

Gießerei-Institut: Forschung, Entwicklung, Ergebnisse

Band 62

**Janin Eiken**

**A Phase-Field Model for  
Technical Alloy Solidification**

Shaker Verlag  
Aachen 2010

**Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek**

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2009)

Copyright Shaker Verlag 2010

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8322-9010-8

ISSN 1435-6198

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen

Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • e-mail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

# SHORT ABSTRACT

In the frame of this work, a new comprehensive phase-field model has been developed which is specially designed for numerical simulation of microstructure formation of alloys during technical solidification processes. Its universal formulation makes it applicable to a multitude of different processes and alloys with an arbitrary number of components, thermodynamic phases and grains in 2D and 3D. The kinetic equations, which describe the time evolution of the microstructure, have been consistently derived from a free energy functional under consideration of all multiphase, polycrystalline and multicomponent interactions. Anisotropy is taken into account for both the interfacial mobilities and the interfacial energies. Cubic and hexagonal lattice symmetries can be modeled by using specifically formulated anisotropy functions.

The major advantage of the model over previous multicomponent multiphase models is its numerically efficient and stable applicability at the length scale of technical relevant microstructure parameters. This is mainly enabled by a special quasi-equilibrium constraint, which explicitly defines the non-equilibrium conditions at the phase interfaces. The underlying assumption of equal diffusion potentials for all locally coexisting phases can be evaluated by thermodynamic calculations based on Gibbs energies from Calphad databases. A specially deduced extrapolation scheme reduces the frequency of these time demanding evaluations and thus enables the simulation of even complex technical microstructures in reasonable computation time.

The comprehensively derived phase-field model has been used as a theoretical basis to improve the implementation of the kinetic equations in the phase-field software MICRESS<sup>®</sup>. The amended anisotropy formulation and the generalized treatment of thermodynamic data not only extend the applicability, but also enhance the prediction accuracy and computational stability. Application examples for directional and equiaxed solidification processes of Mg-based alloys with varied addition of aluminum, zinc, calcium and manganese prove that the upgraded model version is capable of handling the thermodynamics of multiphase, multicomponent alloys as well as complex crystallographic anisotropy in 2D and 3D. Since the application-oriented phase-field model enables the numerical prediction of technically relevant microstructure parameters for a large variety of potential compositions and cooling conditions, it represents a helpful tool for the design and optimization of alloys and processes for new critical applications.

# KURZFASSUNG

Im Rahmen dieser Arbeit ist ein neues, umfassendes Phasenfeldmodell entwickelt worden, das speziell zur numerischen Simulation der Gefügeentwicklung von Legierungen in technischen Erstarrungsprozessen konzipiert ist. Seine universelle Formulierung macht es auf eine Vielzahl unterschiedlicher Prozesse und Legierungen mit beliebiger Anzahl von Komponenten, thermodynamischen Phasen und Körnern in 2D und 3D anwendbar. Die kinetischen Gleichungen, die die zeitliche Entwicklung des Gefüges beschreiben, sind konsistent von einem Freie-Energie-Funktional unter Berücksichtigung aller Mehrkomponenten-, Mehrphasen- und Mehrkorn-Wechselwirkungen abgeleitet worden. Anisotropie ist sowohl für die Grenzflächenmobilitäten als auch für Grenzflächenenergien berücksichtigt worden. Kubische und hexagonale Gittersymmetrien können mittels spezifisch formulierter Anisotropiefunktionen modelliert werden.

Der Hauptvorteil des neuen Modells gegenüber vorherigen Mehrkomponenten-Mehrphasen-Modellen ist seine numerisch effiziente und stabile Anwendbarkeit im Größenbereich technisch relevanter Mikrostrukturparameter. Dies wird hauptsächlich durch eine spezielle Quasi-Gleichgewichtsbedingung ermöglicht, die explizit die Nichtgleichgewichtsbedingungen an den Phasengrenzen definiert. Die zugrunde liegende Annahme von gleichen Diffusionspotentialen für alle lokal koexistenten Phasen kann durch thermodynamische Berechnungen basierend auf Gibbs-Energien aus Calphad-Datenbanken ausgewertet werden. Ein speziell abgeleitetes Extrapolationsschema reduziert die Frequenz dieser zeitintensiven Auswertungen und ermöglicht somit die Simulation selbst komplexerer technischer Gefüge in angemessener Rechenzeit.

Das ausführlich hergeleitete Phasenfeldmodell wurde als theoretische Grundlage benutzt, um die Implementierung der kinetischen Gleichungen in der Phasenfeld-Software MICRESS® zu verbessern. Die erweiterte Anisotropieformulierung und die allgemeingültigere Behandlung der thermodynamischen Daten erweitern nicht nur die Einsetzbarkeit, sondern erhöhen auch die Vorhersagegenauigkeit und numerische Stabilität. Anwendungsbeispiele für gerichtete und äquiaxiale Erstarrungsprozesse von Magnesium-Basis-Legierungen mit variierenden Anteilen von Aluminium, Zink, Kalzium und Mangan beweisen, dass die verbesserte Modellversion in der Lage ist, sowohl die Thermodynamik von mehrphasigen, mehrkomponentigen Legierungen als auch komplexe kristallographische Anisotropie in 2D und 3D zu handhaben. Da das anwendungsorientierte Phasenfeldmodell die numerische Vorhersage von technisch relevanten Gefügeparametern für eine Vielfalt von potentiellen Zusammensetzungen und Abkühlbedingungen ermöglicht, stellt es ein hilfreiches Werkzeug zum Design und zur Optimierung von Legierungen und Prozessen für neue kritische Anwendungen dar.