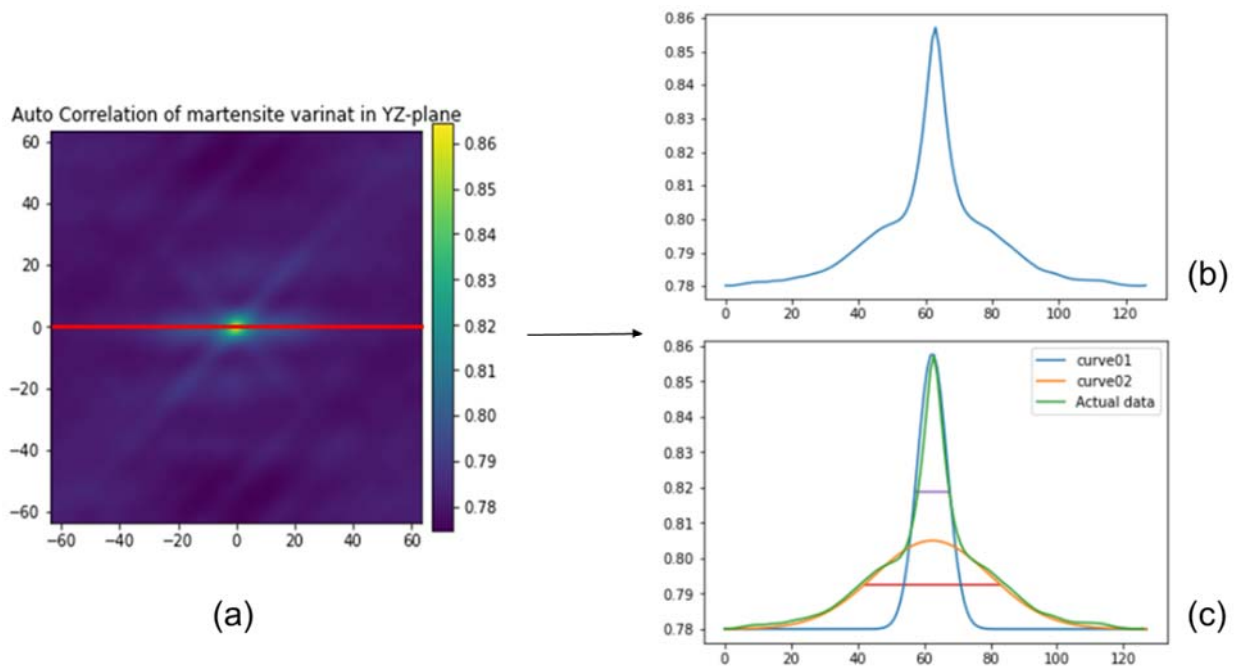


Abbildung 14: Autokorrelationskarte der Variante 23 in YZ-Richtung

Die Intensität in der Mitte des Plots wird wie in Abbildung 14b dargestellt aufgetragen. An diese Kurve werden zwei Gauß-Kurven angepasst, wie in Abbildung 14c dargestellt. Die durchschnittliche Korngröße in YZ-Richtung wird anhand der vollen Breite bei halbem Maximum (FWHM) berechnet. Durch die Berechnung des Durchschnitts der beiden FWHM's wurde eine durchschnittliche Korngröße von $0.257 \mu\text{m}$ ermittelt. Anhand dieser Auswertungen können die 3D-Informationen wie die Abstände zwischen den Körnern berechnet und als zusätzliches Merkmal für das kommende maschinelle Lernmodell verwendet werden. Diese Ergebnisse erfüllen die Anforderungen von Meilenstein M6 und bilden die Grundlage für Meilenstein M7.

Konstituierendes Ermüdungsmodell.

Wie jegliche plastische Verformungseigenschaften eines Materials hängt seine Ermüdung von der vorhandenen Mikrostruktur und ihrer Weiterentwicklung ab. Um diese Abhängigkeit einerseits zu verstehen und andererseits für Anwendungen abzubilden, wird gegenwärtig ein konstitutives Modell entwickelt, welches die wesentlichen Mikrostrukturparameter (z.B. Längenskalen der Phasenverteilung) mit der plastischen Reaktion von Versetzungen auf eine zeitlich variable Belastung verknüpft. Dies entspricht zunächst einer verallgemeinerten Kocks-Mecking-Modellierung von Fließkurven auf Basis einer oder mehrerer Klassen von Versetzungsdichten. Kürzlich wurde eine solche Modellierung am ICAMS auch erfolgreich auf versetzungsbasiertes Kriechen in Ni- basierten Superlegierungen übertragen, wobei die absoluten Längenskalen der γ/γ' - Mikrostruktur einen entscheidenden Einfluss auf die Kriechgeschwindigkeit besitzen. Zur Modellierung des Ermüdungsverhaltens wurden nun alle Voraussetzungen geschaffen, und die Modellierung ist in Arbeit.

Alle technischen Voraussetzungen zur Anwendung eines konstitutiven Modells unter diversen Randbedingungen (versch. Experimente) wurden geschaffen:

- zeitkontrollierte Vorgabe der externen Spannung
- zeitkontrollierte Dehnung
- Erweiterung auf zyklische Spannungen oder Dehnungen: sinus, Sägezahn flexibel mit Pausen; variable Amplitude und Mittelwert
- Einlesen und Vergleich mit experimentellen Dateien
- Fitten der Plastizitätsmodell-Parameter über gemessene Fließ- oder Kriechkurven

Erste Ansätze zur Schädigungsakkumulation wurden getestet:

- Erweiterung um neue, zusätzliche neue Zustandsvariablen (zusätzlich zu den Versetzungsdichten): prismatische Versetzungen, Dichte der Mikrorisse, deren momentane Größe
- Ansatzfunktionen für Rissinitiierung und Wachstum, die grundsätzlich für alle Materialien sinnvolle Schädigungsvorhersagen treffen können, sofern der modellierte Mechanismus der kritische ist.
- Rissinitiierung und Wachstum berücksichtigen Längen- und Energie-Parameter der Mikrostruktur / Phasengrenzen
- Grundsätzlich funktioniert dieser Ansatz bereits zur Berechnung von Wöhlerkurven, wie im DGM-Arbeitskreis Fatigue am 18.11.2022 demonstriert wurde.

Die physikalische Modellierung wird gegenwärtig an die Erfordernisse in Bainitischen Stählen angepasst und getestet.

- Die hohe Lokalität plastischer Verformung vor Rissinitiierung soll berücksichtigt werden. Hierzu müssen Verteilungen von lokalen Spannungen und Längenskalen angenommen werden, aus denen sich Wahrscheinlichkeiten zur Rissinitiierung ableiten lassen.
- Gegenwärtig steht die Rissinitiierung an Zementit im Vordergrund.

2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Der größte Kostenposten sind Personalausgaben (Position: 0812 250398,11 €) da das Projekt rein theoretisch/numerisch angelegt ist und Rechnerkosten vom durchführenden Institut getragen werden. Ein Unterauftrag (Position: 0835 46410,- €) an die OpenPhase Solutions GmbH, einem Spin-Off des Institutes, betrifft die softwaretechnische Integration in den workflowmanager pyiron, da nur dort die notwendige Expertise vorhanden ist. Position: 0846 12295,26 € betrifft Reisekosten.

3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Alle durchgeführten Arbeiten waren zur Erreichung des Vorhabenszieles, eines automatisierten workflows um mittels Phasen-Feld Simulationen Vorhersagen über die mechanischen Eigenschaften bainitischer Stähle zu erzielen, notwendig und angemessen. Dabei war ein zentrales Anliegen, mittels digitaler Methoden und dem Einsatz künstlicher Intelligenz im Vergleich mit dem Experiment (der Partner) das Modell zu kalibrieren und verifizieren. Noch ausstehend ist das letztendliche Ziel, eine verlässliche Aussage über die Ermüdungslebensdauer zu treffen.

4. Voraussichtlicher Nutzen und Fortschreibung des Verwertungsplans

Der etablierte workflow und die erweiterte Phasen-Feld Software stehen direkt zum Einsatz in der industriellen und akademischen Forschung zur Verfügung.

5. Darstellung des während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordenen Fortschritts auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Es sind keine gleichartigen Forschungen oder Veröffentlichungen zum Thema der Simulation und Bewertung bainitischer Stähle in Abhängigkeit der Prozessführung bekannt.

6. Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen des Ergebnisses nach Nr. 5 der NABF/NKBF

Published:

Efficient reconstruction of prior austenite grains in steel from etched light optical micrographs using deep

learning and annotations from correlative microscopy

B. Bachmann, M. Müller, D. Britz, A. Durmaz, M. Ackermann, O. Shchyglo, T. Staudt, F. Mücklich.

Frontiers in Materials, Frontiers Media SA, 9, 1033505, (2022),

<https://doi.org/10.3389/fmats.2022.1033505>

Comparative Study on Carbide-Bearing and Carbide-Free Bainite: Influence of Isothermal Phase Transformation Temperature on Microstructure and Performance

O. Gülbay, M. Ackermann, A. Gramlich, A.R. Durmaz, I. Steinbach, U. Krupp

Steel research international, 2300238 <https://doi.org/10.1002/srin.202300238>

Submitted:

Phase-Field Simulation Framework for Modeling Martensite and Bainite Formation in Steel.

Hesham Salama, Muhammad Adil Ali, Oleg Shchyglo, Ingo Steinbach
Computational Materials Science

Efficient finite strain elasticity solver for phase-field simulations

O. Shchyglo, H. Salama, M.A. Ali
npj Computational Materials

Materials and processes as understood by phase-field simulations: Solidification, solid state transformation, and high-temperature creep

Ingo Steinbach, Murali Uddagiri, Hesham Salama, Muhammad Adil Ali, Oleg Shchyglo
MRS bulletin

Planned:

Data-driven approach for estimating three-dimensional microstructural features of bainitic steels using phase-field simulation and experimental results.

Dhanunjaya K Nerella, Adil Ali Muhammad, Ali Riza Durmaz, Marc Ackermann, Oleg Shchyglo, Ingo Steinbach

Effect of carbon content and processing parameters on bainite formation kinetics. A phase-field study.

Muhammad Adil Ali, Oleg Shchyglo, Ingo Steinbach

Konferenzbeiträge:

iBain: Intelligent-data-guided process design for fatigue-resistant steel components with bainitic microstructure

Ingo Steinbach, Oleg Shchyglo, Irina Roslyakova, Muhammad Adil Ali, Dhanunjaya Kumar Nerella, Chris Eberl, Ali Riza Durmaz; Ulrich Krupp, Marc Ackermann.

- *MRM 2021 16.-13. December, Yokohama, Japan*
- *PTM 2022 27. June - 1. July, Xi'an, China*
- *Symposium Materialtechnik 23.-24. Februar 2023 TU Clausthal, Germany*
- *TMS annual meeting 2023, March 19–23, San Diego, USA*
- *ICAMS Advanced Discussion 2022 Oct 26, Bochum, Germany*

Recent developments in phase-field modeling at ICAMS,

O.Shchyglo, H. Salama, M.Uddagiri, M.A. Ali, I.Steinbach, ICAMS, Ruhr University Bochum, Germany

- *MRD Industry Day 2023 May 15, Bochum, Germany*

Phase-field modeling of martensite and bainite formation in steel

H. Salama, M.A. Ali, O. Shchyglo, I. Steinbach; ICAMS, Ruhr University Bochum, Germany

- *FEMS Euromat 2023, Frankfurt am Main, Germany*

Teil III: Erfolgskontrollbericht

1. Wissenschaftlich-technisches Ergebnis des Vorhabens, erreichte Nebenergebnisse und gesammelte wesentliche Erfahrungen

Die wichtigsten Ergebnisse des Vorhabens sind hier tabellarisch aufgelistet:

- Erweiterung der Software OpenPhase zur Simulation gemischt massiver und diffusiver Phasentransformationen verifiziert am Beispiel bainitischer Stähle.
- Erstellung eines automatischen Workflows zur Vorhersage materialspezifischer Charakteristika bainitischer Stähle in Abhängigkeit des Prozesses.
- Erarbeitung von Werkzeugen künstlicher Intelligenz zur Merkmalextraktion (feature extraction) bainitischer Mikrostrukturen aus Phasen-Feld Simulationen.
- Verifikation am Experiment.

2. Fortschreibung des Verwertungsplans

- Erfindungen/Schutzrechtsanmeldungen und erteilte Schutzrechte
Die Anmeldung von Schutzrechten ist nicht geplant.
- Wirtschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende (mit Zeithorizont)
Die erarbeiteten Methoden stehen direkt zum industriellen Einsatz bereit und werden über die OpenPhase Solutions GmbH vermarktet. Für den direkten kommerziellen Einsatz müssen jedoch noch erhebliche Anstrengungen hinsichtlich der Bedienbarkeit des Workflows, der Rechenzeiten, der Kalibrierung von Modellparametern, der Verifikation sowie der letztendlich noch nicht erfolgten Etablierung eines Schadenskriteriums erfolgen. Auch muss es noch Fortschritte bei der Akzeptanz des hier unternommenen Angangs in Industrie und Forschung geben, z.B. durch „best practice“ Beispiele und die noch in Arbeit befindliche detaillierte Veröffentlichung der Ergebnisse. Es ist mit einer Latenzzeit von 3-5 Jahren zu rechnen.
- Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten nach Projektende (mit Zeithorizont)
Die Projektergebnisse sind über die Plattform MaterialDigital verfügbar zu Einsatz in Forschungsprojekten welche verwandte Materialien und Prozesse betreffen. Zeithorizont < 1 Jahr. Ein Fortsetzungsprojekt im Rahmen der Ausschreibung MaterialDigital III ist eingereicht.
- Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit
Wie bereits ausgeführt sind weitere Schritte zur Effizienz und Zuverlässigkeit des verfolgten Ansatzes digitaler Eigenschaftsvorhersage in technischen Materialien notwendig. Dazu gehören die Übertragung auf andere Material- und Prozessklassen. Auch ist die Akzeptanz in der industriellen und akademischen Forschung zu stärken. Als Zeithorizont kann 3-5 Jahre gelten.

3. Angaben zu Arbeiten, die zu keiner Lösung geführt haben

Bisher nicht hinreichend gelöst ist die Etablierung eines Versagenskriteriums. Es kann als sicher gelten, dass ein solches Kriterium nicht generell für eine große Gruppe von Materialien und Prozessen gelten kann, sondern jeweils neu formuliert und kalibriert werden muss. Hier soll ein „best practice“ Beispiel in dem beantragten Folgeprojekt „Digitale Materialbetrachtung entlang der gesamten Wertschöpfungskette für Stahlkomponenten zur Effizienzsteigerung, Lebensdauerprognose und Bestimmung des CO₂-Fußabdrucks; DiStEL“. Es war jedoch bereits im Antrag des hier behandelten Projektes iBain vermerkt, dass dieses Ziel ein Fernziel ist, zu dem nur wesentliche Zwischenschritte im Antragszeitraum erreichbar waren. Diese sind weitestgehend erreicht worden, so dass wir von einer sinnvollen und ökonomischen Verwendung der Fördermittel überzeugt sind.

4. Angaben über die Einhaltung der Ausgaben- bzw. Kosten- und der Zeitplanung

Während der Projektlaufzeit wurden fast alle Projektziele erreicht. Insbesondere die Meilensteine M1-M4 (virtuelle Mikrostrukturen), die die Phasenfeldmodellierung von bainitischen Mikrostrukturen betreffen, wurden erfolgreich erreicht. Die Meilensteine N5-M7 (KMI-Integration), die sich auf die Datenanalyse und die Workflow-Integration beziehen, wurden ebenfalls erfolgreich erreicht. Der Meilenstein M8 wurde durch die Entwicklung des Modells zur Vorhersage der Ermüdungslebensdauer ersetzt, da es während der Projektlaufzeit zu personellen Veränderungen kam: Die anleitende Wissenschaftlerin und Expertin für AMI und multikriterielle Optimierung hat das Institut nach dem ersten Projektjahr verlassen. Dies führte zu einer kostenneutralen Projektverlängerung um 5 Monate und zu einer Substitution der Gewichtung der Arbeiten in der letzten Projektphase, in der anstelle der multikriteriellen Optimierung ein Modell zur Vorhersage der Ermüdungslebensdauer vorgeschlagen wurde.

Der Kostenplan wurde eingehalten.