

Software für den Materialentwurf

BEPHASY – Berechnung multikomponentiger Phasengleichgewichte in Systemen mit beliebiger Zahl von Mischphasen und reinen Stoffen

Problemstellung

Numerische Berechnung von Gleichgewichten multikomponentiger Vielphasensysteme

Phase	Components	System Components						
		Fe	N	O	C	Ca	Si	Mg
Gas	Fe	1	0	0	0	0	0	0
	N ₂	0	2	0	0	0	0	0
	O ₂	0	0	2	0	0	0	0
	C	0	0	0	1	0	0	0
	CO	0	0	1	1	0	0	0
	CO ₂	0	0	2	1	0	0	0
	Ca	0	0	0	0	1	0	0
	CaO	0	0	1	0	1	0	0
	Si	0	0	0	0	0	1	0
	SiO	0	0	1	0	0	1	0
Slag	Mg	0	0	0	0	0	0	1
	SiO ₂	0	0	2	0	0	1	0
	Fe ₂ O ₃	2	0	3	0	0	0	0
	CaO	0	0	1	0	1	0	0
	FeO	1	0	1	0	0	0	0
	MgO	0	0	1	0	0	0	1
Liq. Fe	Fe	1	0	0	0	0	0	0
	N	0	1	0	0	0	0	0
	O	0	0	1	0	0	0	0
	C	0	0	0	1	0	0	0
	Ca	0	0	0	0	1	0	0
	Si	0	0	0	0	0	1	0
	Mg	0	0	0	0	0	0	1

Hier noch eine Bildunterschrift ?

Mathematische Formulierung als nichtlineare Optimierungsaufgabe unter Nebenbedingungen

$$\text{minimiere } G(f, x) = \sum_{i=1}^n f^i G^i(x^i)$$

$$\text{Nebenbedingungen } \langle x^i, 1 \rangle = 1$$

$$\sum_{i=1}^n f^i A_i^T x^i = b$$

G – Gesamt-Gibbs-Funktion als Linearkombination aus einzelnen Phasen-Gibbs-Funktionen G^i

f^i – Molzahl der Phase i

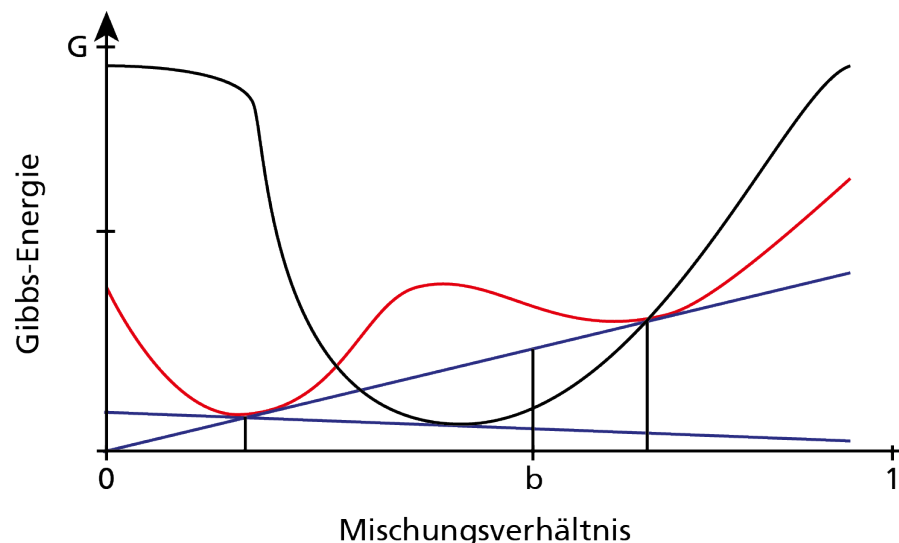
x^i – Vektor der Molbrüche in der Phase i

A_i – stöchiometrische Matrix

b – Vektor der Stoffmengen der Systemkomponenten

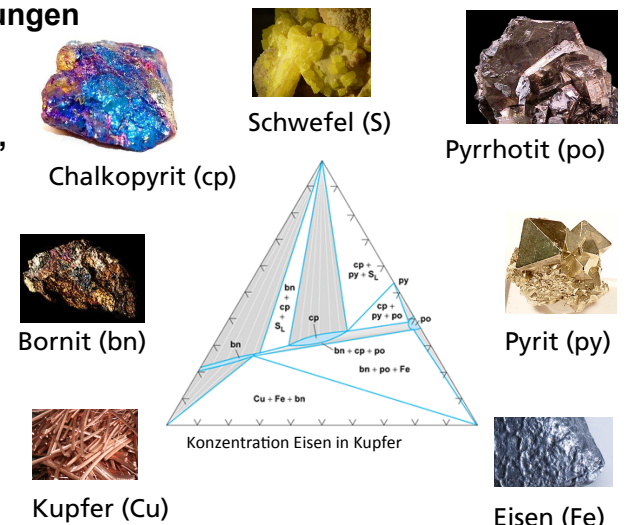
n – Anzahl an Phasen

- Keine grundsätzliche Limitierung der Zahl von Phasen und chemischen Komponenten
- Auswahl der relevanten Phasen aus Datenbanken
- Vorab-Berechnungen in „Schätzverfahren“
- Detektion von Mischungslücken



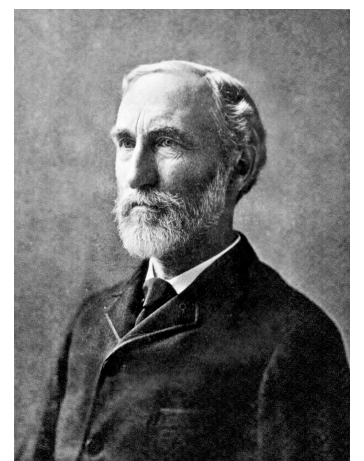
Anwendungen

- Design von Werkstoffen
- Hochleistungslegierungen für Spezialstähle, Leichtmetallsysteme
- keramische Systeme, Verschleißschutz, Hochtemperatur-Supraleitung
- u.v.m.



Methodik

- Rechnergestützte Thermochemie
- CALPHAD-Methodik zur Berechnung von thermochemischen Gleichgewichten und Phasendiagrammen
- Theoretische Grundlage zurückgehend auf Josiah Willard Gibbs (1839 – 1903)
- Mathematisch: Lagrange oder KKT-Gleichungen, iterative numerische Lösung
- Softwareerstellung in C++
- Einsatz von High Performance Computing Systemen



Josiah Willard Gibbs

Partner

GTT Technologies GmbH, Herzogenrath
• Software, Beratung und Dienstleistungen in der technischen Thermochemie

Kontakt: Prof. Dr. Klaus Hack
kh@gtt-technologies.de
www.gtt-technologies.de

Fraunhofer Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI
• Entwicklung von Algorithmen für industrielle Anwendungen
• Software Entwicklungen und Dienstleistungen für Anwendungen der numerischen Simulation, Optimierung und Bioinformatik

Kontakt: Dr. Johannes Linden,
johannes.linden@scai.fraunhofer.de
www.scai.fraunhofer.de



GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium für Bildung und Forschung