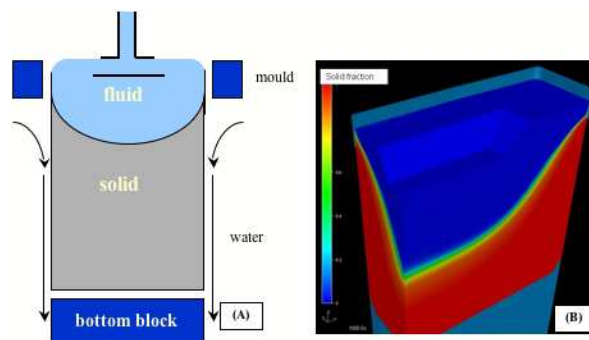


Hoogwaardige aluminiumlegeringen

Het fabriceren van hoogwaardige aluminiumlegeringen heeft veel weg van alchemie uit vervlogen eeuwen. Exact berekenen wat er chemisch gebeurt tijdens het afkoelen, kost tot nu toe te veel rekentijd. Een slimme wiskundige aanpak kan deze alchemie terugbrengen naar deze eeuw en nauwkeurige voorspellingen leveren gebaseerd op moderne natuurkunde en chemie.

Onderdelen van auto's, vliegtuigen en een heleboel andere producten zijn gemaakt van een hoogwaardige aluminiumlegering. Het materiaal moet de gewenste sterkte, stijfheid en gladheid hebben. Om het deze eigenschappen te geven, worden allerlei chemische elementen toegevoegd aan het zuivere aluminium: bijvoorbeeld koper, zink, silicium, mangaan en magnesium. Afhankelijk van de toepassing variëren de gewichtsfracties van deze elementen tussen eentiende en tien procent.

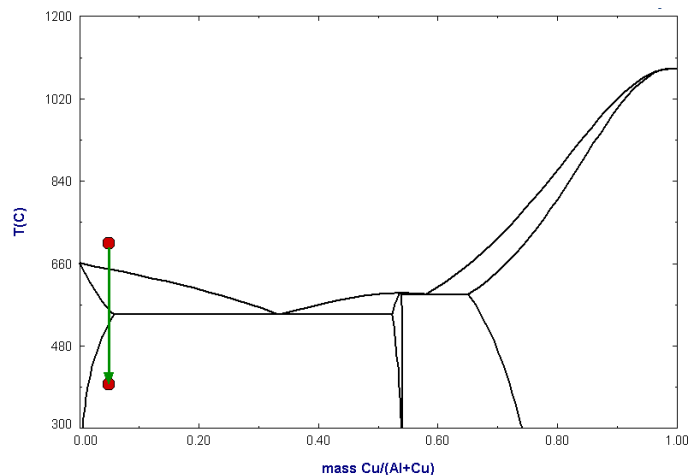


Figuur 1: Links: schema van het aluminium gietproces. Rechts: numerieke simulatie van het aluminium gietproces in een kwart van de gietvorm. Blauw is vloeibaar aluminium en rood is vast aluminium.

Bij het staalbedrijf Corus wordt onderzoek gedaan naar het productieproces van deze hoogwaardige producten. Dat proces begint met het gieten van een vloeibare aluminiumlegering in een cilindrische vorm. Aan de zijkanten wordt de vorm met water gekoeld. De bodem van de vorm staat op een lift die naar beneden zakt tijdens het gietproces. Aan de bovenkant wordt voortdurend vloeibaar aluminium bijgegoten (figuur 1). De aluminiumlegering stolt van buiten naar binnen en van beneden naar boven. Uiteindelijk komt er aan de onderkant van de vorm een vaste aluminiumstaaf of -blok uit die meer dan zes meter lang, tot een halve meter dik en, voor de plakken, tot wel twee meter breed kan zijn.

Zuiver aluminium stolt bij 660 graden Celsius. Als je er vijf gewichtsprocent koper aan toevoegt, daalt het stolpunt naar 650 graden Celsius. Het gedrag van de legering wordt aan de ene kant bepaald door het verloop van de afkoeling, maar aan de andere kant ook door de stroming van de legering door de gietvorm. Als gevolg van de stroming en het stolproces kan er bijvoorbeeld relatief veel koper in het midden terecht komen. Het gevolg is een hoger stolpunt in het midden dan aan de zijkanten. Dat leidt er toe dat het eindproduct in het midden andere eigenschappen krijgt dan aan de buitenkant. Idealiter wil Corus juist een eindproduct dat overal dezelfde eigenschappen heeft.

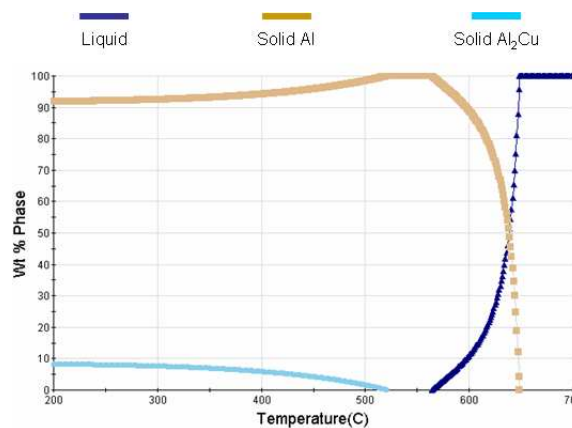
“We willen begrijpen hoe dit soort inhomogeniteiten ontstaat”, zegt Andreas ten Cate van Corus. “Als we dat begrijpen, dan is de volgende stap dat we het productieproces kunnen aanpassen om inhomogeniteiten in het eindproduct te voorkomen.”



Figuur 2: Fasediagram dat de relatie geeft tussen de samenstelling van de aluminium-koperlegering en de temperatuur.

Stolling en stroming Samen met andere aluminiumbedrijven ontwikkelt Corus software om het gietproces op de computer te simuleren (figuur 1). Dat is gemakkelijker gezegd dan gedaan. Op elk punt in de gietvorm moet je in de tijd berekenen welke elementen er in welke concentratie zitten en waar ze heen stromen. Bij het stollen kan op iedere plek de concentratie van elementen veranderen, omdat niet evenveel van een element vanuit de vloeistof in het vaste materiaal wil gaan zitten. De stroming zorgt er vervolgens voor dat de elementen zich verplaatsen. Het gevolg daarvan is dat op iedere plek ook de stolling steeds anders kan gaan verlopen.

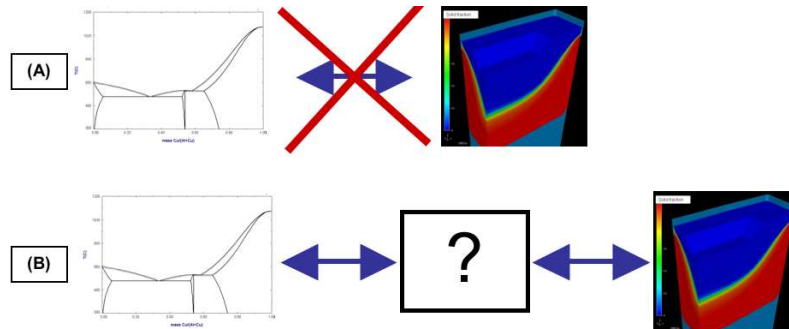
Juist de aanwezigheid van een verscheidenheid aan extra elementen in de aluminiumlegering compliceert het probleem sterk. Elk extra element leidt tot een extra dimensie in de meerdimensionale thermodynamische faseruimte (figuur 2). Om te voorkomen dat op elk tijdstip en op elk punt de fasetoestand moet worden berekend bij een specifieke temperatuur en een specifieke combinatie van elementen, lijkt het daarom handig om gebruik te maken van een thermodynamisch databestand. Daarin staat voor een heleboel temperaturen en concentraties wat de fasetoestand is. De database is netjes van te voren berekend. In plaats van het telkens opnieuw berekenen van de fasetoestand, hoeft het computerprogramma de fasetoestand alleen maar in een tabel op te zoeken. Omdat de database alleen een discrete voorstelling van de werkelijkheid levert, is in de praktijk interpolatie nodig om de fasetoestand voor een willekeurige combinatie van temperatuur en concentraties te kennen. Maar dat werkt nog steeds sneller dan het telkens opnieuw berekenen van de fasetoestand.



Figuur 3: Fasevorming tijdens het stolproces van aluminium met 4,5 gewichtsprocent koper (ook aangegeven met de groene lijn in figuur 2).

Toch is zo'n rechttoe-rechtaan-database niet automatisch de oplossing. Probleem is dat de grootte van dit gegevensbestand snel uit de hand loopt bij een toenemend aantal elementen in het vloeibare aluminium. Bij vier elementen beslaat de database al snel duizend gigabyte. Bij vijf of zes elementen wordt de database onwerkbaar groot.

Ten Cate: “Als we het probleem terugbrengen tot twee dimensies, duurt een simulatie al drie uur. Als we het tijdafhankelijke, driedimensionale probleem willen oplossen, duurt één enkele simulatie al langer dan twee weken. De uitdaging die we aan de studiegroep wiskunde met de industrie hebben gegeven was om een efficiënte koppeling te zoeken tussen de thermodynamische database en het simulatiemodel.”



Figuur 4: Een directe koppeling tussen thermodynamicasoftware en de simulatie kost te veel rekentijd. De uitdaging van het Corus-probleem is om een efficiënte koppeling te bedenken tussen de simulatie en de thermodynamische database.

Sprongpunten De wiskundigen van de studiegroep hebben eerst een eenvoudig eendimensionaal model van het fysische probleem gemaakt. Ondanks de beperking tot één dimensie, geeft dit model nog steeds een realistische beschrijving van het stollingsproces. Het model bestaat uit een verzameling partiële differentiaalvergelijkingen die het karakter hebben van convectie-diffusievergelijkingen met brontermen. Het model is zo ontworpen dat het gebruik kan maken van een thermodynamische database.

De volgende stap is dan om te proberen de thermodynamische database in grootte te beperken zonder dat de uiteindelijke oplossing significant afwijkt van de realiteit. “Daarvoor hebben we een wonderlijk eenvoudig idee uitgewerkt”, zegt professor Bernard Geurts van de Universiteit Twente en lid van de studiegroep die de uitdaging van Corus bestudeerde. “Het thermodynamische gedrag in de faseruimte wordt gekenmerkt door een heleboel sprongpunten. Als we weten waar de sprongpunten zitten, kunnen we de enorme thermodynamische database die aan elk roosterpunt hangt, veel goedkoper representeren. We maken gebruik van de wetenschap dat het gedrag tussen de sprongpunten ofwel lineair ofwel kwadratisch verloopt. Dan kunnen we polynomiale fitting toepassen. Zo hebben we de database met een factor achthonderd gereduceerd, van 1000 gigabyte naar 1,25 gigabyte en dan is de simulatie wel te doen. Zo hebben we laten zien dat de berekening wél goed is uit te voeren, terwijl we maar een klein beetje aan nauwkeurigheid verliezen.”

De partiële differentiaalvergelijkingen kunnen met commercieel verkrijgbare software numeriek worden opgelost. Het moeilijkste van het Corus-probleem zit in de datareductie, niet in het oplossen van de uiteindelijke vergelijkingen.

Behalve deze concrete verbetering, heeft de studiegroep nog andere suggesties gedaan, die echter nog niet in detail zijn uitgewerkt. Deze sugges-

ties bieden kansen op verdere verbeteringen als Corus de mogelijkheid heeft deze stappen verder uit te werken. Allereerst zou je een onderscheid kunnen maken tussen grootheden die langzaam veranderen als functie van temperatuur en samenstelling van de legering, en grootheden die snel veranderen. Ten tweede kun je belangrijkere gebieden in het fase-diagram ook met een hogere nauwkeurigheid representeren dan gebieden die in de praktijk minder belangrijk zijn.

“Het probleem is te zwaar om binnen een week met direct toepasbare resultaten te komen”, zegt Geurts. “Maar met het model dat er nu ligt, zou Corus ideeën voor het maken van betere legeringen makkelijk kunnen testen. De reductie van de database die we hebben voorgesteld, kunnen ze ook direct toepassen in hun simulatiesoftware. De bal ligt nu bij Corus. Zij moeten bekijken of en hoe ze onze resultaten willen toepassen.”

Homogeen eindproduct Andreas ten Cate van Corus is tevreden met de resultaten. “De studiegroep is heel concreet bezig geweest, en dat terwijl we de wiskundigen niet directe toegang tot de broncode van onze software konden geven. Ik kon ze wel een modelbeschrijving geven, en op basis daarvan hebben ze hun eigen model gemaakt. De concrete resultaten die ze voorstellen, maken volgens mij een goede kans om geïmplementeerd te worden. Het was nieuw voor mij om te zien dat je met een semi-analytische beschrijving van de curves in het fase-diagram veel sneller resultaten behaalt. Ook de andere gesuggereerde verbeteringen zien er goed uit.”

Gaat Corus de resultaten dan ook in de eigen simulatiesoftware gebruiken? Ten Cate: “Omdat de softwareontwikkeling binnen een internationaal consortium gebeurt, weet ik niet zeker of, en zo ja, hoe het wordt opgepikt, maar ik ga de suggesties van de studiegroep zeker inbrengen. Dan is het vervolgens aan het consortium om te beslissen wat ze ermee willen doen. Volgens mij is er een goede kans dat de resultaten geïmplementeerd gaan worden.”

De mensen in de fabriek zijn al blij als er een heel blok aluminiumlegering uit het productieproces komt. Het is mooi meegenomen als de eigenschappen dan ook nog homogeen zijn, maar dat gebeurt niet altijd en soms verliest het eindproduct veel van zijn waarde. Ten Cate: “Nu wordt geprobeerd om nieuwe legeringen te ontwikkelen die het negatieve gevolg van de inhomogene samenstelling compenseren. Als we echter de interactie tussen de chemie en de fysica van het stollingsproces tijdens het gieten begrijpen en beheersen, dan kunnen we met dezelfde legering een beter product aanbieden. Dan weten we namelijk hoe we inhomogeniteiten kunnen voorkomen.”