PANDAT™ 2024

培训教程

凝固模块(PanSolidification)

版权 © 2000-2024 CompuTherm 有限责任公司

目　　录

目　　录 i

第 V 部分： PanSolidification 凝固模块 1

5.1　加载数据库并选择组元 1

5.2　凝固模拟教程 3

5.2.1 Mg-9Al 合金凝固过程 3

5.2.2 Al-Mg-Si 合金热裂倾向计算 9

5.2.3 利用高通量计算 Al-Mg-Si 合金在富 Al 角的热裂敏感指数图 12

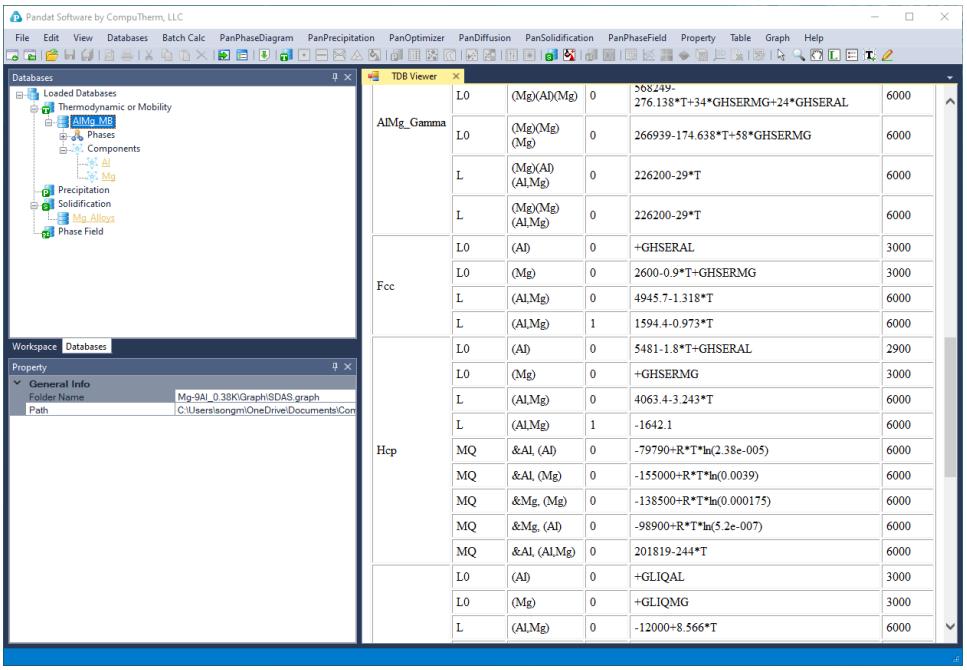
第 V 部分：凝固模块(PanSolidification)

5.1 加载数据库并选择组元

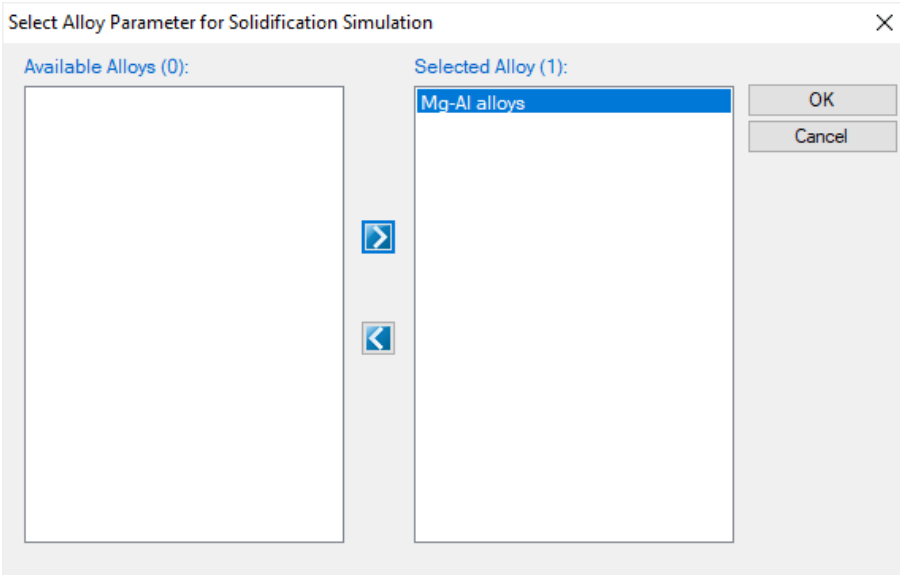
在执行任何凝固模拟之前必须先加载包括热力学模型参数和迁移率模型参数的组合数据库（PDB 或 TDB），以及管理凝固动力学模型参数的 SDB 文件。

a. 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 *PanSolidification* 模块。

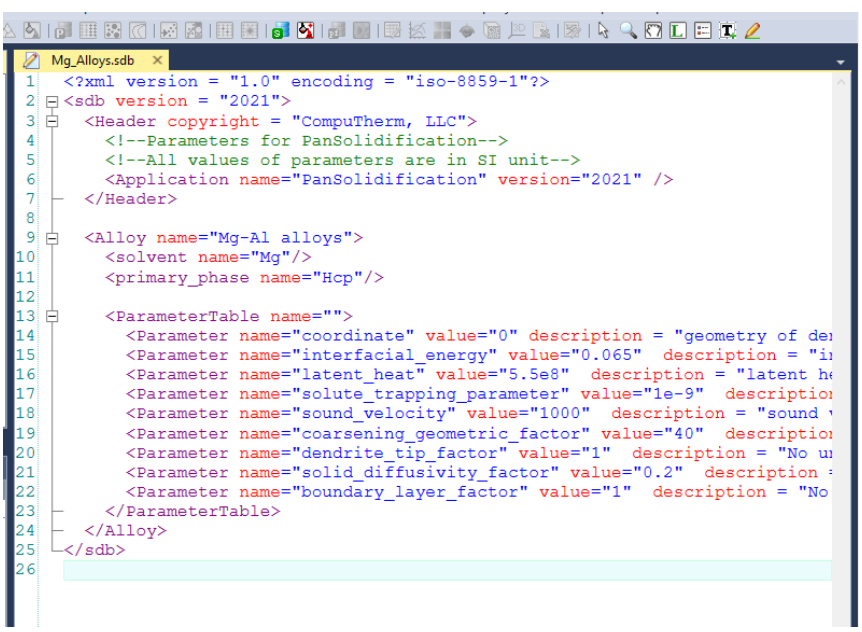
b. 单击工具栏图标，或使用菜单 *Database→Load TDB or PDB (Encrypted TDB)* 加载包含热力学模型参数和迁移率模型参数组合的数据库。如 *AlMg_MB.tdb* 所示，MQ 表示迁移率模型参数。



c. 单击工具栏 或从菜单中选择 *PanSolidification→Load SDB*，加载凝固动力学模型参数文件，选择 sdb 文件中对应的合金体系参数。



d. 使用菜单(*File → Open File*)或单击按钮以文本格式打开 SDB 文件。例如，*Mg_Alloys_Tutorial.sdb* 展示 SDB 文件的格式。在该文件中，定义了合金体系，以及针对该合金体系的参数，比如 interfacial_energy, latent_heat, solute_trapping_parameter, coarsening_geometric_factor, solid_diffusivity _factor 等与凝固过程相关的参数。用户可以根据不同的合金体系，以及特殊的凝固工艺对该文件中的参数进行修改和保存。如果修改参数，则需要再次加载此文件。



5.2 凝固模拟教程

下面将利用 Mg-Al 二元体系和 Al-Mg-Si 三元体系为例来进行凝固模拟。凝固模块可以模拟多组元体系的凝固过程。Pandat 演示版仅适用于三元以下体系。

5.2.1 Mg-9Al 合金凝固过程

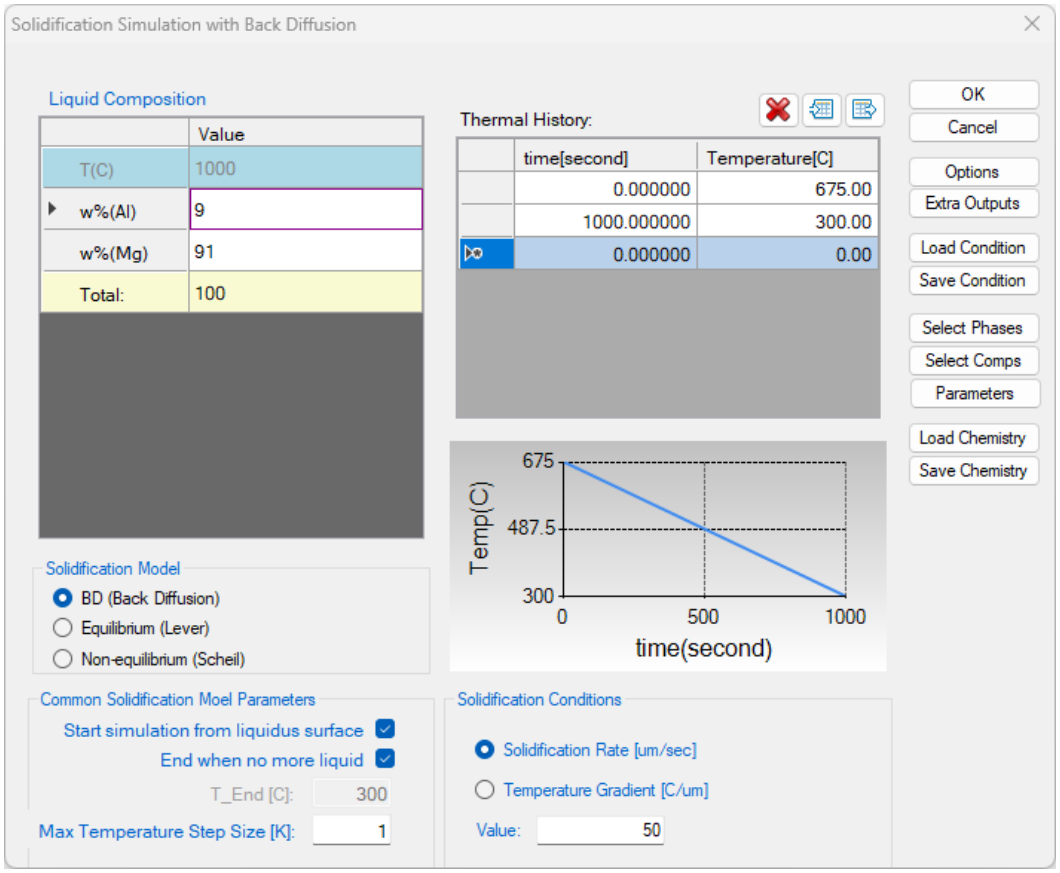
考虑了固相反扩散的 Mg-9wt.%Al 合金的凝固行为与 Scheil 模型，平衡杠杆定律有什么不同？

4.2.1.1 考虑固相反扩散合金的凝固

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（AlMg_MB.tdb），并选择两个组元 Al 和 Mg。

b. 单击工具栏上的 按钮加载凝固动力学参数 sdb 文件（*Mg_Alloys_Tutorial.sdb*）

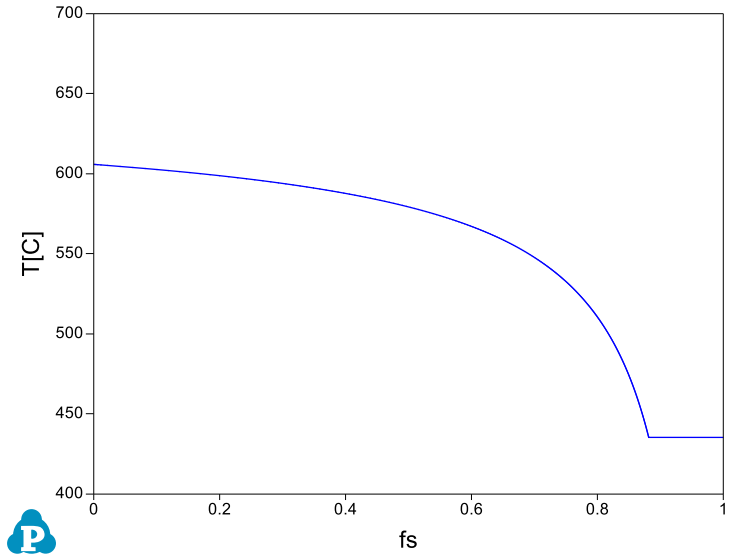
c. 从菜单中选择 *PanSolidification*→*Solidification Simulation with Back Diffusion* 或单击工具栏上的按钮，将计算条件设置如下，选择凝固模型**(Solidification Model)**为 **BD (Back Diffusion)**，这是考虑固相中反扩散的凝固模拟。另外，**Equilibrium (Lever)**和 **Non-Equilibrium(Scheil)**分别对应的是平衡杠杆定律和 **Scheil** 模型的凝固模拟。通过 “Thermal History” 将冷却速度设置为 0.375 K/s，即在 1000 秒内从 675°C 冷却到 300°C。凝固速率（“Soildification Rate”）设置为 50 μm/sec. (注意: Thermal History 用于设置冷却速度，不一定要对应实际的凝固温度区间。如下图中设置条件表示冷却速度为 375°C/1000s 即 0.375 °C/s， 并不是指凝固从 675°C 开始，软件会从液相开始自动寻找凝固开始的温度，即合金的液相线温度。)



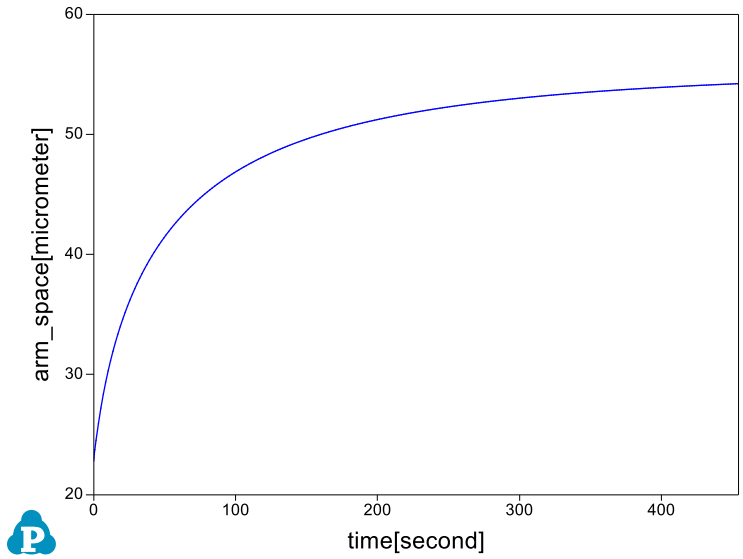
d. 此处要特别注意当前所使用的单位，包括时间单位、长度、成分和温度的单位，通过 **Options 按钮**里面的菜单来设置单位。

e. 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。

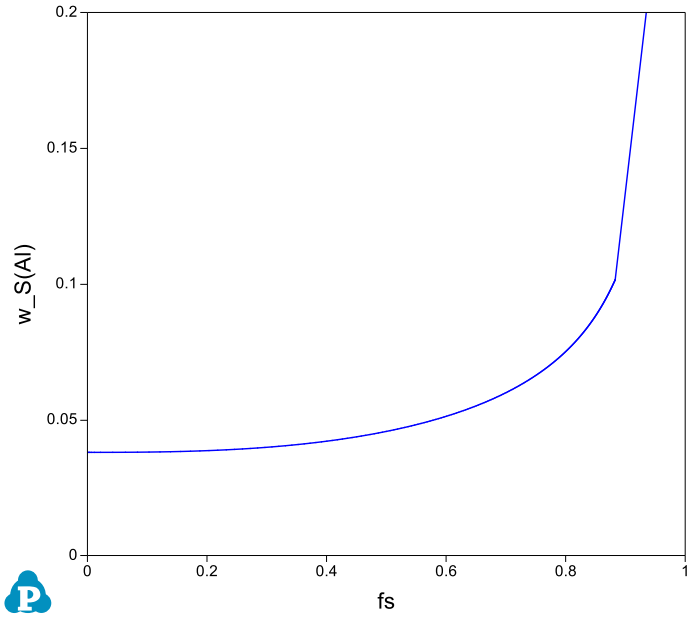
f. 单击 ***OK*** 开始 Mg-9Al 合金的凝固模拟。默认图是固相分数随温度的变化曲线如下



g. 双击打开 Default 表格，选择 **time**（second），然后按<Ctrl>选择 **arm_space**（millimeter），可以将 arm_space 的单位修改为 micrometer，然后单击 按钮绘制凝固过程中二次枝晶臂间距随时间的变化。



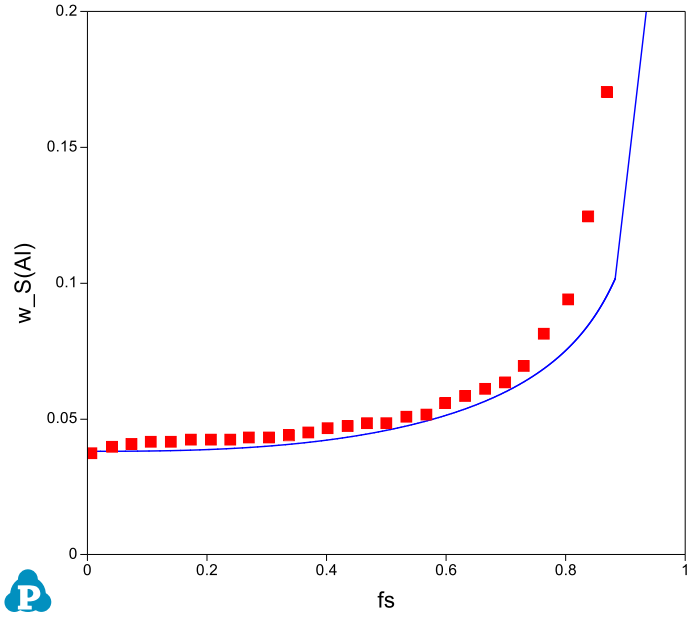
h. 双击打开 Default 表格，选择 fs，然后按<Ctrl>选择 **w_S(Al)**，该参数代表固相中 Al 的质量分数。然后单击 按钮绘制凝固过程溶质原子 Al 的偏析情况，修改范围为 **w_S(Al)**从 0-0.2，如下图所示：



i. 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 Mg-9Al_Tutorial.txt。

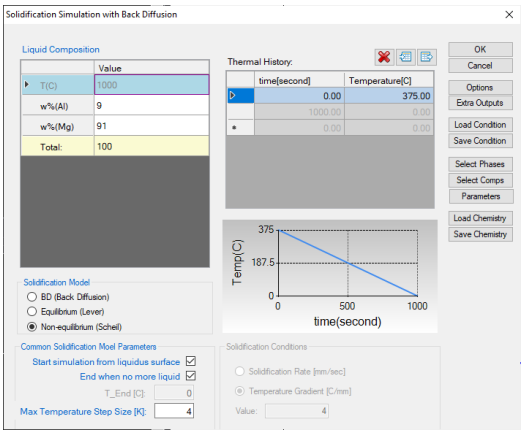
j. 双击上图，在主窗口打开上面的 w_S(Al)-fs 图，然后在单击 Table 目录下刚才导入的 *Mg-9Al_Tutorial.txt* 表格，在属性窗口中，将 **fs** 拖动到主显示窗口，然后按<Ctrl>并将 **wAl** 拖到主显示窗口中。

k. 在属性窗口的 Plot Property 下，选择 Plot Type 为 Point 而不是 Line。

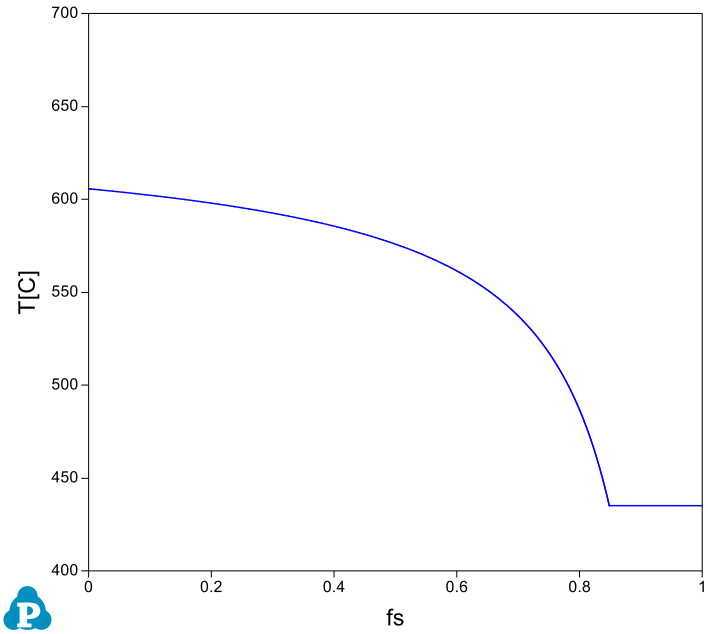


4.2.1.2 与 Scheil 模型凝固结果对比

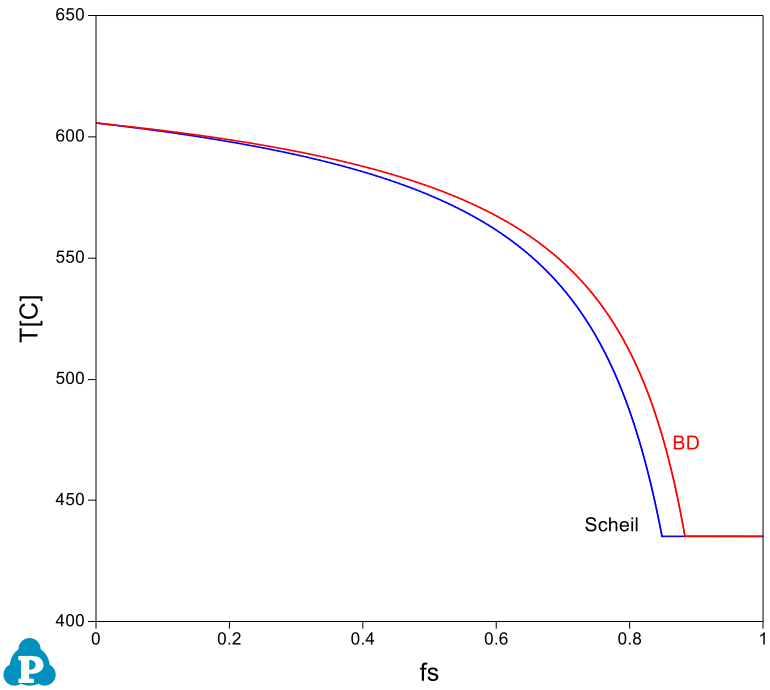
l. 单击工具栏上的按钮，选择凝固模型为 **Non-Equilibrium(Scheil)**。



m. 在 Scheil 模型下，则不需要设置冷却速率和温度梯度，因此，Thermal History 和 Solidification condition 部分均为灰色。点击 OK, 开始凝固计算，计算结果如下图：

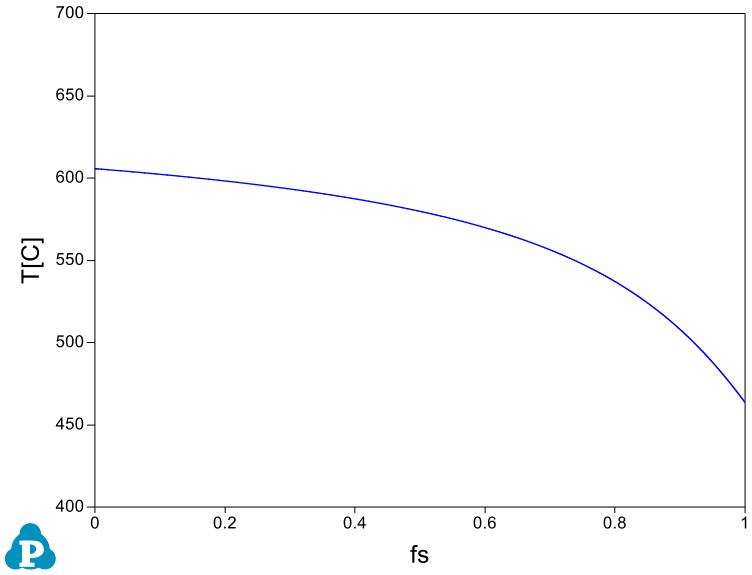


n. 右键单击鼠标并选择 *Copy Data*，然后打开上面由 BD 模型计算的图，右键单击鼠标并选择 *Paste Data*，便可以对比两个模型计算的结果。

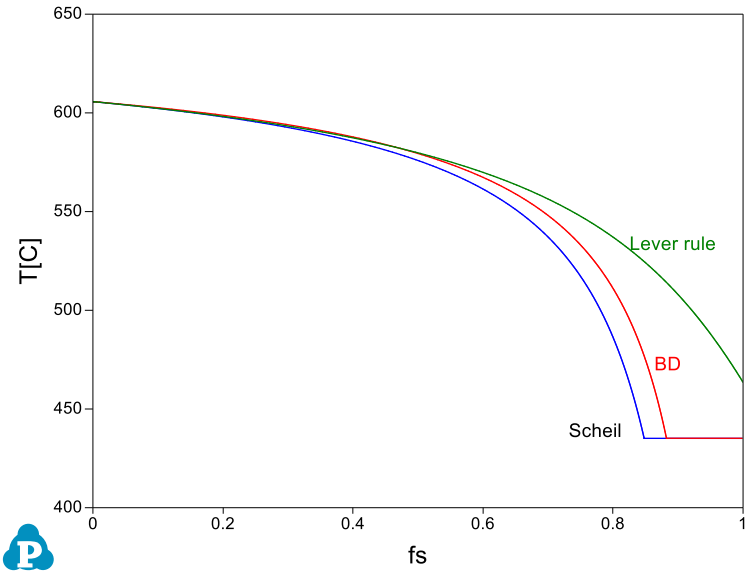


4.2.1.3 与平衡杠杆定律凝固结果对比

o. 单击工具栏上的按钮，选择凝固模型为 **Equilibrium(Lever)**,然后点击 OK， 计算得到结果如下图。



p. 点击鼠标右键，copy data, 然后再打开在 BD 条件下模拟的 fs-T 图，点击鼠标右键 paste data。获得三种不同条件下的凝固模拟结果如下图所示



5.2.1 小结

- 学习使用凝固模块下不同模型模拟凝固过程.
- 学习如何比较不同模型模拟结果

5.2.2 Al-Mg-Si 合金热裂倾向计算

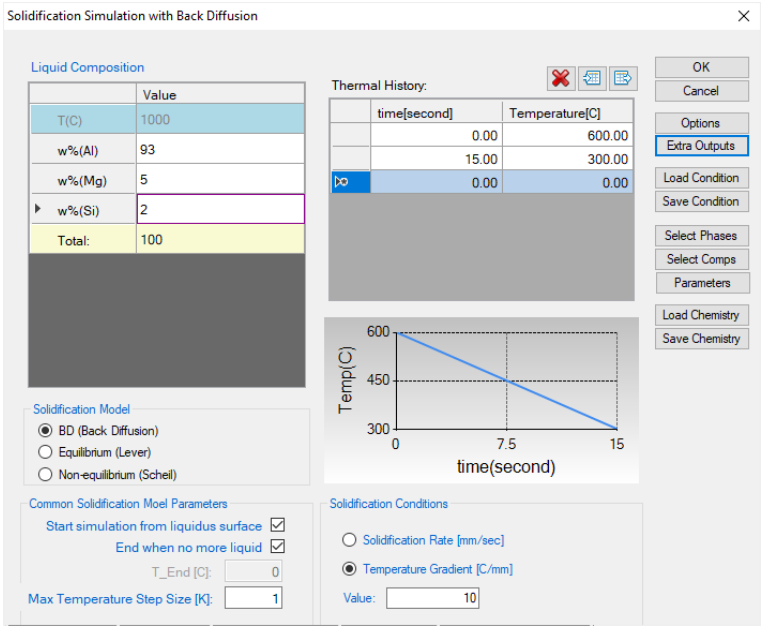
合金热裂敏感指数的计算？

背景：热裂敏感指数定义为$|dT/d(f_s)^{1/2}|$在 $f_s^{1/2} < 0.99$ 处的最大值。

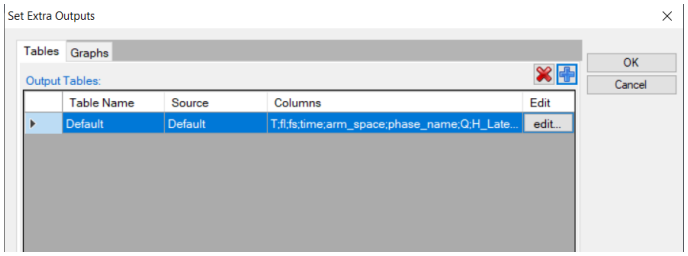
a. 单击工具栏上的按钮以加载组合的热力学和迁移率数据库（*AlMgSi.tdb*），

b. 单击工具栏上的 按钮以加载凝固动力学参数 sdb 文件（*Al_Alloys_Tutorial.sdb*）

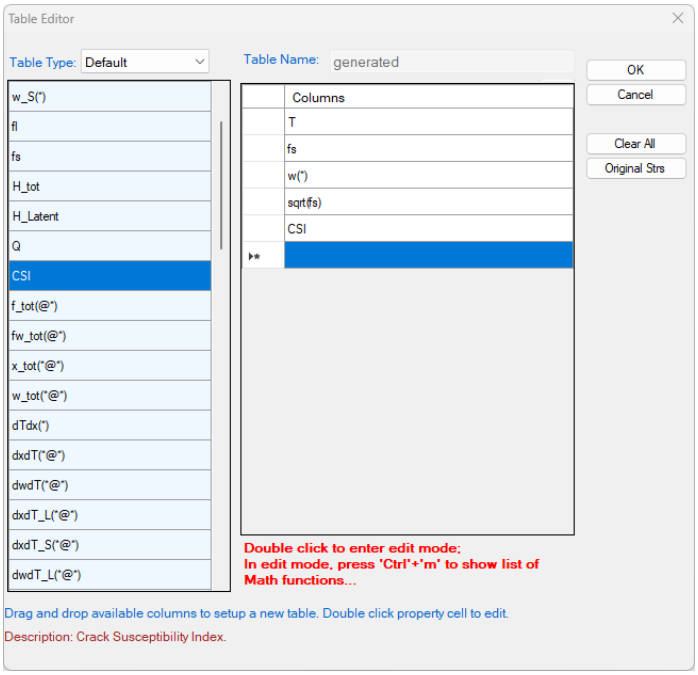
c. 设置凝固模拟条件；合金成分为 Al-5wt.%Mg-2wt.%Si, 选择凝固模型 **(Solidification Model)**为 **BD (Back Diffusion)**。热历史（Thermal History）中设置的冷却速率为 20 K/s。温度梯度（“Temperature gradient”）设置为 10 K/mm。设置条件时，请注意时间和长度的单位。



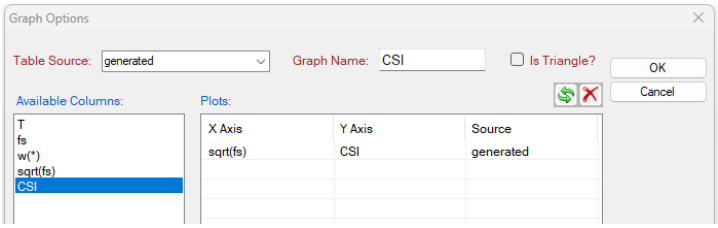
d. 设置“Extra Outputs table”。单击上中的“Extra Outputs”，将出现如下图所示的新界面。



e. 单击上图中的蓝色“+”符号，弹出表格 Table Editor，如下图所示。在此表编辑器中，用户可以指定并键入要输出的属性，例如本例中选择 T，fs，w(*)，sqrt(fs)和 CSI。其中 CSI 是热裂敏感因子，在 Pandat2022 之前版本可以采用“-T//sqrt(fs)”代替，指-dT/d(fs)$^{1/2}$，在 Pandat 软件语法//表示中是微分。请注意，使用此设置，除默认(Default)表外，还将创建一个名为“generated”的表格。当然，用户也可以在 Table Name 中输入自己定义的表格名字。点击 OK 后，返回至“Set Extra Option” 界面。

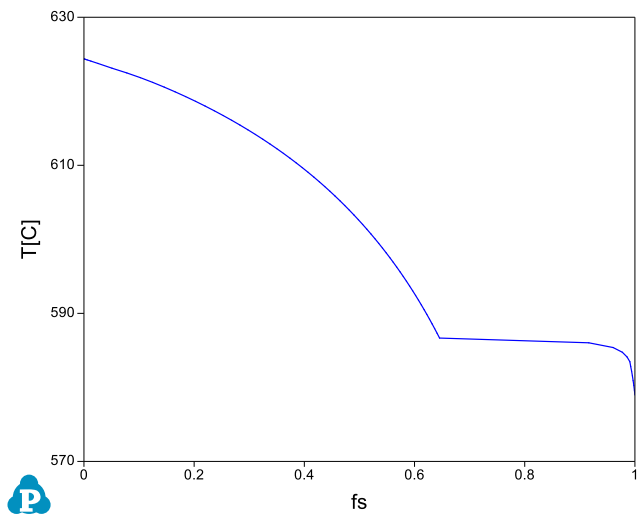


f. 点击 Set Extra Option 界面中的 Graph 的菜单， 再单击图中的蓝色“ +”符号，将出现添加 Graph 的界面，如下图所示。在 Table Source 的下拉菜单中选择刚才添加的“generated”表格，在 Available Columns 中将出现对应的性质。选择 sqrt(fs)，鼠标左键拖至 plots 下面的 X Axis； 然后将 CSI，用鼠标左键拖至 plots 下面的 Y Axis。 点击 OK.

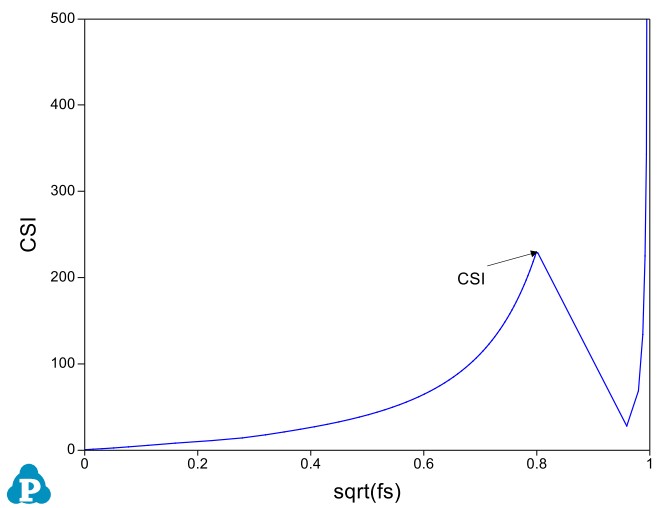


g. 点击 OK, 返回至“Extra Outputs table”窗口，再点击 OK， 返回至设置条件窗口。再点击 OK， 便开始进行凝固模拟。计算完成后将生成两个图。

h. 系统默认生成的固相分数与温度关系图如下所示



i. 通过由 Extra Graph 设置从 generated Table 中数据得到热裂敏感指数曲线图。当 sqrt(fs)<0.99 时对应的 CSI 值即为该合金的 CSI 值。



5.2.2 小结

- 学习使用凝固模拟来计算合金的热裂敏感指数（CSI）值.
- 学习如何使用添加新的表格和图形

5.2.3 利用高通量计算 Al-Mg-Si 合金在富 Al 角的热裂敏感指数图

如何使用 Pandat 的高通量计算来分析合金元素对热裂敏感指数影响，以及绘制热裂敏感指数图？

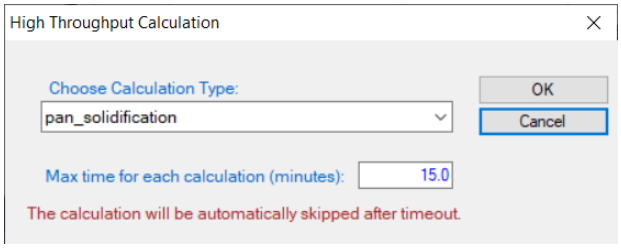
a. 单击工具栏 按钮来创建新的工作空间，建议用户在每次高通量（HTC）计算时开始一个新的独立的工作空间。

b. 单击工具栏 按钮以加载组合的热力学和迁移率数据库（*AlMgSi.tdb*），

c. 单击工具栏 按钮以加载凝固动力学参数 sdb 文件（*Al_Alloys_Tutorial.sdb*）

d. 启动 HTC 功能：Batch Calc → High Throughput Calculation (HTC)；

e. 从 HTC 弹出窗口的下拉列表中选择计算类型，然后选择“ pan_solidification”，如下图所示，点击 OK。



f. 设置 HTC 计算条件(如下图所示，注意设置条件中的单位)：

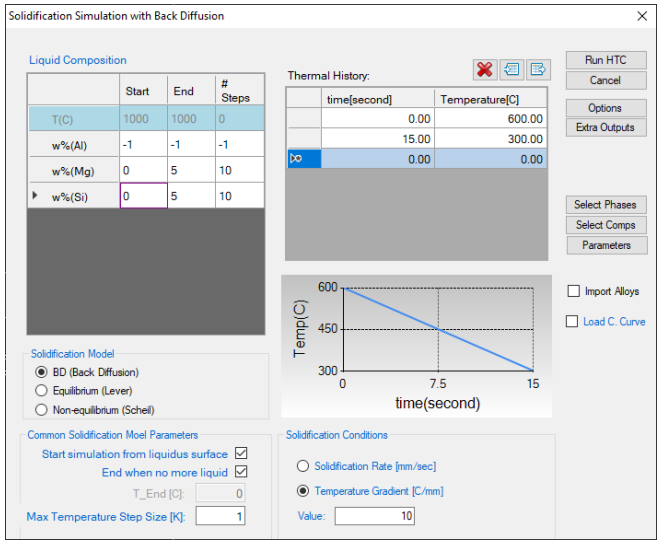
成分范围（liquid composition）: w%Mg, 0-5 #Step 10; w%Si, 0-5, #Step 10; 即 Mg 和 Si 的成分在 0-5%之间平均分为 10 步，成分间隔为 0.5%。然后鼠标右击 Al 的成分区域设置为余量，软件显示为-1.

凝固模型（solidification model）：BD（Back Diffusion）-反扩散模型。

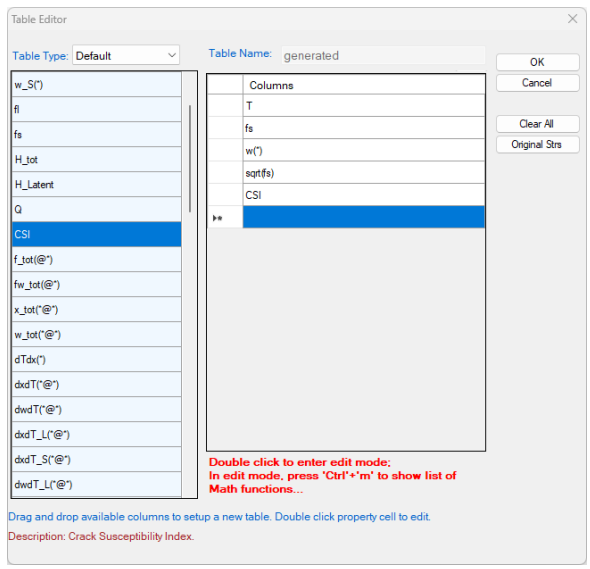
勾选 Start simulation from liquidus surface 和 End when no more liquid：指从凝固模拟温度范围为液相线温度到固相线温度。

热历史（Thermal History）： 600°C 到 300°C，时间 15 秒；代表冷却速率为 20 °C/s（注意这里仅代表冷却速率，不是指从 600°C 到 300°C 的凝固过程）。

凝固条件（Solidification Conditions）：温度梯度(Temperature Gradient) =10°C/mm。



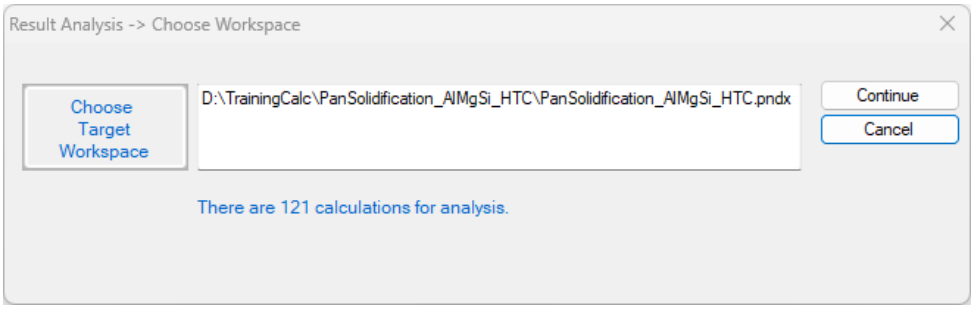
g. 点击上面界面中的“Extra Outputs”，定义额外输出量：时间；T –温度；w(*)–合金成分；fs –固相分数；sqrt(fs)–固相分数的平方根值；和 CSI 指数。如下图所示，然后单击 OK。



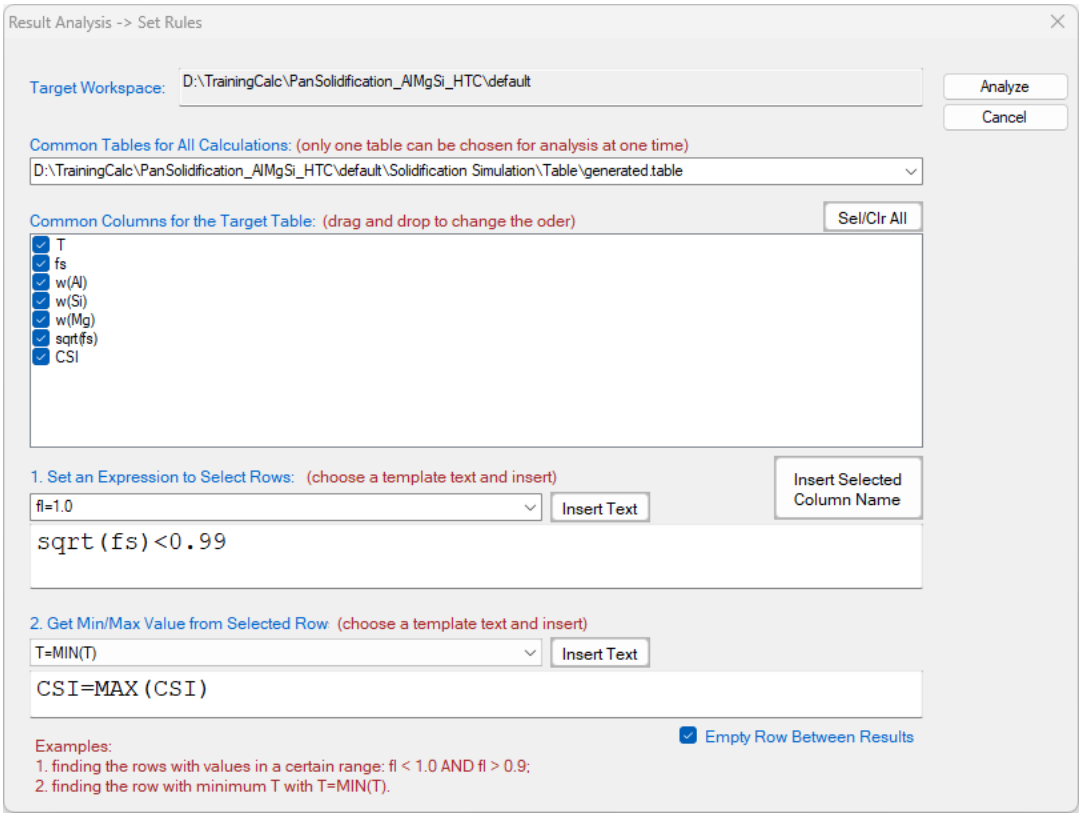
h. 单击“Run HTC”按钮，运行 HTC 模拟。

计算后处理：结果分析

i. 完成所有计算后，通过菜单 Batch Calc→Result Analysis 分析结果。用户可以通过打开相应的工作空间来分析 HTC 计算的结果，如下图所示。



j. 结果分析界面如下图，选择分析“generated table”，设置条件以找到每种合金成分的 CSI，即在“set an Expression to Select Rows”中输入条件 sqrt（fs）< 0.99，在“Get Min/Max Value from Selected Row”中输入条件 CSI=MAX(CSI)。

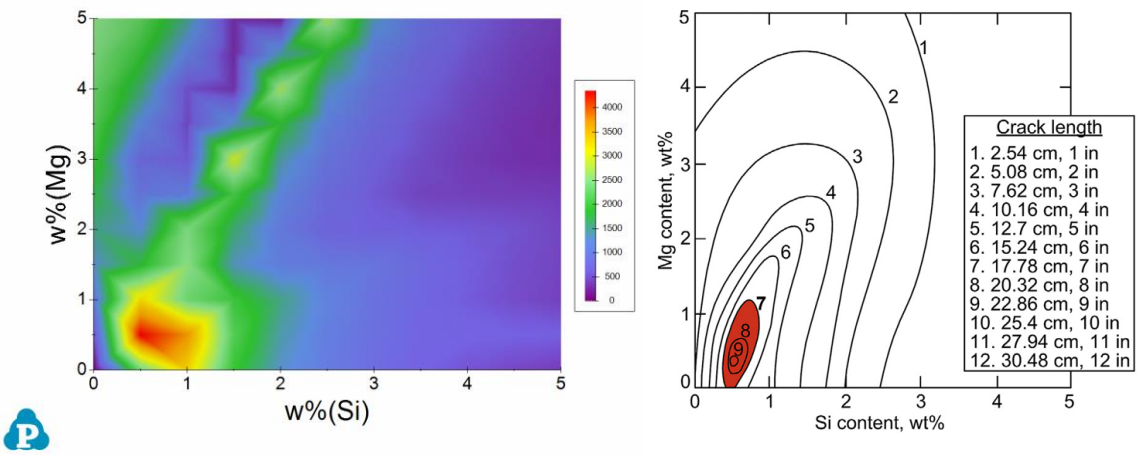


k. 结果分析后，将生成一张列出每种合金成分的 CSI = MAX(CSI) 的表格；

TDB Viewer | result_analysis.report

	CalculationName	AlloyChemistry	T	fs	w(Al)	w(Si)	w(Mg)	sqrt(fs)	CSI
			C	mole/mole	%	%	%		
1	Solidification Si...	100Al+0Mg+0...	660.3200	0.000000	100.0000	0.000000	0.000000	0.000000	0.010000
2	Solidification Si...	99.5Al+0Mg+0....	613.8921	0.979646	99.500000	0.500000	0.000000	0.989771	2,268.6336
3	Solidification Si...	99Al+0Mg+1Si...	577.6636	0.966118	99.000000	1.000000	0.000000	0.982913	3,362.3235
4	Solidification Si...	98.5Al+0Mg+1....	577.8845	0.933441	98.500000	1.500000	0.000000	0.966148	1,942.9461
5	Solidification Si...	98Al+0Mg+2Si...	578.0747	0.898931	98.000000	2.000000	0.000000	0.948120	1,326.2399
6	Solidification Si...	97.5Al+0Mg+2....	577.5938	0.864200	97.500000	2.500000	0.000000	0.929624	1,003.0708
7	Solidification Si...	97Al+0Mg+3Si...	577.7218	0.827395	97.000000	3.000000	0.000000	0.909613	784.8293
8	Solidification Si...	96.5Al+0Mg+3....	577.8185	0.789595	96.500000	3.500000	0.000000	0.888592	635.5671
9	Solidification Si...	96Al+0Mg+4Si...	577.8836	0.750967	96.000000	4.000000	0.000000	0.866584	527.5069
10	Solidification Si...	95.5Al+0Mg+4....	577.2770	0.714034	95.500000	4.500000	0.000000	0.845005	445.8697
11	Solidification Si...	95Al+0Mg+5Si...	577.2786	0.674418	95.000000	5.000000	0.000000	0.821229	382.1456

1. 使用鼠标左键点击选择 w%(Si)作为 X 轴，按<Ctrl>，然后分别点击 w%(Mg)和 CSI 选择作为 Y 轴和 Z 轴，在工具栏上单击 以生成下图，该图给出了冷却速度为 20 K/s 的 Al-Mg-Si 合金的热裂敏感指数图，显示的实验结果吻合较好。



5.2.3 小结

- 学习使用凝固模块来进行高通量计算以及对合金热裂敏感性的结果分析。