

PANDAT™ 2024

培训教程

组织演化模块 (PanEvolution)



版权 © 2000-2024 CompuTherm 有限责任公司


目 录

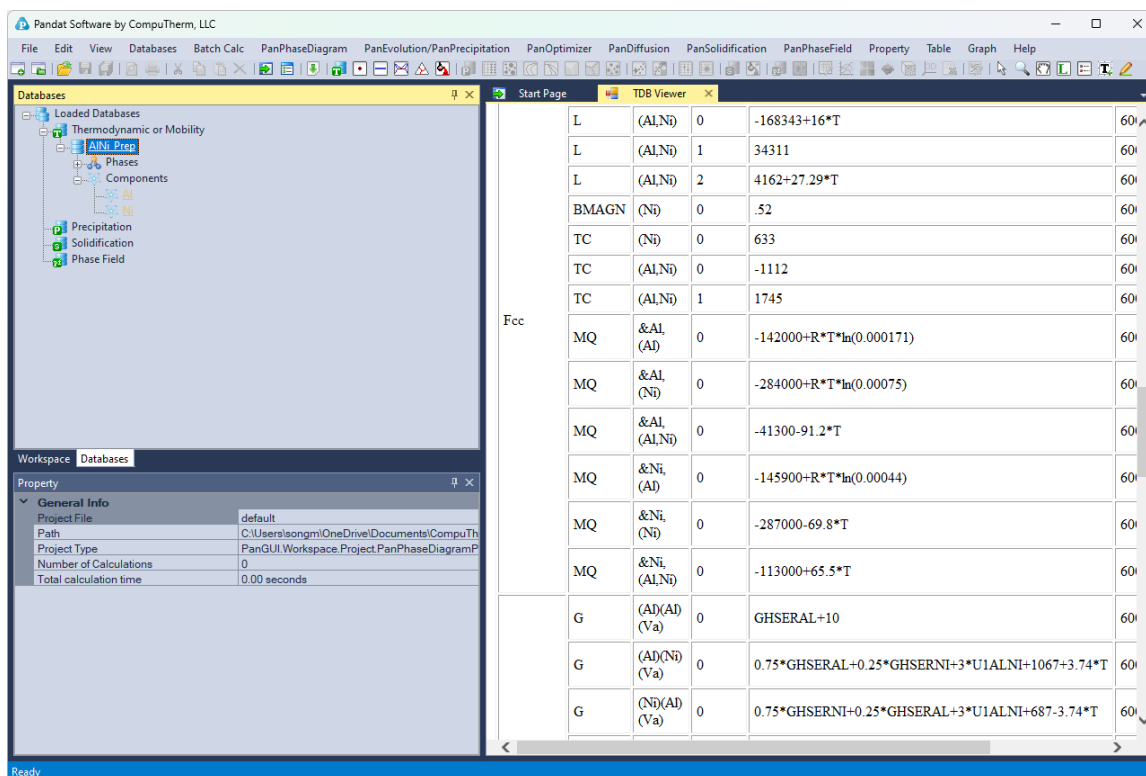
第 III 部分: PanEvolution 组织演化模块	3
3.1 加载数据库并选择组元	3
3.2 析出模拟教程	5
3.2.1 等温时效	5
3.2.2 冷却和第二步时效	8
3.2.3 考虑初始微观组织形态	11
3.2.4 等温时效后的硬度	14
3.2.5 两相或多相同时析出	16
3.2.6 TTT (时间-温度转变) 模拟	19
3.2.7 CCT (时间-温度转变) 曲线模拟	21
3.2.8 晶粒长大和析出模拟	22
3.2.9 动态再结晶模拟	25

第 III 部分：PanEvolution 组织演化模块


3.1 加载数据库并选择组元

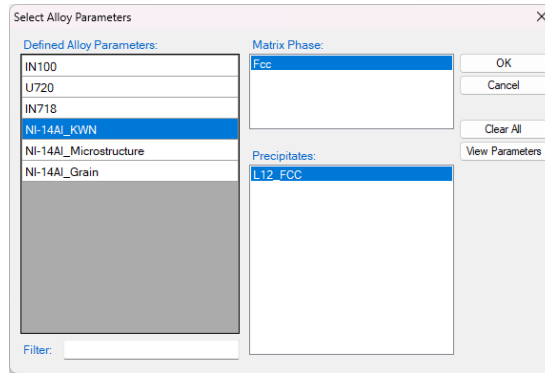
在组织演化模块中，执行任何析出模拟之前必须先加载包括热力学模型参数和迁移率模型参数的组合数据库（PDB 或 TDB），以及具有动力学模型参数（KDB）的数据库。

- 单击起始界面上的 New a Workspace 链接以启动新工作空间，或单击菜单（File → Add a New Project），在当前工作空间中添加新项目，选择 *PanPrecipitation* 模块。
- 单击工具栏图标 ，或使用菜单数据库 Database → Load TDB or PDB (Encrypted TDB) 加载包含热力学模型参数和迁移率模型参数组合的数据库。商业数据库 PDB 文件文件名为：xxx_TH+MB.PDB 或 xxx_All.PDB；TDB 文件中应包含有表示迁移率参数的 MQ 值，如下图 *AlNi_Prep.tdb* 所示。

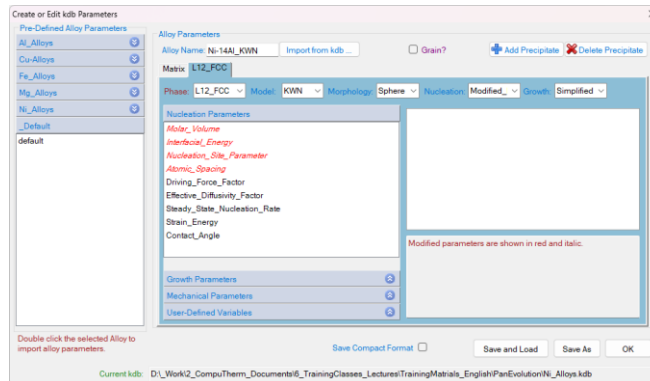



Phase	Component	Parameter Type	Equation
L	(Al,Ni)	0	-168343+16*T
L	(Al,Ni)	1	34311
L	(Al,Ni)	2	4162+27.29*T
BMAGN	(Ni)	0	.52
TC	(Ni)	0	633
TC	(Al,Ni)	0	-1112
TC	(Al,Ni)	1	1745
Fcc	MQ	&Al, (Al)	-142000+R*T*ln(0.000171)
Fcc	MQ	&Al, (Ni)	-284000+R*T*ln(0.00075)
Fcc	MQ	&Al, (Al,Ni)	-41300-91.2*T
Fcc	MQ	&Ni, (Al)	-145900+R*T*ln(0.00044)
Fcc	MQ	&Ni, (Ni)	-287000-69.8*T
Fcc	MQ	&Ni, (Al,Ni)	-113000+65.5*T
G	(Al)(Al) (Va)	0	GHSERAL+10
G	(Al)(Ni) (Va)	0	0.75*GHSERAL+0.25*GHSERNI+3*U1ALNI+1067+3.74*T
G	(Ni)(Al) (Va)	0	0.75*GHSERNI+0.25*GHSERAL+3*U1ALNI+687-3.74*T

- 单击工具栏  或从菜单中选择 PanEvolution/PanPrecipitation → Load KDB or EKDB 或 EKDB，加载动力学模型参数数据库。从数据库中选择合适的合金参数 (Define Alloy Parameters)，基体相(Matrix Phase)和析出相(Precipitates)。



- d. 如果 kdb 中参数需要进行修改，用户可以直接打开 kdb 文件进行编辑修改，也可以点击 View Parameters，在弹出的“Create or Edit Parameters”对话框中进行修改。修改后点击 Save and Load，加载修改后的参数进行模拟。点击 Save As，可以将修改后的参数储存为新的 kdb 文件，下次使用。



- e. 使用菜单(File → Open File)或单击  按钮打开 KDB 文本文件。KDB 文件使用 XML 格式编辑，其中定义了合金名字(<Alloy name>), 基体相(<MatrixPhase>), 析出相(PrecipitatePhase)的关键参数，包括摩尔体积，界面能等。一个 KDB 文件中可以包含多组合金和模拟条件的参数，下图为 *Ni-Alloys.kdb* 局部。

```

1  <?xml version="1.0" encoding="utf-8"?>
2  <PPREC version="2024">
3  <Header copyright="CompuTherm, LLC">
4  <Application name="PanEvolution" version="2024" />
5  </Header>
6
7  <Alloy name="IN100">
8  <!-- Define the range of alloy compositions -->
9  <!-- x: mole fraction, w: weight fraction, x%: mole percentage, w%: weight percentage -->
10 <Composition units="wt%">
11 <Component name="Ni" value="50-100" />
12 <Component name="Al" value="0-6" />
13 <Component name="Co" value="14-18" />
14 <Component name="Cr" value="8-12" />
15 <Component name="Mo" value="0-5" />
16 <Component name="Ti" value="0-7" />
17 <Component name="Zr" value="0-1" />
18 </Composition>
19 <MatrixPhase name="Fcc">
20 <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
21 <Parameter type="Molar_Volume" value="7.1E-6" description="The molar volume of the matrix phase [m^3/mole]." />
22 </ParameterTable>
23 <PrecipitatePhase name="L12_FCC" model="KWN" morphology="Sphere" nucleation="Modified_Homogeneous" growth="Simplified">
24 <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
25 <Parameter type="Molar_Volume" value="7.1E-6" description="The molar volume of the precipitate phase [m^3/mole]." />
26 <Parameter type="Interfacial_Energy" value="0.035" description="Interfacial energy between the matrix and precipitate" />
27 <Parameter type="Nucleation_Site_Parameter" value="1.5E-5" description="Homogeneous: choose a value close to solute" />
28 <Parameter type="Atomic_Spacing" value="3.621E-10" description="Usually use the lattice constant [m]." />
29 </ParameterTable>
30 </PrecipitatePhase>
31 </MatrixPhase>
32 </Alloy>

```

3.2 析出模拟教程

此培训教程以 Ni-Al 二元，Al-Mg-Si 三元和 Ni-Al-Nb 伪三元体系为例，演示组织演化（PanEvolution）模块中各项析出模拟以及晶粒长大与再结晶等组织演化模拟功能。

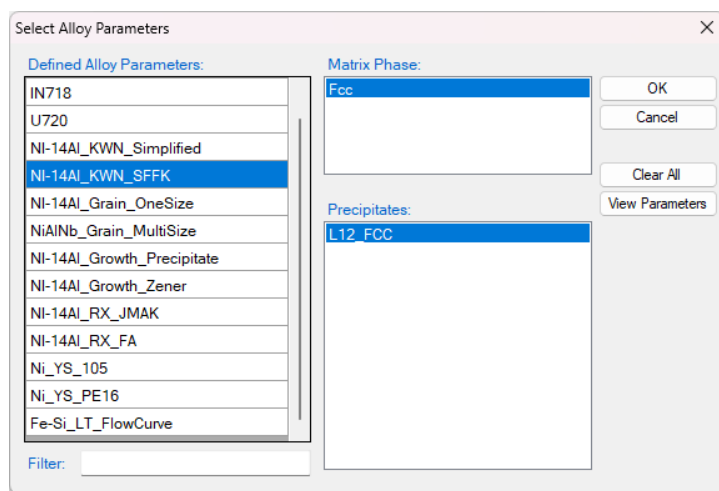
Pandant 演示版仅适用于三元及以下体系。

3.2.1 等温时效

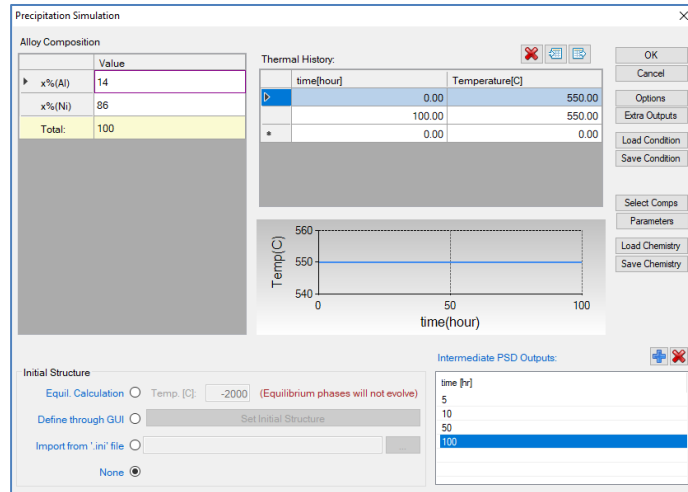


假设初始均匀基体，在等温时效过程中，镍基合金中 γ' 相的尺寸和体积分数如何演变？

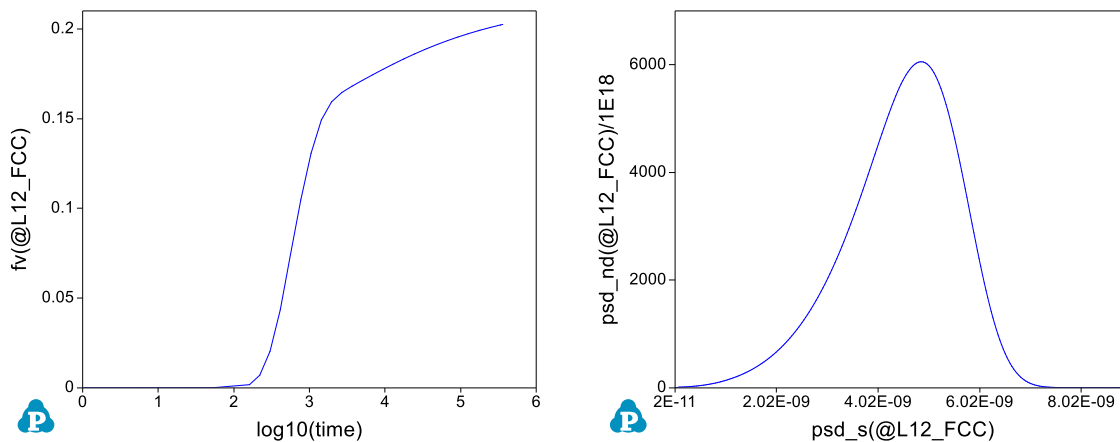
- 单击工具栏上的 按钮以加载组合的热力学和迁移率数据库（*AlNi_Prep.tdb*），并选择两个组元
- 单击工具栏上的 按钮以加载动力学模型数据库（*Ni-Alloys.kdb*），在弹出的对话框中选择 *Ni-14Al_KWN_SFFK*，基体相为 Fcc，析出相为 L12_Fcc。这组参数中析出相的形核选用 KWN 模型，长大过程为 SFFK 模型。




- 从菜单中选择 PanEvolution/PanPrecipitation→Precipitation Simulation 或单击工具栏上的 按钮，将计算条件设置如下，即合金成分为 Ni-14Al（at%），在 550°C 等温时效 100h



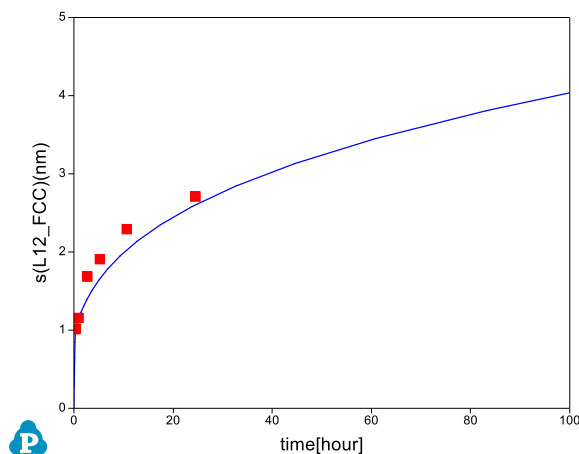
- d. 单击 **Option** 按钮以选择/更改单位
- e. 在"Intermediate PSD Outputs" 栏添加中间状态输出，输出在 5,10,50 和 100 小时的 PSD（粒度分布）
- f. 单击 **Save Condition** 将当前计算条件保存到批处理文件（*.pbfx）中，供将来计算使用
- g. 浏览 **Precipitation Simulation** 对话框中的其他按钮
- h. 单击 **OK** 以在 550°C 下进行等温时效 100h 的模拟，默认图是 γ' 相的体积分数随时间对数 \log_{10} （以秒为单位的时间）的变化。自动生成的图还包括 5、10、50、100 小时及最终时刻的 PSD 图，通过更改属性窗口中的参数来更改图的外观



- i. 双击打开 Default 表格，选择 **time**（小时），然后按<Ctrl>选择 **s(L12_FCC)** (nanometer)，单击  按钮绘制粒子尺寸随时间的变化

	time	log10(time)	T	f_v tot	f_v (@L12_FCC)	s (@L12_FCC)	nd(@L12_FCC)	log10(nd(@L12_FCC))
	hour	SI	C			nanometer	#m ⁻³	SI
7	4.77754E-007	-2.764474	550.0000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000E+020	-20.000000
8	2.38999E-006	-2.065481	550.0000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000E+020	-20.000000
9	1.194512E-005	-1.366507	550.0000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000E+020	-20.000000
10	5.972572E-005	-0.667536	550.0000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000E+020	-20.000000
11	0.000290	0.031434	550.0000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000E+020	-20.000000
12	0.001493	0.730404	550.0000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000E+020	-20.000000
13	0.007466	1.429374	550.0000	9.731122E-013	9.731122E-013	0.341361	5.840278E+015	15.766434
14	0.014931	1.730404	550.0000	2.030040E-007	2.030040E-007	0.351825	1.106127E+021	21.043805
15	0.044794	2.207525	550.0000	0.001683	0.001683	0.380547	7.139813E+024	24.853687
16	0.061224	2.343222	550.0000	0.006963	0.006963	0.385835	2.613012E+025	25.417141
17	0.083665	2.478845	550.0000	0.020266	0.020266	0.394937	6.166439E+025	25.790034
18	0.114320	2.614425	550.0000	0.043390	0.043390	0.448132	7.932785E+025	25.899426
19	0.156221	2.750043	550.0000	0.074363	0.074363	0.538216	7.257083E+025	25.860762
20	0.213474	2.885648	550.0000	0.104656	0.104656	0.694586	4.979582E+025	25.697193
21	0.292095	3.021826	550.0000	0.130695	0.130695	0.833115	3.439341E+025	25.536475
22	0.399464	3.157780	550.0000	0.149252	0.149252	1.015752	2.779569E+025	25.443977
23	0.546160	3.293622	550.0000	0.159403	0.159403	1.095229	2.409595E+025	25.381944
24	0.746255	3.429190	550.0000	0.164583	0.164583	1.163312	2.083331E+025	25.318758
25	1.020315	3.565037	550.0000	0.168128	0.168128	1.237787	1.769968E+025	25.247966
26	1.394757	3.700801	550.0000	0.171330	0.171330	1.323248	1.478542E+025	25.169834
27	1.906911	3.836633	550.0000	0.174443	0.174443	1.421880	1.215366E+025	25.084707

- j. 右键单击工作空间管理窗口中的 **Table** 并选择 **Import Table from File**，从工作目录中选择 **Ni-14Al_Exp.dat**
- k. 双击打开第 j 步创建的粒子尺寸图，然后单击 **Table** 下的 **Ni-14Al_Exp.dat**，将属性窗口中的 **t(hr)** 拖动到主显示窗口作为 X 轴，按<Ctrl>并将 **radius(nm)** 拖动到主显示窗口，作为 Y 轴。图中将增加一条实验值的红线，在图中选择新添加的红线，将属性窗口中的 **Plot Type** 更改为 **Point**



3.2.1 节小结

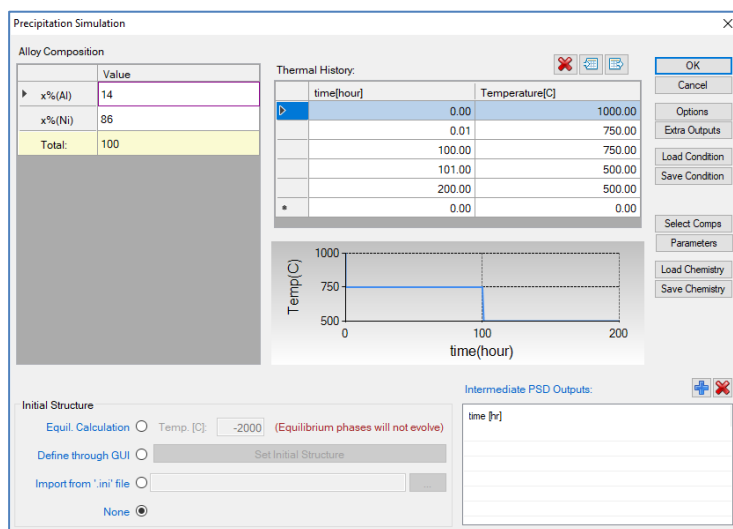
- 学习创建用于析出模拟的工作空间（或项目）
- 学习加载数据库（**tdb** 和 **kdb**）
- 学习设置等温时效的计算条件
- 学习使用 **Default** 表中列出的属性创建新图表
- 学习导入实验数据文件并在计算图上绘制实验数据

3.2.2 冷却和两步时效

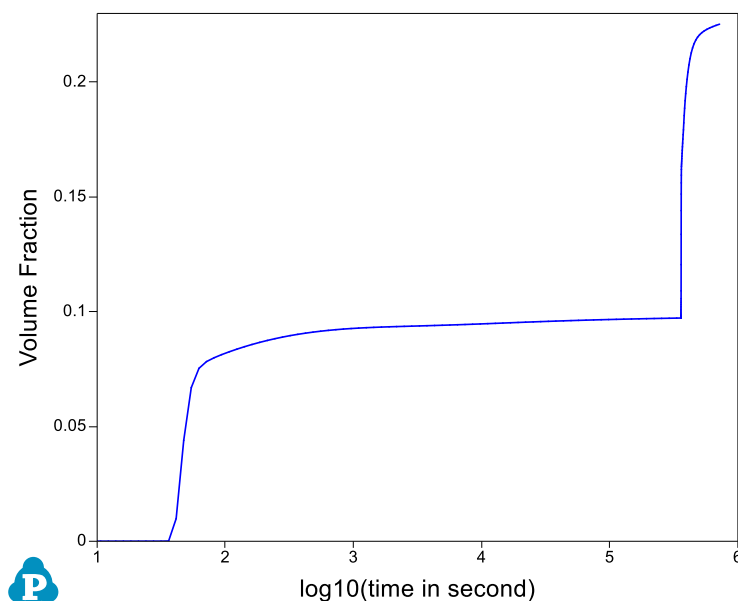



镍基合金在固溶线以上进行固溶处理，然后经过两步时效处理，析出相 γ' 的尺寸和体积分数如何演变？

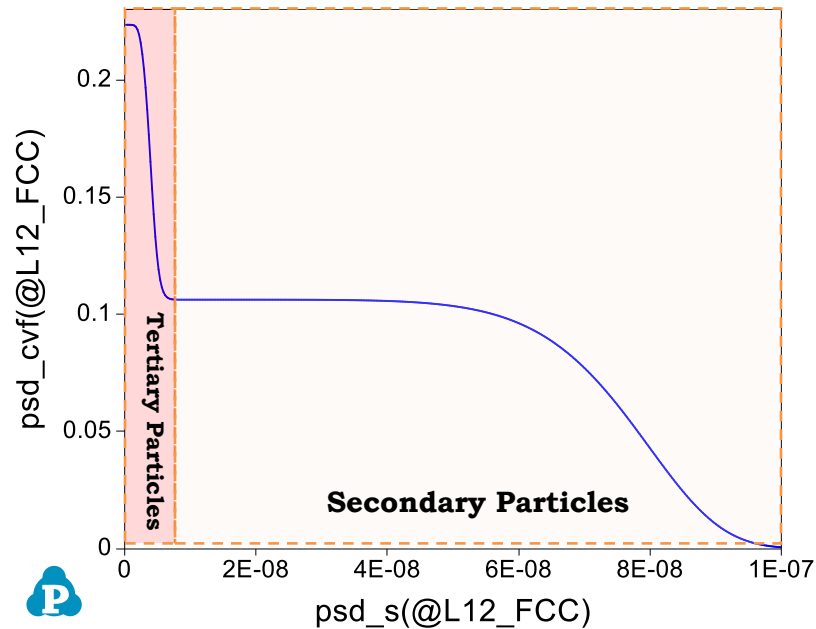
- a. 点击工具栏上的 按钮，设置计算条件如下，合金 Ni-14Al (at%) 首先置于 1000°C (Fcc (γ) 单相区) 进行固溶处理，然后，以 25000°C/h 的速度快速冷却至 750°C，在 750°C 下时效 99.99 小时，然后以 250°C/h 的速度冷却到 500°C，然后在这个温度下时效 99 小时，点击 **OK**



- b. 默认图显示了以时间的对数为横轴， γ' 体积分数为纵轴的演变图，时间单位为秒



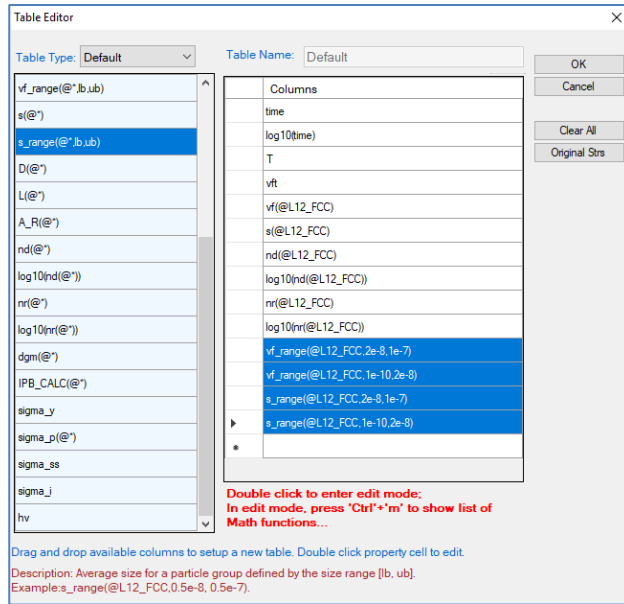
- c. 双击打开 **psd_200** 表，选择 **psd_s(@L12_FCC)**，然后按 <Ctrl> 选择 **psd_cvf(@L12_FCC)**，单击  按钮绘制最后阶段L12_FCC的累积体积分数，此图表明 γ' 体积分数的两次剧增从100nm到20nm（二级 γ' ），从10nm到0.1nm（三级 γ' ）。



- d. 右击 Default Table 并选择 **Edit Table Columns**，再添加四列 **vf_range(@L12_FCC,2e-8,1e-7)**、**vf_range(@L12_FCC,1e-10,2e-8)**、**s_range(@L12_FCC,2e-8,1e-7)**和 **s_range(@L12_FCC,1e-10,2e-8)**，来获得每个颗粒群（二级和三级颗粒）最后（t=200 小时）的平均体积分数和尺寸。



注意：模拟的任意中间状态，如果 PSD 没有保存，那么 **vf_range/s_range** 表示为摩尔分数于所有 γ' 相尺寸平均值的比值，而不是于所选尺寸群比值的平均值。本示例中新列的 4 列表格只有最后一行有意义，因为只储存了最后阶段，即 200h 时，的数据。PSD 表明二级和三级颗粒的平均体积分数和尺寸。



Pandat Software by CompuTherm, LLC

FileEditViewDatabasesBatch CalcPanPhaseDiagramPanPrecipitationPanOptimizerPanDiffusionPanSolidificationPropertyTableGraphHelp

Workspace

graph_g_1.graphgraph_g_2.graphgraph_g_3.graph*graph_g_4.graphDefault.table

graph_g_1.graph

Defaultpsd_100graph_gpsd_5psd_10psd_50psd_100generatedprecipitation_1Graph

Databases

Property

Appearance

Background ColorAppWorkspaceGrid ColorControlDarkBorder StyleFixed SingleCell Border StyleSingleDefault Cell StyleData Grid View Cell Style (LLayout

Auto Size ColumnsNone

graph_g_2.graph

C)vf_range(@L12_FCC, 2e-8, 1e-7)vf_range(@L12_FCC, 1e-10, 2e-8)s_range(@L12_FCC, 2e-8, 1e-7)s_range(@L12_FCC, 1e-10, 2e-8)

SI

metermeter

1810.1994610.1994611.034422E-0091.034422E-009

1820.2017980.2017981.095750E-0091.095750E-009

1830.2040710.2040711.162467E-0091.162467E-009

1840.2063110.2063111.235422E-0091.235422E-009

1850.2084740.2084741.307524E-0091.307524E-009

1860.2105410.2105411.376342E-0091.376342E-009

1870.2124390.2124391.441798E-0091.441798E-009

1880.2141620.2141621.506461E-0091.506461E-009

1890.2156640.2156641.569623E-0091.569623E-009

1900.2169670.2169671.632574E-0091.632574E-009

1910.2181110.2181111.696760E-0091.696760E-009

1920.2191020.2191021.762218E-0091.762218E-009

1930.2199630.2199631.829419E-0091.829419E-009

1940.2207290.2207291.899082E-0091.899082E-009

1950.2214250.2214251.972647E-0091.972647E-009

1960.2220650.2220652.050325E-0092.050325E-009

1970.2226710.2226712.133438E-0092.133438E-009

1980.2232510.2232512.223427E-0092.223427E-009

1990.2238050.2238052.319208E-0092.319208E-009

2000.1074650.1167706.229542E-0082.398701E-009


3.2.2 节小结

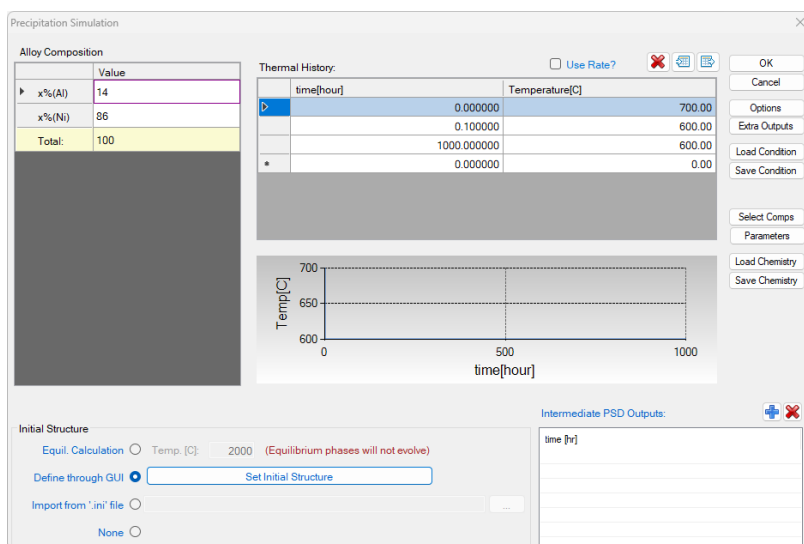
- 学习设置冷却和多步等温时效的计算条件
- 学习从 PSD 表中获取累积体积分数并识别不同的粒子群
- 学习获得每个粒子群的平均体积分数和尺寸

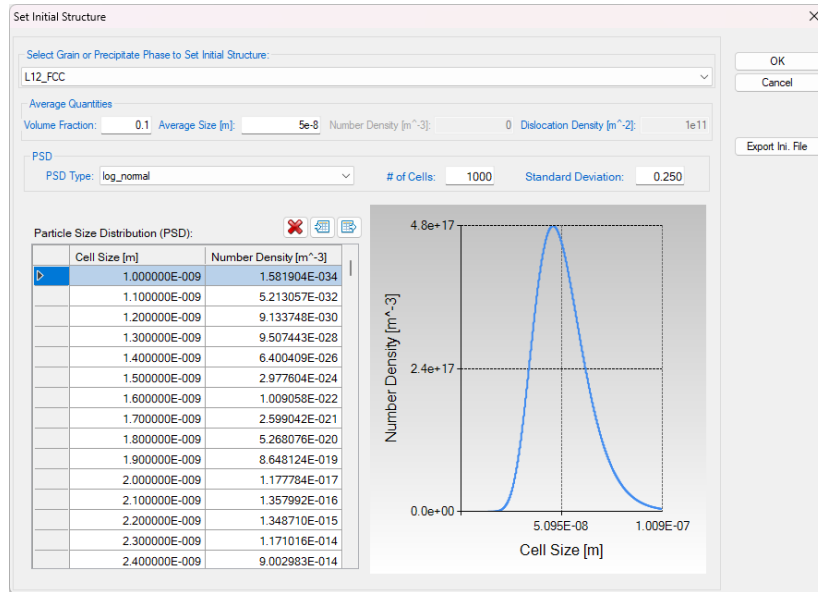
3.2.3 考虑初始微观组织形态



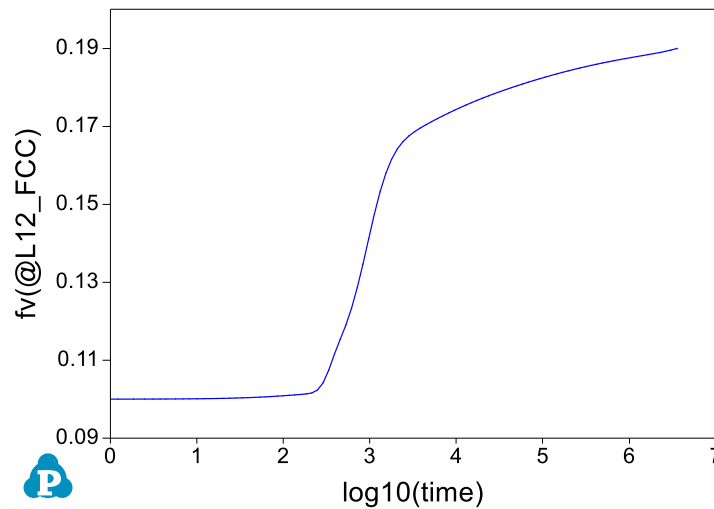
在低于固溶线温度进行固溶处理，然后进行等温时效，镍基合金中 γ' 相的尺寸和体积分数如何演变？

- a. 单击工具栏上的按钮，然后设置如下的计算条件。首先，将 Ni-14Al (at%)合金置于 700°C 进行固溶处理，然后以 1000°C/h 的速度冷却至 600°C，然后在 600°C 下时效 1000 小时。由于合金在 700°C 下进行固溶处理，处于两相区，L12_FCC (γ')析出相已经存在，因此必须给出初始的微观结构。单击 [Set Initial Structure](#)，在弹出窗口中设置初始微观结构。在这种情况下，我们将 γ' 相的初始尺寸（半径）设置为 50nm，体积分数为 10%。particle_size_distribution 被选为“log_normal”，表明 γ' 在初始微观结构中假定对数正态分布。如果将 particle_size_distribution 设置为“uniform”，则表示 γ' 在初始微结构中具有相同的半径 50nm，“normal”则表示初始状态 γ' 粒子尺寸是正态分布。由于三个变量（size, volume_fraction 和 number_density）中只有两个变量是独立的，因此未给出数密度。

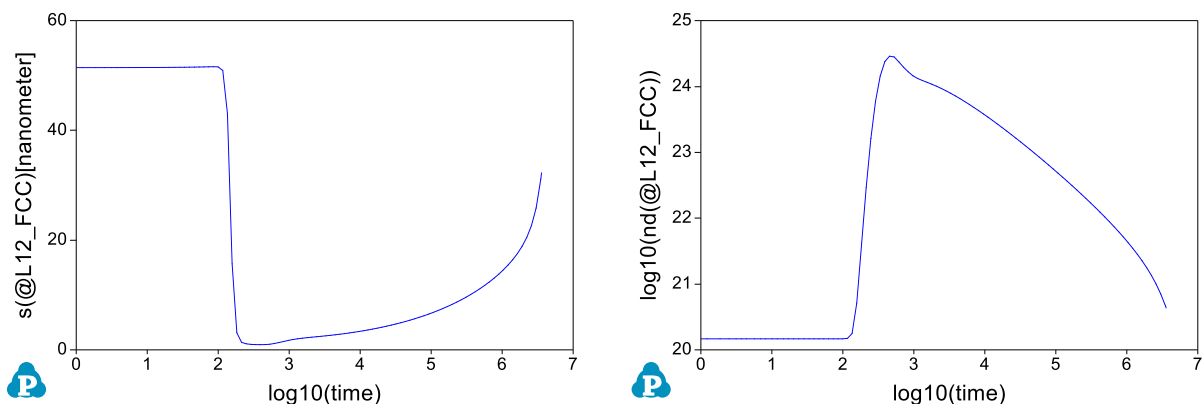




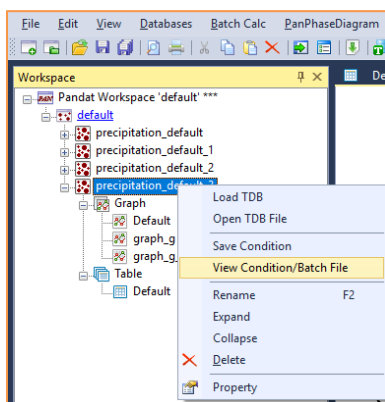
b. 单击 OK 执行模拟计算，默认图形给出了 γ' 析出相的体积分数是 $\text{Log}(\text{time})$ 函数



c. 打开 Default 表格，将 L12_FCC 的尺寸单位选为 nm，然后选择 $\text{log}(\text{time})$ 和 $s(\text{L12_FCC})$ 以绘制粒径随 $\text{log}(\text{time})$ 变化的演变，如下面左图所示；打开 Default 表，然后选择 $\text{log}(\text{time})$ 和 $\text{log}(\text{nd}(\text{L12_FCC}))$ 以绘制粒子数密度随 $\text{log}(\text{time})$ 变化的演变，如下面右图所示。可以看出，在冷却和时效初期，新形核和 γ' 粒子的数密度增加而平均尺寸减小



- d. 在工作空间管理窗口中，右击上述计算的节点，然后选择 View Condition /Batch File。Batch File 采用 XML 格式，记录模拟过程所使用的条件。



```

1  precipitation_3.pbf  x  psd_1000.graph  graph_g_1.graph  graph_g.graph
2  5  </Header>
3  6  <calculation name="Precipitation Simulation" type="precipitation" duration="7.4" original_batch_name="" id="10001">
4  7    <databases>
5  8      <database type="tdb" file_name="AlNi_Prep.tdb" />
6  9      <database type="kdb" file_name="Ni_Alloys.kdb" />
7  10    </databases>
8  11    <units>
9  12      <unit name="T" value="C" />
10 13      <unit name="length" value="nm" />
11 14      <unit name="n" value="xi" />
12 15      <unit name="time" value="hour" />
13 16    </units>
14 17    <system name="Default_System">
15 18      <alloys>
16 19        <alloy name="Ni-14Al_RWN_SFPR" />
17 20      </alloys>
18 21    <components>
19 22      <component name="Al" status="Selected" />
20 23      <component name="Ni" status="Selected" />
21 24    </components>
22 25    <phases>
23 26      <phase name="" status="Suspended" />
24 27      <phase name="fcc" status="Entered" type="matrix" />
25 28      <phase name="L12_FCC" status="Entered" type="precipitate" />
26 29    </phases>
27 30    <points>
28 31      <point>
29 32        <statespace>
30 33          <n component="Al" value="14" />
31 34          <n component="Ni" value="86" />
32 35        </statespace>
33 36      </point>
34 37    </points>
35 38    </condition>

```

3.2.3 节小结

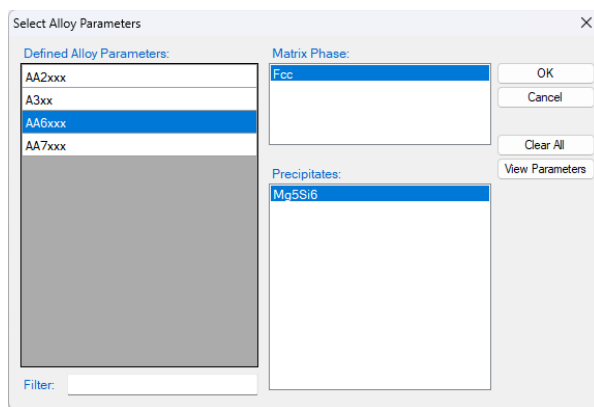
- 学习在需要考虑初始微观结构时设置计算条件
- 学习如何设置初始微观结构，如粒径，体积分数和粒子分布

3.2.4 等温时效后的硬度

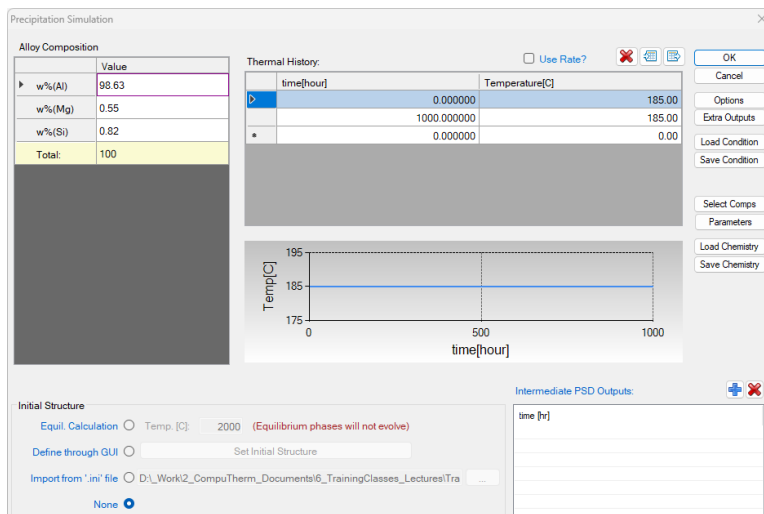


等温时效后 6005 铝合金的硬度是多少？

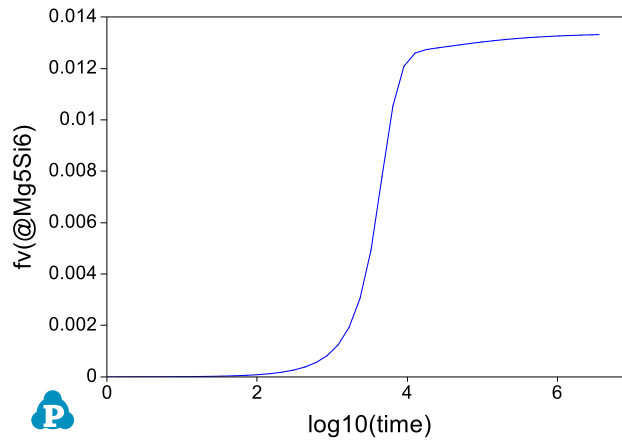
- 从菜单创建新项目 (*File* → *Add a New Project*)
- 单击工具栏上的 按钮，加载热力学和迁移率数据库 (AlMgSi.tdb)，并选择所有三个组元
- 单击工具栏上的 按钮，加载动力学参数数据库 (Al_Alloys.kdb)，选择 AA6xxx 合金，基体相为 Fcc，析出相为 Mg₅Si₆。



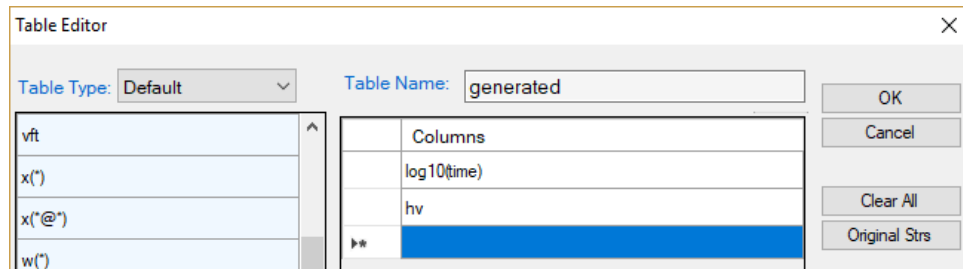
- 单击工具栏上的 按钮，设置计算条件如下，即 AA6005 的合金成分为 Al-0.55Mg-0.82Si(wt%)，合金在 185°C 下时效 1000 小时



- 默认图形是 Mg₅Si₆ 相的体积分数随时间的演变



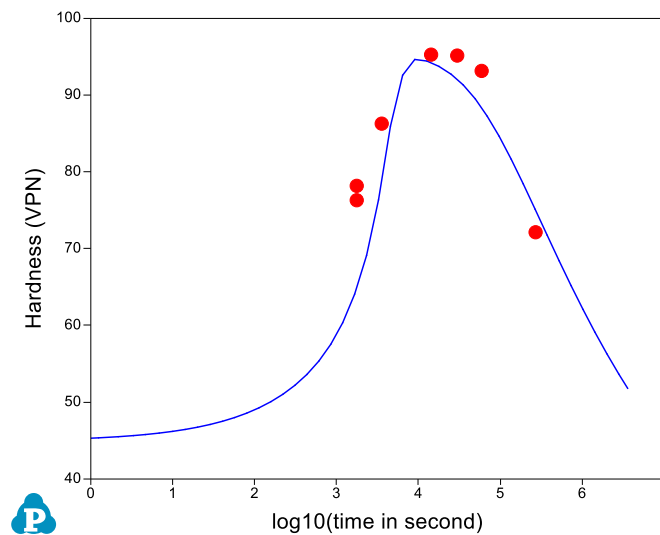
f. 如下所示，添加新表格



g. 从新表中选择产生的两列数据，并绘制硬度随时间的演变图

h. 右击工作空间管理窗口中的 Table 并选择 Import Table from File, 从工作目录中选择 *AA6005-hv_exp.dat*

i. 从导入的表格中添加实验数据



3.2.4 节小结

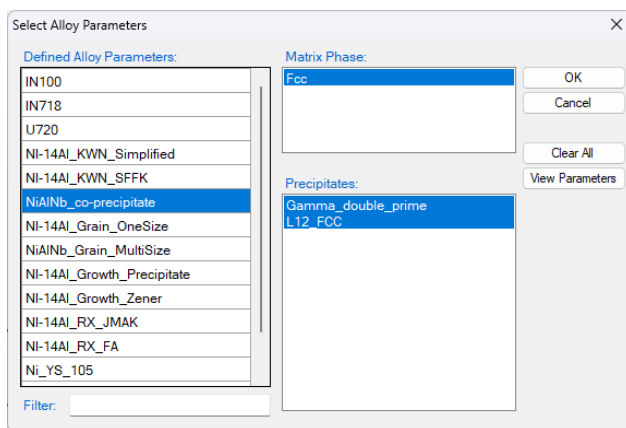
- 学习绘制硬度图形
- 学习在一个图形中添加实验数据

3.2.5 两相或多相同时析出




可以处理两相或多相同时析出吗？

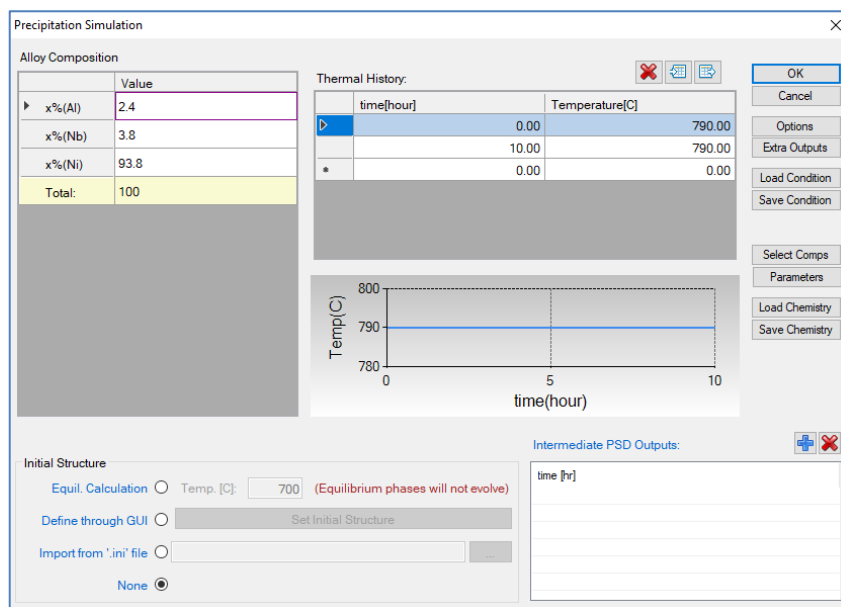
- 从菜单创建新项目 (*File → Add a New Project*)
- 加载热力学和扩散数据库: *NiAlNb_Pseudo.tdb* 和动力学参数数据库: *Ni-Alloys.kdb*, 选择合金参数为 “NiAlNb_co-precipitate”, 该组参数中有两个析出相。



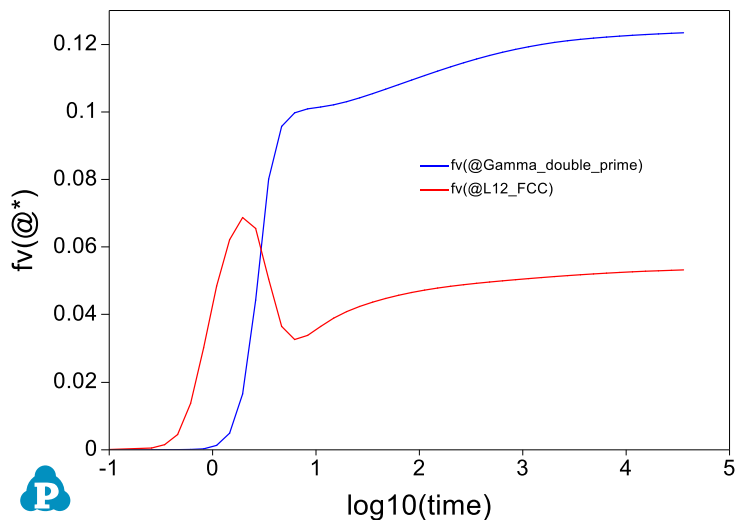
- 单击 打开 *Ni-Alloys.kdb* 文件, 在 `<Alloy name="NiAlNb_co-precipitate">` 下包含了该组合金体系的动力学参数

```
166 <Alloy name="NiAlNb_co-precipitate">
167   <MatrixPhase name="Fcc">
168     <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
169       <Parameter type="Molar_Volume" value="7.1E-6" description="The molar volume of the matrix phase [m^3/mole].">
170       </Parameter>
171     </ParameterTable>
172     <PrecipitatePhase name="L12_FCC" model="KWN" morphology="Sphere" nucleation="Modified_Homogeneous" growth="SFFK">
173       <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
174         <Parameter type="Molar_Volume" value="7.1E-6" description="The molar volume of the precipitate phase[m^3/mole]>
175         <Parameter type="Interfacial_Energy" value="0.04" description="Interfacial energy between the matrix and precipitate [J/m^2]>
176         <Parameter type="Nucleation_Site_Parameter" value="1E-3" description="Homogeneous: choose a value close to 1. Heterogeneous: choose a value close to 0.1.">
177         <Parameter type="Atomic_Spacing" value="3.621E-10" description="Usually use the lattice constant [m]."/>
178       </ParameterTable>
179     </PrecipitatePhase>
180     <PrecipitatePhase name="Gamma_double_prime" model="KWN" morphology="Sphere" nucleation="Modified_Homogeneous" growth="SFFK">
181       <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
182         <Parameter type="Molar_Volume" value="7.1E-6" description="The molar volume of the precipitate phase[m^3/mole]>
183         <Parameter type="Interfacial_Energy" value="0.08" description="Interfacial energy between the matrix and precipitate [J/m^2]>
184         <Parameter type="Nucleation_Site_Parameter" value="1E-3" description="Homogeneous: choose a value close to 1. Heterogeneous: choose a value close to 0.1.">
185         <Parameter type="Atomic_Spacing" value="3.621E-10" description="Usually use the lattice constant [m]."/>
186       </ParameterTable>
187     </PrecipitatePhase>
188   </MatrixPhase>
189 </Alloy>
```


d. 单击工具栏上的  按钮，并设置如下计算条件

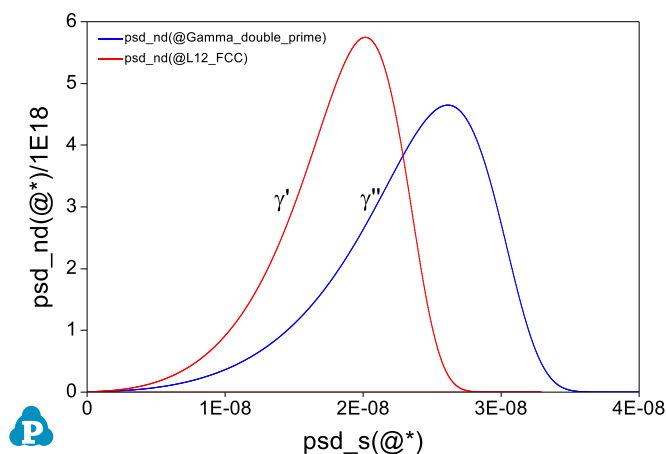





e. Default 图形是两个析出相的体积分数随时间演变

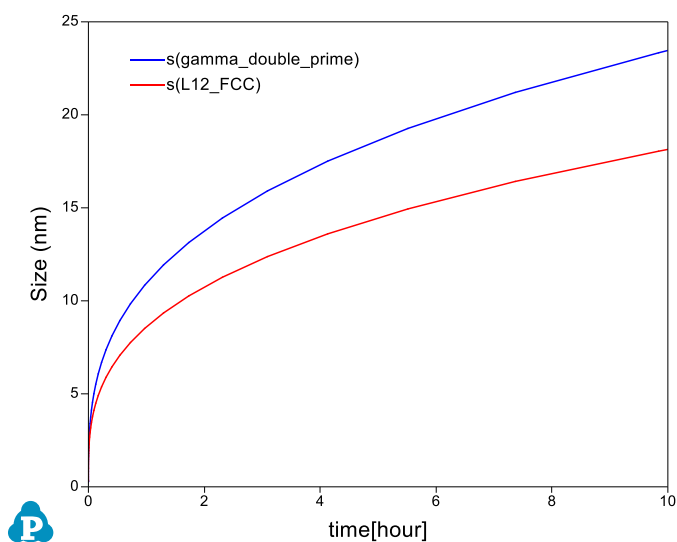


f. 从菜单中选择 Graph→Legend，在主显示窗口中，单击的图形以显示每条线的图例

g. 模拟完成后，将自动生成最终的 psd 表格和图形。双击“psd_10”图形打开 γ' 和 γ'' 相的 PSD



- h. 单击 , 在曲线上添加文本。键入 g 并突出显示, 然后单击  将其更改为符号 γ 。
- i. 双击 Table 下的 Default 打开默认表, 选择 **time** 作为 **x** 轴, 按<Ctrl>键选择 **s(@Gamma_double_prime)**和 **s(@L12_FCC)**作为 **y** 轴, 单击  绘制 γ' 和 γ'' 的尺寸随时间的演变曲线。



3.2.5 节小结

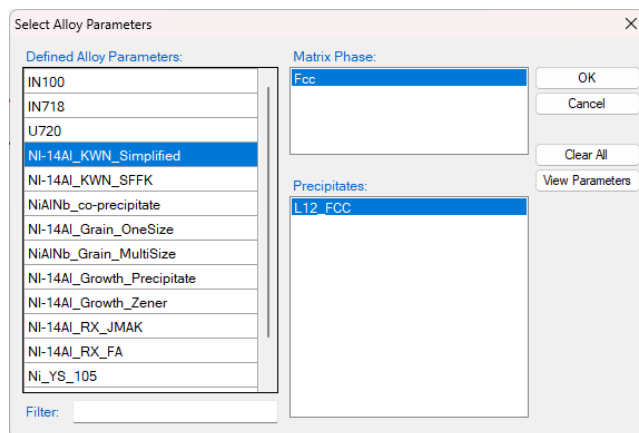
- 学习对体系中有两个或更多析出相的计算
- 学习将带有符号的文本加在图形上

3.2.6 TTT (时间-温度转变) 模拟

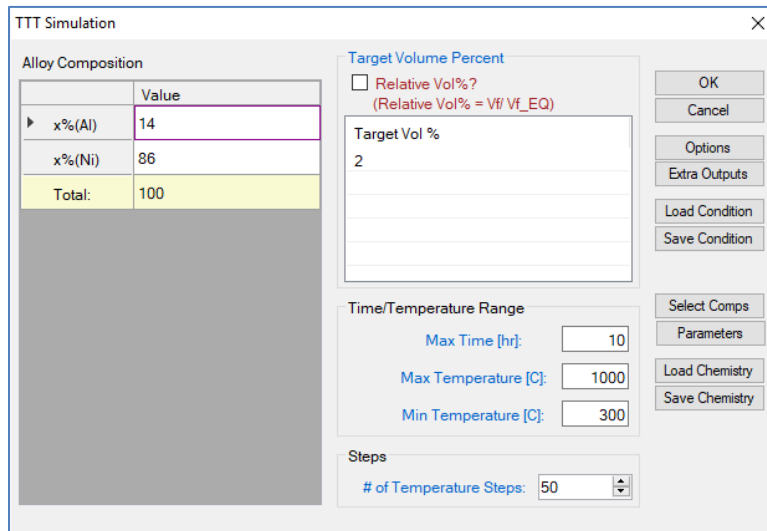


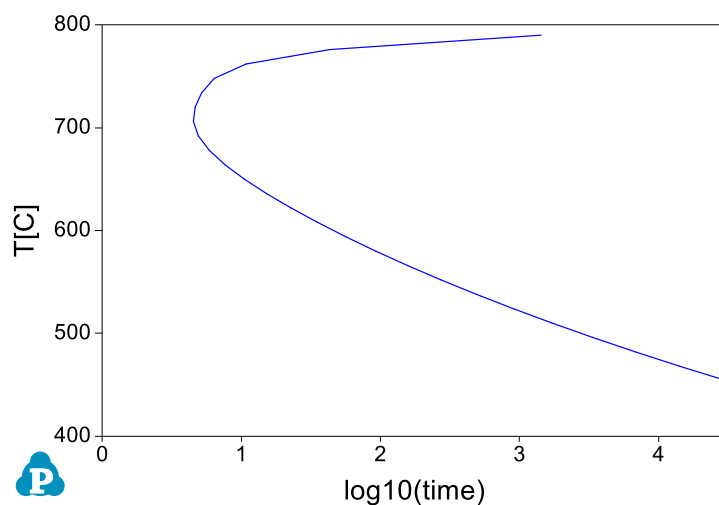
Ni-14Al (at%) 合金的 TTT 曲线是什么样的？

- 单击工具栏上的 按钮，加载热力学和迁移率数据库 (*AlNi_Prep.tdb*)，选择两个组元
- 单击工具栏上的 按钮，加载动力学参数数据库 (*Ni-Alloys.kdb*)，选择 *Ni-14Al_KWN_Simplified*，基体相为 Fcc，析出相为 L12_Fcc



- 从菜单中选择 PanEvolution/PanPrecipitation→TTT Simulation 或单击工具栏上的 按钮，设置模拟条件如下，合金化学成分为 Ni-14Al (at%)，默认 γ' 相的目标体积百分比 (Target Vol) 为 2%，最长时间 (Max Time) 为 10 小时，最高温度 (Max Temperature) 为 1000°C，然后单击 OK





- d. 从菜单中选择 PanEvolution/PanPrecipitation→TTT Simulation，设置如下的模拟条件，勾选“Relative Vol%”以设定 γ' 相的目标体积百分数是各个温度下平衡 γ' 相体积的 2%

Alloy Composition	
	Value
x%(Al)	14
x%(Ni)	86
Total:	100

Target Volume Percent

☒ Relative Vol%?
(Relative Vol% = V_f / V_f_{EQ})

Target Vol %
2

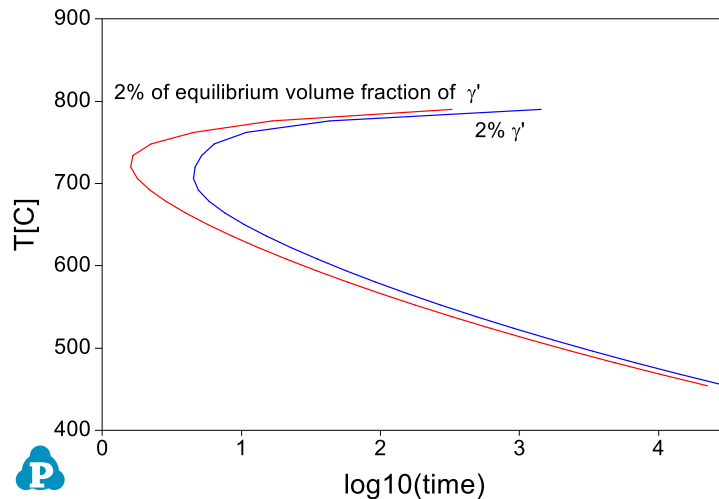
Time/Temperature Range

Max Time [hr]: 10
Max Temperature [C]: 1000
Min Temperature [C]: 300

Steps

of Temperature Steps: 50

- e. 单击 OK 进行另一个计算，将两个 TTT 曲线叠加在一起以对比

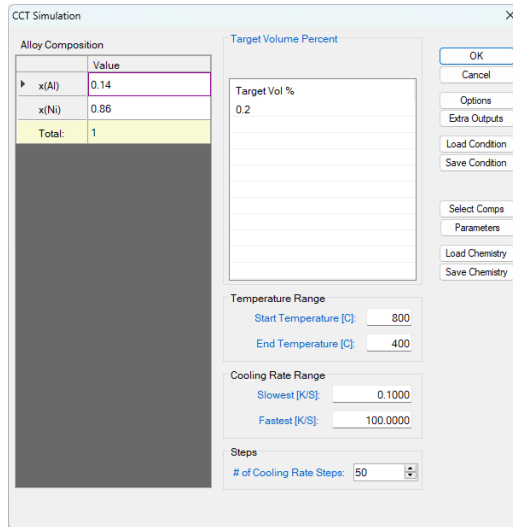


3.2.6 节小结

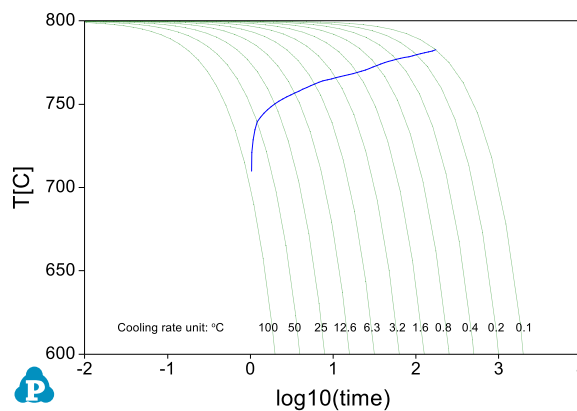
- 学习 TTT 曲线的模拟

3.2.7 CCT (时间-温度转变) 曲线模拟

- 单击工具栏上的  按钮，加载热力学和迁移率数据库 (*AlNi_Prep.tdb*)，选择两个组元
- 单击工具栏上的  按钮以加载动力学模型数据库 (*Ni-Alloys.kdb*)，在弹出的对话框中选择 *Ni-14Al_KWN_Simplified*，基体相为 Fcc，析出相为 L12_Fcc。
- 从菜单中选择 PanEvolution/PanPrecipitation→Precipitation Simulation 或单击工具栏上的  按钮，将计算条件设置如下：合金化学成分为 Ni-14Al (at%)，设置 γ' 相的目标体积百分比 (Target Vol) 为 0.2%，温度范围设置为开始温度为 800°C，结束温度为 400°C，冷却速率范围最慢 (Slowest[K/S]) 为 0.1 K/s，最快 (Fastest[K/S]) 为 100 K/s，然后,点击 OK



- d. 修改温度和时间范围。将光标放在每条绿色的冷却曲线上，然后按 F2 添加冷却速率值，调节位置和数值的小数点位数。获得如下图所示 CCT 图，其中绿线为冷却速率曲线，蓝线为 CCT 曲线。



3.2.6 节小结

- 学习 CCT 曲线的模拟

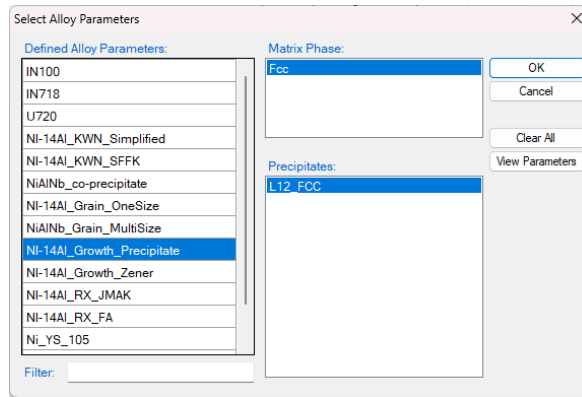
3.2.8 晶粒长大和析出模拟




如何模拟晶粒长大与析出同时发生的过程？

- a. 单击工具栏上的 按钮以加载组合的热力学和迁移率数据库（AlNi_Prep.tdb），并选择两个组元

- b. 单击工具栏上的  按钮，加载动力学参数数据库 (*Ni-Alloys.kdb*)，选择 *Ni-14Al_Growth_Precipitate*，基体相为 Fcc，析出相为 L12_Fcc




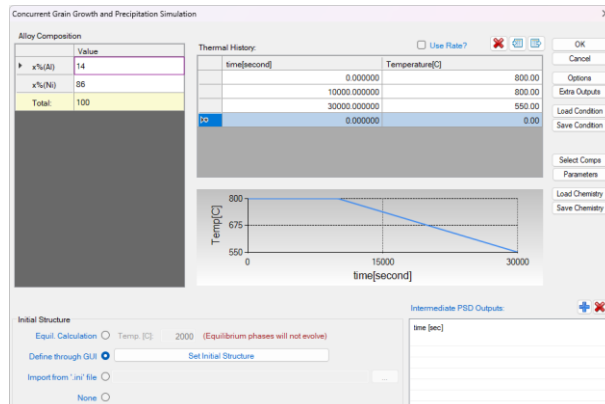
- c. 单击  打开 *Ni-Alloys.kdb*，在 `<Alloy name="Ni-14Al_Growth_Precipitate">` 下包含了该组合金体系的动力学参数，这组参数中包含了基体相（**Matrix Phase**），晶粒（**Grain**）和析出相（**PrecipitatePhase**）。

```

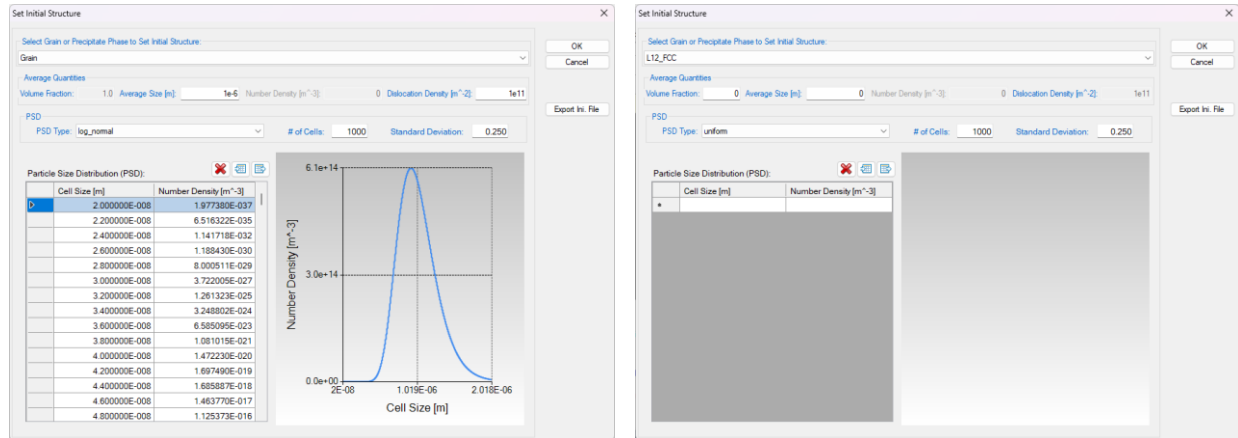
230 <Alloy name="Ni-14Al_Growth_Precipitate">
231 <!-- Kinetic Database for Grain Growth and Precipitation simulation in PanEvolution module-->
232 <MatrixPhase name="Fcc">
233   <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
234     <Parameter type="Molar_Volume" value="7.1E-6" description="The molar volume of the matrix phase [m^3/mol]">
235   </ParameterTable>
236   <Grain name="Fcc" model="Grain_OneSize" morphology="Sphere" nucleation="N/A" growth="Grain_Simplified">
237     <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
238       <Parameter type="Interfacial_Energy" value="0.75" description="High angle grain boundary energy[J/m^2]">
239       <Parameter type="Grain_Boundary_Width" value="2.86E-10" description="Grain boundary width [m]. A suggested value is 2.86E-10 m.">
240     </ParameterTable>
241   </Grain>
242   <PrecipitatePhase name="L12_Fcc" model="KWN" morphology="Sphere" nucleation="Modified_Homogeneous" growth="Grain_Simplified">
243     <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
244       <Parameter type="Molar_Volume" value="7.1E-6" description="The molar volume of the precipitate phase [m^3/mol]">
245       <Parameter type="Interfacial_Energy" value="0.033" description="Interfacial energy between the matrix and precipitate [J/m^2]">
246       <Parameter type="Nucleation_Site_Parameter" value="0.01" description="Homogeneous: choose a value close to 1.0. Heterogeneous: choose a value close to 0.01.">
247       <Parameter type="Atomic_Spacing" value="3.621E-10" description="Usually use the lattice constant [m]">
248     </ParameterTable>
249   </PrecipitatePhase>
250 </MatrixPhase>
251 </Alloy>

```

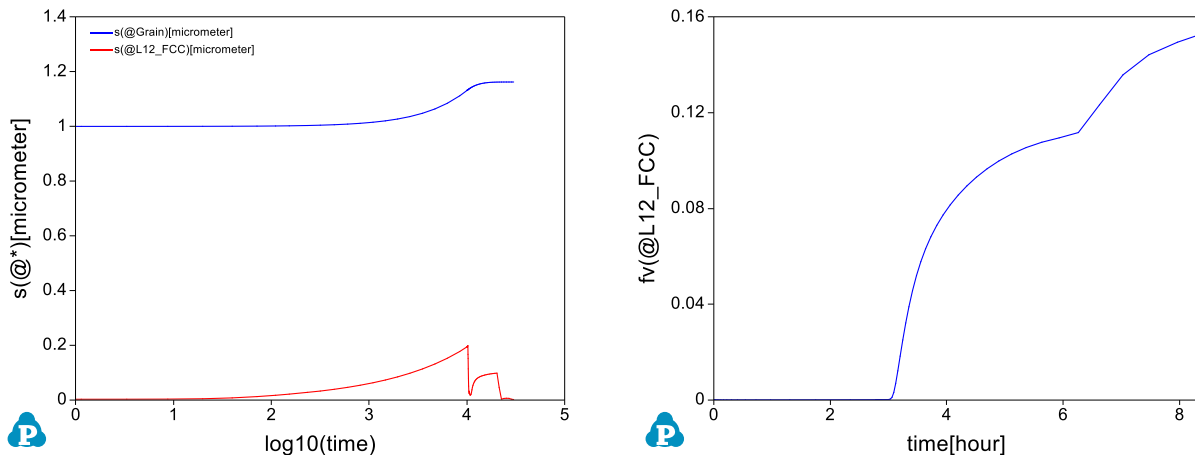
- d. 从菜单中选择 *PanEvolution/PanPrecipitation* → *Concurrent Grain and Precipitation* 或单击工具栏上的  按钮，将计算条件设置如下，在 800°C 下时效 10000s，然后经过 20000s 后缓慢降温至 550°C（相当于冷却速率为 0.0125°C/s）。选择“Define through GUI”设置初始结构。



- e. 点击“Set Initial Structure”，设置初始结构如下：首先选择 Grain；平均尺寸为 $1\text{e-}6\text{m}$ ，PSD Type 选择 log_normal；# of Cells 和 Standard Deviation 保留默认的 1000 和 0.025。然而选择析出相 L12_Fcc，设置体积分数为 0，即初始结构中没有析出相。



- f. 设置好热处理条件和初始结构条件后，点击 OK 开始进行计算模拟。默认的结果图为晶粒和析出相尺寸随时间的变化关系，如下面左图所示。双击 Default 表格，选择 time[hour]为 x 轴，按住 CTRL 键，选择析出相体积分数 $f_v(@L12_Fcc)$ 为 Y 轴，绘制析出相体积分数随时间的演变规律图，如下面右图所示。



3.2.8 节小结

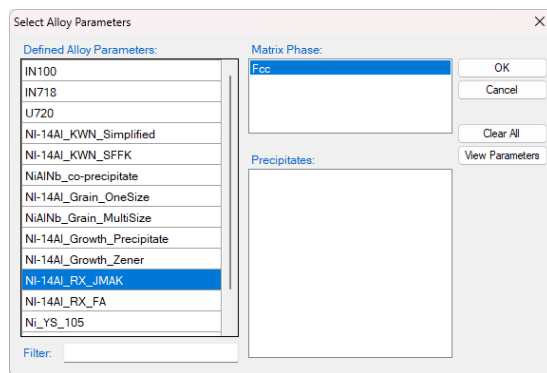
- 学习了如何模拟晶粒长大与析出同时发生的过程

3.2.9 动态再结晶模拟




如何模拟热加工过程发生了动态再结晶的应力-应变曲线?

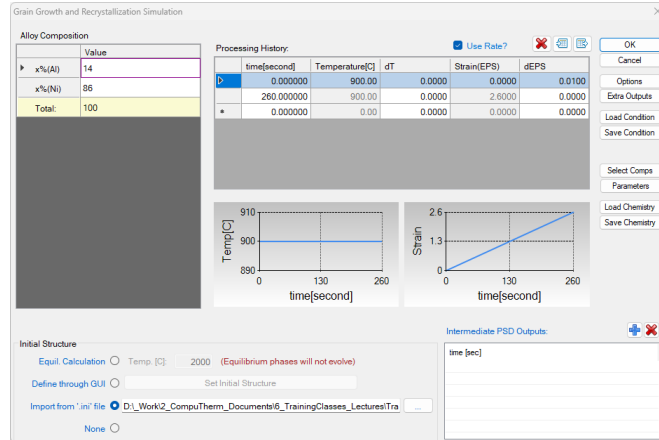
- 单击工具栏上的 按钮以加载组合的热力学和迁移率数据库 (AlNi_Prep.tdb)，并选择两个组元
- 单击工具栏上的 按钮，加载动力学参数数据库 (Ni-Alloys.kdb)，选择 Ni-14Al_RX_JMAK，基体相为 Fcc，该模拟过程未考虑析出相的影响。



- 单击 打开 Ni-Alloys.kdb，在 `<Alloy name="Ni-14Al_RX_JMAK">` 下包含了该组合合金体系的动力学参数。最外层参数为基体相 (*MatrixPhase*)，包含了晶粒 (*Grain*) 和位错密度 (*Dislocation_Density*) 两个子目录，在 *Grain* 的子目录下，定义了原始晶粒 Fcc 和再结晶晶粒 RX_Fcc 的相关参数。位错密度模型采用 Kocks_Mecking 模型，在 *Dislocation_Density* 子目录下定义相关的参数。

```
277 | <Alloy name="Ni-14Al_RX_JMAK">
278 | <!-- Kinetic Database for recrystallization(RX) simulation using the JMAK model in PanEvolution module-->
279 | <MatrixPhase name="Fcc">
280 |   <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
281 |     <Parameter type="Molar_Volume" value="7.1E-6" description="The molar volume of the matrix phase [m^3/
282 |   </ParameterTable>
283 |   <ParameterTable name="mechanical" type="mechanical">
284 |     <Parameter type="Intrinsic_Strength" value="0" description="The baseline contribution including latti
285 |     <Parameter type="Shear_Modulus" value="(86.94-0.027*T)*1e9" description="The shear modulus of the mat
286 |     <Parameter type="Burgers_Vector" value="0.254e-9" description="The Burgers vector of the matrix phase
287 |     <Parameter type="Taylor_Factor" value="3.06" description="The Taylor factor of the matrix phase." />
288 |   </ParameterTable>
289 |   <Grain name="Fcc" model="Grain_MultiSize" morphology="Sphere" nucleation="N/A" growth="Grain_Simplified
290 |   <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
291 |     <Parameter type="Interfacial_Energy" value="0.5" description="High angle grain boundary energy[J/m^
292 |     <Parameter type="Grain_Boundary_Mobility_Factor" value="10" description="A pre-factor to adjust gra
293 |   </ParameterTable>
294 |   <Recrystallization name="RX_Fcc" phase_name="Fcc" model="JMAK" morphology="Sphere" nucleation="" grow
295 |   <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
296 |     <Parameter type="Avrami_Exponent" value="1.261e5*((Grain_Size_0*1e6)^0.036)*((strain_rate*exp(422
297 |     <Parameter type="time_half" value="strain_rate^-0.9" description="The time for 50% RX for JMAK."
298 |     <Parameter type="Nucleation_Site_Parameter" value="0.01" description="Homogeneous: choose a value
299 |   </ParameterTable>
300 |   <VariableTable name="user-defined variables" type="">
301 |     <Parameter type="Critical_Grain_Size_RX" value="1e-6*737.151*((Grain_Size_0*1e6)^0.329)*((strain_
302 |   </VariableTable>
303 |   </Recrystallization>
304 | </Grain>
305 | <Dislocation_Density name="Fcc" model="Kocks_Mecking">
306 |   <ParameterTable name="kinetic" type="kinetic">
307 |     <Parameter type="f_WH" value="3.25*1.41e7*(Grain_Size_0*2)^0.3522283*((strain_rate*exp(450000/Rg/T)
308 |     <Parameter type="f_DRV" value="1.5*75*((max(1e-10, strain_rate)*exp(450000/Rg/T))^~0.035)* descript
309 |     <Parameter type="f_RX" value="0.3 * 3.25*1.41e7*(Grain_Size_0*2)^0.3522283*((strain_rate*exp(450000
310 |   </ParameterTable>
311 | </Dislocation_Density>
312 | </MatrixPhase>
313 | </Alloy>
```

- d. 从菜单 PanEvolution/PanPrecipitation → Grain Growth/Recrystallization 或单击工具栏中  按钮，设置计算条件如下：合金成分为 Ni-14Al。在 Processing History 中设置中，勾选 Use Rates，设置加工温度为 900°C，应变速率 dEPS 为 0.01，时间为 260 秒。初始结构选择 “Import from ‘ini’ file”。



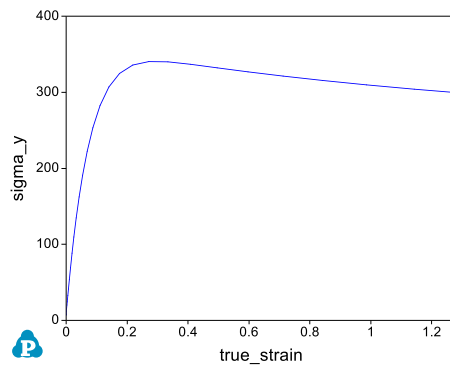
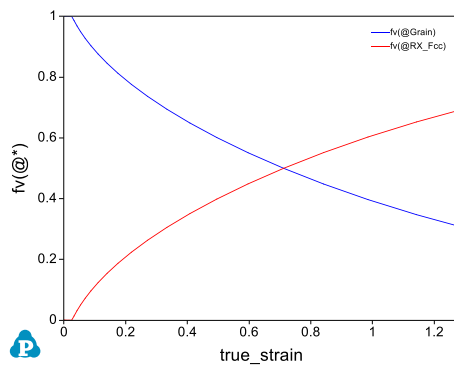
- e. 导入提供的初始结构文件 *Al-Ni.ini*。初始结构条件包括晶粒尺寸（size），相的摩尔分数（volume fraction），位错密度（dislocation density）和尺寸分布（size_distribution）等。

```

9 <Condition name="C1">
10
11 <MatrixPhase name="Fcc">
12 <Grain name="Fcc">
13 <Parameter name="size" value="75e-6" description="average size" />
14 <Parameter name="volume fraction" value="1" description="volume fraction" />
15 <Parameter name="dislocation density" value="1e11" description="dislocation density" />
16 <Parameter name="size_distribution" value="2" number_cells = "1000" sigma="0.3"
17 <Grain >
18 </MatrixPhase >
19 </Condition>
20

```

- f. 设置好热加工条件和初始结构条件后，点击 OK 开始进行计算模拟。默认的模拟结构将绘制两个图，第一个图为再结晶分数随真应变的变化规律，第二个图为合金的真应力-应变曲线图。



3.2.9 节小结

- 学习了如何模拟热加工过程的动态再结晶
- 学习了如何模拟热加工过程中的真应力-应变曲线。