

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

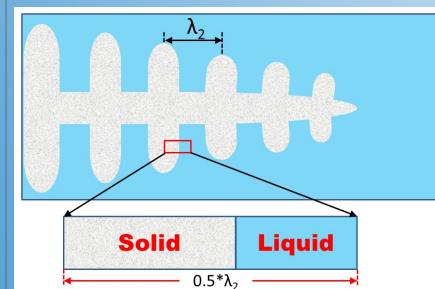
Phone: 1-608-203-8843
Fax: 1-608-203-8045

E-mail: info@compuTherm.com
Web: www.compuTherm.com



凝固模块

PanSolidification



2020

PanSolidification

凝固模块 (PanSolidification) 的特点

- ◆ 与用户友好的 Pandat™ 图形用户界面 (GUI) 以及热力学计算引擎 PanEngine 无缝集成
- ◆ 三种可用于凝固模拟的模型，包括平衡杠杆定律 (Lever rule)，Scheil 模型 (固相中无扩散) 和改进 Scheil 模型 (考虑到固相中的反向扩散与枝晶臂粗化)
- ◆ 三种几何模型，包括板、圆柱体和球体
- ◆ 输出合金体系成分分布图，相分数，凝固过程中的相组成变化以及二次枝晶臂间距 (SDAS)

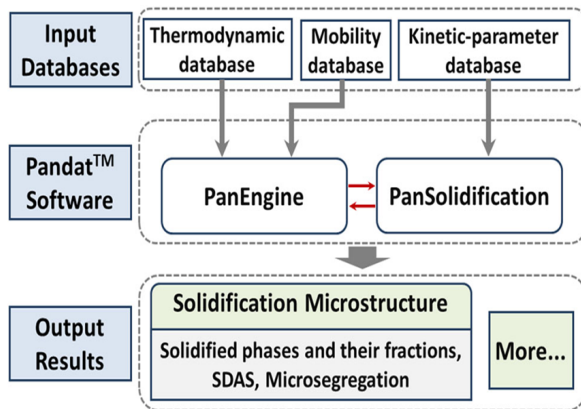


图 1：PanSolidification 模块的架构图

应用示例

图 2 为三种模型计算的 Mg-9Al (wt.%) 合金的凝固路径。图 3 所示为考虑到冷却速率和固相中的反向扩散后所计算出的成分分布。

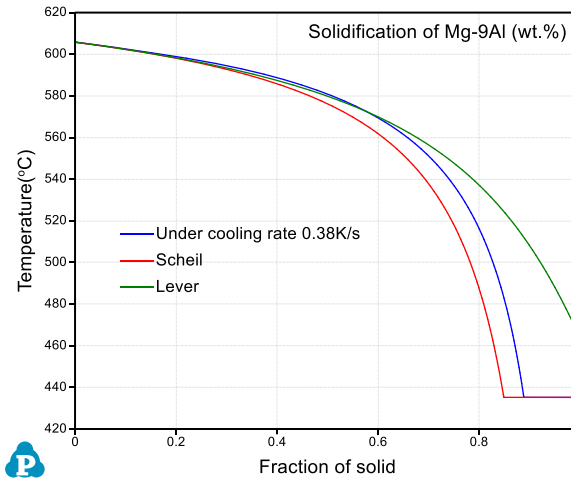


图 2：三种模型计算的凝固路径

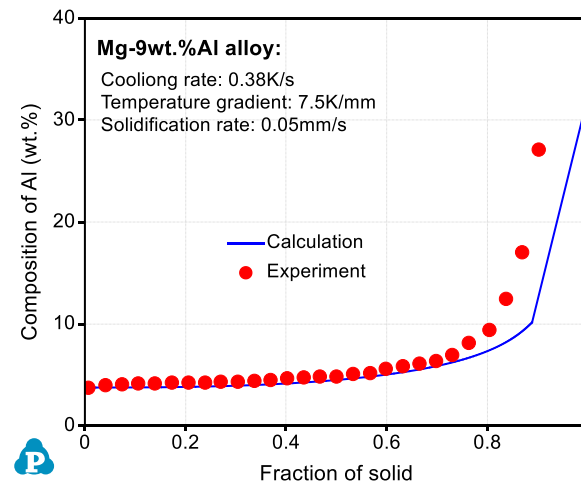


图 3：计算的 (Mg) 枝晶中的 Al 成分和固相分数关系与实验值的对比

图 4 为 Al-Cu-Mg 体系的热裂纹敏感性图。上图是用改进的 Scheil 模型进行的高通量凝固模拟，下图为实验结果。

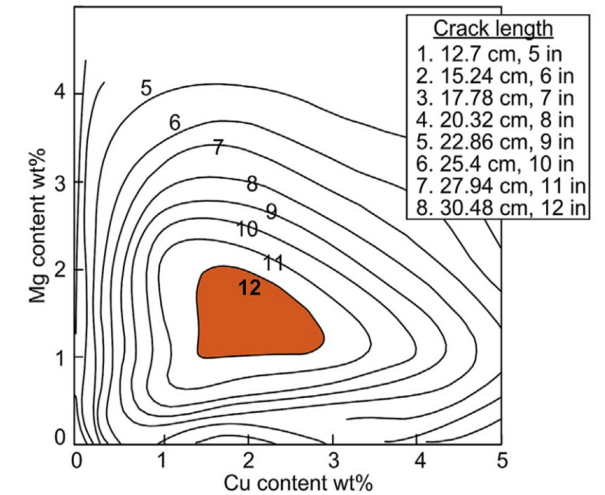
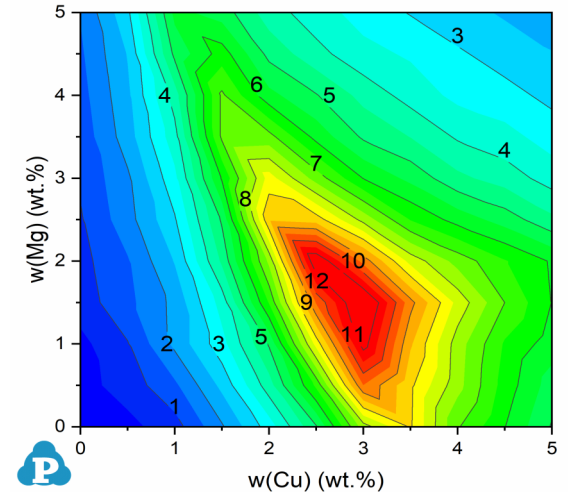


图 4：冷却速率为 20K/s 时 Al-Cu-Mg 三元体系的热裂纹敏感性图：上图是使用改进的 Scheil 模型高通量计算的凝固模拟预测；下图为实验结果。