

CompuTherm 有限责任公司

1996年, CompuTherm 有限责任公司从威斯康星大学麦迪逊分校独立出来而成立, 是 CALPHAD 建模领域的领跑者之一。目前, 公司产品已在全球 ICME 从业人员和高校师生中得到广泛使用。

CompuTherm 公司的产品包括 Pandat™ 软件和用于各种合金体系的模型参数数据库。Pandat™ 是一款模块化设计的软件包。该软件不仅适用于计算热力学和相平衡, 还可应用于模拟整个材料加工过程, 从凝固到均匀化热处理和时效析出热处理。模型参数数据库包括热力学数据库, 迁移率数据库, 摩尔体积数据库和其他热物性数据库。结合 Pandat™ 软件和这些数据库, 便可以设计开发先进的材料。

CompuTherm 仿真工具可以应用于多种合金体系, 包括但不限于 Al 基, Co 基, Cu 基, Fe 基, Mg 基, Mo 基, Nb 基, Ni 基, Ti 基, TiAl 基合金以及高熵合金。

CompuTherm 还针对特定的应用开发量身定制的软件和数据库, 为材料行业提供咨询服务, 并与其他机构合作开展具有挑战性的项目。

软件 • 数据库 • 咨询服务



CompuTherm LLC

8401 Greenway Blvd., Suite 248
Middleton, WI 53562, USA

电话: 1-608-203-8843

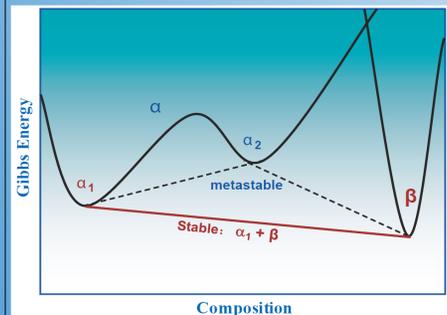
传真: 1-608-203-8045

邮箱: info@computherm.com

网址: www.computherm.com



Pandat™



2020

Pandat™

软件设计

Pandat 是基于 CALPHAD 方法开发的功能强大的软件包，可用于多元热力学/相图计算，凝固模拟，析出模拟和扩散模拟。它具有强大的热力学计算引擎，友好的图形用户界面以及灵活的后处理功能，该功能允许用户通过表格数据来绘制各种性质图。软件的设计理念是建立一个集成平台，目前包括五个主要模块。这种模块化设计允许用户在一个工作空间中执行不同模块的模拟，同时还可以通过添加模块而轻松地扩展软件功能。

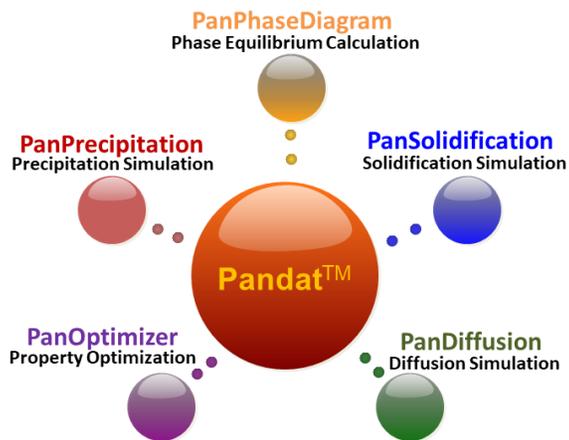


图1: Pandat软件的设计理念

软件架构

软件的架构如图 2 所示，包含三个独立的层：用户界面层，核心层（PanEngine 和模块）和数据库层。界面层将用户命令和模拟条件转换并传递给核心层。计算引擎 PanEngine 从数据库层加载并处理模型参数，执行基本计算，如计算给定条件下的热力学性质和相平衡；还可以为动力学模拟提供所需的原子迁移率和化学驱动力数据。所有计算模块共享 PanEngine。这种设计可以使动力学模块从 PanEngine 中获取即时更新的热力学和相平衡数据。这种架构还具备良好的可维护性和可扩展性。利用当前的设计和功能，开发的新功能和新模块可以很轻松地插入到软件中。

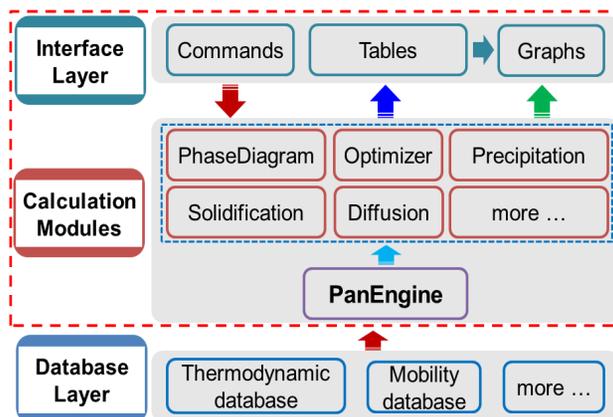


图2: Pandat软件的架构示意图

软件模块

相图模块 (PanPhaseDiagram) 用于计算多元体系的热力学性质和各种相图。该模块不仅可以计算各种稳定相图和亚稳相图，从而确定相变温度，相分数；还可以计算各种热力学性质，例如吉布斯自由能，焓，熵和化学驱动力。

析出模块 (PanPrecipitation) 用于模拟热处理过程中扩散控制的析出动力学。该模块根据析出物的形核，生长/固溶和粗化模型，模拟热处理过程中析出相的成分、体积分数、颗粒密度、以及粒径分布和平均粒径随时间的演变规律。

扩散模块 (PanDiffusion) 用于模拟以元素扩散为主的动力学过程。该模块用于模拟均匀化，析出相固溶，渗碳，扩散相变和其他扩散过程。

凝固模块 (PanSolidification) 用于模拟合金凝固过程。目前版本包括三种模型，分别是杠杆原理模型（平衡），Scheil 模型（固相中没有扩散）和考虑固相中的反向扩散和枝晶臂粗化的凝固模型。

优化模块 (PanOptimizer) 用于优化模型参数。满足高级用户开发自己的热力学和热物性数据库。该模块对学习基于 CALPHAD 方法的热力学建模的学生也非常有用。