Karlsruher Institut für Technologie

Massiv-parallele und großskalige Phasenfeldsimulationen zur Untersuchung der Mikrostrukturentwicklung

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte **Dissertation**

von

Johannes Hötzer, M. Sc. Comp. Sc.

Tag der mündlichen Prüfung:	12.05.2017
Erstgutachter:	Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler
Zweitgutachter:	Prof. Dr. rer. nat. Michael J. Hoffmann

Kurzfassung

Für maßgeschneiderte Bauteile mit definierten Eigenschaften ist ein detailliertes Verständnis der Mikrostrukturentwicklung notwendig. Phasenfeldsimulationen erlauben es, gezielt den Einfluss von verschiedenen physikalischen Parametern sowie von Prozessparametern auf die Mikrostrukturentwicklung zu untersuchen. Im ersten Teil wird die Mikrostrukturentwicklung bei der ternären eutektischen gerichteten Erstarrung untersucht. Hierzu wird die hoch optimierte Umsetzung des Phasenfeldmodells auf Basis des Großkanonischen Potentialansatzes im massiv-parallelen waLBerla-Framework gezeigt. In Messungen wird damit auf einem Rechenkern eine Peak Performance von 27,1% sowie ein nahezu ideales Skalierungsverhalten mit bis zu 1 048 576 Prozessen erreicht. Ausgehend von Simulationsstudien in 2D zu gekipptem Wachstum wird das in Experimenten vermutete und räumlich komplexe Wachstum von Spiralen in großskaligen 3D-Simulationen nachgewiesen. Die Musterbildung vor und nach der Löslichkeitsänderung während der Erstarrung im System Al-Ag-Cu sowie der Einfluss von verschiedenen Geschwindigkeitswechseln auf die Musterbildung wird qualitativ wie auch quantitativ untersucht. Hierbei wird eine gute Übereinstimmung mit Experimenten gefunden. Im zweiten Teil wird die Mikrostrukturentwicklung unter dem Einfluss von Poren an Korngrenzen während des Endstadiums des Sinterprozesses analysiert. Der Druck in den Poren wird hierzu über das ideale Gasgesetz im Phasenfeldmodell modelliert. Zur Beschreibung der Poren-Poren-Interaktion wird im Pace3D-Löser ein effizienter und paralleler Algorithmus zur Beschreibung von Topologieänderungen auf Basis von Zusammenhangskomponenten umgesetzt. Für die Untersuchung des Ablöseverhaltens der Poren von Korngrenzen werden idealisierte sowie realistische Mikrostrukturen mit analytischen Gleichungen verglichen. Zudem wird eine Separationskarte abhängig von der durchschnittlichen Korngröße und dem Porenabstand erstellt.

Abstract

For the development of applications with defined properties, a detailed understanding of the underlying microstructure evolution is needed. Phase-field simulations specifically allow to investigate the effects of the various physical and process parameters on the microstructure evolution. The first part investigates the microstructure evolution in ternary eutectic alloys during directional solidification. Therefor, a highly optimized phase-field model, based on the Grand potential approach, is implemented in the massive parallel waLBerla-framework. In measurements, a peak performance of 27,1% on a single core and a nearly ideal scaling behavior on up to 1 048 576 processes is reached. Based on 2D simulations of tilted growth, the experimentally assumed and spatial complex phenomena of spiral growth is shown in large-scale simulations. In the system Al-Ag-Cu, the pattern formation before and after the solubility shift is studied and the influence of velocity variations on the microstructure evolution is investigated. The arising patterns are quantitatively and qualitatively compared with different statistical methods, showing a good accordance between the simulations and the experiments. In the second part, the microstructure evolution under the influence of pores at the grain boundaries in the finale sintering stage is analyzed. Therefore, the phase-field model is extended by a pressure part based on the ideal gas law, to describe the pores. To model the pore pore interaction, a efficient and parallel algorithm, based on a connected component algorithm, is implemented to manage the topology changes. In the studies for the pore detachment behavior from grain boundaries, idealized and real microstructures are used and compared with analytic solutions. Based on this, a separation map using the average grain size and the pore spacing is created.

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung **1**

2 Gliederung **3**

3 Die Phasenfeldmethode **5**
3.1 Entstehung der Phasenfeldmethode . . . 5
3.2 Der Ordnungsparameter ϕ . . . 9
3.3 Die Phasenfeldmethode für zwei Phasen . . . 11
3.4 Vom Entropiefunktional zum Großkanonischen Funktional . . . 14
3.5 Das Phasenfeldmodell auf Basis des Großkanonischen Potentialansatzes . . . 15
3.6 Phasenfeldevolutionsgleichung . . . 19
3.7 Modell zur Beschreibung des chemischen Potentials . . . 20

4 Umsetzung des Phasenfeldmodells für Hochleistungsrechner **23**
4.1 Diskretisierung des Phasenfeldmodells . . . 24
4.2 Frameworks . . . 27
4.2.1 PACE3D . . . 27
4.2.2 WALBERLA . . . 28
4.3 Hochleistungsrechner . . . 28
4.4 Umsetzung und Performance des Phasenfeldmodells . . . 30
4.4.1 Implementierung des Modells . . . 30
4.4.2 Optimierungen . . . 31
4.4.3 Performance-Ergebnisse . . . 37
4.4.3.1 Single Node Performance . . . 37
4.4.3.2 Skalierungsergebnisse . . . 42
4.4.4 Schlussfolgerungen . . . 47
4.4.5 Ausblick . . . 47
4.5 Bestimmung von Zusammenhangskomponenten . . . 49
4.5.1 Implementierung . . . 49
4.5.2 Testaufbau . . . 53
4.5.3 Performance-Ergebnisse . . . 54
4.5.4 Schlussfolgerungen . . . 56
4.5.5 Ausblick . . . 57

5 Überblick der Arbeiten zur Erstarrung **59**
5.1 Dendritisches Wachstum . . . 63
5.2 Gerichtete eutektische Erstarrung . . . 65
5.2.1 Dünnschichtexperimente und entsprechende zweidimensionale Phasenfeldsimulationen . . . 66
5.2.2 Erstarrungsexperimente auf Basis der Bridgman-Stockbarger-Methode und entsprechende dreidimensionale Phasenfeldsimulationen . . . 69
5.3 Zellwachstum und eutektische Kolonien . . . 73
5.4 Weitere Aspekte zur Simulation von Erstarrungsprozessen . . . 74

6 Gerichtete ternäre eutektische Erstarrung 77
6.1 Phasenfeldmodell für die ternäre gerichtete Erstarrung . . . 79
6.2 Simulationsaufbau . . . 79
6.3 Analysewerkzeuge . . . 80
6.4 Ergebnisse und Diskussion . . . 84
6.4.1 Gekipptes Wachstum . . . 84
6.4.1.1 Simulationsparameter . . . 85
6.4.1.2 Variation der Oberflächenenergien . . . 87
6.4.1.3 Einfluss unterschiedlicher Phasenanteile auf den Kippwinkel . . . 90
6.4.1.4 Einfluss der periodischen Länge . . . 90
6.4.1.5 Einfluss der Erstarrungsgeschwindigkeit . . . 90
6.4.1.6 Richtungswechsel während des gekippten Wachstums . . . 92
6.4.1.7 Einfluss der Diffusion und des Temperaturgradienten . . . 92
6.4.1.8 Diskussion des gekippten Wachstums . . . 92
6.4.1.9 Zwischenschlussfolgerungen . . . 97
6.4.2 Spiralförmiges Wachstum . . . 98
6.4.2.1 Simulation des Spiralwachstums . . . 100
6.4.2.2 Diskussion des Spiralwachstums . . . 105
6.4.2.3 Zwischenschlussfolgerungen . . . 105
6.4.3 Musterbildung in Al-Ag-Cu . . . 107
6.4.3.1 Simulationsparameter . . . 110
6.4.3.2 Simulationsergebnisse . . . 113
6.4.3.3 Quantitativer Vergleich der gesamten Mikrostruktur . . . 122
6.4.3.4 Diskussion . . . 125
6.4.3.5 Zwischenschlussfolgerungen . . . 127
6.4.4 Geschwindigkeitswechseln während der Erstarrung von Al-Ag-Cu . . . 128
6.4.4.1 Simulationsparameter und Durchführung . . . 128
6.4.4.2 Simulationsergebnisse und Diskussion . . . 129
6.4.4.3 Zwischenschlussfolgerungen . . . 142
6.5 Schlussfolgerungen . . . 143
6.6 Ausblick . . . 144

7 Einfluss von Poren an Korngrenzen beim Sinterprozess 147
7.1 Phasenfeldmodell zur Untersuchung der Poren und Korngrenzen Interaktion . . . 150
7.2 Umsetzung und Optimierung des Modells . . . 151
7.3 Ergebnisse und Diskussion . . . 153
7.3.1 Stabilität von Poren in Körnern . . . 153
7.3.2 Poren an Korngrenzen von idealisierten Mikrostrukturen . . . 156
7.3.3 Einfluss der Poren-Poren-Interaktion . . . 162
7.3.4 Poren an Korngrenzen von realistischen Mikrostrukturen . . . 164
7.4 Schlussfolgerungen . . . 171
7.5 Ausblick . . . 172

8 Abschließende Diskussion und Zusammenfassung 173

Literatur 174

Literatur 175

1

Einführung

In den letzten Jahrzehnten wurden Simulationen neben Experimenten und Theorien ein immer wichtigeres Werkzeug in der Industrie sowie in der Wissenschaft zur Untersuchung von komplexen dreidimensionalen Phänomenen. Simulationen ermöglichen es reale Prozesse mit Hilfe eines theoretischen Modells abzubilden, das über Parameter verändert werden kann. Durch Fortschritte in verschiedenen Disziplinen wurden die Modelle für die Simulationen immer genauer und damit auch zunehmend rechenintensiver [1]. Durch den kontinuierlichen exponentiellen Anstieg der Rechenleistung, wie auf Basis des Mooreschen Gesetzes [2] vorhergesagt, ist es möglich, diese immer komplexeren Modelle zu berechnen und damit neue Erkenntnisse zu gewinnen.

Die Simulationen zur Mikrostrukturentwicklung erlauben es, gezielt den Einfluss verschiedener Material- und Prozessparameter zu untersuchen, welche in Experimenten zum Teil gar nicht, nur aufwendig oder abhängig von anderen Parametern verändert werden können. Die Mikrostruktur ist von großer Bedeutung, da diese neben den chemischen Elementen die späteren Eigenschaften des Bauteils direkt mitbestimmt. Daher ist ein detailliertes Wissen über die Mikrostrukturentwicklung zur Herstellung maßgeschneiderter Bauteile von großem wirtschaftlichen und wissenschaftlichen Interesse.

Phasenfeldmodelle erlauben es, gezielt den Einfluss von Parametern auf die Mikrostrukturentwicklung zu untersuchen. Dabei schlägt die Phasenfeldmethode die Brücke zwischen der atomistischen und der makroskopischen Skala. Die Grundlage aller Phasenfeldmodelle ist dabei die Minimierung der Energie im System unter weiteren physikalischen Nebenbedingungen. Hierzu kann die Phasenfeldmethode mit weiteren physikalischen Prozessen wie Temperatur, Konzentration, Strömung, mechanischen Kräften, Magnetismus und Gravitation gekoppelt werden [1].

Zur Untersuchung von statistisch repräsentativen dreidimensionalen Simulationsgebieten mit ausreichender Gitterauflösung, die mit Experimenten vergleichbar sind, müssen meist großskalige Gebiete mit rechenintensiven Gleichungen gelöst werden [3, 4]. Um solche Simulationen effizient und in vertretbarer Zeit durchzuführen, ist es notwendig, die Modelle in den Lösern zu parallelisieren und zu optimieren. Vor allem durch das Ende der steigenden Taktrate der Recheneinheiten ist es notwendig geworden, die Berechnungen auf verschieden Ebenen zu parallelisieren, um heutige Rechenkerne ausnutzen zu können [5]. Weiterhin können große Gebiete oft nicht im Arbeitsspeicher eines einzelnen Rechners gehalten werden, weshalb sie in Teilgebiete zerlegt werden, die auf unterschiedlichen Rechnern parallel berechnet werden. Aufgrund der Datenabhängigkeit aus der Diskretisierung der Phasenfeldmethode und der hieraus resultierenden regelmäßigen Kommunikation zwischen den Rändern der Teilgebiete ist der Einsatz von Hochleistungsrechnern mit schnellen Netzwerken notwendig.

Das Zusammenspiel verschiedener Disziplinen erlaubt es, großskalige und massiv-parallele Phasenfeldsimulationen durchzuführen, welche es ermöglichen neue Erkenntnisse der komplexen dreidimensionalen Mikrostrukturentwicklung zu erhalten. Daneben sind experimentelle und theoretische Arbeiten zum Vergleich sowie zur Validierung der verschiedenen Modelle notwendig.

2

Gliederung

Diese Doktorarbeit beschäftigt sich mit der Anwendung massiv-paralleler und großskaliger Phasenfeldsimulationen zur Untersuchung der Mikrostrukturentwicklung. Hierzu wird in Kapitel 3 die Phasenfeldmethode eingeführt sowie genauer auf das Phasenfeldmodell auf Basis des Großkanoischen Potentialansatzes zur Simulation ternärer Legierungen eingegangen. Das Simulieren der Mikrostrukturentwicklung in großskaligen Gebieten erfordert einen hohen Rechenaufwand. Um diesen Rechenaufwand in vertretbarer Zeit zu bewältigen sind hoch optimierte und parallele Löser zur effizienten Simulation der Mikrostrukturentwicklung notwendig. Hierzu wird in Kapitel 4 die Umsetzung und Optimierung des Phasenfeldmodells aus dem vorherigen Abschnitt beschrieben sowie die Performance und das Skalierungsverhalten untersucht. Zudem wird ein paralleler Algorithmus zur Bestimmung von Zusammenhangskomponenten in 3D vorgestellt, welcher zur Verfolgung der Mikrostrukturänderung verwendet wird. In Kapitel 5 wird ein Überblick der experimentellen und simulativen Arbeiten zur Erstarrung von dendritischen, eutektischen und zellulären Strukturen gegeben. Basierend auf dem optimierten und massiv-parallelen Löser aus Kapitel 4 werden in Kapitel 6 verschiedene Muster bei der ternäreren eutektischen gerichteten Erstarrung untersucht, die nur in großskaligen dreidimensionalen Gebieten beobachtet werden können. Zuerst wird der Frage von Spiralwachstum, wie es in Experimenten vermutet wird, nachgegangen. Hierzu wird das Spiralwachstum in 3D auf Basis des gekippten Wachstums von Lamellen in 2D untersucht. Anschließend wird die Mikrostrukturentwicklung in Al-Ag-Cu und der Einfluss von Geschwindigkeitswechsel auf die Musterbildung untersucht. Kapitel 7 behandelt den Einfluss von Poren an Korngrenzen von idealisierten und realistischen Mikrostrukturen während des Endstadiums des Sinterprozesses.

3

Die Phasenfeldmethode

Zur Simulation der Mikrostrukturevolution hat sich in den letzten Jahrzehnten die Phasenfeldmethode (PFM) etabliert. Die PFM beschreibt mathematisch die Grenze zwischen zwei oder mehreren Phasen als einen stetigen Übergang. Dies erlaubt es, die Mikrostrukturentwicklung ohne das zusätzliche Verfolgen der Grenzflächen, auch *interface tracking* genannt, zu simulieren, wie es im Gegensatz in der klassischen Finite-Elemente-Methode (FEM) zur Simulation der Strukturmechanik notwendig ist. Verglichen mit *first principle methods*, wie der Monte-Carlo-Methode oder der Dichtefunktionaltheorie, erlaubt es die PFM, physikalisch größere Gebiete zu berechnen. Daher schließt die PFM die Lücke zwischen der atomistischen Skala und der makroskopischen Skala, wie in Abbildung 3.1 dargestellt. Eine Übersicht der Vor- und Nachteile der PFM ist von Qin und Bhadeshia in [6] zusammengestellt.

Dieses Kapitel gibt basierend auf den Ergebnissen aus [1, 8, 9] zuerst einen historischen Überblick über die Entwicklungen der Phasenfeldmethode. Anschließend wird auf die Herleitung der Phasenfeldmethode und auf den Zusammenhang der Gleichungsteile eingegangen. Danach wird das Phasenfeldmodell basierend auf dem Großkanonischen Potentialansatz und dessen Kopplung an die CALPHAD-Datenbank, welche zur Beschreibung thermodynamischer Datensätze genutzt wird, vorgestellt.

3.1 Entstehung der Phasenfeldmethode

Die Phasenfeldmethode erlaubt es allgemein, die zeitliche Entwicklung der Grenzflächen zwischen Phasen auf der mesoskopischen Skala unter verschiedenen physikalischen Einflüssen numerisch zu simulieren. Durch die Kopplung an verschiedene physikalische Einflüsse, wie die Konzentration, Temperatur, Strömung, mechanische Kräfte und Magnetismus, hat sich die Phasenfeldmethode zur Simulation der Mikrostrukturentwicklung etabliert [1].

Im Folgenden wird basierend auf [1] die Entwicklung der Phasenfeldmethode beschrieben. Das grundlegende Konzept zur Beschreibung von Grenzflächen zwischen zwei Phasen als eine diffuse Grenzschicht wurde in den 1870er Jahren von van der Waals in [10] vorgeschlagen. Dieses Konzept wurde in den 1950er Jahren durch das Einführen eines Ordnungsparameters mit der Ginzburg-Landau-Funktionaltheorie [11, 12] für die phänomenologische Beschreibung der Supraleitung erweitert. Der Ordnungsparameter gibt dabei an, in wie weit sich eine Phase in einem bestimmten Zustand befindet. Auf Basis von Energiefunktionalen des Ginzburg-Landau-Typs beschreiben Cahn und Hilliard [13–16] sowie Allen und Cahn [17] die Phasenumwandlung bei der Erstarrung von Legierungen auf der makroskopischen Skala. Diese wandeln sie durch

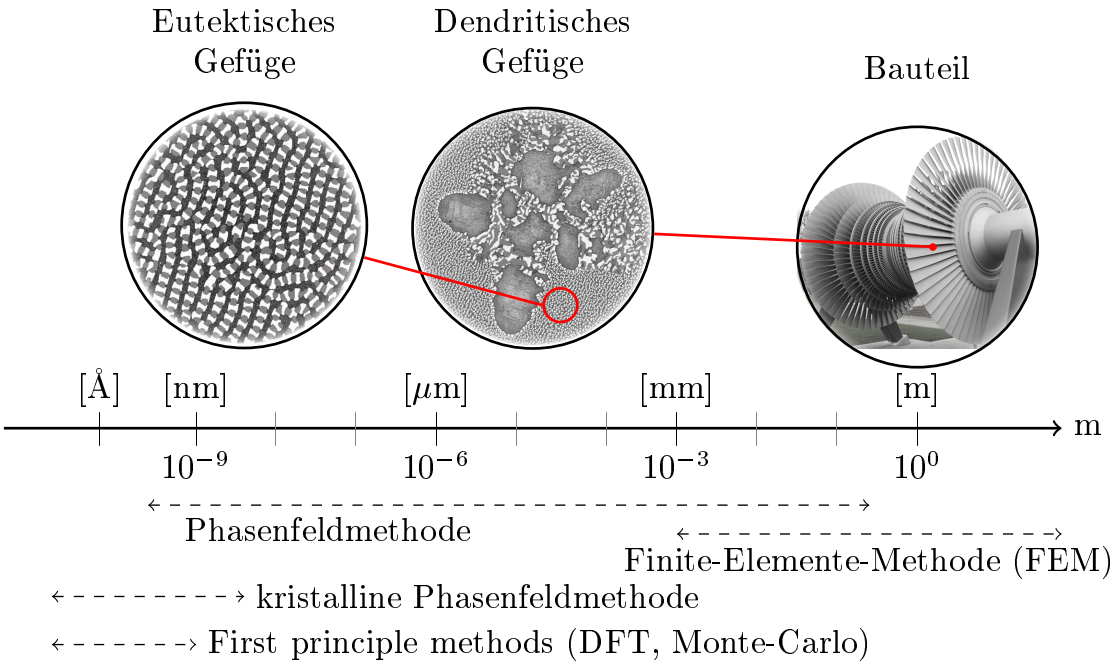


Abbildung 3.1: Übersicht der typisch verwendeten Simulationsmethode für die unterschiedlichen Längenskalen, basierend auf [1]. Die Schliffbilder stammen aus [7].

eine Variationsableitung in partielle Differenzialgleichungen um, die die Evolution der Ordnungsparameter beschreiben. Die Evolution des Ordnungsparameters und die daraus folgende Umwandlung von einer Phase in eine andere wird dabei durch die Minimierung der gesamten Energie im System getrieben. In [18, 19] beschreiben Allen und Cahn den Zusammenhang zwischen der gesamten Energie im System und der Mikrostruktur.

Die Vorläufer der Phasenfeldmethode bilden nach [1] die Modelle von Halperin et al. [20] aus dem Jahr 1974. In ihrer Arbeit werden verschiedene Ginzburg-Landau-Modelle diskutiert, welche die zeitliche Entwicklung von erhaltenden und nicht erhaltenden Ordnungsparametern beschreiben. Ihr Fall C, *case C*, der auch als *model C* beschrieben wird [20, 21], bildet dabei die Grundlage heutiger Phasenfeldmodelle. Ein weiterer Vorläufer der PFM ist das Modell von Langer und Sekerka [22] aus dem Jahr 1975, in dem die Konzentration als diffuses Feld beschrieben ist, das durch die Minimierung der freien Energie angetrieben wird, aber hierfür keinen Ordnungsparameter verwendet.

Die Kopplung eines Ordnungsparameters und eines Temperaturfelds für die Simulation von Kristallwachstum wurde 1985 von Collins und Levine [23] beschrieben, jedoch noch nicht als Phasenfeldmethode bezeichnet. Ein Jahr später, 1986, wurden die Modelle von Caginalp und Fife [24, 25] sowie von Langer [26] als Phasenfeldmodelle eingeführt. Basierend auf dem Modell von Collins und Levine [23] wurde im Jahr 1991 von Kobayashi [27] die erste großskalige zweidimensionale Phasenfeldsimulation mit einer Netzgröße von 300 × 300 Gitterpunkten zur Untersuchung von dendritischen Strukturen durchgeführt. Nach der Etablierung der PFM für reine Metalle wurden diese von Wheeler et al. in [28] zur zweidimensionalen Simulation der spinodalen Entmischung sowie in [29] für das Wachstum von thermischen Dendriten genutzt. Im Jahr 1993 vergrößerten Wheeler et al. [29] die Netzgröße auf 900 × 450 Gitterpunkte. Im Jahr 1994 erweiterten Karma et al. [30] ihr Modell für binäre Systeme zur Simulation der gerichteten Erstarrung am eutektischen Punkt. Warren und Boettinger [31] schlugen eine Methode zur Kopplung der thermisch getriebenen und konzentrations getriebenen Erstarrung vor, bei gleichzeitiger Vernachlässigung des Wärmeflusses, aufgrund des hohen Rechenaufwands. Loginova et al. [32] und Emmerich et al. [33] nutzten das Modell aus [31] für ihre Untersuchungen. Loginova et al. fanden damit heraus, dass für kleine Unterkühlun-

gen und viele Keime ein isotroper Ansatz ausreichend ist. Jedoch muss die Entwicklung der Konzentration und der Temperatur für größere Unterkühlungen mit weniger Keimen gelöst werden [32].

Das Wachstum von konzentrationsgetriebenen Dendriten wurde intensiv in den 2000er Jahren untersucht [1, 34–51]. Quantitative Phasenfeldsimulationen zur Mikrostrukturentwicklung von konzentrationsgetriebenen Dendriten bei der Erstarrung von Legierungen wurden 2001 von Karma [34] gezeigt. Mit dem Modell wird eine gute Übereinstimmung zwischen der Grenzflächenbewegung und dem Löslichkeitsprofil in den Festphasen gefunden. Im Jahr 2002 nutzten George und Warren [36] das Modell aus Warren und Boettinger [31] für die erste großskalige dreidimensionale Simulation eines konzentrationsgetriebenen Dendriten. Durch Ausnutzen der Symmetrie konnte der 1000^3 Zellen große Dendrit in einem Achtel des Gebiets mit 500^3 Zellen auf 32 CPUs berechnet werden. Zur Berechnung nutzen George und Warren einen mit dem Message Passing Interface (MPI) parallelisierten Löser. Zudem werden verschiedene Skalierungsdiagramme für unterschiedliche Cluster sowie verschiedene Problemgrößen gezeigt. Zur simulativen Untersuchung des Zusammenspiels verschiedener Dendritenarme sind große Simulationsgebiete notwendig. Eiken [52] zeigte im Jahr 2008 das konkurrierende Wachstum von mehreren zueinander verkippten Dendriten bei der gerichteten Erstarrung. Hierbei kann neben dem Wachstum der primären Dendritenarme auch das Wachstum von sekundären und tertiären Dendritenarme beobachtet werden. Die Simulation des $714 \times 714 \times 990$ Zellen großen Gebiets wurde mit einem hoch optimierten Löser in 390 Stunden auf einem Prozessor berechnet. Die Gordon-Bell-Preisgewinner aus dem Jahr 2011, Shimokawabe et al. [47], nutzen das Phasenfeldmodell für binäre Legierungen aus [53, 54] für großskalige Simulationen zur Untersuchung des konkurrierenden dendritischen Wachstums. Basierend auf dem hoch optimierten und parallelen Löser für Graphikkarten (GPUs) wurde auf dem TSUBAME2.0 Supercomputer mit 4 000 GPUs und 16 000 Rechenkernen erstmals eine Peak Performance von 1,017 PFlops (10^{15} Gleitkommaberechnungen pro Sekunde) in Phasenfeldsimulationen erreicht. Neben der Umsetzung, Optimierung und dem Skalierungsverhalten des Modells wird das konkurrierende Wachstum verschieden orientierter Dendriten in einem $768 \times 1\,632 \times 3\,264$ Volumenzellen großen Gebiet gezeigt, das mit 1 156 Graphikkarten (GPUs) auf dem TSUBAME2.0 Supercomputer berechnet wurde. Die Arbeit wurde zwei Jahre später von Takaki et al. [50] fortgesetzt. Hierfür wurden Gebiete mit $4\,096 \times 4\,104 \times 4\,096$ Volumenzellen genutzt, die jeweils auf 768 GPUs und CPUs in einer Durchschnittszeit von 2 Stunden und 59 Minuten berechnet wurden. Aufgrund der Größe kann zum ersten Mal die komplexe Interaktion der Dendriten sowie das Wachstum von unerwarteten Orientierungen beobachtet werden. In [55] untersuchen Takaki et al. das konkurrierende Wachstum von dendritischen sowie von zellulären Strukturen mit der Phasenfeldmethode in 2D. In Gebieten mit $6\,700 \times 6\,700 \times 6\,700$ Zellen, die auf 10 235 160 Recheneinheiten des Sunway TaihuLight Supercomputers berechnet werden, zeigen Zhang et al. [56] Phasenfeldsimulationen zur Untersuchung der Kornwachstumsdynamik auf Basis der Cahn-Hilliard-Gleichung. Der Löser erreichte dabei 50,579 PFlops, was einer maximalen Performance von 41,3% der Gesamtperformance des Sunway TaihuLight Supercomputers entspricht.

Zur Untersuchung der Mikrostrukturentwicklung von realen mehrkomponentigen Materialsystemen auf Basis von thermodynamischen Daten wurden verschiedene Multiphasen- und Multikomponenten-Phasenfeldmodelle entwickelt [1]. Thermodynamisch konsistente Modelle werden in [57–60] hergeleitet. Wheeler et al. stellen in [59] zwei Modelle zur Beschreibung der eutektischen Erstarrung von Legierungen vor. Das erste Modell basiert auf den vorherigen Arbeiten aus [28, 29] und nutzt die reguläre Lösungstheorie. Zur Behebung der Schwächen des ersten Modells entwickeln Wheeler et al. ein thermodynamisch konsistentes Modell auf Basis einer idealen Lösungstheorie. Für dieses Modell zeigen sie die Übereinstimmung mit der scharfen Grenzflächenlösung (engl. *sharp interface*). Hierzu untersuchen sie die Grenzfläche zwischen der Schmelze und den Festphasen und vergleichen die Winkel nahe des Dreiphasenpunkts mit den theoretischen Gleichgewichtswinkeln. Tiaden[1] et al. entwickeln in [54] ein Multiphasenmodell für N Phasen mit unterschiedlichen Löslichkeiten und Diffusionskonstanten zur Modellierung der Festphasendiffusion. Ihr Modell vergleichen sie für einen vereinfachten Fall mit zwei Phasen mit dem Modell von Wheeler et al. [28]. Zudem wird mit dem Modell auf Basis thermodynamischer Daten zu Fe-C die peritektische Erstarrung untersucht.

[1] Geburtsname J. Tiaden, Familienname J. Eiken

Weitere Multiphasenmodelle zur Simulation von mehr als zwei Phasen werden von Steinbach et al. [61], Garcke et al. [62] sowie von Nestler et al. [63] vorgestellt. Zur Interpolation der treibenden Kräfte bei mehr als zwei Phasen hat Moelans in [64] eine verbesserte Interpolationsfunktion vorgeschlagen.

Zur Simulation des Erstarrungsprozesse von immer komplexeren Legierungen mit mehr als zwei Komponenten wurden die Multiphasenmodelle um Modelle zur Beschreibung von Multikomponenten [42, 65–68] erweitert, wie in beschrieben [1]. Multiphasen-Multikomponentenmodelle erlauben es, die Mikrostrukturentwicklung einer Vielzahl von technisch relevanten Legierungen zu untersuchen, die heute in vielen Bauteilen Anwendung finden. Garcke et al. stellen in [65] ein Multiphasen-Multikomponentenmodell zur Untersuchung der Erstarrung mit beliebigen Phasendiagrammen vor. Dabei setzen sie das Modell in Beziehung mit den Modellen von Penrose und Fife [57] sowie Caginalp und Hele [69] und zeigen deren Übereinstimmung in bestimmten Fällen.

Nestler et al. [66] stellen ein thermodynamisch konsistentes Multiphasen-Multikomponentenmodell mit anisotroper Oberflächenenergie sowie anisotroper Kinetik vor. Auf Basis eines mit MPI und OpenMP parallelisierten Lösers werden mit diesem Modell verschiedene zweidimensionale und dreidimensionale Simulationen zur Erstarrung einer ternär eutektischen Legierung gezeigt. Die Kopplung von Multiphasen-Multikomponenten-Phasenfeldmodellen mit thermodynamischen Datenbanken wie Calphad wird von Eiken[1] et al. [68] mit Hilfe eines linearen Extrapolationsschemas vorgestellt. Hiermit wird die Diffusionsgleichung von [70] und [42] in bestimmten Fällen reproduziert, ohne die Einschränkung der Festphasendiffusion aus ihrer früheren Arbeit [54].

Die immer komplexeren Modelle und der Anstieg an zu lösenden Gleichungen zur Simulation von Mulitphasen-Multikomponentenmodellen in repräsentativen Gebieten führt zu einem immer größeren Rechenaufwand. Um diesen zu senken sowie genauere und größere Simulationen durchzuführen, wurde eine Vielzahl an modellseitigen Optimierungen auf verschiedenen Ebenen vorgestellt. Karma et al. [71, 72] stellen eine mathematische Optimierung vor, um den Rechenaufwand zu reduzieren, indem sie ein kleineres Verhältnis der Kapillarlänge und der Grenzflächenbreite nutzen. Zur Reduzierung der zu lösenden Evolutionsgleichungen in Multiphasenmodellen mit vielen Ordnungsparametern schlagen Kim et al. [73] einen Ansatz vor, um die Gleichungen auf eine konstante Anzahl zu reduzieren. Hierzu nutzen sie lokal die maximale Anzahl an sich berührenden Körnern an einem Punkt aus. Dies erlaubt es, den benötigten Arbeitsspeicher als auch die Anzahl an Evolutionsgleichungen für die Ordnungsparameter auf eine konstante Anzahl von fünf in 2D bzw. sechs in 3D zu senken. Dieser Ansatz wird in abgewandelter Form in [74–77] verwendet. Der Einfluss der diffusen Grenzflächenbreite und deren Gitterauflösung wird in [34, 78, 79] untersucht.

Neben der Erweiterung der Modelle wurde die Verknüpfung zu Datenbanken mit realen Parametern [53, 80] verbessert. Durch Kopplung der Phasenfeldmethode mit thermodynamischen Calphad-Datenbanken [39, 81–89] konnte die Mikrostrukturevolution von verschiedenen realen Legierungen untersucht werden [8, 90–92]. Verschiedene thermodynamische Datenbanken mit Gibbs-Energien für Mehrkomponentenlegierungen wurden in den letzten Jahren vorgestellt [93–106]. Diffusionskonstanten sind in Mobilitätsdatenbanken, wie zum Beispiel in [107–109], zusammengestellt. Die Kopplung von Datenbanken mit thermodynamischen Daten wie auch Mobilitätsdaten für die Phasenfeldmethode wird von [110, 111] gezeigt.

Ein Überblick über weitere Modelle ist von Caginalp und Xie [112], Almgren [113] und Sekerka [114] zusammengestellt. Der aktuelle Stand der Forschung im Bereich der Phasenfeldmethode ist in den Überblicksarbeiten [115–129] aufgezeigt. Eine detaillierte Beschreibung der Phasenfeldmethode ist von Provatas und Elder in [130] verfasst und die physikalischen Hintergründe sind unter anderem in den Büchern [131–135] erläutert. In Toth et al. [136] wird ein ausführlicher Vergleich der verschiedenen Modellstämme sowie deren Anwendbarkeitsbereiche gezeigt.

3.2 Der Ordnungsparameter ϕ

Zur Beschreibung der einzelnen thermodynamischen Phasen im Simulationsgebiet und deren Eigenschaften werden in der Phasenfeldmethode Ordnungsparameter verwendet. Basierend auf [8, 66, 137–139] wird im Folgenden der Ordnungsparameter genauer beschrieben. Hierzu wird das Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ mit der Anzahl an $d \in \{1,2,3\}$ Dimensionen betrachtet. Die Indexmenge $\mathbb{I}$ ist definiert als $\mathbb{I} := [1, \ldots, N]$, mit den Indizes $\alpha, \beta \in \mathbb{I}$. Die thermodynamischen Phasen, ihre unterschiedlichen physikalischen Eingenschaften, ihre lokalen Volumenanteile und ihre Orientierung werden über einzelne Phasenfelder ϕ_α, allgemein Ordnungsparameter genannt, beschrieben. Der Phasenfeldvektor $\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}, t)$ besteht aus N Einträgen, welche die jeweiligen Phasenfelder ϕ_α repräsentieren. Das Phasenfeld $\phi : \Omega \times \mathbb{R}^+ \to [0,1]$ beschreibt eine Funktion von lokalen Phasenanteilen im Gebiet Ω an der Stelle $\boldsymbol{x} \in \Omega$ und in der Zeit $t \in \mathbb{R}$. Die Funktion $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ ist stetig und zweifach ableitbar. Der Übergang zwischen zwei Phasenfeldern ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Der räumliche Phasenfeldvektor $\boldsymbol{\phi} : \Omega \to \Delta^{N-1}$ ist über dem Simplex

$$\Delta^{N-1} = \left\{ \phi_1 \boldsymbol{e}_1 + \cdots + \phi_N \boldsymbol{e}_N \mid \phi_\alpha \geq 0 \wedge \sum_{\alpha=1}^{N} \phi_\alpha = 1 \right\} \tag{3.1}$$

mit den Basisvektoren $\boldsymbol{e}_\alpha$ des kartesischen Koordinatensystems definiert.

Das Gebiet Ω kann in verschiedene Regionen unterteilt werden, wie in Abbildung 3.2 schematisch dargestellt. Die Region, in der nur ein Phasenfeld eins ist, wird als Bulk bezeichnet und wird definiert als $B_\alpha := \{\boldsymbol{x} \in \Omega \mid \phi_\alpha(\boldsymbol{x}, t) = 1\}$. Die diffuse Grenzfläche zwischen den thermodynamischen Phasen wird Interface genannt und ist definiert als $I_\Omega := \Omega \setminus \biguplus_{\alpha \in N} B_\alpha$. Das Interface zwischen genau zwei Phasen α und β wird durch $I_{\alpha\beta} := \{\boldsymbol{x} \in I_\Omega \mid \phi_\alpha(\boldsymbol{x}, t) + \phi_\beta(\boldsymbol{x}, t) = 1\}$ beschrieben. Das gesamte Teilgebiet, in dem eine Phase vorhanden ist, wird durch $\Omega_\alpha = \{\boldsymbol{x} \in \Omega \mid \phi_\alpha > 0\}$ definiert. Entsprechend ist die Region, in der ϕ_α nicht vorhanden ist, mit $\overline{\Omega}_\alpha = \Omega \setminus \Omega_\alpha$ beschrieben.

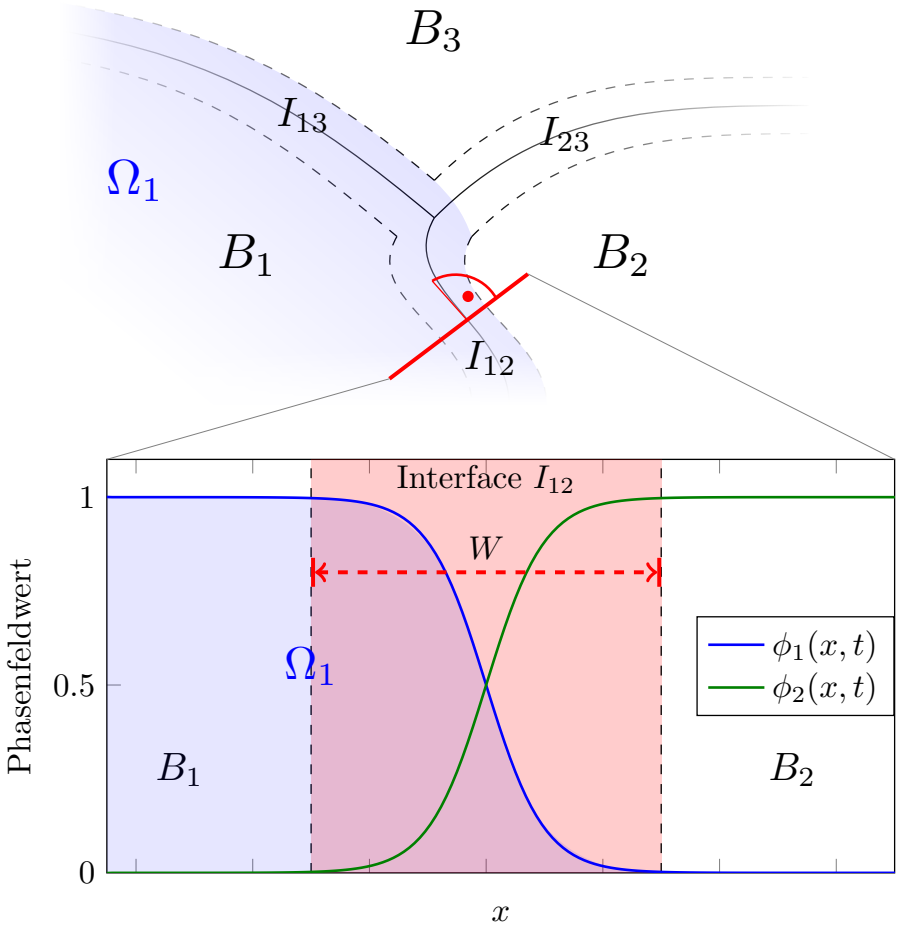


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung eines Ausschnitts des Gebiets Ω mit drei verschiedenen Regionen B_α, in denen nur ein Phasenfeld vorhanden ist. In Blau ist die Region Ω_1, in der $\phi_1 > 0$ ist, gekennzeichnet. Die rote Linie zeigt einen senkrechten Schnitt durch die diffuse Grenzfläche sowie den Verlauf der Phasenfelder ϕ_1 und ϕ_2. Die Interface-Region I_{12} mit der Breite W ist in Rot eingezeichnet.

3.3 Die Phasenfeldmethode für zwei Phasen

In diesem Abschnitt wird die Herleitung des Phasenfeldmodells für zwei Phasen nach [9] gezeigt. Hierfür wird das Entropiefunktional von Nestler et al. [66] ohne treibende Kräfte verwendet. Das Entropiefunktional ist formuliert als

$$\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}) = \int_\Omega \epsilon\tilde{a}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}) + \frac{1}{\epsilon}\tilde{\omega}(\boldsymbol{\phi})\ \mathrm{d}\boldsymbol{x}\ . \tag{3.2}$$

Das Entropiefunktional beschreibt die gesamte Grenzflächenentropie im System, basierend auf dem Term der Gradientenentropiedichte $\tilde{a}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi)$ und dem Term der Potentialentropiedichte $\tilde{\omega}(\boldsymbol{\phi})$. Das Zusammenspiel dieser beiden Terme sorgt für eine definierte diffuse Grenzschicht zwischen den Phasen, wie in Abschnitt 3.2 beschrieben.

Die Evolutionsgleichungen für die einzelnen Phasenfelder ϕ_α können unabhängig von der expliziten Form des gewählten Funktionals durch eine Variationsableitung bestimmt werden. Basierend auf dem Ansatz von Allen und Cahn [17] ergeben sich für die einzelnen Phasen die Evolutionsgleichungen

$$\tau\epsilon\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial t} = -\frac{\delta\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi)}{\delta\phi_\alpha} - \lambda \tag{3.3}$$

$$= \frac{\partial\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi)}{\partial\phi_\alpha} - \frac{\partial\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi)}{\partial\nabla\phi_\alpha} - \lambda, \quad \forall\alpha\ . \tag{3.4}$$

Der Lagrange-Multiplikator $\lambda := -1/N \sum_{\beta=1}^{N} {}^{\delta\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi},\nabla\phi)}/_{\delta\phi_\beta}$ stellt sicher, dass die Nebenbedingung $\sum_{\alpha=1}^{N} {}^{\partial\phi_\alpha}/_{\partial t} = 0$ erfüllt ist. Der Parameter τ ist der kinetische Koeffizient und $\epsilon > 0$ skaliert die Grenzflächenbreite. Die Evolutionsgleichungen werden dann, wie später in Abschnitt 4.1 gezeigt, räumlich und zeitlich diskutiert. Das Ziel der numerischen Lösung ist dabei, die Gleichgewichtsbedingungen zwischen den Phasen durch die Entropiemaximierung zu finden.

Für $N = 2$ Phasenfelder und ein eindimensionales Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^1$ kann (3.4) analytisch gelöst werden. Hierdurch kann entweder das Potential oder die Gradientenentropiedichte über das Interfaceprofil hergeleitet werden. Im Folgenden wird dies für das Potential gezeigt. Durch Ausnutzen der Bedingung, dass $\boldsymbol{\phi}$ auf einem Eins-Simplex definiert ist, kann im Zweiphasenfall $\phi_2 = 1 - \phi_1$ geschrieben werden, wodurch es genügt, nur eine Phase zu betrachten.

Die Gradientenentropiedichte für zwei Phasen ist gegeben als

$$\tilde{a}(\nabla\phi_\alpha) = \sigma_{\alpha\beta}\left(\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial x}\right)^2 \tag{3.5}$$

mit dem räumlichen Gradienten $\partial_x\phi_\alpha$ von ϕ_α und der Oberflächenentropiedichte $\sigma_{\alpha\beta}$. Die beiden Evolutionsgleichungen für ϕ_1 und ϕ_2 sind verrechnet mit dem Lagrange Multiplikator

$$\tau\epsilon\partial_t\phi_1 = -\frac{1}{2}\left(\frac{\delta\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi)}{\delta\phi_1} - \frac{\delta\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi)}{\delta\phi_2}\right) = -\tau\epsilon\partial_t\phi_2\ . \tag{3.6}$$

In diesem Fall heben sich die beiden Evolutionsgleichungen gegenseitig auf. Hierdurch müssen auch die beiden Variationen des Potentials $\tilde{\omega}'(\phi_1)$ sowie die Variationen der Gradientenentropiedichte (3.5) gleich sein

$$\frac{1}{2\epsilon^2}\tilde{\omega}'(\phi_1) = \sigma_{\alpha\beta}\partial_x^2\phi_1\ \ . \tag{3.7}$$

Daher genügt es, ϕ_1 im weiteren Verlauf als unabhängige Variable zu betrachten.

Für den definierten Übergang zwischen zwei Phasen wird eine punktsymmetrische Funktion auf Basis eines Sinus der Form

$$\phi_1(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sin\left(\frac{4}{\pi\epsilon}x\right) , \tag{3.8}$$

gewählt. Damit besitzt der Übergang zwischen zwei Phasen in Abhängigkeit von ϵ eine definierte Grenzflächenbreite W von

$$W = \frac{1}{4}\epsilon\pi^2 . \tag{3.9}$$

Durch Einsetzen von (3.8) in (3.7) und durch Integration nach dem Phasenfeldparameter ϕ_1 mit $\sin(4x/\pi\epsilon) = (1 - 2\phi_1)$ ergibt sich das Potential

$$\tilde{\omega}(\phi_1) = \frac{16}{\pi^2}\sigma_{\alpha\beta}\phi_1(1 - \phi_1) . \tag{3.10}$$

Durch Nutzung des Zusammenhangs $\phi_2 = 1 - \phi_1$ erhält das Potential, welches auch *Obstacle-Potential* genannt wird, seine symmetrische Form

$$\tilde{\omega}(\phi_1) = \begin{cases} \frac{16}{\pi^2}\sigma_{\alpha\beta}\phi_1\phi_2, & \phi \in \Delta^1 \\ \infty, & \text{ansonsten} . \end{cases} \tag{3.11}$$

Damit die Minima des Potentials $\tilde{\omega}(\phi)$ an den Kanten des Simplex $\Delta^1 = [0,1]$ sind, wird der Wert für das Potential in den Bulk-Bereichen B_α als unendlich definiert. Die Generalisierung des Obstacle-Potentials für Multiphasen, wie es im Folgenden verwendet wird, findet durch die Bildung einer Summe über alle paarweisen Oberflächen statt.

Abbildung 3.3 zeigt den hergeleiteten Zusammenhang zwischen der im Gebietsraum x definierten Gradientenentropiedichte, dem gewählten Profil und dem Potential sowie den Einfluss von zusätzlicher Krümmung und unterschiedlichen Oberflächenentropiedichten grafisch. Durch Nutzen eines Tangens Profils in (3.8) für das Interface anstatt des Sinus ergibt sich für dasselbe Vorgehen das bekannte Muldenpotential (engl. *multiwell potential*) [65, 66]. Durch die definierte Breite des Obstacle-Potentials ist es rechentechnisch günstiger als das Muldenpotential mit unendlicher Interfacebreite.

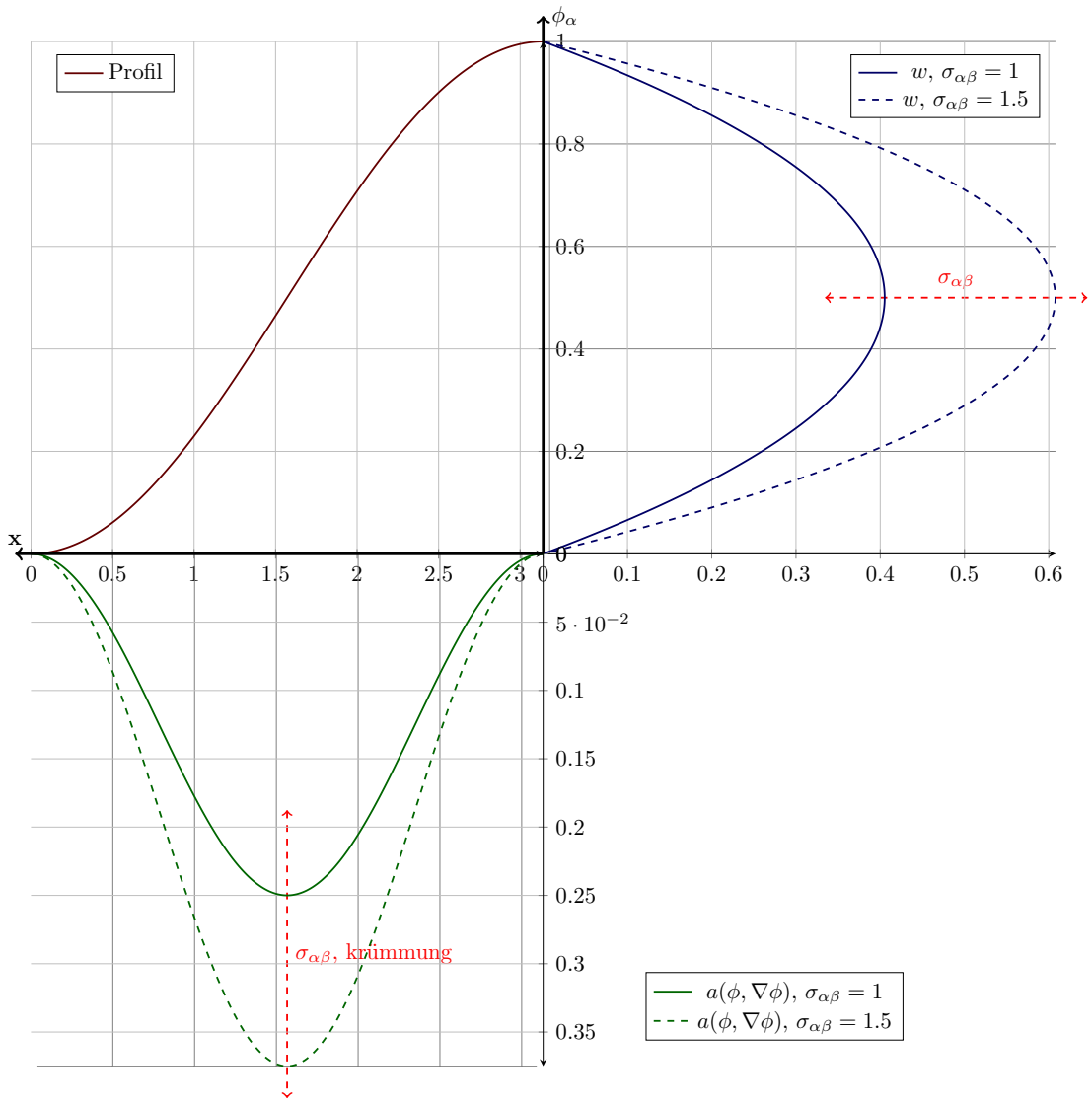


Abbildung 3.3: Zusammenhang zwischen Gradientenentropiedichte, Potential und dem Profil zwischen zwei Phasenfeldern.

3.4 Vom Entropiefunktional zum Großkanonischen Funktional

Als Basis für die Phasenfeldmethode können verschiedene thermodynamische Potentiale genutzt werden, um die gesamte Energie im System zu beschreiben und daraus die treibende Kraft für die Phasenumwandlung herzuleiten.

Ein Ansatz ist die Nutzung eines Entropiefunktionals

$$\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{c}, e) = \int_\Omega -\left(\epsilon\tilde{a}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi) + \frac{1}{\epsilon}\tilde{\omega}(\boldsymbol{\phi})\right) + s(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{c}, e)d\Omega\,, \tag{3.12}$$

wie im vorherigen Abschnitt nach Nestler et al.[66] hergeleitet. Es ist vom Phasenfeldvektor $\boldsymbol{\phi}$, dem K-Elemente großen Konzentrationsvektor $\boldsymbol{c}$ und der inneren Energie e abhängig. Die treibende Kraft zur Phasenumwandlung ist über die Entropie $s(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{c}, e)$ modelliert. Die Nutzung eines Entropiefunktionals zur Beschreibung der Phasenumwandlung wurde von Penrose und Fife [57] vorgeschlagen und wird beispielsweise in [57, 66, 140, 141] verwendet.

Zur Änderung der abhängigen Variablen des Systems kann das Entropiefunktional (3.12) durch Nutzung des Zusammenhangs $f = e - Ts$ zwischen der freien Energie f und der Entropie s sowie der Annahme von konstanter innerer Energie e in ein freies Energiefunktional der Form

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{c}, T) = \int_\Omega \left(\epsilon a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi) + \frac{1}{\epsilon}\omega(\boldsymbol{\phi})\right) + f(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{c}, T)d\Omega \tag{3.13}$$

umgeschrieben werden, mit der Temperatur T. Dies führt dazu, dass $\tilde{a}$ und $\tilde{\omega}$ nicht mehr von der Oberflächenentropiedichte, sondern von der Oberflächenenergiedichte abhängen, was durch Weglassen der $\tilde{\cdot}$ gekennzeichnet ist. Der Ansatz zur Minimierung der Helmholtz freien Energie wird in den Modellen von [24, 25, 27, 28, 61, 112, 142–144] verwendet.

Während der Umwandlung nahe den Gleichgewichtsbedingungen sind die chemischen Potentiale der Phasen gleich [70]. Hierdurch kann die treibende Kraft zur Phasenumwandlung durch die Minimierung des Großkanonischen Potentials hergeleitet werden [3, 8, 145, 146]. Zudem erlaubt es dieser Ansatz, die Abhängigkeit der Grenzflächenbreite von der treibenden Kraft zu reduzieren, für die ansonsten eine sehr feine Gitterauflösung und damit ein hoher Rechenaufwand notwendig wäre [145, 146]. Der Ansatz verhindert zudem das Freiwerden zusätzlicher Energie in der Grenzfläche bei der Verwendung des Phasenfeldmodells aus [66], wie in [146] beschrieben. Das Großkanonische Funktional kann unter der Annahme von konstantem Volumen, konstantem Druck und konstanter Teilchenanzahl aus (3.12) mit dem K-Elemente großen Vektor $\boldsymbol{\mu}$ des chemischen Potentials als

$$\Psi(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T) = \int_\Omega \left(\epsilon a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi) + \frac{1}{\epsilon}\omega(\boldsymbol{\phi})\right) + \psi(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T)d\Omega \tag{3.14}$$

hergeleitet werden [145, 146].

3.5 Das Phasenfeldmodell auf Basis des Großkanonischen Potentialansatzes

Für die Modellierung der Erstarrung hat sich das Funktional aus (3.14) auf Basis des Großkanonischen Potentials Ψ etabliert. Eine detaillierte Herleitung des Modells für Multikomponenten ist in [66, 146] und eine Zusammenfassung für ternäre Legierungen in [8] gegeben. Es besteht aus der Gradientenenergiedichte $a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi})$, dem Obstacle-Potential $\omega(\boldsymbol{\phi})$ und der treibenden Kraft $\psi(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T)$, die im Folgenden genauer beschrieben werden.

Die Gradientenenergiedichte für isotope Oberflächenenergien $\gamma_{\alpha\beta}$ hat die Form

$$a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}) = \sum_{\substack{\alpha,\beta=1 \\ (\alpha<\beta)}}^{N,N} \gamma_{\alpha\beta}|q_{\alpha\beta}|^2 \,, \tag{3.15}$$

mit dem generalisierten antisymmetrischen Gradientenvektor

$$q_{\alpha\beta} = \phi_\alpha \nabla\phi_\beta - \phi_\beta \nabla\phi_\alpha = -q_{\beta\alpha} \,. \tag{3.16}$$

Das generalisierte Obstacle-Potential, wie es in Abschnitt 3.3 für zwei Phasenfelder hergeleitet ist, schreibt sich im Multiphasenfall als

$$\omega(\boldsymbol{\phi}) = \begin{cases} \dfrac{16}{\pi^2} \displaystyle\sum_{\substack{\alpha,\beta=1 \\ (\alpha<\beta)}}^{N,N} \gamma_{\alpha\beta}\phi_\alpha\phi_\beta + \sum_{\substack{\alpha,\beta,\delta=1 \\ (\alpha<\beta<\delta)}}^{N,N,N} \gamma_{\alpha\beta\delta}\phi_\alpha\phi_\beta\phi_\delta, & \boldsymbol{\phi} \in \Delta^{N-1} \,, \\ \infty, & \boldsymbol{\phi} \notin \Delta^{N-1} \,. \end{cases} \tag{3.17}$$

Der Term höherer Ordnung mit dem Parameter $\gamma_{\alpha\beta\delta}$ dient der Unterdrückung von unphysikalischen Phasen in Zwei-Phasen-Grenzflächen und wird in Hötzer et al. [9] untersucht.

Die treibende Kraft $\psi(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T)$ zwischen den Phasen wird berechnet als

$$\psi(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T) = \sum_{\alpha=1}^{N} \psi_\alpha(\boldsymbol{\mu}, T) h_\alpha(\boldsymbol{\phi}) \tag{3.18}$$

mit dem Großkanonischen Potential

$$\psi_\alpha(\boldsymbol{\mu}, T) = f_\alpha(\boldsymbol{c}^\alpha(\boldsymbol{\mu}, T), T) - \sum_{i=1}^{K} \mu_i c_i^\alpha(\boldsymbol{\mu}, T) \tag{3.19}$$

und der Interpolationsfunktion für Multiphasen von Moelans [64] der Form

$$h_\alpha(\boldsymbol{\phi}) = \frac{\phi_\alpha^2}{\displaystyle\sum_{\beta=1}^{N} \phi_\beta^2} \,. \tag{3.20}$$

Die Differenzen zwischen den Großkanonischen Potentialen beschreibt dabei die Energie für die Phasenumwandlung. Für ternäre Legierungen lassen sich die parabolischen freien Energien f_α durch das Fitten der Gibbs-Energien an den Arbeitspunkten aus CALPHAD-Datenbanken bestimmen [89]. Da für die Berechnungen der treibenden Kraft nur der Unterschied in den Großkanonischen Potentialen sowie die chemischen Potentiale benötigt werden, können unter der Annahme von konstantem Volumen und konstantem Druck sowohl die Gibbs-Energien aus den CALPHAD-Datenbanken als auch die freien Energien wie im Modell genutzt werden, da diese nur um einen konstanten Energiebeitrag verschoben sind. Eine ausführliche

Herleitung im Kontext mit der Phasenfeldmethode ist für binäre und ternäre Systeme in [147] gegeben.

Die parabolischen freien Energien f_α mit den temperaturabhängigen Vorfaktoren $A(T)$ bis $G(T)$ werden allgemein für die jeweilige Phase wie folgt geschrieben:

$$\begin{aligned} f_\alpha(\boldsymbol{c}, T) = {} & A_\alpha(T){c_1}^2 + B_\alpha(T){c_2}^2 + C_\alpha(T){c_3}^2 \\ & + D_\alpha(T)c_1 + E_\alpha(T)c_2 + F_\alpha(T)c_3 + G_\alpha(T)\,. \end{aligned} \tag{3.21}$$

In Abbildung 3.4 sind die gefitteten parabolischen freien Energien für ein binäres und ternäres System gezeigt. Abbildung 3.4(a) zeigt den Zusammenhang zwischen den freien Energien f_α, dem chemischen Potential μ_α, dem Großkanonischen Potential ψ_α und der treibenden Kraft für ein binäres System. Die freien Energien auf Basis des parabolischen Ansatzes von (3.21) für das ternäre System Al-Ag-Cu, wie es in Abschnitt 6.4.3 verwendet wird, ist zur besseren Übersichtlichkeit in Abbildung 3.4(b) nur für die Schmelze (gelb) und Ag_2Al (grün) dargestellt. Die Paraboloide sind mit den Werten aus den Tabellen 6.6 und 6.7 für den Datensatz EXP berechnet. In Grau sind die Gleichgewichtsebenen der chemischen Potentiale und das daraus resultierende Großkanonische Potential bei einer Temperatur unterhalb der eutektischen Temperatur eingezeichnet. Auf dem Simplex sind zudem die Gleichgewichtskonzentrationen analog zu Abbildung 3.4(a) eingezeichnet.

Durch die Annahme von nur kleinen Temperaturunterschieden können die Vorfaktoren $A_\alpha(T)$ bis $G_\alpha(T)$ linear in der Temperatur gewählt werden, mit der Form $A_\alpha(T) = a_\alpha T + A_\alpha$ und den entsprechenden Steigungen a_α bis g_α und A_α bis G_α. Durch Ausnutzen der Massenerhaltung kann die Anzahl der K-Elemente im Konzentrationsvektor $\boldsymbol{c} \in \Delta^{K-1}$ um eins reduziert werden, indem c_3^α als $c_3^\alpha = (1 - c_1^\alpha - c_2^\alpha)$ dargestellt wird. Diese Umformulierung vereinfacht die weiteren mathematischen Formulierungen und reduziert den benötigten Rechenaufwand und den Arbeitsspeicher.

Somit lässt sich (3.21) umformen in

$$\begin{aligned} f_\alpha(\boldsymbol{c}, T) = {} & \tilde{A}_\alpha(T){c_1}^2 + \tilde{B}_\alpha(T){c_2}^2 + \tilde{C}_\alpha(T)c_1c_2 \\ & + \tilde{D}_\alpha(T)c_1 + \tilde{E}_\alpha(T)c_2 + \tilde{F}_\alpha(T) \end{aligned} \tag{3.22}$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{A}_\alpha(T) &= A_\alpha(T) + C_\alpha(T)\,, \\ \tilde{B}_\alpha(T) &= B_\alpha(T) + C_\alpha(T)\,, \\ \tilde{C}_\alpha(T) &= 2C_\alpha(T)\,, \\ \tilde{D}_\alpha(T) &= D_\alpha(T) - 2C_\alpha(T) - F_\alpha(T)\,, \\ \tilde{E}_\alpha(T) &= E_\alpha(T) - 2C_\alpha(T) - F_\alpha(T)\,, \\ \tilde{F}_\alpha(T) &= C_\alpha(T) + F_\alpha(T) + G_\alpha(T)\,. \end{aligned}$$

Die parabolischen freien Energien (3.21) lassen sich nach Hötzer et al. [8] kompakt mit dem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ schreiben als

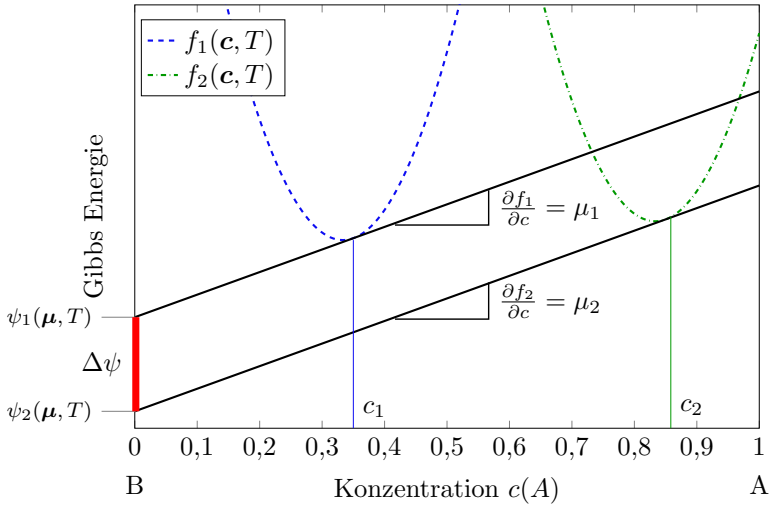
$$f_\alpha(\boldsymbol{c}, T) = \langle \boldsymbol{c}, \boldsymbol{\Xi}_\alpha(T)\boldsymbol{c} \rangle + \langle \boldsymbol{c}, \boldsymbol{\xi}_\alpha(T) \rangle + X_\alpha(T)\,, \tag{3.23}$$

mit der Matrix $\boldsymbol{\Xi}_\alpha(T)$, dem Vektor $\boldsymbol{\xi}_\alpha(T)$ und dem Skalar $X_\alpha(T)$:

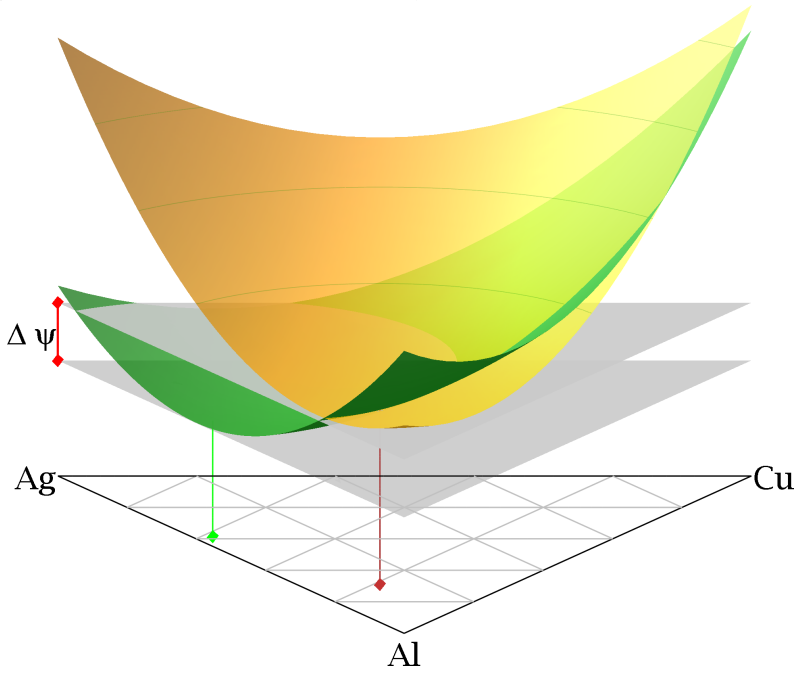
$$\boldsymbol{\Xi}_\alpha(T) = \begin{bmatrix} \tilde{A}_\alpha(T) & \frac{1}{2}\tilde{C}_\alpha(T) \\ \frac{1}{2}\tilde{C}_\alpha(T) & \tilde{B}_\alpha(T) \end{bmatrix}, \tag{3.24}$$

$$\boldsymbol{\xi}_\alpha(T) = \begin{pmatrix} \tilde{D}_\alpha(T) \\ \tilde{E}_\alpha(T) \end{pmatrix}, \tag{3.25}$$

$$X_\alpha(T) = \tilde{F}_\alpha(T)\,. \tag{3.26}$$



(a) Zusammenhang zwischen den freien Energien f_α, dem chemischen Potential μ_α und dem Großkanonischen Potential ψ_α für die Phasen $\alpha \in \{1,2\}$.



(b) Reduzierte Darstellung der freien Energien für das ternäre System Al-Ag-Cu auf Basis des Datensatzes EXP aus Abschnitt 6.4.3.

Abbildung 3.4: Schematische Darstellung des Zusammenhangs der freien Energien in einem binären und ternären System.

Hiermit lassen sich die K-spezifischen chemischen Potentiale $\boldsymbol{\mu}^\alpha(\boldsymbol{c}, T) = (\mu_1^\alpha, \ldots, \mu_K^\alpha)^T$ für das Phasenfeld ϕ_α schreiben als

$$\boldsymbol{\mu}^\alpha(\boldsymbol{c}, T) = \frac{\partial f_\alpha(\boldsymbol{c}, T)}{\partial \boldsymbol{c}} = 2\boldsymbol{\Xi}_\alpha(T)\boldsymbol{c} + \boldsymbol{\xi}_\alpha(T) \,. \tag{3.27}$$

Aufgrund von Diffusion passen sich unterschiedliche chemische Potentiale von gleichzeitig vorhandenen Phasen instantan an, weshalb die spezifischen chemischen Potentiale zu einem chemischen Potential reduziert werden können, $\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{c}, T) = \boldsymbol{\mu}^\alpha(\boldsymbol{c}, T) \;\forall\; \alpha \in \mathbb{I}$, unabhängig von den jeweiligen Phasen [135, 145].
Die spezifische Konzentration $\boldsymbol{c}^\alpha$ für die Phase α lässt sich damit als

$$\boldsymbol{c}^\alpha(\boldsymbol{\mu}, T) = -\frac{\partial \psi_\alpha(\boldsymbol{\mu}, T)}{\partial \boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Xi}_\alpha^{-1}(T) \;\; (\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\xi}_\alpha(T)) \tag{3.28}$$

über die inverse Funktion von (3.46) berechnen. Die Ableitung von (3.28) nach $\boldsymbol{\mu}$ ist

$$\frac{\partial \boldsymbol{c}^\alpha(\boldsymbol{\mu}, T)}{\partial \boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Xi}_\alpha^{-1}(T) \,. \tag{3.29}$$

Die Konzentrationen $\boldsymbol{c}$ für ein gegebenes chemisches Potential lassen sich mit (3.28) berechnen als

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{c}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T) &= -\frac{\partial \psi(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \boldsymbol{\mu}} && (3.30)\\
&= -\sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\partial \psi_\alpha(\boldsymbol{\mu}, T)}{\partial \boldsymbol{\mu}} h_\alpha(\boldsymbol{\phi}) && (3.31)\\
&= \sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{c}^\alpha(\boldsymbol{\mu}, T) h_\alpha(\boldsymbol{\phi}) \,. && (3.32)
\end{aligned}$$

Die Gleichung für das Großkanonische Potential (3.19) lässt sich mit (3.23) und (3.26) in eine kompakte Schreibweise umformen zu

$$\begin{aligned}
\psi_\alpha(\boldsymbol{\mu}, T) &= \langle \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Upsilon}_\alpha(T)\boldsymbol{\mu} \rangle + \langle \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{v}_\alpha(T) \rangle + Y_\alpha(T) \\
&= \langle \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Upsilon}_\alpha(T)\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{v}_\alpha(T) \rangle + Y_\alpha(T)
\end{aligned} \tag{3.33}$$

mit

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Upsilon}_\alpha(T) &= -\frac{1}{4}\boldsymbol{\Xi}_\alpha^{-1}(T) && (3.34)\\
\boldsymbol{v}_\alpha(T) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{\Xi}_\alpha^{-1}(T)\boldsymbol{\xi}_\alpha(T) && (3.35)\\
Y_\alpha(T) &= -\frac{1}{4}\left\langle \boldsymbol{\Xi}_\alpha^{-1}(T)\boldsymbol{\xi}_\alpha(T), \boldsymbol{\xi}_\alpha(T) \right\rangle + X_\alpha \\
&= -\frac{1}{2}\left\langle \boldsymbol{v}_\alpha(T), \boldsymbol{\xi}_\alpha(T) \right\rangle + X_\alpha(T) \,. && (3.36)
\end{aligned}$$

3.6 Phasenfeldevolutionsgleichung

Die Phasenfeldevolutionsgleichung wird mit Hilfe des Allen-Cahn-Ansatzes, der besagt, dass die zeitliche Entwicklung des Ordnungsparameters proportional zur Variationsableitung des Funktionals nach dem Ordnungsparameter ist, aus (3.14) hergeleitet. Die Evolutionsgleichung schreibt sich

$$\tau\epsilon\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial t} = \underbrace{-\epsilon\left(\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi},\nabla\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha} + \nabla\cdot\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi},\nabla\boldsymbol{\phi})}{\partial\nabla\phi_\alpha}\right) - \frac{1}{\epsilon}\frac{\partial\omega(\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha} - \frac{\partial\psi(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\mu},T)}{\partial\phi_\alpha}}_{\frac{\delta\Psi}{\delta\phi_\alpha}} + \lambda \tag{3.37}$$

mit dem Lagrange-Multiplikator $\lambda = \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{\delta\Psi}{\delta\phi_\alpha}$. Der kinetische Koeffizient

$$\tau = \frac{\sum\limits_{\substack{\alpha,\beta=1\\(\alpha<\beta)}}^{N,N}\tau_{\alpha\beta}\phi_\alpha\phi_\beta}{\sum\limits_{\substack{\alpha,\beta=1\\(\alpha<\beta)}}^{N,N}\phi_\alpha\phi_\beta} \tag{3.38}$$

wird über die reziproke Mobilität $\tau_{\alpha\beta}$ zwischen zwei Phasenfeldern berechnet. Für die Variationsableitungen aus dem Allen-Cahn-Ansatz folgen die Ableitungen für die einzelnen Funktionen des Modells. Die Ableitungen der Gradientenenergiedichte (3.15) können mit $q_{\alpha\beta} = -q_{\beta\alpha}$ wie folgt geschrieben werden:

$$\frac{\partial a(\phi,\nabla\phi)}{\partial\phi_\alpha} = 2\sum_{\substack{\beta=1\\(\beta\neq\alpha)}}^{N}\gamma_{\alpha\beta}\left\langle q_{\alpha\beta},\nabla\phi_\beta\right\rangle\,, \tag{3.39}$$

$$\frac{\partial a(\phi,\nabla\phi)}{\partial\nabla\phi_\alpha} = -2\sum_{\substack{\beta=1\\(\beta\neq\alpha)}}^{N}\gamma_{\alpha\beta}q_{\alpha\beta}\phi_\beta\,. \tag{3.40}$$

Die Ableitung des Obstacle-Potentials (3.17) ergibt

$$\frac{\partial w(\phi,\nabla\phi)}{\partial\phi_\alpha} = \frac{16}{\pi^2}\sum_{\substack{\beta=1\\(\beta\neq\alpha)}}^{N}\gamma_{\alpha\beta}\phi_\beta + \sum_{\substack{\beta=1\\(\beta\neq\alpha)}}^{N}\sum_{\substack{\gamma=1\\(\gamma>\beta)}}^{N}\gamma_{\alpha\beta\gamma}\phi_\beta\phi_\gamma\,. \tag{3.41}$$

Die treibende Kraft des Großkanonischen Potentials (3.18) hängt nur über die Interpolationsfunktion (3.20) vom Ordnungsparameter ab, weshalb nur die Interpolationsfunktion differenziert wird. Durch die Summe über alle Ordnungsparameter in (3.18) ergeben sich die zwei unterschiedlichen Differenzen

$$\frac{\partial h_\alpha(\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha} = \frac{2\phi_\alpha\left(\sum\limits_{\beta=1}^{N}\phi_\beta^2 - \phi_\alpha^2\right)}{\left(\sum\limits_{\beta=1}^{N}\phi_\beta^2\right)^2}\,, \tag{3.42}$$

$$\frac{\partial h_\alpha(\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\delta} = -\frac{2\phi_\alpha^2\phi_\delta}{\left(\sum\limits_{\beta=1}^{N}\phi_\beta^2\right)^2} \mid \delta\neq\alpha\,. \tag{3.43}$$

3.7 Modell zur Beschreibung des chemischen Potentials

Das chemische Potential, auch Potential eines Stoffes genannt, wurde von J. W. Gibbs eingeführt. Es beschreibt die Möglichkeit, die Zustandsform in einer thermodynamischen Phase zu ändern. Die Evolution des chemischen Potentials kann direkt aus der Evolution der Konzentrationen hergeleitet werden. Eine detaillierte Herleitung des Modells für Multikomponenten ist in [145, 146] und eine Zusammenfassung für ternäre Legierungen in [8] gegeben.

Die Evolution der Konzentrationen in Abhängigkeit des chemischen Potentials, der Phasenänderung und der Temperatur ist

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{c}}{\partial t} &= \left(\frac{\partial \boldsymbol{c}}{\partial \boldsymbol{\mu}}\right)_{T,\boldsymbol{\phi}} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial t} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{c}}{\partial \boldsymbol{\phi}}\right)_{T,\boldsymbol{\mu}} \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial t} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{c}}{\partial T}\right)_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\phi}} \frac{\partial T}{\partial t} \\ &= \nabla \cdot (\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\phi}, T) \nabla \boldsymbol{\mu}) \,. \end{aligned} \tag{3.44}$$

Die Berechnung der Evolution des chemischen Potentials erlaubt es, die treibenden Kräfte (3.18) in der Phasenfeldevolutionsgleichung direkt miteinander zu koppeln. Die Mobilität der chemischen Potentiale

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T) = \sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{D}_\alpha \frac{\partial \boldsymbol{c}_\alpha(\boldsymbol{\mu}, T)}{\partial \boldsymbol{\mu}} h_\alpha(\boldsymbol{\phi}) \tag{3.45}$$

wird mit der Diffusionsmatrix $\boldsymbol{D}_\alpha$ berechnet.

Die Evolution für das chemische Potential aus (3.44) lässt sich damit schreiben als

$$\frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial t} = \left[\left(\frac{\partial \boldsymbol{c}}{\partial \boldsymbol{\mu}}\right)_{T,\boldsymbol{\phi}}\right]^{-1} \left(\nabla \cdot (\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\phi}, T) \nabla \boldsymbol{\mu}) - \left(\frac{\partial \boldsymbol{c}}{\partial \boldsymbol{\phi}}\right)_{T,\boldsymbol{\mu}} \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial t} - \left(\frac{\partial \boldsymbol{c}}{\partial T}\right)_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\phi}} \frac{\partial T}{\partial t}\right). \tag{3.46}$$

Durch die künstliche Verbreiterung der Grenzfläche zwischen zwei Phasen mit unterschiedlichen Diffusionskonstanten kommt es zu einem Stoffüberfüllungseffekt, *solute trapping effect*, der Konzentrationen in der Grenzfläche. Dieser Effekt wird in [29, 148–151] untersucht. Um diesen unphysikalischen Effekt auszugleichen, werden sogenannte *anti-trapping-currents* vorgeschlagen [34, 145, 146, 152–154]. Diese führen durch ihre Komplexität jedoch zu einem deutlich höheren Rechenaufwand. Aufgrund dieses Stoffüberfüllungseffekts ist in (3.46) ein *anti-trapping-current* $\boldsymbol{J}_{at}$ notwendig. Der *anti-trapping-current* hat die Form

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}_{\mathrm{at}} = \frac{\pi\epsilon}{4} \sum_{\substack{\alpha=1 \\ (\alpha\neq\ell)}}^{N} \frac{h_\alpha(\boldsymbol{\phi}) h_\ell(\boldsymbol{\phi})}{\sqrt{\phi_\alpha \phi_\ell}} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} \left(\left\langle \frac{\nabla \phi_\alpha}{|\nabla \phi_\alpha|}, \frac{\nabla \phi_\ell}{|\nabla \phi_\ell|} \right\rangle\right) \\ \left(\left(\boldsymbol{c}^\ell(\boldsymbol{\mu}, T) - \boldsymbol{c}^\alpha(\boldsymbol{\mu}, T)\right) \otimes \frac{\nabla \phi_\alpha}{|\nabla \phi_\alpha|}\right)\end{aligned} \tag{3.47}$$

und ist in [145, 146] hergeleitet. Der Phasenfeldindex ℓ beschreibt die flüssige Phase.

Mit der Gleichung (3.47) für den *anti-trapping-current* und durch Einsetzen der Berechnung für die Konzentration aus (3.32) in (3.46) ergibt die Evolutionsgleichung für das chemische Potential

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial t} = \left[\sum_{\alpha=1}^{N} h_\alpha(\boldsymbol{\phi}) \left(\frac{\partial \boldsymbol{c}^\alpha(\boldsymbol{\mu}, T)}{\partial \boldsymbol{\mu}}\right)\right]^{-1} \left(\nabla \cdot \left(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T) \nabla \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{J}_{\mathrm{at}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T)\right)\right. \\ \left. - \sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{c}^\alpha(\boldsymbol{\mu}, T) \frac{\partial h_\alpha(\boldsymbol{\phi})}{\partial t} - \sum_{\alpha=1}^{N} h_\alpha(\boldsymbol{\phi}) \left(\frac{\partial \boldsymbol{c}^\alpha(\boldsymbol{\mu}, T)}{\partial T}\right) \frac{\partial T}{\partial t}\right).\end{aligned} \tag{3.48}$$

Der erste Term in (6.2) kann als Löslichkeit interpretiert werden. Der zweite Term beschreibt den Fluss des chemischen Potentials $\boldsymbol{\mu}$ in Abhängigkeit der Mobilität und des *anti-trapping-current*. Die beiden letzten Terme beschreiben die Änderung des chemischen Potentials aufgrund der Phasenumwandlung und der Temperaturänderung. Der Beitrag durch die Änderung der Phasenumwandlung kann über den Gradienten in der Zeit zwischen dem alten und neuen Zeitschritt in den Phasenfeldern bestimmt werden. Der Beitrag der Temperaturänderung für die jeweilige spezifische Konzentration c_i^α ergibt sich durch das Ableiten von (3.32) nach T

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{c}^\alpha(\boldsymbol{\mu},T)}{\partial T} = &\left(k_\alpha(T)\begin{bmatrix} \tilde{B}_\alpha(T) & -\frac{1}{2}\tilde{C}_\alpha(T) \\ -\frac{1}{2}\tilde{C}_\alpha(T) & \tilde{A}_\alpha(T) \end{bmatrix}\right.\\ &\left.+\frac{1}{2K_\alpha(T)}\begin{bmatrix} \tilde{b}_\alpha & -\frac{1}{2}\tilde{c}_\alpha \\ -\frac{1}{2}\tilde{c}_\alpha & \tilde{a}_\alpha \end{bmatrix}\right)(\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{\xi}_\alpha)\\ &+\frac{1}{2k_\alpha(T)}\begin{pmatrix} -\tilde{d}_\alpha\tilde{B}_\alpha(T)+\tilde{e}_\alpha\frac{1}{2}\tilde{C}_\alpha(T) \\ \tilde{d}_\alpha\frac{1}{2}\tilde{C}_\alpha(T)+\tilde{e}_\alpha\tilde{A}_\alpha(T) \end{pmatrix},\end{aligned} \tag{3.49}$$

mit den temperaturabhängigen Faktoren

$$K_\alpha(T) = \tilde{A}_\alpha(T)\tilde{B}_\alpha(T) - \frac{1}{4}\left(\tilde{C}_\alpha(T)\right)^2, \tag{3.50}$$

$$k_\alpha(T) = \frac{\partial}{\partial T}\frac{1}{K_\alpha(T)} = -\frac{1}{2{K_\alpha}^2}\left(\tilde{a}_\alpha\tilde{B}_\alpha(T)+\tilde{A}_\alpha(T)\tilde{b}_\alpha-\left(\frac{1}{2}\tilde{C}_\alpha(T)\right)\tilde{c}_\alpha\right). \tag{3.51}$$

4

Umsetzung des Phasenfeldmodells für Hochleistungsrechner

Das Hochleistungsrechnen, im Englischen High Performance Computing (HPC) genannt, umfasst alle Aktivitäten, die zur Bewältigung von speicher- und rechenintensiven Aufgaben notwendig sind. Hierzu zählen auch die rechenintensiven numerischen Simulationen mit der Phasenfeldmethode in der Materialwissenschaft.

Moderne Hochleistungsrechner bestehen aus vielen Rechenknoten, die über ein Netzwerk verbunden sind. Diese setzen sich wiederum aus einzelnen Prozessoren mit mehreren Rechenkernen zusammen. Innerhalb dieser Rechensysteme gibt es unterschiedliche Ebenen der Parallelität sowie Flaschenhälse, auf die die Software zur effizienten Nutzung der Hochleistungsrechner angepasst werden muss. Flaschenhälse bilden dabei die Anbindung des Arbeitsspeichers an die Rechenkerne, die maximal mögliche Rechenleistung, die Netzwerkverbindung zwischen den Knoten und die Ein-/Ausgabe der Simulationsdaten.

Ein einzelner Rechenkern besteht heute meist aus mehreren Ports, in denen die jeweiligen Instruktionen des Programms ausgeführt werden. Instruktionen können zudem vektorisiert durchgeführt werden, indem diese gleichzeitig auf mehrere Datentupel angewendet werden. Dies wird generell als *single instruction, multiple data* (SIMD) bezeichnet. Hierzu wurden in den letzten Jahren verschiedene SIMD-Instruktionserweiterungen in die Rechenkerne eingebaut. Mit der *Streaming SIMD Extensions*-Erweiterung (SSE) für x86 Mikroprozessoren von Intel und AMD können vier Werte mit einfacher Genauigkeit, *single precision* (SP), bzw. zwei Werte mit doppelter Genauigkeit, *double precision* (DP) in einer Operation verarbeitet werden. Die nachfolgenden Erweiterungen *Advanced Vector Extensions* (AVX), sowie das neuere AVX2 erlauben es, im Vergleich zu SSE, die doppelte Anzahl an Werten zu verarbeiten. Für IBM PowerPC-Rechenkerne gibt es - ähnlich zu AVX - die SIMD-Erweiterung *Quad Processing eXtension* (QPX), bei der ebenfalls vier DP-Werte in einer Operation verarbeitet werden können.

Seit der Intel Haswell-Rechnerarchitektur ist es zudem möglich, eine Addition und Multiplikation als eine Operation durchzuführen, *fused multiply-add* (FMA) genannt. Zusätzlich erlauben die Rechenkerne oft *Simultaneous Multithreading* (SMT) zu nutzen, bei Intel auch *Hyperthreading* (HT) genannt, bei dem sich mehrere Ausführungswarteschlangen eine Recheneinheit teilen. Hierdurch können die Latenzen in der Abarbeitung der Instruktionen überlagert werden.

Die maximal mögliche Anzahl an Gleitkommaberechnungen pro Sekunde, auch *Floating Point Operations per Second* ($^{FLOP}/_{s}$) genannt, berechnet sich daher aus der Taktrate, der Anzahl an Rechenkernen sowie den

Faktoren aus den Erweiterungen

$$PeakPerformance = Takt \cdot Rechenkerne \cdot SIMD\,breite \cdot FMA \cdot Ports\,. \tag{4.1}$$

Zur vollen Ausnutzung eines Rechnersystems ist es daher notwendig, alle Erweiterungen der Prozessoren zu nutzen. Abhängig von der erreichten Performance werden die Präfixe G, T und P der Einheit $^{FLOP}/_{s}$ zur besseren Unterscheidung der Werte vorangestellt, wobei Giga den Wert mit 10^6 multipliziert, Tera mit 10^{12} und Peta mit 10^{15}.

Abhängig von dem zu lösenden Problem können innerhalb eines Prozessors allgemein zwei Flaschenhälse für ein Programm unterschieden werden: die Anbindung der Rechenkerne an den Arbeitsspeicher sowie die maximal möglichen Instruktionen im Rechenkern. Hierdurch kann die Performance des Programms durch die Bandbreite des Arbeitsspeichers an die Rechenkerne, *memory bound*, oder durch die maximal ausführbaren Instruktionen, *compute bound*, limitiert sein.

Zur Untersuchung dieser Flaschenhälse können verschiedene Modelle verwendet bzw. Messungen durchgeführt werden. Ein häufiger Ansatz ist die Verwendung eines Roofline-Modells [155], welches Hinweise auf die möglichen Flaschenhälse sowie die Performance des Programms gibt. Hierzu wird zum einen die Arbeitsspeicheranbindung an die Rechenkerne mit dem STREAM Benchmark [156] gemessen und zum anderen die verrichtete Arbeit über die Anzahl an $^{FLOP}/_{s}$ oder die (Millionen) Zell-Updates pro Sekunde ($^{(M)LUP}/_{s}$) durch Zeitmessungen bestimmt.

Zudem stellt das Netzwerk zwischen den Knoten oft aufgrund seiner Latenz und Bandbreite einen weiteren Flaschenhals dar. Hierfür werden abhängig vom betrachteten Problem *Strong-Scaling*-Tests bzw. *Weak-Scaling*-Tests durchgeführt [157]. Beim *Strong-Scaling* wird die Problemgröße konstant gehalten und das Skalierungsverhalten bei steigender Anzahl an Rechenkernen betrachtet. Beim *Weak-Scaling* wird die Problemgröße mit der Anzahl an Rechenkernen vergrößert.

Im ersten Teil dieses Abschnitts wird die Diskretisierung und die effiziente Implementierung des Phasenfeldmodells aus Kapitel 3 gezeigt. Anschließend wird auf die angewendeten Optimierungen und deren Performance auf einem Rechenkern, auf einem Rechenknoten sowie auf verschiedenen Hochleistungsrechnern eingegangen. Im zweiten Teil wird ein paralleler Algorithmus zur Bestimmung von Zusammenhangskomponenten in 3D vorgestellt.

4.1 Diskretisierung des Phasenfeldmodells

Zur Implementierung des Phasenfeldmodells aus Kapitel 3 werden die Evolutionsgleichungen mit finiten Differenzen im Raum und mit einem expliziten Euler-Verfahren in der Zeit diskretisiert.

Die Werte für die Phasenfelder und die chemischen Potentiale sowie die Berechnungen der zeitlichen Änderung werden in der Zellmitte der kartesischen Gitterzellen bestimmt. In Abbildung 4.1 ist ein zweidimensionaler Gitterausschnitt mit den Zellwerten (schwarze Kreise) sowie den Flüssen (blaue Dreiecke) und dem daraus entstehenden Rechenstempel (blau gestrichelt) für das Phasenfeld zu sehen. Der Stempel beschreibt die Datenabhängigkeit, welche zur Berechnung einer Gitterzelle in der Zeit notwendig ist. Hierzu wird, wie in [138], im Folgenden das Schema DxCy verwendet, wobei D für die Dimensionen, C für die Zelle (Englisch: cell) und die Platzhalter x und y für die entsprechende Anzahl stehen. Der hier gezeigte Phasenfeldstempel entspricht in 2D einem D2C5-Stempel und sein 3D-Äquivalent einem D3C7-Stempel.

Basierend auf der Arbeit von Garcke et al. [158] werden für die verschiedenen Gradienten und Divergenz-Operatoren unterschiedliche Differenzen verwendet. Daher werden für die Berechnung der Gradienten, wie in [9] beschrieben, in den beiden Ableitungen der Gradientenergiedichte (3.15) unterschiedliche Differenzen verwendet. Für Gradienten innerhalb der Divergenz werden rechtsseitige Gradienten verwendet. Hierdurch wird sichergestellt, dass die Berechnungen der Teilterme immer in der Zellmitte stattfinden.

Ansonsten werden zentrale Gradienten für die Berechnungen genutzt. Für die Ableitungen des Obstacle-Potentials (3.41) und die treibende Kraft (3.18) mit der Interpolationsfunktion (3.43) des Phasenfeldmodells werden nur die Werte aus der Zellmitte benötigt, wodurch direkt die Werte aus den Zellen verwendet werden können. Für die Gitterposition x, y, z und den Gitterabstand Δx, Δy und Δz in die jeweilige Raumrichtung wird $\partial_{\phi_\alpha} a(\phi, \nabla\phi)$ aus (3.39) in 3D für den Phasenfeldwert ϕ_α sowie für das Skalarprodukt $\langle \boldsymbol{q}_{\alpha\beta}, \nabla\phi_\beta \rangle$ mit dem folgendem zentralen Differenzenschema der Form

$$\left[\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi)}{\partial\phi_\alpha}\right]^{t}_{x,y,z} = 2 \sum_{\substack{\beta=1 \\ (\beta\neq\alpha)}}^{N} \gamma_{\alpha\beta} \left\langle \begin{pmatrix} \phi_\beta^{x,y,z} \frac{\phi_\alpha^{x+1,y,z} - \phi_\alpha^{x-1,y,z}}{2\Delta x} - \phi_\alpha^{x,y,z} \frac{\phi_\beta^{x+1,y,z} - \phi_\beta^{x-1,y,z}}{2\Delta x} \\ \phi_\beta^{x,y,z} \frac{\phi_\alpha^{x,y+1,z} - \phi_\alpha^{x,y-1,z}}{2\Delta y} - \phi_\alpha^{x,y,z} \frac{\phi_\beta^{x,y+1,z} - \phi_\beta^{x,y-1,z}}{2\Delta y} \\ \phi_\beta^{x,y,z} \frac{\phi_\alpha^{x,y,z+1} - \phi_\alpha^{x,y,z-1}}{2\Delta z} - \phi_\alpha^{x,y,z} \frac{\phi_\beta^{x,y,z+1} - \phi_\beta^{x,y,z-1}}{2\Delta z} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{\phi_\beta^{x+1,y,z} - \phi_\beta^{x-1,y,z}}{2\Delta x} \\ \frac{\phi_\beta^{x,y+1,z} - \phi_\beta^{x,y-1,z}}{2\Delta y} \\ \frac{\phi_\beta^{x,y,z+1} - \phi_\beta^{x,y,z-1}}{2\Delta z} \end{pmatrix} \right\rangle \tag{4.2}$$

berechnet.

Die Berechnung des Divergenzterms $\nabla \cdot \partial_{\nabla\phi_\alpha} a(\phi, \nabla\phi)$ (3.40) wird in zwei Schritten durchgeführt. Im ersten Schritt werden die Flüsse J an den Zellkanten als rechtsseitige Differenzen bestimmt. Für die Raumrichtung entlang der X-Koordinate wird der Fluss $J_{\alpha,x}$ an der ±-Zellseite für das Phasenfeld ϕ_α berechnet als

$$J^{\pm}_{\alpha,x} = \pm \sum_{\substack{\beta=1 \\ (\beta\neq\alpha)}}^{N} \gamma_{\alpha\beta} \Big(\phi_\alpha^{x\pm\frac{1}{2},y,z} \frac{\phi_\beta^{x\pm1,y,z} - \phi_\beta^{x,y,z}}{\Delta x} - \phi_\beta^{x\pm\frac{1}{2},y,z} \frac{\phi_\alpha^{x\pm1,y,z} - \phi_\alpha^{x,y,z}}{\Delta x} \Big) \phi_\beta^{x\pm\frac{1}{2},y,z} . \tag{4.3}$$

Die Gradienten werden über den generalisierten antisymmetrischen Gradientenvektor $q_{\alpha\beta}$ mit den auf die Zellkante gemittelten Phasenfeldwerten $\phi_\alpha^{x\pm\frac{1}{2},y,z} = 1/2(\phi_\alpha^{x\pm1,y,z} + \phi_\alpha^{x,y,z})$ skaliert.

Der Fluss in die beiden anderen Raumrichtungen wird analog bestimmt. Im zweiten Schritt wird die Divergenz über die Flüsse mit linksseitigen Differenzen

$$\left[\nabla \cdot \left(\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi)}{\partial\nabla\phi_\alpha}\right)\right]^{t}_{x,y,z} = -2 \left(\frac{J^{+}_{\alpha,x} - J^{-}_{\alpha,x}}{\Delta x} + \frac{J^{+}_{\alpha,y} - J^{-}_{\alpha,y}}{\Delta y} + \frac{J^{+}_{\alpha,z} - J^{-}_{\alpha,z}}{\Delta z} \right) \tag{4.4}$$

bestimmt.

Für die zeitliche Diskretisierung mit der Zeitschrittweite Δt wird ein explizites Euler-Schema

$$\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial t} = \frac{\phi_\alpha^{t+1} - \phi_\alpha^{t}}{\Delta t} \tag{4.5}$$

mit der Zeitschrittweite Δt verwendet. Durch Gleichsetzen der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung sowie anschließendes Umformen ergibt sich die folgende Update-Vorschrift für die Zelle an den Positionen x, y und z zum Zeitpunkt t der Form

$$\begin{aligned} \phi_\alpha^{t+\Delta t}{}_{x,y,z} = \phi_\alpha^{t}{}_{x,y,z} + \frac{\Delta t}{\tau\epsilon} \Bigg(& -\epsilon \left(\left[\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi)}{\partial\phi_\alpha}\right]^{t}_{x,y,z} + \left[\nabla \cdot \left(\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\phi_\alpha)}{\partial\nabla\phi_\alpha}\right)\right]^{t}_{x,y,z} \right) \\ & - \frac{1}{\epsilon} T \left[\frac{\partial w(\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha}\right]^{t}_{x,y,z} - \left[\frac{\partial\psi(\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha}\right]^{t}_{x,y,z} + \lambda \Bigg) . \end{aligned} \tag{4.6}$$

Für die Diskretisierung der Flüsse im chemischen Potential wird analog zum Phasenfeld vorgegangen, was zu einem D2C9- bzw. D3C19-Stempel führt. In Abbildung 4.2 sind die Positionen der Werte, der Flüsse und des *anti-trapping-current* sowie der Stempel in gestricheltem Blau eingezeichnet. Für die Berechnung

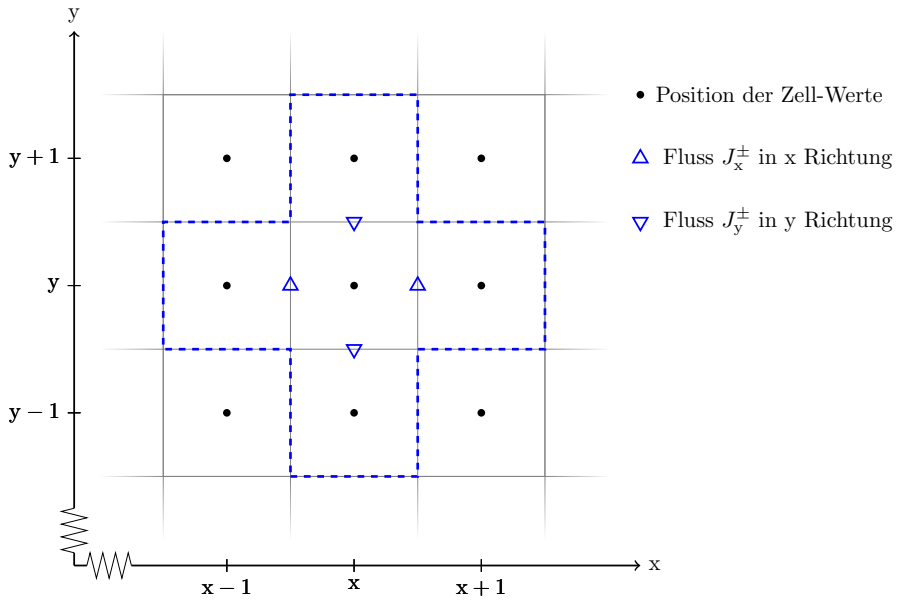


Abbildung 4.1: Diskretisierung der Phasenfeldevolutionsgleichung in 2D entsprechende [9]. Die blau gestrichelte Linie stellt die Zellen des D2C5-Stempels an der Position (x,y) dar.

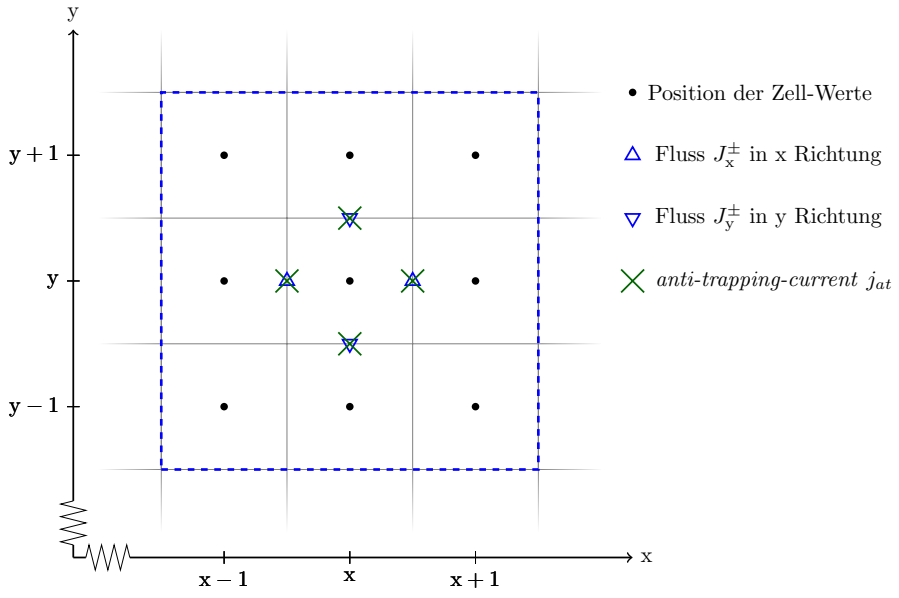


Abbildung 4.2: Diskretisierung der Evolutionsgleichung des chemischen Potentials in 2D. Die blau gestrichelte Linie stellt die Zellen des D2C9-Stempels an der Position (x,y) dar.

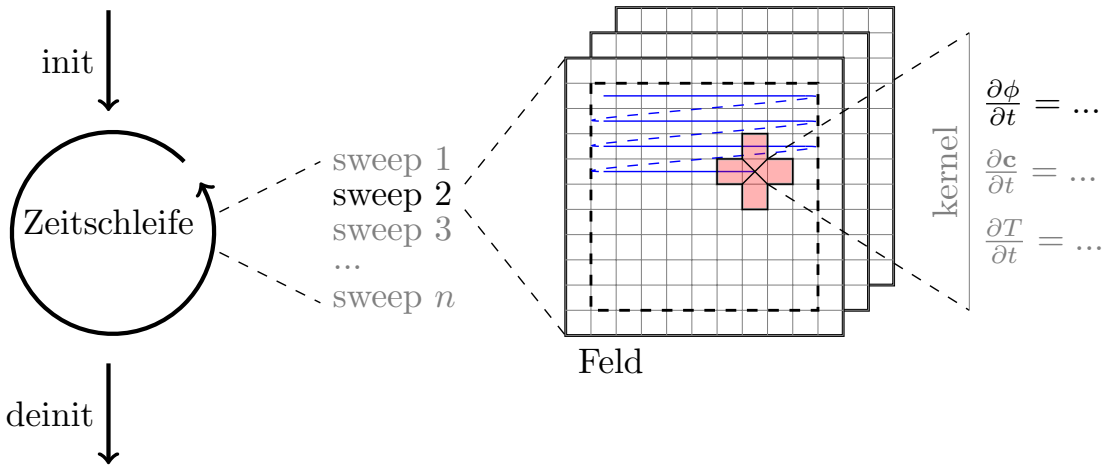


Abbildung 4.3: Allgemeiner Aufbau eines Lösers für Phasenfeldmodelle.

der Divergenz der chemischen Potentiale ist ein D3C7-Stempel notwendig. Zusätzlich muss noch der *anti-trapping-current* auf den Zellkanten bestimmt werden, was es nötig macht, alle Phasenfeldwerte wie auch alle chemischen Potentialwerte auf den Zellkanten als Mittelwert zu bestimmen. Hierdurch ist ein D3C19-Stempel für die Werte aus dem alten sowie ein D3C7-Stempel für die Werte aus aktuellen Zeitschritt des Phasenfelds notwendig. Anstatt die zeitliche Änderung des Phasenfelds $\partial_t h_\alpha(\boldsymbol{\phi})$ im *anti-trapping-current* neu zu berechnen, wird dies effizient aus der Differenz von zwei Zeitschritten bestimmt. Wie in Abschnitt 4.4.1 beschrieben wird, ist dies aufgrund der zwei Felder für den alten und neuen Zeitschritt direkt möglich. Hierzu ist es aber notwendig, dass zuerst die zeitliche Entwicklung des Phasenfelds berechnet wird.

4.2 Frameworks

Im Folgenden werden die beiden verwendeten Löser-Frameworks Pace3D und waLBerla vorgestellt. Beide Frameworks nutzen kartesische Gitter und sind mit dem *Message Passing Interface* (MPI) parallelisiert. In Abbildung 4.3 ist der allgemeine Aufbau der beiden Löser dargestellt. Nach der Initialisierung wird in der Zeitschleife der jeweils nächste Zeitschritt berechnet. Hierzu wird in den Sweeps über die entsprechenden Felder iteriert und für jede Zelle der Kernel mit der jeweiligen diskretisierten Evolutionsgleichung ausgeführt. Nach der Berechnung werden die Daten im Löser freigegeben und das Programm wird beendet.

4.2.1 Pace3D

Das Pace3D-Framework [159–164] beinhaltet eine Vielzahl an effizienten und skalierbaren Lösern, über 170 Werkzeuge zum Vor- und Nachbearbeiten von Simulationen sowie zwei Visualisierungswerkzeuge. Das Framework wird seit den 2000er Jahren in der Gruppe von Prof. Dr. Nestler zur Untersuchung unterschiedlicher multiphysikalischer Prozesse mit freien Oberfächen auf Basis der Phasenfeldmethode entwickelt.

Der Löser beinhaltet verschiedene Module für diffuse Interface-Ansätze (Allen-Cahn, Cahn-Hilliard) [66], Massenfluss [89, 165], Temperatur, Strömung (Lattice-Boltzmann, Navier-Stokes) [166], Magnetismus [167], die kristalline Phasenfeldmethode (PFC) [168] und Benetzung [169, 170]. Der Löser ist in der Programmiersprache C geschrieben und über eine dreidimensionale Gebietszerlegung auf Basis von MPI parallelisiert [160]. Hierbei wird jedes Teilgebiet einem MPI-Prozess zugeordnet. Über Schalter zur Übersetzungszeit kann der Löser für 1D, 2D und 3D optimiert sowie für den parallelen oder sequenziellen Einsatz aus dem

Code kompiliert werden. Über weitere Schalter und Code-Erweiterungen zum effizienten Einlesen, Verteilen und Verwalten großer Parametermatrizen kann der Löser für die Simulation von Systemen mit mehreren tausend Ordnungsparametern optimiert werden [75].

4.2.2 waLBerla

Das waLBerla-Framework (widely applicable lattice Boltzmann from Erlangen) [171] wurde zur massivparallelen Simulation von Strömungsprozessen mit der Lattice-Boltzmann-Methode entwickelt. Es ist komplett in C++ entwickelt und legt einen hohen Fokus auf Performance und Parallelität. Über die Jahre hat es sich zu einem allgemeinen Framework für das parallele Lösen verschiedener Modelle auf Basis von Stempel-Codes entwickelt, die auf unterschiedlich großen HPC-Systemen skalieren [172–174]. Hierzu zerlegt waLBerla das kartesische Gitter des Simulationsgebietes in Blöcke mit einer oder mehreren Randschichten, um die Kommunikation per MPI zu ermöglichen. Jedem MPI-Prozess können mehrere Blöcke zugeordnet werden, wodurch es möglich ist, die Last auf Blockbasis zu verteilen sowie komplexe Geometrien zu beschreiben [172], welche sich an die Laufzeit anpassen können.

4.3 Hochleistungsrechner

Für die Performance-Messungen sowie die Durchführung der später gezeigten Simulationen werden die derzeit schnellsten Supercomputer Deutschlands verwendet. Hierzu werden basierend auf [138] die drei verwendeten Tier-0/1-Systeme am High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS), am Leibniz Supercomputing Centre (LRZ) München und am Jülich Supercomputing Centre (JSC) im Folgenden kurz vorgestellt. Alle Systeme bestehen aus mehr als 100 000 Rechenkernen und unterstützen vektorisierten Code. Abbildung 4.4 zeigt die zwei Supercomputer Hazel Hen und SuperMUC.

Der Hermit Supercomputer [175] war ein Cray XE6-System mit 113 664 Rechenkernen, das bis 2015 am HLRS betrieben wurde. Jeder der 3 552 Knoten bestand aus 2 AMD Interlagos 2,3 GHz CPUs mit 16 Rechenkernen, welche AVX unterstützten. Als Verbindung zwischen den Knoten wurde ein Cray Gemini-Netzwerk verwendet. Der Nachfolge-Supercomputer am HLRS ist die Hornet [176] mit 94 656 Rechenkernen auf Basis eines Cray XC40-Systems. Das System besteht pro Knoten aus je zwei Intel Xeon CPU E5-2680 v3-Prozessoren mit je 12 Rechenkernen mit 2, 50 GHz, die über ein Dragonfly-Netzwerk [177], Cray Aries genannt, verbunden sind. Die Rechenkerne unterstützen *Hyperthreading* (HT) sowie die neuere Vektorerweiterung AVX2. Die theoretische Speicherbandbreite pro CPU beträgt 68 GB/s und die mit dem STREAM Benchmark [178] gemessene Speicherbandbreite beträgt für einen Knoten, bestehend aus zwei Rechenkernen, 116, 8 GB/s. Der Hornet Supercomputer wurde 2015 auf 185 088 Rechenkerne erweitert und in Hazel Hen [179] umbenannt. Stand Juli 2016 ist dies der schnellste deutsche Supercomputer mit einer Spitzenleistung von 7,42 $^{PFLOP}/_{s}$ und steht auf Platz neun der Top 500 Liste [180] und ist damit der neuntschnellste Rechner der Welt. Der SuperMUC aus Phase 1 am LRZ [181], mit 147 456 Rechenkernen und einer Spitzenleistung von 3 185,05 $^{TFLOP}/_{s}$ ist der drittschnellste deutsche Supercomputer und ist auf Platz 27 in der Top 500 [180]. Das System besteht pro Knoten aus zwei Xeon E5-2680 Prozessoren mit je acht Rechenkernen, welche mit einer Taktrate von 2, 7 GHz arbeiten und AVX unterstützen. Die CPUs des SuperMUC erreichen eine theoretische Bandbreite von 51, 2 GB/s und im STREAM Benchmark [178] eine Bandbreite von 80 GB/s pro Knoten. In einer Insel sind 512 Knoten zusammengefasst, die über ein nicht blockierendes *Tree*-Netzwerk (Baumtopologie) verbunden sind. Die 18 Inseln sind über einen *pruned tree* (4:1), einen gestutzten Baum, miteinander verbunden. Der JUQUEEN Supercomputer [182] am JSC ist ein IBM BlueGene/Q-System mit 458 752 Rechenkernen und ist der zweitschnellste deutsche Supercomputer. In der Top 500 belegt das System mit seinen 5, 9 $^{PFLOP}/_{s}$ den 13. Platz. Jeder Knoten besteht aus 16 IBM PowerPC A2-Rechenkernen mit 1, 6 GHz, die ein 4-*way multithreading* erlauben. Die JUQUEEN nutzt ein 5-dimensionales Torus-Netzwerk mit einer Bandbreite von 40 GB/s und einer Latenz von maximal 2, 5μs.



Hazel Hen



SuperMUC

Abbildung 4.4: Bilder der beiden Supercomputer Hazel Hen am HLRS und SuperMUC am LRZ.

4.4 Umsetzung und Performance des Phasenfeldmodells auf Basis des Großkanonischen Potentialansatzes

In diesem Abschnitt wird die Implementierung des Phasenfeldmodells in das waLBerla-Framework aus Abschnitt 4.2.2 auf Basis des Großkanonischen Potentialansatzes aus Abschnitt 3.5 erläutert. Hierzu wird die Diskretisierung mit finiten Differenzen im Raum und dem Euler-Verfahren in der Zeit aus Abschnitt 4.1 verwendet. Anschließend wird auf die vorgenommenen Optimierungen, deren Performance und das Skalierungsverhalten auf den drei derzeit schnellsten deutschen Supercomputern Hazel Hen [179], SuperMUC [181] und JUQUEEN [182] eingegangen.

4.4.1 Implementierung des Modells

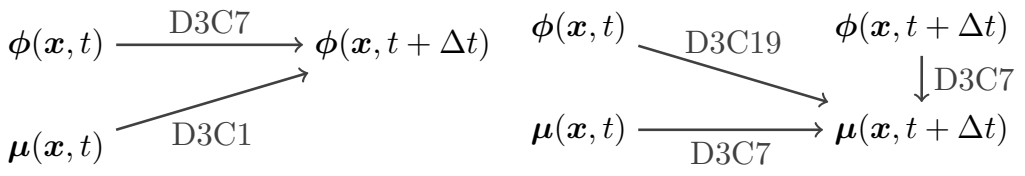
Zur Berechnung der zeitlichen Entwicklung werden wie in [138] beschrieben die beiden Evolutionsgleichungen für die Phasenfelder (3.37) sowie für die chemischen Potentiale (6.2) jeweils als eigener Kernel im waLBerla-Framework implementiert. Die Kernel beschreiben die Berechnungsvorschrift sowie die benötigten Zellwerte für einen Zeitschritt einer Zelle. Für jeden Ordnungsparameter ϕ_α sowie jedes chemische Potential μ_i werden zwei reguläre äquidistante Felder angelegt: für den alten Zeitschritt *src* als auch für den neuen Zeitschritt *dst*. Hierzu wird für die Felder der Ordnungsparameter ein *array of structs* (AoS)-Layout verwendet, in dem der Vektor mit den vier Ordnungsparametern $\boldsymbol{\phi}$ in jeder Zelle nacheinander liegt. Für die Felder des chemischen Potentials $\boldsymbol{\mu}$ wird ein *struct of array* (SoA)-Layout genutzt, in dem für jedes chemische Potential ein eigenes Feld verwendet wird. Zur Berechnung des nächsten Zeitschritts $t + \Delta t$ werden die Werte aus den *src*-Feldern gelesen und in die entsprechenden *dst*-Felder geschrieben. Hierzu iteriert jeder Kernel in einem Sweep über die lokal auf dem Prozess vorhandenen Teilgebiete. Nach jedem Sweep werden die entsprechenden Ränder in den *dst*-Feldern aktualisiert. Hierzu werden zuerst die Randschichten zwischen den Teilgebieten mit Hilfe des *Message Passing Interfaces* (MPI) ausgetauscht und anschließend am globalen Gebietsrand Dirichlet- und Neumann- sowie die periodischen Randbedingungen ausgeführt. Nachdem alle Sweeps berechnet und die Ränder aktualisiert sind, werden die Felder zur Berechnung des nächsten Zeitschritts getauscht. Der Ablauf zur Berechnung eines Zeitschritts ist in Algorithmus 1 dargestellt. Für die Berechnung des nächsten Zeitschritts im ϕ-Kernel werden für die Gradienten die direkten

Algorithm 1 Berechnung eines Zeitschritts. Algorithmus basierend auf [138].

1: $\boldsymbol{\phi}_{dst} \leftarrow \phi\text{-Kernel}\left(\boldsymbol{\phi}_{src}, \boldsymbol{\mu}_{src}\right)$ (siehe (3.37))
2: $\boldsymbol{\phi}_{dst}$-Randaustausch zwischen den Blöcken
3: $\boldsymbol{\phi}_{dst}$-Randbedingungen
4: $\boldsymbol{\mu}_{dst} \leftarrow \mu\text{-Kernel}\left(\boldsymbol{\mu}_{src}, \boldsymbol{\phi}_{src}, \boldsymbol{\phi}_{dst}\right)$ (siehe (6.2))
5: $\boldsymbol{\mu}_{dst}$-Randaustausch zwischen den Blöcken
6: $\boldsymbol{\mu}_{dst}$-Randbedingungen
7: Tausche $\boldsymbol{\phi}_{src} \leftrightarrow \boldsymbol{\phi}_{dst}$ und $\boldsymbol{\mu}_{src} \leftrightarrow \boldsymbol{\mu}_{dst}$

Nachbarzellen aus dem aktuellen $\boldsymbol{\phi}_{src}$-Feld benötigt. Zudem ist für die treibende Kraft der entsprechende Zellwert aus dem $\boldsymbol{\mu}_{src}$-Feld notwendig. Zur Berechnung eines Zeitschritts in 3D mit dem ϕ-Kernel ist ein D3C7-Stempel im $\boldsymbol{\phi}_{src}$-Feld notwendig, welcher die sechs direkten Nachbarzellen sowie die zentrale Zelle beinhaltet. Für das $\boldsymbol{\mu}_{src}$-Feld ist ein D3C1-Stempel notwendig, da nur die zentralen Zellen benötigt werden. Die Abhängigkeiten der Daten für den ϕ-Kernel sind in Abbildung 4.5(a) dargestellt.

Für die Berechnung des nächsten Zeitschritts im μ-Kernel werden neben den aktuellen Feldern auch die neuen Werte aus dem $\boldsymbol{\phi}_{dst}$-Feld benötigt. Die komplexeren Abhängigkeiten resultieren aus der Diskretisierung des *anti-trapping-current* aus (3.47). Zur Berechnung sind aus dem $\boldsymbol{\phi}_{src}$-Feld ein D3C19-Stempel und aus dem $\boldsymbol{\phi}_{dst}$-Feld ein D3C7-Stempel notwendig. Für das $\boldsymbol{\mu}_{src}$-Feld wird ein D3C7-Stempel benötigt. Die Abhängigkeiten der Zellen im μ-Kernel sind in Abbildung 4.5(b) dargestellt. Die Berechnung der Temperatur



(a) ϕ-Kernel **(b)** μ-Kernel

Abbildung 4.5: Datenabhängigkeit der beiden Kernel aus den entsprechenden Feldern zur Berechnung des nächsten Zeitschritts. Die Abbildungen basieren auf [138].

wird über einen analytischen Temperaturgradienten beschrieben, der in jeder Zelle ausgewertet wird.

Zur Generierung der initialen Keime im Simulationsgebiet wird der parallele Voronoi-Algorithmus aus [183] verwendet. Hierzu werden von einem Prozess alle Voronoi-Punkte im zu füllenden Gebiet erzeugt und an alle anderen Prozesse verteilt, welche dann die Voronoi-Füllung generieren. Anschließend werden die Voronoi-Zellen den Phasen, entsprechend der Phasenanteile aus dem Phasendiagramm, zugeordnet.

Zur Ausgabe der Simulationsdaten sind wie in [138] beschrieben, verschiedene Formate implementiert. Neben dem *Visualization ToolKit* (VTK)-Format für eine voxelbasierte Ausgabe ist das PACE3D-interne p3s-Voxelformat umgesetzt, das es erlaubt, die Simulationsdaten mit den über 170 Werkzeugen [184] aus dem PACE3D-Framework auszuwerten sowie effizient zu visualisieren. Zur Reduzierung des Speicherverbrauchs werden die Daten nur in einfacher Genauigkeit geschrieben. Zudem wird das p3s-Voxelformat für das Schreiben und Lesen der Sicherungspunkte in doppelter Genauigkeit zum Fortsetzen der Simulation sowie zur Generierung von komplexen Startbedingungen verwendet. Zum Schreiben nicht direkt bekannter Felder, wie der Konzentrationsfelder oder des Temperaturfelds, sind zusätzliche Adapter implementiert, die diese Größen beim Schreiben der Daten berechnen. Zur Reduzierung des Speicherverbrauchs auf dem Dateisystem und der Bandbreite beim Schreiben der Daten ist für die Phasenfelder zusätzlich eine auf Oberflächennetzen (Mesh) basierende Ausgabe auf Basis des Wavefront-obj-Formats umgesetzt. Das Oberflächennetzen erlaubt es, die Grenzschicht zwischen den Ordnungsparametern als Dreiecke darzustellen, wodurch anstatt der Volumendaten nur noch die Grenzflächen gespeichert werden müssen. Für die Berechnung des Oberflächennetzes wird der *Marching-Cube*-Algorithmus aus [185] verwendet. Hierzu bestimmt jeder Prozess unabhängig das Oberflächennetz für die Phasenfelder an der 0,5-Isofläche, was der Grenzfläche im *Sharp-Interface*-Fall für einen Zweiphasenübergang entspricht. Anschließend werden die Daten auf einer vorgegebenen Anzahl an Prozessen eingesammelt, aggregiert und in eine Datei geschrieben, was den Schreibprozess bei vielen Prozessen deutlich verkürzt.

4.4.2 Optimierungen

Ausgehend von der allgemeinen Implementierung des Phasenfeldmodells auf Basis des Großkanonischen Potentialansatzes aus Abschnitt 3.5 für die ternäre gerichtete Erstarrung wird im Folgenden die Spezialisierung und Optimierung des Modells im WALBERLA-Framework zur effizienten Simulation großer dreidimensionaler Gebiete beschrieben. Die Optimierungen werden wie in [138] beschrieben auf verschiedenen Ebenen umgesetzt, indem physikalische, mathematische, numerische und rechentechnische Aspekte ausgenutzt werden, um die Rechenzeit zu reduzieren. Zudem wird der Code auf mehreren Ebenen parallelisiert, um Hochleistungsrechner sowohl innerhalb eines Knotens als auch im Verbund mit mehreren Knoten effizient zu nutzen.

Auf der physikalischen Ebene wird das Modell zur Simulation der ternären eutektischen gerichteten Erstarrung von einem Multiphasen- und Multikomponentenmodell auf ein Vierphasenmodell ($N = 4$) und ein Dreikomponentenmodell ($K = 3$) beschränkt, wie in Abschnitt 3.5 beschrieben. Unter der Annahme, dass sich die Konzentrationen während der Simulation nahe dem Gleichgewicht befinden, ist es möglich,

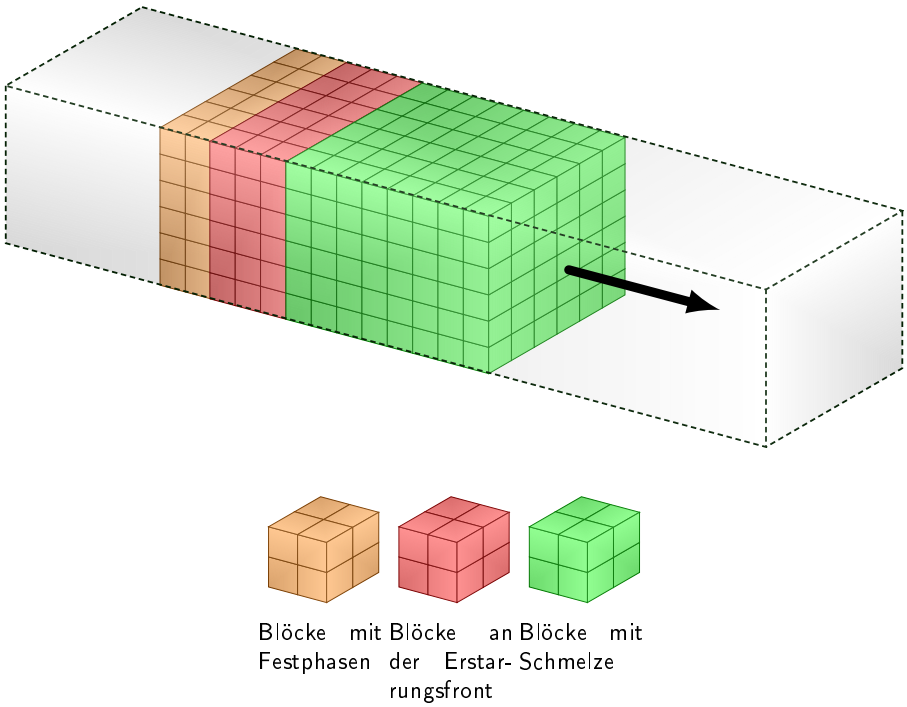


Abbildung 4.6: Moving-Window-Ansatz mit unterschiedlich klassifizierten Blöcken entsprechend des Zustands des Simulationsgebiets

die Gibbs-Energien aus den CALPHAD-Datenbanken für ternäre Systeme durch einen parabolischen Fit-Ansatz zu beschreiben, wie bereits in Abschnitt 3.5 erläutert. Hierdurch ist eine direkte Umrechnung von Konzentrationen und chemischen Potentialen möglich, was den Rechen- und Beschreibungsaufwand deutlich reduziert, da die Funktionen für die Gibbs-Energien aus den CALPHAD-Datenbanken nicht immer eine eindeutige Abbildung zwischen dem chemischen Potential und den Konzentrationen zulassen. Die Anzahl der zu berechnenden Konzentrationen wird durch das Ausnutzen der Massenerhaltung zudem um eine Konzentration reduziert, da diese direkt aus den anderen Konzentrationen mit $c_3 = 1 - \sum_{i=1}^{K-1} c_i$ berechnet werden kann. Daraus folgend konnten auch die drei Evolutionsgleichungen für das chemische Potential auf zwei Gleichungen reduziert werden. Anstatt ein teureres iteratives Verfahren zu verwenden, erlaubt es die Limitierung der Komponenten, die Matrixinvertierung in (6.2) explizit zu formulieren. Zur effizienteren Berechnung wird das Modell zudem angepasst, um gleiche Vorfaktoren innerhalb von Summen nach außen ziehen zu können sowie diese mit anderen Vorfaktoren als mit bereits verrechneten Größen zu nutzen.

Bei der Implementierung des Modells in das WALBERLA-Framework wird das $Nx \times Ny \times Nz$ Zellen große Simulationsgebiet an den experimentellen Aufbau der gerichteten Erstarrung angepasst [138]. Aufgrund der um mehrere Größenordnungen kleineren Diffusionskoeffizienten in den Festphasen, im Vergleich zur Schmelze, und der Annahme eines stationären Konzentrationsprofils in ausreichender Entfernung der Erstarrungsfront, wird die effektive Rechengebietsgröße in Erstarrungsrichtung durch einen *Moving-Window*-Ansatz [35, 160, 186] reduziert, in dem die Evolutionsgleichungen nur noch in der Nähe der Erstarrungsfront gelöst werden. Erreicht die Erstarrungsfront innerhalb des Rechengebiets eine gewisse Höhe in Wachstumsrichtung, werden die Simulationsdaten nach unten verschoben und der obere Teil mit Schmelze aufgefüllt. Hierdurch muss nur noch ein Ausschnitt des gesamten Simulationsgebiets berechnet werden, wie in Abbildung 4.6 anhand der farbigen Teilgebiete bzw. Blöcke gezeigt. Zur effizienten Umsetzung werden hierzu die Daten blockweise verschoben, was zudem die Anzahl an Prüfungen reduziert, ob die Front eine bestimmte Höhe erreicht hat.

Die unterschiedlichen Farben der Blöcke in Abbildung 4.6 repräsentieren die verschiedenen Zustände der Phasen im Rechengebiet sowie deren Rechenlast. Auf Basis der Blockstruktur von waLBerla wird eine statische Lastverteilung umgesetzt, die es dem Benutzer erlaubt, den Blöcken abhängig von ihrer Position in Wachstumsrichtung unterschiedliche Gewichte zuzuordnen. Zu Beginn der Simulation ordnet die statische Lastverteilung den einzelnen MPI-Prozessen entsprechend der Gewichte eine bestimmte Anzahl an Blöcken zu, um eine möglichst gleiche Laufzeit der einzelnen Prozesse zu erreichen. Da sich die Last in den Blöcken aufgrund des *Moving-Window*-Ansatzes über die Simulationszeit hinweg nicht ändert, ist keine dynamische Lastverteilung zur Laufzeit notwendig.

Durch das Klassifizieren der Rechenzellen anhand der Werte in den Phasenfeldern ist es in beiden Evolutionsgleichungen möglich, wie in [138] beschrieben, das Ergebnis von Termen direkt zu bestimmen und somit Rechenoperationen zu sparen. Das Klassifizieren der Rechenzellen kann unter Umständen zu teuren Verzweigungen im Kernel führen. Durch die Verzweigungen kann es zu Fehlentscheidungen in der Instruktionsvorhersage der Rechenkerne kommen, was zu einer Reduzierung der maximalen Performance führt. In Abschnitt 4.4.3.1 wird gezeigt, dass die Klassifizierung jedoch zu einer deutlichen Reduzierung der Gesamtlaufzeit führt. Die Evolutionsgleichung für die Phasenfelder muss nur im Interface I_Ω und in den direkten Nachbarzellen ∂I_Ω bestimmt werden. Für die Überprüfung, ob eine Zelle berechnet werden muss, werden die Werte auf den Zellkanten von (3.40) auf ${}^{\partial a}/_{\partial \phi_\alpha \neq 0}$ geprüft. Für alle anderen Zellen wird der aktuelle Zellwert aus dem $\boldsymbol{\phi}_{\text{src}}$-Feld übernommen. Für die Evolutionsgleichung des chemischen Potentials muss der *anti-trapping-current* aus (3.47) nur in Interface-Zellen mit Schmelze $I_{\alpha\ell} := \{\boldsymbol{x} \in I_\Omega \mid 0 < \phi_\ell(\boldsymbol{x}, t) < 1\}$ berechnet werden, da ansonsten die Interpolationsfunktion (3.20) null wird und somit auch das Ergebnis des *anti-trapping-current*. Hierzu wird direkt der Phasenfeldwert der Schmelze auf null geprüft.

Zur Simulation repräsentativer Elemente in einem unendlich ausgedehnten Gebiet werden periodische Randbedingungen parallel zur Erstarrungsrichtung implementiert. Die periodischen Randbedingungen erfordern für physikalisch korrekte Ergebnisse eine von den Simulationsparametern abhängige Mindestgröße in $Nx \times Ny$, wie in Steinmetz et al. [3] gezeigt.

Aufgrund der unterschiedlichen Zeitskalen zwischen dem Diffusionskoeffizienten der Temperatur und denen der Konzentrationen wird für die effiziente Berechnung der Temperaturentwicklung ein *Frozen-Temperature*-Ansatz angewendet, bei dem die Temperatur durch eine analytische Funktion beschrieben wird [8, 165, 187, 188]. Weiterhin wird angenommen, dass die Temperatur innerhalb einer $Nx \times Ny$-Ebene an der Stelle z zum Zeitpunkt t konstant ist. Durch das Iterieren über das Simulationsgebiet mit x als innerste Gebietsschleife und z als äußerste, muss die Temperatur nur einmal pro Ebene bestimmt werden [138].

Auf der Anwendungsebene erlaubt es dieser Ansatz, temperaturabhängige Terme wie die Vorfaktoren der freien Energien aus den Gleichungen (3.26) und (3.34) bis (3.36) jeweils für eine Ebene vorab zu berechnen [138]. Durch entsprechende Schleifen über das Gebiet muss nur ein Paar an Werten vorgehalten werden, was zudem den benötigten Pufferspeicher reduziert. Neben dem Vorberechnen von Werten werden für die Terme der Divergenzen in den beiden Evolutionsgleichungen Pufferspeicher implementiert, um die mehrfach benötigten Werte auf den Zellkanten wie in den Gleichungen (3.40), (3.45) und (3.47) nur einmal zu berechnen [138]. Für das Berechnen eines Zeitschritts werden aufgrund der Diskretisierung Werte auf den sechs Seitenflächen der Zelle benötigt. Drei der berechneten Werte können jedoch gepuffert und bei der Berechnung der nächsten Zellen wiederverwendet werden. Hierzu werden drei $Nx \times Ny$-Ebenen als Pufferspeicher verwendet. Diese Pufferspeicheroptimierung wurde auf Basis eines Roofline-Modells [155] durchgeführt, welches zeigt, dass die beiden Evolutionsgleichungen durch die Instruktionen limitiert sind und damit deren Berechnungsdauer nicht von der Anbindung des Arbeitsspeichers abhängt, sondern nur von der maximalen Anzahl an Rechenoperationen des Rechenkerns. Hierauf wird in Abschnitt 4.4.3.1 genauer eingegangen. Zur weiteren Reduzierung des Rechenaufwands werden Divisionen mit festem Nenner durch schnellere Multiplikationen sowie für die Berechnung der in der Zelle vorhandenen Phasen durch eine *Lookup*-Tabelle ersetzt. Die Divisionen durch einen Wurzelausdruck in (3.47) werden durch den schnelleren Algorithmus zur Berechnung der inversen Wurzel aus [189] ersetzt. Weiterhin werden Verzweigungen aufgrund von *Wenn-dann*-Bedingungen (*Branching*) und Funktionsaufrufe im Sweep reduziert, indem die Implementierung auf die gerichtete Erstarrung von ternären eutektischen Systemen spezialisiert wird.

Das Simulationsgebiet wird zur schnelleren Berechnung mit Hilfe einer dreidimensionalen Gebietszerlegung in kleinere Blöcke, zerlegt, wie in Abbildung 4.6 dargestellt. Für den Austausch der Randschichten zwischen den Blöcken nach jedem Zeitschritt werden in waLBerla nicht blockierende Sende- und Empfangsfunktionen aus dem MPI [190] verwendet. Diese Funktionen reduzieren die benötigte Logik zum senden und empfangen von Nachrichten erheblich, machen es es aber notwendig, Pufferspeicher für die Ränder aller Blöcke vorzuhalten.

Der nicht blockierende Austausch erlaubt es zudem, die Kommunikation während der Berechnung des jeweils anderen Sweeps durchzuführen. Das Überlagern der Berechnung und der Kommunikation wird als *Communication hiding* bezeichnet. Hierdurch kann die Wartezeit zur Übertragung der Daten für den Randaustausch reduziert werden. Aufgrund der lokalen D3C1-Stempeldatenabhängigkeit der Phasenfeldgleichung von den Werten der chemischen Potentialfelder, wie in Abbildung 4.5(a) gezeigt, kann die Kommunikation der Randschichten für das chemische Potential im *dst*-Feld während der Berechnung der Phasenfelder durchgeführt werden [138]. Die komplexere Datenabhängigkeit des Kernels für das chemische Potential führen wie in [138] gezeigt hingegen zu keiner Verbesserung der Performance. Der Algorithmus, mit dem die Kommunikation zum Randaustausch mit der Berechnung des $\boldsymbol{\phi}$-Sweeps überlagert wird, ist in Abschnitt 4.4.2 dargestellt.

Algorithm 2 Berechnung des nächsten Zeitschritts mit *Communication hiding* während der $\boldsymbol{\phi}$ Berechnung. Algorithmus aufbauend auf [138].

1: **Kommunikationsbeginn** $\boldsymbol{\mu}_{src}$
2: $\phi_{\text{dst}} \leftarrow \phi\text{-sweep}\left(\boldsymbol{\phi}_{\text{src}}, \boldsymbol{\mu}_{\text{src}}\right)$ (siehe (3.37))
3: **Kommunikationsende** $\boldsymbol{\mu}_{src}$
4: $\boldsymbol{\phi}_{dst}$-Randaustausch zwischen den Blöcken
5: $\boldsymbol{\phi}_{\text{dst}}$-Randbehandlung
6: $\boldsymbol{\mu}_{\text{dst}} \leftarrow \mu\text{-sweep}\left(\boldsymbol{\mu}_{\text{src}}, \boldsymbol{\phi}_{\text{src}}, \boldsymbol{\phi}_{\text{dst}}\right)$
7: $\boldsymbol{\mu}_{\text{dst}}$-Randbehandlung
8: Tausche $\boldsymbol{\phi}_{\text{src}} \leftrightarrow \boldsymbol{\phi}_{\text{dst}}$ und $\boldsymbol{\mu}_{\text{src}} \leftrightarrow \boldsymbol{\mu}_{\text{dst}}$

Moderne Rechenkerne unterstützen verschiedene SIMD (*Single Instruction, Multiple Data*)-Erweiterungen, die wie im Falle von *Advanced Vector Extensions (AVX)* eine Berechnung auf acht Floating-Point-Elementen gleichzeitig durchführen und somit theoretisch eine Steigerung der Performance um Faktor acht ermöglichen. Zur Ausnutzung der SIMD-Erweiterungen in den Rechenkernen ist es notwendig, den Code hierauf anzupassen, wie in [138] beschrieben. Für einfache Gleichungen können die meisten Compiler automatisch die Schleifen vektorisieren. Für die automatische Vektorisierung von komplexerem Code ist es notwendig, weitere compilerspezifische Informationen über nicht portable *Pragma-Direktiven* bezüglich des *Aliasing*, Daten-*Alignment* sowie der Schleifenlänge im Code zu hinterlegen. Zudem führt dies abhängig vom Compiler, den Datenabhängigkeiten sowie dem Codeaufbau nicht immer zur Vektorisierung des Codes. Basierend auf Untersuchungen mit dem Performance-Werkzeug LIKWID [191] wurde festgestellt, dass große Teile der beiden Evolutionsgleichungen nicht automatisch vektorisiert wurden. Anstelle des Ansatzes mit *Pragma-Direktiven* werden die beiden Evolutionsgleichungen explizit mit intrinsischen Compilerfunktionen vektorisiert, um eine bestmögliche Vektorisierung zu erreichen. Dies erfordert es jedoch, die Gleichungen für die Vektorisierung auf Basis der intrinsischen Funktionen neu zu formulieren. Da die intrinsischen Funktionen von der entsprechenden Hardware abhängig sind, wird eine portable Zwischenschicht auf Makrobasis implementiert, um diese einfach, transparent und ohne Performanceverlust austauschen zu können. Die Zwischenschicht unterstützt die intrinsischen Funktionen von Intel für SEE2, SSE4, AVX, AVX2 sowie QPX für Blue-Gene/Q-Prozessoren [138]. Für die Vektorisierung des $\boldsymbol{\mu}$-Sweeps wird der klassische Ansatz verwendet, in dem mehrere Zellen gleichzeitig berechnet werden, wodurch die Vereinfachungen der Klassifizierung nur noch möglich sind, wenn alle Zellen hierauf zutreffen. Für die Vektorisierung des $\boldsymbol{\phi}$-Sweeps wird ein anderer Ansatz verwendet. Da die Vektorgröße von vier AVX-Datenelementen in doppelter Genauigkeit mit der Anzahl der Phasenfelder übereinstimmt, werden die vier Phasenfeldgleichungen pro Zelle

auf einmal berechnet, anstatt vier Zellen auf einmal zu berechnen. Hierdurch ist es weiterhin möglich, alle vorhergehenden Optimierungen zu nutzen, wodurch diese Variante eine bessere Performance liefert, als de Vektorisierung über Vier Zellen wie in [138] gezeigt. Im Vergleich zur Berechnung von vier Zellen sind jedoch mehrere teure Rotier- und Tauschoperationen auf dem Phasenfeldvektor durchzuführen, um die häufigen $\sum_{\alpha=1}^{N} \phi_\alpha \ldots$-Terme zu vektorisieren. Abhängig von der Art der Schleife ist es möglich, bestimmte Variablen wie die Oberflächenenergien bereits zur Initialisierungszeit des Lösers in geeigneten Vektoren vorzuberechnen. Hierdurch müssen nur die Phasenfeldvektoren entsprechend der Summenbedingungen wie z.B. $\alpha < \beta$ und $\alpha \neq \beta$ für die Terme in (3.37) für jede Zelle generiert werden. Generell können die Summen bei gleichzeitiger Betrachtung aller Phasen als Matrix-Vektor-Operation der Form $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ mit den Vektoren $\boldsymbol{y}$ und $\boldsymbol{x}$ sowie der Matrix $\boldsymbol{A}$ dargestellt werden. Die Matrix $\boldsymbol{A}$ entspricht im Modell z.B. der Oberflächenenergienmatrix $\gamma_{\alpha\beta}$ oder der Matrix des kinetischen Koeffizienten $\tau_{\alpha\beta}$. Die Vektoren $\boldsymbol{x}$ und $\boldsymbol{y}$ entsprechen den Phasenfeldvektoren $\boldsymbol{\phi}$ und den räumlichen Gradienten des Phasenfeldvektors in eine Raumrichtung, wie sie für die Berechnung von $\nabla\phi$ und $q_{\alpha\beta}$ benötigt werden. Im weiteren Verlauf wird exemplarisch die Vektorisierung der Gradient Energie aus (3.39) für die x-Richtung gezeigt. Das vorgehen lässt sich analog für die weiteren Raumrichtungen sowie die anderen Modellteile übertragen. Somit ergibt sich für (3.39) mit dem Vektor $q_{\alpha\beta}$ aus (3.16) die folgende zu lösende Gleichung für die gleichzeitige Berechnung aller vier Phasen

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 2\sum_{\substack{\beta=1 \\ (\beta\neq 0)}}^{N} \gamma_{0\beta} q_{0\beta} \nabla\phi_\beta \\ 2\sum_{\substack{\beta=1 \\ (\beta\neq 1)}}^{N} \gamma_{1\beta} q_{1\beta} \nabla\phi_\beta \\ 2\sum_{\substack{\beta=1 \\ (\beta\neq 2)}}^{N} \gamma_{2\beta} q_{2\beta} \nabla\phi_\beta \\ 2\sum_{\substack{\beta=1 \\ (\beta\neq 3)}}^{N} \gamma_{3\beta} q_{3\beta} \nabla\phi_\beta \end{pmatrix} \tag{4.7}$$

$$= 2 \begin{pmatrix} \gamma_{01} q_{01} \nabla\phi_1 + \gamma_{02} q_{02} \nabla\phi_2 + \gamma_{03} q_{03} \nabla\phi_3 \\ \gamma_{10} q_{10} \nabla\phi_0 + \gamma_{12} q_{12} \nabla\phi_2 + \gamma_{13} q_{13} \phi_3 \\ \gamma_{20} q_{20} \nabla\phi_0 + \gamma_{21} q_{21} \nabla\phi_1 + \gamma_{23} q_{23} \nabla\phi_3 \\ \gamma_{30} q_{30} \nabla\phi_0 + \gamma_{31} q_{31} \nabla\phi_1 + \gamma_{32} q_{32} \nabla\phi_2 \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

$$= 2 \begin{pmatrix} \gamma_{01} q_{01} \nabla\phi_1 + \gamma_{02} q_{02} \nabla\phi_2 + \gamma_{03} q_{03} \nabla\phi_3 \\ \gamma_{12} q_{12} \nabla\phi_2 + \gamma_{13} q_{13} \nabla\phi_3 + \gamma_{10} q_{10} \nabla\phi_0 \\ \gamma_{23} q_{23} \nabla\phi_3 + \gamma_{20} q_{20} \nabla\phi_0 + \gamma_{21} q_{21} \nabla\phi_1 \\ \gamma_{30} q_{30} \nabla\phi_0 + \gamma_{31} q_{31} \nabla\phi_1 + \gamma_{32} q_{32} \nabla\phi_2 \end{pmatrix}. \tag{4.9}$$

Durch das Gruppieren der Summanden in die farbigen Blöcke kann die Berechnung effizient durch Rotieren und Vertauschen des Ausgangsphasenfeldvektors generiert werden. Dies ist im Folgenden zur besseren Lesbarkeit an AVX-intrinsics angelehnte Befehle dargestellt. Es werden nur Befehle verwendet werden, die im AVX Standard umgesetzt sind. Da für die Berechnungen der Phasenfeldvektor in permutierter Form benötigt wird, werden effiziente Permutationsfunktionen verwendet, da es zeitlich deutlich teurer ist, die Elemente in den Vektoren entsprechend explizit zu setzten. Zur effizienten Permutation können die Vektoren nach rechts bzw. links rotiert werden was im weiteren mit $\texttt{rotieren}_\texttt{r}$ und $\texttt{rotieren}_\texttt{l}$ dargestellt ist. Zudem erlaubt es AVX, effizient die obere Hälfte mit der unteren Hälfte zu tauschen was mit $\texttt{vertauschen}_\texttt{h}$ dargestellt ist. Die Vektoren für die Oberflächenenergien werden nur einmal initial gesetzt, da sie unabhängig vom aktuellen Zustand der Zellen im Feld sind, mit

$$\texttt{g1} \longleftarrow \texttt{setze}(\gamma_{32}, \gamma_{21}, \gamma_{10}, \gamma_{03}) \qquad = \gamma_{32}, \gamma_{21}, \gamma_{10}, \gamma_{03} \tag{4.10}$$

$$\texttt{g2} \longleftarrow \texttt{setze}(\gamma_{31}, \gamma_{20}, \gamma_{13}, \gamma_{02}) \qquad = \gamma_{31}, \gamma_{20}, \gamma_{13}, \gamma_{02}\,. \tag{4.11}$$

Durch die Symmetrie der Matrizen gilt $\gamma_{\alpha\beta} = \gamma_{\beta\alpha}$ und $\tau_{\alpha\beta} = \tau_{\beta\alpha}$. Durch Ausnutzen dieser Symmetrie in den Matrizen und den späteren permutieren Vektoren müssen nur zwei Vektoren für die drei farbigen Gruppen

initialisiert werden. Die permutierten Phasenfeldvektor werden wie folgt pro Zelle erzeugt:

$$\texttt{p0} \longleftarrow \texttt{lade}(\phi^{x,y,z}) \qquad = \phi_3, \phi_2, \phi_1, \phi_0 \tag{4.12}$$
$$\texttt{p1} \longleftarrow \texttt{rotieren}_\texttt{r}(\texttt{p0}) \qquad = \phi_0, \phi_3, \phi_2, \phi_1 \tag{4.13}$$
$$\texttt{p2} \longleftarrow \texttt{vertauschen}_\texttt{h}(\texttt{p0}) \qquad = \phi_1, \phi_0, \phi_3, \phi_2 \tag{4.14}$$
$$\texttt{p3} \longleftarrow \texttt{vertauschen}_\texttt{h}(\texttt{p1}) \qquad = \phi_2, \phi_1, \phi_0, \phi_3\ . \tag{4.15}$$

Für die Berechnung von $\nabla\phi$ werden wie in Abschnitt 4.1 gezeigt die zentrale Gradienten benötigt,

$$\texttt{ppx} \longleftarrow \texttt{lade}(\phi^{x+1,y,z}) \tag{4.16}$$
$$\texttt{pmx} \longleftarrow \texttt{lade}(\phi^{x-1,y,z}) \tag{4.17}$$
$$\texttt{gradphix} \longleftarrow (\texttt{ppx} - \texttt{pmx}) * (\Delta x)^1 \qquad = \nabla\phi_3, \nabla\phi_2, \nabla\phi_1, \nabla\phi_0\ . \tag{4.18}$$

Zur Berechnung des $q_{\alpha\beta}$ Vektors werden zuerst die Gradienten mit den entsprechend Phasenfeldern verrechnet

$$\texttt{pg1} \longleftarrow \texttt{p1} * \texttt{gradpx} \qquad = \phi_0\nabla\phi_3, \phi_3\nabla\phi_2, \phi_2\nabla\phi_1, \phi_1\nabla\phi_0 \tag{4.19}$$
$$\texttt{pg2} \longleftarrow \texttt{p2} * \texttt{gradpx} \qquad = \phi_1\nabla\phi_3, \phi_0\nabla\phi_2, \phi_3\nabla\phi_1, \phi_2\nabla\phi_0 \tag{4.20}$$
$$\texttt{pg3} \longleftarrow \texttt{p3} * \texttt{gradpx} \qquad = \phi_2\nabla\phi_3, \phi_1\nabla\phi_2, \phi_0\nabla\phi_1, \phi_3\nabla\phi_0 \tag{4.21}$$
$$\texttt{pg4} \longleftarrow \texttt{rotieren}_\texttt{l}(\texttt{pg1}) \qquad = \phi_3\nabla\phi_2, \phi_2\nabla\phi_1, \phi_1\nabla\phi_0, \phi_0\nabla\phi_3 \tag{4.22}$$
$$\texttt{pg5} \longleftarrow \texttt{vertauschen}_\texttt{h}(\texttt{pg2}) \qquad = \phi_3\nabla\phi_1, \phi_2\nabla\phi_0, \phi_1\nabla\phi_3, \phi_0\nabla\phi_2\ . \tag{4.23}$$

Hieraus werden die permutierten $q_{\alpha\beta}$ Vektoren der Form bestimmt

$$\texttt{q1} \longleftarrow \texttt{pg4} - \texttt{pg3} \qquad = q_{32}, q_{21}, q_{10}, q_{03} \tag{4.24}$$
$$\texttt{q2} \longleftarrow \texttt{pg3} - \texttt{pg4} \qquad = q_{23}, q_{12}, q_{01}, q_{30} \tag{4.25}$$
$$\texttt{q4} \longleftarrow \texttt{pg2} - \texttt{pg5} \qquad = q_{13}, q_{02}, q_{31}, q_{20}\ . \tag{4.26}$$

Diese werden mit dem Gradienten der Phasen und den Oberflächenenergien verrechnet

$$\texttt{r1} \longleftarrow \texttt{q1} * \texttt{g1} \qquad = q_{32}\gamma_{32}, q_{21}\gamma_{21}, q_{10}\gamma_{10}, q_{03}\gamma_{03} \tag{4.27}$$
$$\texttt{r2} \longleftarrow \texttt{rotieren}_\texttt{r}(\texttt{r1}) \qquad = q_{03}\gamma_{03}, q_{32}\gamma_{32}, q_{21}\gamma_{21}, q_{10}\gamma_{10} \tag{4.28}$$
$$\texttt{r3} \longleftarrow \texttt{r2} * \texttt{gradphix} \qquad = q_{03}\gamma_{03}\nabla\phi_3, q_{32}\gamma_{32}\nabla\phi_2, q_{21}\gamma_{21}\nabla\phi_1, q_{10}\gamma_{10}\nabla\phi_0 \tag{4.29}$$
$$\texttt{r4} \longleftarrow \texttt{q2} * \texttt{g1} * \texttt{gradphix} \qquad = q_{23}\gamma_{32}\nabla\phi_3, q_{12}\gamma_{21}\nabla\phi_2, q_{01}\gamma_{10}\nabla\phi_1, q_{30}\gamma_{03}\nabla\phi_0 \tag{4.30}$$
$$\texttt{r5} \longleftarrow \texttt{q4} * \texttt{g2} * \texttt{gradphix} \qquad = q_{13}\gamma_{31}\nabla\phi_3, q_{02}\gamma_{20}\nabla\phi_2, q_{31}\gamma_{13}\nabla\phi_1, q_{20}\gamma_{02}\nabla\phi_0 \tag{4.31}$$
$$\tag{4.32}$$

und anschließend werden die entsprechend sortierten Vektoren wie in (4.9) dargestellt aufsummiert

$$\texttt{r6} \longleftarrow \texttt{rotieren}_\texttt{l}(\texttt{r3}) \qquad = q_{32}\gamma_{32}\nabla\phi_2, q_{21}\gamma_{21}\nabla\phi_1, q_{10}\gamma_{10}\nabla\phi_0, q_{03}\gamma_{03}\nabla\phi_3 \tag{4.33}$$
$$\texttt{r7} \longleftarrow \texttt{rotieren}_\texttt{r}(\texttt{r4}) \qquad = q_{30}\gamma_{03}\nabla\phi_0, q_{23}\gamma_{32}\nabla\phi_3, q_{12}\gamma_{21}\nabla\phi_2, q_{01}\gamma_{10}\nabla\phi_1 \tag{4.34}$$
$$\texttt{r8} \longleftarrow \texttt{vertauschen}_\texttt{h}(\texttt{r5}) \qquad = q_{31}\gamma_{13}\nabla\phi_1, q_{20}\gamma_{02}\nabla\phi_0, q_{13}\gamma_{31}\nabla\phi_3, q_{02}\gamma_{20}\nabla\phi_2 \tag{4.35}$$
$$\texttt{y} \longleftarrow 2 * (\texttt{r6} + \texttt{r7} + \texttt{r8})\ . \tag{4.36}$$

Dieses Vorgehen lässt ich auf die anderen Modellterme analog übertragen.

4.4.3 Performance-Ergebnisse

Im Folgenden werden zuerst die Performancesteigerungen der verschiedenen Optimierungen auf einem Rechenkern vorgestellt. Anschließend wird auf die Performance innerhalb eines Rechenknotens eingegangen. Zudem werden die Ergebnisse aus [138] auf dem SuperMUC mit den Ergebnissen auf der Hazel Hen vergleichen. Aufbauend auf den besten Ergebnissen werden auf den drei größten deutschen Supercomputern Hazel Hen, SuperMUC und JUQUEEN *Weak-Scaling*-Messungen durchgeführt. Für diese Messungen werden drei typische Gebietszustände mit unterschiedlichen Lasten (siehe Abbildung 4.6), wie sie während der Simulation auftreten, untersucht. Der erste Typ beinhaltet nur Schmelze und entspricht dem geringsten Lastfall. Der zweite Typ beinhaltet nur Festphasen, was dem mittleren Lastfall entspricht. Der dritte und teuerste Lastfall ist der Übergangsbereich von flüssig nach fest. Alle Performance-Ergebnisse werden in *Million Lattice Updates per Second* (MLUP/s) dargestellt, um die verschiedenen Optimierungen besser vergleichen zu können. Die Einheit MLUP/s entspricht der Anzahl an Millionen Gebietszellen, die pro Sekunde berechnet werden können. Mit der Anzahl an Gleitkommazahloperationen für die Kernel lässt sich hierüber die Performance in $^{FLOP}/_{s}$ bestimmen.

Als Compiler wird auf den Systemen Hazel Hen und SuperMUC der Intel Compiler in Version 14.0.3 verwendet. Der Code wird auf Level 3 optimiert und die Schalter entsprechend der Hardwareerweiterungen für AVX bzw. AVX2 sind aktiviert. Auf dem JUQUEEN Supercomputer wird der Code mit dem IBM XL Compiler in Version 12.1 und dem Optimierungslevel 5 übersetzt.

4.4.3.1 Single Node Performance

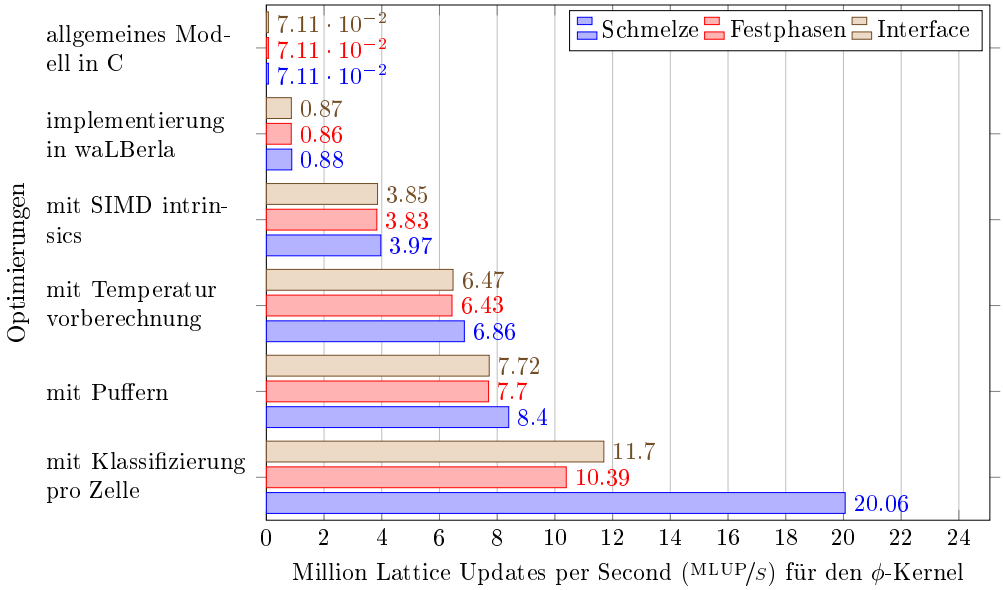
Dieser Abschnitt behandelt die Performancesteigerungen basierend auf den im vorhergehenden Abschnitt 4.4.2 beschriebenen Optimierungen. Hierzu werden Messungen auf den beiden Supercomputern Hazel Hen und SuperMUC durchgeführt. Die Messungen werden für eine typische Blockgröße von 60^3 Zellen, wie sie auch für Simulationen verwendet wird, untersucht. Für eine Blockgröße von 60^3 Zellen kann zudem angenommen werden, dass die Felder nicht in den schnellen Cache der Rechenkerne passen und somit vom Arbeitsspeicher geladen werden müssen. Die Optimierungen werden für alle drei Gebietszustände wie in [138] untersucht.

Ausgehend von der direkten Umsetzung des Modells in der Programmiersprache C wurden die beiden Evolutionsgleichungen als zwei Kernel in waLBerla neu implementiert. Durch die Spezialisierung des Modells sowie der Implementierung innerhalb des waLBerla-Frameworks und das Anwenden von grundlegenden Optimierungen konnte bereits eine signifikante Steigerung der Performance in beiden Kerneln erreicht werden, wie in den Abbildungen 4.7 und 4.8 dargestellt. Diese Steigerung ist auf das Entfernen von Indirektionen durch Funktionszeiger auf Zellebene, auf die Spezialisierung, das Limitieren der Phasenfelder und der chemischen Potentiale, das Entfernen von Divisionen mit bekanntem Nenner sowie auf Basis von *Lookup*-Tabellen und die schnelle Berechnung der inversen Wurzel [189] zurückzuführen.

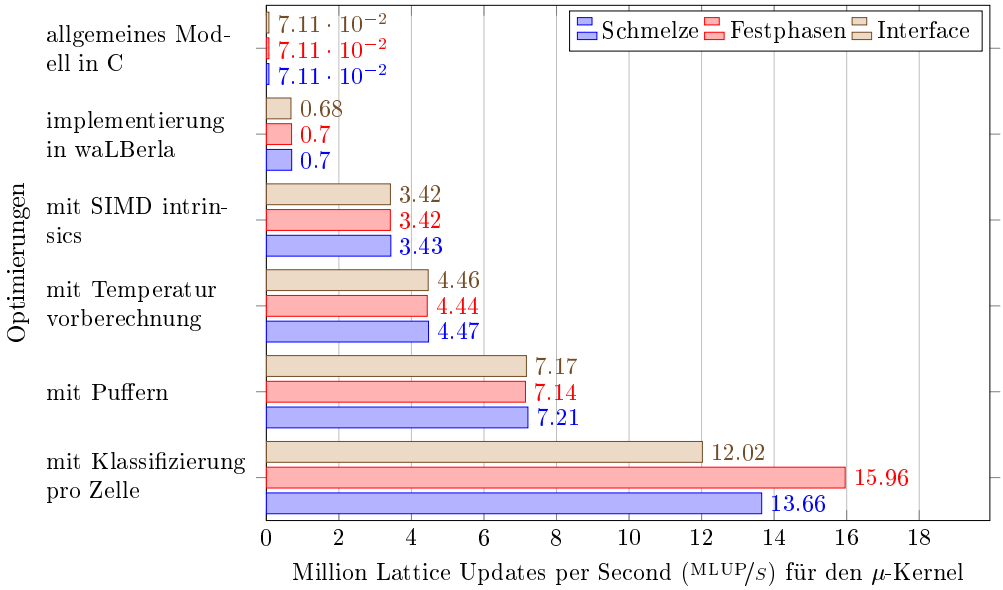
Im nächsten Schritt wurden die beiden Kernel, wie in 4.4.2 beschrieben, explizit vektorisiert. Durch die Vektorisierung konnte die Performance für den ϕ-Kernel um das 4,5- bis 4,8-fache sowie für den μ-Kernel um das 5- bis 5,7-fache gesteigert werden. Die Steigerung der Performance um einen größeren Faktor als den theoretisch zu erwartenden Faktor vier für AVX, bei doppelter Genauigkeit, lässt sich auf die Umformulierung der Gleichungen und auf zusätzliche Optimierungen zurückführen.

Durch das Vorberechnen der temperaturabhängigen Werte für die Vorfaktoren sowie der daraus zusammengesetzten Werte der parabolischen freien Energien für eine Ebene konnte vor allem die Performance des ϕ-Kernels nahezu verdoppelt werden. Für den μ-Kernel wird damit eine Steigerung von ungefähr 20% erzielt.

Das Puffern von mehrfach benötigten Werten, wie Gradienten und Werten auf den Zellenkanten, führt für den μ-Kernel zu einer Steigerung von etwa 37%. Dies zeigt, dass die Laufzeit des μ-Kernels durch die Berechnung der Werte auf den Zellkanten dominiert wird. Im ϕ-Kernel führte das Puffern aufgrund der

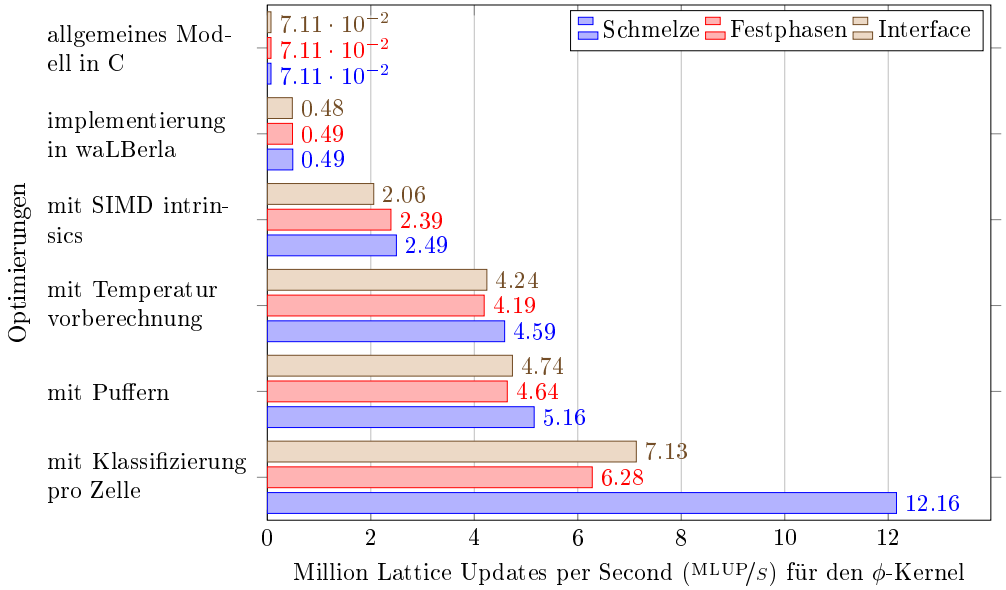


(a) ϕ-sweeps - Hazel Hen

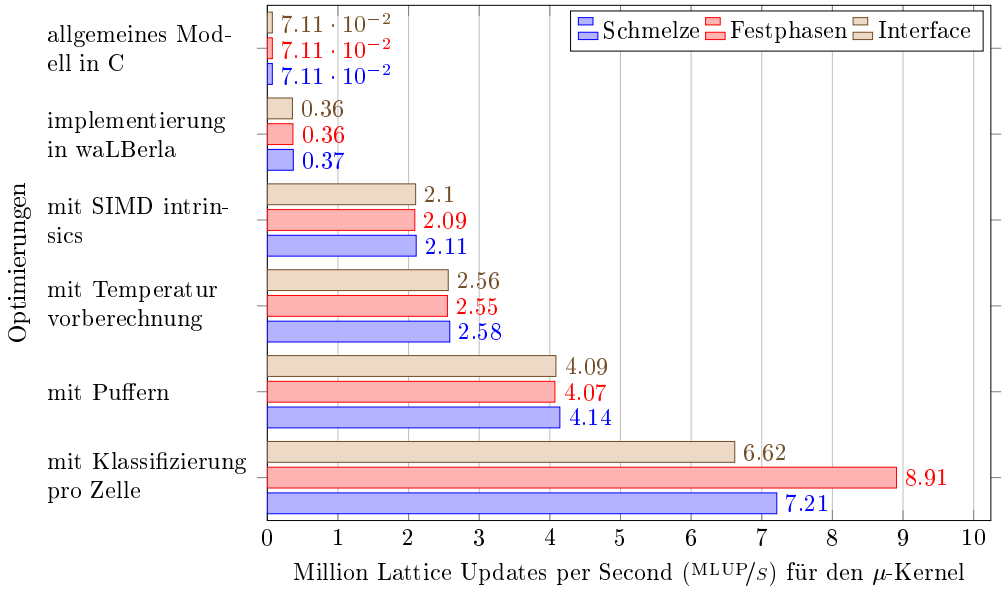


(b) μ-sweeps - Hazel Hen

Abbildung 4.7: Erreichte Performancesteigerungen in Millionen Zellupdates pro Sekunde (MLUP/s) für die Optimierungen im ϕ-Kernel und μ-Kernel auf dem Supercomputern Hazel Hen. Hierzu wurden zusätzlich drei typische Gebietszustände miteinander verglichen.



(a) ϕ-sweeps - SuperMUC



(b) μ-sweeps - SuperMUC

Abbildung 4.8: Erreichte Performancesteigerungen für die Optimierungen im ϕ-Kernel und μ-Kernel auf dem Supercomputer SuperMUC, basierend auf [138]. Die Performancewerte sind in Millionen Zellupdates pro Sekunde (MLUP/s) dargestellt. Für die Analyse wurden drei typische Gebietszustände miteinander verglichen.

einfacher zu berechnenden Werte zu einer geringeren Steigerung auf den Zellkanten (Gradientenenergiedichte (3.39) und (3.40)), im Vergleich zu den Gleichungsteilen in der Zelle (Obstacle-Potential (3.41) und der treibenden Kraft (3.23)).

Das Klassifizieren der Zellen und somit das Überspringen ganzer Gleichungsteile führt bei den Blöcken, in denen nur Schmelze vorhanden ist, zu mehr als einer Verdoppelung der Performance. Die Steigerung hängt jedoch stark vom Gebietszustand und damit auch von der Möglichkeit ab, Gleichungsteile zu überspringen. Dies ist am deutlichsten im ϕ-Kernel für die Blöcke mit Festphasen sowie die Blöcke im Übergangsbereich von flüssig nach fest zu sehen. In beiden Fällen sind viele Interface-Zellen in den Blöcken vorhanden, welche komplett berechnet werden müssen, was im Vergleich zu den Blöcken, die nur Schmelze enthalten, zu einer geringen Verbesserung der Performance führt. In den nur mit Schmelze gefüllten Blöcken kann die Berechnung der treibenden Kraft sowie des Obstacle-Potentials komplett übersprungen werden, was zu mehr als einer Verdoppelung der Performance führt. Im μ-Kernel profitieren die Blöcke mit Festphasen am meisten von dieser Optimierung, da hier der rechenintensive *anti-trapping-current* nicht ausgewertet werden muss. In den Blöcken mit Schmelze muss zusätzlich geprüft werden, ob der Phasenfeldwert der Schmelze einen Gradienten besitzt, was zusätzlichen Rechenaufwand erfordert, bevor der *anti-trapping-current* übersprungen werden kann.

Für alle Optimierungen wird bezogen auf die direkte Umsetzung des Modells ein Speedup von über 80 erreicht. Im Vergleich zur ersten Umsetzung in waLBerla für den besten Fall wird auf dem Hazel Hen eine Steigerung um den Faktor 22,8 und auf dem SuperMUC eine Steigerung von 24,7 erreicht.

Für beide Supercomputer konnten vergleichbare Performancesteigerungen erzielt werden. Die absoluten Werte auf der Hazel Hen unterscheiden sich jedoch aufgrund der neueren Rechenkerne, die auf der Haswell-Architektur basieren (Abbildung 4.7), von den Werten des SuperMUC, dessen Kerne auf der Sandy-Bridge-Architektur basieren (Abbildung 4.8). Zudem unterstützt die Haswell-Architektur AVX 2, wodurch es möglich ist, die Werte in Vektoren schneller zu rotieren und zu tauschen.

Zur Bewertung der absoluten Performance der beiden Kernel werden die Messungen ohne die Klassifizierungen betrachtet, da hier die Anzahl an Rechenoperationen pro Zelle genau bestimmt werden kann. Hierzu werden die Additionen, Multiplikationen sowie Divisionen für die einzelnen Teilterme der beiden Kernel für (3.37) und (6.2) im Code gezählt. Die Werte sind in den Tabellen 4.1 und 4.2 zusammenfasst. Für die Berechnung der Operationen wird angenommen, dass die Werte auf den Zellkanten nur dreimal berechnet werden müssen, da die anderen drei Werte gepuffert werden. Zudem werden die Operationen der Vorberechnungen der temperaturabhängigen Werte auf die Zellanzahl einer xy-Ebene verteilt, sodass diese nur einmal pro Ebene berechnet werden müssen. Für die weiteren Berechnungen wird sich auf die Blockgröße von 60^3 Zellen bezogen. Der SuperMUC mit Sandy-Bridge-Architektur erreicht bei der Verwendung von AVX mit doppelter Genauigkeit (DP) und FMA pro Rechenkern eine Peak Performance von $21{,}6\,^{GFLOP}/_{s} = 2{,}7\ \text{GHz} \cdot 4\ \text{DP FLOPs} \cdot 2\ \text{FMA}$ [181].

Für einen Rechenkern des Hazel Hen Supercomputers mit Haswell-Architektur und zwei FMA Ports wird eine Peak Performance von $40\,^{GFLOP}/_{s} = 2{,}5\ \text{GHz} \cdot 4\ \text{DP FOLPs} \cdot 2\ \text{FMA} \cdot 2\ \text{Ports}$ [179] erreicht. Unter der Annahme eines idealen Frontend, bei dem pro Taktzyklus eine Operation berechnet werden kann, lässt sich über die gezählten Operationen aus den Tabellen 4.1 und 4.2, multipliziert mit den erreichten Millionen Zellupdates pro Sekunde $^{\text{MLUP}}/\text{s}$, die maximal erreichte Performance bestimmen. Für den SuperMUC wird für den ϕ-Kernel eine Performance von $1{,}29\,^{GFLOP}/_{s} = 250{,}14\,^{\text{FLOP}}/_{\text{LUP}} \cdot 5{,}16\,^{\text{MLUP}}/\text{s}$ und für die Hazel Hen eine Performance von $2{,}1\,^{GFLOP}/_{s} = 250{,}14\,^{\text{FLOP}}/_{\text{LUP}} \cdot 8{,}4\,^{\text{MLUP}}/\text{s}$ erreicht. Dies entspricht einer Peak Performance des ϕ-Kernel von 5,9% auf dem SuperMUC und 5,25% auf der Hazel Hen. Analog lässt sich die erreichte Peak Performance für den μ-Kernel bestimmen. Für den SuperMUC wird eine Peak Performance von 27,1% und für die Hazel Hen eine Peak Performance von 25,46% erreicht.

Tabelle 4.1: Zusammenfassung der Vektor- und Skalaroperationen im ϕ-Kernel zur Berechnung einer Zelle entsprechend (3.37).

Term	Vektoroperationen			Skalaroperationen		
	+	*	/	+	*	/
Vorberechnungen$/_{NxNy}$	0	0	0	189	309	4
$a(\partial\phi,\nabla\phi)/_{\partial\phi_\alpha}$ (3.39)	21	31	0	0	0	0
3x $a(\partial\phi,\nabla\phi)/_{\partial\nabla\phi_\alpha}$ (3.40)	6	12	0	0	0	0
$w(\partial\phi)/_{\partial\phi_\alpha}$ (3.41)	4	6	0	8	13	1
$\psi(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\mu}, T$ (3.18)	15	29	1	10	0	0
Zusammenrechnen der Teilterme	17	18	1	12	4	1
Teilsummen	75	120	2	30,05	21,086	2,0
Summe	250,14					

Tabelle 4.2: Zusammenfassung der Vektor- und Skalaroperationen im μ-Kernel zur Berechnung einer Zelle entsprechend (6.2).

Term	Vektoroperationen			Skalaroperationen		
	+	*	/	+	*	/
Vorberechnungen$/_{NxNy}$	0	0	0	530	820	12
$\partial c/\partial\boldsymbol{\mu}$	16	34	1	0	0	0
3x $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\phi}, T)\nabla\boldsymbol{\mu}$	21	30	1	0	0	0
3x $\boldsymbol{J}_{\text{at}}$ (3.47)	116	198	1	0	3	0
$\partial c/\partial\boldsymbol{\phi}$	84	76	0	0	4	0
$\partial c/\partial T$ (3.49)	33	36	1	0	0	0
Divergenz + Zusammenrechnen der Teilterme	9	8	0	0	0	0
Teilsummen	553	838	8	0,147	13,23	0,0033
Summe	1412,38					

4.4.3.2 Skalierungsergebnisse

Zur Bestimmung der Knoten-Performance, auch *single node performance* genannt, wurde zuerst anhand eines Roofline-Performance-Modells [155] geprüft, ob der Code durch die Bandbreite des Arbeitsspeichers an die Rechenkerne (*memory bound*) oder durch die Anzahl an Recheninstruktionen (*compute bound*) limitiert ist. Hierfür wurde mit dem STREAM Benchmark [178] für die Hazel Hen und den SuperMUC, wie in Abschnitt 4.3 beschrieben, die maximale Bandbreite zwischen den Recheneinheiten und dem Arbeitsspeicher gemessen. Für das Roofline-Modell wird angenommen, dass aufgrund der symmetrischen D3C7- und D3C19-Stempel sowie des gewählten Datenlayouts nur etwa die Hälfte der Zellen geladen werden muss. Des Weiteren wird basierend auf [138] nur der μ-Kernel betrachtet, da hierfür aufgrund des D3C19-Stempels sowie des *anti-trapping-current* am meisten Daten geladen werden müssen. Unter der Annahme, dass pro Feld nur die neuen Zellen mit dopelter Genauigkeit, 8 Byte pro Zelle, in Iterationsrichtung geladen werden müssen und sich die anderen Zellen bereits im Cache befinden, entspricht dies für einen D3C19-Stempel neun zu ladenden Zellen und für einen D3C7-Stempel drei zu ladenden Zellen. Für den $\boldsymbol{\mu}$-Kernel ergibt sich damit

$$432\ \text{Byte} = (2\ \mu\text{-Werte} \cdot 3\ \text{Zellen} + 4\ \phi\text{-Werte} \cdot (9\ \text{Zellen} + 3\ \text{Zellen})) \cdot 8\ \text{Byte} \tag{4.37}$$

an Daten, die für jede Zelle aus dem Arbeitsspeicher pro Rechenkern geladen werden müssen. Unter der Annahme, dass der Code *memory bound* ist, ergibt dies für den SuperMUC mit der gemessenen Bandbreite für den gesamten Knoten von $80^{GByte}/_{s}$ eine theoretisch mögliche Performance von $185{,}19^{\text{MLUP}}/_{\text{S}} = 80^{GByte}/_{s}\ /\ 720^{Byte}/_{\text{LUP}}$ und für die Hazel Hen eine Performance von $270{,}3^{\text{MLUP}}/_{\text{S}}$.

Für eine typische Blockgröße von 40^3 Zellen kann angenommen werden, dass nur eine Ebene in den 256 KB großen L2-Cache der Rechenkerne passt und nicht das gesamte Gebiet. Bei der Nutzung aller Rechenkerne gilt dies auch für den gemeinsamen und größeren L3-Cache.

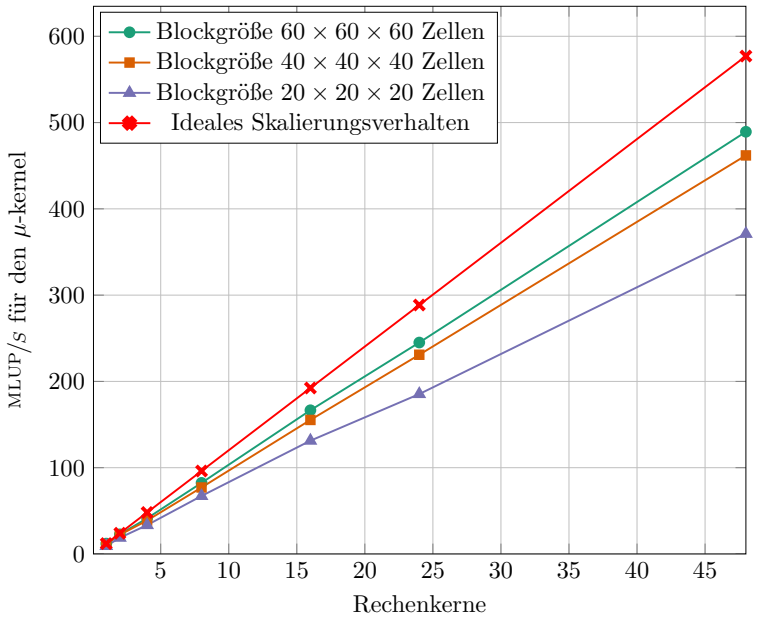
Abbildung 4.9 zeigt für die Hazel Hen sowie den SuperMUC einen nahezu idealen linearen Anstieg in der Performance für drei unterschiedlich große Interface-Blöcke mit 20^3, 40^3 und 60^3 Zellen. Hierzu wurde der Code mit allen Optimierungen verwendet und das Gebiet systematisch mit der Anzahl an Rechenkernen vergrößert, auch *Weak-Scaling* genannt.

Für die Werte des SuperMUC ist zu erkennen, dass sie nicht den theoretischen Wert der Bandbreite überschreiten, womit der Code nicht *memory bound* ist. Auch der erwartete lineare Verlauf lässt hierauf schließen. Weiterhin ändert sich die Performance für die 20^3 Zellenblöcke, die komplett in den L3-Cache passen, und somit nicht regelmäßig vom Arbeitsspeicher geladen werden, kaum. Für die Hazel Hen, Abbildung 4.9(a), wurde zusätzlich *hyper threading* (HT) verwendet, bei dem sich zwei Instruktionsströme einen physikalischen Rechenkern teilen. Bei der Verwendung von HT ist für die 20^3 Zellenblöcke bei mehr als 24 Rechenkernen ein leichtes Abknicken der Performance zu beobachten. Auch in diesem Fall skaliert der Code nahezu linear, was darauf schließen lässt, dass der Code nicht *memory bound* ist, obwohl der theoretische Wert von $270{,}3^{\text{MLUP}}/_{\text{S}}$ überschritten ist. Die höhere Performance lässt sich auf die Klassifizierung zurückführen, welche es auch im Interfacefall erlaubt, Berechnungen und somit auch das Laden von Zellwerten zu überspringen. Vor allem durch das Überspringen des *anti-trapping-current* kann das Laden von 384 Byte eingespart werden. Daher entspricht die oben getroffene Annahme einer pessimistischen Abschätzung, die für die hier gewählten Gebietstypen nicht zutrifft. Unter der Annahme, dass das Interface etwa 10 Zellen breit ist, befinden sich in einem 40^3 Gebiet etwa 25% Interface-Zellen. Hierdurch müssen im Durchschnitt

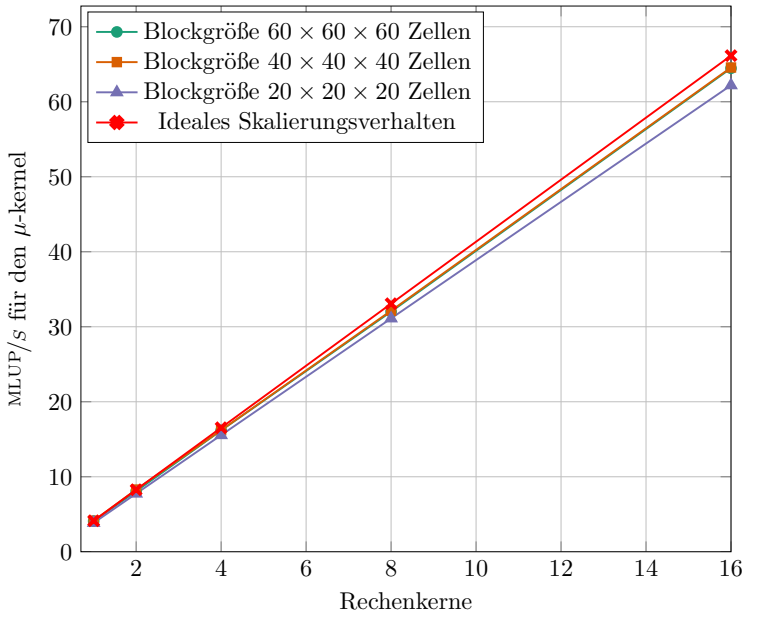
$$144\ \text{Byte} = (2\ \mu\text{-Werte} \cdot 3\ \text{Zellen} + {}^1/_4 \cdot 4\ \phi\text{-Werte} \cdot (9\ \text{Zellen} + 3\ \text{Zellen})) \cdot 8\ \text{Byte} \tag{4.38}$$

an Daten pro Zelle aus dem Arbeitsspeicher geladen werden. Dies ergibt eine theoretisch mögliche Performance von $811{,}1^{\text{MLUP}}/_{\text{S}}$, die größer ist als der erreichte Wert.

Basierend auf der guten Rechenkern- sowie Knoten-Performance werden *Weak-Scaling*-Messungen auf den derzeit größten deutschen Supercomputern Hazel Hen, SuperMUC und JUQUEEN durchgeführt. Hierzu



(a) Skalierung innerhalb eines Knotens (single node scaling) - Hazel Hen



(b) Skalierung innerhalb eines Knotens (single node scaling) - SuperMUC (Phase 1). Basierend auf Ergebnissen aus [138].

Abbildung 4.9: *Weak-Scaling* innerhalb eines Rechenknotens für drei unterschiedlich große Blöcke pro Recheneinheiten für die zwei Supercomputer Hazel Hen und SuperMUC.

Tabelle 4.3: Technische Parameter und Ergebnisse der Simulationen auf den zwei Supercomputern Hornet und Hazel Hen.

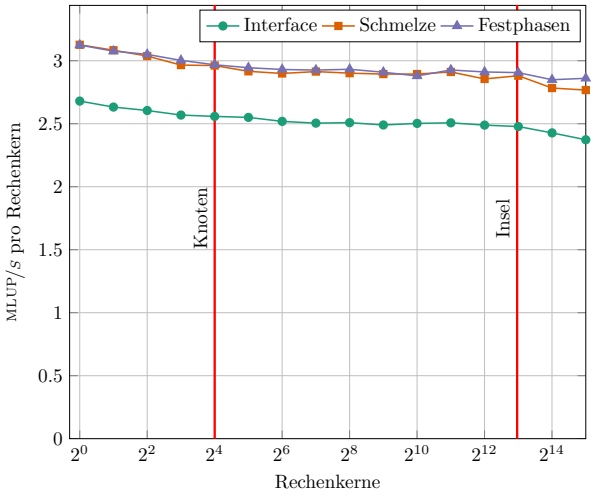
Supercomputer	Hornet	Hazel Hen
Berechnete Gebietsgröße	2 420 × 2 420 × 242	4 116 × 4 088 × 256
Totale Gebietsgröße durch *moving window*	2 420 × 2 420 × 1 474	4 116 × 4 088 × 4 325
Gebietszerlegung	110 × 110 × 11	147 × 146 × 8
Blockgröße	22 × 22 × 22	28 × 28 × 32
Recheneinheiten	84 700	171 696
Dauer	7h	6,7h
Speicher (nur Mesh)	262 GB	1 486 GB
Datum der Simulation	01.10.2014	13.10.2015

wird die Blockgröße pro Recheneinheit konstant bei 60^3 Zellen belassen und das Gesamtgebiet mit der Anzahl an Recheneinheiten gleichmäßig entlang der X- und Y-Koordinate vergrößert. Für den SuperMUC werden alle drei Gebietstypen verglichen. Für die Hazel Hen sowie JUQUEEN wird nur der langsamste Interface-Gebietstyp skaliert, da dieser für die Performance in Produktivläufen der limitierende Typ ist. Für die Hazel Hen und den SuperMUC wird jedem Rechenkern ein MPI-Prozess mit einem Block zugeordnet, wohingegen auf der JUQUEEN 4-fach *simultaneous multithreading* (SMT) verwendet wird, um die *in-order processing unit* voll auszunutzen. Hierzu werden jeder Recheneinheit auf dem JUQUEEN vier MPI-Prozesse zugeordnet, was bei 262 144 Rechenkernen 1 048 576 genutzten Prozessen entspricht. Auf dem SuperMUC wird der Code über mehrere Inseln hinweg auf bis zu 32 768 Recheneinheiten skaliert. Auf der Hazel Hen werden bis zu 16 384 Recheneinheiten genutzt.

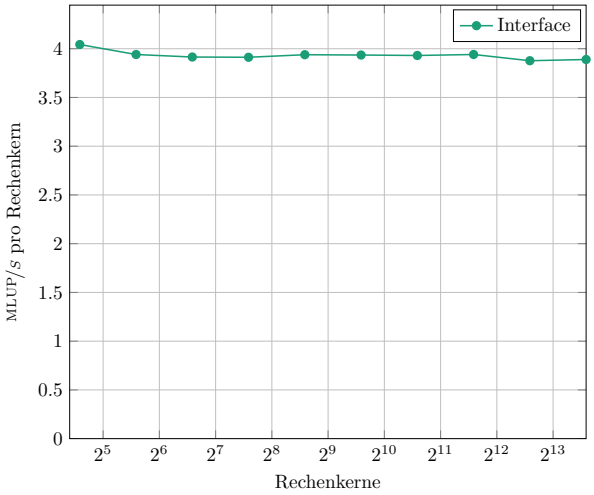
Abbildung 4.10 zeigt ein nahezu ideales Skalierungsverhalten auf allen drei deutschen Supercomputern. Nur beim Verlassen des Knotens oder einer Insel auf dem SuperMUC, was einen Wechsel des Netzwerks bedeutet, ist aufgrund der jeweiligen geringen Bandbreite eine Verringerung der Performance zu beobachten. Die Netzwerkwechsel sind durch die roten Linien gekennzeichnet. Danach bleibt die Performance für diese Art von Stempelcode und Skalierungstest, wie theoretisch zu erwarten, nahezu konstant. In Abbildung 4.10(a) sind die Performance-Unterschiede der drei Gebietstypen auf dem SuperMUC auf die Klassifizierung der Rechenzellen zurückzuführen, wie in den Abbildungen 4.7 und 4.8 zu sehen.

Aufbauend auf der guten Knoten-Performance und dem nahezu idealen Skalierungsverhalten konnten zwei reale Simulationen auf Basis des Al-Ag-Cu-Systems, welches in Kapitel 6 genauer erläutert wird, auf der gesamten Hornet sowie der Hazel Hen durchgeführt werden, um die Musterbildung in noch größeren Gebieten zu untersuchen. In Tabelle 4.3 sind die technischen Parameter und Ergebnisse dieser Simulationen zusammengefasst. Bei der Simulation auf der Hornet wird eine statische Lastverteilung verwendet. Darum werden die unteren drei Blockschichten mit den Festphasen sowie dem Interface mit einer doppelten Last gewichtet. Hierdurch werden jedem MPI-Prozess entweder zwei Blöcke mit Schmelze oder ein Block mit Festphasen bzw. Interface zugeordnet.

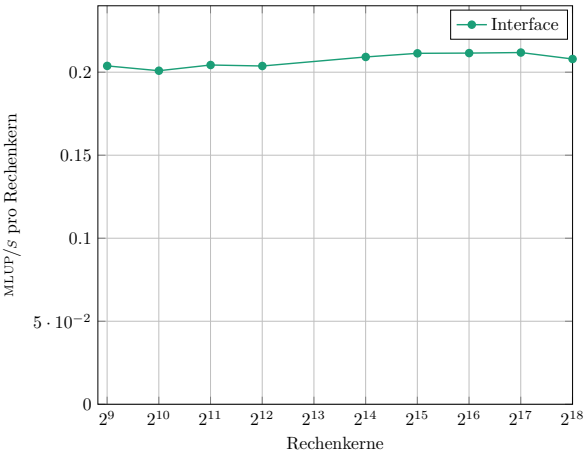
In Abbildung 4.11 ist die derzeit größte produktive Simulation mit einer Gebietsgröße von 4 116 × 4 088 × 4 325 Zellen dargestellt, die mit dem hier vorgestellten Löser durchgeführt wurde. Für die Produktivsimulation auf der Hazel Hen wurde auf Basis der gezählten Operationen und der Dauer von 24 225,94 s für 1 854 853 Zeitschritte eine Performance von 1,0401 $^{PFLOP}/_{s}$ erreicht, was etwa einem Siebtel der Gesamtrechenleistung entspricht. In der Simulation sind, wie in Kapitel 6 erläutert, unterschiedlich ausgerichtete Kettenstrukturen zu sehen.



(a) Scaling - SuperMUC



(b) Scaling - Hazel Hen



(c) Scaling - JUQUEEN

Abbildung 4.10: *Weak-Scaling* Ergebnisse aufbauend auf [138] für die drei derzeit größten Supercomputern Hazel Hen, SuperMUC und JUQUEEN.

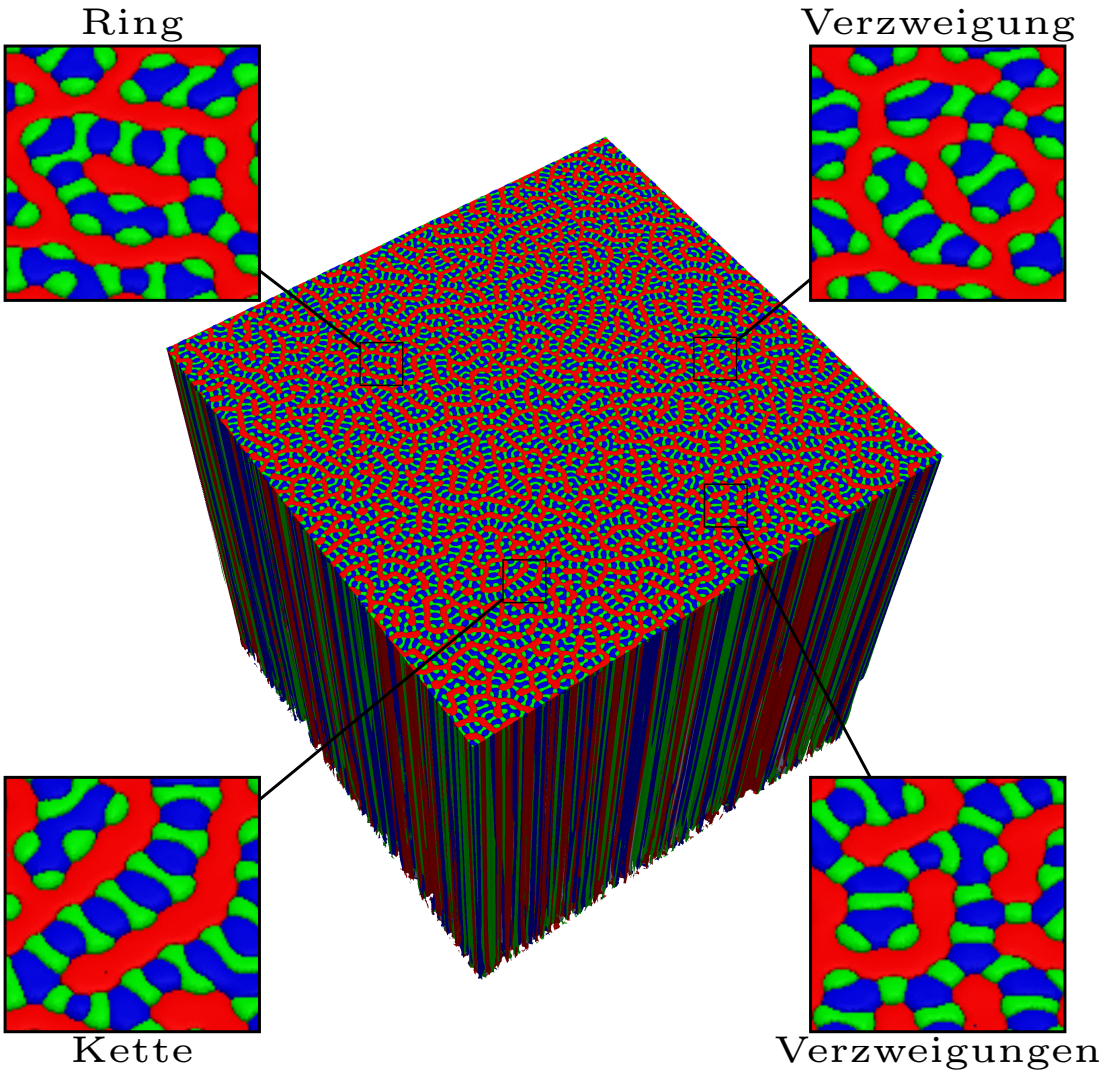


Abbildung 4.11: Simulation des ternären eutektischen Systems Al-Ag-Cu in einem $4\,116 \times 4\,088 \times 4\,325$ Zellen großen Gebiet.

4.4.4 Schlussfolgerungen

In diesem Abschnitt wurde die Umsetzung und die systematische Optimierung des Phasenfeldmodells aus Kapitel 3 und dessen Implementierung für die effiziente Nutzung von Hochleistungsrechnern gezeigt. Hierzu wurde das Phasenfeldmodell auf verschiedenen Ebenen optimiert. Für die unterschiedlichen Optimierungen wurden die Performancesteigerungen gemessen und verglichen. Zudem wurde das Skalierungsverhalten innerhalb eines Rechenknotens und auf verschiedenen Supercomputern untersucht. Hierzu wurde der Löser auf den drei derzeit schnellsten deutschen Supercomputern Hazel Hen [179], SuperMUC [181] und JUQUEEN [182] skaliert.

Die Schussfolgerungen sind:

(i) Basierend auf den Optimierungen auf unterschiedlichen Ebenen konnte die Performance des Lösers um mehr als Faktor 80 verbessert werden.

(ii) Der optimierte Löser erreicht eine maximale Peak Performance von 25,46% auf der Hazel Hen sowie 27,1% auf dem SuperMUC und in Produktivläufen auf der gesamten Hazel Hen etwa ein Siebtel.

(iii) Die Optimierungsstrategien sind zum Großteil auf beide Modellteile anwendbar.

(iv) Die Implementierung des Modells im waLBerla-Framework zeigt mit bis zu 1 048 576 Prozessen ein nahezu ideales Skalierungsverhalten auf den drei derzeit größten Supercomputern.

(v) Die Performance der Implementierung ist nicht durch die Anbindung des Arbeitsspeichers limitiert.

Durch das Zusammenspiel von hoch optimiertem und massiv-parallelem Code ist es möglich, großskalige Simulationsgebiete effizient auf Supercomputern zu berechnen. Dies ermöglichte es, die Simulationen in Abbildung 4.11 sowie die im Folgenden Kapitel 6 gezeigten Simulationen zur Musterbildung effizient in Größen zu berechnen, die mit Experimenten vergleichbar sind. Weiterhin sind die hier vorgestellten Optimierungen zum Großteil auf andere Phasenfeldmodelle übertragbar.

4.4.5 Ausblick

Wie in den Performance-Messungen gezeigt, ist die Implementierung nur durch die Instruktionen limitiert, was weitere Optimierungen ermöglicht. Hierzu kann die Vektorisierung weiter verallgemeinert werden, was den Quellcode übersichtlicher, wartbarer und performanter macht. Zudem ist es möglich, die $^{MLUP}/_{s}$ durch manuelles Umordnen der Instruktionen in den Kernels für die jeweilige Rechenarchitektur weiter zu erhöhen. Zur Erhöhung der Cache-Effizienz ist die Puffergröße für die Werte auf den Zellkanten zu reduzieren. Anstelle von drei Schichten kann dies durch Ausnutzung der Iterationsrichtung über das Gebiet auf eine konstante Variable, eine Linie und eine Ebene reduziert werden. Hierdurch wird der Cache besser genutzt und es wird weniger Arbeitsspeicher für die Pufferschichten benötigt. Auf Anwendungsebene könnten durch *adaptive mesh refinement* (AMR)-Techniken unterschiedliche Gitterauflösungen auf Basis der Blöcke verwendet werden, was die Rechenlast zur Berechnung des chemischen Potentials wie auch die Last zur Berechnung des Phasenfelds reduziert. Möglicherweise könnten implizite Verfahren für die Diskretisierung der Zeit einen Laufzeitvorteil bieten. Zur Nutzung zukünftiger Exascale-HPC-Systeme sind zudem angepasste Sweeps für Beschleunigerkarten wie Xeon Phi und GPUs notwendig. Zudem ist in den letzten Jahren ein Rückgang in der Rechenleistungszunahme von neuen Supercomputern zu beobachten [180], entgegen den Erwartungen aus dem Mooreschen Gesetz [2]. Durch die geringere Rechenleistungszunahme ist es notwendig, den Code weiter zu optimieren, um noch größere und komplexere Simulationen durchführen zu können, bzw. es wird länger dauern, bis größere Hochleistungsrechner mit genügend Rechenleistung zur Verfügung stehen.

4.5 Bestimmung von Zusammenhangskomponenten

Zusammenhangskomponenten-Algorithmen (engl. *Connected-component labeling*) (CCL) ermöglichen es, zusammenhängende Bereiche anhand eines Kriteriums eindeutig zu markieren. Hierdurch erlauben es CCL-Algorithmen, topologische Zusammenhänge zu beschreiben. Topologische Eigenschaften sind in der Materialwissenschaft zur Beschreibung der Mikrostruktur von Interesse, um daraus charakteristische Größen zu bestimmen. In Simulationen können die topologischen Veränderungen der Mikrostruktur auf Basis von CCL-Algorithmen verfolgt werden. Weiterhin kann die Simulation anhand der topologischen Veränderungen dynamisch angepasst werden.

Einer der ersten *Connected-component labeling*-Algorithmen wurde 1966 von Rosenfeld und Pfaltz [192] auf Basis einer *Two-Scan*-Methode vorgestellt, bei dem zweimal über das Gebiet iteriert wird. Bei der ersten Iteration wird jeder Zelle, die dem Kriterium entspricht, eine temporäre Markierung zugeordnet. Hierbei wird geprüft, ob bereits Nachbarzellen markiert sind. Zudem werden Nachbarn mit unterschiedlichen Markierungen in einer Gleichheitsliste gespeichert. Bei der zweiten Iteration werden die zusammenhängenden Bereiche entsprechend einer Markierung der Gleichheitsliste ummarkiert. Aufbauend auf [192] werden verschiedene effiziente Algorithmen entwickelt [193–196]. Eine verbesserte Variante mit nur einer Iteration wird in AbuBaker et al. [195] vorgestellt. Die Bestimmung von zusammenhängenden Komponenten in dreidimensionalen Gebieten wird in Rodriguez et al. [196] vorgestellt. Alnuweiti und Prasanna [193] stellen einen parallelen Algorithmus zur Bestimmung von zusammenhängenden Komponenten vor. Netzel und Stepinski stellen in [194] eine parallele Variante zur Analyse von Gebieten mit $1{,}6 \cdot 10^{10}$ Zellen vor.

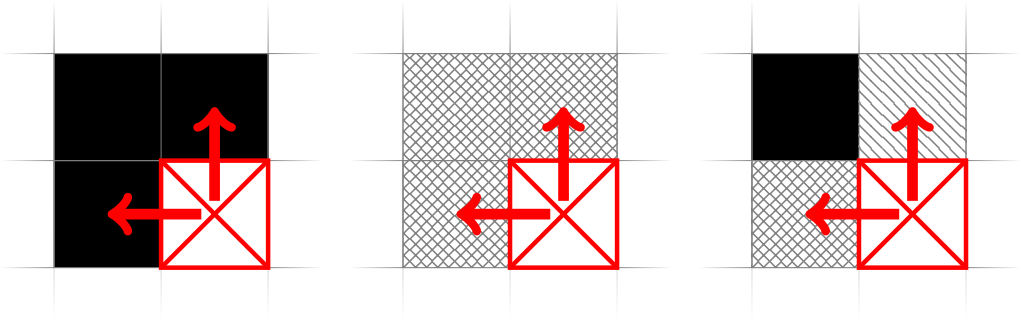
Der in diesem Abschnitt vorgestellte parallele CCL-Algorithmus dient der effizienten Bestimmung von zusammenhängenden Komponenten während der Simulation mit der Phasenfeldmethode auf verteilten Recheneinheiten, um die Änderung der Topologie zu verfolgen. Hierbei ist das betrachtete Gebiet auf verschiedenen Prozesse verteilt, die über das Message Passing Interface (MPI) kommunizieren. Der Algorithmus dient in den späteren Abschnitten als Grundlage zur Auswertung von Simulationsdaten in Kapitel 6 und zur Verfolgung und Anpassung der Simulation bei der Veränderung der Topologie von Poren in Kapitel 7.

Zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten wird im Folgenden der in [163] entwickelte parallele, dreidimensionale *Connected-component labeling*-Algorithmus genauer vorgestellt. Zur Analyse des Laufzeitverhaltens werden die verschiedenen Lastszenarien für das *strong scaling* vorgestellt. Anschließend wird das Skalierungsverhalten sowie das Laufzeitverhalten der einzelnen Algorithmusteile auf dem Hermit Supercomputer [175] am HRLS Stuttgart mit bis zu 12 000 Recheneinheiten untersucht. Abgeschlossen wird der Abschnitt mit den Schlussfolgerungen und einen Ausblick für mögliche Verbesserung des Algorithmus.

4.5.1 Implementierung

Der hier vorgestellte verteilte, parallele, dreidimensionale *Connected-component labeling*-Algorithmus besteht aus zwei Teilen. Der erste Teil bestimmt die Zusammenhangskomponenten unabhängig in jedem Teilgebiet. Zur Speicherung der Komponenten wird ein separates Farbfeld entsprechend der Gebietsgröße verwendet, das die Zusammenhangskomponenten im Gebiet beschreibt. Durch die Verwendung einer Zuordnungsschicht vom Wert des Farbfeldes zur eigentlichen Zusammenhangskomponente benötigt der Algorithmus nur eine Iteration über das Gebiet. Für die Berechnung wird angenommen, dass alle Randzellen der Teilgebiete im Farbfeld als nicht zutreffend markiert sind (schwarz), also zu keiner Zusammenhangskomponente gehören. Im zweiten Teil werden die Zusammenhangskomponenten am Rand der Teilgebiete zu einem Graphen verbunden, welcher es allen Prozessen ermöglicht, die Zusammenhangskomponenten eindeutig zu kennzeichnen. Die einzelnen Schritte der beiden Teile werden im Folgenden genauer erläutert.

Im ersten Teil des Algorithmus wird entsprechend [163] von der linken oberen vorderen Ecke durch das dreidimensionale Gebiet zur gegenüberliegenden Ecke iteriert, wie im Pseudocode Listing 4.1 gezeigt. Für



(a) Die Zelle hat nur nicht zutreffende Vorgängerzellen.

(b) Die Zelle hat nur Vorgängerzellen, die zur gleichen Zusammenhangskomponente gehören.

(c) Die Zelle hat Vorgängerzellen, die zu unterschiedlichen Zusammenhangskomponenten gehören .

Abbildung 4.12: Zweidimensionale Darstellung der möglichen Fälle, die gemäß [163] im Farbfeld auftreten können. Das rote x entspricht der Zelle, für die das Kriterium zutraf, und die Pfeile zeigen die Vorgängerzellen an, die geprüft werden müssen. In Schwarz sind die Zellen markiert, die nicht dem Kriterium entsprechen oder am Rand des Teilgebiets liegen, und gestrichelt die bereits detektierten Zusammenhangskomponenten.

jede Zelle im Gebiet wird ein vom Benutzer definiertes Kriterium geprüft (Listing 4.1 Zeile 2), mit dem entschieden wird, ob die Zelle zu einer Zusammenhangskomponente gehört. Hierzu wird zur flexiblen Nutzung des Algorithmus ein Funktionszeiger verwendet, der entsprechend der Anwendung ausgetauscht werden kann. Falls die Zelle nicht dem Kriterium entspricht, wird sie im Farbfeld als nicht zutreffend (schwarz) markiert, siehe Listing 4.1 Zeile 11. Entspricht die Zelle dem Kriterium, werden die direkten Vorgängerzellen im Farbfeld geprüft. Hierbei müssen drei Fälle, wie in Abbildung 4.12 für 2D dargestellt, unterschieden werden.

Listing 4.1: Ablauf des Algorithmus zur Bestimmung von Zusammenhangskomponenten in 3D

```
1  für jede Zelle in x, y, z:
2        wenn die Zelle im Feld dem Kriterum entspricht:
3          wenn die Zellen x-1 und y-1 und z-1 im Farbfeld noch nicht eingefärbt sind
               :
4            erzeuge eine neue Komponente,
5          wenn eine der Zellen x-1 oder y-1 oder z-1 im Farbfeld eingefärbt ist:
6            wenn Vorgängerzellen zu unterschiedlichen Komponenten
7            gehören:
8              füge die unterschiedlichen Komponenten zusammen
9            füge Zelle zur Vorgängerkomponente hinzu
10       ansonsten:
11         markiere Zelle im Farbfeld als nicht zutreffend
```

Im ersten Fall (Listing 4.1, Zeile 3) sind alle Vorgängerzellen als nicht dem Kriterium entsprechend markiert, wie es an den Rändern der Teilgebiete sowie bei der ersten Detektion einer Zusammenhangskomponente auftritt. Abbildung 4.12(a) zeigt einen möglichen Zustand im Farbfeld für diesen Fall. Tritt dieser Fall auf, wird eine neue Zusammenhangskomponente mit einer fortlaufenden ID C^i erzeugt und im Farbfeld entsprechend eingetragen. Im zweiten Fall (Listing 4.1, Zeile 9) gehören alle Vorgänger zur gleichen Zusammenhangskomponente, wie in Abbildung 4.12(b) dargestellt. In diesem Fall wird die Zelle im Farbfeld zur Zusammenhangskomponente der Vorgängerzelle hinzugefügt. Als nicht dem Kriterium entsprechend markierte Zellen werden in diesem Fall ignoriert. Im dritten Fall (Listing 4.1, Zeile 6) gehören mindestens zwei Vorgängerzellen zu unterschiedlichen Zusammenhangskomponenten, wie in Abbildung 4.12(c) zu sehen. Durch das Markieren der aktuellen Zelle verbinden sich die Zusammenhangskomponenten und müssen zusammengeführt werden.

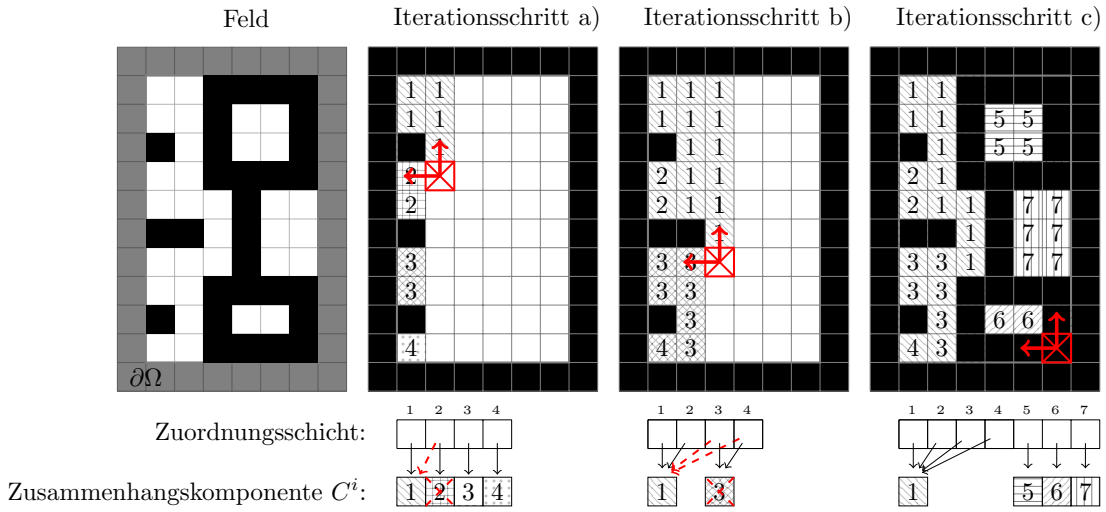


Abbildung 4.13: Ablauf des Algorithmus zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten in 2D für unterschiedliche Fälle. Links, das Feld mit Randzellen (grau) und in Weiß die Zellen, die dem Kriterium entsprechen. Rechts, drei Zwischenschritte des Algorithmus zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten sowie der Zuordnungsschicht.

Um das Umfärben von Zusammenhangskomponenten effizienter durchzuführen, wird zwischen dem Farbfeld und der eigentlichen Komponente eine Zuordnungsschicht verwendet. So werden im Farbfeld nur die Indexpositionen des Arrays in der Zuordnungsschicht gespeichert. Die Elemente im Array der Zuordnungsschicht zeigen auf die entsprechenden Zusammenhangskomponenten C^i. Hierdurch können zwei Zusammenhangskomponenten durch das Umsetzen von Zeigern effizient zusammengeführt werden. Der Ablauf des Algorithmus in 2D ist für drei Zwischenstände, a) bis c), während der Iteration über das Gebiet, zusammen mit der Zuordnungsschicht und dem Umhängen der Zeiger, in Abbildung 4.13 dargestellt. Das erste Feld zeigt das initiale Gebiet mit den weißen Zellen, welche dem Kriterium entsprechen und in Grau die Randzellen. Daneben sind die drei Zwischenschritte dargestellt. Durch die Zuordnungsschicht ist es zudem effizient möglich, weitere Informationen einer Zusammenhangskomponente wie die Anzahl an Zellen, den Schwerpunkt einer Zusammenhangskomponente oder deren minimalen und maximalen Radius während der Iteration über das Gebiet zu bestimmen. Dazu kann jeder Zusammenhangskomponente eine beliebige Datenstruktur mitgegeben werden. Zur Nutzung müssen dem Algorithmus weitere Funktionszeiger für das Erzeugen, das Befüllen, das Zusammenführen und das Freigeben der Datenstruktur mitgegeben werden. Hierdurch können entsprechend der Anwendung unterschiedliche Informationen bestimmt werden. Die Anwendung dieser Information wird in Abschnitt 6.3 und Kapitel 7 gezeigt.

Der zweite Teil des Algorithmus verbindet die lokalen Zusammenhangskomponenten der einzelnen Teilgebiete zu einem globalen Graph, der allen Prozessen zur Verfügung steht und eine eindeutige Zuordnung aller Zusammenhangskomponenten erlaubt. Der Aufbau des Graphen mit global eindeutigen IDs von verschiedenen Strukturen (graue Zellen) sowie die darauf angewendete eindimensionale Gebietszerlegung ist in Abbildung 4.14 dargestellt. Für den Aufbau des Graphen werden die lokalen IDs aller Zusammenhangskomponenten C^i mit der Position des Teilgebietes p an der Stelle Ox, Oy, Oz im Gx, Gy, Gz großen Gesamtgebiet addiert, um somit über die Teilgebiete hinweg eindeutig IDs zu erzeugen. Die global eindeutige IDs C_p^i werden mit

$$C_p^i = Ox + OyGx + OzGxGy + C^i \tag{4.39}$$

berechnet. Da C^i maximal so groß wie die Anzahl an Zellen im Teilgebiet werden kann, ist sichergestellt, dass keine IDs mehrfach vorkommen.

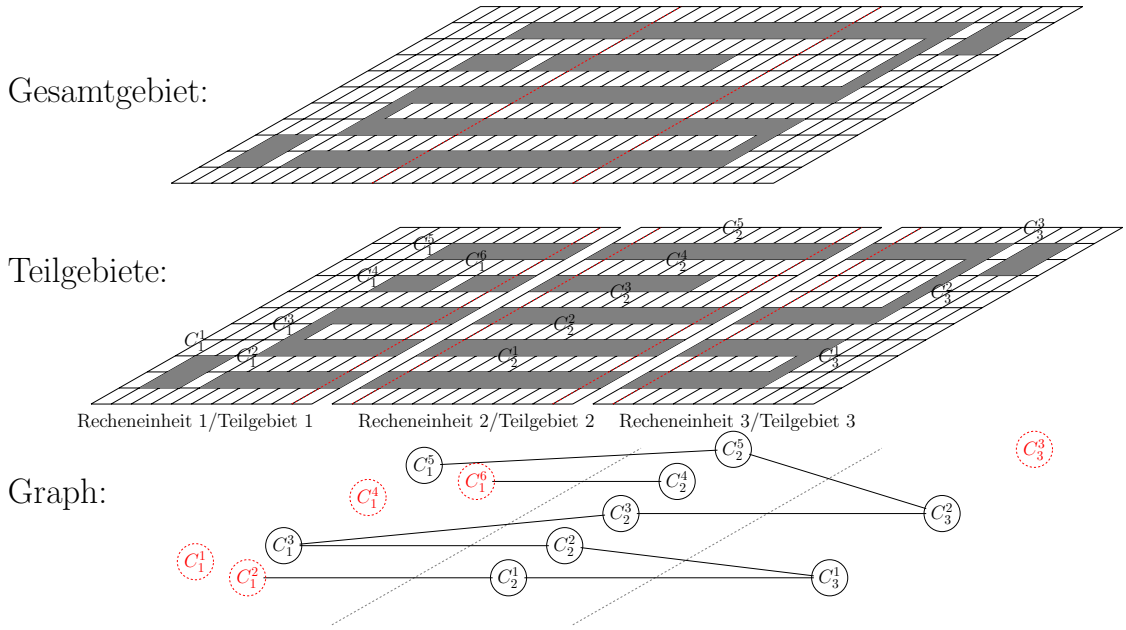
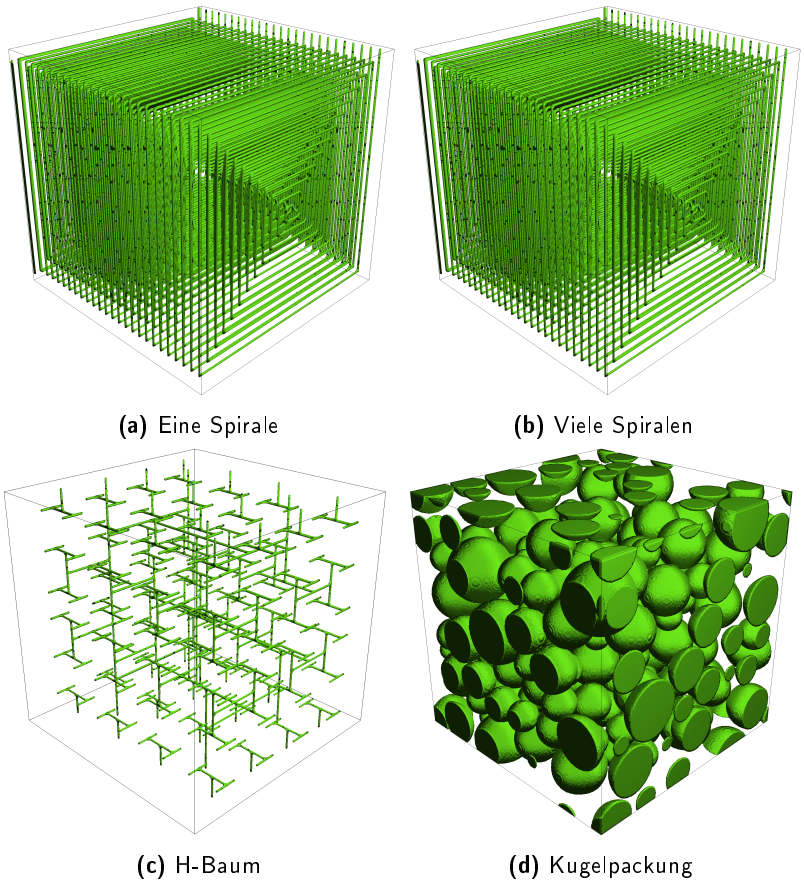


Abbildung 4.14: Aufbau des globalen Graphen zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten. Im oberen Teil ist das Gesamtgebiet mit der zu bestimmenden Struktur in Grau dargestellt. Darunter die Teilgebiete mit den Randschichten sowie den eindeutigen IDs C_p^i der lokalen Zusammenhangskomponenten. Das i steht hierbei für die lokale ID und das p für das Teilgebiet. Der daraus resultierende Graph ist darunter dargestellt, mit den global eindeutigen IDs in den rot gestrichelten Kreisen.

Anschließend sind wie in [163] beschrieben zwei Kommunikationsschritte notwendig, um den Graphen auf alle Prozesse aufzubauen. Zuerst werden die Zusammenhangskomponenten in den Teilgebieten, welche die Ränder berühren, miteinander verbunden, indem ein Randaustausch durchgeführt wird. Da es sich um einen ungerichteten Graphen handelt, muss der Austausch nur in eine Richtung erfolgen. Der empfangende Prozess verbindet danach die IDs der Zusammenhangskomponenten aus dem Rand des benachbarten Teilgebiets mit seinen IDs am entsprechenden Rand. Hierbei werden die Zusammenhangskomponenten als Knoten und deren Verbindungen über ein Teilgebiet hinweg als Kanten interpretiert. Im zweiten Kommunikationsschritt werden die Knoten- und Kanteninformationen serialisiert und global mit allen Prozessen ausgetauscht. Hierzu wird die kollektive MPI-Funktion MPI_AllGatherv [190] verwendet, welche einen effizienten Austausch der Daten ermöglicht. Nach dem Deserialisieren der Daten kann jeder Prozess den Graph, wie beispielhaft in Abbildung 4.14 dargestellt, aufbauen und den Zusammenhangskomponenten eine global eindeutige ID zuordnen. Hierzu wird für jede lokal im Teilgebiet vorkommende Zusammenhangskomponente eine Breitensuche auf dem Graphen durchgeführt, die von der ID der Zusammenhangskomponente ausgeht, und nach dem Knoten mit der niedrigsten ID gesucht, welche dann der Zusammenhangskomponente zugeordnet wird. Diese IDs sind in Abbildung 4.14 als rot gestrichelte Kreise dargestellt . Hierdurch erhalten alle Zusammenhangskomponenten die gleichen eindeutigen IDs über die Teilgebiete hinweg. Um die Zeit für das Reservieren und des anschließenden Freigebens des Speichers für Graphen zu reduzieren, wurde ein eigener Speichermanager geschrieben, der die Knoten mit einer bereits allokierten Menge an Kanten in einer Liste vorhält. Hierdurch kann durch das Umhängen von Zeigern ein Knoten allokiert bzw. wieder freigegeben werden. Der Speichermanager reduziert die Zeit zum Auf- und Abbau des Graphen von mehreren Minuten auf wenige Millisekunden.



(a) Eine Spirale **(b)** Viele Spiralen

(c) H-Baum **(d)** Kugelpackung

Abbildung 4.15: Unterschiedlich komplexe Gebietszustände in einem 100^3 Gebiet zur Auswertung des parallelen CCL-Algorithmus. Die Abbildungen basieren auf [163].

4.5.2 Testaufbau

Zur Messung der Laufzeit und des Skalierungsverhaltens des parallelen dreidimensionalen Algorithmus werden wie in [163] die vier unterschiedlichen Strukturen, eine Spirale, viele unabhängige Spiralen, ein H-Baum und eine Kugelpackung, verwendet, wie beispielhaft in Abbildung 4.15 für 100^3 Gebiete zur besseren Darstellung gezeigt. Für die Spirale werden zwei Varianten verwendet, um viele Zusammenhangskomponenten in den Teilgebieten zu erzeugen und den Einfluss auf die Bildung des globalen Graphen zu untersuchen. Im ersten Fall werden die Spiralen in den Ebenen miteinander verbunden, während im zweiten Fall die Spiralen zwischen den Ebenen unabhängig voneinander sind. Der H-Baum und die Kugelpackung werden als realistische Fälle gewählt. Für alle Strukturen wird ein Gebiet mit 500^3 Zellen verwendet. Zusätzlich wird für die Spiralfälle und für den H-Baum ein Gebiet aus 100^3 Zellen verwendet, um den Einfluss der Gebietsgröße zu untersuchen. Zur Untersuchung des *strong scaling* werden bis zu 12 168 Recheneinheiten verwendet. Um das Gebiet gleichmäßig in alle Raumrichtungen zu zerlegen, werden die Recheneinheiten p für die Skalierung in Schritten von p^3 vergrößert. Für alle Messungen wird der Algorithmus 500 mal nacheinander durchgeführt.

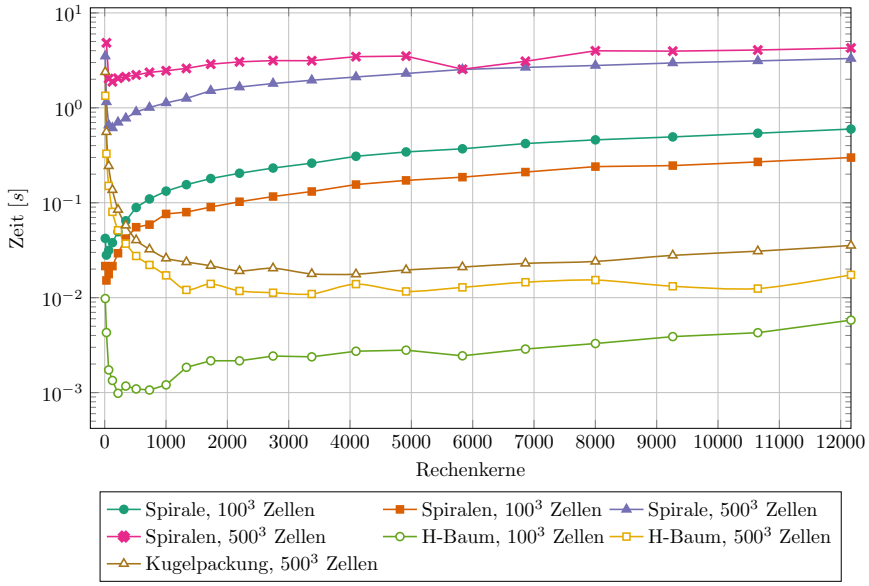


Abbildung 4.16: Durchschnittliche Laufzeit zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten mit dem verteilten parallelen dreidimensionalen *Connected-component labeling*-Algorithmus basierend auf [163]. Die Laufzeiten sind für die sieben unterschiedliche Strukturen im Gebiet dargestellt.

4.5.3 Performance-Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die Laufzeitmessungen sowie das Skalierungsverhalten für das *strong scaling* auf dem Cray XE6 Hermit [175] am HLRS, basierend auf [163], gezeigt. Zudem wird die Verteilung der Laufzeit abhängig von den einzelnen Teilen des Algorithmus analysiert.

Die Laufzeit zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten für die sieben untersuchten Strukturen ist in Abbildung 4.16 dargestellt. Die Laufzeit zwischen den Varianten unterscheidet sich abhängig von der Struktur um mehrere Größenordnungen. Für die realistischen Strukturen, wie den H-Baum und die Kugelpackung, nimmt, wie zu erwarten, die Laufzeit mit steigender Anzahl an Recheneinheiten ab. Je nach Struktur nimmt die Laufzeit ab 1000 Recheneinheiten im Fall des H-Baums im 100^3-Gebiet bzw. ab ~3500 Recheneinheiten im Fall des H-Baums und der Kugelpackung im 500^3-Gebiet wieder zu, bleibt aber deutlich unter der Referenzlaufzeit mit 9 Recheneinheiten. Für die komplexeren Spiralstrukturen nimmt die Laufzeit bis etwa 125 Recheneinheiten ab und beginnt danach zu steigen. Im Fall der 100^3-Gebiete steigt die Laufzeit über den Referenzwert. Für die Strukturen in den 500^3-Gebieten beträgt die maximale Laufzeit 4,83 Sekunden für die vielen Spiralen bei 9 Recheneinheiten und die minimale Laufzeit 0,0118 Sekunden für den H-Baum bei 2197 Recheneinheiten. Für die 100^3-Gebiete reduziert sich die Laufzeit im besten Fall für den H-Baum auf 0,98 *ms* bei 216 Recheneinheiten. Der Laufzeitunterschied des Algorithmus beträgt damit für den Fall eines 500^3-Gebiets bei 12 168 Recheneinheiten zwischen der schnellsten Laufzeit (dem H-Baum) und der langsamsten Laufzeit (der vielen Spiralen) einen Faktor von 190, abhängig von der Struktur, und in einem 100^3-Gebiet einem Faktor von 51. Die Unterschiede in den Laufzeiten sind auf die Anzahl der lokalen Zusammenhangskomponenten in den Teilgebieten und auf die Zeit zum Erzeugen und Durchlaufen des Graphen zurückzuführen, wie im späteren Verlauf dargestellt.

In Abbildung 4.17 ist das Skalierungsverhalten des Algorithmus für die verschiedenen Fälle dargestellt. Für den H-Baum und die Kugelpackung in einem 500^3 Zellen großen Gebiet skaliert der Algorithmus bis 2 000 Recheneinheiten und erreicht bei 3 375 Recheneinheiten seinen maximalen Speedup von 135. Nach dem Erreichen des Maximalwerts bleibt der Speedup in etwa konstant.

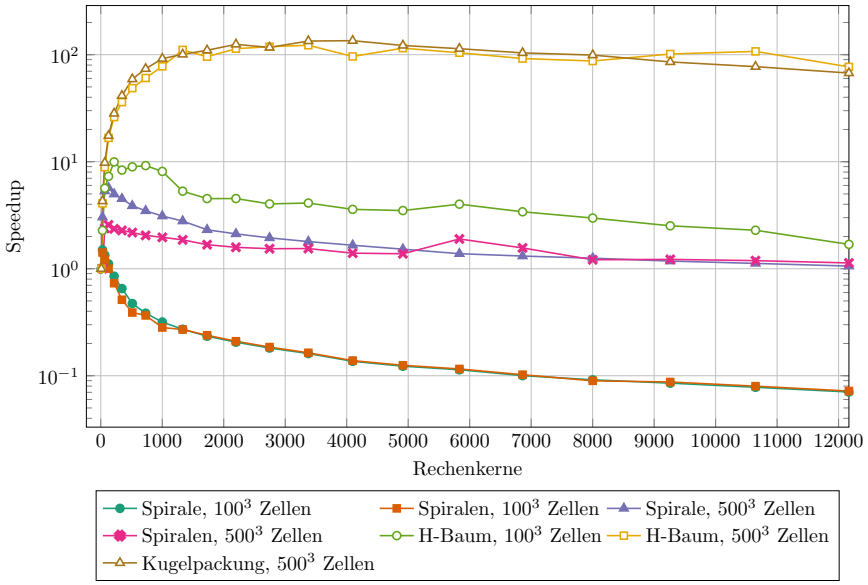


Abbildung 4.17: Skalierungsverhalten des parallelen dreidimensionalen Algorithmus basierend auf [163] zur Bestimmung von Zusammenhangskomponenten für die sieben unterschiedlichen Strukturen im Gebiet.

Dieses Verhalten entspricht den Erwartungen beim *strong scaling*, wie es auch im Amdahlschen Gesetz vorhergesagt wird [197]. Hierbei wird ab einer bestimmten Anzahl an Recheneinheiten bei einer festen Problemgröße ein Plateau erreicht, wie im Falle des H-Baums und der Kugelpackung bei 3 375 Recheneinheiten. Ab diesem Wert ist durch die Parallelisierung kein Geschwindigkeitszuwachs mehr zu beobachten. Die Teilgebietsgröße bei der das Plateau beginnt, entspricht etwa 33^3 Zellen pro Recheneinheit.

Für die anderen Gebiete skaliert der Algorithmus schlechter bis etwa 200 Recheneinheiten. Für die 100^3-Gebiete mit einer hohen Anzahl an Zusammenhangskomponenten zwischen den Teilgebieten (Spiralvarianten) ist ein deutlicher Einbruch im Skalierungsverhalten zu sehen, wodurch, wie im vorherigen Diagramm zu sehen, die Laufzeit durch die Parallelisierung zunimmt.

Der Grund für die Abhängigkeit des Skalierungsverhaltens von der Anzahl der Zusammenhangskomponenten ist in Abbildung 4.18 zu sehen. Für den Fall der Kugelpackung zeigt Abbildung 4.18 repräsentativ die Laufzeit der einzelnen Teile des Algorithmus für unterschiedlich viele Recheneinheiten. Der Verlauf ist für alle anderen Fälle ähnlich. Durch den Anstieg der Recheneinheiten bei fester Gesamtgebietsgröße werden die Teilgebiete pro Recheneinheit entsprechend kleiner. Hierdurch sinkt wie erwartet die Zeit zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten für die Teilgebiete. Weiterhin nimmt auch die Zeit für den Randaustausch ab, der für die Erzeugung des globalen Graphen benötigt wird. Hierbei müssen die Zusammenhangskomponenten am Rand von benachbarten Teilgebieten zwischen den Recheneinheiten ausgetauscht werden. Da die Randflächen mit steigender Anzahl an Recheneinheiten kleiner werden, führt dies wiederum zu weniger zu kommunizierenden Daten und damit zu kürzeren Laufzeiten. Durch die höhere Anzahl an Recheneinheiten gibt es jedoch auch mehr Teilgebiete und somit mehr Knoten und Kanten im Graph. Dies führt dazu, dass die Zeit zum globalen Austausch der Knoten und Kanten des Graphen mit steigender Anzahl an Recheneinheiten nach einem kurzen Sinken der Laufzeit langsam ansteigt. Die Zeit zum globalen Austausch der Daten dominiert ab etwa 3 000 Recheneinheiten bis etwa 10 000 Recheneinheiten die Gesamtlaufzeit.

Ebenfalls steigt mit dem größer werdenden Graphen die Zeit für dessen Erzeugung sowie für das anschließende Freigeben des Speichers. Vor allem die Zeit für das Erzeugen übersteigt ab etwa 10 000 Recheneinheiten die dominierende Zeit für den globalen Austausch. Die Zeit zum Durchsuchen des Graphen mit einer Breitensuche, für die Bestimmung der global eindeutigen IDs, sinkt bis etwa 1 000 Recheneinheiten.

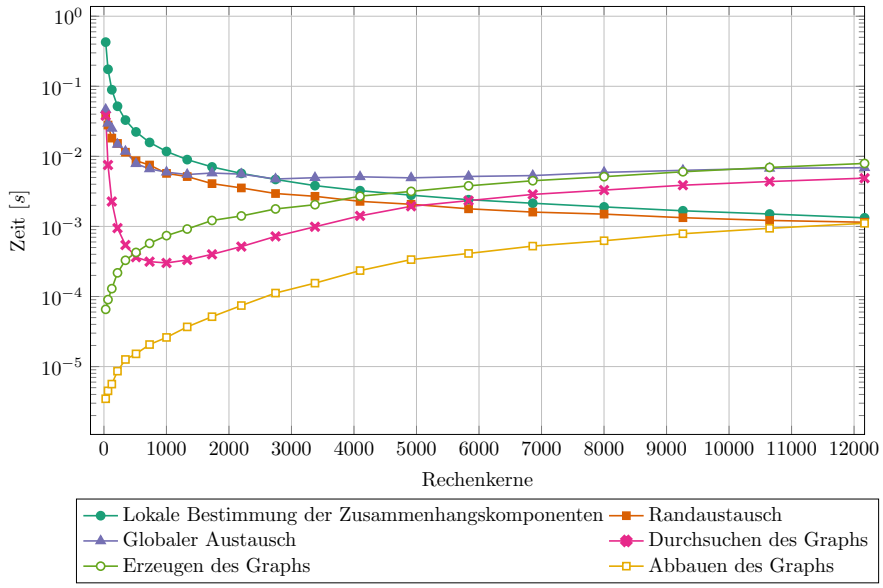


Abbildung 4.18: Laufzeit in Abhängigkeit der Recheneinheiten für die Berechnung der einzelnen Teilschritte zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten für die Kugelpackung. Abbildung aufbauend auf [163].

Der Grund für die anfängliche Abnahme hängt mit der sinkenden Anzahl an lokalen Zusammenhangskomponenten in den Teilgebieten zusammen, die im Graph geprüft werden müssen. Ab etwa 1 000 Recheneinheiten wird der Graph so groß, dass die sinkende Anzahl an zu prüfenden lokalen Zusammenhangskomponenten die Zeit zum Durchsuchen des Graphen nicht mehr kompensiert und die Zeit somit wieder ansteigt. Der Anstieg der Laufzeit der einzelnen Teile im Algorithmus führt beim *strong scaling* dazu, dass das Skalierungsverhalten für den H-Baum und die Kugelpackung ab etwa 4000 Recheneinheiten einbricht, wie in Abbildung 4.17 zu sehen. Durch die Abhängigkeit von der Anzahl der Zusammenhangskomponenten in den Teilgebieten bricht das Skalierungsverhalten für die anderen Fälle und die kleineren Gebiete deutlich früher ein.

Da sich die Ordnungsparameter in der Phasenfeldmethode, die in den meisten Fällen zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten verwendet wird, pro Zeitschritt nur langsam ändern, reicht es aus, den Algorithmus nur in bestimmten Intervallen durchzuführen, um die Änderung der Topologie zu verfolgen. Im Vergleich zur Laufzeit für die Berechnung eines Zeitschritts mit der Phasenfeldmethode von wenigen *ms* bis hin zu mehreren *s* ist der Algorithmus selbst für 12 168 Recheneinheiten mit 0,035*s* für realistische Strukturen schnell genug und beeinflusst die Gesamtlaufzeit der Simulation nur gering.

4.5.4 Schlussfolgerungen

In diesem Abschnitt wurde ein effizienter paralleler, dreidimensionaler Algorithmus zur Bestimmung von Zusammenhangskomponenten in verteilten Speichersystemen vorgestellt, wie sie in Supercomputern zur Verfügung stehen. Zur Bestimmung der Zusammenhangskomponenten iteriert der Algorithmus einmal über das Gebiet und baut danach im parallelen Fall einen globalen Graphen der zusammenhängenden Komponenten auf. Es wurden Laufzeitmessungen für vier unterschiedliche Strukturen und zwei Gebietsgrößen durchgeführt.

Die Schlußfolgerungen aus diesem Abschnitt sind:

(i) Der vorgestellte Algorithmus erlaubt es, Zusammenhangskomponenten parallel und effizient in zerlegten und verteilten dreidimensionalen Gebieten zu bestimmen.

(ii) Der Algorithmus skaliert beim *strong scaling* für realistische Strukturen mit bis zu 3 375 Rechenkerne. Dies entspricht einer Teilgebietsgröße von etwa 33^3 Zellen pro Recheneinheit.

(iii) Die Laufzeit des Algorithmus ist mit 0,035 *s* bei 12 168 Rechenkernen im Bereich der Laufzeit eines Zeitschritts der Phasenfeldmethode.

(iv) Die Laufzeit ist von der Struktur und damit von der Anzahl der Zusammenhangskomponenten abhängig.

(v) Das Erzeugen der Zusammenhangskomponenten in den Teilgebieten skaliert entsprechend der kleiner werdenden Teilgebiete.

(vi) Die Laufzeit im parallelen Fall für viele Recheneinheiten wird vor allem durch den globalen Austausch der Daten sowie dem Erzeugen und Durchsuchen des Graphen dominiert.

Der hier vorgestellte Algorithmus eignet sich im Falle von realistischen Strukturen aufgrund seiner geringen Laufzeit zur Verfolgung der Topologie in Phasenfeldsimulationen. Während der Simulation ist es zudem nur in bestimmten Intervallen notwendig, die Zusammenhangskomponenten zu bestimmen, da sich die Topologie bei Phasenfeldsimulationen nur langsam ändert.

4.5.5 Ausblick

Um die Laufzeit für die Topologieänderung während der Simulation weiter zu verbessern, ist es notwendig, den teuren Teil des Algorithmus, das Austauschen, Erzeugen und Durchsuchen des Graphen, weiter zu optimieren. Hierbei wäre es möglich wie in [163] beschrieben, den Graphen nur einmal zu Beginn der Simulation zu erzeugen und diesen anschließend nur bei Änderungen in der Topologie in den Teilgebieten anzupassen. Hierdurch könnte vor allem die Zeit für den Austausch der Kanten und für den Aufbau des Graphen reduziert werden. Weiterhin könnte das Durchsuchen des Graphen optimiert werden, indem ausgehend vom Graphen geprüft wird, ob der Knoten zu einer lokal vorhandenen Zusammenhangskomponente gehört.

5

Überblick der experimentellen und simulativen Arbeiten zur Untersuchung des Erstarrungsprozesses

Bereits 4 000 v. Chr. wurden erste einfache Gegenstände durch Gießen hergestellt. Hierzu wurde die flüssige Metallschmelze in Formen gegossen, die durch das anschließende Abkühlen in einen festen Zustand erstarrte. Die Herstellung von komplexen Bronzegegenständen begann etwa 1 600 v. Chr. in China und wurde um etwa 500 v. Chr. auf die Herstellung von Gegenständen aus Eisen erweitert. Erst im 16ten Jahrhundert begann die Herstellung von Gegenständen aus Eisen in Europa und gewann erst durch die Industrialisierung im 18ten Jahrhundert in England an Schwung [132]. Durch das Kombinieren von verschiedenen Elementen wird seither versucht, in Erstarrungsexperimenten Legierungen mit verbesserten Eigenschaften herzustellen. Das Periodensystem beinhaltet 80 metallische Elemente. Aus diesen ergeben sich theoretisch 3 160 binäre und bereits 82 160 ternäre Legierungen [131, 198]. Teilweise untersucht sind davon derzeit etwa 2 500 binäre und 3 000 ternäre Legierungen [1]. Für Legierungen mit mehr als drei Elementen, wie quaternäre Systeme ($> 10^6$ mögliche Legierungen), steigt die Anzahl an möglichen Legierungen noch weiter an und der Anteil an untersuchten Systemen nimmt weiter ab. Durch das Mischen verschiedener chemischer Elemente erlauben es Legierungen, die positiven Eigenschaften der Elemente für neue Materialien zu kombinieren, wie sie für Anwendungen unter hoher mechanischer und thermischer Beanspruchung beispielsweise in der Automobilindustrie, der Luft- und Raumfahrt, für Turbinen und bleifreie Lötzinne benötigt werden [199, 200]. Zur Verbesserung des Kriechwiderstands bei hohen Temperaturen, der Bruchzähigkeit und der Steifigkeit werden reinen Metallen oder binären Legierungen oft zusätzliche hitzebeständige Stoffe wie Cr, Mo, W, C, Nb hinzugefügt [1]. Aufgrund der schlechten Dehnbarkeit und Bruchzähigkeit [201] wird zum Beispiel der technisch interessanten Legierung NiAl [93, 202–204] Cr oder Mo hinzugefügt, um deren Anwendbarkeit bei niedrigen Temperaturen zu verbessern [205, 206].

Für die Herstellung neuartiger und verbesserter Produkte werden jedoch Materialien mit definierten Eigenschaften benötigt [1]. Die Materialeigenschaften hängen dabei zum einen von den Eigenschaften der chemischen Elemente selbst und zum anderen von der sich während des jeweiligen Erstarrungsprozesses entwickelnden Mikrostruktur ab [207–209]. Die Mikrostruktur bestimmt dabei neben den mechanischen Eigenschaften auch die elektrischen, optisch-akustischen, tribologischen, thermischen und magnetischen Eigenschaften mit [210]. Ein wichtiger Prozess, bei dem sich eine Vielzahl an Mikrostrukturen ausbildet, ist die Erstarrung, der Umwandlungsprozess von flüssig zu fest [211]. In der Natur kann dies beispielsweise täglich bei der Erstarrung von Wasser zu Eis beobachtet werden, bei der sich Eiskristalle sowie unterschiedliche Kristallstrukturen ausbilden können. Aufgrund der Einfachheit ist die Erstarrung von Metallen zudem

einer der wichtigsten formgebenden Herstellungprozessse mit einer hohen wirtschaftlichen Relevanz. Die Erstarrung von Metallen wird dabei für die unterschiedlichsten Anwendungszwecke genutzt: von großen Blöcken für den Bau von Häusern, Brücken und Schiffen, bis hin zu hochreinen Einkristallen mit definierter Form für die Elektronikindustrie [132].

Erste analytische Modelle zur Beschreibung des Erstarrungsprozesses stammen, wie in [1] beschrieben, aus den 1940er Jahren [135]. Eine Theorie, abhängig von der Amplitude einer sinusförmigen Erstarrungsfront hin zu stabilem bzw. gestörtem Wachstum bei der gerichteten Erstarrung, wird von Mullins und Sekerka [212–214] hergeleitet. Jackson und Hunt leiten in [215] einen Zusammenhang zwischen der Unterkühlung an der Erstarrungsfront, dem Lamellenabstand und der Erstarrungsgeschwindigkeit für gerichtet erstarrte binäre Systeme her. Eine Zusammenfassung und Einordnung der charakteristischen Mikrostrukturen in die verschiedenen Erstarrungsprozesse sowie entsprechende Theorien zur Beschreibung sind in Kurz und Fisher [132] gegeben. Weitere Theorien zu unserem heutigen Verständnis des Erstarrungsprozesses sind in [114, 133, 216–218] beschrieben.

Neben den klassischen Feldern der Experimente und der Theorie haben Simulationen in den letzten Jahrzehnten immer mehr an Bedeutung in der Entwicklung von neuen Anwendungen und Materialien gewonnen [135]. Besonders durch den exponentiellen Anstieg der Rechenleistung, entsprechend dem Mooreschen Gesetz [2], ist es möglich, immer genauere und größere Simulationen durchzuführen [1]. Zur Simulation der Mikrostrukturentwicklung haben sich in den letzten Jahren besonders Simulationen auf Basis der Phasenfeldmethode (PFM) als mächtiges Werkzeug etabliert[122]. Die Übereinstimmung der PFM mit klassischen *Sharp-Interface*-Theorien wird in [30, 54, 62, 219–223] gezeigt. Die Anwendbarkeit der PFM zur Simulation dynamischer Prozesse wird in [224] gezeigt. Der Fortschritt in den Computerwissenschaften ist auch in den immer größer werdenden Simulationsgebieten und den komplexer werdenden Modellen zu sehen, welche zu einem besseren Verständnis des Erstarrungsprozesses beitragen [1].

Thermodynamisch kann die Phasenumwandlung durch die Zustandsvariablen Konzentration, Temperatur und Druck kontrolliert werden. Die Gibbssche Phasenregel $F = C - N + 2$, mit der Anzahl an Komponenten K und Phasen N, beschreibt dabei, wie viele Phasen im thermodynamischen Gleichgewicht gleichzeitig vorliegen können, abhängig von der Anzahl an veränderlichen intensiven Zustandsgrößen F [225]. Hierbei können abhängig von der Anzahl an veränderlichen Zustandsgrößen F drei Arten von Gleichgewichten existieren, ohne das sich der Zustand des Systems ändert [226]. (1) ein invariantes Gleichgewicht bei dem keine Zustandsgröße veränderlich ist ($F = 0$), was durch einen Punkt im Phasendiagramm gekennzeichnet. (2) ein univariantes Gleichgewicht bei dem eine Größe verändert ($F = 1$) werden kann. Hierbei ist es jedoch notwendig auch die anderen Zustandsgrößen mit zu verändern um den Zustand des Systems zu erhalten. Im Phasendiagramm ist dies als univariante Line dargestellt. (3) ein divariantes Gleichgewicht ($F > 1$) bei dem die Zustandsgrößen beliebig geändert werden können, ohne das sich der Zustand im System ändert.

In den Phasenfeldmodellen zur Beschreibung der Erstarrung wird der Druck wie in [1] beschrieben normalerweise als konstante Zustandsgröße angenommen, weshalb der Prozess nur von der Konzentration und der Temperatur abhängt. Für die Untersuchung der gerichteten Erstarrung werden sowohl die Wachstumsrichtung als auch die Wachstumsgeschwindigkeit v durch einen aufgeprägten Temperaturgradienten kontrolliert [1]. Experimentell wird die gerichtete Erstarrung mit Öfen auf Basis der Bridgman-Stockbarger-Methode untersucht, wie schematisch in Abbildung 5.1 dargestellt. Hierbei wird über Heiz- und Kühlelemente ein Temperaturgradient G erzeugt, der mit einer bestimmten Geschwindigkeit v bewegt wird [208]. Hiermit werden Dünnschichtexperimente, englisch *thin sample experiments* genannt, sowie Erstarrungsexperimente in Schmelztiegeln durchgeführt.

Abbildung 5.2 zeigt die zwei Öfen auf Basis der Bridgman-Stockbarger-Methode, mit denen die Experimente, die in dieser Arbeit sowie in [227–231] gezeigt werden, durchgeführt wurden. Die Geschwindigkeit des Temperaturgradienten während der Erstarrung wird im Ofen aus Abbildung 5.2(a) mechanisch über eine Schnecke geregelt. Der Gradient in der Temperatur wird über ein fest positioniertes Heizelement am oberen Teil des Ofens sowie über ein Kühlelement am unteren Ofenteil eingestellt. Durch die Wasserkühlung wird der Gradient alleine durch die Stärke des Heizelements geregelt. Im Gegensatz hierzu wird in der

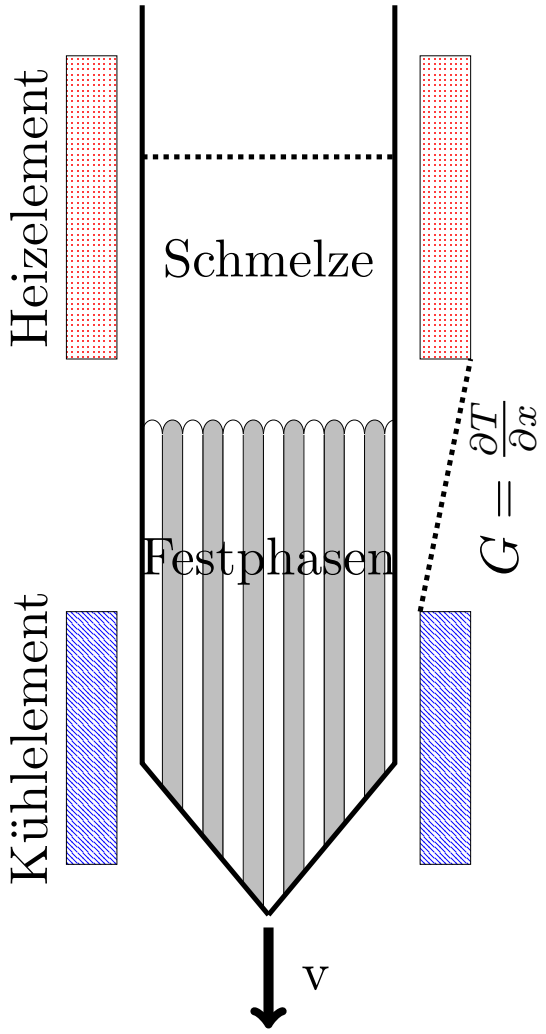
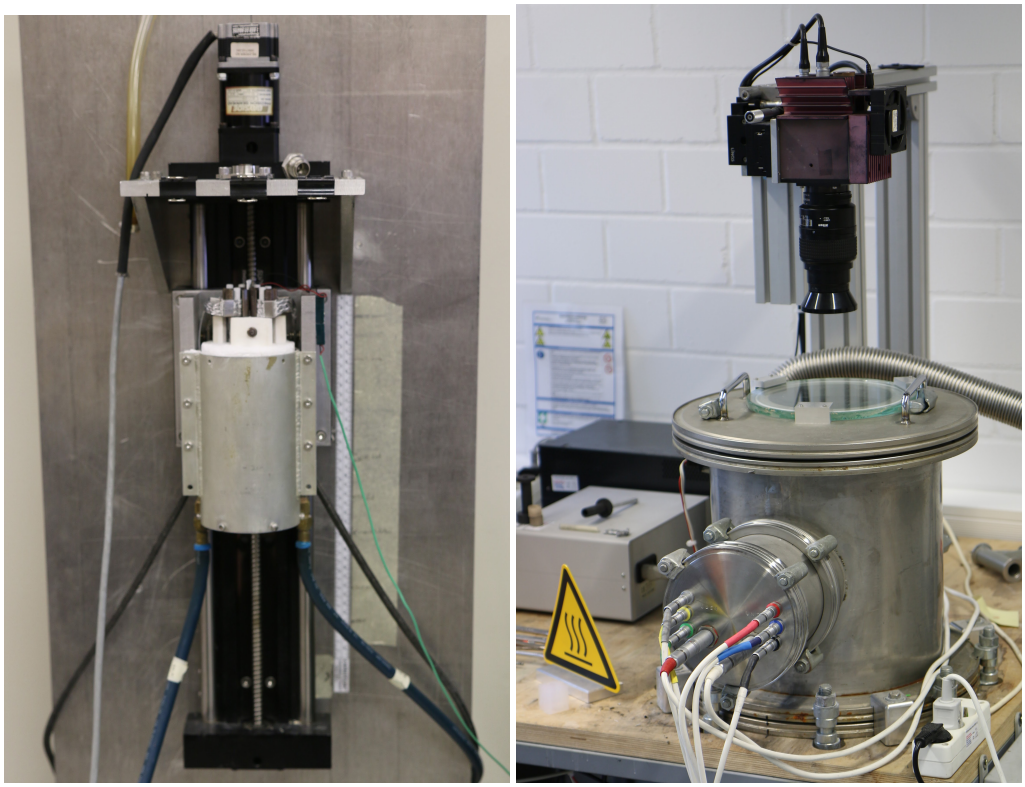


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung eines Bridgman-Ofens mit Heiz- und Kühlelement auf Basis von [132].



(a) Ofen an der University of Alabama at Birmingham (UAB)

(b) Ofen am Deutschen Luft und Raumfahrtzentrum (DLR)

Abbildung 5.2: Öfen zur experimentellen Untersuchung der gerichteten Erstarrung auf Basis der Bridgman-Stockbarger-Methode. Diese Öfen wurden für die experimentellen Vergleiche in dieser Arbeit verwendet.

ARTEMIS-Anlage (AErogel TEchnology for MIcrogravity Solidification)[232] am DLR die Geschwindigkeit sowie der Temperaturgradient über Heizelemente am oberen und unteren Ende des Ofens eingestellt. Der Ofen ist in Abbildung 5.2(b) zu sehen. Zudem ist eine optische Messung der Erstarrungsgeschwindigkeit über einen durchsichtigen Aerogel-Schmelztiegel und einen Spiegel möglich. Dies ermöglicht es, die Erstarrungsgeschwindigkeit und den Temperaturgradienten zu überwachen und anzupassen.

Abhängig von den Prozessbedingungen während der Erstarrung, den chemischen Elementen und deren Zusammensetzungen entstehen charakteristische Mikrostrukturen wie dendritische Strukturen, Zellstrukturen, eutektische Strukturen und peritektische Strukturen sowie spinodale Entmischungsmuster [1]. McCartney et al. [233] klassifizierten abhängig von der Zusammensetzung der Schmelze mit den drei Komponenten A, B und C eines einfachen ternären Systems fünf Regionen mit charakteristischen Mikrostrukturen, die bei der gerichteten Erstarrung entstehen. Systeme mit weniger Komponenten sind über die Regionen am Rand abgebildet. Die Erstarrungsmuster für Legierungen aus mehreren Komponenten können analog zu [233] hergeleitet werden. Für das hier betrachtete ternäre System wird angenommen, dass die drei primären Phasen α, β und γ nicht facettiert erstarren und dass die Erstarrungsgeschwindigkeit und der Temperaturgradient konstant sind. Auf Basis des Systems Al-Ag-Cu zeigen sie in [234] die Übereinstimmung mit ihren Vermutungen. In Abbildung 5.3 sind die fünf Regionen beispielhaft für ein einfaches ternäres System dargestellt. In Region **1**, nahe der reinen Zusammensetzung der Komponente, wird mit planarem, einphasigem Wachstum gerechnet. Nahe der binären eutektischen Zusammensetzung in Region **2** wird planares, zweiphasiges Wachstum erwartet. In Region **3**, entlang der eutektischen Rinne, wird abhängig von der Zusammensetzung das Wachstum von zweiphasigen Zellstrukturen und Dendriten vermutet. Nahe des ternären eutektischen Punkts, Region **4**, wird planares, dreiphasiges Wachstum erwartet. In Region **5** wird

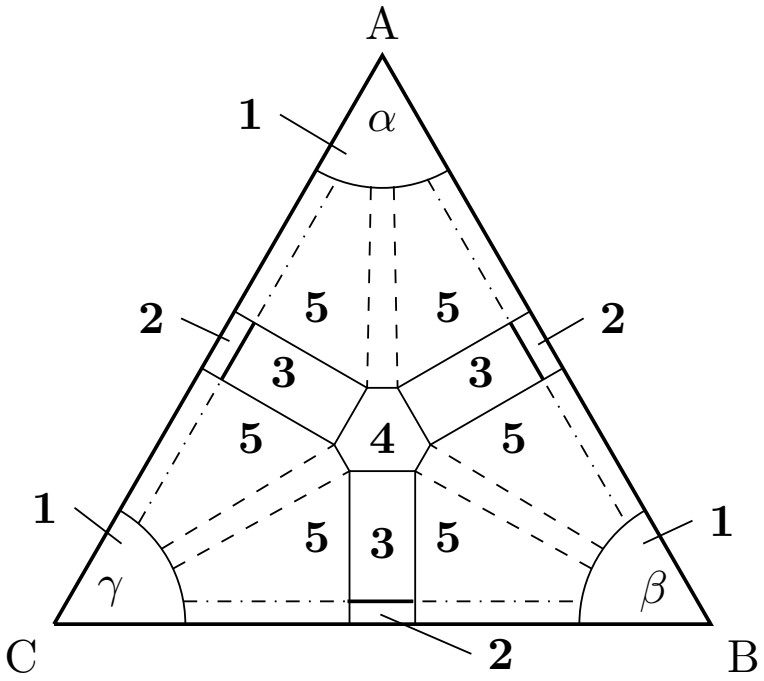


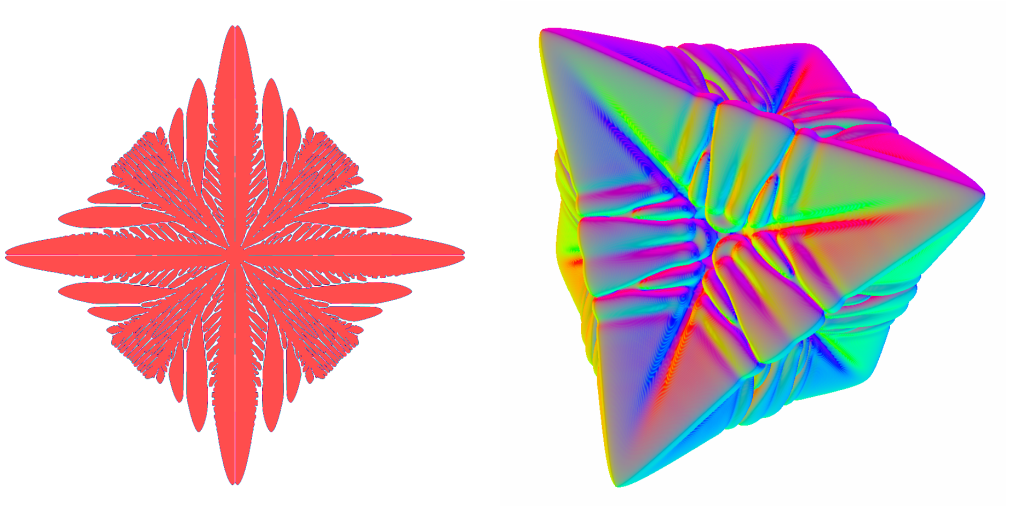
Abbildung 5.3: Charakteristische Mikrostrukturen abhängig von der Zusammensetzung der Schmelze bei konstanten Prozessbedingungen während der gerichteten Erstarrung, nach [234].

das Zellwachstum einer Phase und dendritisches Wachstum erwartet, gefolgt von Strukturen wie in den Regionen **2**, **3** und **4**. Weitere Erstarrungsmuster, wie sie bei der peritektischen Erstarrung entstehen, werden in der Übersichtsarbeit von Akamatsu und Plapp [235] beschrieben. Spinodale Entmischungsmuster werden intensiv in den Publikationen [236–241] untersucht.

Im Folgenden wird entsprechend [1] der Fokus auf die unterschiedlichen Formen bei der Erstarrung von ternären Legierungen gelegt, wie von McCartney et al. [233] klassifiziert. Hierzu werden zum einen die Ergebnisse von Phasenfeldsimulationen sowie die entsprechenden Experimente und grundlegenden Theorien dargestellt. Zuerst wird auf das freie sowie gerichtete dendritische Wachstum von zwei Phasen mit einer Komponente sowie mit zwei Komponenten eingegangen. Danach wird die gerichtete Erstarrung von mehrphasigen, mehrkomponentigen Systemen für eutektische und nah-eutektische Legierungen betrachtet. Abschließend werden weitere Aspekte zur Simulation der Erstarrung mit der PFM aufgezeigt.

5.1 Dendritisches Wachstum

Eine typische Struktur, die bei der Erstarrung entsteht, sind Dendriten. Abhängig von den Prozessbedingungen und den chemischen Elementen bilden sich unterschiedliche Dendriten bei der Erstarrung aus. Die Dendriten bilden dabei (tannen-) baumartige Strukturen aus, wie sie in vielen Erstarrungsproben gefunden werden. Daher stammt auch die Bezeichnung Dendrit, die sich von dem griechischen Wort déndron herleitet, das Baum bedeutet. Abbildung 5.4 zeigt einen einzelnen Dendrit in 2D mit mehreren Seitenarmen sowie in 3D ohne Seitenarme, die mit dem Phasenfeldmodell von [66] simuliert wurden. Abhängig von der Anisotropie kann die Anzahl an Dendritenarmen variieren. Durch Fluktuationen in der Temperatur und in den Konzentrationen kann auch die Anzahl an Unterarmen variieren. Basierend auf [1] werden im Folgenden die Arbeiten zu dendritischem Wachstum zusammengefasst. Ivantsov et al. stellen 1947 in [242]



(a) 2D-Dendrit mit mehreren Seitenarmen in einem $6\,000^2$ Gebiet.

(b) 3D-Dendrit in einem 700^3 Gebiet.

Abbildung 5.4: Phasenfeldsimulation eines einzelnen Dendriten in 2D und 3D auf Basis eines Modellsystems.

ein analytisches Modell zur Beschreibung der Spitze der Dendritenarme während des Wachstums vor. Dieses Modell wird bis heute zur Validierung von Simulationen verwendet. Für die Simulation von Dendriten mit der Phasenfeldmethode wird meist zwischen thermischem und konzentrationsgetriebenem Wachstum sowie einer Kombination aus beidem unterschieden.

Ausführliche Untersuchungen zu thermisch getriebenem Dendritenwachstum [27, 71, 72, 219, 221, 243–248] mit der PFM stammen aus den 1990er Jahren, wie in [1] beschrieben. Hierbei entstehen die Arme der Keime durch Fluktuationen im Temperaturfeld. Im Jahr 1993 stellen Kobayashi [27] sowie Wheeler et al. [219] erste 2D-Phasenfeldsimulationen zur Untersuchung von thermisch getriebenen Dendriten mit anisotropen Oberflächenenergien vor. Abhängig von der gewählten Anisotropie und dem verwendeten Rauschen wird in Kobayashi [27] das Wachstum von bis zu drei Unterarmen beobachtet. Boettinger und Warren zeigen in [245] zweidimensionale Phasenfeldsimulationen von nicht isotherm erstarrten Dendriten mit bis zu drei Seitenarmen. Ein effizientes Phasenfeldmodell zur Simulation von Dendriten bei der Erstarrung von reinen Metallen wird 1996 von Karma und Rappel [71] vorgestellt. Das Modell erlaubt es, physikalisch kleine und damit relevante kinetische Koeffizienten zu untersuchen. Quantitativ zeigt das Modell für den stationären Wachstumszustand eine gute Übereinstimmung mit der Geschwindigkeit an der Dendritenspitze und der Dendritenform, verglichen mit der Greenschen Funktionsmethode. Basierend auf dem Modell aus [71] untersuchen Karma und Rappel in [244] das Wachstum von Dendriten in einer reinen unterkühlten Schmelze in 2D und 3D, mit einer Gitterauflösung von 300^3 Zellen. Mit dem Modell zeigen sie einen ausführlichen quantitativen Vergleich mit Succinonitril (Bernsteinsäuredinitril). Die Dendritenarme in 3D sind dabei von einer Vierfachsymmetrie dominiert, wobei diese stark von der Amplitude in den verwendeten Anisotropien abhängen. Die Ergebnisse ihrer vorherigen Arbeiten diskutieren Karma und Rappel in [72]. In [221] untersuchen sie die Bildung von Seitenarmen durch thermisches Rauchen.

In den 2000er Jahren ging die Forschung hin zur Modellierung und Untersuchung von konzentrationsgetriebenen Dendriten [34–51], die auf Basis von Fluktuationen im Konzentrationsfeld aus der Schmelze entstehen [1]. Karma zeigte 2001 in [34] die Anwendbarkeit von numerischen Berechnungen mit der PFM zur Analyse von konzentrationsgetriebenem dendritischem Wachstum. Hierfür stellte er ein verbessertes Phasenfeldmodell vor, welches mittels realer Festphasendiffusion zur quantitativen Untersuchung der Musterbildung während der Mikrostrukturentwicklung in Legierungen verwendet werden kann. Für ein Wasser-Eis-System zeigen Gránásy et al. [37] quantitativ die Keimbildung und das Wachstum von mehreren Dendriten für einkomponentige und binäre Systeme auf Basis der Phasenfeldmodelle von Caginalp

und Jones [249] sowie Conti [108]. In [38] zeigen Gránásy et al. mit einem Modell, basierend auf [29, 108] und homogener Keimbildung, das Zusammenstoßen von mehreren Dendriten in 7000^2 Gebieten. Warren und Boettinger [31] stellen ein Phasenfeldmodell mit Wärme- und Diffusionsgleichung zur Simulation der Erstarrung von binären Legierungen vor. Hiermit zeigen sie das Wachstum von Dendriten bei isothermen Bedingungen in eine übersättigte Schmelze mit einem 750^2 Zellen großen Gebiet. Abhängig von den Parametern werden realistische Muster und sekundäre und tertiäre Dendritenarme beobachtet, die wachsen, vergröbern und sich vereinigen. Loginova et al. [32] und Emmerich et al. [33] nutzen das Modell aus [31] für ihre Untersuchungen. Loginova et al. finden damit heraus, dass für kleine Unterkühlungen und viele Keime ein isotroper Ansatz ausreichend ist. Jedoch muss die Entwicklung der Konzentration und Temperatur für größere Unterkühlungen mit weniger Keimen gelöst werden [32]. Im Jahr 2002 nutzten George und Warren [36] das Modell aus Warren und Boettinger [31] für eine erste großskalige Simulation eines konzentrationsgetriebenen Dendriten in einem dreidimensionalen Gebiet mit $500 \times 500 \times 500$ Zellen. Ein quantitativer Vergleich in 2D und 3D zwischen dem Phasenfeldmodell aus [146] und zellulären Automaten wird von Choudhury et al. [250] für Al-Cu-Legierungen gezeigt. Wesner et al. [49] untersuchen das Schmelzen und Fragmentieren von Al-Cu-Dendriten bei unterschiedlichen Zusammensetzungen und Temperaturen in 2D und 3D mit dem Modell aus [146]. Shimokawabe et al. [47] untersuchen das gemeinsame gerichtete dendritische Wachstum, welches von Takaki et al. in [50] fortgesetzt wird. In [55] analysieren Takaki et al. das konkurrierende Wachstum von dendritischen sowie von zellulären Strukturen mit der Phasenfeldmethode in 2D. Der Übergang von dendritischem zu kugelförmigem Wachstum für verschiedene Zusammensetzungen der Schmelze und Erstarrungsgeschwindigkeiten für das ternäre System Ni-Cu-Cr wird von Danilov und Nestler [251] untersucht.

5.2 Gerichtete eutektische Erstarrung

Die Erstarrung von eutektischen Legierungen ist nach Fredriksson [252] wie folgt definiert: „Eutectic solidification of a liquid is defined as a simultaneous precipitation of two or more phases via an eutectic reaction $L \leftrightarrow \alpha + \beta$ at constant temperature“ („Eutektische Erstarrung einer Schmelze ist definiert als das gleichzeitige Erstarren von zwei oder mehr Phasen über eine eutektische Reaktion $L \leftrightarrow \alpha + \beta$ bei einer konstanten Temperatur“). Bei dem eutektischen Punkt befinden sich die Festphasen, und die Schmelze bei der eutektischen Temperatur T_E im thermodynamischen Gleichgewicht, wodurch dies eindeutig im Phasendiagramm definiert ist. Diese Reaktion wird daher als invariant Reaktion bezeichnet. Die Temperatur bei der eutektischen Erstarrung ist dabei immer niedriger als die Schmelztemperatur der einzelnen Phasen. Hieraus leitet sich auch das ursprünglich aus dem Griechischen stammende Wort eutektisch ab, was leicht oder niedrig schmelzend bedeutet. Durch den niedrigen Schmelzepunkt bieten eutektische Legierungen giesstechnisch viele Vorteile. Technisch relevante eutektische Legierungen setzen sich aus Lötzinnen, Eisen und Kohlenstoff (eutektisches Gusseisen) sowie Aluminiumlegierungen zusammen [210].

Für Systeme mit mehr als zwei Komponenten können sich abhängig von der Anzahl an gleichzeitig erstarrenden Festphasen verschiedene eutektische Systeme bilden, die hierbei eutektische Rinnen oder eutektische Flächen im Phasendiagramm formen, deren Schmelztemperatur jedoch höher ist als die des eutektischen Punkts. Bei einem ternären System mit einem ternären eutektischen Punkt befinden sich die drei Festphasen und die Schmelze im Gleichgewicht. Daneben bilden jeweils zwei Festphasen und die Schmelze eutektische Rinnen, wie in der Liquidusprojektion des Systems Al-Ag-Cu in Abbildung 6.22 im Abschnitt 6.4.3 als schwarze Linien dargestellt sind.

Das gemeinsame, gleichzeitige und gekoppelte Wachstum der Phasen bei der Erstarrung am eutektischen Punkt, vor allem bei mehrkomponentigen Systemen, führt zur Ausbildung von feinen und komplexen Mustern im Werkstoff [135, 229, 253, 254]. Daher können eutektische Werkstoffe hohe Festigkeiten oder ungewöhnliche elektrische und magnetische Eigenschaften besitzen [210]. Daneben können manche der experimentell beobachteten Gefüge nicht mit den herkömmlichen Theorien erklärt werden, weshalb diese auch von hohem wissenschaftlichen Interesse sind [210].

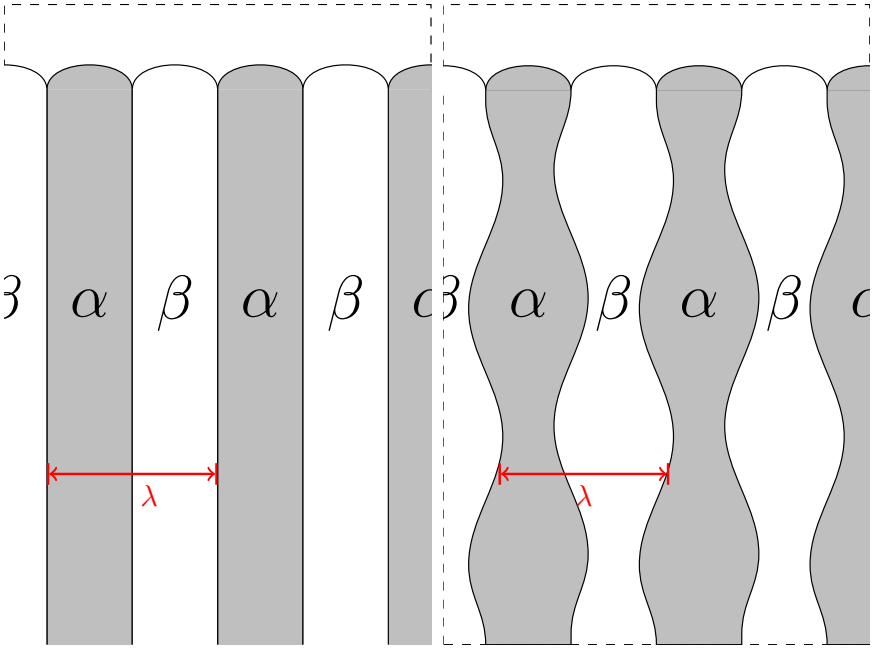
Im Folgenden werden daher basierend auf [1] die experimentellen sowie simulativen Arbeiten zur Mikrostrukturentwicklung beim eutektischem Wachstum zusammengefasst. Zur theoretischen Beschreibung der Stabilität der Muster von binären eutektischen Lamellenstrukturen während des Wachstums wurden bereits in den 70er und 80er Jahren verschiedene analytische Modelle hergeleitet [234, 255–257]. Neben dem geraden Wachstum der Lamellen und Fasern während der gerichteten eutektischen Erstarrung können verschiedene Instabilitäten wie Oszillation und gekipptes Wachstum beobachtet werden. Das Phänomen des gekippten Wachstums, bei dem sich die Ausrichtungen der Fest-Fest-Grenzflächen zu der aufgeprägten Wachstumsrichtung des Temperaturgradienten unterscheiden, wird theoretisch von Kassner et al. [258] untersucht. Zusätzlich untersuchten Kassner et al. [259] wie auch Karma und Sarkissian [260] das Phänomen der Oszillation. Neben verschiedenen Phasenanordnungen bei der eutektischen Erstarrung in 2D formen sich bei mehrkomponentigen Legierungen in 3D zudem komplexe Muster aus. Zur experimentellen Untersuchung der Phasenanordnungen und Muster bei der eutektischen Erstarrung haben sich zwei Arten von Experimenten, mit Öfen auf Basis der Bridgman-Stockbarger-Methode, etabliert: die Erstarrung in dünnen Schichten und die Erstarrung in Schmelztiegeln. Diese beiden Arten von Experimenten erlauben es, neben der Zusammensetzung der Legierung gezielt die Erstarrungsbedingungen zu kontrollieren. Dabei können die Erstarrungsrichtung, die Erstarrungsgeschwindigkeit und der Temperaturgradient an der Erstarrungsfront auf die Mikrostrukturentwicklung untersucht werden.

Ergebnisse zur gerichteten eutektischen Erstarrung von Legierungen aus Experimenten mit Dünnschichtexperimenten und auf Basis der Bridgman-Stockbarger-Methode sowie entsprechende Phasenfeldsimulationen werden im Folgenden genauer betrachtet.

5.2.1 Dünnschichtexperimente und entsprechende zweidimensionale Phasenfeldsimulationen

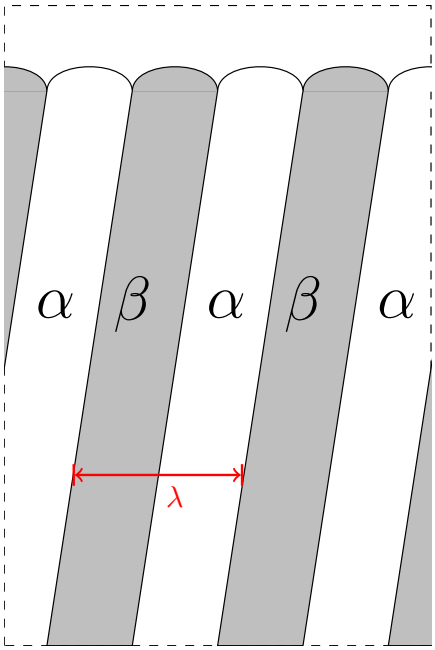
Zur Untersuchung der Phasenanordnung und der verschiedenen Instabilitäten während der gerichteten Erstarrung haben sich Dünnschichtexperimente etabliert. Die Erstarrung in dünnen Schichten erlaubt es dabei, quasi-zweidimensionale Strukturen zu analysieren. Aufbauend auf [1] werden im Folgenden die theoretischen, experimentellen sowie simulativen Arbeiten zusammengefasst. Diese Reduzierung der Dimensionen erlaubt es, grundlegende Effekte wie Anisotropie, gekipptes Wachstum, den Einfuß der Phasenanordnungen sowie das Auslöschen und die Keimbildung zu untersuchen. Durch die Betrachtung von nur zwei Raumdimensionen eignen sich Dünnschichtexperimente zudem zur Überprüfung und Verbesserung von analytischen Theorien wie der Jackson-Hunt-Theorie [215] und der Mullins-Sekerka-Theorie [212, 213]. In-situ-Experimente von transparenten organischen Systemen ermöglichen zudem die Untersuchung der Mikrostrukturentwicklung während der Erstarrung.

Verschiedene experimentelle Arbeiten zur gerichteten Erstarrung des pseudo-binären Systems Kohlenstoff-Brom Chlor CBr_4-C_2Cl_6 in dünnen Schichten stammen von [261–268]. Caroli und Faivre [261] zeigen, dass sich die Lamellenbreite λ nicht, wie in der Jackson-Hunt-Theorie [215] vorhergesagt, bei der Lamellenbreite mit der größten Unterkühlung einstellen muss. Sie schlussfolgern daher, dass es kein eindeutiges Selektionsprinzip der Lamellen gibt, das zu einer eindeutigen finalen Mikrostruktur führt. Zudem zeigen sie, dass es unter speziellen Bedingungen, verursacht durch die Wachstumsbedingungen und die räumlichen Randbedingungen, dauerhaft zu Störungen im System kommen kann, was zu gekipptem und oszillierendem Wachstum führt. Neben dem stationären Wachstum sind mögliche Störungen beim Wachstum wie das Kippen und Oszillieren der Lamellen für ein binäres System bei der gerichteten Erstarrung beispielhaft in Abbildung 5.5 dargestellt. Faivre fasst in [262] die vergangenen experimentellen und numerischen Arbeiten zusammen. Darin wird geschlussfolgert, dass experimentell stationäres Wachstum bei der Erstarrung mit nur einem Korn nach langer Zeit erreicht werden kann, sich aber die Lamellenbreite λ nicht überall gleich einstellt. Für mehrere Körner wird hingegen kein stationäres Wachstum gefunden, da verschiedene Instabilitäten das Wachstum stören. Ginibre et al. [263] zeigen für einfache Muster, dass diese für unterschiedliche Breiten, nach denen sich die Muster periodisch wiederholen, stabil wachsen, wie von der Jackson-Hunt-Theorie [215] vorhergesagt. Zudem werden sechs verschiedene Muster mit niedriger Symmetrie gezeigt:

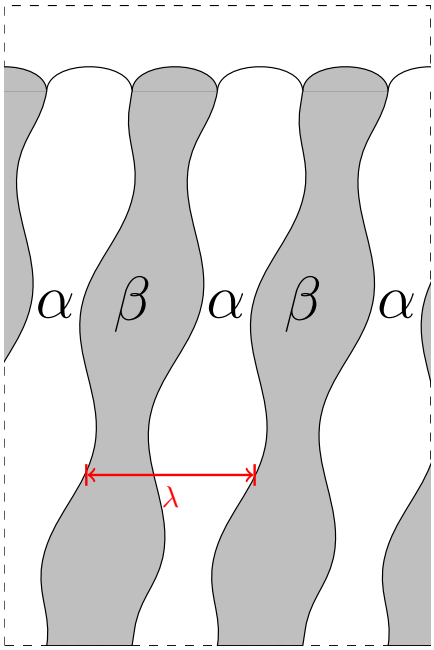


(a) Stationäres Lamellenwachstum.

(b) Oszillierendes Wachstum.



(c) Stationäres gekipptes Lamellenwachstum.



(d) Oszillierendes gekipptes Wachstum.

Abbildung 5.5: Idealisierte Wachstumsarte der Lamellen bei der gerichteten Erstarrung von binären Systemen.

gekipptes Wachstum [258, 262] sowie fünf neue Muster mit und ohne Oszillation. Außerdem wird eine gute quantitative Übereinstimmung der Experimente mit den numerisch berechneten Stabilitätsdiagrammen von Karma und Sarkissian [260] gefunden.

Um den Einfluss von Anisotropie auf das gekippte Wachstum zu untersuchen, ändern Akamatsu und seine Kollegen in [266–268] systematisch die Orientierung der Wachstumsrichtung während der gerichteten Erstarrung, indem sie den Temperaturgradienten über eine rotierende Platte, auf der das Experiment aufgebaut ist, verändern. Hiermit bestimmten sie in [266] die Wulff-Form der Anisotropie. Dünnschichtexperimente mit dem ternären eutektischen System In-Bi-Sn werden in Rex [269] durchgeführt. Darin wird der Einfluss auf die Mikrostrukturentwicklung bei leichten Abweichungen der Konzentrationen der Schmelze vom eutektischen Punkt untersucht. Abhängig davon und den Erstarrungsbedingungen werden komplexe Abfolgen in der Mikrostruktur gefunden. Eine Zusammenfassung der Arbeiten im Bereich der Musterbildung an der Erstarrungsfront mit in-situ durchgeführten Methoden von Akamatsu und Nguyen-Thi findet sich in [270].

Zweidimensionale Phasenfeldsimulationen zur gerichteten Erstarrung mit binären Systemen werden in [30, 63, 271–274] vorgestellt. Ein Vergleich von 2D-Phasenfeldsimulationen mit unterschiedlichen Lamellenbreiten λ und der daraus resultierenden Unterkühlung wird in Karma [30], Apel et al. [271], Choudhury et al. [275] sowie Folch und Plapp [272] mit der Jackson-Hunt-Theorie gezeigt. Karma [30] stellen ein Phasenfeldmodell vor, das es quantitativ erlaubt, stabiles Wachstum bei isothermer sowie nicht isothermer, eutektischer Erstarrung von binären Legierungen zu Simulieren. Apel et al. [271] untersuchen den Einfluss von λ und zeigen, dass mit zunehmendem λ die Lamellen beginnen zu oszillieren. Neben stabilem Wachstum werden in Nestler und Wheeler [63] verschiedene Instabilitäten wie unterschiedliche Typen der Oszillation in der Lamellenbreite und grapfadrige Strukturen gezeigt. Folch und Plapp [272] zeigen einen quantitativen Vergleich ihrer Zwei-Phasen-Modelle mit einem Multigridansatz für das System CBr_4-C_2Cl_6.

Simulative Untersuchungen mit der Phasenfeldmethode zu gekipptem Wachstum mit verschiedenen Anisotropieformulierungen für ein binäres Eutektikum werden von Ghosh und Kollegen [273, 274, 276] durchgeführt. In den Arbeiten zeigen sie, dass das gekippte Wachstum durch die Form und Stärke der Anisotropie in der Oberflächenenergie getrieben ist. Zudem werden die Ergebnisse der Phasenfeldsimulationen mit der *dynamic boundary-integral*-Methode verglichen, mit der eine gute Übereinstimmung gefunden wird, solange die Anisotropien klein und die Anisotropiefunktionen glatt sind. Für Systeme mit mehr als zwei Phasen, wie bei ternären eutektischen Systemen, können weitere Mechanismen zu gekipptem Wachstum führen, wie in [137, 277] beschrieben. Hötzer et al. [137] zeigen gekipptes Wachstum für verschiedene idealisierte ternäre Systeme mit isotropen Oberflächenenergien mit dem Phasenfeldmodell aus [8, 146]. Hierbei wird das gekippte Wachstum von der Fest-Fest- und der Fest-Flüssig-Oberflächenenergie kontrolliert. Abhängig vom System und den Prozessparametern wird ein Kippwinkel von bis zu 7,29° beobachtet. Eine Abhängigkeit des Kippwinkels vom Lamellenabstand und der Wachstumsgeschwindigkeit wird in Ghosh et al. [273] wie auch in Hötzer et al. [137] gefunden. Ein weiterer Mechanismus für gekipptes Wachstum wird von Apel et al. [277] für Al-Ag-Cu beschrieben. Hierbei entsteht die Verkippung durch Unterschiede im Konzentrationsfeld, da es aufgrund der Phasenanordnung keine Spielsymmetrie mehr gibt. Zudem untersuchen Apel et al. verschiedene Phasenanordnungen und deren Stabilität. Verschiedene Oszillationsmodi in ternären Systemen werden von Choudhury und Kollegen [275, 278] untersucht. Auf Basis des Phasenfeldmodells aus [66] wird in [278] systematisch der Einfluss von nicht eutektischen Zusammensetzungen der Schmelze, der Phasenanordnung sowie der periodischen Breite auf das Wachstum und die Stabilität der Lamellen untersucht. In [275] wird die Arbeit aus [278] mit dem Phasenfeldmodell aus [146] für anisotrope Grenzflächen und Phasenanordnungen fortgesetzt.

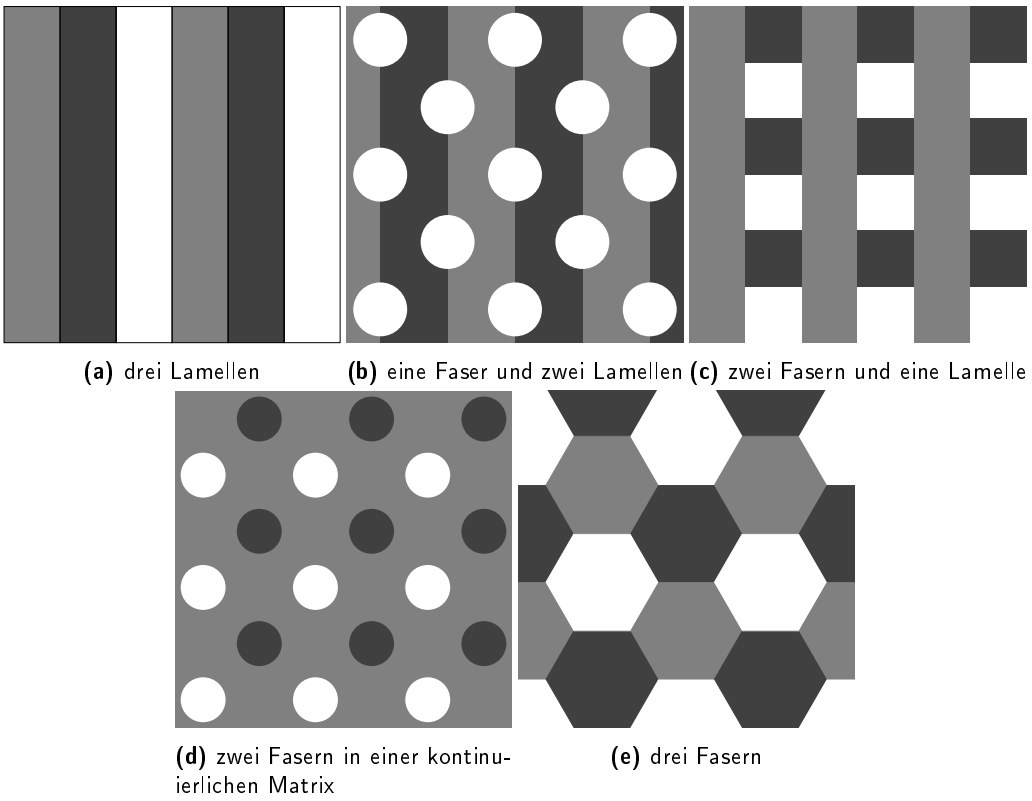


Abbildung 5.6: Idealisierte Muster in einem ternären eutektischen System, die sich während der Erstarrung ternärer eutektischer Systeme in Schliffbildern parallel zur Wachstumsfront bilden, entsprechend den theoretischen Vorhersagen von [253, 254].

5.2.2 Erstarrungsexperimente auf Basis der Bridgman-Stockbarger-Methode und entsprechende dreidimensionale Phasenfeldsimulationen

Zur Untersuchung der Musterbildung in der Mikrostruktur bei der gerichteten Erstarrung von eutektischen Legierungen werden Erstarrungsexperimente in Schmelztiegeln auf Basis der Bridgman-Stockbarger-Methode genutzt [279–281]. Die Öfen auf Basis der Bridgman-Stockbarger-Methode erlauben es, gezielt den Erstarrungsprozess und damit die entstehende Mikrostruktur und somit auch die späteren Materialeigenschaften zu kontrollieren.

Im Folgenden werden basierend auf [1] die theoretischen, experimentellen sowie simulativen Arbeiten zur gerichteten Erstarrung zusammengefasst. Ein optischer Vergleich der Mikrostrukturen nach der ternären eutektischen Erstarrung von sieben verschiedenen Systemen, Cd-Sn-(Pn, In, Tl), Al-Cu-(Mg, Zb, Ag) und Zn-Sn-Pb, wurde von Cooksey und Hellawell im Jahr 1967 in [282] durchgeführt.

Auf Basis der fünf chemischen Elemente Bi, In, Sn, Pb und Cd führen Ruggiero und Rutter Experimente zur gerichteten Erstarrung durch [253, 283–287], in denen Sie eine Vielzahl an Mustern beobachten. In [253] klassifizieren Ruggiero und Rutter auf Basis von experimentellen Schliffbildern des Systems Bi-In-Sn sowie mittels geometrischer Überlegungen fünf theoretische Muster. Diese Muster sind wie folgt: (a) drei Lamellen, (b) zwei Lamellen und eine Faser, (c) eine Lamelle und zwei Fasern (d) zwei Fasern in einer kontinuierlichen Matrix und (e) drei Fasern. Lewis et al. [254] stellen diese Muster graphisch dar, wie in Abbildung 5.6 nachgebildet.

Basierend auf der Jackson-Hunt-Theorie zur Berechnung der Unterkühlung, abhängig von der periodischen Länge und der Erstarrungsgeschwindigkeit für binäre Systeme, erweitern Himemiya und Umeda [288] diese für ternäre Systeme. Hierfür leiten sie Gleichungen für die folgenden drei Muster her: regelmäßige Lamellenstruktur, eine Faser in einer hexagonalen Struktur sowie eine Ziegelstruktur. Der Zusammenhang aus der Jackson-Hunt-Theorie [215] von Lamellenabstand und Erstarrungsgeschwindigkeit wird experimentell für verschiedene Legierungen in [279, 280, 289–291] gezeigt.

Dreidimensionale Langzeit In-situ-Beobachtungen des binären eutektischen Systems Succinonitril-Campher (SCN-DC) werden von Perrut und Kollegen [292, 293] durchgeführt. In [292] werden verschiedene Muster mit geordneten Fasern gezeigt, welche durch unterschiedliche Erstarrungsgeschwindigkeiten entstehen. Verschiedene dynamische Instabilitäten wie das Aufteilen und Überwachsen der Fasern in Abhängigkeit des Lamellenabstands und der Geschwindigkeit werden in [293] gezeigt.

Experimentelle Untersuchungen zur gerichteten ternären eutektischen Erstarrung von Al-Ag-Cu wurden aufgrund des geringen Schmelzpunkts von 773,6K und der relativ zentralen Lage des eutektischen Punkts im Phasendiagramm von [138, 227–231, 233, 234, 281, 282, 294–296] durchgeführt. Darin werden verschiedene Muster abhängig von den Erstarrungsbedingungen gefunden. Zudem ist es aufgrund der unterschiedlichen Dichten der Komponenten für Experimente in Schwerelosigkeit interessant [294]. Hierzu werden derzeit Experimente in geringer Schwerelosigkeit von Al-Ag-Cu auf der Internationalen Raumstation (ISS) im Rahmen des „Solidification along an Eutectic path in Ternary Alloys" (SETA)-Programms durchgeführt [297]. Der Effekt von Konvektion und Gravitation auf die Konzentration während der Erstarrung wird zudem von Sargin [295] untersucht. Modelle auf Basis einer Stabilitätsanalyse zur Erklärung der fünf möglichen Erstarrungsregionen bei der gerichteten Erstarrung von ternären Systemen, wie in Abbildung 5.3 dargestellt, werden im ersten Teil von McCartney et al. [233] untersuchen. Im zweiten Teil zeigen McCartney et al. [234] durch Erstarrungsexperimenten die Übereinstimmung ihrer Modelle mit dem System Al-Ag-Cu. Aufgrund der Änderung der Löslichkeit von Silber in Aluminium [227] verändern sich die Muster nach der Erstarrung. Zur Untersuchung der Musterbildung quer und parallel zur Erstarrungsfront, direkt nach der Erstarrung, werden von Böyük und Marasli [281] sowie von Sargin [295] Abschreckexperimente durchgeführt. Die entstehenden Muster in der Mikrostruktur bei der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung von Al-Ag-Cu werden experimentell von Genau und Kollegen [227, 228] sowie von Dennstedt und Kollegen [229–231, 296] untersucht und mit verschiedenen Methoden quantifiziert. Die kristallographische Orientierung der Muster wird von Genau und Ratke [228] mit EBSD-Messungen und die Phasenanordnung mit Nächste-Nachbarn-Statistiken charakterisiert. Dennstedt und Ratke [229] setzen die Charakterisierung der Muster auf Basis von Formfaktoren fort und zeigen, dass die Muster mit langsamer werdender Erstarrungsgeschwindigkeiten von unregelmäßigen Mustern in Kettenmuster übergehen. Ein Vergleich von experimentellen Schliffbildern mit Phasenfeldsimulationen sowie mit Polfiguren wird in Dennstedt et al. [230] gezeigt. Verschiedene Muster abhängig von der Erstarrungsgeschwindigkeit und dem aufgeprägten Temperaturgradienten werden in Dennstedt et al. [296] gezeigt und mit Hilfe von Nächsten-Nachbar-Statistiken quantifiziert. Eine erste dreidimensionale Rekonstruktion einer experimentellen Probe von gerichtet ternär eutektisch erstarrtem Al-Ag-Cu mittels Synchrotronstrahlung ist in [138, 231] dargestellt. In [231] sind Ereignisse beim Wachstum der Faser wie Nukleation, Zusammenwachsen, Aufteilen und Überwachsen anhand der dreidimensional rekonstruierten Daten dargestellt. Weitere experimentelle Arbeiten zu ternären eutektischen Systemen sind in [207] für Nb-Al-Ni, in [298] für Al-Si-Ni und in [299] für Sn-Ag-Zn beschrieben. Rinaldi et al. [280] zeigen neben reinen eutektischen Mustern auch gekoppelte eutektische und dendritische Strukturen am System Al-Cu-Ni.

Zur Simulation der eutektischen Erstarrung, entsprechend der vorgestellten Experimente mit der Phasenfeldmethode, haben sich zwei Ansätze etabliert. Zur Simulation der Muster parallel zur Erstarrungsfront können zweidimensionale Simulationen genutzt werden. Diese haben den Vorteil, dass der Rechenaufwand aufgrund der kleineren Gebiete um mehrere Größenordnungen geringer ist als bei 3D-Simulationen. Jedoch ist ein Keimbildungsmodell notwendig, um in 2D realistische Mikrostrukturen simulieren zu können. Der zweite Ansatz ist die Simulation der Mikrostrukturentwicklung in einem dreidimensionalen Gebiet. Daher müssen die Keime nur zu Beginn der Simulation als Startbedingung gesetzt werden, von denen sich die

Muster während der Erstarrung ausbilden. Aufgrund der komplexen räumlichen Interaktion der Muster lassen sich viele Effekte nur mit 3D-Simulationen untersuchen.

Die Simulationsergebnisse der eutektischen Erstarrung mit der Phasenfeldmethode wurden im Jahr 2004 von Lewis et al. [300] und im Jahr 2015 von Akamatsu und Plapp [235] zusammengestellt. Zweidimensionale Phasenfeldsimulationen der eutektischen Erstarrung werden von [220, 301–307] beschrieben. Für die binäre eutektische Erstarrung des Systems Al-Si zeigen Nestler und Kollegen [302, 303] für ihr Multiphasenmodell die optische Übereinstimmung von 2D-Simulationen mit Experimenten. Die entstehenden Mikrostrukturen von ternären eutektischen Systemen bei der Erstarrung mit 2D-Phasenfeldsimulationen werden von Cogswell und Carter [307] und Kundin et al. [305] untersucht. Kundin et al. [305] nutzen dabei das System Al-Cu-Ni zur Untersuchung von peritektischen und eutektischen Mustern, abhängig von verschiedenen Nukleationsmechanismen. Cogswell und Carter [306, 307] stellen ein thermodynamisches Multiphasen-Multikomponenten-Phasenfeldmodell vor. Damit zeigen sie für unterschiedliche Zeitpunkte während der schnellen Erstarrung die entstehenden Muster.

Dreidimensionale Phasenfeldsimulationen mit einem binären eutektischen System stammen von Apel et al. [271]. Für die Simulationen beobachten sie wie in Experimenten eine hexagonale Anordnung der Fasern. Parisi und Kollegen [308–310] untersuchen mit Phasenfeldsimulationen die Stabilität von lamellenartigen Strukturen bei der gerichteten binären eutektischen Erstarrung. Für ihre Analyse werden gezielt die Konzentrationsfelder sowie die Phasenfelder während dem stabilen lamellenartigen Wachstum gestört und die daraus entstehenden Instabilitäten in den Mustern untersucht. Abhängig von den Mustern wird eine Änderung der durchschnittlichen Frontunterkühlung beobachtet. Plapp fasst in [311] die beobachteten Instabilitäten bei der gerichteten Erstarrung von binären Systemen zusammen. Der Einfluss auf die Muster durch einen schrägen Temperaturgradienten in binären Systemen wird von Perrut et al. [312] erforscht. Ein schräger Temperaturgradient führt dabei zu einer regelmäßigeren Lamellenanordnung der zwei entstehenden Phasen, anstelle von labyrinthartigen Mustern. Ghosh und Plapp führen in [274] ihre Arbeit zu zweidimensionalem Lamellenwachstum aus [273] für dreidimensionale Strukturen fort. Dabei untersuchen sie den Einfluss der Anisotropie der Fest-Fest-Oberflächenenergie auf die Musterauswahl, abhängig von bestimmten Orientierungen. Der Einfluss der Wachstumsgeschwindigkeit auf die Faseranordnung für das System NiAl-34Cr mit dem Phasenfeldmodell aus [8, 146] wird in Kellner et al. [313] gezeigt und mit experimentellen Schliffbildern quantitativ verglichen. In Abbildung 5.7 ist die dreidimensionale Faserstruktur sowie die Mikrostruktur parallel zur Erstarrungsfront bei verschieden Zeitschritten des gerichtet erstarrten Systems NiAl-34Cr dargestellt. In gelb in ist die Martixphase NiAl und in blau die Cr Fasern gezeigt. Hierbei entwickelt sich die Mikrostruktur ausgehend von einer Voronoi Verteilung zur Modellierung der Keime hin zu einer geordneten hexagonalen Anordnung der Cr Fasern. Zur Veranschaulichung des Anordnungsprozess der Fasern sind die Events wie das Überwachsen und Aufteilen der einzelnen Cr Fasern in 3D mit unterschiedlichen Blautönen zusätzlich neben der gesamten Mikrostruktur freigestellt. Zudem wird in [313] für zweidimensionale und verschiedene dreidimensionale Faserstrukturen die Unterkühlung abhängig vom Lamellenabstand untersucht und eine gute Übereinstimmung mit der Jackson-Hunt-Theorie gefunden.

Die gerichtete Erstarrung von ternären eutektischen Systemen in 3D mit einem thermodynamisch konsistenten Multiphasen-Multikomponenten-Phasenfeldmodell wird von Nestler et al. [66] gezeigt. Darin wird das Wachstum eines hexagonalen Musters für isotrope Oberflächenenergien gezeigt. Choudhury et al. [278] untersuchen die Muster mit verschieden Phasendiagrammen auf Basis des Phasenfeldmodells aus [66]. Für ein symmetrisches Phasendiagramm wird das Wachstum von hexagonalen Strukturen beobachtet, während bei einem unsymmetrischen Phasendiagramm Kettenmuster entstehen. Zudem wird der Einfluss einer nicht eutektischen Schmelze für das symmetrische Phasendiagramm untersucht, bei dem sich ein Ziegelmuster entwickelt. Zur Untersuchung des Einflusses von verschiedenen Fest-Flüssig-Oberflächenenergien und der Konzentration in der Schmelze auf die entstehenden Muster nutzt Choudhury in [314] das Phasenfeldmodell aus [145, 146]. Hiermit wird gezeigt, dass ungleiche Phasenfraktionen eine der Hauptursachen für das Vernetzen der Phasen ist. Hötzer et al. [315] reproduzieren mit dem Phasenfeldmodell aus [145, 146] vier der fünf theoretisch vorhergesagten Muster aus [253, 254]. In [8] untersuchen Hötzer et al. die gerichtete eutektische Erstarrung des Systems Al-Ag-Cu mit großskaligen 3D-Simulationen. Darin

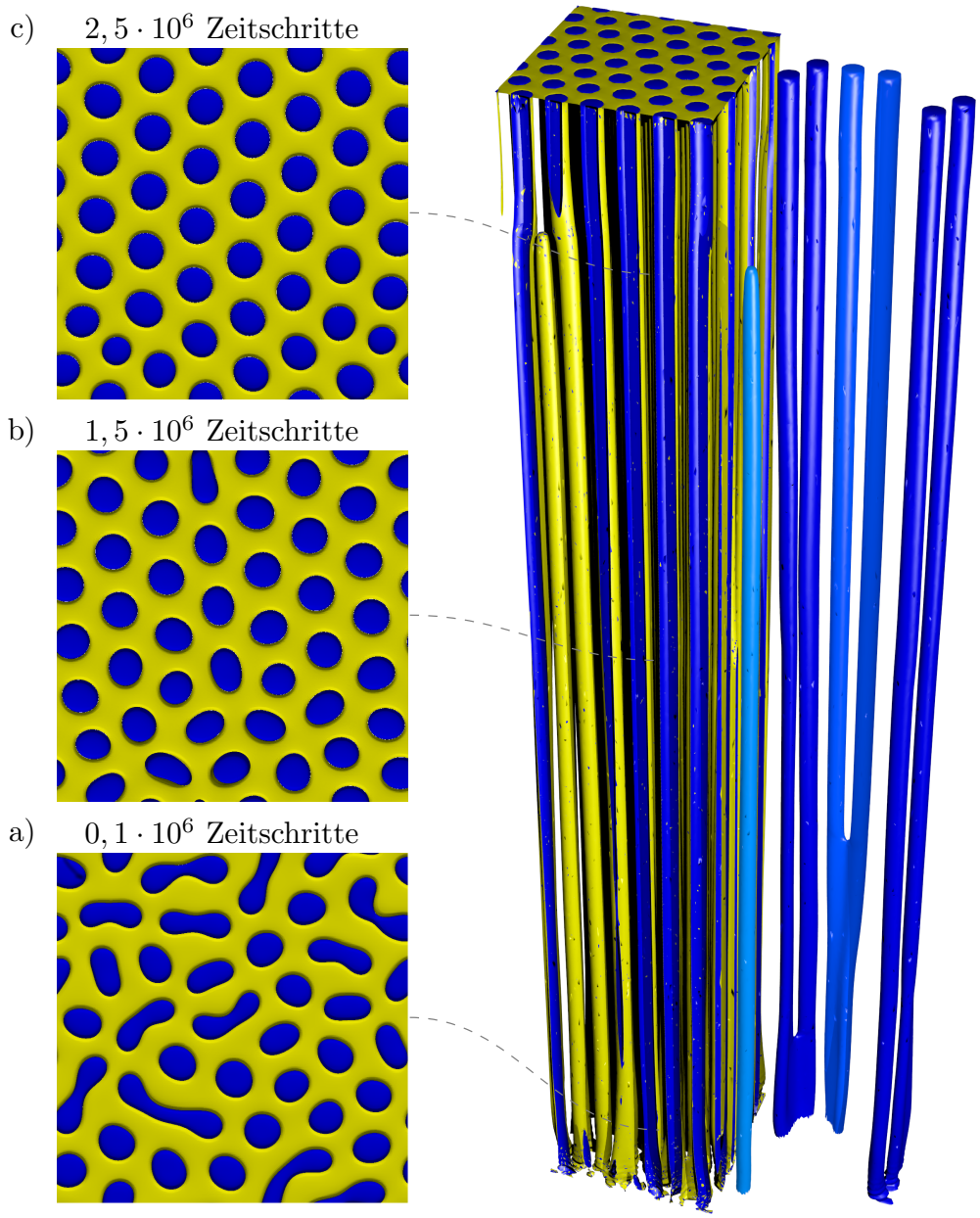


Abbildung 5.7: Phasenfeldsimulationen des gerichtet erstarrten Systems NiAl-34Cr in 3D sowie die Mikrostruktur parallel zur Erstarrungsfront zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Für die Simulation wurde das Modell aus [8, 146] mit einer Grundfläche von 300×300 Zellen und einer Höhe von 280 des *moving window* verwendet, das mit 1575 Rechenkernen auf der Hazel Hen berechnet wurde. Für die Simulationsparameter wurden die Werte aus [313] und einer Erstarrungsgeschwindigkeit von $500^{mm}/_{h}$ verwendet.

werden die Muster vor und nach der Löslichkeitsänderung simuliert und quantitativ mit experimentellen Schliffbildern verglichen. Zur Simulation der bis zu 2 420 × 2 420 × 1 474 Zellen großen Gebiete wurden bis zu 84 700 Rechenkerne für 7 Stunden auf dem Hazel Hen Supercomputer genutzt. In diesen großskaligen Simulationen werden viele Merkmale in der Mikrostruktur, die auch in Experimenten gefunden werden, beobachtet. Zudem werden verschiedene Ereignisse wie das Aufteilen, das Zusammenwachsen und das Absterben von Fasern während der Erstarrung beobachtet. In Steinmetz et al. [316] wird der Einfluss der Zusammensetzung der Konzentrationen in der Schmelze im Bereich von ±1% um den ternären eutektischen Punkt von Al-Ag-Cu auf die entstehenden Muster untersucht. Hierbei wird bereits für kleine Abweichungen der Zusammensetzung eine Änderung der Muster beobachtet, wodurch sich die Form und die Vernetzung der einzelnen Phasen ändert. Hötzer et al. [137] führen großskalige Phasenfeldsimulationen auf Basis der Instabilität des gekippten Wachstums durch, um die experimentelle Vermutung von Spiralwachstum während der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung in Al-Ag-Cu von Genau et al. [227] zu bestätigen. In den Simulationen werden mehrere Helizes innerhalb der Martixphase beobachtet. Auf Basis einer Hauptachsenanalyse (PCA) von Zweipunktkorrelationen der Mikrostrukturen zeigen Steinmetz et al. [3] eine gute quantitative Übereinstimmung der Simulationsergebnisse von [8] mit experimentellen Mikrostrukturen des Systems Al-Ag-Cu. Zudem wird quantitativ die Notwendigkeit von großskaligen Simulationen für statistische Volumenelemente gezeigt. Yabansu et al. zeigen in [317] die Rekonstruktion von Zweipunktkorrelationen aus dem PCA-Raum. Ein Vergleich der Unterkühlungen bei der Simulation von hexagonalen Strukturen durch systematische Änderung der Gebietsgrößen mit der Jackson-Hunt-Theorie wird in Steinmetz [4] gezeigt. In großskaligen Simulationen werden in der Mikrostruktur zudem aufgrund der definierten hexagonalen Phasenanordnung verschiedene ausgerichtete Regionen beobachtet, die bisher nicht in kleineren Simulationsgebieten gefunden wurden.

5.3 Zellwachstum und eutektische Kolonien

Neben dem Wachstum von dendritischen und eutektischen Strukturen können bei der Erstarrung von mehrkomponentigen Systemen zelluläre Strukturen und eutektische Kolonien beobachtet werden. Diese Strukturen entstehen durch eine Abweichung von der eutektischen Konzentration in der Zusammensetzung der Schmelze oder durch Verunreinigungen und werden im weiteren basierend auf [1] beschrieben.

Solche Verunreinigungen können durch eine Anreicherung der Schmelze an der Erstarrungsfront mit einer nicht erstarrenden Komponente entstehen. Die hierdurch entstehenden Störungen können dabei zum Wachstum von Zellenstrukturen und Kolonien führen. In [212–214, 318] stellen Mullins und Sekerka für eine sinusförmige Störung an der Erstarrungsfront eine Theorie zur Beschreibung der Stabilität der Front vor, abhängig von der Frequenz und der Amplitude. Akamatsu und Faivre [319] zeigen in Dünnschichtexperimenten verschiedene Instabilitäten bei der gerichteten Erstarrung des ternären Systems CBr_4-C_2-Cl_6. Für dendritenartige Strukturen ist dies experimentell in [320–322] zu sehen.

Ein gute Übereinstimmung von Zellwachstum bei der gerichteten Erstarrung der binären Legierung SCN-C152 mit Experimenten und 2D-Phasenfeldsimulationen auf Basis des Modells aus [71] wird von Losert et al. [323] gezeigt. Zur Simulation von Zellstrukturen nutzen Lan und Chang [324] einen effizienten Löser mit einem *adaptive Mesh*-Algorithmus für das binäre System Ni-Cu. Für verschiedenen Erstarrungsgeschwindigkeiten mit und ohne Temperaturgradient zeigen Lan und Chang [324] die Übereinstimmung mit den Simulationen aus [187]. Eine gute Übereinstimmung von Langzeitsimulationen in 2D nahe dem Beginn für Instabilitäten für SCN-Aceton und der Mullins-Sekerka-Theorie werden von Lan et al. [325] gezeigt. Auf Basis des Phasenfeldmodells aus [326] zeigen Lan et al. [327] quantitativ den Übergang von planarem Wachstum zu zellulärem Wachstum mit tiefen Zellen für das System SCN-Aceton. Der Einfluss von Strömung auf das zellulare Wachstum bei der gerichteten Erstarrung wird von Lan et al. [328] analysiert. Schulz [147] führt an einphasigen Wachstumsfronten von Aluminium-Silizium-Legierungen Stabilitäts-Analysen mit der Phasenfeldmethode durch, für die er eine gute Übereinstimmung mit der Mullins-Sekerka-Theorie

findet. Die Stabilität der Erstarrungsfront, entsprechend der Mullins-Sekerka-Theorie bei unterschiedlichen Zusammensetzungen der Schmelze und der Diffusionskonstanten, werden von Lahiri und Choudhury [329] mit dem Phasenfeldmodell aus [146] untersucht.

Für Systeme mit mehr als zwei Phasen können eutektische Kolonien als Kombination aus Zellwachstum und eutektischem Wachstum entstehen, wie experimentell in [330, 331] gezeigt. Raj und Locci [332] untersuchen experimentell an Ni-33Al-31Cr-3Mo den Übergang von planarem zu zellularem Wachstum, abhängig von der Erstarrungsgeschwindigkeit, und charakterisieren diese anhand der Form. Eine Selektionskarte für eutektisches Zellwachstum und Dendritenwachstum entlang der eutektischen Rinne für dreiphasiges und zweiphasiges Wachstum einer Ebenenfläche für das System Al-Al_2Cu-Ag_2Al wird von Himemiya [333] vorgestellt. Für die Beschreibung von binären eutektischen Kolonien nutzen Plapp und Karma in [334] eine erweitere lineare Stabilitätsanalyse von Datye und Langer [335], mit der sie ein analoges Verhalten zur Mullins-Sekerka-Theorie finden. Der Übergang zwischen eutektischem Lamellenwachstum und zellularem Wachstum mit Phasenfeldsimulationen wird von Boettinger et al. [187] untersucht. Darin wird der Zellabstand, die Zelltiefe, die Temperatur, der Radius an der Spitze und die Konzentrationsmuster als Funktion der Geschwindigkeit bestimmt. Eutektische Kolonien aufgrund von Verunreinigungen in einem ternären System werden von Plapp und Karma [186] mit einem isotropen Phasenfeldmodell untersucht. Hiermit untersuchen sie die Bildung von Kolonien in großskaligen 2D-Simulationen und zeigen eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse mit ihrer Theorie aus [334]. Eine Erweiterung des Modells aus [186] mit einer Anisotropie in der Fest-Fest- sowie der Fest-Flüssig-Grenzfläche wird von Lahiri et al. [336] vorgestellt. Mit diesem Modell wird der Einfluss der Wachstumsfront in Mehrphasenlegierungen untersucht, bei dem sich ein definierter Zellabstand einstellt, was für isotrope Systeme bisher noch nicht beobachtet wurde. Lahiri et al. [337] untersuchen den Einfluss der Erstarrungsgeschwindigkeit und der Stärke der Anisotropie in 2D- und 3D-Phasenfeldsimulationen.

Akamatsu et al. untersuchen in [338] eine spezielle räumliche Anordnung in eutektischen Kolonien, in der zwei Phasen umeinander rotieren und dabei eine kegelförmige Spirale bilden; einen sogenannten Spiraldendriten. Simulationen mit der PFM zum Wachstum von Spiraldendriten werden von Pusztai et al. [339] und Ratkai et al. [340] durchgeführt.

5.4 Weitere Aspekte zur Simulation von Erstarrungsprozessen

Zur weiteren Untersuchung des Erstarrungsprozesses mit der Phasenfeldmethode werden im Folgenden basierend auf [1] weitere relevante Aspekte aufgezeigt. Zuerst wird auf Modellerweiterungen zur Simulation von realen Systemen eingegangen. Zur effizienten Simulation der Modelle werden anschließend Optimierungen auf verschiedenen Ebenen vorgestellt.

Zur Simulation vieler technischer Legierungen werden Multikomponentensysteme mit mehr als drei Komponenten benötigt. Erste quaternäre Phasenfeldsimulationen in 1D für das System Ni-Al-Co-Cr-Ti mit dem Multikomponenten-Multiphasenmodell aus [54, 61] sind in [83] gezeigt. In [91] wird das freie Erstarren von Mg-Al-Mn-Zn-Dendriten in 2D-Simulationen mit zufällig verteilten Keimen untersucht. Verschiedene Keimbildungsmechanismen während der Erstarrung in Phasenfeldsimulationen werden in [27, 91, 118, 119, 141, 304, 341–346] vorgestellt. Verschiedene Ansätze zur Keimbildung in der PFM werden in [347] vorgeschlagen. Keime können zufällig oder abhängig von einem Kriterium wie der lokalen Temperatur oder der Konzentration gesetzt werden. Es können auch zufällige Störungen in die Simulationsfelder oder in die diffuse Grenzschicht eingebracht werden.

Aufgrund von unterschiedlichen Dichten der Elemente, oder durch den Gießprozess, kann es zu einer Konvektion während der Erstarrung kommen. Zweidimensionale Phasenfeldsimulationen zur Untersuchung des Einflusses von Konvektion auf die Mikrostrukturentwicklung während des Dendritenwachstums sind

in [326, 348–350] gezeigt. Dreidimensionale Untersuchungen mit Phasenfeldsimulationen sind in [351] dargestellt. Erste Phasenfeldsimulationen zum Dendritenwachstum in einer Strömung stammen von Beckermann et al. [326]. Das Wachstum von Dendriten als Starrkörper in einer Scherströmung wird von Rojas et al. [349] untersucht. Das Modell aus [349] wird von Takaki et al. in [350] um Gravitation erweitert. Sakane et al. [352] zeigen mit einem Lattice-Boltzmann-Phasenfeldmodell dreidimensionales Dendritenwachstum in einer Strömung mit einem Löser für GPUs. Der Einfluss von Strömung auf die gerichtete Erstarrung wird in [328, 353] gezeigt.

Zur effizienten Simulation von Erstarrungsprozessen in großen Gebieten wurden Optimierungstechniken auf verschiedenen Ebenen entwickelt. Zudem führen die Erweiterungen zur Beschreibung zusätzlicher physikalischer Einflüsse als auch das Überbrücken von verschiedenen Längen- und Zeitskalen zu einem hohen Rechenaufwand. Des Weiteren werden Optimierungstechniken auf unterschiedlichen Ebenen wie den Parametern, dem Modell, der Numerik, den Algorithmen, der Parallelisierung und der Vektorisierung vorgestellt [1].

Berghoff et al. zeigen in [161] das Wachstum eines 1 μm großen Dendriten, beginnend mit einem 50 Å großen Keim. Beginnend mit dem Keim aus einer Molekulardynamik (MD)-Simulation, wird hierzu das Dendritenwachstum mit dem Phasenfeldmodell aus [66] gezeigt. Hierbei wird das Simulationsgebiet durch Ausnutzen der Symmetrie des Dendriten mit Hilfe von Hill-Tetraedern um den Faktor 96 reduziert. Zudem wird das Simulationsgebiet mehrfach skaliert, um den einzelnen Dendriten über mehrere Größenordnungen hinweg mit der PFM zu berechnen.

Modelloptimierungen zur Reduzierung der rechenintensiven Grenzflächenbreite werden von Karma et al. [71, 72] vorgestellt. Zur Simulation von vielen Phasen stellen Kim et al. [73] ein effizientes Verfahren zur lokalen Reduzierung der benötigten Phasenfelder vor. Hierbei zeigen sie, dass für realistische Simulationen die Anzahl an Phasenfeldern in jeder Zelle auf fünf in 2D und sechs in 3D reduziert wird. Hierdurch kann sowohl die Anzahl der Felder im Arbeitsspeicher und auf der Festplatte als auch die Anzahl an zu lösenden Gleichungen von N auf fünf bzw. sechs pro Zelle reduziert werden.

Durch Ausnutzen der verschiedenen Zeitskalen der Massendiffusion zwischen fest und flüssig ist es möglich, eine *Moving-Window*-Technik zu nutzen, bei der nur die Erstarrungsfront simuliert wird [8, 35, 186]. Diese erlaubt es, die Gebietsgröße wie auch den Rechenaufwand deutlich zu reduzieren. Durch Ausnutzen der verschiedenen Zeitskalen zwischen Massendiffusion und Temperaturdiffusion kann für die gerichtete Erstarrung ein *Frozen-Temperature*-Ansatz [8, 187, 188] genutzt werden. Hierbei wird die Temperatur analytisch beschrieben, was die benötigte Rechenzeit deutlich reduziert und zudem eine größere Zeitschrittweite erlaubt. Zudem werden die Energieskalen der Parameter angepasst, um eine höhere Wachstumsrate pro Simualtionszeitschritt zu erreichen. Zur weiteren Erhöhung der numerischen Zeitschrittweite, neben dem allgemein verwendeten expliziten Euler-Schema für die Zeitdiskretisierung, werden in [354–361] implizite Verfahren für zweidimensionales Wachstum und in [362] implizite Verfahren für dreidimensionales dendritisches Wachstum verwendet. Semi-implizite Ansätze werden von Vanherpe et al. [363], wie auch von Kornhuber und Krause [364] vorgeschlagen.

Adaptive mesh refinement (AMR)-Techniken werden in [46, 365, 366] für dendritisches Wachstum, in [324, 367] für Zellwachstum und in [272] für das Wachstum von Lamellenstrukturen verwendet, um lokal die Auflösung in Regionen mit steilen Gradienten dynamisch zu ändern. Ein Überblick über die verschiedenen dynamischen AMR-Algorithmen ist von Provatas et al. in [120] zusammengefasst.

Zur Parallelisierung der numerischen Berechnungen werden häufig Gebietszerlegungstechniken, *domain decomposition*, verwendet, um sowohl die Daten als auch den Rechenaufwand zu verteilen. Auf Basis der *Shared-Memory*-Parallelisierung wird der Rechenaufwand nur auf mehrere Rechenkerne verteilt; jedoch hängt die maximale Gebietsgröße vom Arbeitsspeicher des jeweiligen Rechners ab. Altenfeld et al. [368] zeigen einen solchen Ansatz auf Basis des Open Multi-Processing (OpenMP) Standards. Für die Verteilung von Daten sowie der Berechnung über mehrere Rechner hinweg hat sich in den letzten Jahrzenten die *Distributed-Memory*-Parallelisierung auf Basis des Message Passing Interface (MPI) durchgesetzt. Hierbei werden die Randschichten, auch *ghost layers* genannt, über einen festgelegten Nachrichtenaustausch zwischen den benachbarten Teilgebieten entsprechend der jeweiligen Diskretisierung nach jedem Zeitschritt

ausgetauscht. Verschiedene Anwendungen des MPI für den Randaustausch werden in [36, 47, 50, 138, 160, 161, 360, 369] vorgestellt. Zur Reduzierung der benötigten Rechenzeit werden seit einigen Jahren vermehrt Beschleunigerkarten wie GPUs und Xeon Phis verwendet. Die Anpassung von Phasenfeldlösern auf GPUs wird in [47, 50, 369] gezeigt. Ein gemischter Ansatz aus *Shared-* und *Distributed-Memory*-Parallelisierung mit OpenMP und MPI wird in [66, 345, 360] verwendet. Eine weitere Beschleunigung der Berechnungen kann durch das Vektorisieren der Gleichungen erreicht werden. Hierdurch kann die Rechenzeit um einen Faktor entsprechend der Vektorlänge reduziert werden. Einer der ersten vektorisierten Phasenfeldlöser wurde 1993 von Wheeler et al. [29] beschrieben, mit dem eine Leistung von 200 MFLOPS auf einer einzelnen CPU erreicht wurde. Durch das explizite Vektorisieren des Phasenfeldmodells sowie durch systematische *Node-Level-Performance-Engineering*-Techniken erreichen Bauer et al. [138] 2015 eine Peakleistung von 25% auf einem einzelnen Knoten des SuperMUC Supercomputers, was 86,4 GFLOPS entspricht.

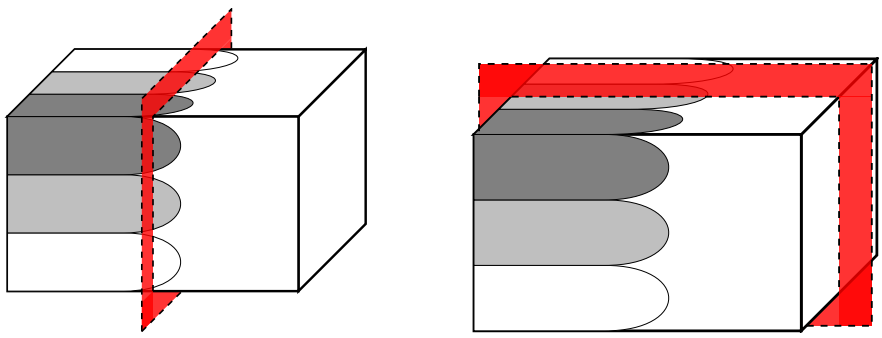
Weitere Optimierungen wie das Klassifizieren einzelner Zellen im Gebiet und das Puffern von mehrfach benötigten Werten wie Gradienten und versetzt angeordneten Gitterwerten wird in [138] gezeigt. Im Jahr 2008 werden von Eiken [45, 52] verschiedene Optimierungstechniken zur Simulation eines $714 \times 714 \times 990$ Zellen großen Gebiets verwendet, bei denen dreidimensionale Dendriten auf einer einzelnen CPU genutzt werden.

6

Gerichtete ternäre eutektische Erstarrung

Ein verbessertes Verständnis der Musterbildung in der Mikrostruktur bei der gerichteten eutektischen Erstarrung von Legierungen ist von wissenschaftlichem und wirtschaftlichem Interesse, da die Muster in der Mikrostruktur einen direkten Einfluss auf die späteren Eigenschaften das Bauteils haben. Zudem erfordern heutige Anwendungen Materialien mit genau definierten Eigenschaften. Zur Entwicklung dieser Materialien ist ein detailliertes Wissen des Herstellungsprozesses notwendig. Mehrkomponentige Legierungen erlauben es dabei, die positiven Eigenschaften der verschiedenen chemischen Elemente für neue Materialien zu verknüpfen und über die vielfältigen Anordnungen der Phasen gezielt Mikrostrukturen zu erzeugen [207–209].

Experimentell werden bei der gerichteten Erstarrung meistens zwei Arten von Schliffbildern unterschieden: die Mikrostruktur quer und parallel zur Erstarrungsfront, wie in Abbildung 6.1 dargestellt. Hierbei bildet sich vor allem quer zur Erstarrungsfront eine Vielzahl an Mustern in der Mikrostruktur aus. Für die gerichtete eutektische Erstarrung einer dreikomponentigen ternären Legierung werden, wie in Abbildung 5.6 auf Basis der Arbeiten [253, 254] dargestellt, fünf theoretische Muster parallel zur Erstarrungsfront vorhergesagt. Experimentell werden weitere Muster bei der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung von Al-Ag-Cu, die aus Kombinationen der theoretischen Muster bestehen, beobachtet [227–230, 296]. In Dennstedt et al. [296] werden mehrere Muster abhängig von der Erstarrungsgeschwindigkeit und dem Temperaturgradienten beobachtet, die in den Kategorien „Leiterstrukturen“, „Kettenmuster“, „ungeordnete Strukturen“, „Tatzenmuster“, „Kreuzmuster“ und „unregelmäßige Strukturen“ klassifiziert werden. In Leiterstrukturen



(a) Querschnitt parallel zur Erstarrungsfront **(b)** Querschnitt entlang der Wachstumsrichtung

Abbildung 6.1: Experimentell und simulativ betrachtete Querschnitte in der Mikrostruktur.

ordnen sich Ag_2Al-Fasern abwechselnd mit Al_2Cu-Fasern, eingebettet von der Al-Phase, in eine vorgegebene Richtung an. Bei den Kettenmustern ist die Richtung der sich abwechselnden Fasern unterschiedlich, die Ketten können sich aufteilen und sie können einen Anfang bzw. ein Ende besitzen. Bei Tatzenmustern bilden sich in regelmäßigen Abständen Ag_2Al-Fasern an der Grenzschicht zwischen der Al-Phase und der Al_2Cu-Phase. Unterschiedliche Muster innerhalb eines Schliffbildes werden in Steinmetz et al. [316] gezeigt. Muster entlang der Erstarrungsrichtung, wie in Abbildung 6.1(b), sind in Genau und Ratke [227] dargestellt. Dreidimensionale Rekonstruktionen der gesamten Mikrostruktur werden von Dennstedt et al. [231] mit Hilfe von Synchrotronstrahlung für Al-Ag-Cu und in Contieri et al. [370] durch Abtragen von dünnen Schichten für Nb-Al-Ni gezeigt. Zhou und Froyen [371] zeigen dreidimensionale Rekonstruktionen des quaternären Systems Al-Cu-Ag-Mg. Dabei sind während der Erstarrung unterschiedliche Ereignisse wie die Bildung einer neuen Faser, das Aufteilen, das Zusammenwachsen sowie das Überwachsen einer Faser zu sehen [231].

Zur simulativen Untersuchung der Musterbildung, abhängig von den Material- sowie Prozessparametern, hat sich die Phasenfeldmethode etabliert, wie in Abschnitt 5.2.2 beschrieben. Zur Verbesserung des Verständnisses der Musterbildung bei der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung von Legierungen werden im Folgenden die Simulationsergebnisse der Musterbildung sowie deren Auswertungen beschrieben. Hierzu wird das thermodynamisch konsistente Phasenfeldmodell aus Abschnitt 3.5 verwendet. Für die Simulationen sind großskalige und statistisch repräsentative Gebiete notwendig, wie in [3] gezeigt. Zur effizienten Berechnung wird der optimierte Phasenfeldlöser aus Kapitel 4 auf Basis des waLBerla-Frameworks eingesetzt.

Im ersten Teil wird kurz auf das Modell sowie auf den Simulationsaufbau und auf das entwickelte Werkzeug zur Analyse der dreidimensionalen Mikrostruktur eingegangen. Danach wird das gekippte Wachstum der Lamellen in ternären eutektischen Systemen untersucht, welches als Mechanismus für das anschließend gezeigte Spiralwachstum genutzt wird. Spiralwachstum der Fasern wird von Genau und Ratke [227] anhand von Mustern in ternären eutektischen gerichtet erstarrten, experimentellen Schliffbildern von Al-Ag-Cu entlang der Erstarrungsrichtung vermutet. Aufbauend hierauf wird die Musterbildung in Al-Ag-Cu direkt nach der Erstarrung, was den Mustern in Abschreckexperimenten entspricht, sowie bei langsam abgekühlten Proben betrachtet. Anschließend wird der Einfluss von Geschwindigkeitswechseln im Temperaturgradienten auf den Umordnungsprozess der Faser analysiert.

Die gezeigten experimentellen Schliffbilder stammen von A. Genau von der University of Alabama at Birmingham (UAB) sowie A. Dennstedt vom Deutschen Luft und Raumfahrtzentrum (DLR) in Köln, die mit den beiden Öfen aus Abbildung 5.2 in Kapitel 5 erstarrt wurden.

In diesen Kapitel werden die Festphasen als α, β und γ sowie die Schmelze als ℓ bezeichnet, die den Phasenfeldern ϕ_0, ϕ_1, ϕ_2 und ϕ_3 entsprechen. Die Farben Rot, Grün und Blau entsprechen den Phasen α, β und γ in den Schliffbildern sowie in den dreidimensionalen Darstellungen. Die Schmelze ℓ ist in Gelb dargestellt.

6.1 Phasenfeldmodell für die ternäre gerichtete Erstarrung

Die Phasenfeldmethode hat sich für die Simulation verschiedener Erstarrungsprozesse, wie in Kapitel 5 beschrieben, etabliert. Für die Simulation der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung in diesem Kapitel wird das thermodynamisch konsistente Phasenfeldmodell aus Abschnitt 3.5 auf Basis des Großkanonischen Potentialansatzes verwendet [8].

Die zusammengefassten Evolutionsgleichungen für die $N = 4$-Phasenfelder $\boldsymbol{\phi}$, die $K = 3$-chemischen Potentiale $\boldsymbol{\mu}$ und den analytischen Temperaturgradienten schreiben sich:

$$\tau\epsilon\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial t} = \underbrace{-\epsilon\left(\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi},\nabla\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha} - \nabla\cdot\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi},\nabla\boldsymbol{\phi})}{\partial\nabla\phi_\alpha}\right) - \frac{1}{\epsilon}\frac{\partial\omega(\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha} - \frac{\partial\psi(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\mu},T)}{\partial\phi_\alpha}}_{:=\,\delta\Psi/\delta\phi_\alpha} - \frac{1}{N}\sum_{\beta=1}^{N}\delta\Psi/\delta\phi_\beta\,, \tag{6.1}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\boldsymbol{\mu}}{\partial t} = {} & \left[\sum_{\alpha=1}^{N} h_\alpha(\boldsymbol{\phi})\left(\frac{\partial\boldsymbol{c}_\alpha(\boldsymbol{\mu},T)}{\partial\boldsymbol{\mu}}\right)\right]^{-1}\left(\nabla\cdot\Big(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\mu},T)\nabla\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{J}_{at}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\mu},T)\Big)\right.\\ & \left. - \sum_{\alpha=1}^{N}\boldsymbol{c}_\alpha(\boldsymbol{\mu},T)\frac{\partial h_\alpha(\boldsymbol{\phi})}{\partial t} - \sum_{\alpha=1}^{N} h_\alpha(\boldsymbol{\phi})\left(\frac{\partial\boldsymbol{c}_\alpha(\boldsymbol{\mu},T)}{\partial T}\right)\frac{\partial T}{\partial t}\right),\end{aligned} \tag{6.2}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left(T_0 + G(x - vt)\right) = -Gv\,. \tag{6.3}$$

Die Terme der PDEs sind ausführlich in Abschnitt 3.5 hergeleitet sowie die Optimierung und Parallelisierung des Modells in Kapitel 4 betrachtet.

Aufgrund des um mehrere Größenordnungen höheren Diffusionskoeffizienten der Temperatur, im Vergleich zu der in der Simulation betrachteten Diffusion in den Konzentrationen, wird ein analytischer Temperaturgradient G mit der Geschwindigkeit v in die Wachstumsrichtung x verwendet. T_0 ermöglicht es, den Temperaturgradienten initial im Gebiet zu platzieren. Dieser häufig verwendete Ansatz, der als *Frozen-Temperature*-Ansatz bezeichnet wird, wird bereits in den früheren Arbeiten [27, 187] zur Steuerung der gerichteten Erstarrung verwendet.

Das Phasenfeldmodell wurde für die Simulation der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung in [4, 165] validiert. Ein Vergleich von kleineren 2D-Simulationen mit dem analytischen Jackson-Hunt-Ansatz [215] wird in Steinmetz et al. [4] durchgeführt. Dabei wird eine gute Übereinstimmung für die in den Simulationen gemessene Unterkühlung mit den aus dem Jackson-Hunt-Ansatz berechneten Unterkühlungen, abhängig von Lamellenabstand und der Erstarrungsgeschwindigkeit, gefunden. In Choudhury [165] wird für das Modell eine Konvergenzstudie der Erstarrungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit der Grenzflächenbreite gezeigt.

6.2 Simulationsaufbau

Im Folgenden ist der allgemeine Simulationsaufbau nach [8, 66, 146] für die ternäre eutektische Erstarrung erläutert. In Abbildung 6.2 ist der Simulationsaufbau für die Erstarrung der drei Festphasen bei der ternären eutektischen Temperatur T_E sowie das aufgeprägte Temperaturprofil und die verwendete Randbedingung in 2D dargestellt. Für die Simulation der gerichteten Erstarrung einer Schmelze wird wie in den Experimenten von [227, 372, 373] ein aufgeprägter Temperaturgradient G mit einer vorgegebenen Richtung und einer vorgegebenen Geschwindigkeit v genutzt. Der Lamellenabstand λ beschreibt die Breite einer sich wiederholenden Phasenanordnung.

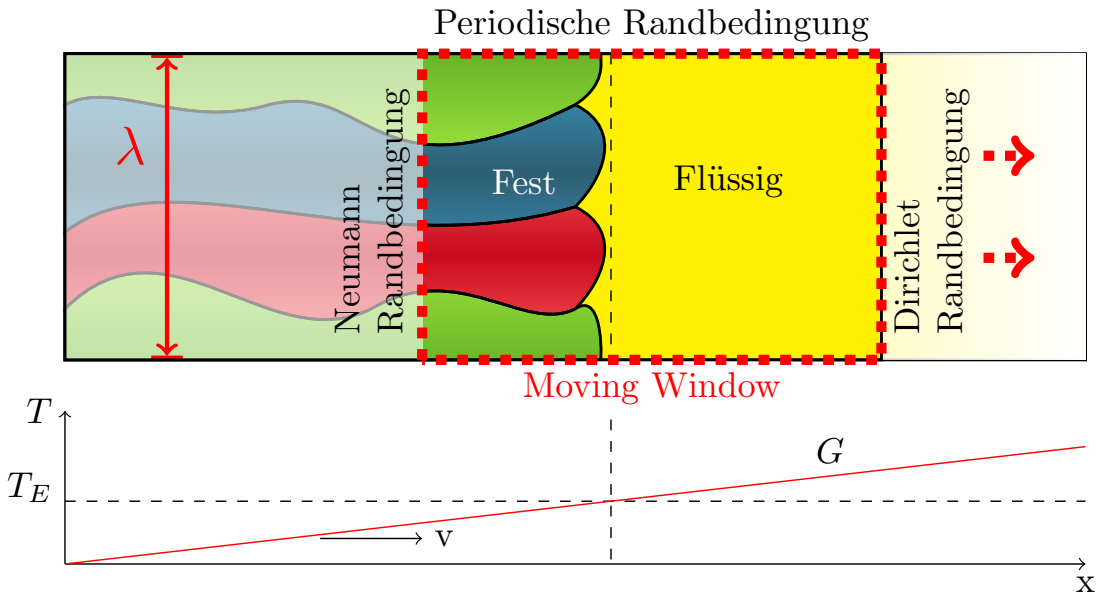


Abbildung 6.2: Simulationsaufbau für die ternäre eutektische gerichtete Erstarrung mit den verwendeten Randbedingungen, dem aufgeprägten Temperaturprofil und dem *Moving-Window*, aufbauend auf [8, 138].

Als Startbedingung für die Simulation wird das Gebiet mit Schmelze gefüllt und am unteren Ende des Gebiets werden entgegen der Wachstumsrichtung zufällig Keime für die drei Phasen über eine Voronoi-Verteilung eingebracht. Hierbei werden die Phasenanteile, wie sie sich aus dem Phasendiagramm ableiten, in der Voronoi-Verteilung beachtet. Zudem ist es möglich, gezielt Bereiche mit Festphasen zu setzen, um eine definierte Start-Mikrostruktur zu erzeugen. Am bereits erstarrten Ende des Gebiets wird eine Neumann-Randbedingung mit einem Gradienten von null genutzt, da die Diffusion in den Festphasen, verglichen mit der Diffusion in der Schmelze, um mehrere Größenordnungen kleiner ist und deshalb die Festphasendiffusion vernachlässigt wird. Zur Beschreibung eines unendlich großen Gebiets an Schmelze wird in Erstarrungsrichtung eine Dirichlet-Randbedingung mit der Konzentration des ternären eutektischen Punktes genutzt. Parallel zur Erstarrungsrichtung werden periodische Randbedingungen verwendet, um eine unendlich große Erstarrungsfront zu simulieren. Unter der Annahme einer gerichteten Erstarrung in eine unendliche Schmelze und der Vernachlässigung der Festphasendiffusion ist es möglich, nur die Region um die Erstarrungsfront zu simulieren, wie durch die rot gestrichelte Box in Abbildung 6.2 dargestellt. Diese Box, *Moving-Window*, wird entsprechend der sich bewegenden Erstarrungsfront mit bewegt. Hierdurch lässt sich der benötigte Rechenaufwand deutlich reduzieren. Die Umsetzung der *Moving-Window*-Technik ist in Kapitel 4 beschrieben.

6.3 Analysewerkzeuge

Zur Analyse der dreidimensionalen Mikrostruktur mit etablierten Methoden (Nächste-Nachbarn-Statistiken, Schwerpunkt, Umfang, Fläche, Formfaktoren, minimaler und maximaler Radius der Fasern) wie auch neuen Methoden (Graphenanalyse, Hauptachsenanalyse) wird ein erweiterbares Werkzeug entwickelt. Für die Auswertung der Mikrostruktur können drei Klassen unterschieden werden: (i) die Analyse einzelner Fasern, (ii) die Analyse einer Ebene und (iii) die Analyse der dreidimensionalen Struktur der Fasern. Hierzu wird im Folgenden der Algorithmus vorgestellt, auf dessen Basis die Auswertung mit allen drei Klassen möglich ist.

Durch die vom Temperaturgradienten vorgegebene Wachstumsrichtung der Mikrostruktur können die Fa-

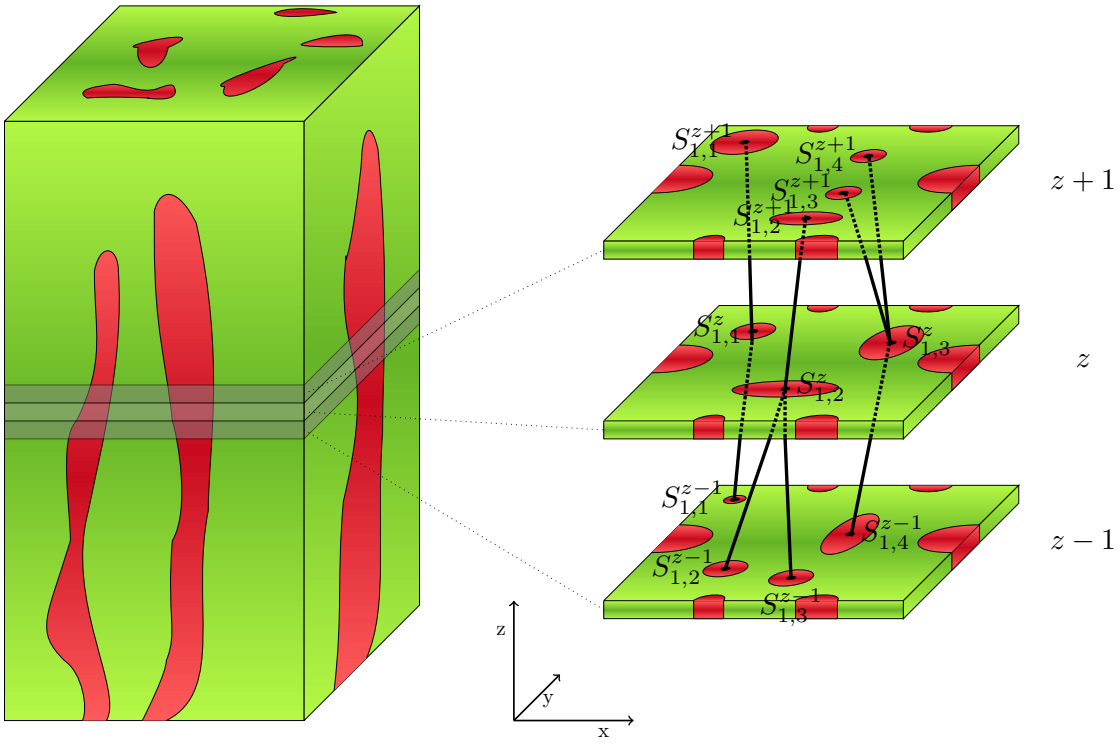


Abbildung 6.3: Schematische Darstellung der Generierung des Graphen für eine Phase einer gerichtet erstarrten Simulation

sern als Graph dargestellt werden. Der Graph wird dabei entlang der Wachstumsrichtung über die Schwerpunkte der sich aufteilenden, überwachsenden und zusammenwachsenden Fasern aufgebaut. Dies ist schematisch in Abbildung 6.3 dargestellt. Zur Erzeugung des Graphen wird basierend auf [137] das Gebiet Ω entlang der Wachstumsrichtung z mit dem Einheitsvekotor $\boldsymbol{e}_3$ in Ebenen $\mathbf{S}^z := \{\boldsymbol{x} \in \Omega \,|\, \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_3 = z\}$ zerlegt. Die Fasern einer bestimmten Phase in einer Ebene sind definiert als $\mathbf{S}^z_\alpha := \Omega_\alpha \cap \mathbf{S}^z$. Die Zusammenhangskomponenten der einzelnen Fasern $\mathbf{S}^z_{\alpha,i} \subset \mathbf{S}^z_\alpha$ bilden eine disjunkte Vereinigung $\mathbf{S}^z_\alpha := \biguplus_i \mathbf{S}^z_{\alpha,i}$, wobei i die Bezeichnung der Zusammenhangskomponente bzw. Faser ist. Die Zusammenhangskomponenten werden mit dem Algorithmus aus Abschnitt 4.5 bestimmt. Für den Aufbau des Graphen werden für die Zusammenhangskomponenten in jeder Ebene $\mathbf{S}^z_{\alpha,i}$ die Schwerpunkte bestimmt. Der Schwerpunkt für eine diskrete Menge an den Punkten $\boldsymbol{M}$ mit der Mächtigkeit $|\boldsymbol{M}|$ ist definiert als

$$BC(\boldsymbol{M}) := \frac{1}{|\boldsymbol{M}|} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{M}} \boldsymbol{x}\,. \tag{6.4}$$

Um die Schwerpunkte der sich periodisch fortsetzenden Fasern in einer Ebene korrekt zu bestimmen, wird der Algorithmus von Bai und Breen [374] verwendet. Die Punkte der Zusammenhangskomponente in kartesischen Koordinaten werden hierzu für jede Dimension auf einen Kreis projiziert und dort der Schwerpunkt bestimmt. Anschließend wird der Schwerpunkt in kartesische Koordinaten zurückprojiziert. Die Menge der Punkte $\mathbf{S}^z_{\alpha,i}$ wird hierzu über die größte Gebietskoordinate $\boldsymbol{x}_{\max} = \max(\Omega)$ und den Einheitsvektor $\boldsymbol{e}_j$ des kartesischen Koordinatensystems normiert

$$\hat{\mathbf{S}}^z_{\alpha,i} := \left\{ \left(\frac{\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_1}{\boldsymbol{x}_{\max} \cdot \boldsymbol{e}_1}, \frac{\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_2}{\boldsymbol{x}_{\max} \cdot \boldsymbol{e}_2}, \frac{\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_3}{\boldsymbol{x}_{\max} \cdot \boldsymbol{e}_3} \right)^T \,\middle|\, \boldsymbol{x} \in \mathbf{S}^z_{\alpha,i} \right\}, \tag{6.5}$$

sodass $\hat{\mathbf{S}}^z_{\alpha,i} \subset [0,1]^d$. Die normierten Punkte einer Zusammenhangskomponente werden auf eine Linie in

Raumrichtung j verschoben und mit

$$\boldsymbol{K}_1^j = \{\cos(2\pi x_j) \mid x_j := \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_j \,,\ \boldsymbol{x} \in \hat{\mathbf{S}}_{\alpha,i}^z\} \,, \tag{6.6}$$

$$\boldsymbol{K}_2^j = \{\sin(2\pi x_j) \mid x_j := \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_j \,,\ \boldsymbol{x} \in \hat{\mathbf{S}}_{\alpha,i}^z\} \tag{6.7}$$

in die beiden Mengen $\boldsymbol{K}_1$ und $\boldsymbol{K}_2$ umgerechnet. Mit (6.4) wird der Schwerpunkt

$$k_1^j = BC(\boldsymbol{K}_1^j) \,, \tag{6.8}$$

$$k_2^j = BC(\boldsymbol{K}_2^j) \tag{6.9}$$

für die beiden Mengen bestimmt. Die Schwerpunkte für die drei Raumrichtungen $j = 1$, $j = 2$ und $j = 3$ werden mit

$$\begin{aligned} \boldsymbol{bc}_{\alpha,i}^z = \Bigg(& \left(\frac{\operatorname{atan2}(-k_2^1, -k_1^1)}{2\pi} + \frac{1}{2} \right) \boldsymbol{x}_{\max} \cdot \boldsymbol{e}_1, \\ & \left(\frac{\operatorname{atan2}(-k_2^2, -k_1^2)}{2\pi} + \frac{1}{2} \right) \boldsymbol{x}_{\max} \cdot \boldsymbol{e}_2, \\ & \left(\frac{\operatorname{atan2}(-k_2^3, -k_1^3)}{2\pi} + \frac{1}{2} \right) \boldsymbol{x}_{\max} \cdot \boldsymbol{e}_3 \Bigg)^T \end{aligned} \tag{6.10}$$

zurück in den kartesischen Raum projiziert und mit $\boldsymbol{x}_{\max}$ skaliert.

Die Schwerpunkte $\boldsymbol{bc}_{\alpha,i}^z$ beschreiben damit die x- und y-Position der Faser i der Phase α in der Ebene mit der Höhe z. Für den Graphen werden die Schwerpunkte $\boldsymbol{bc}_{\alpha,i}^z$ über eine Kante mit den vorherigen Schwerpunkten $\boldsymbol{bc}_{\alpha,i}^{z-1}$ verbunden, wenn sich die beiden Mengen $\mathbf{S}_{\alpha,i}^z$ und $\mathbf{S}_{\alpha,i}^{z-1}$ berühren. Zwei Mengen berühren sich, wenn aus $\tilde{\mathbf{S}}_{\alpha,i}^z = \{(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_2, 0) \mid \boldsymbol{x} \in \mathbf{S}_{\alpha,i}^z\}$ und $\tilde{\mathbf{S}}_{\alpha,i}^{z-1} = \{(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{e}_2, 0) \mid \boldsymbol{x} \in \mathbf{S}_{\alpha,i}^{z-1}\}$ folgt, dass $\tilde{\mathbf{S}}_{\alpha,i}^z \cap \tilde{\mathbf{S}}_{\alpha,i}^{z-1} \neq \varnothing$. Somit lässt sich die dreidimensionale Mikrostruktur als Graph G interpretieren, in dem die Schwerpunkte die Knoten $V = \{\boldsymbol{bc}_{\alpha,i}^z, \ldots\}$ und deren Verbindungen die Kanten E bilden.

Über den Graphen kann die dreidimensionale Struktur der Fasern mit unterschiedlichen Massen analysiert werden. Durch die Projektion der Schwerpunkte auf eine Ebene ist die Detektion und Analyse von Spiralen, wie in Abschnitt 6.4.2 beschrieben, möglich. Durch Erzeugen eines gerichteten Graphen, mit Hilfe der Höheninformation, können die Ereignisse während des Wachstums mit $v \in V$ über den Grad $d(v)$ der Knoten beobachtet werden. Dabei kann zusätzlich in einem gerichteten Graphen zwischen d^- für die Anzahl der eingehenden und d^+ für die Anzahl der ausgehenden Kanten unterschieden werden.

Ein Ausgangsgrad von $d^+(G) = 0$ steht für das Ereignis des Überwachsens einer Faser, was in dieser Arbeit mit dem Symbol ✝ gekennzeichnet ist. Ein Eingangsgrad von $d^-(G) \geq 2$ steht für das Zusammenwachsen ➽ von mehreren Fasern und ein Ausgangsgrad von $d^+(G) \geq 2$ für das Aufteilen ➷ einer Faser. Ein Grad von $d^+(G) = d^-(G) = 1$ repräsentiert ein Faserstück ▮. Nukleation ●, wie sie in Experimenten beobachtet wird, ist definiert als $d^-(G) = 0$. Die Ereignisse für die entsprechenden Ein- und Ausgangsgrade sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst. In Abbildung 6.4 sind die Ereignisse beispielhaft für eine simulierte Faser mit dem entsprechenden minimalen Graphen dargestellt. Ein Strang der Faser wird, wie in der Vergrößerung gezeigt, überwachsen und der andere Strang teilt sich zweimal auf und wächst danach wieder zusammen. Mit dieser Methode lassen sich die Ereignisse über die Wachstumshöhe, wie in den Abschnitten 6.4.3 und 6.4.4 gezeigt, betrachten.

Für die Analyse der einzelnen Fasern wird die Fläche mit $A = |\mathbf{S}_{\alpha,i}^z|$ bestimmt. Über den Schwerpunkt und die Zusammenhangskomponente wird mit

$$r_{\min} = \min \left\{ \left\| \boldsymbol{bc}_{\alpha,i}^z - \boldsymbol{x} \right\| \;\middle|\; \boldsymbol{x} \in \partial S_{\alpha,i}^z \right\}, \tag{6.11}$$

$$r_{\max} = \max \left\{ \left\| \boldsymbol{bc}_{\alpha,i}^z - \boldsymbol{x} \right\| \;\middle|\; \boldsymbol{x} \in \partial S_{\alpha,i}^z \right\}, \tag{6.12}$$

Tabelle 6.1: Ereignisse der Fasern bei der Erstarrung sowie ihr Ein- ($d^-(G)$) und Ausgangsgrad ($d^+(G)$) bei der Repräsentation der Struktur als gerichteter Graph.

$d^-(G)$ \ $d^+(G)$	0	1	≥ 2
0	-	Nukleation ●	-
1	Überwachsen ✚	normales Wachstum ▮	Aufteilen ◀
≥ 2	-	Zusammenwachsen ▶	-

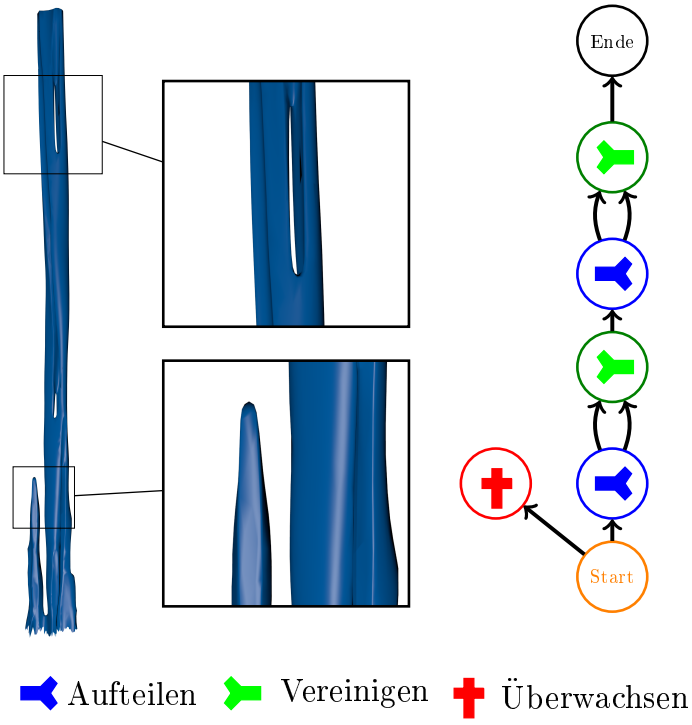


Abbildung 6.4: Ereignisse, die während der gerichteten Erstarrung in einer Faser über die Wachstumshöhe auftreten können. Links: Eine simulierte Faser mit einem überwachsenen Teil sowie einem sich aufteilenden und zusammenwachsenden Teil. Rechts: Die Faser als minimaler Graph mit den entsprechenden Ereignissen.

der minimale und maximale Radius der Faser in einer Ebene in euklidischer Norm berechnet, wobei $\partial S^z_{\alpha,i}$ den Rand der Zusammenhangskomponente beschreibt. Zur Klassifikation der Morphologie werden für die einzelnen Fasern die Formfaktoren nach [229] und die Invarianten der Trägheitstensoren nach [375, 376] bestimmt.

Innerhalb einer Ebene können unter Verwendung aller Zusammenhangskomponenten die Nächste-Nachbarn-Statistiken bestimmt werden, wie sie in den Abschnitten 6.4.3 und 6.4.4 verwendet werden. Mit Hilfe der Hauptachsenanalyse auf Basis einer Zweipunktkorrelation, wie in [3] gezeigt, ist ein quantitativer Vergleich der gesamten Mikrostruktur einer Ebene möglich. Ein Vergleich der Mikrostrukturen aus Phasenfeldsimulationen und Experimenten auf Basis dieser Methode ist in Abschnitt 6.4.3 gezeigt.

Die Daten aus der vorgestellten Analysemethode werden für jede Simulation in einer SQL-Datenbank gespeichert, was anschließend eine schnelle Auswertung ermöglicht. Für die Auswertung können sowohl die zellbasierten Ausgabeformate der Simulationen als auch die Oberflächennetze verwendet werden. Über das zellbasierte Format ist es zudem möglich, Stapel von experimentellen Schliffbildern zu analysieren.

6.4 Ergebnisse und Diskussion

Dieser Abschnitt stellt die simulativen Ergebnisse der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung auf Basis großskaliger Phasenfeldsimulationen dar, die nur durch den optimierten Löser aus Kapitel 4 und den Einsatz von Hochleistungsrechnern möglich sind.

In der Veröffentlichung von Genau und Ratke [227] wird auf Basis von experimentellen Schliffbildern von Al-Ag-Cu ein Hinweis für Spiralwachstum von zwei intermetallischen Fasern in der Al-Matrixphase gefunden. Diese Vermutung konnte mit Hilfe der zweidimensionalen Schliffbilder nicht eindeutig belegt werden. Hierzu wird im ersten Teil dieses Abschnitts das gekippte Wachstum von Lamellen während der gerichteten Erstarrung in 2D untersucht. Dieser Mechanismus wird als Ursache für das Wachstum von Spiralen in 3D vermutet. Zunächst wird der Einfluss verschiedener Parameter auf den Kippwinkel systematisch analysiert. Mit Hilfe dieser Erkenntnisse wird ein Parametersatz mit hoher Wahrscheinlichkeit für Spiralwachstum in 3D entwickelt. Der Abschnitt zu Spiralwachstum untersucht die Vermutung von Genau und Ratke [227] mit Hilfe von Phasenfeldsimulationen. Um die räumlich komplexe Struktur von Spiralen simulativ zu beobachten, sind großskalige Gebiete und neuartige Auswertetechniken notwendig, wie in Abschnitt 6.3 beschrieben.

Der darauffolgende Abschnitt beschreibt den Einfluss verschiedener Parameter auf die dreidimensionale Musterbildung in Al-Ag-Cu. Hierzu werden zwei Datensätze entwickelt, welche die Muster direkt nach der Erstarrung und nach dem weiteren Abkühlen bei Raumtemperatur beschreiben. Die Simulationsergebnisse werden qualitativ und quantitativ mit experimentellen Schliffbildern verglichen. Der letzte Abschnitt behandelt den Einfluss von Geschwindigkeitswechseln des aufgeprägten Temperaturgradienten während der gerichteten Erstarrung auf die Musterbildung sowie den Umordnungsprozess der Fasern. Zudem werden die Ergebnisse im Vergleich zu experimentellen Geschwindigkeitswechseln beschrieben.

6.4.1 Gekipptes Wachstum

Während der gerichteten Erstarrung von binären und ternären eutektischen Strukturen in Dünnschichtexperimenten kann eine stabile Abweichung zwischen der Wachstumsrichtung der Festphasen und der Richtung des vorgegebenen Temperaturgradienten beobachtet werden. Dieses Phänomen des gekippten Wachstums von Lamellen während der gerichteten eutektischen Erstarrung eines binären Systems wurde 1989 von Faivre et al. [377] untersucht. Theoretische Studien zu diesem Phänomen werden von Kassner et al. [258] durchgeführt. Der Einfluss der Anisotropie in der Oberflächenenergie auf den Kippwinkel in binären Systemen ist theoretisch, experimentell und simulativ in [235, 260, 263, 266, 267, 273, 378] untersucht.

Tabelle 6.2: Zusammenfassung der physikalischen Parameter mit gleichen Phasenfraktionen entsprechend [137]. Die deckungsgleichen Gibbs-Energien für das System sind über die Parameter $\Xi_\alpha, \boldsymbol{\xi}_\alpha, X_\alpha$ modelliert, die gleichmäßig um den Paraboloid der Schmelze in der Mitte des Simplex angeordnet sind.

Parameter	Simulationswert			Physikalischer Wert
$\Xi_\alpha, \boldsymbol{\xi}_\alpha, X_\alpha$	$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$,	$\begin{bmatrix} -2{,}8 \\ -2{,}0 \end{bmatrix}$,	1,04	
$\Xi_\beta, \boldsymbol{\xi}_\beta, X_\beta$	$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$,	$\begin{bmatrix} -2{,}0 \\ -2{,}8 \end{bmatrix}$,	1,04	
$\Xi_\gamma, \boldsymbol{\xi}_\gamma, X_\gamma$	$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$,	$\begin{bmatrix} -1{,}2 \\ -1{,}2 \end{bmatrix}$,	0,24	
$\Xi_\ell, \boldsymbol{\xi}_\ell, X_\ell$	$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$,	$\begin{bmatrix} -2{,}0 \\ -2{,}0 \end{bmatrix}$,	$3,\overline{3} - 2,\overline{6}T$	
$T_{\text{eutektisch}}$	1,0			773,6 K
Phasenanteile von α, β, γ	$0,\overline{3}; 0,\overline{3}; 0,\overline{3}$			$0,\overline{3}; 0,\overline{3}; 0,\overline{3}$

Neben gekipptem Wachstum in binären eutektischen Systemen haben Apel et al. [118, 277] mit Hilfe von Phasenfeldsimulationen eines ternären eutektischen Systems ein Kippen der Lamellen bei gleichen und isotropen Oberflächenenergien beobachtet. In ihrer Arbeit wird das Kippen der Lamellen durch eine unsymmetrische Verteilung der Konzentration an der Erstarrungsfront getrieben. Zudem wird der Einfluss der Festphasenanordnung untersucht, bei dem ein gekipptes Wachstum nur bei nicht spiegelsymmetrischen Anordnungen der Lamellen beobachtet wird.

In diesem Abschnitt wird das gekippte Wachstum von ternären eutektischen, gerichtet erstarrten Systemen basierend auf [137] untersucht und systematisch versucht, die Verkippung zu erhöhen. Hierzu wird ein neuer Kippmechanismus auf Basis von isotropen Oberflächenenergien vorgestellt, die jedoch für die einzelnen Grenzflächen unterschiedlich sind. Es wird vermutet, dass diese Art der Verkippung in zwei Dimensionen zu Spiralwachstum in drei Dimensionen führt, was im nachfolgenden Abschnitt 6.4.2 untersucht wird.

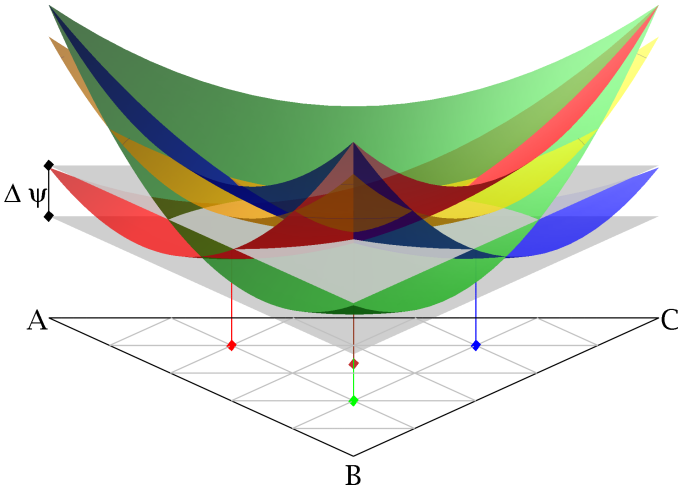
6.4.1.1 Simulationsparameter

Für die Untersuchung des gekippten Wachstums werden aufbauend auf [137] zwei ternäre eutektische Systeme genutzt, bei denen die Gibbs-Energien einmal symmetrisch und einmal unsymmetrisch angeordnet sind. Die Gibbs-Energien für die vier Phasen der beiden Systeme sind als deckungsgleiche Paraboloide entsprechend der Gleichung (3.23) konstruiert. Die drei Paraboloide der Festphasen sind symmetrisch um den im Zentrum des Simplex platzierten Paraboloid der Schmelze in die jeweilige Richtung der Simplex-Ecken angeordnet. Die Parameter für die Paraboloide des symmetrischen ternären eutektischen Systems sind in Tabelle 6.2 zusammengefasst. Im unsymmetrischen System ist die Gibbs-Energie der α-Phase entgegen der korrespondierenden Komponente A im Simplex verschoben, während das Verhältnis der Komponenten B und C gleich gehalten wird. Hierdurch wird das System in die Richtung von Al-Ag-Cu verschoben, in dem in Experimenten Spiralwachstum beobachtet wurde. Durch die Verschiebung der Gibbs-Energie der Phase α ergeben sich ungleiche Phasenanteile in den Festphasen. Die veränderten Parameter, basierend auf Tabelle 6.2, sind in Tabelle 6.3 zusammengefasst. Die Gibbs-Energien der beiden ternären eutektischen Systeme sind in Abbildung 6.5 über dem ternären Simplex der drei Komponenten A, B, und C dargestellt. Die Gibbs-Energie der Schmelze (gelb) wurde zur besseren Darstellung nach oben verschoben.

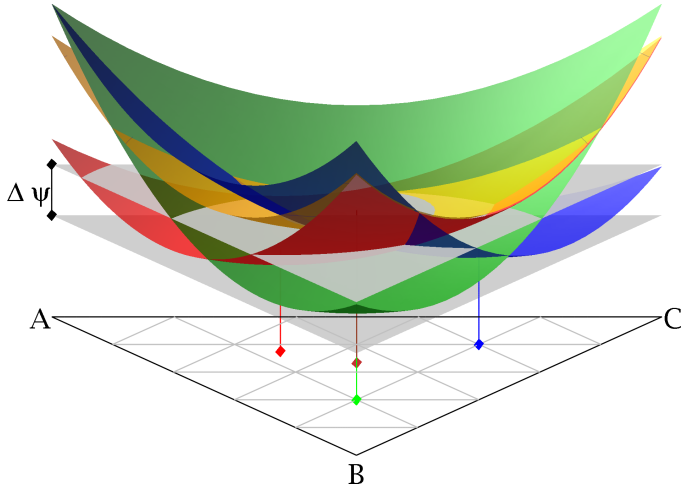
Für die Parameterstudien wird in zweidimensionalen Phasenfeldsimulationen zudem der Einfluss von verschiedenen Oberflächenenergieverhältnissen r_γ, Erstarrungsgeschwindigkeiten v, Lamellenabständen λ, Diffusionen D und Temperaturgradienten G auf den Kippwinkel der Lamellen untersucht. Die grundlegenden numerischen und physikalischen Parameter sind in Tabelle 6.4 gegeben. Die variierten Parameter

Tabelle 6.3: Zusammenfassung der Parameter für die verschobene Gibbs-Energie der Phase α entsprechend [137].

Parameter	Simulationswert
$\Xi_\alpha, \xi_\alpha, X_\alpha$	$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} -2{,}5 \\ -2{,}0 \end{bmatrix}$, 0,875
Phasenanteile von α, β, γ	0,4375; 0,2812; 0,2812



(a) Symmetrisches System



(b) Unsymmetrisches System

Abbildung 6.5: Anordnung und Position der Gibbs-Energien im ternären Simplex.

Tabelle 6.4: Zusammenfassung der numerischen und physikalischen Parameter basierend auf [137]. Die verschiedenen Oberflächenenergien sowie ihr Verhältnis sind in den Spalten a) bis f) gegeben.

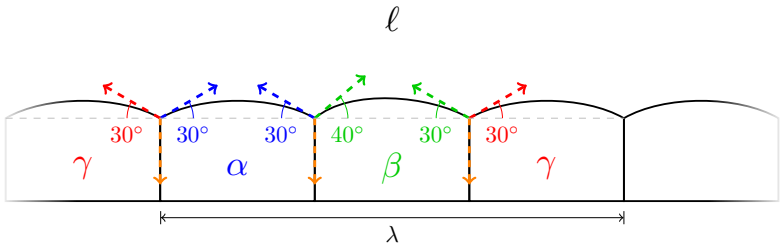
Parameter	Simulationswert	Physikalischer Wert
$\boldsymbol{\gamma}$	Phase α β γ ℓ α $-$ $\gamma_{\alpha\beta}$ 0,2 $\gamma_{\alpha\ell}$ β $\gamma_{\alpha\beta}$ $-$ 0,2 0,2 γ 0,2 0,2 $-$ 0,2 ℓ $\gamma_{\alpha\ell}$ 0,2 0,2 $-$ mit $\gamma_{\alpha\beta} = 0{,}2$ und $\gamma_{\alpha\ell} = 0{,}2$	Umrechungsfaktor für physikalischen Wert: $0{,}5\,{}^{J}/_{m^2}$
$\boldsymbol{c}_\ell = \left[c_\mathrm{A}^\ell, c_\mathrm{B}^\ell, c_\mathrm{C}^\ell\right]$	$0,\overline{3}; 0,\overline{3}; 0,\overline{3}$	$0,\overline{3}; 0,\overline{3}; 0,\overline{3}$ mol-Anteil
$\boldsymbol{D}$	3,0	$4{,}55 \cdot 10^{-9}\,{}^{m^2}/_{s}$
∇T	10^{-4}	$200\,{}^{K}/_{mm}$
v von ∇T	0,0034 Zellen pro Zeitschritt	$13{,}2\,{}^{\mu m}/_{s}$
$\gamma_{\alpha\beta\delta}$	2,6	$1{,}3\,{}^{J}/_{m^2}$
Δx	1,0	$3{,}89 \cdot 10^{-7}$ m
Δt	0,005	$5{,}00 \cdot 10^{-7}$ s
ϵ	4,0	$1{,}56 \cdot 10^{-6}$ m

auf Basis der Werte in Tabelle 6.4 sind zur besseren Übersichtlichkeit in den jeweiligen Abschnitten gegeben. Die Tabellen enthalten sowohl die realen als auch die entdimensionalisierten Werte, wie sie in der Simulation verwendet werden. Letztere werden im Löser verwendet, um die numerischen Abweichungen bei großen Skalenunterschieden zu reduzieren. Der kinetische Koeffizient τ wurde analog zu [165] über die Diffusion und die freie Energie berechnet. Mit den Werten aus Tabelle 6.4 ergibt sich nach [260] eine Diffusionslänge von $3{,}45 \cdot 10^{-5}\,m$.

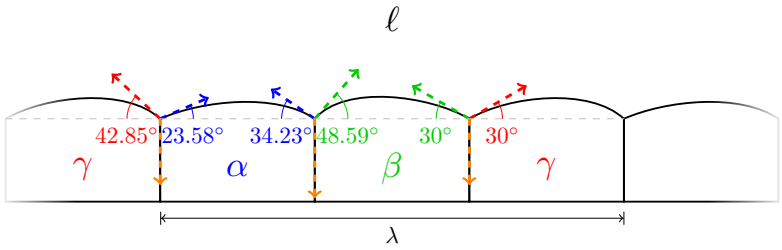
Entsprechend der experimentellen Schliffbilder von Genau und Ratke [227] quer zur Erstarrungsfront, in denen Spiralwachstum vermutet wird, und den Ergebnissen von Apel et al. [277], dass in spiegelsymmetrischen Anordnungen wie α-γ-β-γ-β-γ keine Verkippung beobachtet wird, wird in den folgenden Studien eine α-β-γ-Phasenanordnung gewählt. Der Lamellenabstand λ beschreibt dabei allgemein nach Jackson und Hunt [215] die Breite der sich wiederholenden Phasenanordnung. Für die hier durchgeführten Simulationen entspricht dies der Gebietsbreite in die eine α-β-γ-Lamellenanordnung gesetzt wird, wie in Abbildung 6.2 schematisch dargestellt. Der Simulationsaufbau sowie die theoretischen Gleichgewichtswinkel bei gleichen sowie unterschiedlichen Oberflächenenergien für die Werte aus den Tabellen 6.2 und 6.4 sind in Abbildung 6.6 dargestellt.

6.4.1.2 Variation der Oberflächenenergien

Für die Studie wird zuerst das Wachstum der Lamellen basierend auf den Werten aus Tabelle 6.4, analog zu [137], mit gleichen Oberflächenenergien (Tabelle 6.5 a)) und dem symmetrischen System aus Tabelle 6.2 genutzt. Der Aufbau ist schematisch in Abbildung 6.6(a) gezeigt. Für die Simulation wird ein Gebiet mit 80×6800 Zellen und $\lambda = 80$ Zellen genutzt. Das Ergebnis der Simulation ist in Abbildung 6.7(a) dargestellt. Dieses zeigt oszillierendes Wachstum der Lamellen, wie es für λ größer der minimalen Unterkühlung λ_{JH}, entsprechend der Jackson-Hunt-Theorie, erwartet wird. Das oszillierende Wachstum kann auf den lokalen Mangel einer oder mehrerer Komponenten zurückgeführt werden, welcher durch zu breite Lamellen entsteht. Hierdurch kommt nicht genügend Material der entsprechenden Komponente durch Diffusion an der Erstarrungsfront nach, wodurch sich die entsprechenden anderen Komponenten anstauen. Durch Oszillieren kann diese Anstauung wieder abgebaut werden. Phasenfeldsimulationen zu oszillierendem Wachstum



(a) $r_\gamma = 1$



(b) $r_\gamma = 1\,5$

Abbildung 6.6: Simulationsaufbau für die Untersuchung des gekippten Wachstums für das symmetrische System bei verschieden r_γ-Verhältnissen der Oberflächenenergien und den daraus resultierenden Gleichgewichtswinkeln.

Tabelle 6.5: Zusammenfassung der verschiedenen Simulationswerte der Oberflächenenergien sowie deren Verhältnis [137].

Parameter	a)	b)	c)	d)	e)	f)
$\gamma_{\alpha\beta}$	0,2	0,21	0,22	0,24	0,27	0,3
$\gamma_{\alpha\ell}$	0,2	0,19	0,18	0,16	0,13	0,1
Verhältnis $r_\gamma = \gamma_{\alpha\beta}/\gamma_{\alpha\ell}$	1,0	1,105	1,22	1,5	2,077	3,0

werden in [275] untersucht. Aufgrund der gleichen Oberflächenenergien und der symmetrischen Gibbs-Energie ist neben der lokalen Änderung aufgrund der Oszillation kein Kippen der Lamellen zu beobachten.

Zur Untersuchung des Einflusses der Oberflächenenergien auf den Kippwinkel wird basierend auf [137] gezielt das Verhältnis in einem Dreiphasenpunkt zwischen den zwei Fest-flüssig-Grenzflächen und der Fest-fest-Grenzfläche gestört, um damit die Symmetrie zwischen den Lamellen zu brechen. Für die Studie wird hierzu das Verhältnis $r_\gamma = \gamma_{\alpha\beta}/\gamma_{\alpha\ell}$ am Dreiphasenpunkt $TJ_{\alpha\beta\ell}$ erhöht, indem die Oberflächenenergien von α-β in der Fest-fest-Grenzfläche erhöht und die Oberflächenenergien von α-ℓ in der Fest-flüssig-Grenzfläche gesenkt werden. Die Werte sowie die Verhältnisse von r_γ sind in Tabelle 6.5 in den Spalten b)-f) dargestellt. Für alle Simulationen werden ansonsten dieselben Parameter und Startbedingungen wie in der vorherigen Simulation verwendet. Der Simulationsaufbau mit den Kräftevektoren der Oberflächenenergien sowie die daraus resultierenden theoretischen Gleichgewichtswinkel sind in Abbildung 6.6(b) dargestellt.

Der Kippwinkel v_t für die verschiedenen Oberflächenenergieverhältnisse ist in Abbildung 6.7 als gestrichelte grüne Linie dargestellt. Ab einem Oberflächenenergieverhältnis von mehr als $r_\gamma = 1{,}11$ steigt der Kippwinkel genähert linear bis zu 1,05° Grad bei $r_\gamma = 3$ an. Dies deutet auf eine Energiebarriere hin, welche erst überschritten werden muss, bevor die Lamellen gekippt wachsen. In Abbildung 6.7(b) ist die Simulation mit dem größten Kippwinkel bei einem Oberflächenenergieverhältnis von $r_\gamma = 3$ dargestellt. Durch die Erhöhung des Oberflächenenergieverhältnisses beginnen die Phasen zudem stärker zu oszillieren, indem

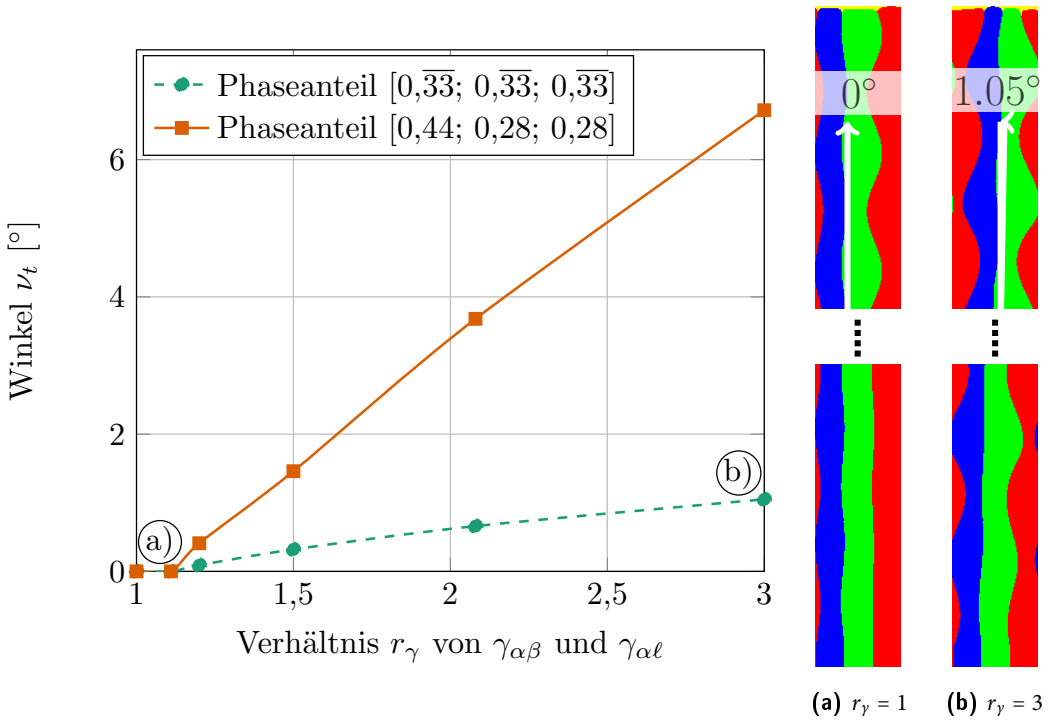


Abbildung 6.7: Kippwinkel in Abhängigkeit der Oberflächenenergie. Verhältnisse zwischen einer Fest-fest- und einer Fest-flüssig-Grenzfläche für zwei unterschiedliche Gleichgewichtskonzentrationen basierend auf [137]. Auf der rechten Seite sind zwei lamellare Strukturen mit gleichen Phasenanteilen, aber unterschiedlichen Oberflächenenergieverhältnissen von 1 und 3 sowie ihr Kippwinkel dargestellt.

die maximale Oszillationsamplitude steigt. Die gleichen Kippwinkel entstehen, indem das Verhältnis in den Oberflächenenergien in einem anderen Dreiphasenpunkt TJ entsprechend verändert wird. Veränderungen der Oberflächenenergien an verschiedenen TJ's wie α-β und γ-ℓ haben hingegen zu keiner Verkippung geführt.

6.4.1.3 Einfluss unterschiedlicher Phasenanteile auf den Kippwinkel

Entsprechend der Studie mit dem symmetrischen System wird der Einfluss des Oberflächenenergieverhältnisses für das unsymmetrische System, analog zu [137], mit den Parametern für die Gibbs-Energie der α-Phase aus Tabelle 6.3 wiederholt. Hierzu werden die Oberflächenenergien, wie in Tabelle 6.5 a)-f) gegeben, für das unsymmetrische System variiert. Der resultierende Verkippungswinkel ν_t für die Studie ist in Abbildung 6.7 als orange Linie eingezeichnet. Wie in der vorherigen Studie mit dem symmetrischen System, muss zuerst eine Barriere im Oberflächenenergieverhältnis überwunden werden, bevor der Kippwinkel genähert linear auf einen Wert von bis zu $\nu_t = 6{,}72°$ Grad bei $r_\gamma = 3$ ansteigt. Im Vergleich zwischen dem symmetrischen System mit gleichen Phasenanteilen und dem unsymmetrischen System sind die gleichen Tendenzen zu erkennen, die Kippwinkel sind jedoch für das unsymmetrische System größer.

6.4.1.4 Einfluss der periodischen Länge

Um den Einfluss des Lamellenabstands λ auf den Kippwinkel zu untersuchen, wird dieser wie in [137], systematisch variiert. Der Lamellenabstand λ wird dazu von 60 Zellen in Schritten von 10 Zellen bis 120 Zellen vergrößert. Der Temperaturgradient wird mit der Geschwindigkeit $\nu_1 = 0{,}0028$ Zellen pro Zeitschritt in der Simulation bewegt.

Mit größer werdendem Lamellenabstand steigt der Kippwinkel auf bis zu $\nu_t = 7{,}29°$ bei $\lambda = 90$ Zellen an. Nach Erreichen dieses Maximums bei λ_{peak} nimmt der Kippwinkel wieder ab. Der Kippwinkel über dem Lamellenabstand ist in Abbildung 6.8 als grüne Linie dargestellt.

Die Simulationsergebnisse für die Wachstumsgeschwindigkeit $\nu_1 = 0{,}0028$ sind für ausgewählte Lamellenabstände in den Abbildungen 6.8(a) bis 6.8(f) dargestellt. Abhängig vom Lamellenabstand können zwei Fälle unterschieden werden: Für $\lambda \leq \lambda_{\text{peak}}$ wird ein stabiles Lamellenwachstum mit konstantem Kippwinkel beobachtet. Für $\lambda > \lambda_{\text{peak}}$ beginnen die Lamellen in ihrer Breite mit einer jeweils konstanten Amplitude zu oszillieren, die mit zunehmendem Abstand zu λ_{peak} größer wird. Das Oszillieren der Phasen führt dazu, dass sich lokal kein konstanter Kippwinkel einstellen kann, was zu einem Rückgang der Gesamtverkippung führt.

6.4.1.5 Einfluss der Erstarrungsgeschwindigkeit

Zur Untersuchung des Einflusses der Erstarrungsgeschwindigkeit v auf den Kippwinkel wird neben dem Lamellenabstand zudem der Temperaturgradient mit drei Geschwindigkeiten, wie in [137], in den Simulationen bewegt. Die drei Geschwindigkeiten sind $\nu_1 = 0{,}0028$, $\nu_2 = 0{,}0022$ und $\nu_3 = 0{,}0015$ Zellen pro Zeitschritt. Hierbei sind ähnliche Verläufe wie für ν_1 aus Abschnitt 6.4.1.4 zu sehen, jedoch mit zunehmender Geschwindigkeit in positiver λ-Richtung verschoben. Das Maximum der Verkippung von ν_1 mit $7{,}11°$ ist ähnlich dem von ν_2 mit $7{,}29°$. Für die Wachstumsgeschwindigkeit ν_3 wird hingegen kein lokales Maximum für die betrachteten Lamellenabstände gefunden. Der Lamellenabstand am Maximum bei ν_1 ist mit etwa 90 Zellen kleiner als bei ν_2 mit etwa 110 Zellen. Die Abnahme des Lamellenabstands mit steigender Erstarrungsgeschwindigkeit entspricht der Erwartung aus der Jackson-Hunt-Theorie. Der Lamellenabstand am Arbeitspunkt λ_{JH} mit der geringsten Unterkühlung nimmt darin entsprechend der Gleichung $\lambda_{JH} \propto \sqrt{1/v}$ [288] mit steigender Erstarrungsgeschwindigkeit ab.

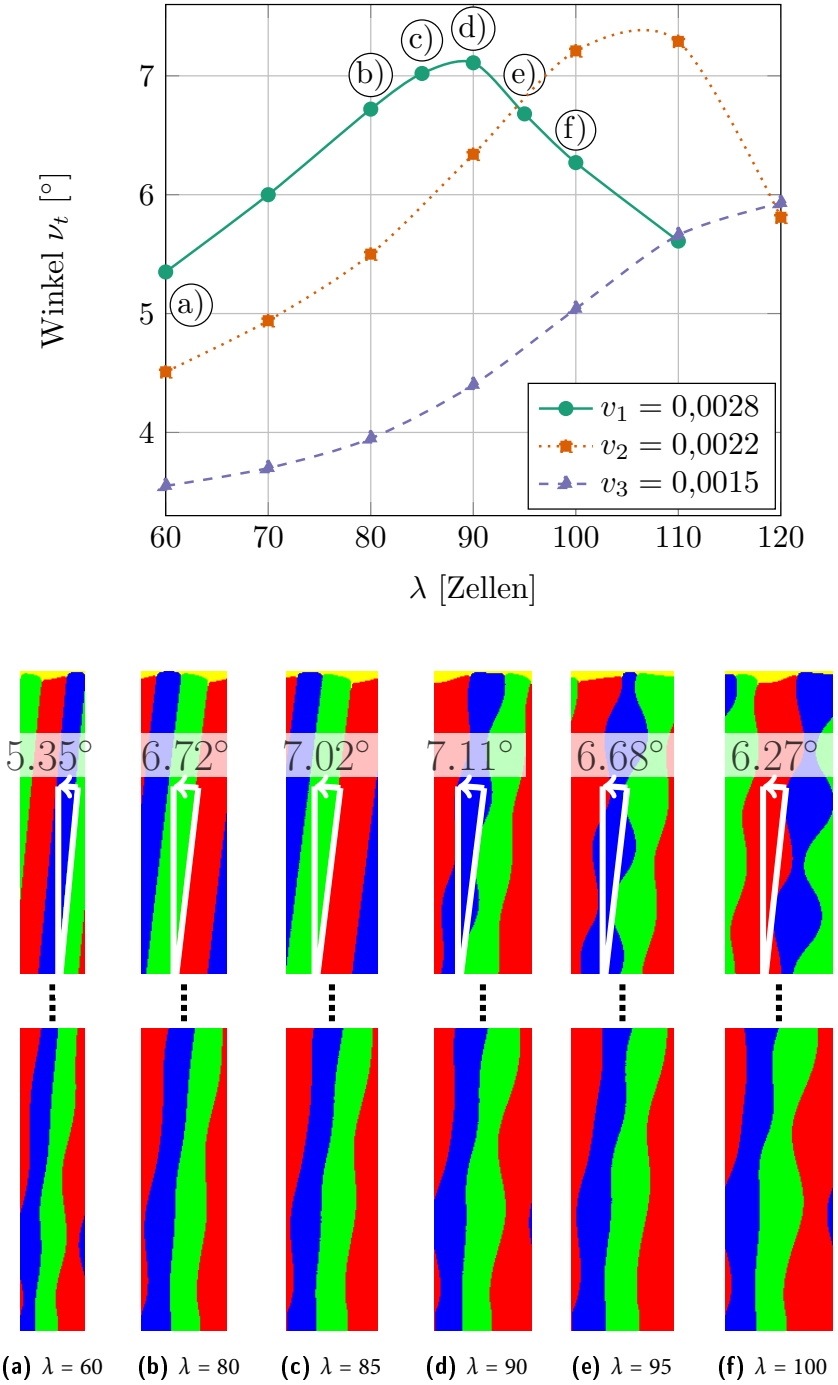


Abbildung 6.8: Verkippungswinkel in Abhängigkeit des Lamellenabstands λ und der Erstarrungsgeschwindigkeit v, basieren auf [137]. Die Abbildungen 6.8(a) bis 6.8(f) zeigen die Lamellenstruktur und ihre Verkippung für unterschiedliche Lamellenabstände für die Erstarrungsgeschwindigkeit v_1.

6.4.1.6 Richtungswechsel während des gekippten Wachstums

Zur Untersuchung des Einflusses der Oberflächenenergien auf die Kipprichtung wird die Oberflächenenergie während des Wachstums für die Geschwindigkeit v_2 mit $\lambda = 95$ und $\lambda = 105$ Zellen verändert, basierend auf dem Datensatz aus den Tabellen 6.3 und 6.4. Hierzu werden die beiden Oberflächenenergien der Festphasen $\gamma_{\alpha\beta}$ während der Simulation mehrfach mit $\gamma_{\alpha\gamma}$ getauscht, um die Kipprichtung zu ändern. Zudem werden alle Oberflächenenergien auf den gleichen Wert von 0,2 gesetzt, um ein nicht gekipptes Wachstum zu erzielen. Um den direkten Einfluss der Oberflächenenergien auf die Verkippung sowie deren Richtung zu zeigen, wird die Kipprichtung ausgehend von einem nicht gekippten Wachstum $\parallel$ nach rechts $\Rightarrow$, dann gerade $\parallel$, nach links $\Leftarrow$, nach rechts $\Rightarrow$, nach links $\Leftarrow$ und zurück auf ein nicht gekipptes Wachstum $\parallel$ geändert. Zwischen jedem Richtungswechsel werden zwei Millionen Zeitschritte gerechnet, um ein stabiles Wachstum zu erreichen. In den Abbildungen 6.9 und 6.10 sind Ausschnitte der verschiedenen Kipprichtungen sowie deren Übergänge zu sehen. Für alle Richtungswechsel ist eine schnelle Anpassung der Wachstumsrichtung zu sehen. Zudem verschwindet die Verkippung nach der Änderung aller Oberflächenenergien auf den gleichen Wert, was zeigt, dass das Oberflächenenergieverhältnis der treibende Mechanismus hinter der Verkippung und ihrer Richtung ist. Abhängig von λ ist wie bereits zuvor ein Oszillieren zu beobachten, das gleichermaßen in beide Kipprichtungen ausgeprägt ist.

6.4.1.7 Einfluss der Diffusion und des Temperaturgradienten für unterschiedliche Oberflächenenergieverhältnisse

Zur Untersuchung des Einflusses der Diffusion und des Oberflächenenergieverhältnisses werden verschiedene Werte untersucht. Hierzu wird auf den Parametern aus der vorhergehenden Studie mit der Geschwindigkeit v_2 aufgebaut. Für die Oberflächenenergieverhältnisse werden die Werte für $r_\gamma = 1{,}5$ und $r_\gamma = 2{,}5$ verwendet, und für die Diffusion die Werte $D = 3$, $D = 4$ und $D = 5$. Die Kippwinkel sind in Abbildung 6.11 für unterschiedliche Werte von λ aufgetragen. Für $r_\gamma = 2{,}5$ ist für alle drei Diffusionswerte ein ähnlicher Verlauf wie bei der Variation der Geschwindigkeit zu sehen, jedoch mit einem geringeren Kippwinkel aufgrund des Oberflächenenergieverhältnisses. Hierbei ist für $r_\gamma = 2{,}5$ mit steigendem Diffusionswert eine Verschiebung des Hochpunkts nach rechts zu beobachten. Des Weiteren nimmt die Größe des Winkels am Hochpunkt ab. Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass sich die Konzentrationen durch einen höheren Diffusionswert schneller anpassen. Dies hat auch zur Folge, dass breite Fasern länger stabil sind, bevor sie anfangen zu oszillieren, was die Verschiebung des Peaks nach rechts erklärt. Für $r_\gamma = 1{,}5$ stellt sich abhängig vom Diffusionswert ein konstanter bzw. ein mit λ leicht ansteigender Kippwinkel ein. Jedoch ist für dieses Oberflächenenergieverhältnis kein Hochpunkt zu beobachten.

Zudem wird mit dem Diffusionswert $D = 3$ und der Geschwindigkeit v_2 für die beiden Oberflächenenergieverhältnisse der Einfluss auf die Steigung des Temperaturgradienten untersucht. Hierzu werden drei Steigungen $G = 0{,}5 \cdot 10^{-4}$, $1 \cdot 10^{-4}$ und $2 \cdot 10^{-4}$ verwendet. In Abbildung 6.12 ist der Kippwinkel für die unterschiedlichen Winkel über λ aufgetragen. Für alle Steigungen ist ein ähnlicher Verlauf des Kippwinkels zu sehen. Im Fall von $r_\gamma = 2{,}5$ verschiebt sich der Hochpunkt leicht nach rechts oben. Durch den steileren Gradienten werden die Fasern stabilisiert, da der Temperaturbereich, in dem sich die Fasern an der Erstarrungsfront bewegen können, verringert wird. Dies wiederum führt zu einer Reduzierung der Oszillation und damit zu einer Verschiebung der Kippwinkel hin zu einem größeren λ senkrecht zur Richtung des Temperaturgradienten sowie zu einer leichten Erhöhung des Winkels. Für $r_\gamma = 1{,}5$ liegen die Verläufe eng zusammen und bilden wie zuvor eine leicht ansteigende Gerade.

6.4.1.8 Diskussion des gekippten Wachstums

In allen Simulationen wird eine stabile Verkippung sowie Form der Erstarrungsfront für $\lambda \leq \lambda_{\text{peak}}$ beobachtet. Die Oberflächenkonturen der Phasengrenzen für verschiedene Zeitschritte sind für v_1 und $\lambda = 85$ gespiegelt entlang der Wachstumsrichtung in Abbildung 6.13 dargestellt. Die Simulation entspricht dem Fall c) in Abbildung 6.8 mit 7,02°. Dabei sind die drei Festphasen in dem periodischen Gebiet in einer α-β-γ-Folge

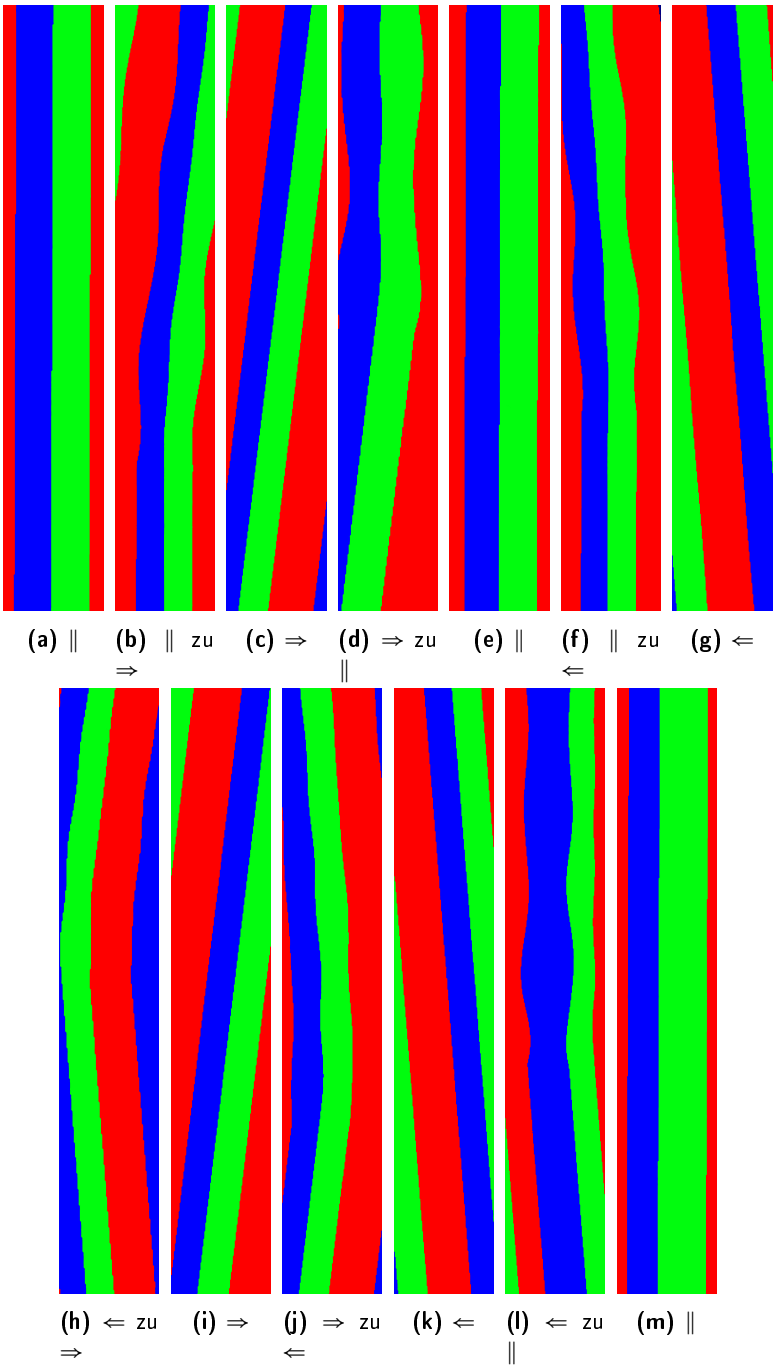


Abbildung 6.9: Änderung der Kipprichtung durch Variation der Fest-fest-Oberflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ und $\gamma_{\alpha\gamma}$ für eine Gebietsgröße von 95 Zellen.

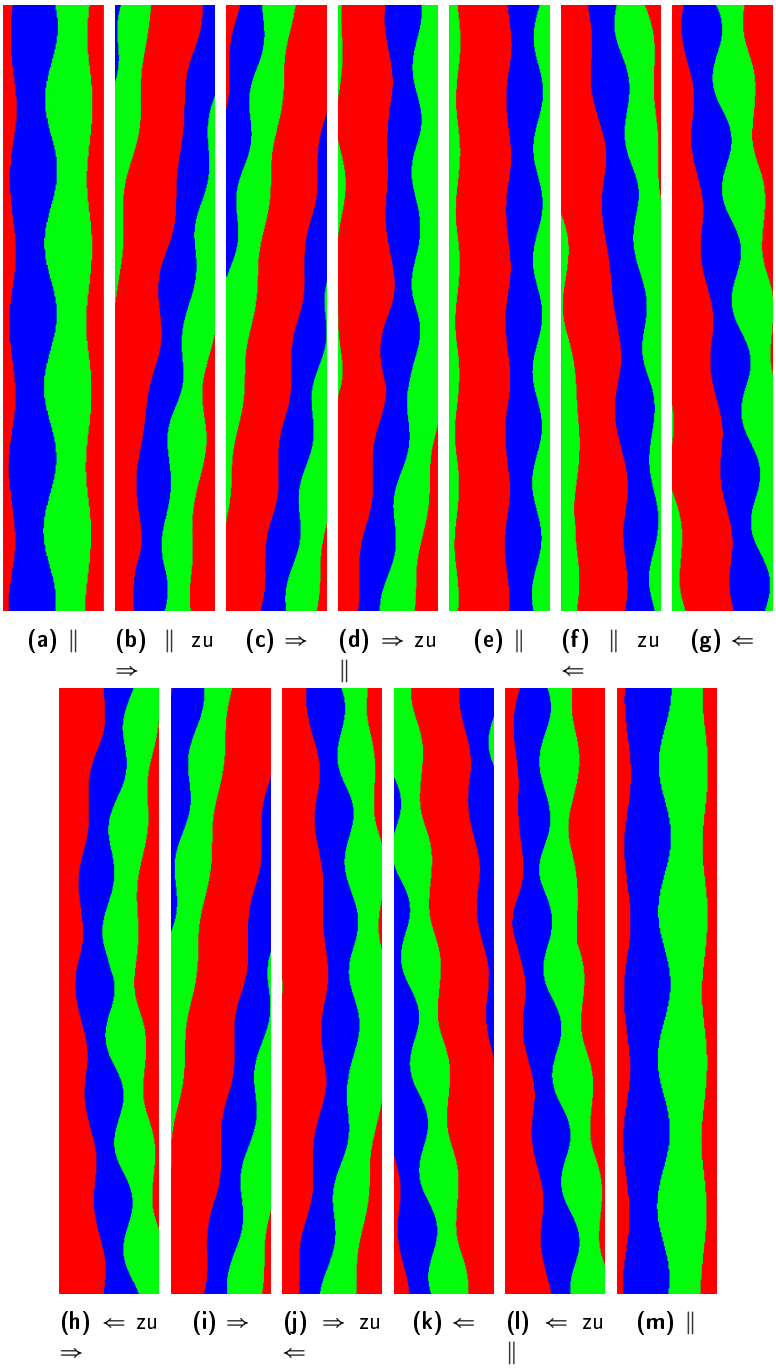


Abbildung 6.10: Änderung der Kipprichtung durch Variation der Fest-fest-Oberflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ und $\gamma_{\alpha\gamma}$ für eine Gebietsgröße von 105 Zellen.

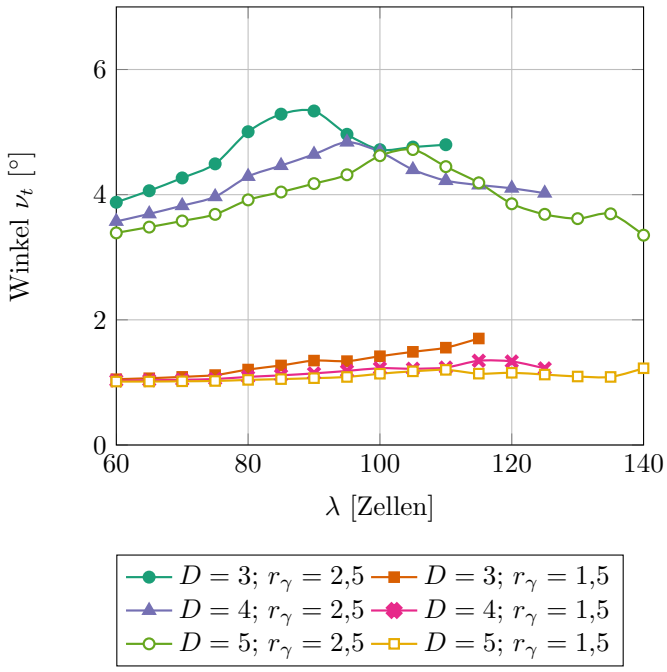


Abbildung 6.11: Einfluss des Diffusionswertes auf den Kippwinkel für zwei unterschiedliche Oberflächenenergieverhältnisse.

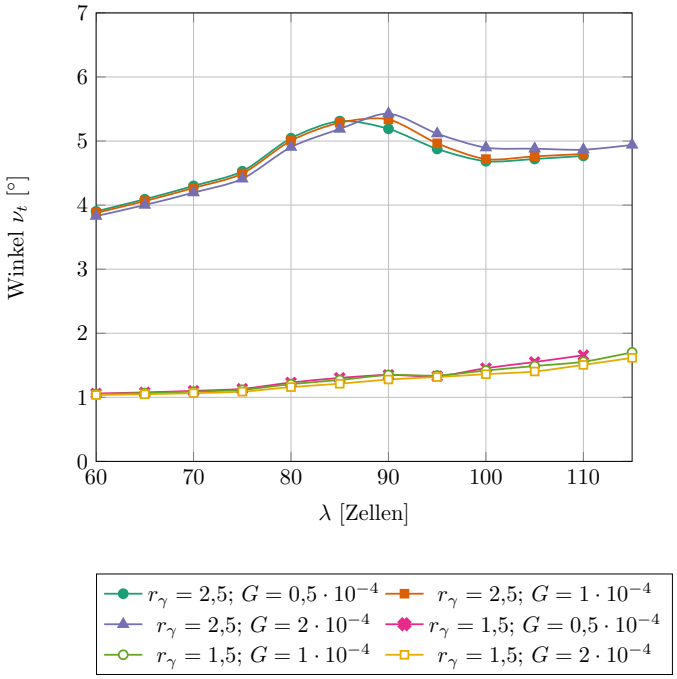


Abbildung 6.12: Einfluss der Steigung des Temperaturgradienten auf den Kippwinkel für zwei unterschiedliche Oberflächenenergieverhältnisse.

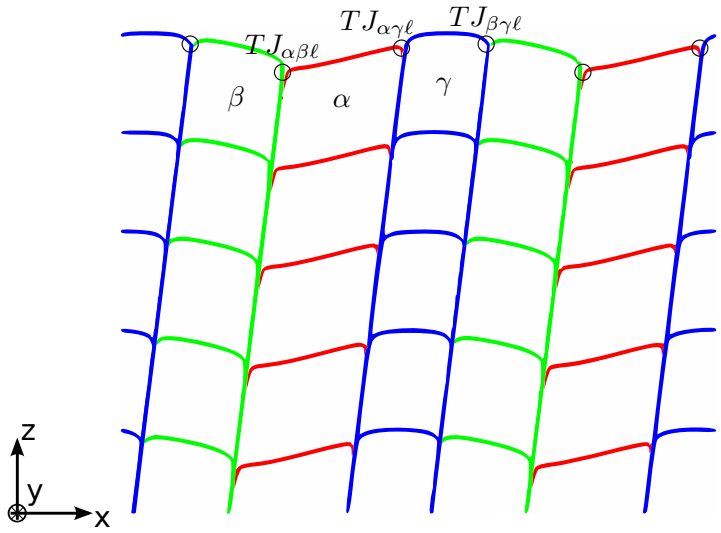


Abbildung 6.13: Oberflächenkontur der Phasengrenzen unter stabilem gekipptem Wachstum für verschiedene Zeitschritte [137]. Das Profil wurde zur besseren Visualisierung entlang der Wachstumsrichtung gespiegelt. Die Simulation wurde mit der Geschwindigkeit v_1 und dem Lamellenabstand $\lambda = 85$ durchgeführt. Die Knotenpunkte TJ, an denen sich drei Phasen berühren, sind mit schwarzen Kreisen eingezeichnet.

angeordnet. Die Oberflächenenergien zwischen den Phasen sind außer den beiden Grenzflächen α-ℓ (fest-flüssig) und α-β (fest-fest) gleich gewählt. Die Oberflächenenergie $\gamma_{\alpha\ell}$ ist niedriger und die Oberflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ ist größer als die anderen Oberflächenenergien. Dies führt, wie in Abbildung 6.13 dargestellt, zu der Anordnung der TJ-Knotenpunkte der Grenzflächen in Wachstumsrichtung von $TJ^z_{\alpha\beta\ell} < TJ^z_{\alpha\gamma\ell} < TJ^z_{\beta\gamma\ell}$ und zu einer Verkippung in positiver x-Richtung, wie auch in [137] beschrieben. Mit einer gedrehten Phasenanordnung von γ-β-α kippen die Lamellen in negativer x-Richtung, wie in Abschnitt 6.4.1.6 gezeigt.

Auf Basis der Ergebnisse zur Variation des Oberflächenenergieverhältnisses in Abbildung 6.7 sowie der Studie zu den Richtungswechseln kann geschlussfolgert werden, dass die Verkippung durch die Oberflächenenergien getrieben ist. Ein zusätzlicher konzentrationsgetriebener Mechanismus der Verkippung wie in [277] kann die hier beobachtete Verkippung zwar unterstützen, die Stärke der Verkippung und deren Richtung werden jedoch primär von dem Oberflächenenergieverhältnis kontrolliert.

Die Theorie eines zusätzlichen konzentrationsgetriebenen Verkippungsmechanismus wird durch die Erhöhung des Kippwinkels für größer werdende Lamellenabstände λ sowie den Einfluss der Diffusion unterstützt. Für die Variation der Erstarrungsgeschwindigkeiten, die ebenfalls die Konzentrationen an der Erstarrungsfront beeinflussen, ist aus den durchgeführten Studien keine eindeutige Aussage über den maximalen Kippwinkel λ_{peak} möglich. Für ein festes $\lambda \leq \lambda_{peak}$ führt eine Erhöhung der Erstarrungsgeschwindigkeit zu einer Zunahme des Kippwinkels, da hierdurch ebenfalls die Konzentrationen an der Erstarrungsfront beeinflusst werden. Daher ist die Verkippung entweder konzentrationsgetrieben, oberflächenenergiegetrieben oder eine Kombination aus beidem.

Neben den Oberflächenenergien verändert der Lamellenabstand das Profil der Erstarrungsfront und damit die Gleichgewichtsbedingungen an den TJ-Knotenpunkten. Eine Vergrößerung von $\lambda \leq \lambda_{\text{peak}}$ erlaubt es den TJ-Knotenpunkten, sich weiter in z-Richtung zu entfernen, was eine höhere Verkippung ermöglicht. Dies unterstützt die Theorie, dass die Oberflächenenergien die Verkippung kontrollieren und die anderen Parameter diese unterstützen.

Basierend auf den Ergebnissen kann ein konzentrationsgetriebener Verkippungsmechanismus in ternären eutektischen Systemen nicht ausgeschlossen werden, jedoch sind für eine genaue Quantifizierung weitere

Simulationsstudien notwendig. Ein analytischer Ansatz zur Beschreibung von gekipptem Wachstum könnte mit Hilfe der TJ-Knotenpunkte, der Gibbs-Thomson-Gleichung und des Youngschen Gesetzes möglich sein. Erste Ansätze mit verschiedenen Annahmen führten jedoch zu uneindeutigen Lösungen.

Weiterhin kann ausgeschlossen werden, dass das gekippte Wachstum aufgrund eines Programmfehlers entstanden ist, da sich der Effekt in den zwei unabhängig voneinander entwickelten Softwarepaketen PACE3D sowie WALBERLA findet und sich die Kipprichtung steuern lässt.

6.4.1.9 Zwischenschlussfolgerungen

In diesen Studien konnte analog zu [137] ein neuer Mechanismus auf Basis von isotropen Oberflächenenergien für gekipptes Wachstum gezeigt werden, im Gegensatz zu dem durch Anisotropie getriebenen gekippten Wachstum in [235, 260, 263, 266, 267, 273, 378] und dem konzentrationsgetriebenen gekippten Wachstum aus [277]. Basierend auf einer systematischen Änderung der Oberflächenenergieverhältnisse, der Phasenanteile, der Erstarrungsgeschwindigkeit, des Temperaturgradienten, der Diffusionswerte und des Lamellenabstands für $\lambda \leq \lambda_{\text{peak}}$ wurde der Einfluss dieser Größen auf den Kippwinkel für eine α-β-γ-Anordnung in 2D-Simulationen untersucht und systematisch erhöht. Durch die systematische Veränderung dieser Parameter konnten Kippwinkel von bis zu 7,29° erreicht werden.

Aus den Studien leiten sich acht Schlussfolgerungen für gekipptes Wachstum ab:

(i) Gekipptes Wachstum kann für isotrope, aber unterschiedliche Oberflächenenergien beobachtet werden. Hierzu müssen aber spezielle Oberflächenenergieverhältnisse zwischen ausgewählten Fest-fest- und Fest-flüssig-Grenzflächen herrschen.

(ii) Eine Vergrößerung des Oberflächenenergieverhältnisses führt zu einem größeren Kippwinkel.

(iii) Damit eine Verkippung stattfindet, muss zuerst eine Barriere im Oberflächenenergieverhältnis überschritten werden.

(iv) Eine Veränderung der Gibbs-Energien und der daraus folgenden anderen Phasenanteile führt zu einer Vergrößerung des Kippwinkels.

(v) Ein größerer Kippwinkel kann durch einen größeren Lamellenabstand erreicht werden, bis ein lokales Maximum bei λ_{peak} erreicht ist. Durch eine weitere Vergrößerung von λ beginnen die Phasen zu oszillieren, was mit einer Abnahme des Kippwinkels einhergeht.

(vi) Für ein festes $\lambda \leq \lambda_{\text{peak}}$ führt eine Erhöhung der Erstarrungsgeschwindigkeit zu einem Anstieg des Kippwinkels. Jedoch ist für die durchgeführten Studien kein direkter Einfluss der Geschwindigkeit auf den maximalen Kippwinkel λ_{peak} zu beobachten.

(vii) Höhere Diffusionswerte verringern den Kippwinkel und verschieben das Maximum in Richtung des größeren λ.

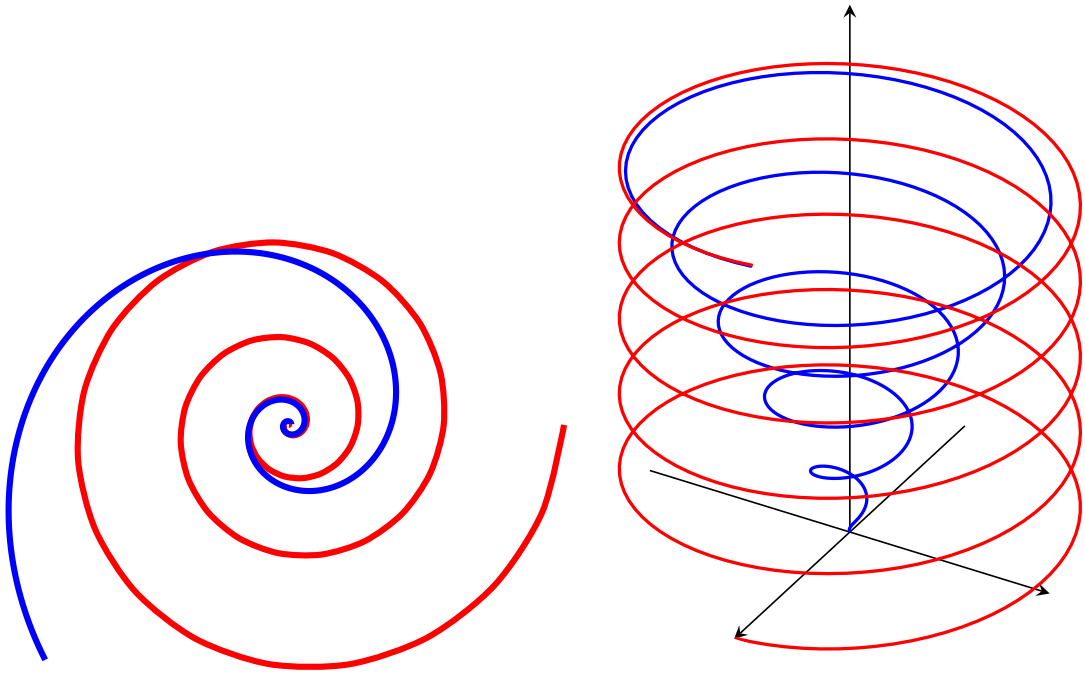
(viii) Größere Steigungen des Temperaturgradienten stabilisieren die Fasern und verschieben das Maximum des Kippwinkels in Richtung des größeren λ. Zudem steigt der Kippwinkel leicht an.

6.4.2 Spiralförmiges Wachstum

Im Folgenden Abschnitt wird basierend auf den Ergebnissen aus dem vorherigen Abschnitt 6.4.1 das Spiralwachstum bei der ternären eutektischen gerichteten Erstarrung von Al-Ag-Cu, wie von Genau und Ratke in [227] vermutet, untersucht [137].

Spiralen finden sich in der Natur auf verschiedene Längenskalen, von DNA-Strängen mit einem Durchmesser von wenigen μm bis hin zu Spiralgalaxien mit einem Durchmesser von mehreren Lichtjahren ($1\,lj \approx 9{,}4607 \cdot 10^{15}\,m$). Mathematisch können zwei Klassen von Spiralen unterschieden werden: zweidimensionale und dreidimensionale Spiralen, wie in Abbildung 6.14 für jeweils zwei exemplarische Typen dargestellt. Bei zweidimensionalen Spiralen wie der archimedischen Spirale (Abbildung 6.14(a) rote Spirale) oder der logarithmischen Spirale (Abbildung 6.14(a) blaue Spirale) verändert sich der Abstand zum Mittelpunkt in einer Ebene monoton. Solche Spiralen finden sich in der Natur z.B. in Spiralgalaxien. Dreidimensionale Spiralen verändern zusätzlich ihr Rotationszentrum. Bei einer Änderung des Rotationsradius entstehen dabei konische Spiralen (Abbildung 6.14(b), blaue Spirale) und bei einem konstanten Rotationsradius entstehen Schrauben bzw. Helizes (Abbildung 6.14(b), rote Spirale), wie sie von der DNA bekannt sind.

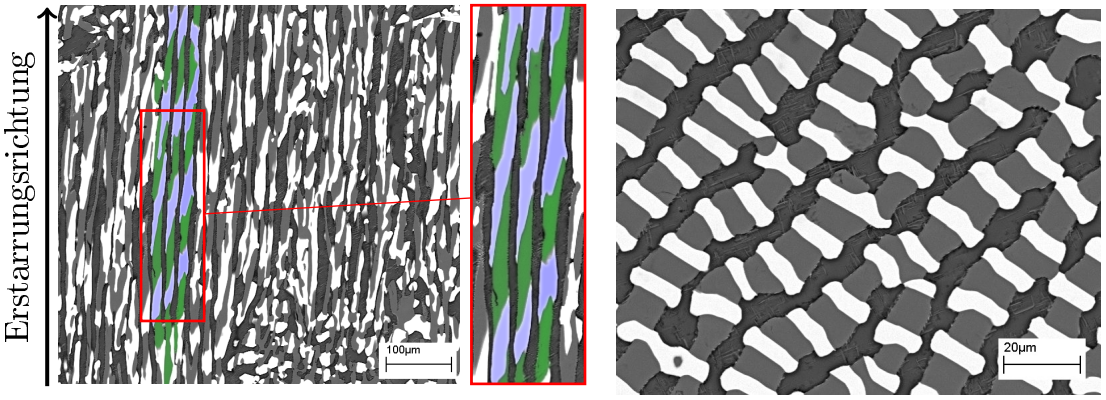
Bei der Erstarrung von Legierungen wird wie in [137] beschrieben die Bildung von unterschiedliche Arten von Spiralen beobachtet. Über das Rotieren von Phasen bei der gerichteten Erstarrung von binären eutektischen Legierungen wurde erstmals von Double et al. [379] im Jahr 1968 berichtet. Rotierende Lamellen, die sich helixförmig um eine Achse parallel zur Wachstumsrichtung formen und sich mit bis zu 30° pro cm drehen, werden in den gerichtet erstarrten binären Systemen LiF-NaF, Al-Al_2Cu, Al-Ag_2Al, Al-Zn und LiF-NaF gefunden. Spiralwachstum von Lamellen bei der gerichteten eutektischen Erstarrung von Pb-Sn-Legierungen wird in [380, 381] untersucht. Mourer und Verhoeven [381] finden eine starke Zunahme der Rotationsrate mit der Erstarrungsgeschwindigkeit. In [382] zeigen Attallah und Gruzleski ein Modell zur



(a) Zweidimensionale Spiralen. In Rot eine archimedische und in Blau eine logarithmische Spirale.

(b) Dreidimensionale Spiralen. In Rot eine Schraube und in Blau eine konische Spirale.

Abbildung 6.14: Verschiedene zweidimensionale und dreidimensionale Spiralen.



(a) Mikrograph entlang der Wachstumsrichtung. Darin ist ein Bereich mit einem sich in Blau und Grün wiederholenden Muster hervorgehoben, das für Sprialen gehalten wird. Die Abbildung stammt von A. Genau [384] und wurde aus [137] angepasst.

(b) Mikrograph parallel zur Erstarrungsfront mit Kettenmuster. Die Abbildung von A. Genau [384] wurde aus [137] entnommen.

Abbildung 6.15: Mikrographen der gerichtet erstarrten, ternären eutektischen Legierungen Al-Ag-Cu. Beide Bilder stammen aus derselben Probe und wurden senkrecht zueinander aufgenommen. Die vermutete Spirale besteht aus einer Ag_2Al-Phase (Weiß/Grün) und einer Al_2Cu-Phase (Grau/Blau), eingebettet in einer Al-Matrix. Die Bilder wurden von A. Genau aufgenommen.

Untersuchung des Spiralwachstums von eutektischen Lamellen. Damit zeigen sie, dass dieser Typ von Spiralwachstum auf eine bestimmte Beziehung der kristallographischen Orientierungen von zwei gemeinsam wachsenden Phasen zurückgeführt werden kann, welche zu einer Abweichung von der bevorzugten kristallographischen Wachstumsrichtung führt, was zu einem Wachstum parallel zur Fest-flüssig-Grenzfläche führt. Auf Basis des Modells berechnen sie die Rotationsrate für verschiedene binäre eutektische Systeme und zeigen damit, dass nur in bestimmten Systemen wie Pb-Sn, Al-Al_2Cu, Al-Ag_2Al, in denen auch experimentell Spiralwachstum beobachtet wird, die Rotationsrate größer Null ist.

Akamatsu et al. [338] zeigen 2010 in Echtzeit Beobachtungen bei Dünnschichtexperimenten das Wachstum von zweiphasigen dendritischen Spiralen bei der gerichteten Erstarrung der transparenten pseudo-ternären Legierung Succinonitril-(d)Campher (SCN-DC-NA). Bei der Erstarrung von zwei Phasen mit schwacher Anisotropie entlang der univarianten Linie von SCN-DC formt sich dabei an der Dendritenspitze ein Doppelhelixmuster aus. Dreidimensionale Phasenfeldsimulationen zum Spiralwachstum von [338] werden von Pusztai et al. [339] und Rátkai et al. [340] durchgeführt. Neben der optischen Übereinstimmung zwischen den Simulationen und Experimenten wird auch der Radius an der Dendritenspitze in Abhängigkeit von der Oberflächenenergie und der kinetischen Anisotropie verglichen. Der Einfluss der Anisotropie in der Oberflächenenergie auf die Ausbildung von zweiphasigen Spiraldendriten wird von Ratkai et al. in [340] begutachtet. In ihrer Arbeit schlussfolgern sie, dass Spiraldendriten ohne Anisotropie unwahrscheinlich sind, im Gegensatz zu den Erwartungen von Akamatsu et al. [338, 383].

In dieser Arbeit liegt der Fokus auf dem Spiralwachstum von Helizes während der ternären eutektischen gerichteten Erstarrung, basierend auf den Ergebnissen aus [137]. Hierbei vermuten Genau und Ratke in [227] auf Basis von experimentellen Bildern von Al-Ag-Cu, dass die erstarrenden Phasen eine Helix um ein gemeinsames Rotationszentrum formen. In dem hervorgehobenen Bereich in Abbildung 6.15(a), entlang der Erstarrungsrichtung, wird Spiralwachstum von zwei intermetallischen Phasen (weiß/blau und grau/grün) in einer Helix vermutet. Anhand eines Schliffbilds, ähnlich dem aus Abbildung 6.15(a), berichten Genau und Ratke in [227] von der Möglichkeit, dass sich für das System Al-Ag-Cu stabförmige eutektische Phasen in einer Matrix als Helix anordnen. Von einzelnen 2D-Bildern ist keine sichere Aussage über Spiralwachstum möglich. Eine dreidimensionale Analyse der Mikrostruktur ist experimentell nur mit einer aufwendigen Abtragungstechnik oder durch Messungen mit Synchrotrontomografie in einem Teilchenbeschleuniger

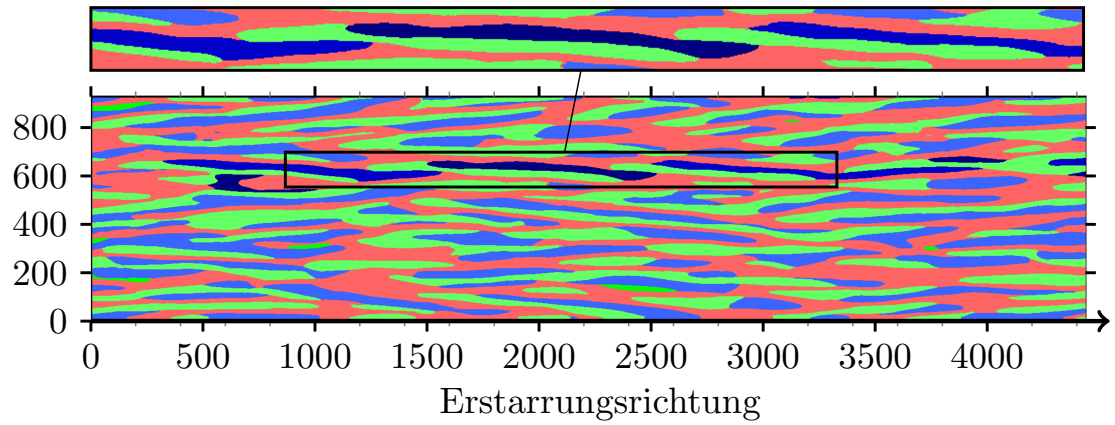


Abbildung 6.16: Querschnitt entlang der Erstarrungsrichtung. In Dunkelblau sind die γ-Fasern hervorgehobenen, welche um eine grüne β-Faser rotieren. Zur besseren Darstellung wurde die y-Achse mit dem Faktor zwei skaliert.

möglich. Daher werden dreidimensionale Phasenfeldsimulation durchgeführt, um das Phänomen des Spiralwachstums bei der Erstarrung von drei Festphasen am ternären eutektischen Punkt zu untersuchen.

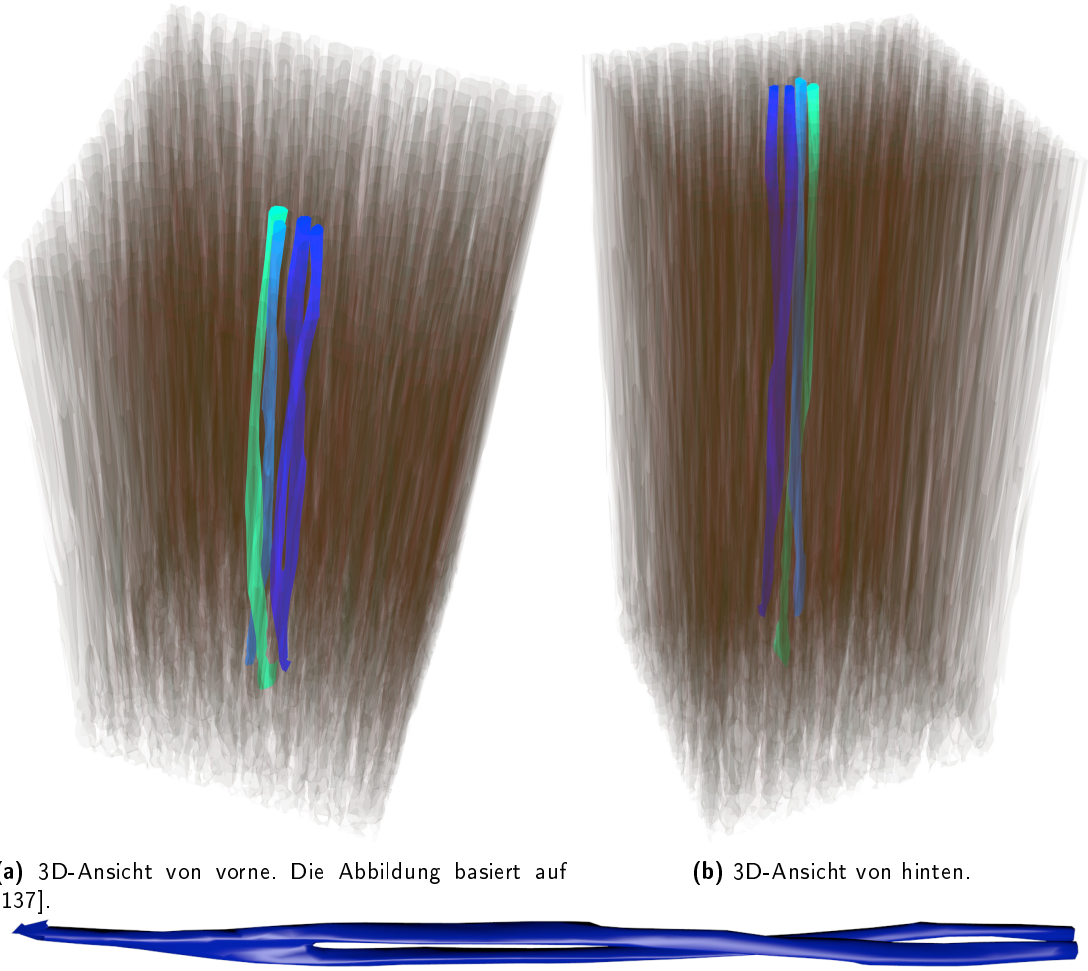
6.4.2.1 Simulation des Spiralwachstums

Zur Untersuchung des Spiralwachstums in Al-Ag-Cu werden großskalige dreidimensionale Phasenfeldsimulationen durchgeführt, um das räumlich komplexe Muster, aufbauend auf [137], zu beobachten. Es wird angenommen, dass der Mechanismus aus Abschnitt 6.4.1, der zur Verkippung der Lamellen in 2D führt, zu Spiralen in 3D führt.

Für die Untersuchung des Spiralwachstums werden die Parameter aus den Tabellen 6.2 bis 6.4 mit $r_\gamma = 3, v_1$, $G = 1 \cdot 10^{-4}$ und $D = 3$ verwendet. Diese Parameter führten im vorherigen Abschnitt 6.4.1 zu hohen Kippwinkeln. Durch die kleinen Strukturen, kleinen λ's, und den hohen Kippwinkel soll die Wahrscheinlichkeit für Spiralwachstum erhöht werden.

Für die Phasenfeldsimulation werden großskalige dreidimensionale Gebiete genutzt, da vermutet wird, dass das Spiralwachstum von der lokalen Phasenanordnung und der Nachbarschaft abhängt. Simulationen in kleineren 3D-Gebieten mit einer zufälligen wie auch einer definierten Phasenanordnung als Startbedingung haben keine Anzeichen für Spiralen geliefert [137]. Zudem haben die periodischen Ränder in kleinen Gebieten einen starken Einfluss auf die Musterbildung, wie in [3, 4] gezeigt. Für die erste Phasenfeldsimulation wird ein Gebiet mit einer Grundfläche von 960×960 Zellen parallel zur Erstarrungsfront verwendet, um die Wahrscheinlichkeit von Spiralwachstum zu erhöhen. Die Simulation wurde bis zu einer Erstarrungshöhe von 2 000 Zellen mit 8 192 Rechenkernen auf dem SuperMUC [181, 385] des LRZ berechnet. Für die Keime in der Schmelze wird wie in Abschnitt 6.2 eine Voronoi-Verteilung mit Keimen kleiner als λ_{JH} verwendet.

Entsprechend der experimentellen Mikrostrukturen in Abbildung 6.15 und [8] bilden sich in der Simulation verschiedene Strukturen sowie sich mehrfach verzweigende Kettenmuster parallel zur Erstarrungsfront aus. Im Querschnitt entlang der Erstarrungsrichtung in Abbildung 6.16 sind ähnliche Muster wie in dem experimentellen Schliffbildern aus Abbildung 6.15 zu sehen. Eine der Faseranordnungen besteht aus zwei Fasern der Phase γ (blau), die um eine β-Phase (grün) rotieren und in der Matrixphase α (rot) eingebettet sind. Abbildung 6.17 zeigt zwei Helixpaare in 3D mit jeweils einer Umdrehung. Für eine bessere Übersicht sind die rotierenden γ-Fasern mit unterschiedlichen Blautönen herausgestellt und die anderen Phasen transparent gewählt. Die hier gefundenen Spiralen weichen von der vorher vermuteten Annahme ab, in der zwei



(a) 3D-Ansicht von vorne. Die Abbildung basiert auf [137].

(b) 3D-Ansicht von hinten.

(c) Spirale freigestellt

Abbildung 6.17: Zwei Spiralstrukturen von verschiedenen Ansichten in einem $960 \times 960 \times 2\,000$ Zellen großen Gebiet. Zwei blaue γ-Fasern rotieren hierbei jeweils um eine grüne β-Faser, die hier ausgeblendet sind. Zur besseren Darstellung sind die verschiedenen Fasern leicht unterschiedlich blau eingefärbt. Hierbei ist zu erkennen, dass sich nach dem Aufteilen einer Faser eine Spirale bildet, wie in c) freigestellt.

unterschiedliche Fasern der Phasen β und γ, verflochten in einer Matrix, die Spirale bilden. Stattdessen rotieren in der Matrix zwei γ-Fasern um eine β-Faser. Bei einer der zwei Spiralen ist zudem zu erkennen, dass sich diese nach dem Aufteilen einer Faser bildet, wie in der Freistellung in Abbildung 6.17(c) dargestellt.

Neben den hervorgehobenen Helizes in Abbildung 6.17 können weitere Anfänge von Spiralen in der Simulation beobachtet werden. Eine Auswahl an freigestellten Fasern mit verschiedenen Spiralansätzen auf unterschiedlichen Höhen ist in Abbildung 6.18 dargestellt. In den meisten Fällen ist jedoch keine kontinuierliche Rotation zu beobachten, da die Fasern mit andern Fasern und Lamellen interagieren. Hierbei werden die Fasern verdrängt oder wachsen mit anderen Fasern zusammen. Auch die Spirale in Abbildung 6.17(c) verbindet sich während ihres Wachstums mit anderen Fasern, löst sich jedoch im weiteren Verlauf wieder von diesen. Das Rotieren auf unterschiedlichen Höhen deutet darauf hin, dass Spiralen nicht dauerhaft wachsen müssen und von der Nachbarschaft abhängen.

Zur Untersuchung von Spiralen mit mehreren Rotationen der Fasern wurde eine weitere Simulation durchgeführt. Die Simulation mit einer Grundfläche von 800×800 Zellen und einer neuen Voronoi-Verteilung wurde bis zu einer Erstarrungshöhe von 8 520 Zellen auf 13 600 Rechenkernen mit dem Hornet Supercom-

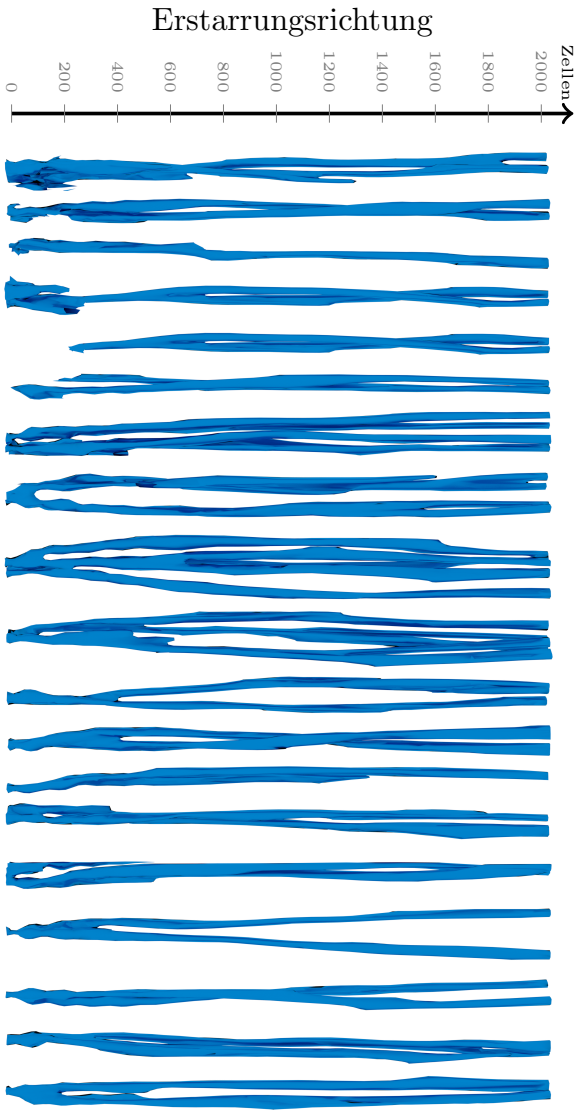


Abbildung 6.18: Auswahl an freigestellten Fasern der γ-Phase aus Abbildung 6.17. Diese Abbildungen zeigen unterschiedlich stark rotierende Fasern auf verschiedenen Höhen.

puter [176, 385] am HLRS berechnet. Das Simulationsergebnis ist in Abbildung 6.19 dargestellt. Wie zuvor bilden zwei Fasern der blauen γ-Phase in einer Helix um eine grüne β-Faser eine Spirale, die sich mehrfach dreht und in der roten α-Matrixphase eingebettet ist. Daneben sind auf unterschiedlichen Höhen vier Querschnitte parallel zur Wachstumsfront dargestellt. In den Querschnitten sind verschiedene Muster zu erkennen. Neben Kettenstrukturen [8, 229], die sich teilweise verzweigen, sind sogenannte Inselstrukturen, bestehend aus zwei bis drei Fasern, zu beobachten. Einzelne Fasern in der Matrix sind hingegen nicht stabil und werden nach einiger Zeit von der Matrixphase überwachsen. Die Fasern interagieren wie in der vorherigen Simulation während des Wachstums miteinander, indem sich Strukturen miteinander verbinden, ablösen und absterben.

In den Vergrößerungen der Querschnitte sind die Fasern der Helix links im Bild hervorgehoben. Dadurch lassen sich gegeneinander versetzte α-β-γ-Abfolgen wie in Abschnitt 6.4.1 beobachten. Diese Abfolgen führen zu einer gegenseitigen Verkippung und somit zu einer Rotation der Fasern während der Erstarrung,

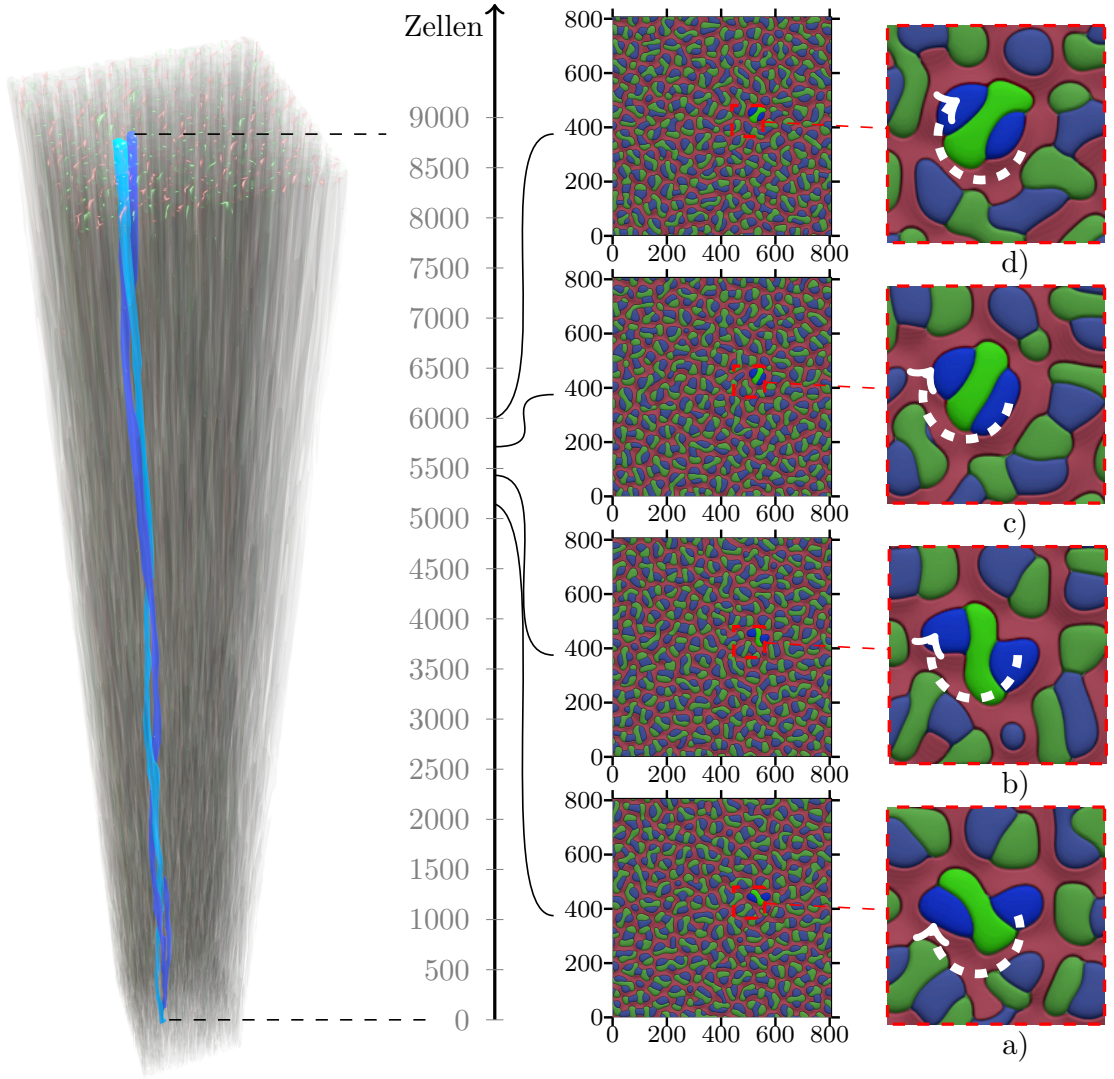


Abbildung 6.19: Simulationsergebnis des Spiralwachstums von zwei γ-Fasern (blau), die mehrfach in einem $800 \times 800 \times 8\,520$ Zellen großen Gebiet um eine β-Faser rotieren, analog zu [137]. Die Matrix α und die Fasern der β-Phase sind transparent. Die γ-Fasern sind ausgeblendet. Auf der rechten Seite ist die Mikrostruktur auf verschiedenen Höhen und die Fasern der Spirale zusätzlich vergrößert dargestellt.

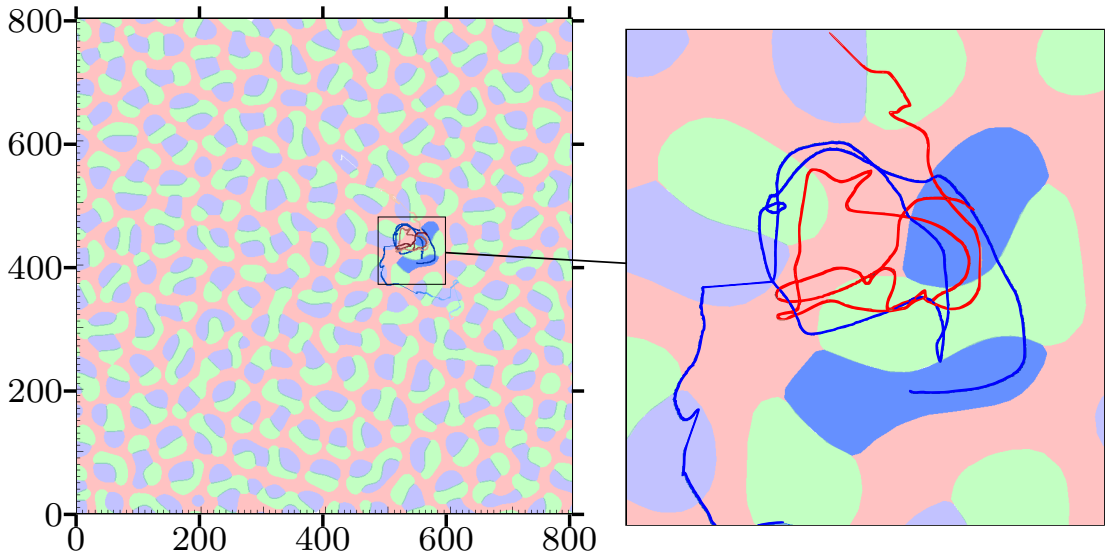


Abbildung 6.20: Projektion der Schwerpunkte der beiden Spiralfasern (blau und rot) für die Simulation aus Abbildung 6.19, basierend auf [137]. Zusätzlich ist die Mikrostruktur am Ende der Simulation bei einer Höhe von 8 520 Zellen ohne die rote Matrixphase dargestellt.

wie durch die weiß gestrichelten Pfeile dargestellt. Die grüne β-Faser sorgt während des Wachstums dafür, dass die drei Fasern zusammenbleiben und sich nicht in zwei β-γ-Strukturen aufteilen.

Für das Auffinden und die Analyse der Spiralen in 3D-Simulationen wird das in Abschnitt 6.3 vorgestellte Analysewerkzeug verwendet. Hierzu werden die Schwerpunkte der Fasern in den einzelnen Querschnitten parallel zur Erstarrungsfront auf eine Ebene projiziert. Dies erlaubt es, den Verlauf der Spiralen über die Höhe zu beobachten. In Abbildung 6.19 ist die Mikrostruktur am Ende der Simulation auf einer Höhe von 8 520 Zellen zusammen mit der Projektion der Schwerpunkte der Spirale aus Abbildung 6.19 dargestellt. Daneben ist die Projektion der Schwerpunkte der zwei Fasern der β-Phase vergrößert hervorgehoben. Zur besseren Unterscheidung sind die Schwerpunkte der beiden β-Fasern in Blau und Rot eingefärbt. In den Vergrößerungen ist zu erkennen, dass sich die Fasern mehrfach um ein gemeinsames Rotationszentrum drehen. Zudem ist im Querschnitt zu sehen, dass die Spirale am Ende der Simulation mit einer weiteren grünen Faser verbunden ist. Die geraden Teilstücke in der Projektion entstehen durch das Aufteilen einer Faser während des Wachstums, wodurch ein Sprung zwischen den Schwerpunkten entsteht. Mit Hilfe der Projektion der Faserschwerpunkte lassen sich die Bewegungen der Fasern und ihre Ereignisse einfach beobachten, was ein effizientes Auffinden von komplexen dreidimensionalen Strukturen wie Spiralen erlaubt.

Die Projektion erlaubt zudem eine quantitative Analyse der Spiralen. Die beiden Fasern drehen sich über eine Höhe von ca. 8 000 Zellen zwischen 630° und 720°. Für die Messung wurde nur der sich drehende Anteil betrachtet. Dies entspricht einer Rotationsrate von 0,078° bis 0,090° pro Zellen. Mit der Annahme eines konstanten Radius kann über die Rotationsrate die Steigung und damit ein Quasi-Kippwinkel berechnet werden. Der Durchschnittsradius der beiden Fasern beträgt etwa 37 Zellen. Hiermit ergibt sich für die Spirale ein Quasi-Kippwinkel von $\approx 3{,}1°$. Dieser ist kleiner als der kleinste Kippwinkel von 5,35° in 2D, mit den gleichen Parametern. Der kleinere Kippwinkel der Spirale resultiert aus den gegeneinander wirkenden Faseranordnungen sowie den deutlich komplexeren Nachbarschaftsbeziehungen. Die Nachbarschaft sorgt dafür, dass die gegeneinander wirkenden Faseranordnungen zueinander verschoben sind und sich damit nicht gegenseitig aufheben.

Wie in der vorherigen Simulation finden sich auch innerhalb dieser Simulation weitere Spiralen mit Drehungen von bis zu 360°, die auf unterschiedlichen Höhen beginnen. Das Verbinden und Lösen der Fasern der Spirale mit anderen Fasern beeinflusst oder blockiert dabei das Weiterrotieren. Daher ist die Anordnung

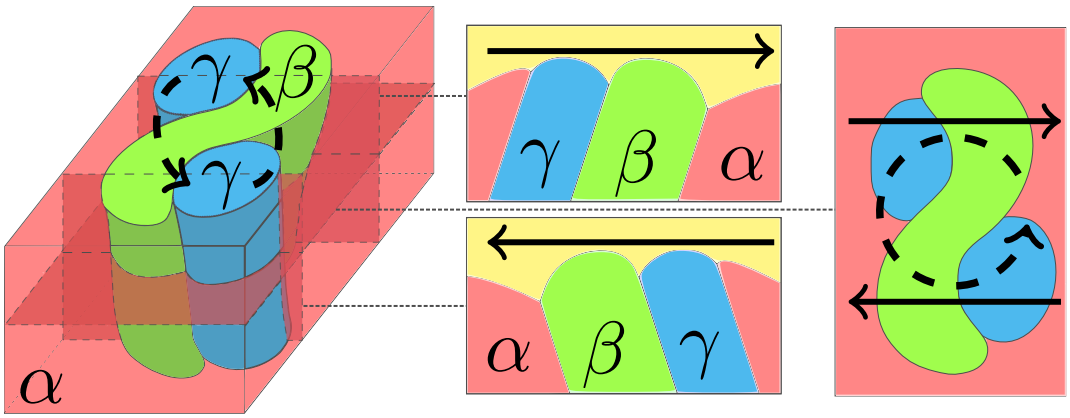


Abbildung 6.21: Schematische Anordnung der Phasen während des Spiralwachstums in 3Dnach [137]. In den konkaven Vertiefungen der $\mathcal{S}$-förmigen Faser (grün) befindet sich jeweils eine blaue Faser. Die zwei verschobenen gegenläufigen Phasenanordnungen gleichen der Anordnung des gekippten Wachstums in 2D, was während des weiteren Wachstums zum Verdrehen der $\mathcal{S}$-Struktur und somit zu einer Spirale führt.

der Phasen sowie ihre Nachbarschaft für ein stabiles Spiralwachstum wichtig. Dies ist in Übereinstimmung mit den experimentellen Schliffbildern, wie in Abbildung 6.15(a) zu sehen, in denen Spiralen nur in bestimmten Regionen parallel zur Wachstumsrichtung beobachtet werden.

6.4.2.2 Diskussion des Spiralwachstums

Wie vermutet führt das in 2D untersuchte gekippte Wachstum aus Abschnitt 6.4.1 bei einer speziellen räumlichen Anordnung der Faser sowie deren Nachbarschaft zu Spiralen in 3D. Die räumliche Anordnung der Faser ist schematisch in Abbildung 6.21 skizziert. Für eine Spirale sind eine β-Faser und zwei γ-Fasern notwendig.

Die grüne β-Faser formt dabei innerhalb der roten Matrix eine $\mathcal{S}$-förmige Struktur, wie auch in [137] beschrieben. In den konkaven Vertiefungen der $\mathcal{S}$-förmigen Faser befindet sich jeweils eine blaue Faser der Phase γ. Die γ-Fasern sind dabei rotationssymmetrisch zueinander versetzt angeordnet. Hierdurch entstehen zwei gegenläufig versetzte Paare einer α-β-γ-Anordnung, wie in der Mitte von Abbildung 6.21 dargestellt. Wie in 2D verursacht diese Phasenanordnung aufgrund des Oberflächenenergieverhältnisses eine Verkippung der Fasern während des Wachstums. Durch die gegenläufige Anordnung der Verkippungen kommt es jedoch aufgrund der $\mathcal{S}$-förmigen β-Faser zu einer Rotation der Struktur, anstatt zu einer reinen Bewegung in Kipprichtung. Während des Wachstums passiert es mehrfach, dass die beiden Phasenanordnungen gegeneinander wirken und somit die Weiterrotation gestoppt ist, wie in der Simulation Abbildung 6.19 in c) und d) zu sehen. Dieser mögliche Gleichgewichtszustand wird durch die Fasern in der Nachbarschaft gestört, wodurch weitere Drehungen möglich sind. Zudem sind die Phasenanteile und der Vernetzungsgrad der Strukturen entscheidend, damit sich eine Dreifaseranordnung in der Matrix frei bilden kann und sich nicht zu häufig mit anderen Strukturen verbindet.

6.4.2.3 Zwischenschlussfolgerungen

In dieser Studie wurde die experimentelle Vermutung von Spiralen bei der gerichteten Erstarrung des ternären eutektischen Systems Al-Ag-Cu von Genau und Ratke [227] bestätigt. Für die Überprüfung der Vermutung wurden wie in [137] großskalige dreidimensionale Phasenfeldsimulation auf Basis der Parameter

des gekippten Wachstums aus Abschnitt 6.4.1 durchgeführt, welche nur auf Hochleistungsrechnern berechnet werden konnten. Basierend auf Parametern mit hohem Kippwinkel aus Abschnitt 6.4.1 wurde Spiralwachstum mit mehreren Rotationen beobachtet. Großskalige Gebiete waren notwendig, um den Einfluss der Randbedingungen zu reduzieren. Zudem wurde mit Hilfe der Schwerpunktprojektion eine Methode zum Eruieren und Auswerten der Spiralen vorgestellt.

Zusammenfassend kann aus den beschriebenen großskaligen, dreidimensionalen Phasenfeldsimulation geschlussfolgert werden, das

(i) Spiralwachstum mit mehreren Rotationen während der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung mit Rotationsraten von bis zu 0,090° pro Zellen auftreten kann.

(ii) gekipptes Wachstum tritt wie in 2D auch in 3D für eine definierte α-β-γ-Phasenanordnung mit unterschiedlichen Oberflächenenergien der Fest-fest- und Fest-flüssig-Grenzfläche auf.

(iii) für Spiralwachstum eine spezielle Anordnung der Fasern in einer $\mathcal{S}$-förmigen Struktur mit zwei zueinander versetzten und gekippten α-β-γ-Phasenanordnungen notwendig ist. Hierzu müssen zwei Fasern der gleichen Phase und eine andere dritte Phase in einer $\mathcal{S}$-förmigen Struktur angeordnet sein, eingebettet in einer Matrix.

(iv) die Drehrichtung der Spirale wird von Anordnung der Fasern an der $\mathcal{S}$-förmige Struktur bestimmt.

(v) das Zusammenspiel der drei Fasern der Spirale und der Nachbarschaft für das stabile Wachstum eine wichtige Rolle spielt.

(vi) Spiralen auf unterschiedlichen Höhen entstehen und enden können.

(vii) aufgrund der komplexeren dreidimensionalen Struktur der (Quasi)-Kippwinkel der Spiralen kleiner ist als bei den zweidimensionalen Untersuchungen.

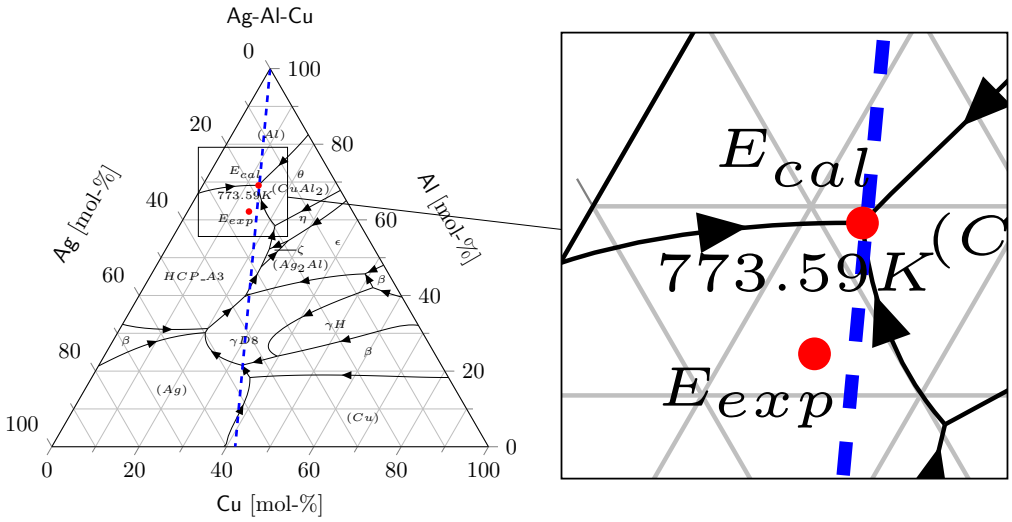
6.4.3 Musterbildung in Al-Ag-Cu

Das ternäre System Aluminium-Silber-Kupfer (Al-Ag-Cu) ist aufgrund seiner verschiedenen Eigenschaften von besonderem wissenschaftlichem Interesse [210]. So besitzt das System einen ternären eutektischen Punkt mit ähnlichen Phasenanteilen in den Festphasen und einem relativ niedrigen Schmelzpunkt von 773,59 K.

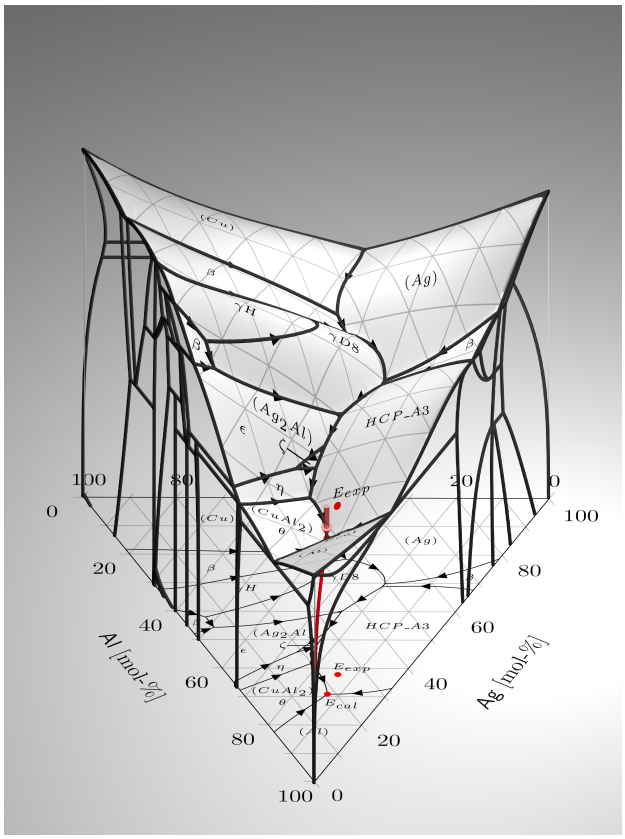
Eine thermodynamische Beschreibung des Systems Al-Ag-Cu mit der CALPHAD-Methode stammt von Witusiewicz et al. [386, 387]. Die Liquidusprojektion auf Basis dieser thermodynamischen Daten mit dem ternären eutektischen Punkt E_{cal} (roter Punkt bzw. Pfeil) ist in Abbildung 6.22 für zwei Perspektiven dargestellt. Das Phasendiagramm in Abbildung 6.23 entspricht dem blau gestrichelten Schnitt in Abbildung 6.22. Hierbei ändert sich die Löslichkeit von Ag in Al um über 50%, von 16,9% zu 8%, in einem Bereich von 20 K direkt unterhalb der ternären eutektischen Temperatur [227]. Dies ist an der rot gekennzeichneten Änderung der Phasengrenze, direkt unterhalb des ternären eutektischen Punkts E_{cal}, zu erkennen. Die Änderung der Festphasengrenze führt dabei besonders bei der Al-Phase zu unterschiedlichen Phasenanteilen bei Raumtemperatur [227, 229, 230, 282], im Vergleich zu den thermodynamisch bestimmten Anteilen. Besonders bei Experimenten mit langsamer Erstarrungsgeschwindigkeit, die für das gemeinsame Wachstum der Festphasen mit einer planaren Grenzfläche benötigt wird, resultiert diese Löslichkeitsänderung in einer signifikanten Festphasenevolution in der Mikrostruktur. Messungen der Phasenanteile bei Abschreckexperimenten in der Nähe der Erstarrungsfront weisen jedoch die thermodynamisch vorhergesagten Phasenanteile auf [281, 295].

Erste Zusammenfassungen zu den entstehenden Phasen in Al-Ag-Cu stammen von Chang et al. [388] aus dem Jahr 1977 sowie neuere Ergebnisse der letzten Jahrzehnte in [389–391]. Rosalie und Bourgeois [392] nutzen das System Al-Ag-Cu zur Untersuchung der Ausscheidungshärtung. Experimentelle Untersuchungen zur Musterbildung in Al-Ag-Cu stammen von Cooksey und Hellawell aus dem Jahr 1967 [282]. Hierbei wird jedoch eine um mehrere Größenordnungen höhere Geschwindigkeit verwendet als in den Experimenten in [227–231, 296], sowie eine nicht eutektische Zusammensetzung der Schmelze. Der Einfluss der Geschwindigkeit und der Zusammensetzung der Schmelze wird systematisch von McCartney et al. [233, 234] untersucht. Unterschiedliche Muster werden in De Wilde et al. [294] sowie in De Wilde [393] für Al-Ag-Cu berichtet. In Abschreckexperimenten wird die Musterbildung bei der ternären eutektischen Erstarrung von Al-Ag-Cu von Böyük et al. [281] mit verschiedenen Erstarrungsgeschwindigkeiten und Temperaturgradienten quer und parallel zur Erstarrungsfront untersucht. Der Einfluss auf die Musterbildung durch die Löslichkeitsänderung in verschiedenen Abständen zur Erstarrungsfront, die Erstarrungsgeschwindigkeit sowie der Einfluss von Gravitation wird von Sargin [295] in Querschnitten parallel zur Erstarrungsfront untersucht. Um den Einfluss von Konvektion durch die unterschiedlichen Dichten auf die Musterbildung zu untersuchen, wird das System im Rahmen des SETA-Projekts [297] auf der Internationalen Raumstation (ISS) mit niedrigem Gravitationseinfluss gerichtet erstarrt. Eine Charakterisierung der Muster wird von Genau und Ratke in [228] mit EBSD-Messungen der Orientierungen sowie in [227] mit Hilfe von Nächste-Nachbarn-Statistiken durchgeführt. Dennstedt und Ratke [229] charakterisierten die Muster mit Hilfe von Formfaktoren auf Basis des Faserumgangs und der Fläche in den Schliffbildern. Ein Vergleich von Phasenfeldsimulationen und experimentellen Schliffbildern mit Polfiguren wird von Dennstedt et al. [230] gezeigt. Eine dreidimensionale Rekonstruktion der Fasern in Al-Ag-Cu mit Synchrotronstrahlung ist in [138, 231] dargestellt.

Simulationen mit dem Phasenfeldmodell von Nestler et al. [66] werden von Choudhury et al. [278] für die zweidimensionale Untersuchung der Oszillationsmodi sowie zur Musterbildung in 3D durchgeführt. Diese Arbeit wird in Choudhury et al. [275] für anisotrope Fest-fest-Oberflächenenergien auf Basis des Großkanonischen Potentialmodells aus [165] fortgesetzt. Phasenfeldsimulationen zu Al-Ag-Cu werden von Apel et al. [277] für unterschiedliche Phasenanordnungen in 2D untersucht und in [118] ist eine der ersten 3D-Simulationen zur ternären eutektischen gerichteten Erstarrung von Al-Ag-Cu mit einer Kettenstruktur zu sehen. Die Musterbildung für unterschiedliche Oberflächenenergien sowie unterschiedliche ternäre eutektische Systeme wird von Choudhury [314] untersucht.



(a) Draufsicht



(b) Vogelperspektive

Abbildung 6.22: Liquidusprojektion des Systems Al-Ag-Cu basierend auf den thermodynamischen Daten von Witusiewicz et al. [386, 387] als Draufsicht und in der Vogelperspektive. Der thermodynamische ternäre eutektische Punkt ist mit E_{cal} eingezeichnet. Mit E_{exp} wird der ternäre eutektische Punkt beschrieben, der die Phasenanteile bei Raumtemperatur wie in den Experimenten von [227, 229, 230] wiedergibt.

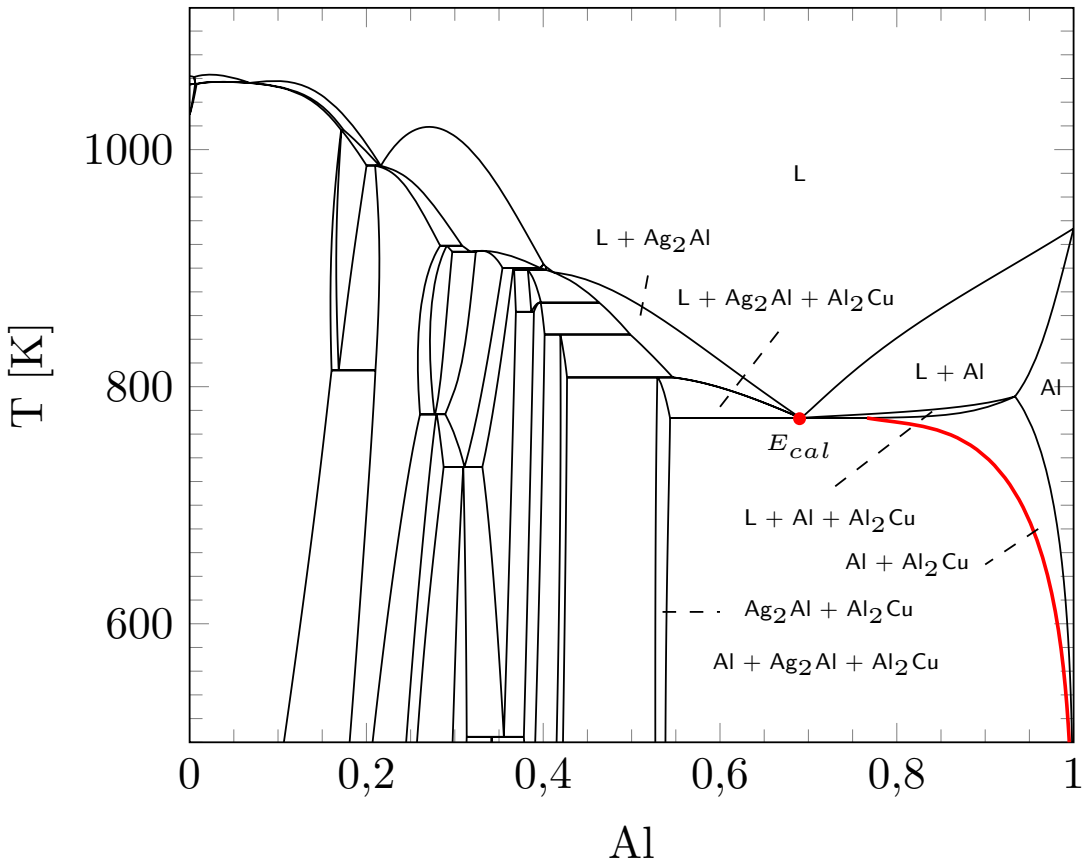
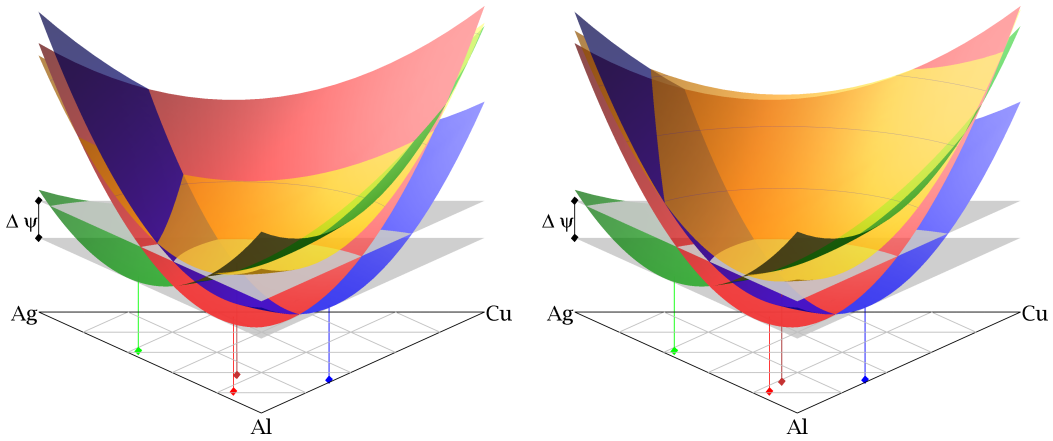


Abbildung 6.23: Schnitt durch das ternäre Phasendiagramm von Al-Ag-Cu basierend auf den thermodynamischen Daten von Witusiewicz et al. [386, 387] von der Al-Ecke durch den ternären eutektischen Punkt E_{exp}, entsprechend der blau gestrichelten Linie in Abbildung 6.22. In Rot ist die Änderung der Phasengrenze aufgrund der Löslichkeitsänderung nach der Erstarrung hervorgehoben.



(a) Gibbs-Energien auf Basis des Datensatzes CAL. **(b)** Gibbs-Energien auf Basis des Datensatzes EXP

Abbildung 6.24: Die Gibbs-Energien der beiden Datensätze CAL und EXP. Die Gibbs-Energien der Phasen sind für Al in Rot, für Ag_2Al in Grün, für Al_2Cu in Blau und für die Schmelze in Gelb dargestellt. In Grau sind die Gleichgewichtsebenen der chemischen Potentiale bei einer Unterkühlung der Erstarrungsfront eingezeichnet sowie die Projektion der Gleichgewichtskonzentrationen auf den Simplex. Die Gibbs-Energie der Schmelze ist zur besseren Übersichtlichkeit nach oben verschoben.

Der Fokus dieses Abschnitts ist die Simulation der Musterbildung in großskaligen Gebieten bei der gerichteten Erstarrung am ternären eutektischen Punkt von Al-Ag-Cu. Vor allem soll durch die großskaligen Gebiete der Einfluss der Randbedingungen auf die Musterbildung, wie in [3] gezeigt, reduziert werden. Hierzu wird sowohl die Musterbildung vor der Löslichkeitsänderung als auch die Musterbildung danach untersucht.

6.4.3.1 Simulationsparameter

Im Folgenden wird auf die physikalischen und numerischen Parameter zur Simulationen der Mikrostruktur bei der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung von Al-Ag-Cu entsprechend [8] eingegangen. Durch die Löslichkeitsänderung direkt unter dem ternären eutektischen Punkt (rote Linie in Abbildung 6.23), werden in dieser Arbeit zwei Datensätze für die Simulationen vorgestellt, um den Rechenaufwand zu reduzieren. Der eine Datensatz basiert auf den Gibbs-Energien einer thermodynamischen CALPHAD-Datenbank und wird für die Simulation der Mikrostruktur nach Abschreckexperimenten verwendet. Der andere Datensatz wird so angepasst, dass die Phasenanteile nach der Erstarrung mit denen aus experimentellen Messungen übereinstimmen, um die Änderung in der Mikrostruktur nach der Löslichkeitsänderung zu untersuchen. Die im Folgenden beschriebenen parabolischen Gibbs-Energien für die zwei ternären eutektischen Punkte sind in Abbildung 6.24 über dem Konzentrationsraum dargestellt. Die Gibbs-Energien für die Phase Al sind in Rot, für die Phase Ag_2Al in Grün, für die Phase Al_2Cu in Blau und für die Schmelze in Gelb eingefärbt. Die Gleichgewichtsebenen der chemischen Potentiale sind in Grau eingezeichnet sowie die Projektion der Gleichgewichtskonzentrationen auf den Simplex. Die Simulationen in dieser Studie sind isotherm erstarrt. Die gemeinsamen numerischen und physikalischen Parameter der zwei Datensätze sind in Tabelle 6.6 zusammengefasst. Die Oberflächenenergien werden aus [134, 288, 394, 395] bestimmt und der kinetische Koeffizient τ wird analog zu [165] über die Diffusionskonstanten und die Gibbs-Energie berechnet. Die Unterschiede in den beiden Datensätzen werden im Folgenden, basierend auf [8], genauer erläutert.

Tabelle 6.6: Zusammenfassung der in den Simulationen verwendeten Parameter aus [8].

Parameter	Wert in der Simulation	Physikalischer Wert
Numerische Parameter		
Δx	1,0	$3{,}89 \cdot 10^{-7} m$
Δt	0,032	$3{,}2 \cdot 10^{-7} s$
τ	Phase: Al, Ag_2Al, Al_2Cu, Schmelze(ℓ) Al: – 1,68 1,18 1,26 Ag_2Al: 1,68 – 0,29 0,58 Al_2Cu: 1,18 0,29 – 1,06 Schmelze(ℓ): 1,26 0,58 1,06 –	basierend auf [165]
ϵ	4,0	$1{,}56 \cdot 10^{-6} m$
Physikalische Parameter		
γ	Phase: Al, Ag_2Al, Al_2Cu, Schmelze(ℓ) Al: – 0,6 0,4 0,2 Ag_2Al: 0,6 – 0,4 0,4 Al_2Cu: 0,4 0,4 – 0,4 Schmelze(ℓ): 0,2 0,4 0,4 –	Umrechnungsfaktor für physikalischen Wert: $0{,}175 J/m^2$, basierend auf [134, 288, 394, 395]
$\boldsymbol{D}$	5,0	$2{,}4 \cdot 10^{-8} m^2/s$
Parabolische freie Energie der Festphasen		
Ξ_{Al}, ξ_{Al}, X_{Al}	$\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix}-2{,}25\\ -3{,}486\end{bmatrix}$, 1,561866	basierend auf [386, 387]
Ξ_{Ag_2Al}, ξ_{Ag_2Al}, X_{Ag_2Al}	$\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix}-3{,}104\\ -2{,}710\end{bmatrix}$, 1,427846	basierend auf [386, 387]
Ξ_{Al_2Cu}, ξ_{Al_2Cu}, X_{Al_2Cu}	$\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix}-1{,}395\\ -2{,}709\end{bmatrix}$, 0,9176	basierend auf [386, 387]

Tabelle 6.7: Zusammenfassung der Parameter, die sich in den Settings CAL und EXP unterscheiden, entsprechend [8].

Parameter	Wert in der Simulation	Physikalischer Wert und Quelle
Parameter die nur in CAL verwendet werden		
$\boldsymbol{c}_\ell$	18; 69; 13 (Ag, Al, Cu)	18; 69; 13 at-% (Ag, Al, Cu)
Phasenanteile von Al, Ag_2Al, Al_2Cu	0,54; 0,3; 0,16	0,54; 0,3; 0,16
$\Xi_\ell, \boldsymbol{\xi}_\ell, X_\ell$	$\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix}-2{,}140\\ -3{,}140\end{bmatrix}$, $3{,}9532 - 2{,}\overline{6}T$	basierend auf [386, 387]
Parameter, die nur in EXP verwendet werden		
$\boldsymbol{c}_\ell$	23,7; 62,2; 14,1 (Ag, Al, Cu)	23,7; 62,2; 14,1 at-% (Ag, Al, Cu)
Phasenanteile von Al, Ag_2Al, Al_2Cu	0,334; 0,309; 0,355	0,334; 0,309; 0,355
$\Xi_\ell, \boldsymbol{\xi}_\ell, X_\ell$	$\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix}-2{,}220\\ -2{,}980\end{bmatrix}$, $3{,}8655 - 2{,}\overline{6}T$	basierend auf [227, 229, 230, 282, 373, 386, 387]

Parameter aus der Calphad-Datenbank

Die CALPHAD-Datenbank mit den die Gibbs-Energien auf Basis der Daten von Witusiewicz et al. [386, 387] beschreibt Gleichgewichtskonzentrationen und Phasenanteile am ternären eutektischen Punkt im System Al-Ag-Cu direkt nach der Erstarrung. Experimentell existiert dieser thermodynamische Zustand der Gibbs-Energien nur für eine kurze Zeit direkt nach der Erstarrung und in einem geringen Abstand hinter der Erstarrungsfront.

Der ternäre eutektische Punkt befindet sich bei einem Stoffmengenanteil von 18 At.-% Ag, 69 At.-% Al und 13 At.-% Cu und bei einer Temperatur von 773,6K. Dieser Punkt ist in der Liquidusprojektion in Abbildung 6.22 als E_{cal} eingezeichnet. Die gefitteten parabolischen Gibbs-Energien entsprechend (3.23), auf Basis der CALPHAD-Datenbank von Witusiewicz et al. [386, 387], sind gemäß [8] in den Tabellen 6.6 und 6.7 beschrieben. Zur Erhöhung der nummerischen Stabilität sowie einer höheren Zeitschrittweite und damit einer Reduzierung des Rechenaufwands werden die Steigungen der parabolischen Gibbs-Energien reduziert. Die hieraus resultierenden parabolischen Gibbs-Energien sind in Abbildung 6.24(a) dargestellt. Die Parameter werden im weiteren Verlauf als Setting CAL bezeichnet.

Parameter aus Experimenten

Direkt unter der eutektischen Temperatur ändert sich in einem Bereich von 20 K die Löslichkeit von Ag um mehr als die Hälfte, von 16,9% auf 8%, wie in dem Schnitt durch das Phasendiagramm in Abbildung 6.23 zu sehen. Diese Änderung führt zu anderen Phasenanteilen bei Raumtemperatur, verglichen mit denen direkt nach der Erstarrung am eutektischen Punkt [227, 229, 230]. Zur Modellierung der Phasenanteile bei Raumtemperatur werden analog zu [8] im Setting EXP die parabolischen Gibbs-Energien aus Tabellen 6.6 und 6.7 so angepasst, dass die Phasenanteile mit denen aus Experimenten nach der Löslichkeitsänderung übereinstimmen. Durch die direkte Nutzung der Gibbs-Energien nach der Löslichkeitsänderung kann die deutlich langsamere Festphasenumwandlung in den Simulationen vernachlässigt werden, was den benötigten Rechenaufwand um mehrere Größenordnungen reduziert, da die Zeitschrittweite von der langsamsten Diffusionskonstante abhängt. Über die Phasenanteile nach der Löslichkeitsänderung von Al-Ag-Cu wird von verschiedenen Autoren [227, 229, 230, 282, 373] berichtet. Auf Basis dieser Phasenanteile bei niedriger Temperatur und den berichteten Konzentrationen in den Festphasen wird ein angepasstes Phasendiagramm berechnet. Da die Gibbs-Energien der Festphasen nach der Löslichkeitsänderung nahe an den Rand des Simplex wandern, führt dies zu numerischen Instabilitäten. Daher werden die Gibbs-Energien der Schmelze verschoben, was denselben Effekt auf die Phasenanteile hat. Hierdurch entsteht ein neuer ternärer eutektischer Punkt E_{exp} mit einer anderen Zusammensetzung. Für die Berechnung werden die

experimentell berichteten Phasenanteile gemittelt und daraus die Konzentrationen $\boldsymbol{c}_\ell$ für den neuen ternären eutektischen Punkt E_{exp} berechnet. Die hieraus resultierenden parabolischen Gibbs-Energien sind in Abbildung 6.24(b) dargestellt.

6.4.3.2 Simulationsergebnisse

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der zwei Parameterdatensätze auf die Musterbildung bei der ternären eutektischen Erstarrung , aufbauend auf [3, 8, 396], beschrieben. Hierzu wird eine quantitative Analyse mit einer Nächste-Nachbarn-Statistik sowie der Hauptachsenanalyse auf Basis von Zweipunktkorrelationen durchgeführt. Zudem werden die simulierten Mikrostrukturen qualitativ und quantitativ mit experimentellen Schliffbildern von Dennstedt [7] verglichen.

Die Farben der Phasen in den Querschnitten aus den Simulationen sind entsprechend den Schliffbildern aus den Experimenten eingefärbt: Al in Schwarz, Al_2Cu in Grau und Ag_2Al in Weiß. Um den Kontrast in den 3D-Bildern zu erhöhen, ist Al in Rot, Ag_2Al in Grün und Al_2Cu in Blau dargestellt.

Für eine aussagekräftig Untersuchung der Mikrostruktur wurden alle Simulationen bis zu einem stabilen Zustand simuliert. Dieser ist definiert durch eine konstante Geschwindigkeit der Erstarrungsfront und konstante Phasenanteile. Hierzu wurden die Simulationen mit $6{,}8 \cdot 10^5$ bis $2 \cdot 10^6$ Zeitschritten berechnet.

Experimentell wird bei der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung von Al-Ag-Cu eine Vielzahl an verschiedenen Mustern in der Mikrostruktur parallel zur Erstarrungsfront beobachtet, wie in Abschnitt 5.2.2 und den Arbeiten [227–231, 233, 234, 281, 282, 294–296] beschrieben. Ein typisches Muster bei langsamer Erstarrung ($\ll 1 \mu m/s$) ist das sogenannte Kettenmuster, wie im oberen Teil von Abbildung 6.25 zu sehen. Bei diesem Muster formen die beiden intermetallischen Phasen Al_2Cu und Ag_2Al die Kettenglieder, umgeben von der Al-Phase. Die Kettenstruktur zeigt zudem unterschiedliche Merkmale, wie in Abbildung 6.25(a)-(f) vergrößert dargestellt. Die Vergrößerungen in (a), (d) und (f) zeigen Ketten mit konvexen und konkaven Grenzflächen zwischen den beiden intermetallischen Phasen sowie verschiedene Ausrichtungen der Ketten. Eine Verzweigung der Kette ist in (b) hervorgehoben. In (c) ist ein Ring zu sehen und in (e) eine kurze Kette. Eine Störung in der Kette ist in (d) zu sehen.

Simulationsergebnisse des EXP-Datensatzes

Zur Untersuchung der Musterbildung mit dem Datensatz EXP werden Simulationen mit einer gesamten Gebietsgröße von 800 × 800 × 4 256 und 2 420 × 2 420 × 1 474 Zellen durchgeführt. Die Simulation mit einer Größe von 800 × 800 × 4 256 Zellen wurde auf 13 600 Rechenkernen für 16 Stunden auf dem Hermit Supercomputer [175] am HLRS durchgeführt. Die andere Simulation wurde mit 84 700 Rechenkernen für 7 Stunden auf dem Hornet Supercomputer [176] am HLRS berechnet. Basierend auf [3, 8] werden im Folgenden die Simulationsergebnisse untersucht.

Das Simulationsergebnis am Ende der $2\,420 \times 2\,420 \times 1\,474$ Zellen großen Phasenfeldsimulation ist im unteren Teil von Abbildung 6.25 dargestellt. Die Reihenfolge der Merkmale (A) bis (F) in Abbildung 6.25 ist die gleiche wie die der experimentellen Mikrostruktur (a)-(f). Beide Mikrostrukturen, experimentell und simulativ, zeigen entsprechend [8] optisch ähnliche Kettenmuster und es finden sich die gleichen Merkmale. Neben der insgesamt guten Übereinstimmung zwischen der simulierten und experimentellen Mikrostruktur gibt es einige Unterschiede. Im Experiment sind die Kettenstrukturen zum Großteil in eine Richtung ausgerichtet. In der Simulation finden sich zudem mehrere kurze unabhängige Ketten. Die durchschnittliche Phase am Ende einer Kette in der Simulation, meistens Ag_2Al, unterscheidet sich von der experimentellen Mikrostruktur, welche meistens der Al_2Cu-Phase entspricht. Daher sind in (e) und (E) unterschiedliche Phasen am Kettenende zu sehen. In den Simulationen ändert sich zudem die Breite der Ketten entlang der Al_2Cu-Ag_2Al-Grenzfläche um etwa einen Faktor zwei, wohingegen sie im experimentellen Schliffbild nahezu konstant ist. Durch die variierende Kettenbreite entsteht ein lamellenartiges Erscheinungsbild in den Simulationen. Die Grenzflächen von Ag_2Al zu Al_2Cu bilden wie in dem experimentellen Schliffbild meist

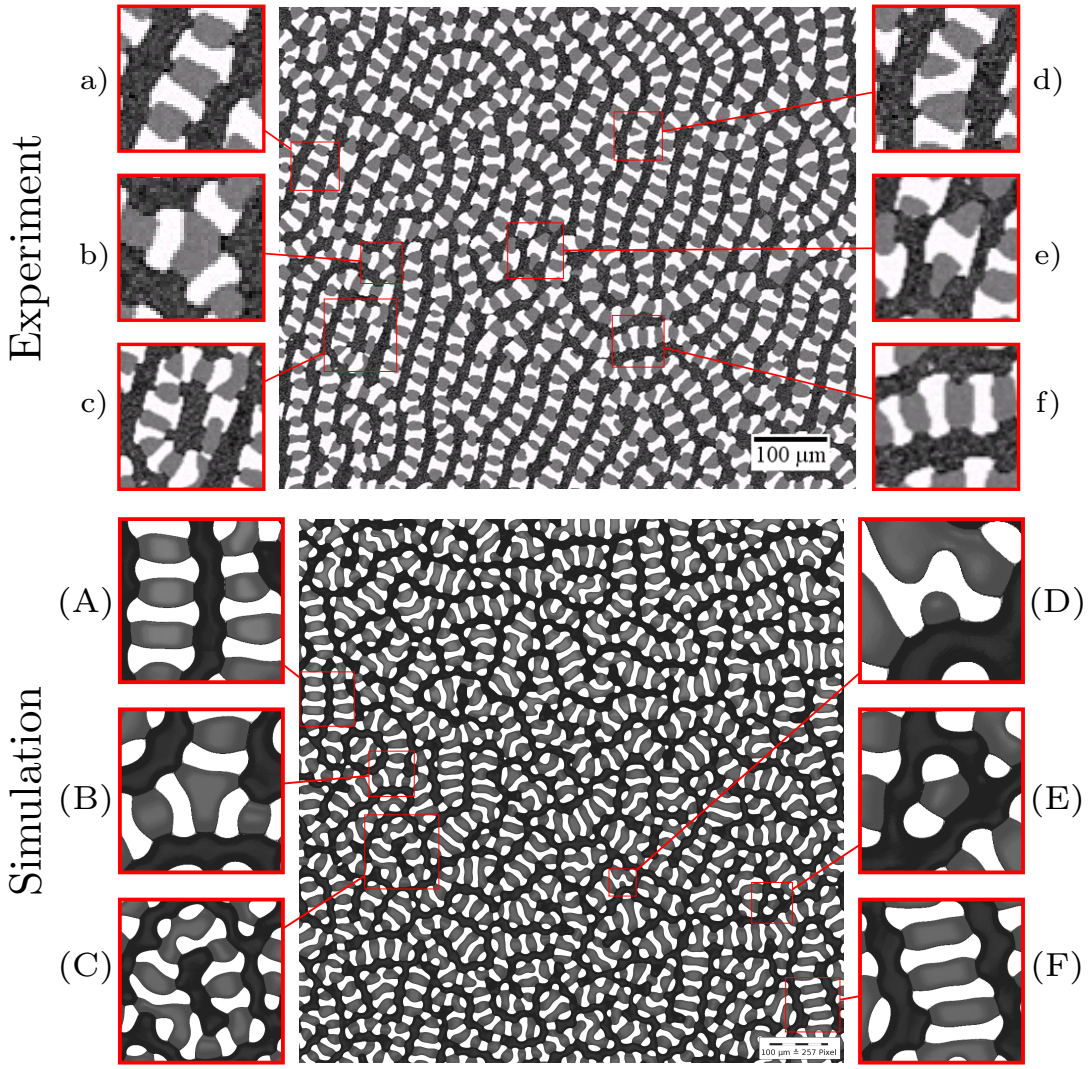


Abbildung 6.25: Schliffbild aus Experiment (oben) und simulierte Mikrostruktur (unten), basierend auf [8]. Beide Schliffbilder zeigen die Mikrostruktur einer gerichtet erstarrten Al-Ag-Cu-Legierung am ternären eutektischen Punkt. In Schwarz ist die Phase Al, in Grau Al_2Cu und in Weiß Ag_2Al dargestellt. Beide Mikrostrukturen zeigen Kettenmuster. Die Geschwindigkeit des Temperaturgradienten im Experiment war $0{,}08\,{}^{\mu m}/_{s}$ und die Steigung $2{,}2\,{}^{K}/_{mm}$.Das experimentelle Schliffbild stammt von Dennstedt [7].

eine konkave Form aus, wie in Abbildung 6.25 (a) und (A) zu sehen. Abhängig von der Länge der Grenzfläche zwischen Al_2Cu und Ag_2Al ändert sich das Vorzeichen in der Krümmung entlang der Grenzfläche, wie in Abbildung 6.25 (f) und (F) gezeigt. Die Grenzfläche zwischen Ag_2Al und Al wölbt sich sowohl im experimentellen wie auch im simulativen Schliffbild in die Matrixphase. Die Wölbung der Grenzfläche ist in den simulativen Schliffbildern ausgeprägter.

Die sich entwickelnde Mikrostruktur auf unterschiedlichen Wachstumshöhen ist für die kleinere Phasenfeldsimulation in Abbildung 6.26 zu sehen. Ausgehend von der Voronoi-Struktur bilden sich bereits nach einem Wachstum von 1 000 Zellen Kettenstrukturen aus. Die Mikrostrukturen auf den einzelnen Ebenen zeigen ein vernetztes Kettenmuster, das sich über die Wachstumshöhen deutlich verändert. Die Fasern und Lamellen in 3D sowie deren Umordnung sind in den Abbildungen 6.26 und 6.27 sowie einzeln für die beiden intermetallischen Phasen Al_2Cu und Ag_2Al in Abbildung 6.29 zu sehen. Die Umordnung der Fasern in den Querschnitten ist in 3D durch verschiedene Ereignisse der Fasern begleitet.

Neben den Mustern der Querschnitte können während der Mikrostrukturentwicklung weitere Informationen durch das Untersuchen der Ereignisse einzelner Fasern gewonnen werden. In Abbildung 6.28 sind die Fasern der zwei Phasen Ag_2Al und Al_2Cu freigestellt. Hieran kann die Entwicklung der Mikrostruktur von der initialen Voronoi-Struktur bis zum stabilen Wachstum in 3D beobachtet werden. Über die Wachstumshöhe ist mehrfach das Verzweigen, das Überwachsen und das Zusammenwachsen von Fasern zu sehen. Diese Ereignisse erlauben es den Fasern, sich während der Erstarrung umzuordnen. In Abbildung 6.29 sind die Ereignisse für die Fasern der zwei Phasen Ag_2Al und Al_2Cu sowie die entsprechende Fläche parallel zur Erstarrungsfront vor dem Ereignis über die Wachstumshöhe dargestellt. Hierbei lässt sich für beide Phasen ein Bereich für die Fläche der Fasern erkennen, in dem sich diese aufteilen ⬅. Die Bereiche für das Aufteilen der Fasern passen zur Jackson-Hunt-Theorie [215], welche eine optimale Breite der Lamellen in 2D vorhersagt, was in 3D einer Fläche entspricht. Werden die Fasern in der Fläche zu groß, beginnen diese instabil zu werden und zu oszillieren. Dies kann auf die zu lang werdenden Diffusionspfade zurückgeführt werden, wodurch nicht mehr genügend Material der entsprechenden Konzentration ins Zentrum gelangt. Um diesen Mangel auszugleichen, teilen sich die Fasern auf. Für zu kleine Flächen sind die Diffusionspfade kurz genug, weshalb genügend Material nachfließen kann und daher kein Aufteilen notwendig ist. Hierbei ist in den beiden Phasen ein deutlicher Unterschied zwischen den Flächen zu sehen. Für Ag_2Al teilen sich die Fasern bei einer Fläche von etwa 1 500 bis 5 500 Zellen^2 bzw. 583,5 μm^2 bis 2139,5 μm^2 auf, wohingegen sich die Al_2Cu-Fasern im Bereich von etwa 2 500 bis 10 000 Zellen^2 bzw. 972,5 μm^2 bis 3890 μm^2 aufteilen. Das Verhältnis der Flächen der beiden Phasen zueinander entspricht auch etwa dem Verhältnis der beiden Phasenanteile. Über die schwarzen Linien zeigt die Darstellung in Abbildung 6.29, dass ein Großteil der sich aufteilenden Fasern überwachsen ⬆ wird. Wie über die Steigung der Linien zwischen ⬅ und ⬆ zu erkennen, geschieht dies unterschiedlich schnell, wobei kein eindeutiger Trend zu beobachten ist. Dieses Verhalten ist auch optisch in den Freistellungen in Abbildung 6.28 zu erkennen. Das Zusammenwachsen ➡ von Fasern tritt für beide Phasen im Verhältnis selten auf. Nur am Anfang der Simulation (< 500 Zellen) wachsen mehrere Fasern zusammen, da sich von einer Voronoi-Verteilung, die kleiner als der Faserdurchmesser ist, ein stabiles Muster einstellen muss. Außerdem zeigt diese Darstellung, dass trotz stabilen Wachstums der Muster mit konstanten Phasenanteilen regelmäßig verschiedene Ergebnisse auftreten.

Für eine quantitative Analyse der Mikrostruktur werden neben den übereinstimmenden Phasenanteilen entsprechend [8] die Nächste-Nachbarn-Statistiken zwischen Simulation und Experiment untersucht. Hierzu werden im Folgenden die nächsten Nachbarn zwischen den zwei intermetallischen Phasen Ag_2Al und Al_2Cu betrachtet. Durch die nahezu durchgängige Matrixphase Al ist die Anzahl der Al-Nachbarn um Ag_2Al und Al_2Cu meistens eins, weshalb die Statistiken von und zu Al nicht dargestellt werden. Für die Statistiken bei einem Kettenmuster kann ein Nachbar als Kettenende oder Kettenanfang, zwei Nachbarn als Kettenglied und mehr als zwei Nachbarn als Verzweigungen interpretiert werden. Die Nächste-Nachbarn-Statistiken am Ende der beiden Simulationen mit dem Parameterdatensatz EXP und dem experimentellen Schliffbild aus Abbildung 6.25 sind in Abbildung 6.30 dargestellt. Beide Statistiken zeigen einen ähnlichen Verlauf der nächsten Nachbarn mit jeweils einem Maximum bei zwei Nachbarn, wie es für Kettenstrukturen zu erwarten ist. Neben den ähnlichen Verläufen weisen die Statistiken in Abbildung 6.30 Unterschiede in den Anteilen der nächsten Nachbarn auf. Kettenanfänge bzw. Kettenenden werden im experimentellen

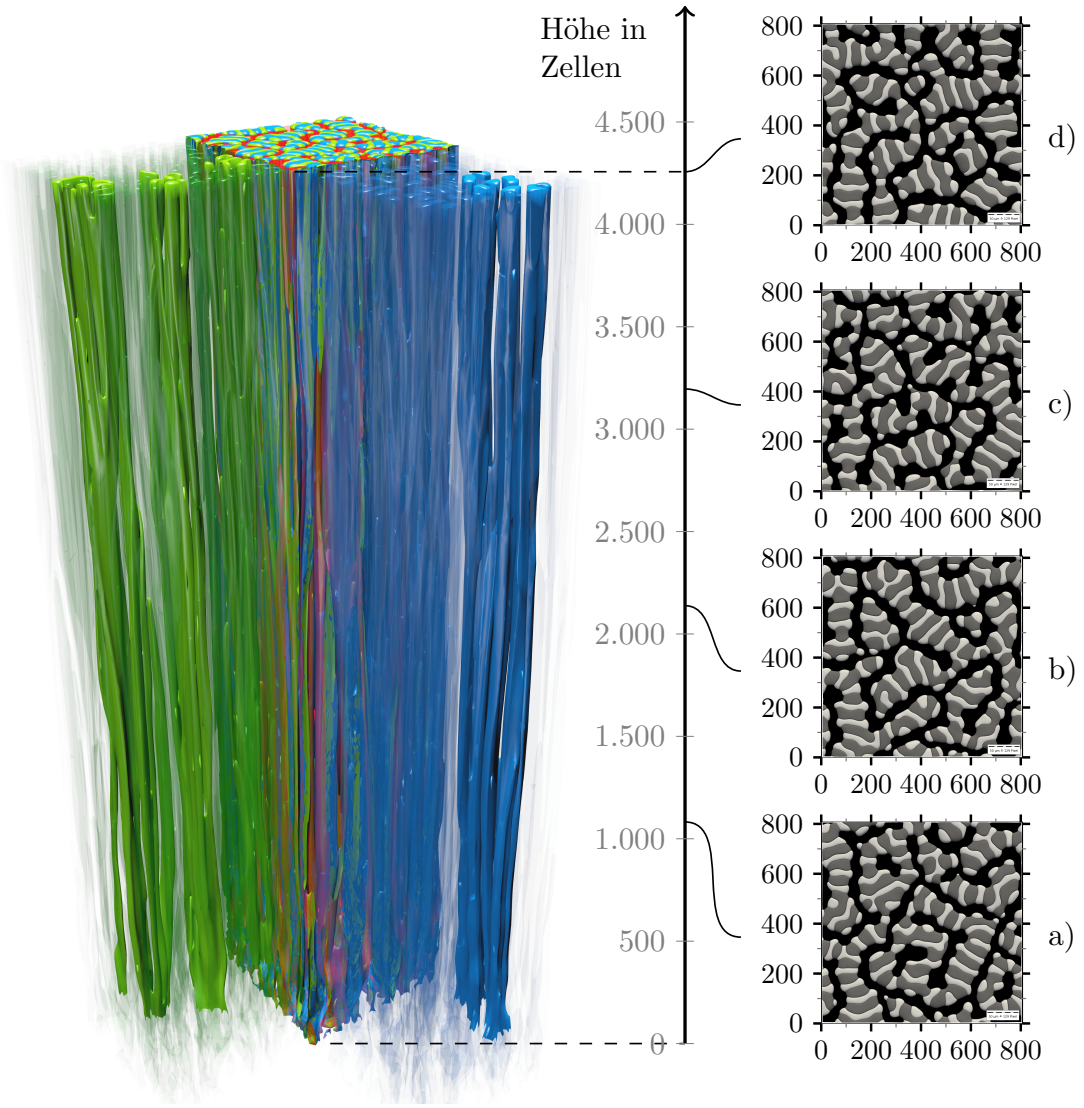


Abbildung 6.26: Simulation auf Basis der Parameter EXP mit einer Grundfläche von 800^2 Zellen, basierend auf [315]. Links ist die gesamte Mikrostruktur in 3D zu sehen. Die beiden Festphasen Al_2Cu und Ag_2Al sind zudem freigestellt. Rechts ist die Mikrostruktur auf verschiedenen Höhen parallel zur Erstarrungsfront dargestellt.

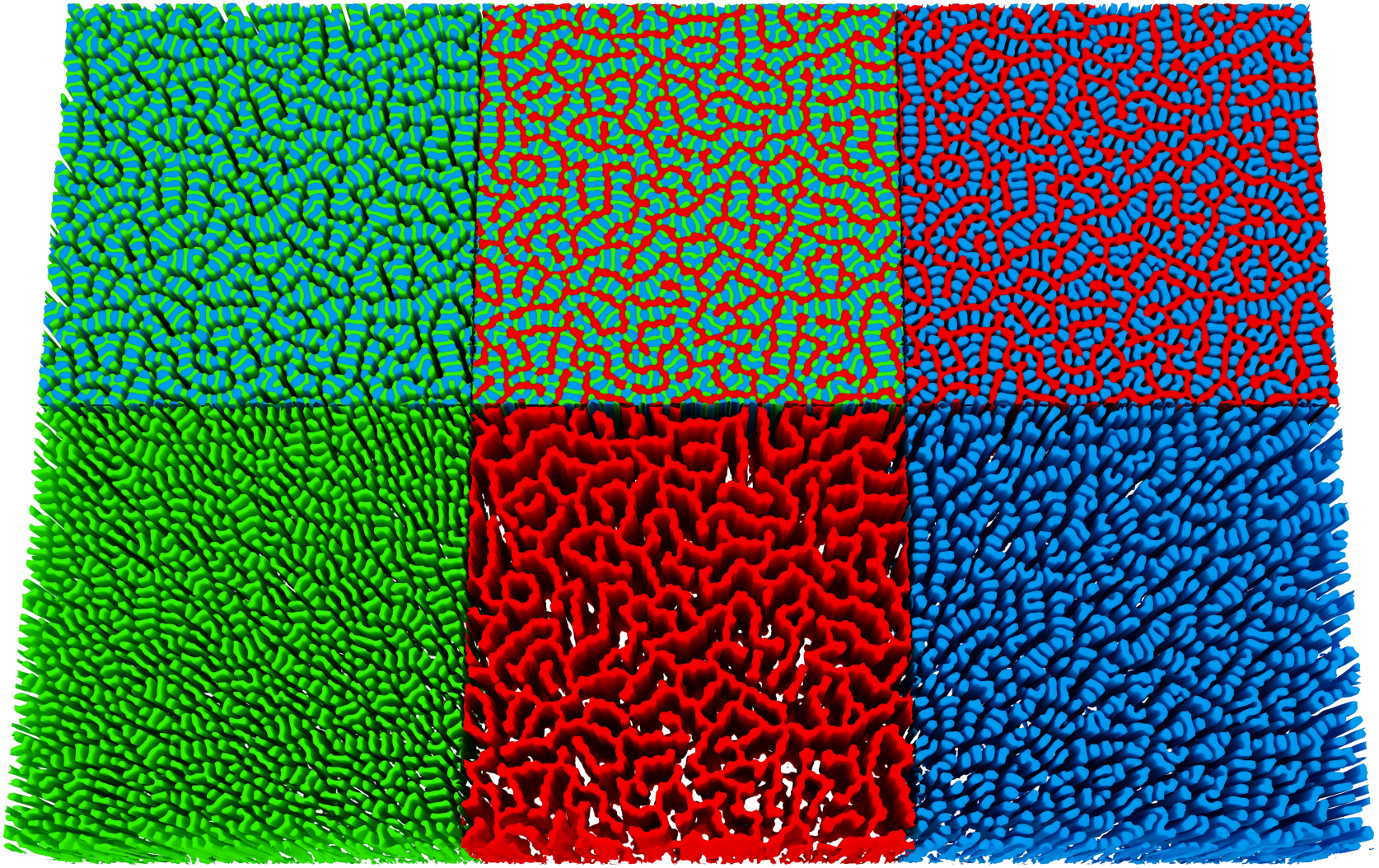
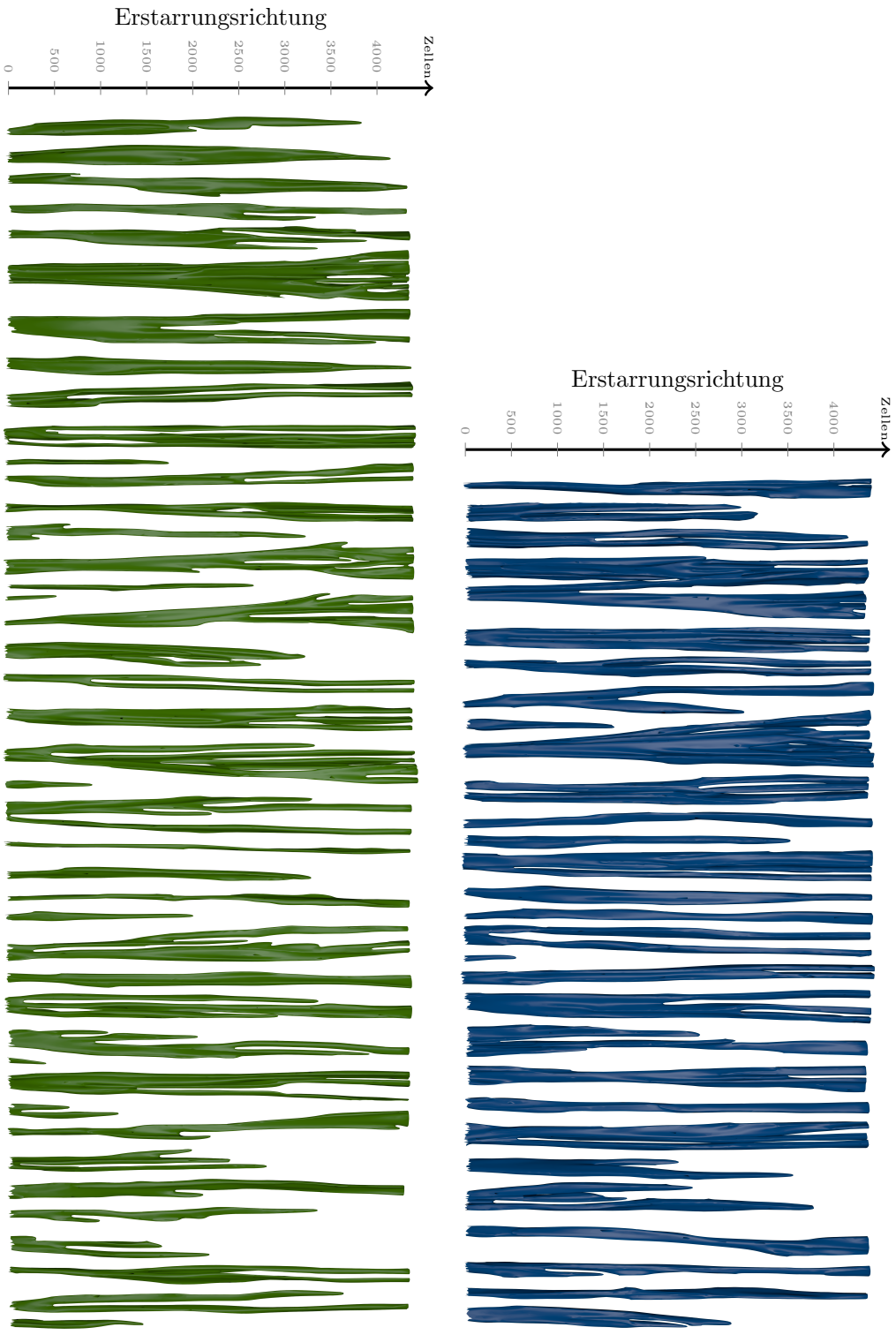
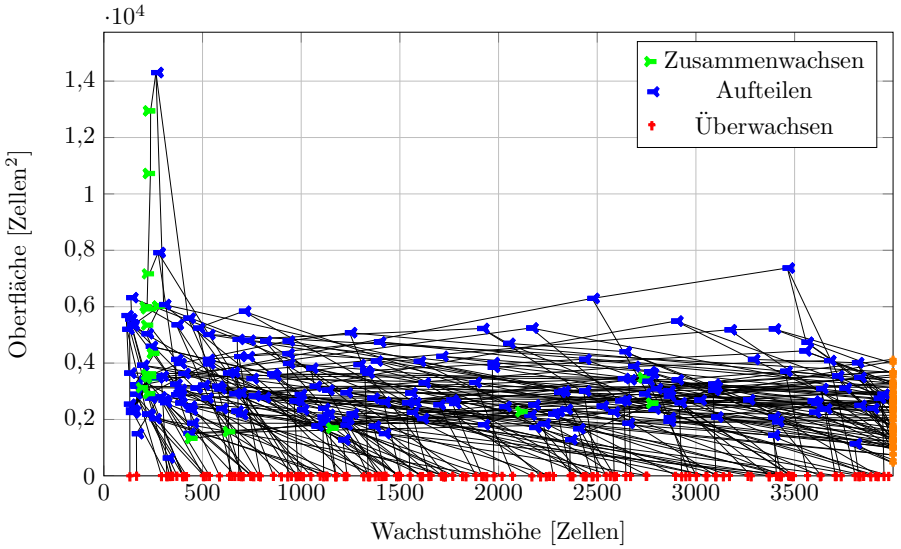


Abbildung 6.27: Simulationsergebnisse der Festphasen auf Basis der Parameter EXP und mit einer Grundfläche von $2\,420^2$ Zellen. In der vorderen Reihe sind die drei Festphasen nebeneinander, links Ag_2Al, zentral Al und rechts Al_2Cu sowie dahinter in Kombinationen daraus dargestellt.

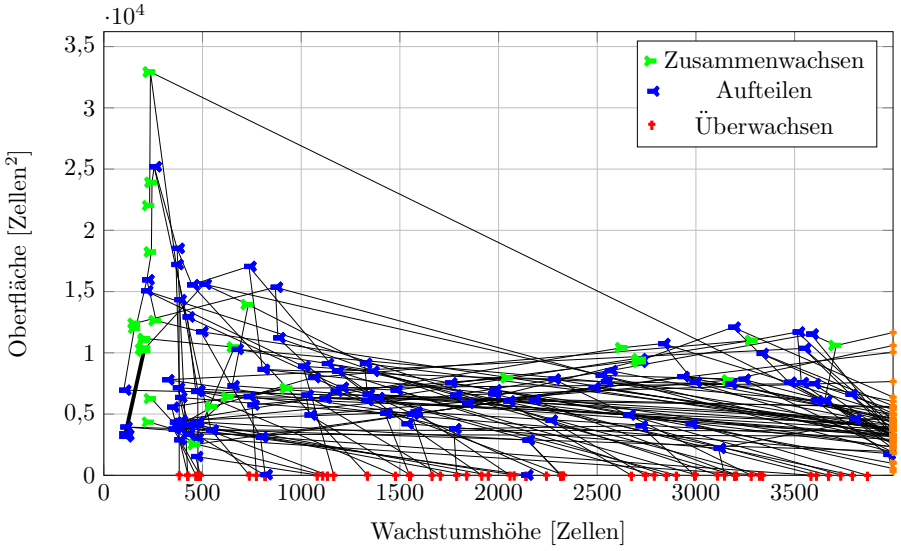


(a) Ag_2Al-Fasern in 3D **(b)** Al_2Cu-Fasern in 3D

Abbildung 6.28: Freigestellte Fasern der beiden Festphasen Al_2Cu und Ag_2Al für die Parameter EXP in 3D. Die Wachstumsrichtung ist von links nach rechts.

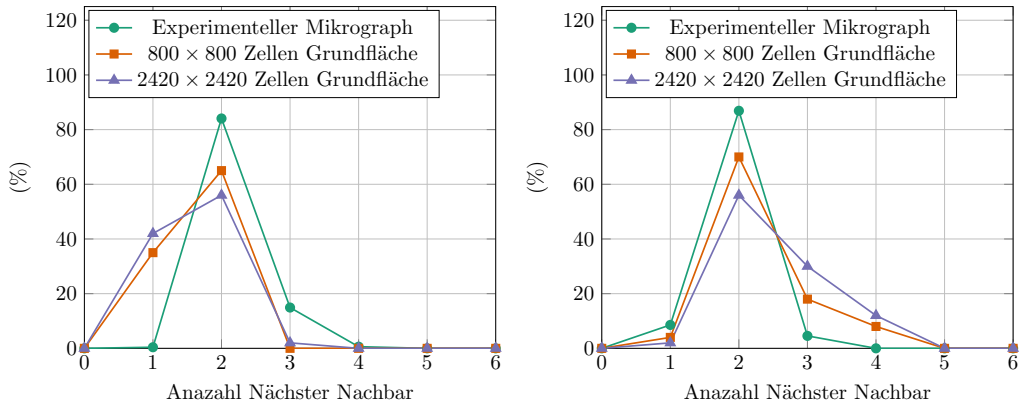


(a) Ereignisse in den Ag_2Al-Fasern



(b) Ereignisse in den Al_2Cu-Fasern

Abbildung 6.29: Ereignisse sowie Größe der Fasern über deren Wachstumshöhe für den Datensatz EXP.



(a) Nächste Nachbarn von Al_2Cu-Phasen um eine Ag_2Al-Phase.

(b) Nächste Nachbarn von Ag_2Al-Phasen um eine Al_2Cu-Phase.

Abbildung 6.30: Gegenseitige Nächste-Nachbarn-Statistiken basierend auf [8] für die Phasen Ag_2Al und Al_2Cu für die beiden Simulationen mit dem Parameterdatensatz EXP und das experimentelle Schliffbild.

Schliffbild mit etwa 10 % von der Ag_2Al-Phase gebildet, wohingegen nahezu keine Al_2Cu-Phase mit einem Nachbar vorhanden ist. Allgemein ist die Anzahl an Kettenanfängen bzw. Kettenenden in den Simulationsergebnissen größer, was mehr Kettenteilen entspricht. Der Anteil bei zwei Nachbarn ist im experimentellen Schliffbild mit über 80 % höher als in den Simulationen mit mindestens 56 %. Dies entspricht der optischen Beobachtung einer geordneteren und kontinuierlicheren Struktur der Ketten im Experiment. Mehr als zwei Nachbarn, sogenannte Verewigungen, werden im experimentellen Schliffbild hauptsächlich bei Ag_2Al beobachtet, während sie in den simulierten Schliffbildern fast ausschließlich bei Al_2Cu zu sehen sind. Im experimentellen Schliffbild ist dieser Anteil kleiner und liegt hauptsächlich bei der Ag_2Al-Phase. Der Anteil bei mehr als vier Nachbarn in Abbildung 6.30(b) deutet in den Simulationen auf ein komplexeres Verzweigungsverhalten der Ketten hin.

Simulationsergebnis auf Basis des CAL-Datensatzes

Basierend auf der guten Übereinstimmung des Datensatzes EXP wird im Folgenden, entsprechend [8], versucht die Mikrostruktur wie sie sich direkt nach der Erstarrung entwickelt zu simulieren. Experimentell kann diese nur mit Abschreckexperimenten untersucht werden. In Abbildung 6.31 ist eine Simulation mit dem CAL-Datensatz in einem 800 × 800 × 3 930 Zellen großen Gebiet in 3D sowie auf verschiedenen Höhen parallel zur Erstarrungsfront dargestellt. Für die Simulation wurden 13 600 Rechenkerne für 6 Stunden auf dem Hornet Supercomputer [176] genutzt. Durch die Nutzung der Gibbs-Energien, wie sie in der CALPHAD-Datenbank von Witusiewicz et al. [386, 387] hinterlegt sind, unterscheiden sich die Konzentrationen im Datensatz CAL in der Schmelze. Hierdurch bilden sich andere Muster, verglichen mit den Simulationen mit dem Datensatz EXP. Dies ist in Übereinstimmung mit Steinmetz et al. [316], wo bereits für eine Änderung von weniger als 1 % eine Musteränderung beobachtet wird. Durch diese Änderung bilden sich kurze Ketten-, Tatzen- und Inselstrukturen, bestehend aus zwei bis 16 Fasern der beiden intermetallischen Phasen aus, eingebettet in die kontinuierliche Al-Matrix. Die Grenzflächen zwischen den intermetallischen Phasen ist nicht wie beim Datensatz EXP lang gezogen. Die Fasern der Phase Al_2Cu bilden vermehrt rundliche Formen an der Grenzfläche zwischen Ag_2Al und Al, was eher den Tatzenstrukturen entspricht. Wie bei der vorherigen Simulation stellt sich bereits nach einem Wachstum von 1 000 Zellen ein stabiles Muster ein, das sich jedoch über die weitere Simulationshöhe verändert. Die Mikrostrukturentwicklung über die gesamte Wachstumshöhe ist beispielhaft rechts in den Schliffbildern in Abbildung 6.31 dargestellt. Die Veränderung der Mikrostruktur geschieht wie beim Datensatz EXP trotz eines stabilen Wachstums mit konstanten Phasenanteilen und konstanter Erstarrungsgeschwindigkeit. Wie im späteren Verlauf der Simulation zu sehen, sind zudem einige Fasern der Ag_2Al-Phase teilweise oder vollständig von der Al_2Cu-Phase umgeben, anstelle der Al-Matrix. Dies wird auch in Experimenten beobachtet [296].

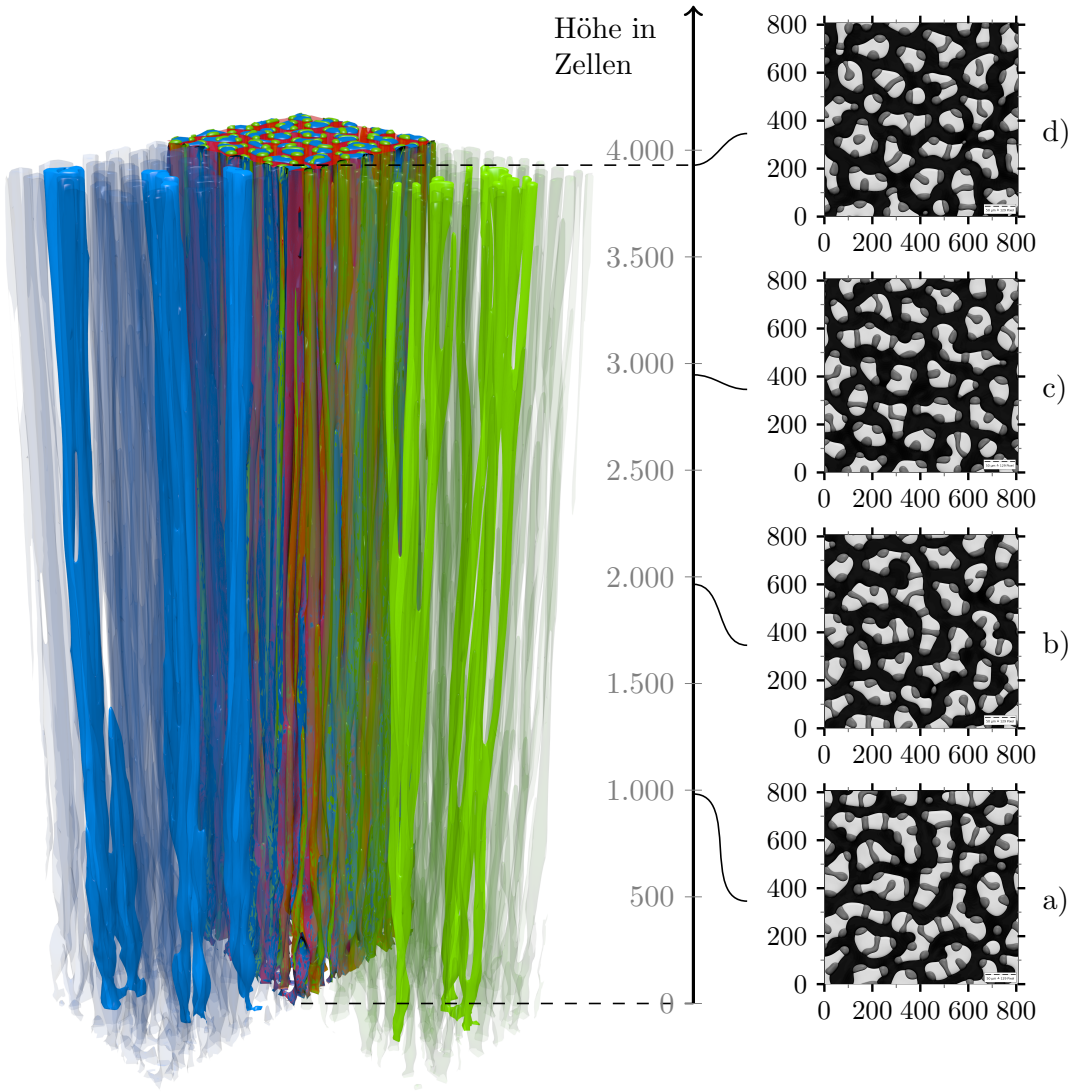


Abbildung 6.31: Simulation auf Basis der Parameter CAL mit einer Grundfläche von 800^2 Zellen. Links ist die gesamte Mikrostruktur in 3D zu sehen. Die beiden Festphasen Al_2Cu und Ag_2Al sind zudem freigestellt. Rechts ist die Mikrostruktur auf verschiedenen Höhen parallel zur Erstarrungsfront dargestellt.

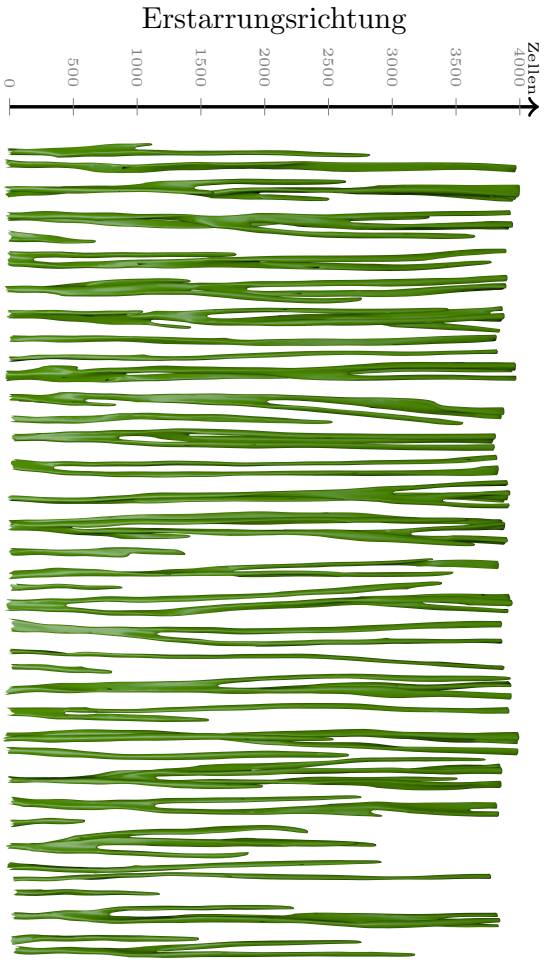
Verglichen mit den Schliffbildern in [295] nach Abschreckexperimenten und Simulationen mit zellulären Automaten bilden sich in den Phasenfeldsimulationen andere Muster aus. Für deutlich höhere Erstarrungsgeschwindigkeiten werden in [295] Kettenstrukturen beobachtet mit unterschiedlich breiten Kettengliedern zwischen den intermetallischen Phasen. Zudem bilden die Kettenglieder eine rechteckige Form aus, anstatt einer geschwungen Form wie nach der Löslichkeitsänderung. Der Unterschied zwischen den Strukturen in [295] und den Phasenfeldsimulationen kann an anderen Oberflächenenergien sowie den höheren Erstarrungsgeschwindigkeiten liegen. Für eine genaue Untersuchung sind weitere Parameterstudien notwendig.

Ähnlich wie bei der Mikrostrukturentwicklung des Datensatzes EXP kann das Verzweigen ➡, das Überwachsen ⬆ und das Zusammenwachsen ⬅ der Fasern beobachtet werden. Zur Verdeutlichung ist dies in Abbildung 6.32 für ausgewählte Fasern zu sehen. Wie auch in der vorherigen Studie bildet sich, wie in Abbildung 6.33 dargestellt, ein Bereich für die Fläche der Fasern aus, in dem sich die Fasern verzweigen. Im Gegensatz zum Verhalten im vorherigen Datensatz wachsen die meisten der sich aufgeteilten Al_2Cu-Fasern wieder zusammen, anstatt überwachsen zu werden. Die Fasern der Ag_2Al-Fasern wachsen hingegen nicht zusammen. Der Bereich der Flächen, in dem sich die Fasern aufteilen, liegt für Ag_2Al bei etwa 1 500 bis 2 700 Zellen^2 bzw. 583,5 μm^2 bis 1050,3 μm^2 und bei Al_2Cu bei etwa 9 000 bis 12 000 Zellen^2 bzw. 3501 μm^2 bis 4668 μm^2. Für die Fasern der Al_2Cu-Phase ist nach dem Aufteilen häufig ein direktes Überwachsen eines der neuen Faserteile zu beobachten, was an den senkrechten schwarzen Linien zu erkennen ist. Dies ist auch in der Freistellung der Faser in Abbildung 6.32(b) zu erkennen. Das Überwachsen der Ag_2Al-Fasern dauert hingegen länger, was ebenfalls in der Freistellung der Faser in Abbildung 6.32(a) zu beobachten ist. Trotz des stabilen Wachstums der Fasern treten verschiedene Ereignisse über die gesamte Wachstumshöhe auf.

Die Nächste-Nachbarn-Statistik in Abbildung 6.34 zeigt entsprechend [8] die gegenseitige Anzahl der nächsten Nachbarn zwischen den zwei intermetallischen Phasen Al_2Cu und Ag_2Al. In den Statistiken sind die beiden Simulationen mit den Datensätzen CAL und EXP für die Grundfläche von 800^2 Zellen zu sehen, da keine entsprechenden experimentellen Bilder mit ähnlichen Erstarrungsgeschwindigkeiten für einen Vergleich zur Verfügung standen. Aufgrund der unterschiedlichen Muster ist eine Interpretation der Statistik wie bei den Kettenstrukturen nicht möglich, weshalb nicht von der Anzahl an Nachbarn auf ein Muster geschlossen werden kann. Wie bereits zuvor werden die Statistiken mit der Al-Phase vernachlässigt. Im Vergleich zu den Nächsten-Nachbarn-Statistiken mit dem Datensatz EXP unterscheiden sich die Verläufe zum Datensatz CAL. Die Anzahl an Nachbarn von Al_2Cu-Phasen um eine Ag_2Al-Phase ist in Abbildung 6.34(a) dargestellt. Das Maximum für den Datensatz CAL liegt bei einem Nachbar mit einem Anteil von 90 %, wohingegen es bei EXP bei zwei Nachbarn liegt, mit einem Anteil von 65 %. Mehr als zwei Nachbarn werden für keinen der beiden Datensätze beobachtet. Die Nächste-Nachbarn-Statistik mit dem Anteil an nächsten Nachbarn von Al_2Cu-Phasen um eine Ag_2Al-Phase ist in Abbildung 6.34(b) gezeigt. Hier liegen die beiden Maxima bei zwei Nachbarn, jedoch ist der Anteil bei der Simulation mit dem Datensatz CAL mit 50 % geringer als bei EXP mit einem Anteil von 70 %. Der höhere Anteil an einem und drei Nachbarn in CAL deutet, wie auch optisch zu beobachten, auf weniger vernetzte Strukturen hin.

6.4.3.3 Quantitativer Vergleich der gesamten Mikrostruktur

Ein quantitativer Vergleich der gesamten Mikrostruktur wird in [3] durchgeführt. Darin werden die Schliffbilder aus Phasenfeldsimulationen mit den Datensätzen EXP und CAL sowie aus Experimenten von Dennstedt [7] miteinander verglichen. Die Schliffbilder parallel zur Erstarrungsfront werden dazu mit Hilfe der Hauptachsenanalyse (PCA) auf Basis von Zweipunktkorrelationen untersucht. In Abbildung 6.35 sind die verschiedenen Schliffbilder der hier gezeigten Simulationen und Experimente in den ersten drei PC-Achsen (PC1, PC2 und PC3), welche den Achsen mit der höchsten Signifikanz entsprechen, dargestellt. Hierbei ist eine gute quantitative Übereinstimmung zwischen den Experimenten (Schwarz) und den Simulationen mit dem Datensatz EXP (Rot) zu sehen. Beide Punktwolken aus experimentellen und simulativen Schliffbildern überlagern sich in beiden Diagrammen. Für den Datensatz CAL liegen die Punkte in der PC1-Achse

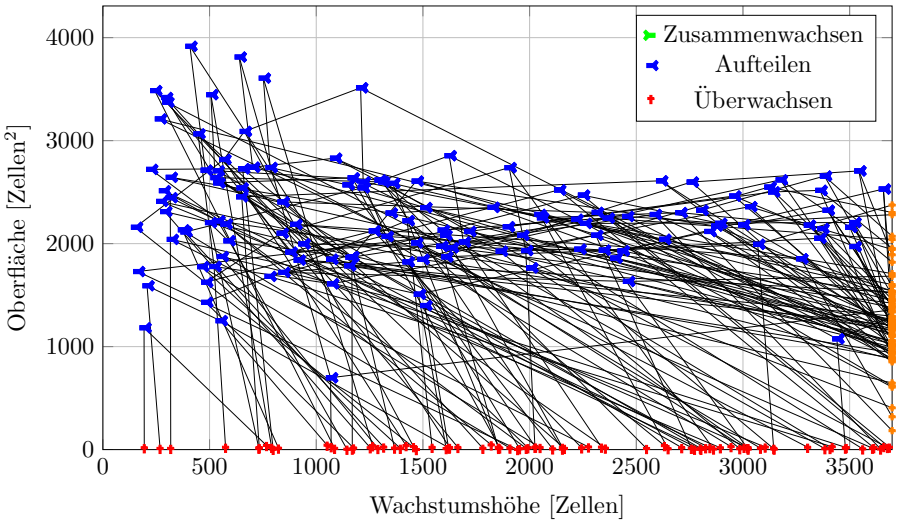


(a) Ag_2Al-Fasern in 3D

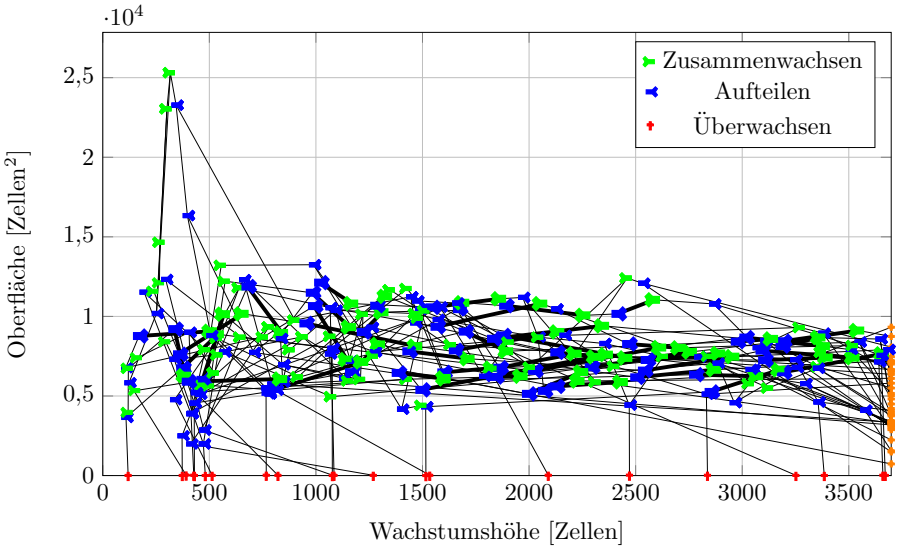


(b) Al_2Cu-Fasern in 3D

Abbildung 6.32: Freigestellte Fasern der beiden Festphasen Al_2Cu und Ag_2Al für die Parameter CAL in 3D. Die Wachstumsrichtung ist von links nach rechts.

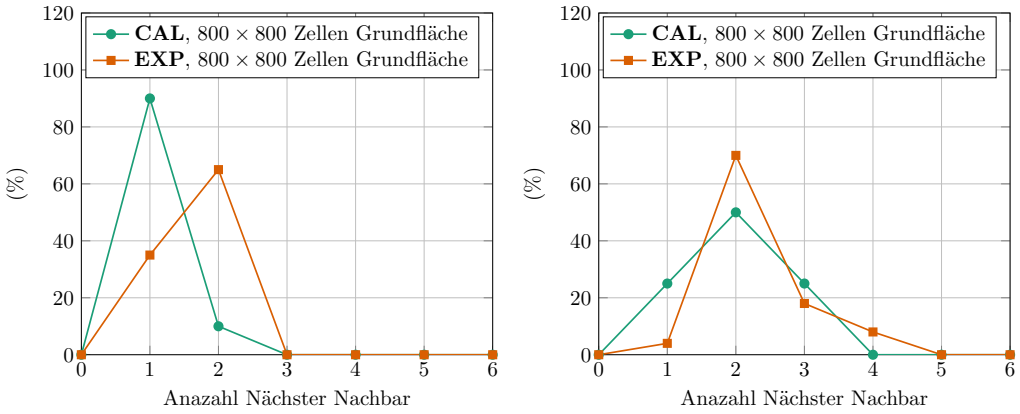


(a) Ereignisse in den Ag_2Al-Fasern



(b) Ereignisse in den Al_2Cu-Fasern

Abbildung 6.33: Ereignisse sowie Größe der Fasern über deren Wachstumshöhe für den Datensatz CAL.



(a) Nächste Nachbarn von Al_2Cu-Phasen um eine Ag_2Al-Phase.

(b) Nächste Nachbarn von Ag_2Al-Phasen um eine Al_2Cu-Phase.

Abbildung 6.34: Gegenseitige Nächste-Nachbarn-Statistiken basierend auf [8] für die Phasen Ag_2Al und Al_2Cu für die beiden Simulationen mit den Parameterdatensätzen EXP und CAL.

verschoben und streuen deutlicher entlang der PC2-Achse. Zudem ist zu jedem Datensatz bzw. Experiment ein repräsentatives Schliffbild dargestellt und in den Diagrammen gekennzeichnet. Eine detaillierte Beschreibung der hier gezeigten PCA-Ergebnisse sowie ihre Vor- und Nachteile ist in [3] zusammengefasst.

6.4.3.4 Diskussion

Auf Basis der hier gezeigten Parameter konnte mit dem Phasenfeldmodell aus Abschnitt 3.5 eine gute optische und quantitative Übereinstimmung zwischen den simulierten und experimentellen Mikrostrukturen bei der ternären eutektischen gerichteten Erstarrung von Al-Ag-Cu gezeigt werden. Zwischen den Simulationen und Experimenten gibt es, wie in [8], jedoch auch einige Unterschiede. Die simulierten Mikrostrukturen werden in dieser Arbeit nur mit einem von vielen möglichen experimentellen Mustern [227–231, 233, 234, 281, 282, 294–296] verglichen, das zu Abweichungen in den Statistiken führen kann. Die Simulationen erstarrten zur Reduzierung des Rechenaufwands mit einer höheren Geschwindigkeit von 79,35$\mu m/s$, verglichen mit der Geschwindigkeit im experimentellen Schliffbild von 0,08$\mu m/s$. Durch die Verwendung einer kleinen Péclet-Zahl (Experiment: $6{,}2 \cdot 10^{-4}$, Simulation: $8{,}2 \cdot 10^{-2}$), wodurch der Erstarrungsprozess von der Diffusion dominiert wird, und die Anpassung der Oberflächenenergien, ist es trotz der höheren Erstarrungsgeschwindigkeiten möglich, die gleichen Längenskalen wie im Experiment zu simulieren. Ein weiterer Einfluss sind die nicht vollständig verfügbaren Werte für die Oberflächenenergien sowie Diffusionskonstanten bei unterschiedlichen Temperaturen. Hierdurch kann der Vernetzungsgrad sowie die Phase am Kettenanfang und Kettenende beeinflusst werden. Vor allem bei leicht unterschiedlichen Gibbs-Energien und die daraus folgenden unterschiedlichen Phasenanteile scheinen eine großen Einfluss auf den Vernetzungsgrad der Ketten zu haben. Zur Simulation von ähnlichen Mustern wie in Abschreckexperimenten mit dem Datensatz CAL sind Parameterstudien mit unterschiedlichen Oberflächenenergien und Diffusionskonstanten notwendig. Zur Untersuchung der Ergebnisse während der Erstarrung bei Experimenten sind, wie in [231] gezeigt, dreidimensionale Daten sowie die Verteilung der Ereignisse von hohem Interesse, um die gesamte 3D-Mikrostruktur vergleichen zu können.

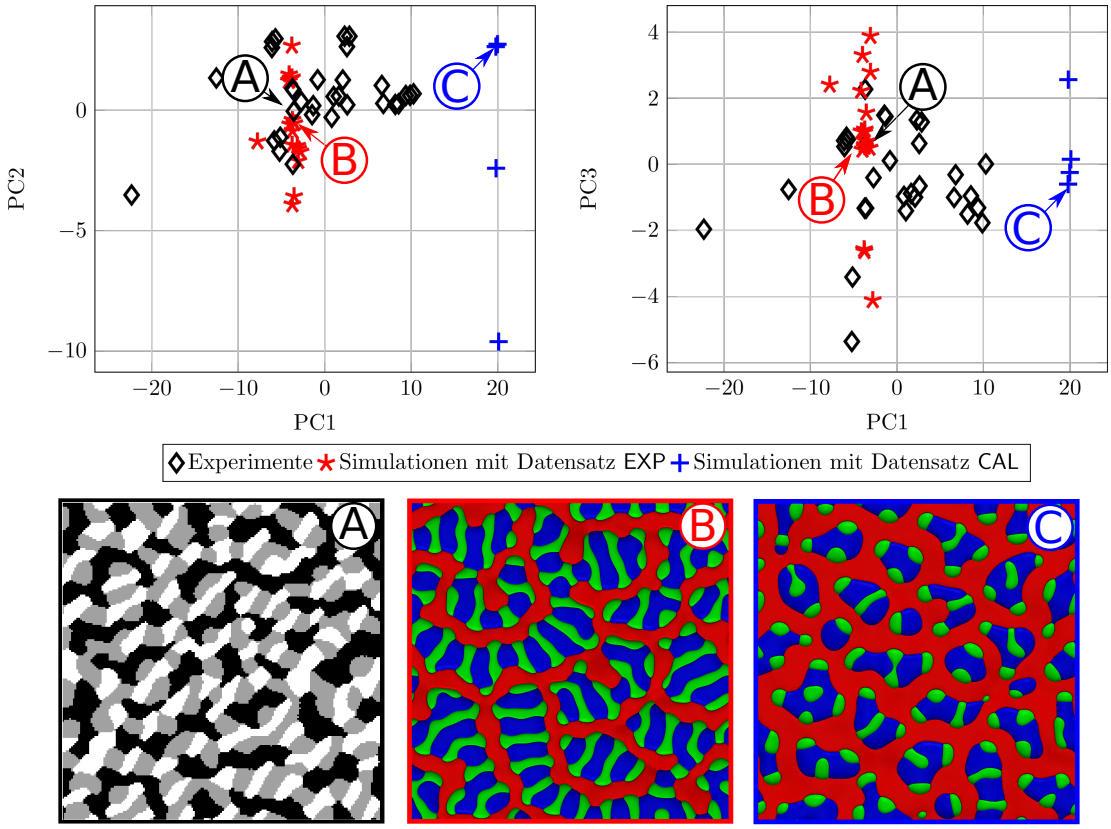


Abbildung 6.35: Quantitativer Vergleich von Simulationen mit den Datensätzen EXP und CAL sowie mit Schliffbildern aus Experimenten mit Hilfe der Hauptachsenanalyse (PCA) auf Basis von Zweipunktkorrelationen, basierend auf [3]. Die Proben der experimentellen Schliffbilder wurden am ternären eutektischen Punkt des Systems Al-Ag-Cu gerichtet erstarrt.

6.4.3.5 Zwischenschlussfolgerungen

In diesem Abschnitt wurde die Mikrostrukturentwicklung bei der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung von Al-Ag-Cu vor und nach der Löslichkeitsänderung simulativ mit der Phasenfeldmethode untersucht. Hierzu wurde das thermodynamisch konsistente Phasenfeldmodell auf Basis des Großkanonischen Potentialansatzes aus Abschnitt 3.5 verwendet. Für die Untersuchung wurden basierend auf [8] zwei verschiedene Datensätze für den ternären eutektischen Punkt in Al-Ag-Cu untersucht. Der erste Datensatz, EXP, wurde auf Basis der thermodynamischen CALPHAD-Datenbank aus [386, 387] sowie von den experimentell berichteten Phasenanteilen aus [227, 229, 230] hergeleitet. Hiermit wurde die Mikrostrukturentwicklung nach der Löslichkeitsänderung untersucht. Der zweite Datensatz, CAL, wurde vollständig aus der CALPHAD-Datenbank von [386, 387] hergeleitet, um die Mikrostruktur direkt nach der Erstarrung entsprechend mit Abschreckexperimenten zu untersuchen. Durch das Nutzen moderner Supercomputer mit mehr als > 10 000 Rechenkernen konnten mit diesen beiden Parameterdatensätzen realistische Gebietsgrößen und Muster mit verschiedenen Merkmalen ähnlich denen von Experimenten simuliert werden. Mit Hilfe der Hauptachsenanalyse (PCA), auf Basis von Zweipunktkorrelationen, sowie der Nächsten-Nachbar-Statistiken konnte neben der guten optischen Übereinstimmung auch eine quantitative Übereinstimmung zwischen den Simulationen auf Basis des Datensatzes EXP und den experimentellen Schliffbildern gezeigt werden.

Die primären Schlussfolgerungen sind:

(i) Mit dem Datensatz EXP kann eine gute optische sowie quantitative Übereinstimmung von Simulationen mit Experimenten erzielt werden. In den großskaligen Simulationen konnten zudem die gleichen Merkmale der Kettenmuster wie im Experiment gefunden werden.

(ii) Der Unterschied in den Mustern zwischen den zwei Datensätzen ist auf die Zusammensetzung der Schmelze zurückzuführen. Hierdurch entstehen beim Datensatz EXP lange Ketten und beim Datensatz CAL kurze Inseln in den Querschnitten.

(iii) Trotz eines stabilen Wachstums treten in der dreidimensionalen Mikrostruktur während des Wachstums unterschiedliche Ereignisse wie das Zusammenwachsen, das Aufteilen und das Überwachsen von Fasern auf.

(iv) Abhängig vom Datensatz und der Phase ist ein anderes Verhalten der Ereignisse der Fasern zu beobachten.

(v) Große dreidimensionale Simulationen erlauben es, die kontinuierlichen Muster während der Erstarrung zu untersuchen. Dadurch ist es möglich, neue Zusammenhänge zwischen den Mustern und den Prozessparametern sowie den physikalischen Parametern zu finden.

(vi) Für die quantitative Untersuchung bestimmter Muster sind Nächste-Nachbarn-Statistiken alleine nicht ausreichend.

(vii) Die Hauptachsenanalyse auf Basis von Zweipunktkorrelationen erlaubt einen quantitativen Vergleich der gesamten Mikrostruktur in Querschnitten parallel zur Erstarrungsfront.

6.4.4 Einfluss von Geschwindigkeitswechseln während der Erstarrung von Al-Ag-Cu

Zur Untersuchung des Einflusses der Erstarrungsgeschwindigkeit auf die Musterbildung sowie auf den Umordnungsprozess der Fasern bei der Veränderung der Geschwindigkeit werden verschiedene Simulationsserien mit unterschiedlichen Geschwindigkeitswechseln durchgeführt. Mehrere Geschwindigkeitswechsel erlauben es, neben dem Umordnungsprozess auch den Einfluss der Vorgeschichte der Muster zu untersuchen.

Experimentelle Arbeiten zum Einfluss der Wachstumsgeschwindigkeit von verschiedenen multikomponentigen Systemen sind in [215, 279, 280, 289–291] zu finden. Untersuchungen zum Einfluss der Wachstumsgeschwindigkeit im ternären eutektischen System Al-Ag-Cu stammen von Genau und Ratke [227] sowie von Dennstedt et al. [296], in denen mehrere Muster abhängig von der Erstarrungsgeschwindigkeit und des Temperaturgradienten beobachtet werden. Genau und Ratke [227] untersuchen hierzu die Musterbildung bei Erstarrungsgeschwindigkeiten im Bereich von 0,2 $\mu m/s$ bis 4,0 $\mu m/s$ und mit einem Temperaturgradienten von 3 K/mm. Aus den experimentellen Schliffbildern klassifizierten sie dabei geordnete und ungeordnete Strukturen. Geordnete Strukturen werden nur für Erstarrungsgeschwindigkeiten kleiner 1 $\mu m/s$ beobachtet. Die Anzahl an nächsten Nachbarn für die jeweiligen Phasen Al_2Cu und Ag_2Al zeigt einen ähnlichen Verlauf für die unterschiedlichen Geschwindigkeiten. Die Größe der Faserfläche der zwei intermetallischen Phasen nimmt entsprechend der Jackson-Hunt-Theorie [215] mit der Erhöhung der Erstarrungsgeschwindigkeit ab. Für die unterschiedlichen Geschwindigkeiten konnte bei abgeschreckten Proben kein Zusammenhang zwischen der Erstarrungsgeschwindigkeit und den Phasenanteilen gefunden werden. Es wird jedoch ein starker Einfluss der Festphasenumwandlung auf die Phasenanteile sowie die Zusammensetzung der Phasen beobachtet. Dennstedt et al. [296] untersuchen die Musterbildung für Erstarrungsgeschwindigkeiten im Bereich von 0,08 $\mu m/s$ bis 3,8 $\mu m/s$ mit Temperaturgradienten von 1,5 K/mm bis 6,2 K/mm. Hierbei werden sechs unterschiedliche Muster beobachtet und mit Hilfe von Nächste-Nachbarn-Statistiken der beiden intermetallischen Phasen quantifiziert.

In noch nicht publizierten Daten von A. Dennstedt [7] vom DLR in Köln wird in Experimenten mit Al-Ag-Cu während der ternären eutektischen gerichteten Erstarrung die Geschwindigkeit reduziert. Die Erstarrungsgeschwindigkeit wird dabei von 0,32 $\mu m/s$ auf 0,08 $\mu m/s$ reduziert, bei einem Temperaturgradienten von 2,2 K/mm und 2,8 K/mm. Die Erstarrungsgeschwindigkeit wird zudem durch einen transparenten Aerogel-Tiegel optisch beobachtet und aufgezeichnet. Anschließend werden verschiedene Ausschnitte der Proben mit Hilfe von Synchrotronstrahlung in 3D, ähnlich wie in [231] beschrieben, rekonstruiert. Hierzu werden Proben am Anfang der Erstarrung, während des Geschwindigkeitswechsels und am Ende der Erstarrung an mehreren Stellen untersucht. In den Proben sind über die gesamte Wachstumshöhe Kettenmuster zu sehen. Durch die Reduzierung der Geschwindigkeit werden die Fasern entsprechend der Jackson-Hunt-Theorie [215] größer. In den Proben wird durch die Geschwindigkeitsreduzierung eine Änderung der Phasenanteile beobachtet, welche vor und nach der Änderung konstant ist. Hierbei nimmt der Al-Phasenanteil zwischen 1,5% bis 3% zu. Die Phasenanteile von Al_2Cu nehmen um 3% bis 5% ab, und die Phasenanteile von Ag_2Al steigen um etwa 1%.

Phasenfeldsimulationen mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten in 2D für ternäre eutektische Systeme werden in [278] mit der Jackson-Hunt-Theorie [215] verglichen, in denen eine gute Übereinstimmung gefunden wird.

6.4.4.1 Simulationsparameter und Durchführung

Basierend auf einer Simulation mit dem Datensatz EXP sowie einer stabilen Mikrostruktur wird der Einfluss von Geschwindigkeitswechseln auf die Musterbildung untersucht. Hierzu werden vier Serien (II, III, IV, V) mit mehreren Geschwindigkeitswechseln sowie eine Serie ohne Geschwindigkeitswechsel (I) durchgeführt. Ausgehend von der Grundgeschwindigkeit $v_{basis} = 0{,}256\,\mu m/s$ wird diese für zwei Varianten um 20% (II) und um 30% (III) reduziert. Für die beiden anderen Varianten (IV) und (V) wird die Geschwindigkeit

Tabelle 6.8: Zusammenfassung der Geschwindigkeiten des Temperaturgradienten.

v_{basis}	$v_{-20\%}$	$v_{-30\%}$	$v_{+20\%}$	$v_{+30\%}$
0,256 $\mu m/s$	0,204 $\mu m/s$	0,175 $\mu m/s$	0,308 $\mu m/s$	0,325 $\mu m/s$

entsprechend im gleichen Verhältnis erhöht. Danach werden die jeweils gegenläufigen Geschwindigkeiten verwendet. Anschließend werden die Geschwindigkeiten auf den initialen Wert v_{basis} zurückgesetzt. Die Geschwindigkeitsverläufe sind in Abbildung 6.36 dargestellt und alle Werte für die Geschwindigkeiten sind in Tabelle 6.8 zusammengefasst. Zwischen jedem Wechsel werden 1,5 Millionen Zeitschritte berechnet, damit sich wieder ein stabiles Wachstum einstellen kann. Dieser Wert wurde auf Basis der Daten in [3] bestimmt. Aufgrund der notwendigen Gitterauflösung sowie der numerischen Stabilität und des damit größer werdenden Rechenaufwands bei großen Geschwindigkeitsänderungen wird die Geschwindigkeit nur im Bereich von ±30% variiert, im Vergleich zu deutlich größeren Änderungen in den Experimenten. Für die Untersuchungen wird im Gegensatz zu den vorherigen Simulationen zu Al-Ag-Cu ein Temperaturgradient mit einem Wert von $G = 795{,}48\ ^K/_{mm}$ verwendet, um die Erstarrungsgeschwindigkeit zu kontrollieren. Der Gradient ist deutlich größer gewählt als in den Experimenten, um die Dauer für die Anpassung der Mikrostruktur und damit den benötigten Rechenaufwand zu reduzieren. Für die Grundfläche des Simulationsgebiets werden 800 × 800 Zellen verwendet. Die Simulationen wurden mit 11 200 Rechenkernen für ca. 40h auf den beiden Supercomputern SuperMUC [181] und Hazel Hen [179] mit 7,5 Millionen Zeitschritten berechnet. Die Keimbildung kann aufgrund der geringen Unterkühlungen und der langsamen Erstarrungsgeschwindigkeiten vernachlässigt werden. Dies ist in Übereinstimmung mit den in 3D rekonstruierten Proben von Hengzhi et al. [397] mit Al-Cu, in denen keine Keimbildung beobachtet wird.

6.4.4.2 Simulationsergebnisse und Diskussion

Im Folgenden werden zuerst die Simulationsergebnisse visuell beschrieben und anschließend quantitativ analysiert, miteinander verglichen und diskutiert. Hierzu werden die Phasenanteile, die Ereignisse der Fasern, die durchschnittliche Faserform und die Nächste-Nachbarn-Statistiken über die Wachstumshöhe ausgewertet.

Visuelle Beschreibung der Simulationen

In Abbildung 6.36 sind die fünf Serien mit und ohne Geschwindigkeitswechsel über die Wachstumshöhe dargestellt. Die Mikrostruktur ist kurz vor dem jeweiligen Geschwindigkeitswechsel zu sehen. Für alle Erstarrungsgeschwindigkeiten werden Kettenstrukturen beobachtet. Abhängig von der Richtung der Geschwindigkeitsänderung bilden sich entsprechend des Jackson-Hunt-Ansatzes kleinere bzw. größere Strukturen aus. Daneben ist zu erkennen, dass die Kettenglieder entsprechend der Geschwindigkeitsänderung eine länglichere Form senkrecht zur Kettenrichtung annehmen. Die Änderung in den Mustern wird mit größeren Geschwindigkeitsänderungen ausgeprägter. Ein Reduzieren der Geschwindigkeit führt zu weniger vernetzten Ketten sowie zu einer höheren Anzahl an Tatzenstrukturen. Bei einer langsamen Geschwindigkeit werden zudem die Al-Matrixlamellen breiter. Ein Erhöhen der Geschwindigkeit führt hingegen zu einer Abnahme in der Breite der Matrixlamellen. Hierdurch werden die Kettenglieder der intermetallischen Phasen breiter und es sind mehr Verzweigungen zwischen den Kettenstrukturen zu erkennen. Zudem ist zu sehen, dass die Mikrostrukturen am Ende der Serien unterschiedlich aussehen und somit von ihrer jeweiligen Vorgeschichte abhängen.

In Abbildung 6.37 ist die dreidimensionale Mikrostruktur für die beiden Serien II und IV dargestellt. Links ist die gesamte Mikrostruktur dargestellt und rechts davon sind einzelne Fasern in der entsprechenden

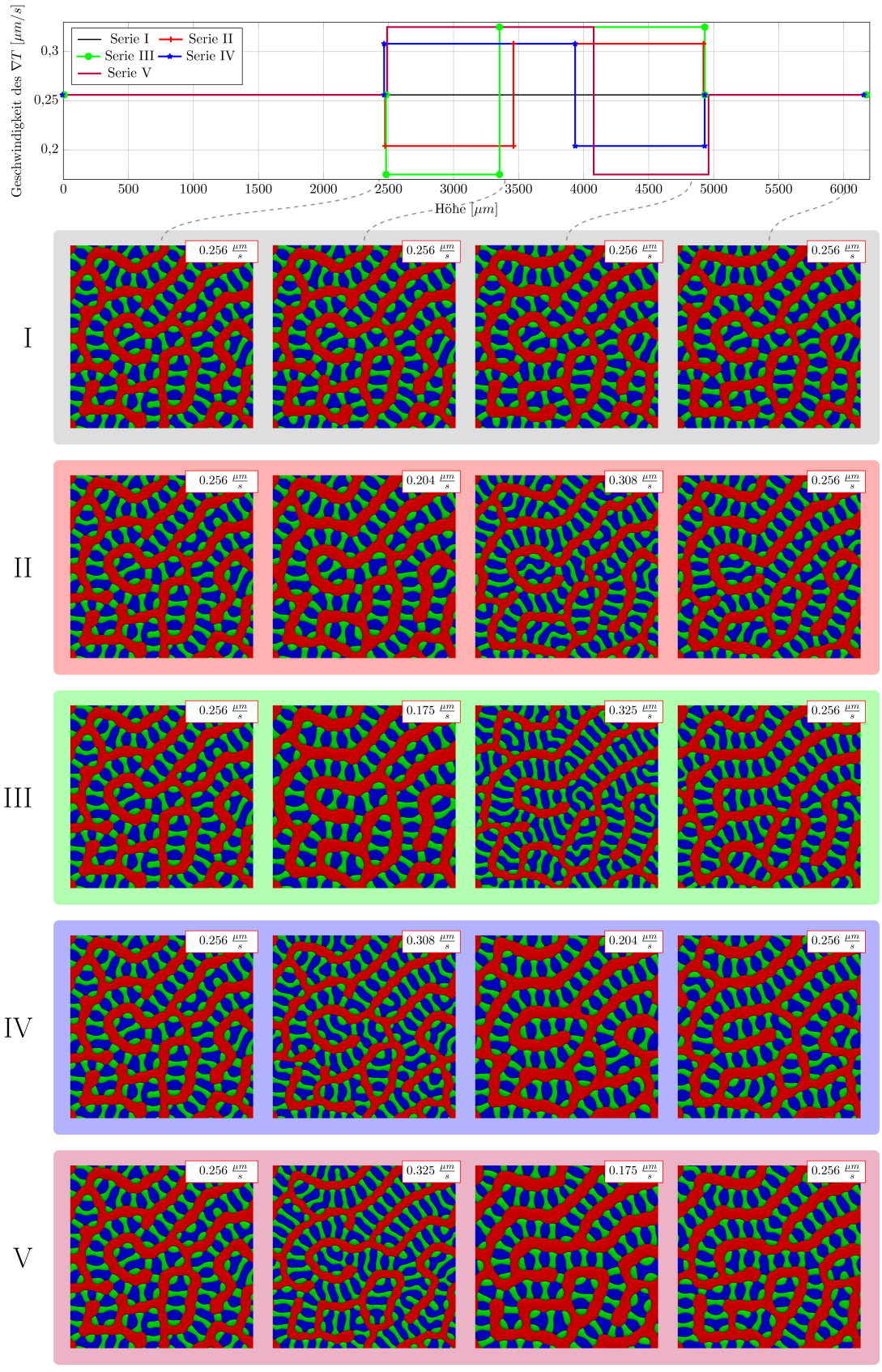
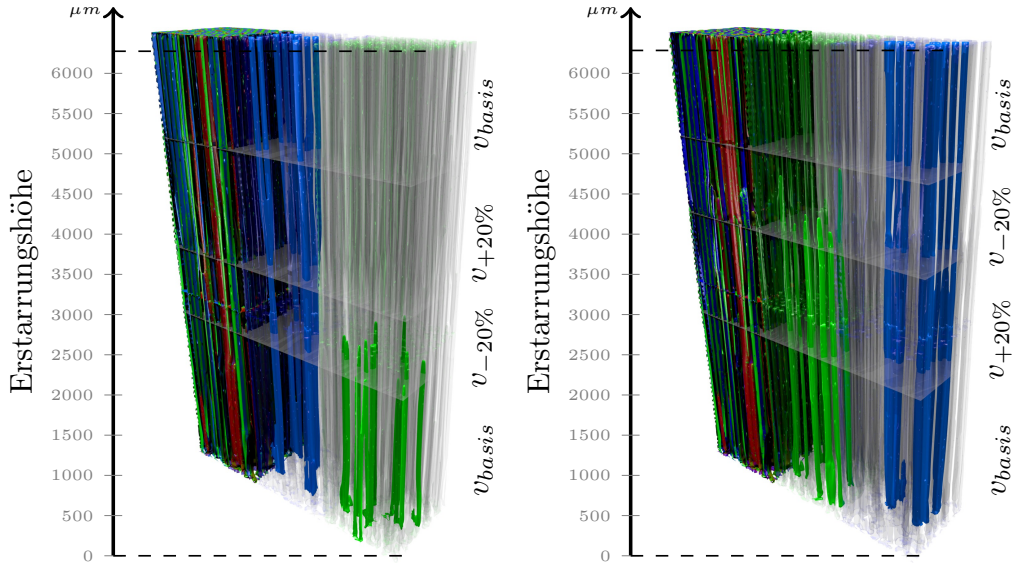


Abbildung 6.36: Übersicht der fünf Geschwindigkeitswechsel des Temperaturgradienten sowie der Mikrostruktur kurz vor dem Wechsel.



(a) Serie II **(b)** Serie IV

Abbildung 6.37: 3D-Darstellung der Mikrostruktur für die zwei gegenläufigen Geschwindigkeitswechselserien II und IV. Zudem sind ausgewählte Fasern freigestellt. Die grauen Ebenen entsprechen der Höhe der Erstarrungsfront beim Geschwindigkeitswechsel.

transparenten Phase freigestellt. Die transparenten grauen Ebenen entsprechen der Höhe der Erstarrungsfront beim Geschwindigkeitswechsel. In beiden Serien ist zu erkennen, dass nach dem Reduzieren der Geschwindigkeit Ag_2Al-Fasern (grün) überwachsen werden und sich die Al_2Cu-Fasern (blau) bei einer Erhöhung der Geschwindigkeit aufteilen.

Im Folgenden werden nur die Ergebnisse der Serien I, III und V mit den stärksten Änderungen verglichen, da die Verläufe der anderen Serien das gleiche Verhalten aufzeigen, welches aber entsprechend der Änderung geringer ausgeprägt ist.

Phasenanteile

Zur Untersuchung des Einflusses von Geschwindigkeitsänderungen auf die Stabilität der Mikrostruktur sowie des experimentell berichteten Einflusses auf die Phasenanteile werden diese im Folgenden über die Wachstumshöhe analysiert.

In Abbildung 6.38 sind Phasenanteile für die drei Festphasen über die Wachstumshöhe sowie die Ereignisse der Fasern während der Erstarrung dargestellt. In gestricheltem schwarz ist der Geschwindigkeitsverlauf des Temperaturgradienten abgebildet. In der Serie I ohne Geschwindigkeitsänderung, wie in Abbildung 6.38(a) zu sehen, oszillieren die Phasenanteile zu Beginn, bis sich stabile Kettenstrukturen aus der Voronoi-Füllung gebildet haben. Danach stellen sich für alle Phasen konstante Phasenanteile ein. Wie bereits in den Simulationen im vorherigen Abschnitt 6.4.3 ordnen sich die Fasern über die eingezeichneten Ereignisse um. Es treten jedoch aufgrund der geringeren Geschwindigkeit, sowie des steileren Gradienten und dessen stabilisierender Wirkung auf die Strukturen weniger Ereignisse auf. In den Serien III und V ist nach den Geschwindigkeitswechseln eine deutliche Veränderung der Phasenanteile zu beobachten, wie in den Abbildungen 6.38(b) und 6.38(c) gezeigt. Nach dem Geschwindigkeitswechsel oszillieren die Phasenanteile und es stellen sich nach 500 bis 1 500 Zellen bzw. 250 μm bis 750 μm des Wachstums, abhängig von der Stärke des Wechsels, neue konstante Phasenanteile ein, die sich jedoch von den vorherigen Phasenanteilen unterscheiden. Nach beiden Serien III und V ist auch zu sehen, dass sich die Phasenanteile für v_{basis} am Anfang und am Ende der Simulation leicht unterscheiden.

Wie bereits in der 3D-Darstellung in Abbildung 6.37 gezeigt, ordnen sich die Fasern beim Reduzieren der Geschwindigkeit vor allem durch Überwachsen der Ag_2Al-Fasern (grün) um, wie an den Ereignissen zu erkennen. Dies ist in Übereinstimmung mit der Jackson-Hunt-Theorie [215], in welcher der Lamellenabstand mit der Bedingung $\lambda \propto \sqrt{1/v}$ von der Geschwindigkeit abhängt. Durch das Gröberwerden der Strukturen müssen Fasern weichen, indem sie zusammenwachsen oder überwachsen werden. Eine Erhöhung der Geschwindigkeit führt zu feineren Strukturen, was durch Verzweigen der beiden Al_2Cu- (blau) und Ag_2Al-Fasern (grün) erreicht wird. Dabei treten die Ereignisse erst auf, nachdem sich die Phasenanteile wieder auf einen konstanten Wert eingestellt haben. Bei der Reduzierung der Geschwindigkeit steigt der Phasenanteil der Al-Phase (rot) an, wohingegen der Al_2Cu-Phasenanteil (blau) und abgeschwächter der Ag_2Al-Phasenanteil (grün) abnimmt. Eine Erhöhung führt zu einem gegenläufigen Verhalten.

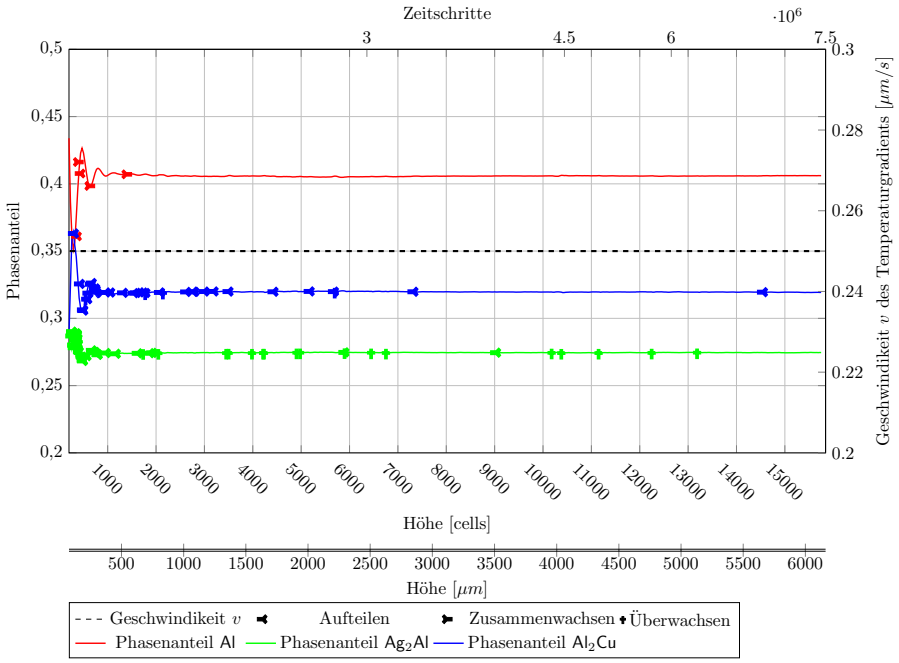
Die Änderungen der Phasenanteile bei einer Reduzierung der Geschwindigkeit sind auch in den experimentellen Proben von A. Dennstedt [7] zu sehen, jedoch weniger stark ausgeprägt. Die Phasenanteile von Ag_2Al steigen im Gegensatz zur Simulation in den Experimenten an. Ein Grund für diesen gegenläufigen Trend könnte die in den Simulationen vernachlässigte Festphasendiffusion sein, wodurch die Löslichkeitsänderung nicht vollständig in der Simulation abgebildet wird. Hierbei nimmt der Anteil an Ag unterhalb der Erstarrungstemperatur in Al ab und diffundiert zur Ag_2Al-Phase. Die Festphasendiffusion wird jedoch aufgrund des hohen Rechenaufwands in den Simulationen vernachlässigt, weshalb die Phasenanteile in den Simulationen dem Zustand direkt nach der Erstarrung entsprechen und sich nicht weiter umlagern können.

Die Änderung der Phasenanteile bei unterschiedlichen Geschwindigkeiten lässt sich auf die Änderung der Frontunterkühlung und die damit verbundenen neuen Gleichgewichte in den Gibbs-Energien zurückführen. Die Unterkühlung an der Front ΔT, abhängig vom Lamellenabstand λ und der Geschwindigkeit des Temperaturgradienten v, kann mit Hilfe des Jackson-Hunt-Ansatzes [215] und der Gibbs-Thomson-Gleichung beschrieben werden als

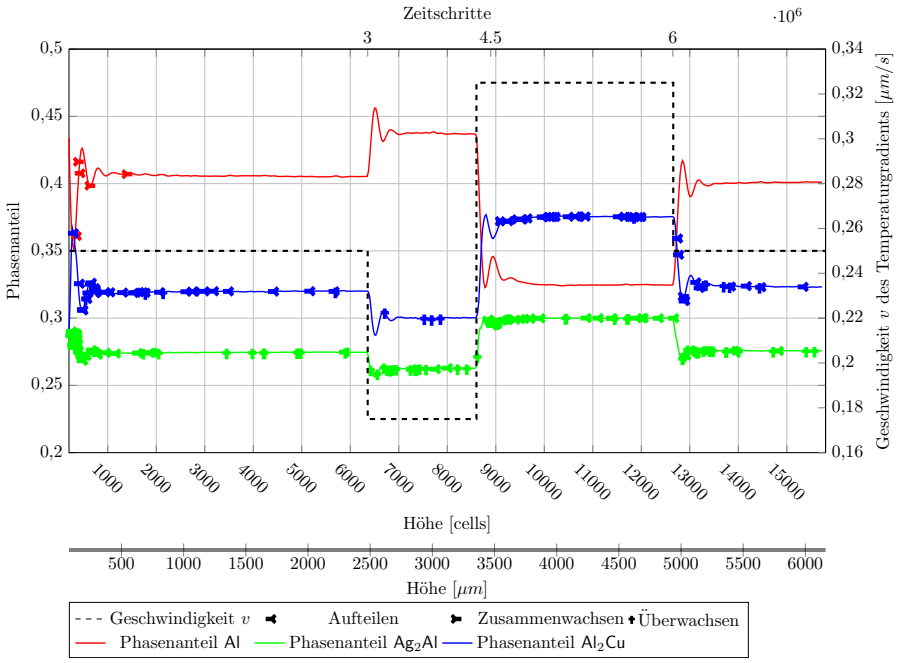
$$\Delta T = A\lambda v + \frac{B}{\lambda}, \tag{6.13}$$

mit den Faktoren A und B. Die Faktoren können wie in [278] beschrieben berechnet werden. Durch einen Wechsel in der Geschwindigkeit des Temperaturgradienten ändert sich entsprechend (6.13) die Unterkühlung, was zu einer Verschiebung der temperaturabhängigen Gibbs-Energien führt. Dies wiederum führt zu einer Veränderung der chemischen Potentiale und folglich auch der Konzentrationen, was zu einer Verschiebung der Phasenanteile führt. In Abbildung 6.39 ist dies beispielhaft für zwei Gibbs-Energien bei unterschiedlichen Temperaturen skizziert. Hierbei ist zu sehen, dass sich durch das Verschieben der Gibbs-Energie ein neues Gleichgewicht mit veränderten Konzentrationen einstellt. Im Vergleich zum Experiment lässt sich die starke Änderung der Phasenanteile in den Simulationen auf die relativ flach modellierten Paraboloide für die Gibbs-Energien zurückführen. Die Steigung der Paraboloide sind reduziert, um die Stabilität der Berechnung in der Simulation zu erhöhen.

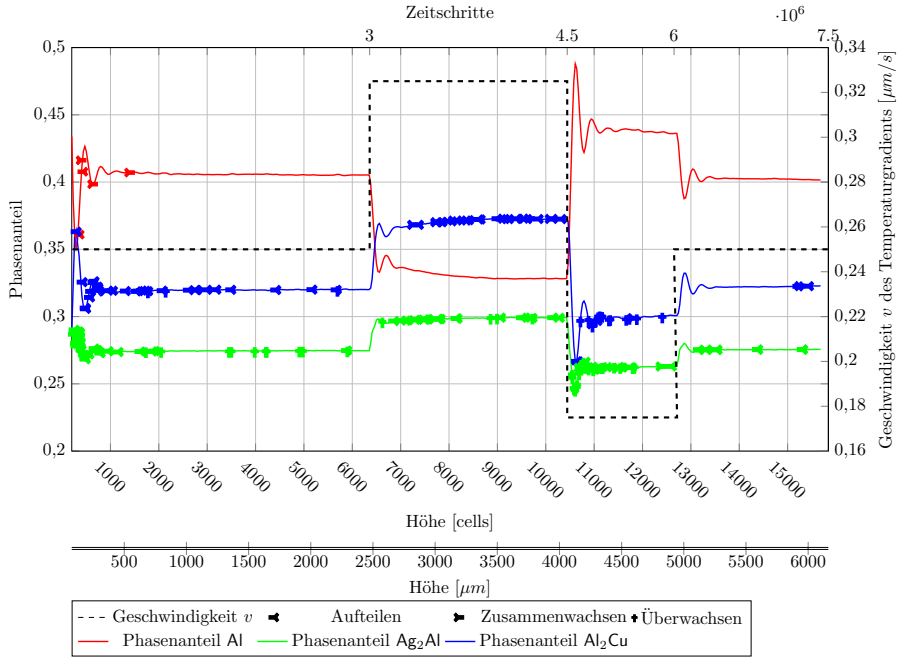
Ein möglicher Grund für die unterschiedlichen Werte der Phasenanteile in der Literatur [227, 231, 386, 387] können daher die sich ändernden Phasenanteile bei unterschiedlichen Geschwindigkeiten sein. Genau und Ratke [227] konnten in abgeschreckten Proben mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten jedoch keinen Zusammenhang zwischen der Erstarrungsgeschwindigkeit und den Phasenanteilen finden. Die angegebene Messgenauigkeit der Phasenanteile von ±1,1% bis ±2,1% ist jedoch größer als die beobachtete Änderung in den dreidimensional rekonstruierten Proben mit einer systematischen Veränderung der Phasenanteile bei den Geschwindigkeitswechseln von A. Dennstedt [7].



(a) Serie I



(b) Serie III



(c) Serie V

Abbildung 6.38: Phasenanteile und Ereignisse der Fasern über die Wachstumshöhe für die drei Serien I, III und V. In Schwarz gestrichelt ist zusätzlich die Geschwindigkeit des Temperaturgradienten eingezeichnet.

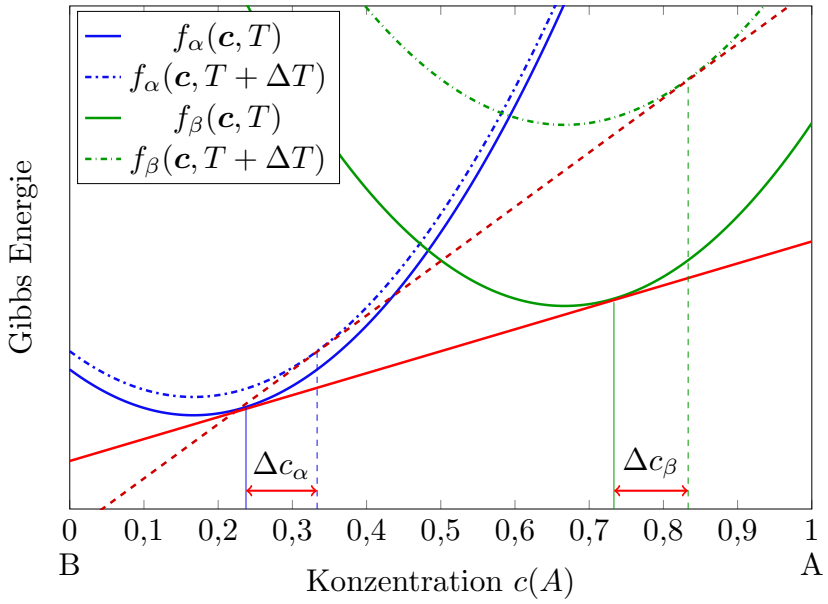


Abbildung 6.39: Beispielhafte Darstellung der Veränderung der Gleichgewichtskonzentrationen bei verschiedenen Unterkühlungen in einem binären System. Durch die andere Unterkühlung (gestrichelte Kurven) verschieben sich die Gibbs-Energien zueinander, wodurch sich ein neues chemisches Potential einstellt. Dieses führt wiederum zu anderen Gleichgewichtskonzentrationen.

Formfaktor

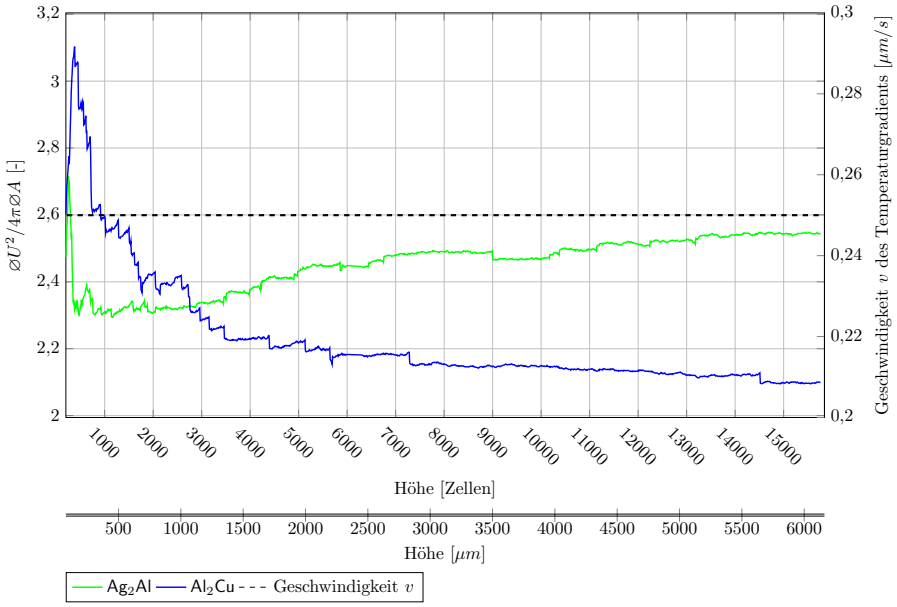
Zur Untersuchung des Einflusses der Geschwindigkeitswechsel auf die Form der Fasern parallel zur Erstarrungsfront wird der dimensionslose und auf einen Kreis normierte Formfaktor mit dem durchschnittlichen Umfang der Fasern $\varnothing U$ und der durchschnittlichen Fläche des Faserquerschnitts $\varnothing A$ verwendet. Der Formfaktor berechnet sich nach Dennstedt und Ratke [229] mit

$$F = \frac{\varnothing U^2}{4\pi \varnothing A} \tag{6.14}$$

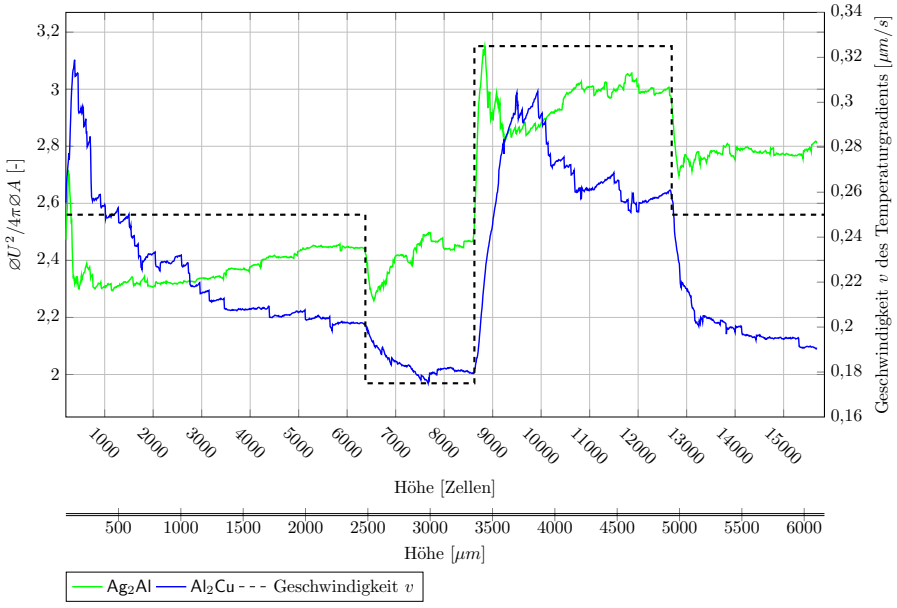
und nimmt im Falle eines Kreises den Wert eins an. Die Formfaktoren für die beiden intermetallischen Phasen Ag_2Al und Al_2Cu sind in Abbildung 6.40 für die drei Serien I, III und V über die Wachstumshöhe dargestellt. Zu Beginn stellen sich noch die Formen der Fasern ein, wodurch die grünen Ag_2Al-Fasern noch runder als die blauen Al_2Cu-Fasern sind. Nach einem Wachstum von etwa 3000 Zellen ändert sich dies jedoch und die blauen Al_2Cu-Fasern nehmen, wie auch optisch zu erkennen, eine rundliche Form in den Kettengliedern an, wohingegen die Ag_2Al-Fasern eine knochenförmige Form annehmen. Die Werte der Formfaktoren liegen im Bereich der aus Experimenten bestimmten Werte von Dennstedt und Ratke [229]. Die Sprünge in den Formfaktoren korrelieren mit den Ereignissen, bei denen sich Fasern aufteilen, zusammenwachsen und überwachsen werden.

Für die Serie I ohne Geschwindigkeitswechsel in Abbildung 6.40(a) ist über die gesamte Simulationshöhe eine leichte Änderung des Formfaktors für die zwei Phasen zu sehen. Dies lässt darauf schließen, dass die Mikrostruktur noch nicht ihre bevorzugte Gleichgewichtsform erreicht hat. Dies steht Gegensatz zu den Ergebnissen aus Steinmetz et al. [3], in denen bereits nach 1000 Zellen ein stabiles Wachstum quantifiziert wird sowie den bereits konstanten Phasenanteilen. Die Veränderung der Formfaktoren ist vor allem durch die verschiedenen Ereignisse beeinflusst, wodurch sich die Fasern umordnen und damit auch ihre Form ändern können.

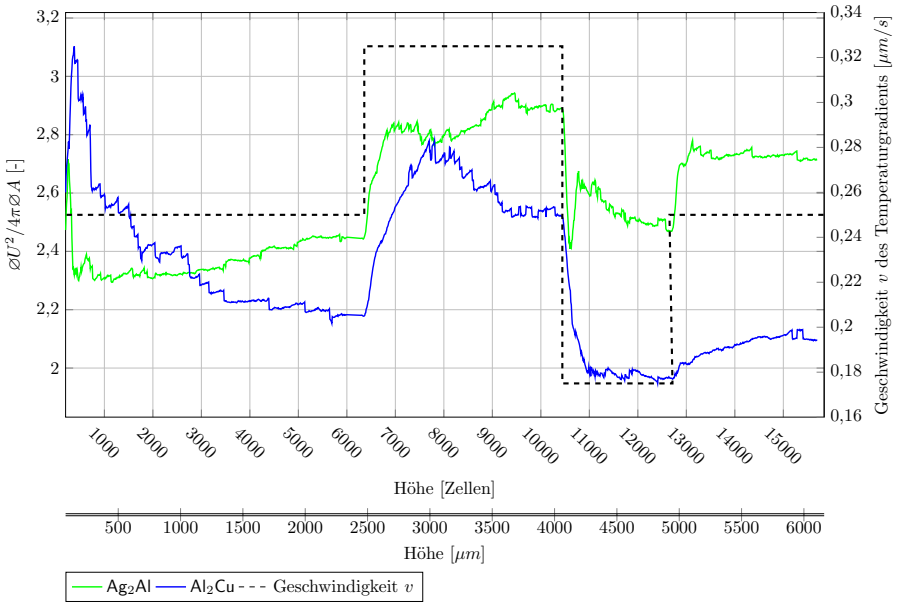
Für die beiden Serien III und V in den Abbildungen 6.40(b) und 6.40(c) ist nach den jeweiligen Geschwindigkeitswechseln eine direkte Änderung der Form zu beobachten. Die Formänderung verhält sich entsprechend der Stärke des Geschwindigkeitswechsels und der Richtung für beide Phasen gleich. Bei der Reduzierung der Geschwindigkeit werden die Fasern runder, was optisch in Abbildung 6.36 durch die Reduzierung der Breite der Kettenglieder zu erkennen ist. Der Formfaktor der grünen Ag_2Al-Fasern nimmt dabei direkt nach der Reduzierung ab und steigt dann wieder langsam etwas an. Die Änderung des Formfaktors ist dabei für die blauen Al_2Cu-Fasern etwas ausgeprägter als für die grünen Ag_2Al-Fasern. Für die Erhöhung der Geschwindigkeit ist eine gegenläufige Änderung der Form zu beobachten. Hierbei werden die Fasern der beiden Phasen länglicher. Auch hier ist die Änderung des Formfaktors für die Ag_2Al-Fasern ausgeprägter als für die Al_2Cu-Fasern. Nach den Geschwindigkeitswechseln stellt sich abhängig von der Intensität des Wechsels ein neues Plateau ein. Dies ist jedoch für die gleichen Geschwindigkeiten innerhalb einer Serie, wie auch über die Serien hinweg, unterschiedlich. Hieraus kann geschlussfolgert werden, dass die Form der Fasern von der Vorgeschichte abhängig ist. Des Weiteren sind in Serie V die Änderungen des Formfaktors nach bereits durchgeführten Wechseln, wie in Abbildung 6.40(c) gezeigt, weniger stark ausgeprägt. Dies kann auf die bessere Anordnung der Fasern in der Mikrostruktur durch die bereits durchgeführten Geschwindigkeitswechsel zurückgeführt werden. Durch die Geschwindigkeitswechsel ist es für die Fasern möglich, sich umzuordnen und dadurch einen energetisch besseren Zustand zu erreichen. Dieses Verhalten ist auch für Serie III in Abbildung 6.40(b) zu beobachten. Geschwindigkeitswechsel erlauben es daher, schneller ein energetisches Minimum und daraus folgend eine geordnetere Mikrostruktur zu erreichen.



(a) Serie I



(b) Serie III



(c) Serie V

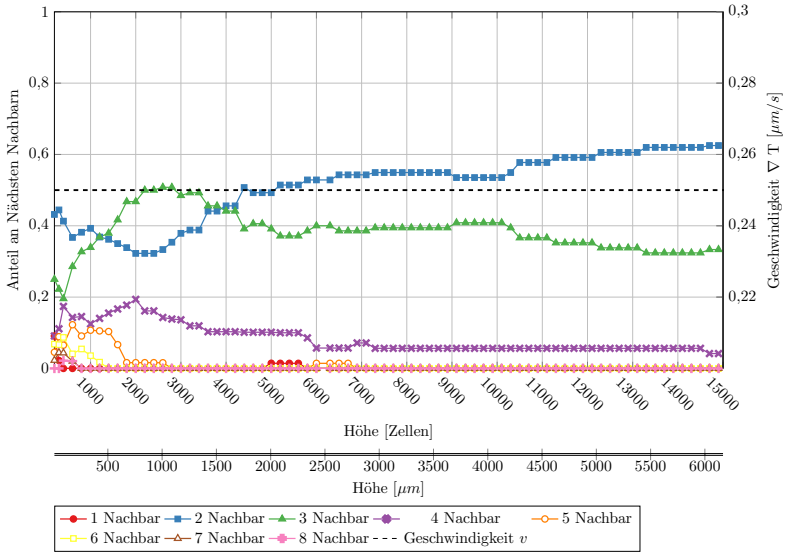
Abbildung 6.40: Verhältnis von durchschnittlichem Umfang der Fasern zum Quadrat durch die durchschnittliche Fläche über die Wachstumshöhe für die drei Serien I, III und V. In Schwarz gestrichelt ist zusätzlich die Geschwindigkeit des Temperaturgradienten eingezeichnet.

Nächste-Nachbarn-Statistiken

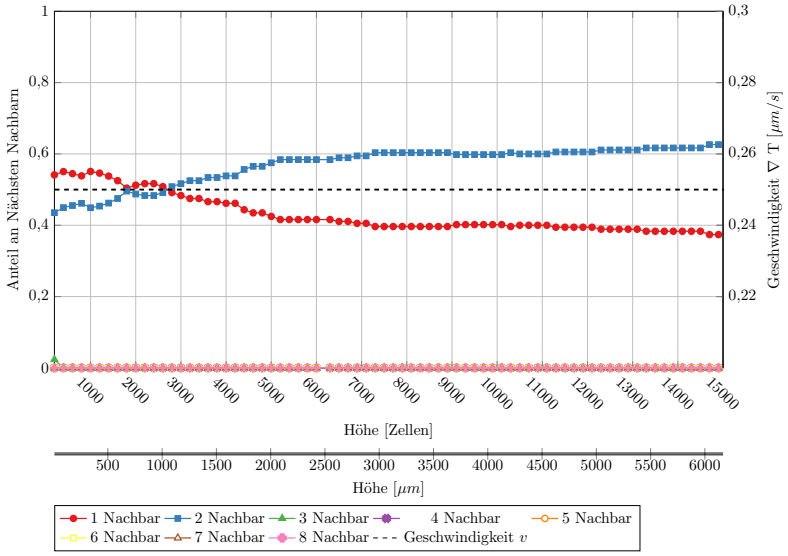
Zur weiteren Untersuchung des Umordnungsprozesses der Fasern werden im Folgenden die Nächste-Nachbarn-Statistiken für die beiden intermetallischen Phasen Ag_2Al (grün) und Al_2Cu (blau) verglichen. Die Statistik kann für Kettenmuster wie folgt interpretiert werden: Ein Nachbar steht für den Anfang bzw. das Ende einer Kette, zwei Nachbarn für ein Kettenglied und mehr als zwei Nachbarn für Verzweigungen der Ketten.

Die Nächste-Nachbarn-Statistiken für die Serie I mit dem Anteil an Ag_2Al (grün) Nachbarn um Al_2Cu (blau) über die Wachstumshöhe ist in Abbildung 6.41(a) dargestellt. Die Al_2Cu-Fasern sind hauptsächlich Kettenglieder, die gegen Ende der Simulation einen Anteil von über 60% ausmachen. Daneben bilden die Al_2Cu-Fasern die Verzweigungen zwischen verschiedenen Ketten mit einem Anteil von etwa 32% bei drei Nachbarn und einem Anteil von 5% bei vier Nachbarn. Über die Wachstumshöhe ist zu erkennen, dass der Anteil an Kettengliedern steigt, wohingegen die Verzweigungen abnehmen. Der Anteil an vier Nachbarn stellt sich nach einem Wachstum um 7000 Zellen bei etwa 6% ein. Fasern mit mehr als vier Nachbarn treten nahezu nicht auf. Für den Anteil an Al_2Cu-Nachbarn (blau) um Ag_2Al (grün), wie in Abbildung 6.41(b) dargestellt, stellt sich ein Anteil von 38% mit einem Nachbar und ein Anteil von 62% mit zwei Nachbarn ein. Ähnlich den Formfaktoren ändern sich die Nächste-Nachbarn-Statistiken über die Wachstumshöhe, was bedeutet, dass sich die Fasern umordnen. Fasern mit mehr als zwei Nachbarn treten nicht mehr auf.

Für die Geschwindigkeitswechsel in Serie III ist in Abbildung 6.42(a) der Anteil an Ag_2Al-Nachbarn (grün) um Al_2Cu (blau) dargestellt, und in Abbildung 6.42(b) der umgekehrte Fall. In beiden Statistiken ist eine Änderung der nächsten Nachbarn nach den Wechseln zu sehen. Der Anteil an Ag_2Al-Fasern in Abbildung 6.42(a) nimmt nach einer Reduzierung der Geschwindigkeit ab. Gleichzeitig reduziert sich der Anteil an drei Nachbarn um etwa 20%. Hierdurch nimmt der Anteil an Al_2Cu-Kettengliedern im gleichen Verhältnis zu. Eine Erhöhung der Geschwindigkeit führt zu gegenläufigem Verhalten, wobei dies trotz stärkerer Geschwindigkeitsänderung weniger ausgeprägt ist. Die Erhöhung führt zu einem Aufteilen der Fasern, was durch den Anstieg von drei und vier Nachbarn reflektiert wird. Der Anteil an vier Nachbarn nimmt bei diesem Wechsel um 10% zu, fällt dann aber vor dem nächsten Geschwindigkeitswechsel auf 0% ab. Die



(a) Anteil an Ag_2Al-Nachbarn (grün) um Al_2Cu (blau)



(b) Anteil an Al_2Cu-Nachbarn (blau) um Ag_2Al (grün)

Abbildung 6.41: Nächste-Nachbarn-Statistik für die Phasen Ag_2Al (grün) und Al_2Cu (blau) über die Wachstumshöhe für Serie I.

zweite Reduzierung der Geschwindigkeit hat jedoch keinen direkt sichtbaren Einfluss auf die Statistik. Höhere Nachbaranzahlen haben nach der Stabilisierung der Muster maximal einen Anteil von 3% und zeigen keinen direkten Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit und den Anteilen.

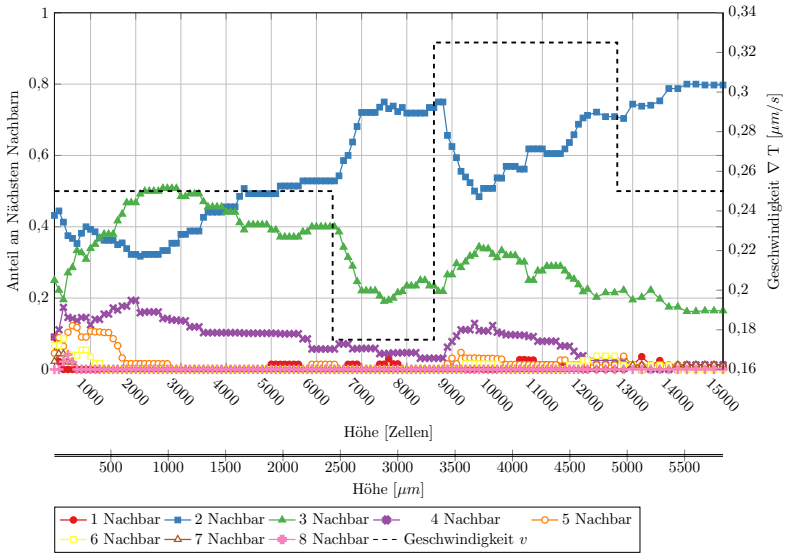
Die Statistik in Abbildung 6.42(b) zeigt einen spiegelbildlichen Verlauf zwischen den Anteilen für einen Nachbar und für zwei Nachbarn. Beide Anteile haben vor dem ersten Geschwindigkeitswechsel einen Anteil von 41% bei einem Nachbarn und einen Anteil von 59% bei zwei Nachbarn. Nach der Reduzierung nimmt der Anteil an Kettengliedern bei zwei Nachbarn um 11% zu, wohingegen die Kettenenden bzw. Kettenanfänge zurück gehen. Eine Erhöhung hat den gegenläufigen Effekt, der diesmal entsprechend der stärkeren Änderung mit etwa 15% ausgeprägter ist. Nach der Erhöhung bildet sich ein Anteil von 2% bis 3% an drei Al_2Cu-Nachbarn um Ag_2Al. Fasern mit mehr als drei Nachbarn werden nicht beobachtet.

Die Statistiken für den gegenläufigen Geschwindigkeitsverlauf aus Serie V sind in Abbildung 6.43 dargestellt. Das Erhöhen der Geschwindigkeit führt erst nach einer Wachstumshöhe von etwa 1 000 Zellen zu einer Änderung der Nachbarn, wohingegen sich die Nachbarn bei der Reduzierung sofort mit ändern. Nach der ersten Erhöhung der Geschwindigkeit in Abbildung 6.43(a) steigt der Anteil an Fasern mit zwei und vier Nachbarn verzögert an, wohingegen Fasern mit drei Nachbarn abnehmen. Das Reduzieren der Geschwindigkeit führt hingegen zu einem direkten Anstieg von 8% an Fasern mit zwei Nachbarn sowie zu einem Rückgang an Fasern mit drei und vier Nachbarn. Höhere Nachbaranzahlen variieren in einem Bereich von wenigen Prozent. Nach der zweiten Erhöhung ist kein Einfluss des Geschwindigkeitswechsels zu beobachten. Der Anteil an Al_2Cu-Nachbarn (blau) um Ag_2Al (grün) in Abbildung 6.43(b) zeigt ebenfalls ein verzögertes und nicht eindeutiges Verhalten bei der Erhöhung der Geschwindigkeit. Bei der Reduzierung der Geschwindigkeit nimmt hingegen der Anteil an zwei Nachbarn um 10% zu und der Anteil an einem Nachbar um 10% ab. Für hohe Geschwindigkeiten sind kleine Anteile an drei Nachbarn im Bereich von 2% zu beobachten.

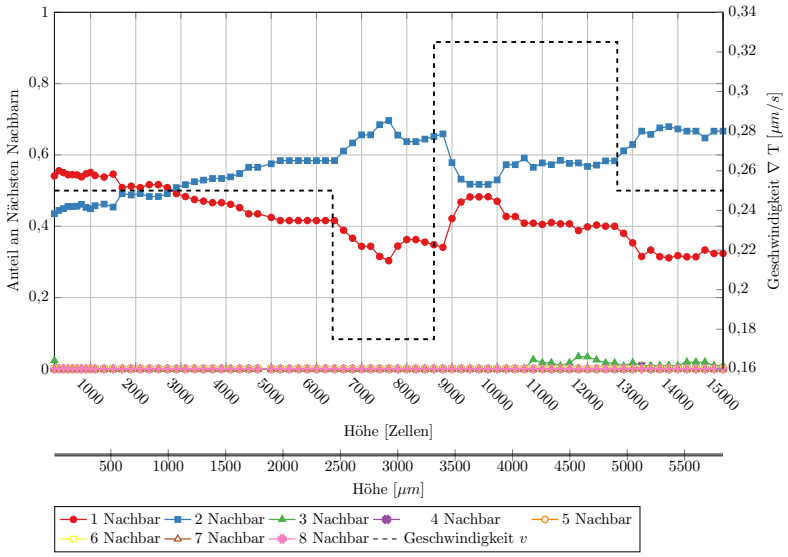
Abhängig von der Stärke der Geschwindigkeitsänderung zeigen beide Serien (III und V) für eine Reduzierung der Geschwindigkeit die gleichen Trends für die Anteile an Ag_2Al-Nachbarn (grün) um Al_2Cu (blau). Der Anteil an zwei Nachbarn nimmt zu und der Anteil an drei Nachbarn nimmt ab. Bei der Erhöhung der Geschwindigkeit unterscheiden sich die Trends. Für den letzten Geschwindigkeitswechsel ist in beiden Serien kein direkter Einfluss zu erkennen. Für den Anteil an Al_2Cu-Nachbarn um Ag_2Al sind die Trends in den Statistiken für beide Geschwindigkeitsänderungsserien gleich.

Im Vergleich zur gleichen Initialgeschwindigkeit ist durch die Serie an Geschwindigkeitswechseln allgemein ein Anstieg an den Kettengliedern mit jeweils zwei Nachbarn zu beobachten. Die Änderungen in den Statistiken sind jedoch abhängig von der Vorgeschichte der Muster. Mehr als vier Nachbarn haben einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Statistiken.

Für den letzten Geschwindigkeitswechsel in Serie III und V wird nur für den Anteil an Al_2Cu-Nachbarn (blau) um Ag_2Al (grün) in Serie III ein Einfluss auf die nächsten Nachbarn gefunden. Dies steht mit der geringen Formänderung der Fasern beim letzten Geschwindigkeitswechsel in Zusammenhang. Durch die zu geringe Formänderung ändert sich auch die Anordnung der Fasern nur gering, wodurch die Anordnung der Fasern und damit das Muster bestehen bleibt.

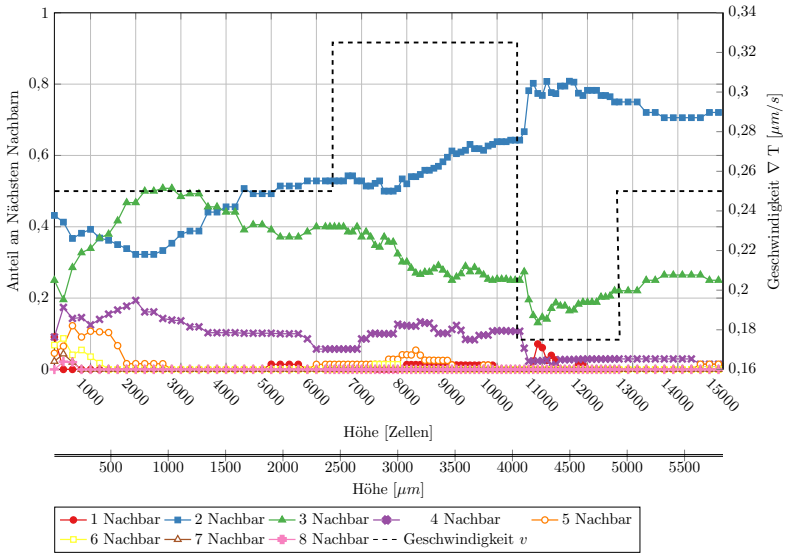


(a) Anteil an Ag_2Al-Nachbarn (grün) um Al_2Cu (blau)

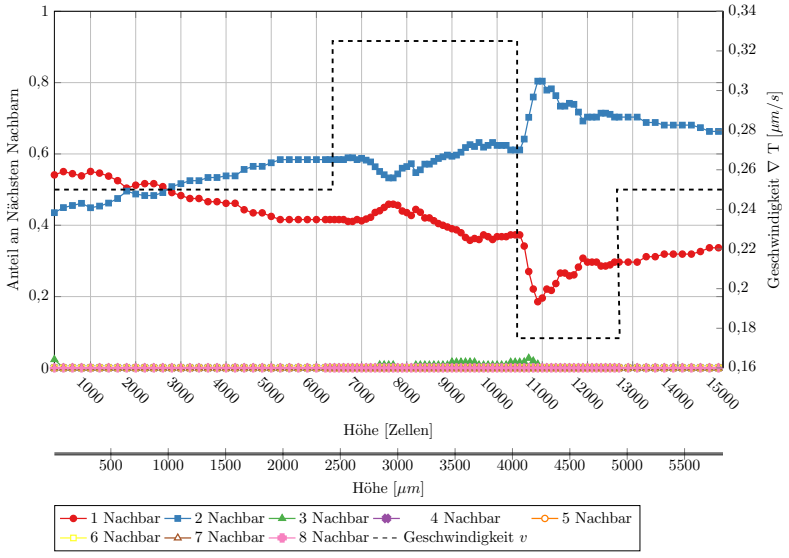


(b) Anteil an Al_2Cu-Nachbarn (blau) um Ag_2Al (grün)

Abbildung 6.42: Nächste-Nachbarn-Statistik für die Phasen Ag_2Al (grün) und Al_2Cu (blau) über die Wachstumshöhe für Serie III.



(a) Anteil an Ag_2Al-Nachbarn (grün) um Al_2Cu (blau)



(b) Anteil an Al_2Cu-Nachbarn (blau) um Ag_2Al (grün)

Abbildung 6.43: Nächste-Nachbarn-Statistik für die Phasen Ag_2Al (grün) und Al_2Cu (blau) über die Wachstumshöhe für Serie V.

6.4.4.3 Zwischenschlussfolgerungen

In dieser Studie wurden vier Serien mit jeweils drei Geschwindigkeitswechseln sowie eine Simulation ohne Wechsel durchgeführt. Hierzu wurden jeweils zwei Serien mit gegenläufigen und unterschiedlich starken Geschwindigkeitswechseln untersucht. Zur Analyse der Mikrostruktur wurden die Phasenfraktionen, Formfaktoren und die Nächste-Nachbarn-Statistiken über die Wachstumshöhe ausgewertet.

Aus den Ergebnissen der Simulationsserien leiten sich die folgenden Schlussfolgerungen ab:

(i) Zur Umordnung bei Geschwindigkeitswechseln teilen sich die Fasern bei einer Erhöhung der Geschwindigkeit auf und werden bei einer Reduzierung überwachsen.

(ii) Die Phasenanteile ändern sich entsprechend der neuen Gleichgewichte in den chemischen Potentialen durch die veränderte Unterkühlung bei unterschiedlichen Geschwindigkeiten.

(iii) Die Vorgeschichte hat einen Einfluss auf die Muster und die Form der Fasern.

(iv) Die Form der Fasern im Kettenmuster wird durch die Erstarrungsgeschwindigkeit beeinflusst.

(v) Geschwindigkeitswechsel erlauben es, schneller ein energetisches Minimum und damit verbunden eine geordnetere Mikrostruktur zu erreichen.

(vi) Die Stärke der Formänderung der Fasern beeinflusst das entstehende Muster.

(vii) Die Nächste-Nachbarn-Statistiken sind nicht für alle Wechsel eindeutig.

(viii) Abhängig von den betrachteten Phasen dominieren die ersten drei bzw. vier nächsten Nachbarn die Statistiken. Höhere Anzahlen an Nachbarn können daher vernachlässigt werden.

(ix) Die Ordnung der Ketten nimmt nach den Geschwindigkeitswechseln zu.

6.5 Schlussfolgerungen

Basierend auf der optimierten und parallelen Implementierung des Phasenfeldmodells konnte in diesem Abschnitt die Mikrostrukturentwicklung bei der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung in großskaligen dreidimensionalen Gebieten untersucht werden. Zuerst wurde das gekippte Wachstum von Lamellen in 2D untersucht, das die Grundlage für das Wachstum von Spiralen in 3D ist. Hierzu wurde ein neuer Mechanismus für gekipptes Wachstum basierend auf unterschiedlichen, aber isotropen Oberflächenenergien vorgestellt und systematisch der Einfluss der verschiedenen Parameter auf den Kippwinkel untersucht. Basierend auf den Studien des Kippwinkels konnte die Vermutung von Genau und Ratke [227] von möglichem Spiralwachstum der Fasern während der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung von Al-Ag-Cu mit Hilfe von großskaligen Phasenfeldsimulationen nachgewiesen werden. Anschließend wurde die Musterbildung der drei Festphasen in Al-Ag-Cu direkt nach der Erstarrung, kurz unterhalb der eutektischen Temperatur, mit dem Datensatz CAL und bei Raumtemperatur mit dem Datensatz EXP simuliert und qualitativ und quantitativ mit experimentellen Schliffbildern verglichen. Hierbei wurde eine gute Übereinstimmung zwischen den simulierten und experimentellen Mikrostrukturen gefunden. Abschließend wurde der Einfluss von Geschwindigkeitswechseln auf die Musterbildung sowie auf den Umordnungsprozess der Fasern in Al-Ag-Cu mit verschiedenen Statistiken untersucht.

Die übergeordneten Schlussfolgerungen aus den Studien zur ternären eutektischen gerichteten Erstarrung sind neben den Schlussfolgerungen in den Abschnitten 6.4.1 bis 6.4.4 :

(i) Das verwendete Phasenfeldmodell beschreibt qualitativ und quantitativ die Musterbildung bei der gerichteten ternären eutektischen Erstarrung.

(ii) Großskalige Simulationen erlauben die Untersuchung von komplexen dreidimensionalen Strukturen sowie die Bildung von Mustern, die in kleinen Simulationsgebieten nicht beobachtet werden konnten.

(iii) Hoch optimierte und massiv-parallele Löser sind für die effiziente Simulation von großskaligen Gebieten entscheidend.

(iv) Auf Basis der dreidimensionalen Mikrostrukturen ist es möglich, die Umordnungsprozesse der Strukturen zu untersuchen.

(v) Neuartige Auswertetechniken, wie PCA, Graphen und Ereignisse der Fasern, sind zur quantitativen Analyse der dreidimensionalen Strukturen notwendig.

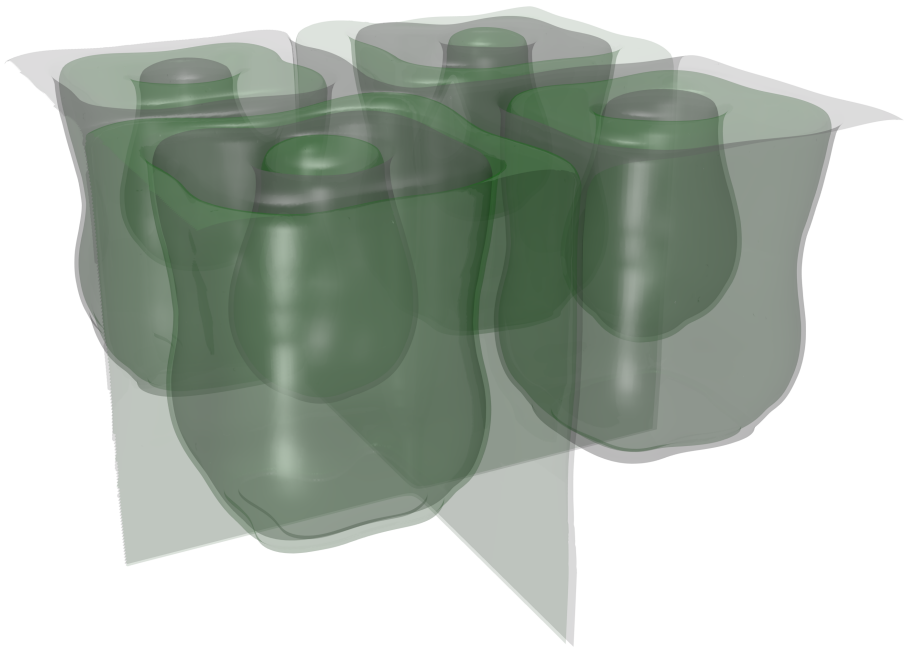


Abbildung 6.44: Mehrfache Nukleation von Fasern in einem binären Modellsystem.

6.6 Ausblick

Basierend auf den guten qualitativen und quantitativen Übereinstimmungen der Mikrostrukturen aus den Simulationen mit Experimenten haben sich weitere Themengebiete entwickelt, die nicht im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden.

Zur Erzeugung maßgeschneiderter Mikrostrukturen sind weitere systematische Untersuchungen zum Einfluss der Prozessparameter auf die Musterbildung notwendig. Neben der Mikrostrukturentwicklung in Al-Ag-Cu sind weitere ternäre Legierungen von hohem wissenschaftlichen sowie wirtschaftlichem Interesse, die auf Basis des hier vorgestellten Phasenfeldmodells untersucht werden können. Hierzu zählen u.a. die Systeme Ni-Al-Cr, Ni-Al-Mo, Fe-Al-Cr, Al-Si-Mg und Ni-Mo-Co. Für das System Ni-Al-Cr wurden bereits erste gemeinsame Arbeiten [313] basierend auf dem vorgestellten Phasenfeldmodell mit stöchiometrischen Phasen und dem vorgestellten Löser durchgeführt.

Durch die sich ändernde Löslichkeit von Ag in Al in Al-Ag-Cu nach der Erstarrung findet aufgrund des langsamen Erstarrungsprozesses eine weitere Festphasenumwandlung statt. Diese Festphasenumwandlung wurde in den hier gezeigten Untersuchungen aufgrund des hohen Rechenaufwands durch die Berechnung eines neuen ternären eutektischen Punktes abgebildet. Zur Untersuchung der Festphasenumwandlung und der sich dabei verändernden Muster ist es möglich, aus den simulierten 3D-Strukturen 2D-Schnitte parallel zur Erstarrungsfront zu extrahieren und diese als Grundlage für die Simulation der Festphasenumwandlung zu verwenden. Dies erlaubt es, den Rechenaufwand deutlich zu reduzieren und ein besseres Verständnis der Umlagerungsprozesse zu erhalten.

Auf Basis der dreidimensionalen Synchrotrontomographiedaten von A. Dennstedt wird neben dem Aufteilen, Zusammenwachsen und Überwachsen auch die Bildung neuer Fasern beobachtet. Zur Abbildung dieses Ereignisses muss das Phasenfeldmodell um die Beschreibung von Keimbildung erweitert werden. Zur Art der Keimbildung sowie deren Kalibrierung wurden im Pace3D-Framework bereits verschiedene Varianten umgesetzt und teilweise untersucht [141]. Für binäre und ternäre Systeme wurden erste gemeinsame Vorarbeiten durchgeführt, wie in Abbildung 6.44 zu sehen. Dies zeigt das Entstehen mehrerer Fasern (in Grau und Grün) ineinander für ein binäres Modellsystem.

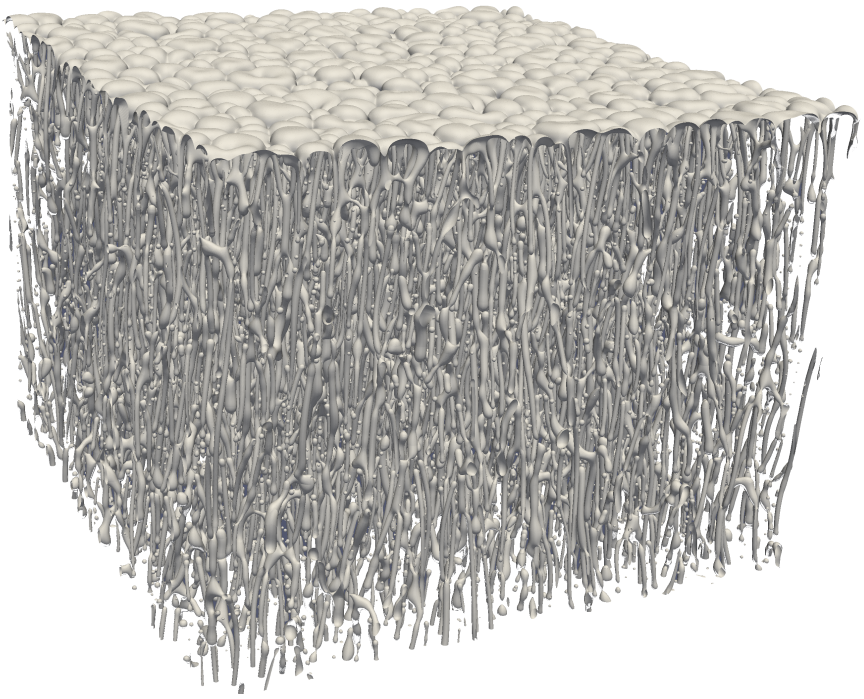


Abbildung 6.45: Teil einer Simulation zur Untersuchung von Zellstrukturen im System Al-Si-Mg in einem $1\,200 \times 1\,200 \times 127\,646$ Zellen großen Gebiet, basierend auf den Parametern von Schulz [147].

In Experimenten wird neben der reinen eutektischen Erstarrung auch das gleichzeitige Wachstum von Dendriten beobachtet. Hierbei erstarren zunächst Dendriten, welche mit der um mehrere Größenordnungen kleineren und später wachsenden eutektischen Struktur interagieren. Neben großskaligen Gebieten zur Simulation dieser skalenübergreifenden Strukturen sind Modellerweiterungen sowie weitere Optimierungen, Anpassungen und Erweiterungen des Lösers notwendig. Zur Simulation des Dendritenwachstums muss das hier vorgestellte Phasenfeldmodell um anisotrope Oberflächenenergien sowie um weitere Ordnungsparameter ergänzt werden. Durch die dendritischen Strukturen, die um mehrere Skalen größer sind als die eutektischen Strukturen, ist für die effiziente Simulation und zur Reduzierung des Rechenaufwands eine adaptive Anpassung der Gittergröße mit AMR-Techniken nützlich.

Neben der dendritisch eutektischen Erstarrung wird in Experimenten auch die Entstehung eutektischer Kolonien und Zellstrukturen beobachtet. Diese können ebenfalls mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Phasenfeldmodell und dem Löser durchgeführt werden. Arbeiten hierzu wurden von Schulz [147] für Zellstrukturen durchgeführt. Basierend auf dieser Arbeit wurden mit dem in Kapitel 4 vorgestellten Löser erste gemeinsame großskalige Phasenfeldsimulationen zur Untersuchung von Zellstrukturen in Al-Si-Mg durchgeführt. Der obere Teil der Zellstrukturen in einem Gebiet mit $1\,200 \times 1\,200 \times 127\,646$ Zellen, das mit 20 250 Rechenkernen auf dem Hazel Hen berechnet wurde, ist in Abbildung 6.45 dargestellt. Zur Auswertung solcher dreidimensionaler Mikrostrukturen sind wie für die ternären eutektischen Strukturen neuartige Auswertungstechniken notwendig.

7

Einfluss von Poren an Korngrenzen beim Sinterprozess

Keramiken sind die ältesten künstlich hergestellten Werkstoffe und beeinflussen das Leben des Menschen schon seit über 30 000 Jahren [398]. Neben Keramiken als Alltagsgegenstände, wie Figuren, Gefäße und Baumaterialien, gewinnen vor allem technische Keramiken eine immer größere Bedeutung für eine Vielzahl von heutigen Produkten. Keramische Produkte reichen von Zündkerzen bis bin zu elektrischen Bauteilen [399]. Diese zeichnen sich durch gute mechanische, thermische, optische und elektrische Eigenschaften aus. Keramiken werden dabei in der Regel aus einem Pulver hergestellt, das zu einem Grünkörper gepresst und anschließend gesintert wird. Beim Sintern verbinden und verdichten sich die Partikel des Grünkörpers durch Wärmebehandlung zu einem festen Körper. Für technische Anwendungen sind Keramiken mit definierten Eigenschaften von großem Interesse. Diese Eigenschaften werden beim Sintern von den Material- und Prozessparametern sowie der daraus entstehenden Mikrostruktur bestimmt. Besonders die sich entwickelnde Form und Größe der Körner und Poren in der Mikrostruktur beeinflussen die Eigenschaften. Eine hohe Dichte des polykristallinen Materials verbessert dabei für die meisten Anwendungen die mechanischen Eigenschaften. Daneben ist auch die Korngröße von Bedeutung, da viele Anwendungen eine feinkörnige Mikrostruktur verlangen [76].

Die treibende Kraft hinter dem Sinterprozess ist die Minimierung der gesamten Oberflächenenergie. Die gesamte Oberflächenenergie γA kann über die Oberfläche A und die spezifische Oberflächenenergie γ beschrieben werden. Die Energieminimierung kann zum einen durch Verdichten (Minimierung der Fest-Gas-Oberfläche $\Delta\gamma A$) und zum anderen durch Kornwachstum (Minimierung der Fest-Fest-Oberfläche $\gamma\Delta A$) sowie einer Kombination aus beidem ($\Delta(\gamma A)$) erreicht werden [400]. Der Sinterprozess ist in Abbildung 7.1 über die Zeit sowie die sich ändernde Dichte für die unterschiedlichen treibenden Kräfte und deren Einfluss auf die Mikrostruktur schematisch dargestellt. Während des Sinterns beeinflussen sich die Verdichtung und das Kornwachstum gegenseitig. Eine Vergrößerung der Korngröße reduziert dabei die treibende Kraft für die Verdichtung. Beim Sintern konkurrieren daher die beiden Prozesse Kornwachstum und Verdichtung. So entstehen typischerweise hohe Dichten für Materialien mit wenig Kornwachstum, wohingegen starkes Kornwachstum zu Restporosität in der Mikrostruktur führt [76].

Das Festphasensintern kann dabei, wie in Abbildung 7.1 dargestellt, in drei Stadien unterteilt werden: das Anfangsstadium, das Zwischenstadium und das Endstadium [401]. Im Anfangsstadium beginnen sich die Partikel im Grünkörper zu verbinden, indem sie einen Sinterhals bilden. Hierbei wird nahezu keine Verdichtung beobachtet. Im weiteren Verlauf bildet sich im Zwischenstadium ein dreidimensionales Netzwerk aus kanalartigen Poren zwischen den sich stark verdichtenden Partikeln aus. Die Porenkanäle brechen im Endstadium des Sinterprozesses zusammen und es entstehen isolierte Poren an den Korngrenzen.

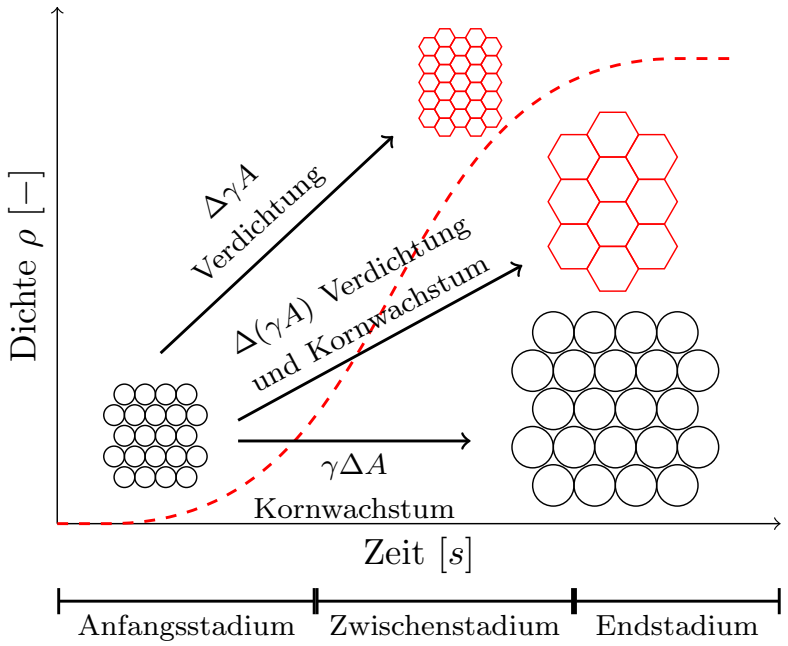


Abbildung 7.1: Grundsätzliches Verhalten der Partikel im Grünkörper über die Zeit beim Sintern nach [400]. Die Triebkraft zur Minimierung der Oberflächenenergie des Systems während des Sinterns kann die Minimierung der Fest-Gas-Oberfläche $\Delta\gamma A$, die Minimierung der Fest-Fest-Oberfläche $\gamma\Delta A$ oder eine Kombination aus beidem $\Delta(\gamma A)$ sein. In Rot sind die Verdichtung über die Zeit sowie die entsprechenden Mikrostrukturen eingezeichnet.

Im Endstadium gewinnt das Kornwachstum aufgrund der kleiner werdenden Poren an Bedeutung, wie in [76] beschrieben. Im Gegensatz zu den noch langen und großen Poren im Zwischenstadium, die für eine hohe Rückhaltekraft der Korngrenzenbewegung sorgen, wird diese Rückhaltekraft mit kleiner werdenden Poren im Endstadium geringer. Bei einer bestimmten Porengröße übersteigt die Kraft der Korngrenzenbewegung die Rückhaltekraft der Poren und Kornwachstum findet statt. Dies führt wiederum dazu, dass die treibende Kraft für die Verdichtung reduziert wird. Entsprechend der Rückhaltekraft können zwei Phänomene unterschieden werden: (i) das Ablösen von Poren an Korngrenzen und (ii) das Haften von Poren an bewegten Korngrenzen. Diese Phänomene sind beim Sintern von großer Bedeutung, da das Haften von Poren das Kornwachstum verlangsamt oder sogar hemmt und somit eine hohe Triebkraft für die Verdichtung erhalten bleibt.

Zur Beschreibung des Festphasensinterns im Endstadium wurden verschiedene analytische Modelle hergeleitet. Coble [402] leitet unter der Annahme von tetraederförmigen Körnern mit runden Poren an den Ecken ein Modell zur Beschreibung der Verdichtungsrate her. Kang und Jung [403] stellen basierend auf [402] ein verbessertes Modell zur Beschreibung der Verdichtungsrate vor, das nicht nur Volumendiffusion sondern auch Korngrenzdiffusion berücksichtigt. Brook [404] leitet unter der Annahme einer runden Pore an einer einzelnen Korngrenze den Übergang von porenkontrolliertem zu korngrenzenkontrolliertem Kornwachstum als Funktion von Korngröße und Porengröße her. Ein Modell zum Einfluss von beweglichen Partikeln an geraden und gekrümmten Korngrenzen wird von Gottstein und Shvindlerman [405] hergeleitet. Hiermit zeigen sie das Ablöse- und Anhaftverhalten von Poren an einer bewegten Korngrenze sowie deren Verformung.

Experimentell ist der Einfluss von Poren an Korngrenzen schwer zu untersuchen und erfordert spezielle Aufbauten. Rödel und Glaeser [406] zeigen einen experimentellen Aufbau, der es erlaubt, die Interaktion zwischen Poren und Korngrenzen ohne den Einfluss der Verdichtung zu untersuchen. Für ihre Untersuchungen platzieren sie Poren mit einer definierten Größe und einem definierten Abstand in einen Einkristall, den sie in einen Polykristall wachsen lassen.

Simulationen erlauben es heute aufgrund des kontinuierlichen Anstiegs der Rechenleistung [2], gezielt den Einfluss von Poren auf die Korngrenzen in komplexen dreidimensionalen Mikrostrukturen zu untersuchen [8]. Auf Basis eines dreidimensionalen Monte-Carlo-Potts-Modells untersuchen Tikare et al. [407] den Einfluss von mobilen Poren auf das Kornwachstum. Hierzu nutzen Tikare et al. eine idealisierte hexagonale Mikrostruktur mit konstanter Triebkraft aus Miodownik et al. [408]. Für die Untersuchungen werden die Poren an die Quadrupelpunkte platziert und die Porengröße und Porenmobilität systematisch variiert. Entsprechend den analytischen Beschreibungen von Gottstein und Shvindlerman [405] konnte damit eine reduzierte Korngrenzengeschwindigkeit durch haftende Poren sowie ein Ablösen der Poren bei kleinen Porenmobilitäten gezeigt werden.

Zur simulativen Untersuchung der Mikrostrukturentwicklung hat sich in den letzten Jahrzehnten vor allem die Phasenfeldmethode, wie in Kapitel 3 vorgestellt, etabliert. Phasenfeldmodelle zur Untersuchung von Kornwachstum werden von Selzer [409], Kumar et al. [410–412] und mit verschiedenen Anisotropien von Vondrous [183] auf Basis des Modells von [66] entwickelt. Das Zusammenspiel von Poren und Korngrenzen unter hydrostatischem Druck bei isotroper sowie kubischer Anisotropie wird von Jing et al. [413] untersucht. Phasenfeldmodelle zur Simulation des gesamten Sinterprozesses werden in [414–418] entwickelt. Kazaryan et al. [417] entwickeln ein allgemeines Phasenfeldmodell mit Bewegung von Starrkörpern (engl. *rigid body*). Damit zeigen sie in 2D eine gute Übereinstimmung des Schrumpfungsverhaltens der Poren mit der Analytik für verschiedene Diffusionsmechanismen. Shinagawa et al. [418] zeigen die Entwicklung verschiedener definierter Partikelanordnungen in 2D für unterschiedliche Widerstandskoeffizienten. Wang [414] untersucht mit seinem Phasenfeldmodell in 2D den Einfluss des Halswachstums von zwei Partikeln während des Sinterns für verschiedene Diffusionsmechanismen sowie die Verdichtung und das Kornwachstum einer 2D-Kugelpackung. Kumar et al. [415] untersuchen das Halswachstum von zwei unterschiedlich großen Partikeln in 2D auf Basis des Modells aus [414]. Ein Phasenfeldmodell zur Simulation des Sinterprozesses auf Basis von Leerstellen wird in Asp und Ågren [416] entwickelt. Hiermit zeigen sie verschiedene zweidimensionale Simulationen mit gleich und unterschiedlich großen Partikeln.

Der Einfluss von Poren auf die Korngrenzenbewegung sowie die Interaktion von Poren während des Endstadiums wurde bisher nicht systematisch untersucht. Hierfür wird im Folgenden basierend auf [66, 76] ein erweitertes Phasenfeldmodell zur Beschreibung der Interaktion zwischen Poren und Korngrenzen vorgestellt, mit dem der Einfluss von haftenden sowie von sich ablösenden Poren in kontrollierbaren, idealisierten sowie realistischen Mikrostrukturen untersucht wird.

7.1 Phasenfeldmodell zur Untersuchung der Poren und Korngrenzen Interaktion

Das Phasenfeldmodell zur Simulation der Interaktion zwischen Poren und Korngrenzen basiert auf dem in Kapitel 3 eingeführten freien Energiefunktional [76]. Die zu lösende partielle Differentialgleichung für die Phasenfelder ϕ_α schreibt sich

$$\tau\epsilon\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial t} = \underbrace{-\epsilon\left(\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi},\nabla\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha} - \nabla\cdot\frac{\partial a(\boldsymbol{\phi},\nabla\boldsymbol{\phi})}{\partial\nabla\phi_\alpha}\right) - \frac{1}{\epsilon}\frac{\partial\omega(\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha} - \frac{\partial f(\boldsymbol{\phi})}{\partial\phi_\alpha}}_{:=\delta\mathcal{F}/\delta\phi_\alpha} - \frac{1}{N}\sum_{\beta=1}^{N}\delta\mathcal{F}/\delta\phi_\beta\,. \tag{7.1}$$

Die Gradientenenergie $a(\boldsymbol{\phi},\nabla\boldsymbol{\phi})$ ist in (3.15) und das Obstacle-Potential $\omega(\boldsymbol{\phi})$ in (3.17) gegeben. Zur Modellierung des Drucks p_α^t in einer Pore mit dem Ordnungsparameter ϕ_α und dem Volumen $V_\alpha^t = \int_\Omega \phi_\alpha(\boldsymbol{x},t)d\Omega \,|\, \boldsymbol{x} \in \Omega_\alpha$ zum Zeitpunkt t wird wie in [76] das ideale Gasgesetz angenommen. Die treibende Kraft $f(\boldsymbol{\phi})$ kann hierbei unter der Annahme einer konstanten Temperatur T, einer konstanten Stoffmenge n_α und der universellen Gaskonstante R über das ideale Gasgesetz $p_\alpha^t V_\alpha^t = n_\alpha RT = \text{const} \,|\, \forall t \in \mathbb{R}$ in der Form

$$f(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{p_\alpha^0 V_\alpha^0}{V_\alpha^t}h_\alpha(\boldsymbol{\phi}) \tag{7.2}$$

geschrieben werden, mit der Interpolationsfunktion $h_\alpha(\boldsymbol{\phi})$ aus (3.20).

Der kinetische Koeffizient τ aus (3.38) berechnet sich aus den reziproken Mobilitäten $\tau_{\alpha\beta}$ zwischen zwei Phasenfeldern. Die Mobilität der Poren kann über den Fluss von Atomen hergeleitet werden [400]. Für die Oberflächendiffusion kann die Mobilität M_p geschrieben werden als

$$M_p = \frac{D_s\delta_s\Omega}{\pi\left(\frac{d_p}{2}\right)^4 k_B T} \propto \frac{1}{d_p^4}\,, \tag{7.3}$$

mit dem Diffusionskoeffizienten D_s, der Breite der Diffusionsschicht δ_s, dem Atomvolumen Ω, dem Porendurchmesser d_p, der Boltzmann-Konstante k_B und der Temperatur T. Für eine konstante Temperatur korreliert (7.3) wie dargestellt nur mit der Porengröße. Durch die Annahme einer kugelförmigen Pore kann der Durchmesser und somit die Mobilität während der Simulation über das Porenvolumen bestimmt werden.

7.2 Umsetzung und Optimierung des Modells

Das in Abschnitt 7.1 beschriebene Phasenfeldmodell ist im PACE3D-Framework aus Abschnitt 4.2.1 umgesetzt. Hierzu sind neben den Optimierungen zur Pufferung von Werten an der Zellkante und zur Klassifizierung, wie in Abschnitt 4.4.2 beschrieben, weitere Optimierungen zur effizienten Simulation umgesetzt. Zuerst wird auf die Umsetzung der Poren-Poren-Interaktion eingegangen. Danach wird die Optimierung zur Simulation von vielen Phasenfeldern vorgestellt. Zur effizienten Speicherung der Phasenfelder wird abschließend die parallele Umsetzung der Oberflächennetzausgabe vorgestellt.

Während der Simulation können Poren miteinander interagieren, wobei verschiedene Ereignisse auftreten können, wie ein Aufteilen, ein Zusammenwachsen oder ein Verschwinden der Poren. Da sich der Druck deutlich schneller angleicht als die sich langsam bewegenden Korngrenzen wird die Entwicklung des Drucks aufgrund der deutlich geringer werdenden Zeitschrittweite und dem damit verbundenen höheren Rechenaufwand nicht berechnet. Um auf diese Ergebnisse während der Simulation im Modell entsprechend reagieren zu können, werden die Poren verfolgt. Treten Poren dabei in Interaktion miteinander, werden die Drücke, die initialen Volumen und die Ordnungsparameter entsprechend dem idealen Gasgesetz angepasst. Zur Verfolgung der Poren wird der parallele Zusammenhangskomponentenalgorithmus aus Abschnitt 4.5 verwendet. Zur Detektion der Porenereignisse werden die Zusammenhangskomponenten aus dem aktuellen Zeitschritt mit den Zusammenhangskomponenten des vorherigen Zeitschritts verglichen. Überlagert sich eine Zusammenhangskomponente einer Pore im aktuellen Gebiet mit mehr als einer Zusammenhangskomponente einer anderen Pore des Gebiets aus dem vorherigen Zeitschritt, werden die Ordnungsparameter der beiden Poren zu einem Ordnungsparameter vereinigt. Zudem wird das initiale Volumen und der initialer Druck angepasst. Im umgekehrten Fall, dem Aufteilen, wird den neuen Zusammenhangskomponenten ein neuer Ordnungsparameter, und ebenfalls entsprechend der aktuellen Volumina, ein neues Initialvolumen und ein initialer Druck zugewiesen. Bei zu kleinen Poren oder zu geringem Druck kann zudem ein Verschwinden der Poren auftreten.

Für die Simulation von vielen Phasenfeldern kann der Phasenfeldvektor $\boldsymbol{\phi}$, wie in [76] beschrieben, lokal reduziert werden. Hierdurch kann der benötigte Arbeitsspeicher sowie die Rechenzeit auf einen konstanten Wert reduziert werden, wodurch solche Simulationen in vertretbarer Zeit durchgeführt werden können. Kim et al. [419] zeigen anhand von Phasenfeldsimulationen zu idealem Kornwachstum, dass es lokal ausreichend ist in 3D maximal sechs Phasen und in 2D maximal fünf Phasen zu berechnen, um realistisches Kornwachstum zu simulieren. Hierdurch ist es möglich, die Anzahl an Ordnungsparametern in einer Zelle auf einen konstanten Wert zu reduzieren. Durch die Annahme, dass alle nicht vorhandenen Phasen $\nabla\phi_\alpha$ an der Postion $\boldsymbol{x}$ und dem Zeitpunkt t null sind, kann das Set an aktiven Phasenindizes definiert werden als $\mathbb{A} := \{\alpha \in \mathbb{I} | \nabla\phi_\alpha > 0\}$. Hierdurch kann der reduzierte Phasenfeldvektor lokal geschrieben werden als $\boldsymbol{\Phi} := (\phi_\alpha)_{\alpha\in\mathbb{A}}$, mit $L = |\mathbb{A}| \leq N$ als Anzahl der Elemente im Vektor. Alle nicht vorhandenen Phasenindizes im reduzierten Phasenfeldvektor erhalten den Wert null $\boldsymbol{\phi} := (\phi_\alpha)_{\alpha\in\mathbb{I}}, \phi_\alpha = 0 \forall \alpha \in \mathbb{I} \setminus \mathbb{A}$. Hiermit lässt sich die Evolutionsgleichung für das Phasenfeld aus (3.37) in einer Zelle durch Nutzen von $\mathbb{A}$ und $\boldsymbol{\Phi}$ anstelle von $\mathbb{I}$ und $\boldsymbol{\phi}$ analog formulieren. Umgesetzt ist diese Evolutionsgleichung in PACE3D mit zwei Arrays pro Zelle, bei der im ersten Array der Phasenfeldindex und im zweiten Array der entsprechende Phasenfeldwert gespeichert ist, wie in [75] gezeigt. Abbildung 7.2 zeigt schematisch die Umsetzung der Reduzierung des N-Elemente langen Phasenfeldvektors auf die zwei Arrays. Alle inaktiven Indizes sind nicht in den Arrays hinterlegt und es wird der Wert null angenommen. Hierdurch ist ein effizientes Speichern der Ordnungsparameter und ein schnelles Zugreifen auf die Werte möglich, mit einer oberen Schranke von sechs Zugriffen in einer Zelle, um einen Wert zu lesen bzw. zu schreiben. Durch entsprechendes Ordnen der Werte in den Arrays sind meist nur ein oder zwei Zugriffe notwendig. Hierzu werden die aktiven Phasenfelder immer als erste Elemente im Array gespeichert und die nicht belegten Elemente danach mit entsprechenden Werten markiert, wodurch die Suche von Phasenfeldern im Array direkt abgebrochen werden kann.

Zur effizienten Speicherung der Daten können anstelle der Voxelzellen auch die Oberflächennetze an der 0,5-Isofläche zwischen den Phasenfeldern gespeichert werden, was die Speichermenge deutlich reduziert. Für die Berechnung der Oberflächennetze wird der Marching-Cube-Algorithmus [185] verwendet. Hierzu

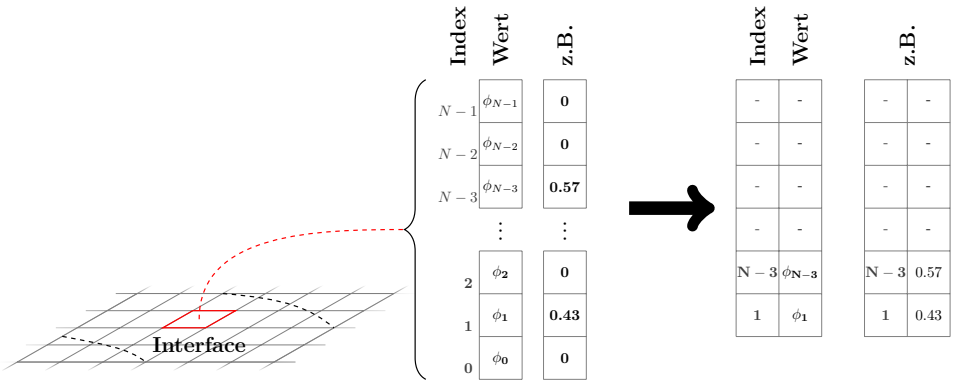


Abbildung 7.2: Schematische Darstellung der lokalen Reduzierung des N-Elemente großen Phasenfeldvektors auf zwei Arrays, in den die nicht vorhandenen Elemente mit Null angenommen werden.

wird jeweils ein Oberflächennetz für eine bestimmte Menge an Phasenfeldern, wie z.B. alle Poren, gleichzeitig berechnet und abgespeichert. Dies erhöht die Geschwindigkeit und reduziert die spätere Anzahl an Dateien. Im parallelen Fall wird der Algorithmus für jedes Teilgebiet gleichzeitig ausgeführt. Anschließend werden die Daten zu einer vom Benutzer festgelegten Anzahl an Prozessen gesendet und von dort in eine Datei im STL-Format geschrieben. Dies bietet den Vorteil, dass die Daten parallel geschrieben werden und nicht ein Prozess zum Flaschenhals wird. Zudem erlaubt es das STL-Format, die Daten unstrukturiert abzuspeichern, d.h. jedes Dreieck wird als eigene Zeile in der Datei gespeichert, weshalb die Reihenfolge der Daten keine Rolle spielt, verglichen mit dem Wavefront-obj-Dateiformat. Durch diese Art des gleichzeitigen Schreibens der Daten sind die Oberflächennetze jedoch auf unterschiedliche Dateien verteilt, die nachträglich zusammengesetzt werden müssen. Dies wird jedoch von den meisten Programmen wie Paraview und Meshlab direkt unterstützt. Zudem verhindert dieser Ansatz eine Überlastung des Dateisystems, wenn alle Prozesse gleichzeitig schreiben würden.

7.3 Ergebnisse und Diskussion

Im Folgenden wird der Einfluss von Poren im Endstadium des Sinterprozesses auf die Korngrenzbewegung untersucht. Für die Untersuchungen werden großskalige Simulationen mit dem Phasenfeldmodell aus Abschnitt 7.1 durchgeführt, die mit bis zu 2449 Recheneinheiten gelöst werden. Die Simulationsergebnisse werden mit analytischen Lösungen verglichen.

Während des Endstadiums bilden sich aus den langen Porenkanälen isolierte Poren an den Korngrenzen. Das darin eingeschlossene Gas gerät durch die weitere Verdichtung unter Druck und wirkt dieser entgegen, bis ein Gleichgewicht zwischen dem entstandenen Druck und der Oberflächenminimierung erreicht ist. Das Gleichgewicht zwischen Druck und Oberflächenminimierung einer einzelnen Pore in einem Korn wird im ersten Teil dieses Abschnitts untersucht. Durch die kleiner werdenden Poren beginnen die Körner zu wachsen und mit diesen zu interagieren. Der Einfluss von porenbehafteten sowie porenfreien Korngrenzen wird im zweiten Teil des Abschnitts untersucht. Hierzu werden idealisierte wie auch realistische Mikrostrukturen genutzt.

Die einzelnen Abschnitte sind wie folgt aufgebaut: Zuerst werden die verwendeten Simulationsstrukturen und die analytischen Gleichungen eingeführt. Danach werden die Simulationsergebnisse dargestellt und diskutiert. Poren sind in den Abbildungen in Rot eingezeichnet und die Korngrenzen sind in Braun dargestellt. Für alle Simulationen wird ein Zellbreite Δx von eins und $\epsilon = 4$ genutzt, was nach (3.9) einer Inferfacebreite von zwölf Zellen entspricht.

7.3.1 Stabilität von Poren in Körnern

Einzelne Poren in einem Einkristall entstehen während des Kornwachstums durch Ablösen der sich an den Korngrenzen entwickelnden Poren. Die Poren bilden dabei eine stabile Gleichgewichtsform zwischen dem entstehenden Druck und der Oberflächenminimierung, unter der Annahme eines idealen Gases, das nicht aus der Pore entweichen kann.

Dieses Gleichgewicht wird im Weiteren zur Validierung der Druckerweiterung im Phasenfeldmodell aus Abschnitt 7.1 und dessen Korrektheit, wie in [76] beschrieben, genutzt. Hierzu wird, wie schematisch in Abbildung 7.3 gezeigt, eine Pore (grau gestrichelter Kreis) mit einem sich nicht im Gleichgewicht befindenden Druck p^0, einem bestimmten Radius r_p^0 und einer gewählten Oberflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ innerhalb eines Korns platziert. Ausgehend hiervon wird die Schrumpfung der Pore simuliert, bis sich die Kraft der Oberflächenenergieminimierung und der entgegenwirkende Gasdruck im Gleichgewicht befinden. Im Gleichgewichtszustand, welcher durch einen konstanten Druck und ein konstantes Volumen definiert ist, werden der Druck p^t und der Radius der Pore im Gleichgewicht $r_p^{\text{gleich.}}$ gemessen. Durch den Unterschied zwischen dem initialen Druck und dem aktuellen Druck kann der Druckunterschied $\Delta p = p^t - p^0$ bestimmt werden. Analytisch kann der Zusammenhang von Druckunterschied, Oberflächenenergien und Gleichgewichtsradius über die Young-Laplace-Gleichung beschrieben werden. Der Druckunterschied entsprechend der Young-Laplace-Gleichung, abhängig von der Anzahl an betrachteten Dimensionen $d \in \{2,3\}$, ist definiert als

$$\Delta p = \frac{\gamma_{\alpha\beta}}{r_p^{\text{gleich.}}}(d-1)\,. \tag{7.4}$$

Zur Validierung werden zwei- sowie dreidimensionale Simulationsstudien durchgeführt und geprüft, ob die Druckdifferenz dem Wert der Young-Laplace-Gleichung entspricht. Als initialer Druck wird für alle Simulationen $p_\alpha^0 = 1$ verwendet. Für den zweidimensionalen Fall werden entsprechend den Werten in Tabelle 7.1 zwei Simulationsstudien durchgeführt. In der Studie a) wird für drei feste Oberflächenenergien der initiale Radius variiert, und in Studie b) wird für drei feste Radien die Oberflächenenergien variiert.

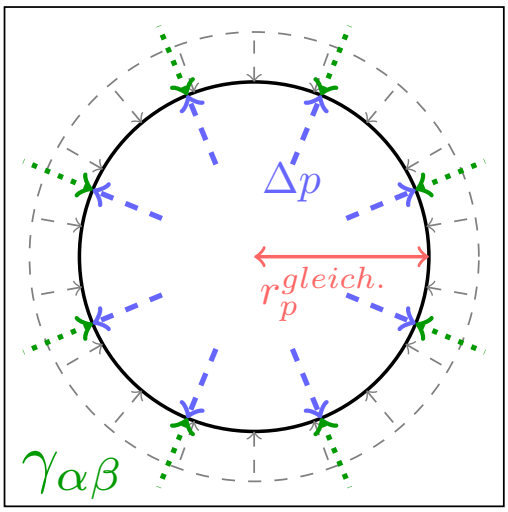


Abbildung 7.3: Schematische Darstellung des Gleichgewichtszustands einer Pore in einem Korn.

Tabelle 7.1: Simulationsparameter für die Validierung des Druckmodells in 2D

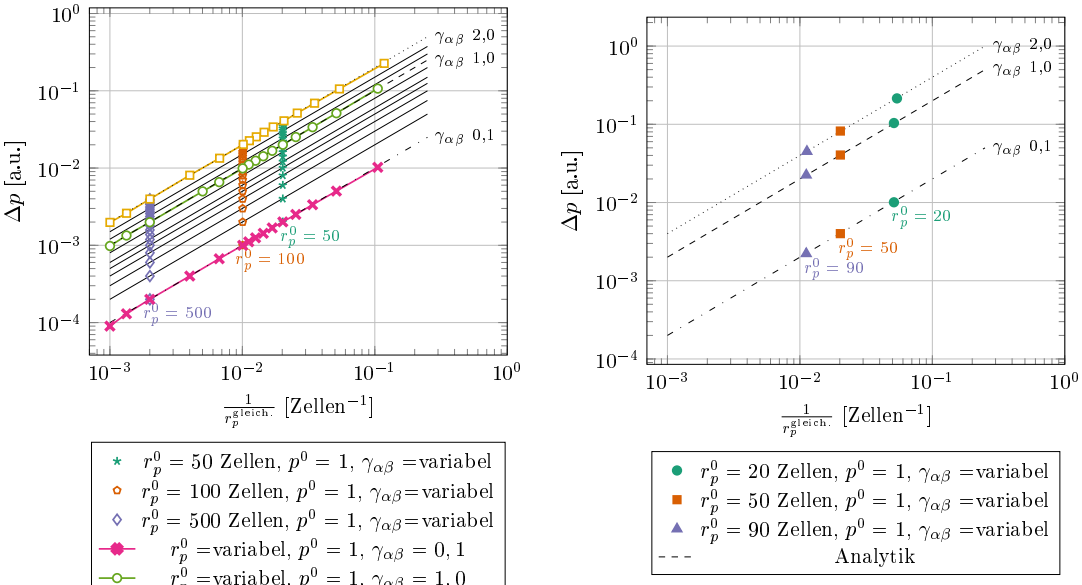
Parameter		**Simulationswerte**
Studie a)		
$\gamma_{\alpha\beta}$	[a.u.]	0,1 1 2
r_p^0	[Zellen]	Verschiedene Werte von 17 bis 2000
Studie b)		
r_p^0	[Zellen]	50 100 500
$\gamma_{\alpha\beta}$	[a.u.]	Verschiedene Werte von 0,1 bis 2

Die Druckdifferenzen der Simulationen über den reziproken Gleichgewichtsradius der zwei Studien sowie die analytischen Lösungen (schwarze Linie) sind in Abbildung 7.4(a) zusammengefasst. Durch die logarithmischen Achsen folgen die Symbole der sechs Studien verschiedenen Geraden. Für alle Simulationen ist eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung zu sehen.

Aufgrund des höheren Rechenaufwands werden nur ausgewählte Simulationen in 3D durchgeführt. Hierzu werden drei Radii und drei Oberflächenenergien entsprechend Tabelle 7.2 untersucht. Die Simulationsergebnisse in 3D sind in Abbildung 7.4(b) dargestellt und zeigen ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit den analytischen Lösungen aus (7.4). Die gute Übereinstimmungen der Druckdifferenzen in Abbildung 7.4 zeigt, das die eingeführte Erweiterung im Phasenfeldmodell in der Lage ist, den Druck in Poren korrekt zu beschreiben.

Tabelle 7.2: Simulationsparameter für die Validierung des Druckmodells in 3D

Parameter		**Simulationswerte**		
$\gamma_{\alpha\beta}$	[a.u.]	0,1	1	2
r_p^0	[Zellen]	20	50	90



(a) 2D **(b)** 2D

Abbildung 7.4: Vergleich der simulierten Druckdifferenz mit der Young-Laplace-Gleichung für unterschiedliche Oberflächenenergien und Porenradien $r_p^{\text{gleich.}}$ in 2D und 3D. Die Abbildungen basieren auf [76].

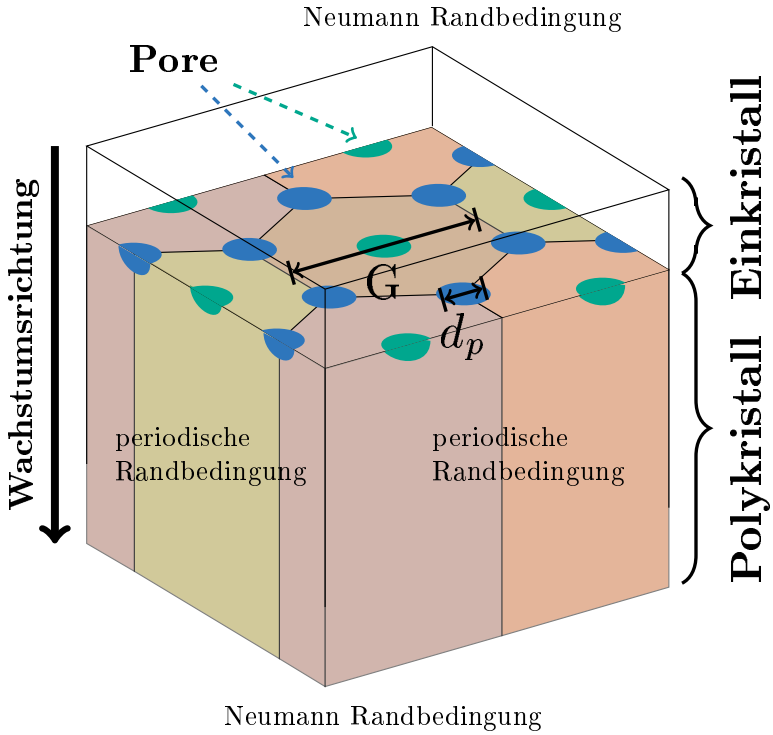


Abbildung 7.5: Simulationsaufbau der hexagonalen Mikrostruktur nach [76, 407, 408] zur Untersuchung des Haftens und Ablösens von Poren. In Blau ist die Porenplazierung nach Tikare et al. [407] und in Grün nach Miodownik et al. [408] dargestellt. Der Einkristall ist zur besseren Übersichtlichkeit ausgeblendet.

7.3.2 Poren an Korngrenzen von idealisierten Mikrostrukturen

Zur Untersuchung des Einfluss von mobilen Poren an sich bewegenden Korngrenzen werden im Folgenden Simulationen an idealisierten Mikrostrukturen, wie in [76], durchgeführt. Zur Untersuchung der Geschwindigkeit der Korngrenze stellen Tikare et al. [407] eine hexagonale Mikrostruktur auf Basis der Mikrostruktur aus Miodownik et al. [408] vor. Wie in Abbildung 7.5 in Braun dargestellt, besteht die Mikrostruktur aus nebeneinander angeordneten hexagonalen Prismen mit dem Durchmesser G. Durch die Verwendung gleicher Oberflächenenergien und gleich großer Hexagone entsteht hierdurch eine stabile Anordnung ohne Kornwachstum zwischen den hexagonalen Körnern. Am obereren Ende der hexagonalen Struktur ist ein Einkristall (in Abbildung 7.5 ausgeblendet) platziert, welcher mit einer konstanten treibenden Kraft F_b und einer konstanten Wachstumsgeschwindigkeit in die hexagonale Struktur wächst. An den Vierfachverzweigungen zwischen den Hexagonen und dem Einkristall sind in Blau die Poren mit dem Durchmesser d_p nach Tikare et al. [407] platziert. Parallel zu den hexagonalen Prismen werden in den Simulationen periodische Randbedingungen genutzt und am oberen und unteren Rand Neumann-Randbedingungen mit einem Gradienten von null verwendet. Die Oberflächenenergien $\gamma_{\alpha\beta}$ zwischen allen Grenzflächen sind für die Studien auf den Wert eins entdimensionalisiert. Die Porenmobilität wird entsprechend (7.3) berechnet, mit dem entdimensionalisierten Produkt $D_s\delta_s\Omega k_B^{-1}T^{-1}$ von 10 000. Die Mobilitäten werden in der Evolutionsgleichung des Phasenfelds in (3.38) als reziproke Werte für den kinetischen Koeffizienten verwendet. Für die Simulationen wird für die Mobilität der Grenzfläche zwischen Poren und Einkristall M_{sc} sowie zwischen Poren und Polykristall M_{pc} derselbe Wert verwendet. Darum werden im weiteren Verlauf die beiden Grenzflächen als M_p bezeichnet. Nach [401] wird abhängig vom Mobilitätsverhältnis $M = {}^{M_p}/_{M_b}$ der Grenzflächen zwischen Pore und Korn M_p sowie zwischen Korn und Korn M_b ein Hafen bzw. ein Ablösen vorhergesagt. Für Mobilitätsverhältnisse größer eins wird ein Anhaften der Poren an der Korngrenze und für Werte kleiner eins ein Ablösen der Poren von dieser erwartet.

Tabelle 7.3: Simulationsparameter für die Untersuchung des Ablösens und Haftens von Poren bei einer hexagonalen Mikrostruktur.

Parameter		**Simulationswerte**	
Variationen		M = 0,04	M = 0,05
G	[Zellen]	150	150
d_p	[Zellen]	20	20
M_p	[a.u.]	1	1
Gebietsgröße	[Zellen^3]	350 × 250 × 400	350 × 250 × 400
Rechenkerne		576	576

Zur Untersuchung dieser beiden Effekte, Ablösen und Haften der Poren an der Korngrenze zwischen Einkristall und hexagonalen Polykristall, werden in der ersten Studie zwei Korngrenzmobilitäten untersucht. Die Parameter für die beiden Simulationen sind in Tabelle 7.3 zusammengefasst. Beide Simulationen wurden auf dem SuperMUC in etwa 8h berechnet. In Abbildung 7.6 ist die zeitliche Entwicklung für die zwei Mobilitätsverhältnisse M = 0,04 und M = 0,05 dargestellt. Abhängig vom Mobilitätsverhältnis kann wie in [401] erwartet für den größeren Wert ein Haften und für den kleineren Wert ein Ablösen der Poren beobachtet werden. Für M = 0,05 kann, wie in den Abbildungen 7.6(a) bis 7.6(c), über die gesamte Simulationszeit ein Haften der Poren an den Vierfachverzweigungen der Korngrenzen beobachtet werden. Hierbei verändert die Pore ihre Form und nimmt eine Eiswaffelform an, wie in Abbildung 7.7(a) zu sehen. Dieses Verhalten wird auch in Tikare et al. [407] beobachtet. Für das kleinere Mobilitätsverhältnis von M = 0,04 ist ein Ablösen der Poren zu beobachten, wie in den Abbildungen 7.6(d) bis 7.6(f) dargestellt. Hierbei verformen sich die Poren nach Erreichen der Eiswaffelform weiter, wie in Abbildung 7.7(b) zu sehen. Zudem verlassen die Poren ihre stabile Postion an den Vierfachverzweigungen und wandern zu einer Tripellinie (Pfeile in Abbildung 7.6(e)) und von dort zu einer einzelnen Korngrenze (Abbildung 7.7(c)), von der sie sich am Ende lösen. Danach nehmen die Poren im Einkristall wie in Abschnitt 7.3.1 beschrieben einen Gleichgewichtszustand an. Für noch kleinere Mobilitätsverhältnisse lösen sich die Poren direkt von den Vierfachverzweigungen, wobei sie ihre Form kaum ändern. Zur weiteren Untersuchung der Porenposition werden für beide Mobilitätsverhältnisse die Poren wie in Abbildung 7.5 entsprechend Miodownik et al. [408] in die Mitte der hexagonalen Prismen platziert. Wie in Abbildung 7.8 zu sehen, lösen sich die Poren dabei für beide Verhältnisse ab, im Gegensatz zu den Simulationen in denen die Poren an den Vierfachverzweigungen platziert waren. Aufgrund der Position nehmen die Poren die Form eines Tropfens an. Hieraus kann geschlussfolgert werden, dass die Postion einen Einfluss auf das Ablöseverhalten von der Korngrenze hat.

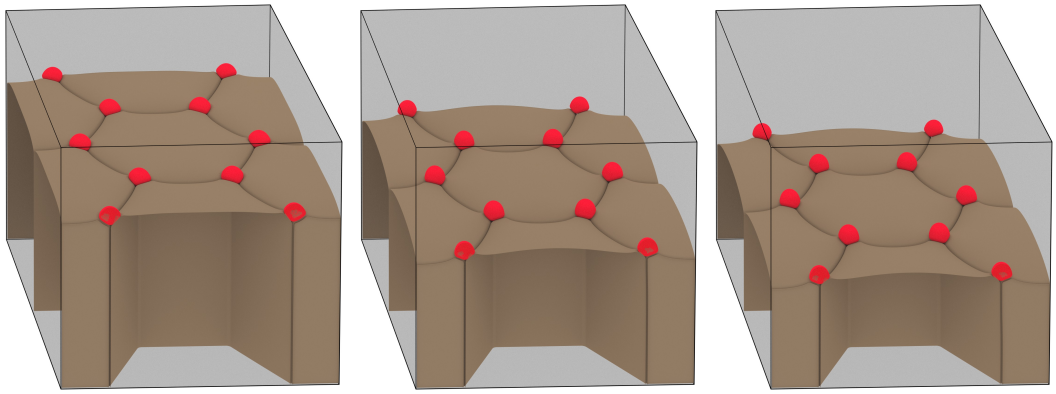
Um den Einfluss der Poren zu quantifizieren, wird im Folgenden die Geschwindigkeit von porenbehafteten sowie porenfreien Korngrenzen mit analytischen Gleichungen verglichen. Die Geschwindigkeit v_b der Korngrenze zwischen dem Einkristall und dem hexagonalen Polykristall kann aufgrund der idealisierten Geometrie analytisch beschrieben werden. Nach [401, 404] kann die Geschwindigkeit v_b der Korngrenze mit der Mobilität M_b und ohne den Einfluss von Poren beschrieben werden als

$$v_b = M_b F_b = \frac{2\gamma_{\alpha\beta} M_b}{G} \ . \tag{7.5}$$

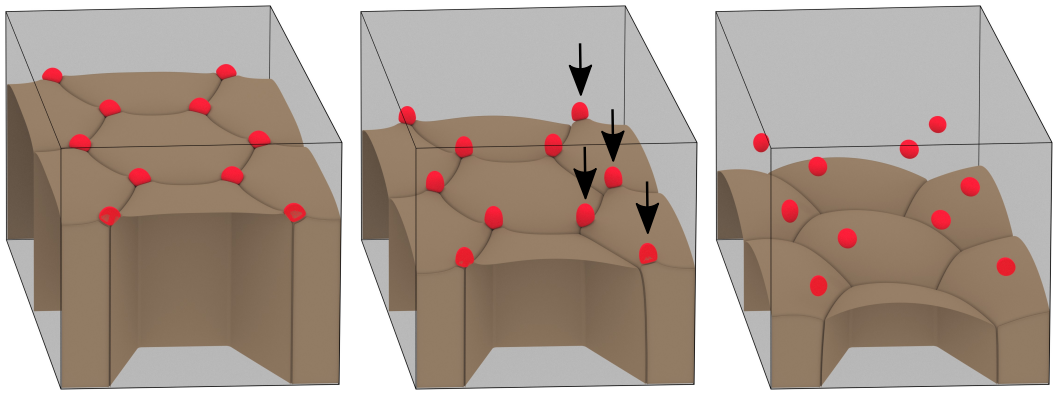
Für eine mit Poren behaftete Korngrenze zwischen dem Einkristall und den hexagonalen Prismen kann nach [401, 404] die Geschwindigkeit der Korngrenze mit der Porendichte N_d und der Rückhaltekraft der Poren F_p formuliert werden als

$$v_b^* = M_b \left(F_b - N_d F_p \right) \ . \tag{7.6}$$

Für den Fall, dass Poren an den Vierfachverzweigungen platziert sind, wie in Abbildung 7.5 dargestellt, leiten Tikare et al. [407] auf Basis der Modelle von [405, 420, 421] eine neue Formulierung her, die anstelle der Rückhaltekraft F_p die Porenmobilität M_p nutzt. Die Geschwindigkeit v_b^T nach Tikare et al. [407] mit der Mobilität M_p der Grenzfläche zwischen Poren und Korn sowie der Einheitsfläche der Poren N_A schreibt

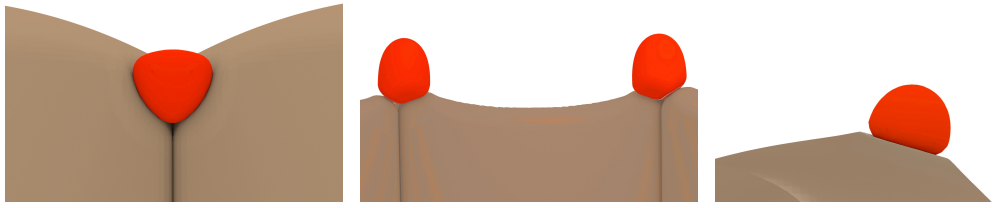


(a) initiale Mikrostruktur **(b)** t=300,6 **(c)** t=484,3



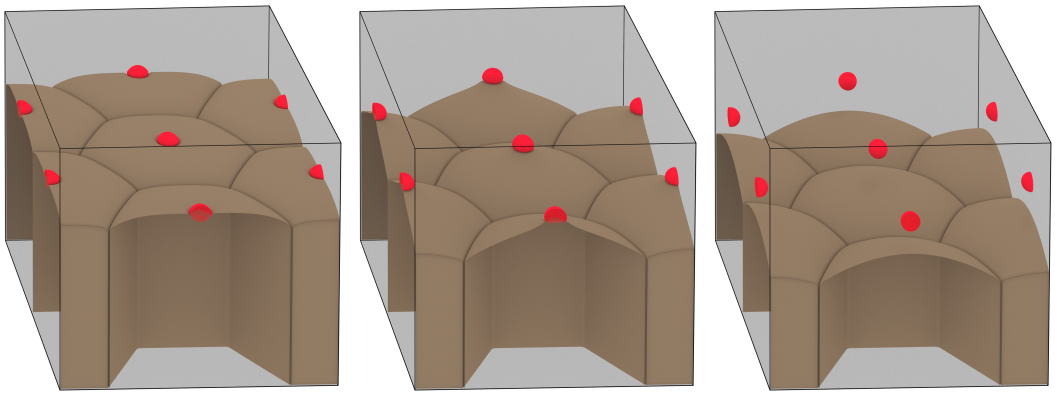
(d) initiale Mikrostruktur **(e)** t=300,6 **(f)** t=484,3

Abbildung 7.6: Entwicklung der Korngrenze und der Poren basierend auf [76] für einen Durchmesser der Hexagone von $G = 150$ Zellen. Für $M = 0{,}05$ ist ein haftenden der Poren (Abbildungen 7.6(a) bis 7.6(c)) und für $M = 0{,}04$ ein ablösenden der Poren (Abbildungen 7.6(d) bis 7.6(f)) zu beobachten. Der Pfeil zeigt die Veränderung der Porenposition vor dem Ablösen.

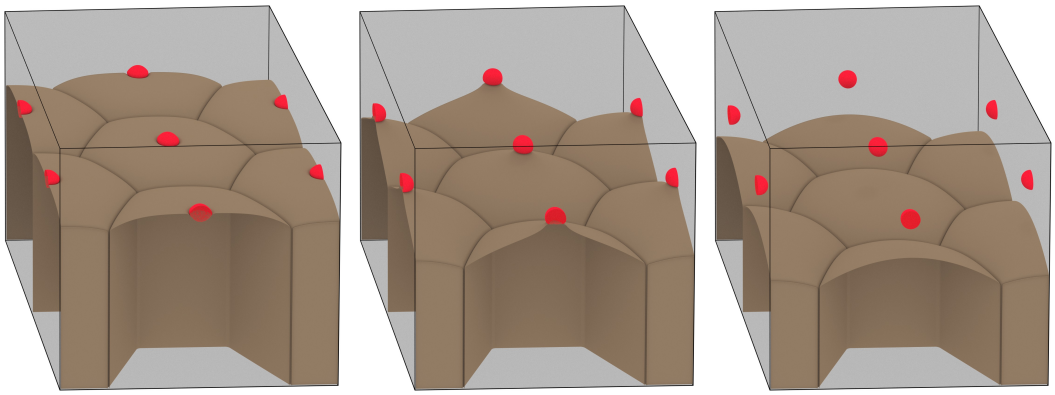


(a) Pore an einer Vierfachverzweigung **(b)** Poren an Vierfachverzweigungen vor dem Ablösen **(c)** Pore an einer Korngrenze

Abbildung 7.7: Position und Form der Poren an Korngrenzen analog zu [76].



(a) initiale Mikrostruktur **(b)** t=167 **(c)** t=217,1



(d) initiale Mikrostruktur **(e)** t=116,9 **(f)** t=183,7

Abbildung 7.8: Entwicklung der Korngrenzen mit Poren in der Mitte der hexagonalen Körner basierend auf [76]. Für $M = 0{,}05$ (Abbildungen 7.8(a) bis 7.8(c)) und für $M = 0{,}04$ (Abbildungen 7.8(d) bis 7.8(f)) ist ein Ablösen der Poren bei der Korngröße von $G = 150$ Zellen zu sehen.

Tabelle 7.4: Simulationsparameter analog zu [76] für die Untersuchung der Korngrenzgeschwindigkeit bei einer hexagonalen Mikrostruktur.

Parameter		**Variationen**				
G = 100 [Zellen] Gebietsgröße: $175 \times 250 \times 200$ Rechenkerne: 150		**Parameter**		**Simulationswerte**		
		d_p	[Zellen]	15	20	25	30
		M_p	[a.u.]	0,198	0,41	1	3,16
		M	[-]	5	10	15	20
G = 200 [Zellen] Gebietsgröße: $350 \times 250 \times 400$ Rechenkerne: 576		**Parameter**		**Simulationswerte**		
		d_p	[Zellen]	15	20	25	30
		M_p	[a.u.]	0,198	0,41	1	3,16
		M	[-]	5	10	15	20
G = 250 [Zellen] Gebietsgröße: $440 \times 250 \times 500$ Rechenkerne: 1100		**Parameter**		**Simulationswerte**		
		d_p	[Zellen]	15	20	25	30
		M_p	[a.u.]	0,198	0,41	1	3,16
		M	[-]	5	10	15	20

sich

$$v_b^T = F_b \frac{M_p M_b}{N_A M_b + M_p} . \tag{7.7}$$

Die Mobilität der Porengrenzfläche M_p kann mit (7.3) bestimmt werden. Die Einheitsfläche der Poren ist nach [407] definiert als

$$N_A = \frac{\pi N_p \left(\frac{d_p}{2}\right)^2}{A} , \tag{7.8}$$

mit der Fläche A und der Anzahl der darin enthaltenen Poren N_p.

Um den Einfluss der Poren zu quantifizieren, wird die Geschwindigkeit von porenbehafteten sowie porenfreien Korngrenzen mit den oben beschriebenen analytischen Gleichungen verglichen. Hierzu werden vier Mobilitätsverhältnisse, vier Porendurchmesser und drei Hexagondurchmesser, wie in Tabelle 7.4 gegeben, verwendet. Um ein Ablösen der Poren auszuschließen, werden größere Mobilitätsverhältnisse als zuvor untersucht. Für die Studien wird zur besseren Vergleichbarkeit ein konstantes Verhältnis M genutzt. Aufgrund der Abhängigkeit der Porenmobilität vom Durchmesser entsprechend (7.3), wird für jeden Porendurchmesser eine entsprechende Mobilität M_b der Korn-Korn-Grenzfläche berechnet, sodass M konstant bleibt.

Die Simulationsergebnisse sind in Abbildung 7.9 zusammengefasst. In den Diagrammen sind für die einzelnen Porendurchmesser die gemessenen Korngrenzgengeschwindigkeiten über das Mobilitätsverhältnis aufgetragen. Die analytische Lösung (7.7) ist als schwarz gestrichelte Linie eingezeichnet. Für die in den Simulationen gemessenen Geschwindigkeiten wird eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung gefunden. Aufgrund der sich zu einer Eiswaffel verformenden Poren ist die gemessene Geschwindigkeit in den Simulationen etwas höher als die durch die Analytik vorhergesagte, welche kugelförmige Poren an-

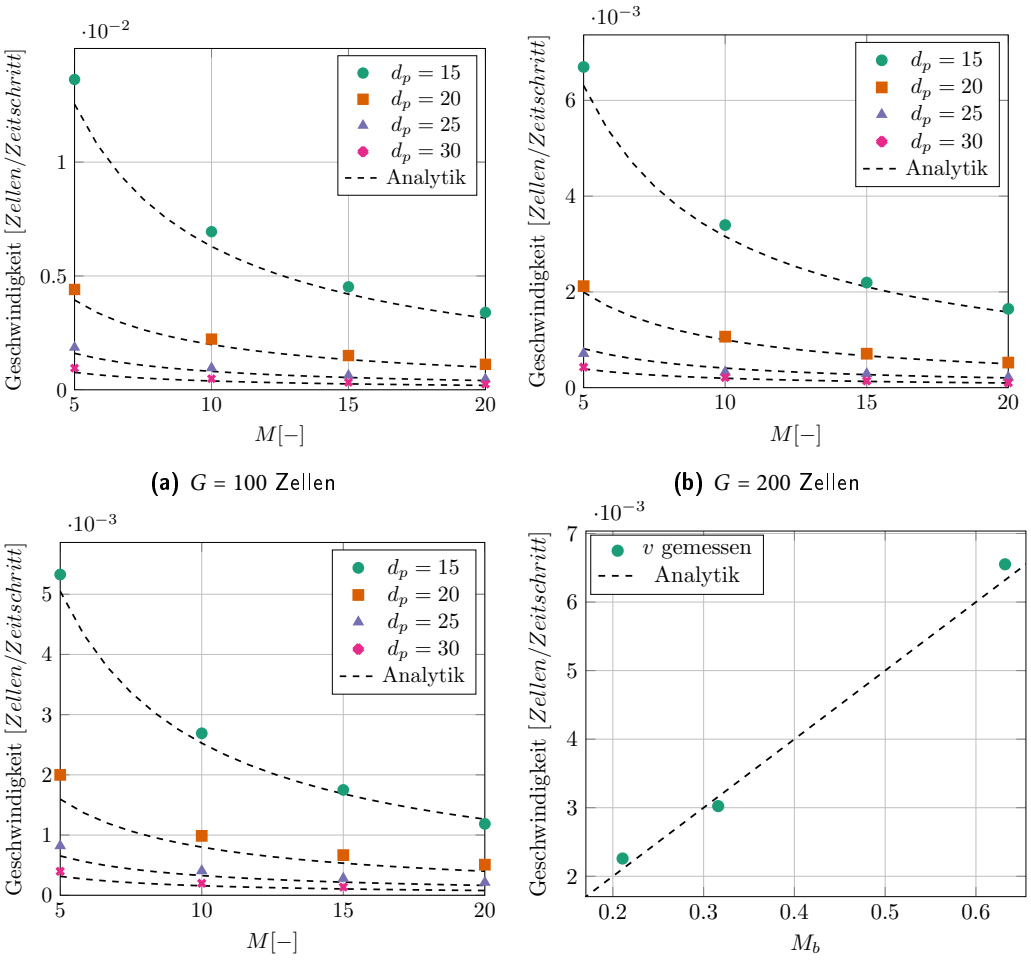


Abbildung 7.9: Vergleich der in der Simulation gemessenen Korngrenzengeschwindigkeit und der analytischen Werte für porenbehaftete und porenfreie Korngrenzen basierend auf [76]. Für den Vergleich wurden Simulationen mit drei Korndurchmessern G sowie vier Porendurchmessern d_p untersucht.

nimmt. Durch die Verformung reduziert sich die Porendichte, was entsprechend (7.7) zu einer Erhöhung der Geschwindigkeit führt. Dieses Verhalten wird auch in den Simulationen von Tikare et al. [407] mit einem Monte-Carlo-Potts-Modell beobachtet. Mit größer werdendem Porendurchmesser sowie größer werdendem Mobilitätsverhältnis ist in allen Diagrammen entsprechend (7.7) eine Abnahme der Geschwindigkeit zu beobachten. Zusätzlich werden in Abbildung 7.9(d) zur Validierung des Kornwachstums Simulationen mit verschiedenen Korngrenzmobilitäten ohne Poren durchgeführt. Die Korngrenzmobilitäten M_b entsprechen den Mobilitätsverhältnisen M der anderen Studien, unter der Annahme eines Porendurchmessers von $d_p = 15$. Für einen Hexagondurchmesser von 200 Zellen wird eine gute Übereinstimmung der Simulationen mit der analytisch berechneten Geschwindigkeit gefunden. Aufgrund der zeitlichen Auflösung der Simulationen ist in den Messungen ein leichtes Schwanken zu erkennen.

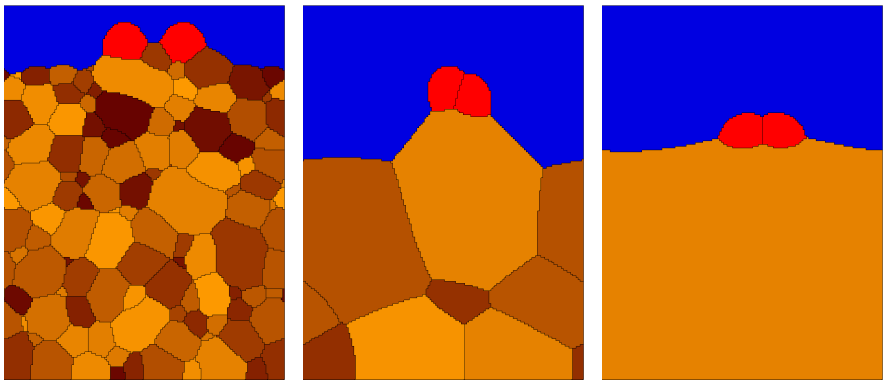
Tabelle 7.5: Simulationsparameter für die Validierung des Druckmodells

Parameter		**Simulationswerte**			
2D Studie					
$\gamma_{\alpha\beta}$	[a.u.]	1	1,5	2	3
r_p^0	[Zellen]	5	6	7	8
3D-Studie					
$\gamma_{\alpha\beta}$	[a.u.]	1	1,5	2	
r_p^0	[Zellen]	6	7	9	

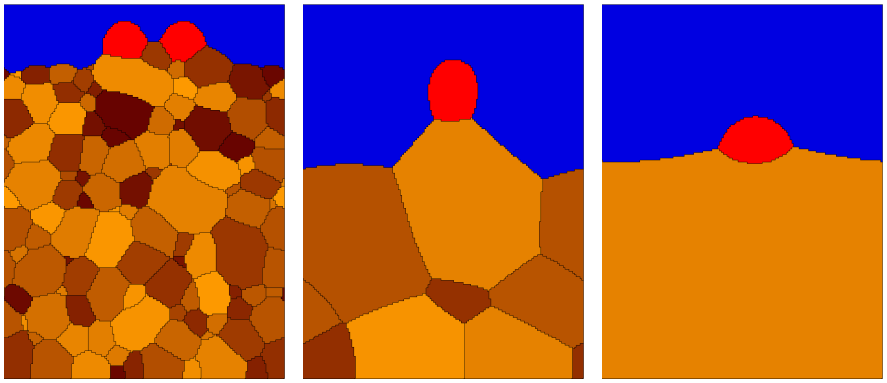
7.3.3 Einfluss der Poren-Poren-Interaktion

In realistischen Mikrostrukturen interagieren die Poren nicht nur mit der Korngrenze, sondern auch miteinander. Lange Poren des Zwischenstadiums teilen sich zum Endstadium hin auf und werden von den Korngrenzen entsprechend ihrer Mobilität mitgezogen. Während des weiteren Kornwachstums mit haftenden Poren können diese wieder in Kontakt kommen und sich zu einer Pore vereinigen. Um dies im Modell abzubilden, wird der in Abschnitt 7.2 beschriebene Algorithmus verwendet, um die Ordnungsparameter, Drücke und Volumen während der Simulation anzupassen. Zudem hängt die Mobilität der Pore, wie in Abschnitt 7.1 beschrieben, vom Volumen ab, was wiederum die Mobilität der Pore und damit das Anhaften bzw. Ablösen beeinflusst. Um diese Einflüsse über die Zeit zu veranschaulichen, werden drei Simulationen durchgeführt, wie in Abbildung 7.10 dargestellt. Hierfür wird zur besseren Veranschaulichung ein zweidimensionales 200×150 Zellen großes Gebiet verwendet. Zudem wird die Mikrostruktur des Polykristalls mit einer Voronoi-Verteilung generiert. In allen Simulationen wächst der Einkristall in den Polykristall, wobei sich das Ablöseverhalten der Poren unterscheidet. Der erste Fall in den Abbildungen 7.10(a) bis 7.10(c) zeigt die Interaktion der Poren ohne Anpassung der Ordnungsparameter und Mobilitäten. Dabei bilden die Poren zwischeneinander eine nicht physikalische Grenzfläche aus und die Poren bleiben an der Korngrenze haften. Im zweiten Fall, Abbildungen 7.10(d) bis 7.10(f), werden nur die Ordnungsparameter, Drücke und Volumen angepasst. Auch hier ist ein Haften der Pore zu beobachten. Im dritten Fall, Abbildungen 7.10(g) bis 7.10(i), wird während der Simulation zusätzlich noch die Mobilität abhängig vom Volumen der Pore berechnet. Hierbei wird die Pore durch das größere Volumen langsamer und löst sich von der Korngrenze ab. Dies zeigt, dass es notwendig ist, den Ordnungsparameter, die Volumina, die Drücke und auch die Mobilität während der Simulation anzupassen, um die Effekte durch die Poreninteraktion korrekt abzubilden.

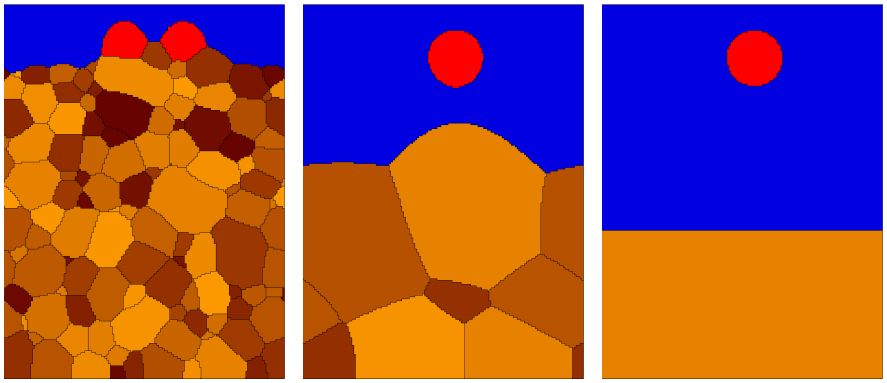
Zur Untersuchung des Druckes bei der Interaktion von Poren miteinander werden entsprechend Abschnitt 7.3.1 Studien für die Druckdifferenz in 2D und 3D durchgeführt. Im Gegensatz zur vorherigen Studie mit einer Pore werden in dieser Studie zwei Poren so in einem Korn platziert, dass sich diese nach kurzer Zeit berühren. Hierbei wird der Druck, das initiale Volumen und der Ordnungsparameter mit dem in Abschnitt 7.2 vorgestellten Algorithmus angepasst. Die variierten Parameter sind in Tabelle 7.5 zusammengefasst. Für die Studie in 2D werden zwei Poren mit den vier Porendurchmessern und Oberflächenenergien untersucht und nach deren Vereinigung die Druckdifferenz Δp und der Gleichgewichtsradius $r_p^{\text{gleich.-vereinigt}}$ gemessen, wie in Abbildung 7.11(a) dargestellt. In 3D werden, wie in Abbildung 7.11(b) gezeigt, drei Porendurchmesser und drei Oberflächenenergien untersucht. Auch hier stimmen die in der Simulation gemessenen Werte mit den analytischen Vorhersagen überein, wie bei der vorherigen Studie mit einer Pore. Die guten Übereinstimmungen zeigen, dass das Modell auch in der Lage ist, die Interaktion von Poren miteinander korrekt abzubilden. Hierauf aufbauend wird im Folgenden die Poren-Korngrenzen-Interaktion für unterschiedliche Mikrostrukturen untersucht.



(a) initiale Mikrostruktur **(b)** $t = 1995$ **(c)** $t = 5130$

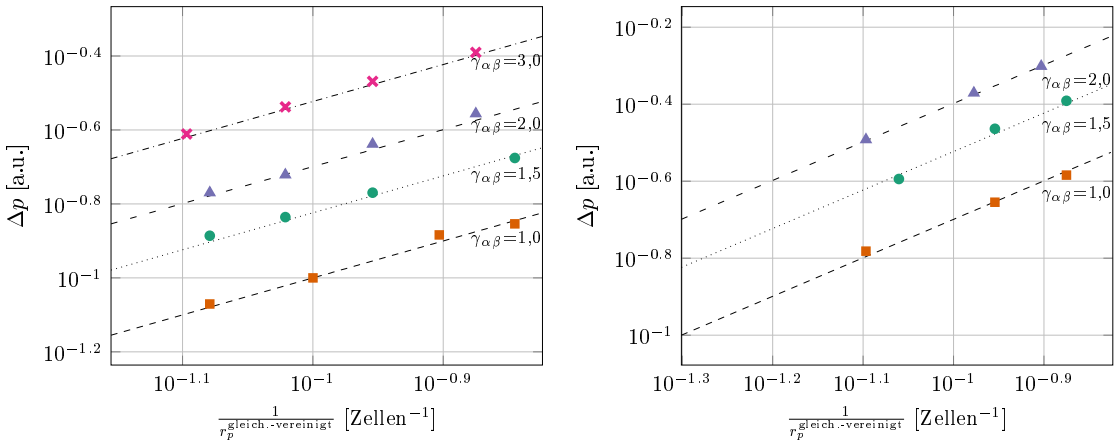


(d) initiale Mikrostruktur **(e)** $t = 1995$ **(f)** $t = 5130$



(g) initiale Mikrostruktur **(h)** $t = 1995$ **(i)** $t = 5130$

Abbildung 7.10: Einfluss der Poren-Poren-Interaktion auf das Ablöseverhalten von der Korngrenze, abhängig von den aktivierten Erweiterungen des Modells, bei denen der Ordnungsparameter, das Volumen, die Drücke und die Mobilität während der Simulation angepasst werden. In a) bis c) wird die Interaktion der Poren ohne Anpassung der Ordnungsparameter und Mobilitäten gezeigt. Abbildung d) bis e) zeigt den Einfluss bei der Anpassung der Ordnungsparameter und g) bis h) zusätzlich noch die der Mobilitäten.



(a) 2D **(b)** 2D

Abbildung 7.11: Vergleich der simulierten Druckdifferenz mit der Young-Laplace-Gleichung für unterschiedliche Oberflächenenergien und Porenradien $r_p^{\text{gleich.-vereinigt}}$ in 2D und 3D, nachdem sich zwei Poren vereinigt haben.

Tabelle 7.6: Simulationsparameter für die realistische Mikrostruktur zur Untersuchung des Ablöse- und Haftverhaltens von Poren.

Parameter		**Simulationswert**		
		a)	b)	c)
d_p	[Zellen]	10	14	20
M_p	[u.a.]	0,12	0,49	1,87
M	[-]	1,6	0,42	0,1

7.3.4 Poren an Korngrenzen von realistischen Mikrostrukturen

Um den Einfluss von Poren an realistischen Mikrostrukturen zu untersuchen, wird im Folgenden basierend auf [76] der experimentelle Aufbau von Rödel und Glaeser [406] verwendet. Hierbei werden wie in der vorherigen Studie Poren in gleichmäßigem Abstand zueinander zwischen dem Einkristall und dem Polykristall eingebracht. Der Polykristall ist hierbei aber aus unterschiedlichen Körnern aufgebaut. Experimentell wird dieser Aufbau zur Untersuchung von Mobilitätseffekten verwendet [406, 422–427]. Aufgrund der unterschiedlichen Formen und Größen der Körner findet neben dem Wachstum des Einkristalls in den Polykristall zusätzlich Kornwachstum im Polykristall statt. Daher verändert sich bei diesem Aufbau die Triebkraft des Einkristalls, was zu einer Reduzierung der Geschwindigkeit der Korngrenze zwischen Einkristall und Polykristall führt. Der Polykristall wird für die Untersuchungen über eine Voronoi-Verteilung mit einer homogenen Korngrößenverteilung und einer definierten Durchschnittskorngröße $\overline{G}$ generiert. Der Simulationsaufbau mit den Randbedingungen ist in Abbildung 7.12 dargestellt. Die Poren sind an den Ecken einer kartesischen Topologie mit dem Abstand f in der Grenzfläche zwischen Einkristall und Polykristall angebracht. Hierdurch können sich die Poren an Vierfachverzweigungen, Dreifachverzweigungen und an Korngrenzen befinden.

Zur Untersuchung des Haft- und Ablöseverhaltens der Poren von der Korngrenze werden entsprechend [76] drei Porendurchmesser d_p untersucht. Hierzu wird im Gegensatz zur vorherigen Studie die Mobilität der Korngrenze M_b festgehalten und die Porenmobilität entsprechend dem Porendurchmesser mit (7.3) berechnet, was zu unterschiedlichen M-Werten führt. Die Parameter sind in Tabelle 7.6 zusammengefasst. Für die Oberflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ werden realistische Verhältnisse zwischen Korn-Korn- und Poren-Korn-Grenzflächen verwendet. Die entdimensionalisierten Oberflächenenergien $\gamma_{\alpha\beta}$ betragen zwischen Korn und Korn 0,5 sowie zwischen Poren und Korn 1. Der Porenabstand f beträgt 60 Zellen und die initiale

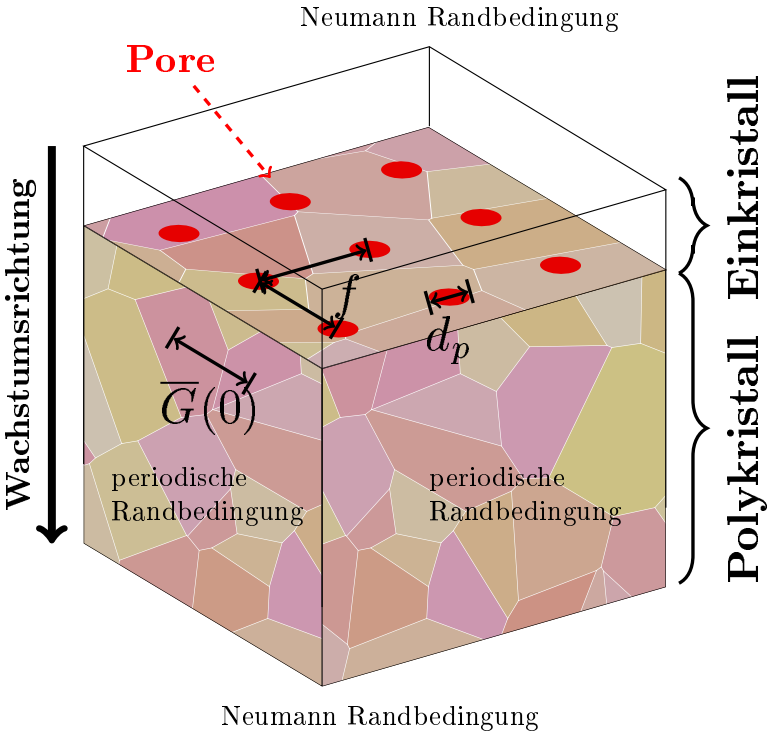


Abbildung 7.12: Simulationsaufbau und Parameter entsprechend des experimentellen Aufbaus von [428] mit dem Porenabstand f, dem Porendurchmesser d_p und dem initial durchschnittlichen Korndurchmesser $\overline{G}(0)$.

durchschnittliche Korngröße im Polykristall $\overline{G}(0) = 60$ Zellen. Die $240 \times 240 \times 320$ Zellen großen Simulationen wurden auf dem SuperMUC mit 289 Rechenkernen in 10h berechnet. Für alle Simulationen wird dieselbe Mikrostruktur verwendet.

Die zeitliche Entwicklung der Mikrostruktur für die drei Porendurchmesser von 10, 14 und 20 Zellen ist in Abbildung 7.13 für drei Zeitschritte zu sehen. Abhängig vom Durchmesser können drei Fälle unterschieden werden: Haften, Ablösen und teilweises Ablösen der Poren. Für den kleinsten Porendurchmesser von $d_p = 10$ Zellen ist wie in den Abbildungen 7.13(a) bis 7.13(c) ein Haften der Poren zu beobachten. Hierbei nehmen die Poren wie in der vorherigen Studie, abhängig von der Postion, unterschiedliche Formen an, wie die Eiswaffel- und Tropfenform. Zudem ist eine Bewegung der Poren entlang der Grenzfläche zwischen Einkristall und Polykristall zu beobachten. Zur besseren Veranschaulichung der Porenbewegung ist in Abbildung 7.14 die Mikrostruktur des Polykristalls mit den Poren aus der Vogelperspektive dargestellt. In Abbildung 7.14(a) ist die initiale Mikrostruktur gezeigt. Die Mikrostruktur zum Zeitschritt $t = 1680$ zusammen mit der initialen Position der Poren (Blau) ist in Abbildung 7.14(b) dargestellt. Über die Zeit ist aufgrund der größer werdenden Körner eine Bewegung der Poren entlang der Vierfach- und Dreifachverzweigungen des Polykristalls zu beobachten. Zudem ist eine deutliche Verzerrung der Poren quer zur Wachstumsrichtung zu erkennen, was zusammen mit den verschiedenen Korndurchmessern lokal zu unterschiedlichen Wachstumsgeschwindigkeiten führt. Die unterschiedlich geformten Poren entlang der Wachstumsrichtung zum Zeitschritt $t = 1680$ sind in Abbildung 7.15 freigestellt und nebeneinander angeordnet.

Für den Porendurchmesser von $d_p = 14$ Zellen kann wie in den Abbildungen 7.13(d) bis 7.13(f) zu sehen ein teilweises Ablösen der Poren beobachtet werden. Die Poren lösen sich dabei abhängig von ihre Position im Polykristall und der Größe der beteiligten Körner zu unterschiedlichen Zeitpunkten ab. Auch hier ist vor dem Ablösen ein Wandern der Poren von Mehrfachvereinigungen zu Korngrenzen zu beobachten.

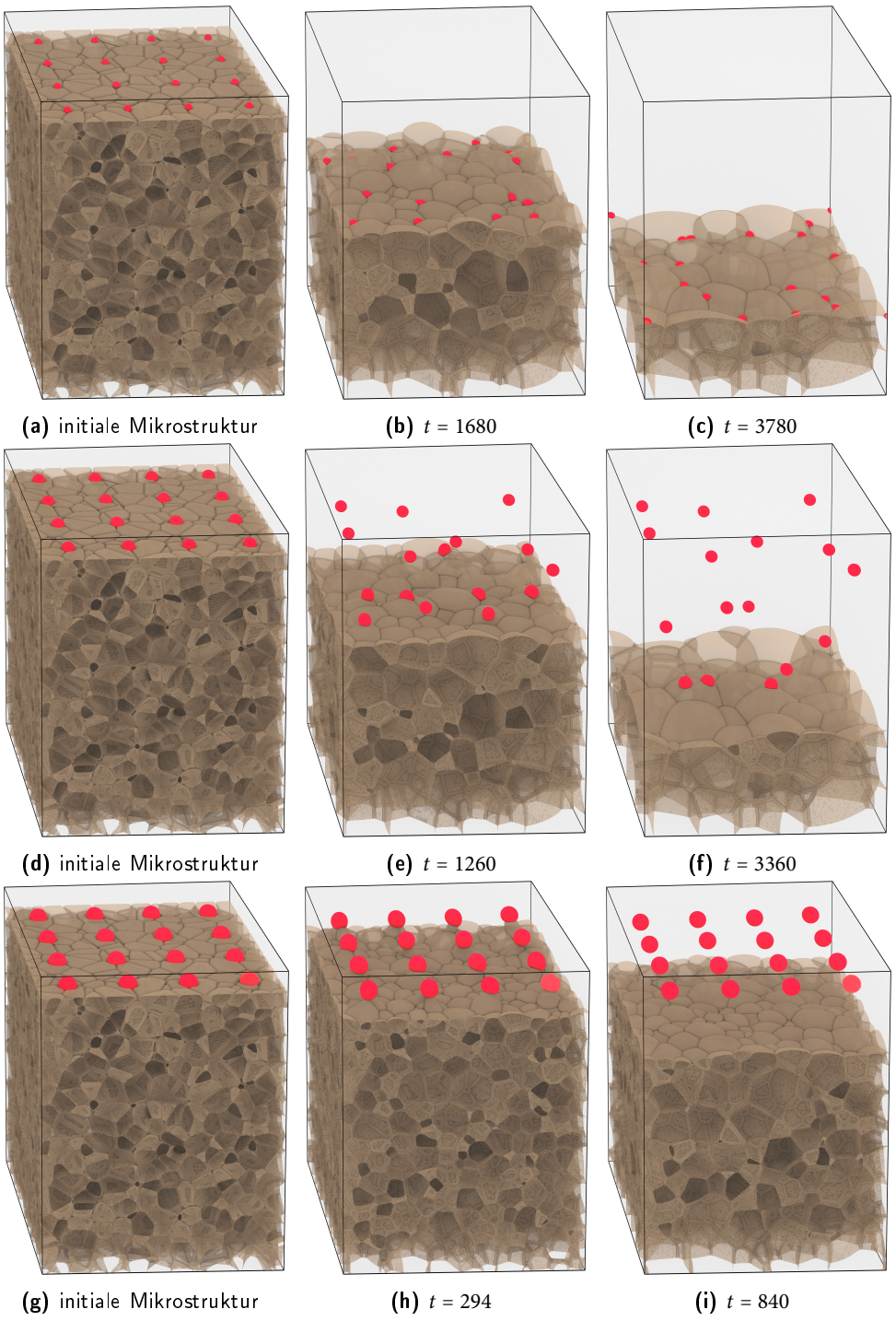
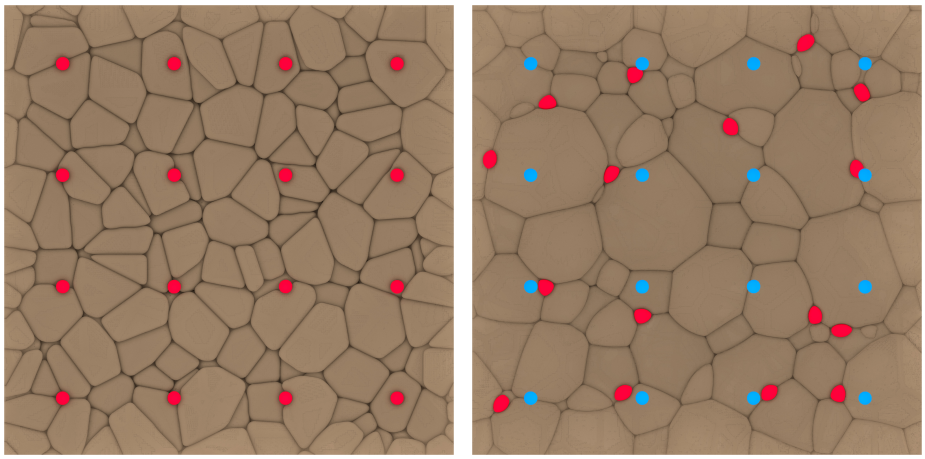


Abbildung 7.13: Entwicklung der Korngrenzen und der Poren basierend auf [76] im Falle von haftenden Poren (Abbildungen 7.13(a) bis 7.13(c)) mit $d_p = 10$, komplettem Ablösen (Abbildungen 7.13(g) bis 7.13(i)) mit $d_p = 20$ und teilweisem Ablösen (Abbildungen 7.13(d) bis 7.13(f)) mit $d_p = 14$ für unterschiedliche Zeitschritte. In allen Simulationen werden dieselbe Gebietsgröße von $320 \times 240 \times 240$ Zellen und dieselbe initiale Mikrostruktur verwendet.



(a) $t = 0$ **(b)** $t = 1680$

Abbildung 7.14: Aufsicht auf das Porengitter und den Polykristall zur Visualisierung der Porenbewegung senkrecht zur Wachstumsrichtungam Anfang und am Ende der Simulation basierend auf [76]. Die Simulation wurde mit dem Porendurchmesser $d_p = 10$, dem Porenabstand $f = 60$ und dem Korndurchmesser $\overline{G}(0) = 20$ durchgeführt. In b) ist zudem die initiale Porenposition in Blau und die Porenposition zum Zeitpunkt $t = 1680$ in Rot markiert.

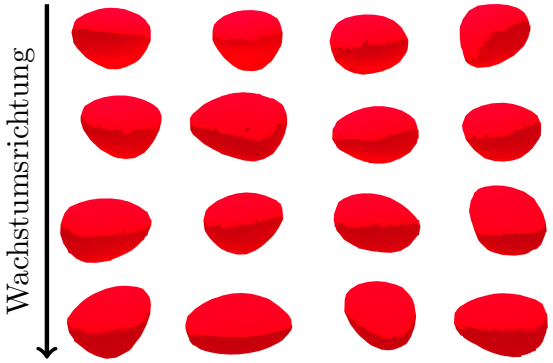


Abbildung 7.15: Freistellung der einzelnen verformten Poren aus Abbildung 7.14(b) in Wachstumsrichtung zum Zeitschritt $t = 1680$. Die Poren sind aus Abbildung 7.14(b) entnommen.

Für den größten Porendurchmesser von $d_p = 20$ Zellen ist ein sofortiges Ablösen aller Poren zu beobachten. Aufgrund des größeren Durchmessers sind die Poren zu inmobil und lösen sich ohne eine starke Formänderung von der Korngrenze ab. Die zeitliche Entwicklung ist in den Abbildungen 7.13(g) bis 7.13(i) dargestellt. Hierin ist zu beobachten, dass sich die Poren unabhängig von der Position und Art der Verzweigung ablösen.

Zur quantitativen Untersuchung des Haftens und Ablösens der Poren wird im Folgenden eine analytische Gleichung für die kritische Ablösegeschwindigkeit hergeleitet, welche zur Bestimmung der kritischen Korngröße im Polykristall genutzt wird. Diese Analytik wird anschließend mit den Ergebnissen mehrerer Simulationsserien verglichen.

Die maximale Geschwindigkeit der Korngrenze zwischen Einkristall und Polykristall lässt sich schreiben als

$$v_b = M_b F_{b,max} = \frac{\partial \Delta L}{\partial t}\,, \tag{7.9}$$

mit der Stecke ΔL, die der Einkristall in den Polykristall in einer gegeben Zeit t gewachsen ist. Die maximale Triebkraft $F_{b,max}$ aufgrund der Krümmung eines großen Korns in einen Polykristall mit der mittleren Korngröße $\overline{G}$ wird von Rödel und Glaeser [406] auf Basis der Arbeit von Hillert [429] hergeleitet. Die maximale Triebkraft mit der Oberflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ berechnet sich als

$$F_{b,max} = \frac{3\gamma_{\alpha\beta}}{\overline{G}(t)}\,. \tag{7.10}$$

Aufgrund der unterschiedlichen Korngrößen findet im Polykristall Kornwachstum statt, wodurch sich der durchschnittliche Korndurchmesser $\overline{G}(t)$ mit der Zeit t verändert. Die Entwicklung des Korndurchmessers $\overline{G}(t)$ wird über ein Kornwachstumsgesetz für den Polykristall der Form

$$\overline{G}(t)^n - \overline{G}(0)^n = k_n t \tag{7.11}$$

mit der initialen Korngröße $\overline{G}(0)$, der empirischen Kornwachstumskonstante k_n und dem Wachstumsexponenten n beschrieben. Abhängig vom Material werden in der Literatur verschiedene Wachstumsexponenten berichtet. Im weiteren Verlauf wird ein parabolisches Kornwachstumsgesetz auf Basis der Arbeit von Burke und Turnbull [430] mit $n = 2$ verwendet. Die Änderung der Korngröße im Polykristall führt wiederum zu einer Reduzierung der Triebkraft beim Wachstum des Einkristalls in den Polykristall.

Zur Beschreibung dieses Wachstums schlagen Rödel und Glaeser [406] einen parabolischen Ansatz vor. Die Wachstumsstrecke ΔL des Einkristalls in den Polykristall ist formuliert als

$$\Delta L^2 = k_L t\,, \tag{7.12}$$

mit der Wachstumskonstante k_L. Durch Differenzieren von (7.12) nach der Zeit t ergibt sich nach [428]

$$\frac{\partial \Delta L}{\partial t} = \frac{k_L}{2\Delta L}\,. \tag{7.13}$$

Mit (7.13) und (7.9) leiten Rödel und Glaeser [428] den Zusammenhang

$$M_b \gamma_{\alpha\beta} = \frac{k_L \overline{G}(t)}{6\Delta L} \tag{7.14}$$

her. Durch Einsetzen von (7.14) in (7.9) kann die Geschwindigkeit v_b berechnet werden.

Tabelle 7.7: Simulationsparameter analog zu [76] für den Vergleich der Korngröße $\overline{G}(0)$ und des Porenabstands f auf das Haft- und Ablöseverhalten von Poren in einer realistischen Mikrostruktur.

Parameter		Simulationswert		
f	[Zellen]	60	**Parameter**	**Simulationswerte**
			$\overline{G}(0)$ [Zellen]	20; 30; 35; 40; 45; 50; 60; 70; 90
		120	**Parameter**	**Simulationswerte**
			$\overline{G}(0)$ [Zellen]	20; 30; 35; 40; 45; 50; 60; 70; 90
		240	**Parameter**	**Simulationswerte**
			$\overline{G}(0)$ [Zellen]	20; 30; 40; 50; 60; 70; 80; 90
d_p	[Zellen]	14		
M_p	[u.a.]	0,49		
M	[-]	0,42		

Zur Berücksichtigung der Poren an der Korngrenze kann die Rückhaltekraft nach [401, 406] geschrieben werden als

$$F_p = \pi \frac{d_p}{2} \gamma_{\alpha\beta} \,. \tag{7.15}$$

Durch Einsetzen von (7.9) und (7.15) in (7.6) kann nach [401, 406] die kritische Korngröße des Polykristalls für das Ablösen der Poren vom Einkristall mit

$$\overline{G}(t) < \frac{6f^2}{\pi d_p} \left(1 - \frac{v_p}{v_b}\right) \tag{7.16}$$

bestimmt werden.

Ausgehend von (7.16) werden im weiteren Verlauf Simulationsstudien mit verschiedenen Porenabständen f und initialen Korndurchmessern $\overline{G}(0)$ in realistischen Mikrostrukturen untersucht. Um den Einfluss des teilweisen Ablösens genauer zu untersuchen, wird der Porendurchmesser von 14 Zellen verwendet. In Tabelle 7.7 sind die variierten Parameter zusammengestellt.

Alle Simulationen wurden auf dem SuperMUC mit einer Gebietsgröße von 480 × 480 × 300 Zellen und 240 × 240 × 300 Zellen durchgeführt. Das größere Gebiet wird für die Simulationen mit dem Porenabstand von $f = 240$ Zellen verwendet. Mit 2449 Rechenkernen benötigt die Berechnung etwa 16h. Das kleinere Gebiet wird für die Simulationen mit den beiden Porenabständen von $f = 60$ und 120 Zellen verwendet, die mit 289 Rechenkernen in etwa 10h berechnet werden.

Entsprechend (7.16) ist in den Simulationen für Durchmesser größer als der kritische Korndurchmesser ein Haften der Poren und für kleinere Korndurchmesser ein Ablösen zu beobachten. Für Korndurchmesser nahe dem kritischen Korndurchmesser ist ein Bereich mit teilweisem Ablösen zu beobachten. Die Simulationsergebnisse des Porenverhaltens sind in Abbildung 7.16 abhängig von der Korngröße und dem Porenabstand zusammengefasst. Die Simulationen, bei denen sich alle Poren ablösen bzw. haften bleiben, sind in Rot bzw. Grün markiert. Die Simulationen, in denen nur ein teilweises Ablösen beobachtet wird, sind zusammen mit dem prozentualen Anteil an sich ablösenden Poren in Blau markiert. In der Ablösekarte in Abbildung 7.16 sind abhängig vom initialen Korndurchmesser $\overline{G}(0)$ drei Bereiche zu sehen, für Ablösen, Haften und teilweises Ablösen. Der Porenabstand f hat hingegen nahezu keinen Einfluss. Dies ist in Übereinstimmung mit den experimentellen Arbeiten zu Aluminium von Rödel und Glaeser [406]. In Schwarz ist zudem die analytische Lösung aus (7.16) für die höchste und niedrigste gemessene Porengeschwindigkeit

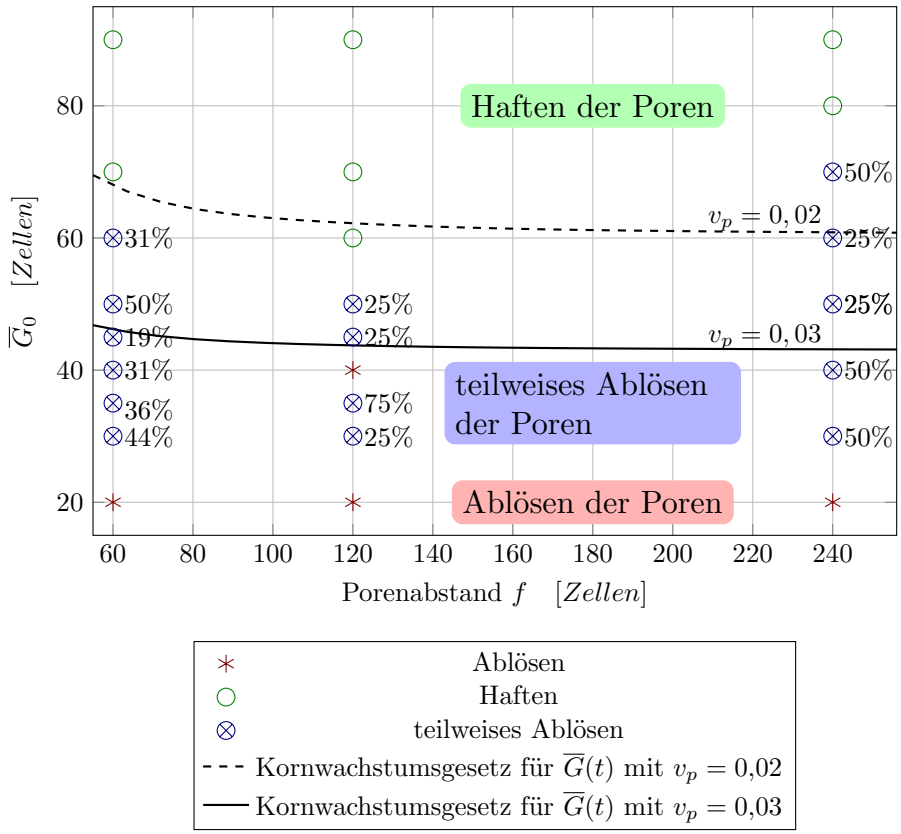


Abbildung 7.16: Karte des Porenverhaltens basierend auf [76] für unterschiedliche Korngrößen $\overline{G}(0)$ und Porenabstände f. Die roten Markierungen entsprechen dem vollständigen Ablösen und die grünen Markierungen entsprechen dem Haften der Poren. In Blau sind die Simulationen mit teilweisem Ablösen sowie mit prozentualem Ablöseanteil eingezeichnet. Die beiden schwarzen Linien entsprechen der oberen und unteren Schranke für das Ablösen nach (7.16).

kurz vor dem Ablösen dargestellt. Die durchschnittlich gemessenen Geschwindigkeiten sind v = 0,02 und v = 0,03 Zellen pro Zeitschritt.

Für Korngrößen kleiner als 20 Zellen ist ein Ablösen aller Poren zu beobachten. Für Korngrößen von mehr als 70 Zellen ist aufgrund der geringeren Triebkraft und der damit langsameren Geschwindigkeit der Korngrenze ein Haften der Poren an der Korngrenze zu sehen. Die Korngrößen dazwischen führen zu einem teilweisen Ablösen der Poren. Auch die analytischen Werte für das Ablösen der Poren aus (7.16) verlaufen durch diesen Bereich. Der prozentuale Anteil der sich ablösenden Poren in Abbildung 7.16 zeigt dabei keinen Trend, abhängig von der Korngröße und dem Porenabstand. Dies könnte jedoch auch an der geringen Anzahl an Poren in den Simulationen liegen. Zudem hat die Postion der Poren in der initialen Mikrostruktur einen Einfluss auf das Ablöseverhalten, wie in Abschnitt 7.3.2 gezeigt. Durch das Platzieren der Poren mit einem festen Abstand befinden sich die Poren an unterschiedlichen Mehrfachvereinigungen, was die Statistik vor allem im Bereich des teilweisen Ablösens beeinflussen kann.

Hieraus kann jedoch geschlussfolgert werden, dass die initiale Porenposition einen Einfluss auf das Ablöseverhalten in realistischen Mikrostrukturen hat, da sich Poren an Korngrenzen schneller ablösen als an Mehrfachverzweigungen. Poren an Verzweigungen lösen sich dabei erst später ab, da sie erst an eine Korngrenze wandern müssen, bevor sie sich ablösen können. Dieses Wandern der Poren ist in Abbildung 7.14 zu sehen. Während der Zeit, die die Poren benötigen, um an eine Korngrenze zu wandern, findet im Polykristall Kornwachstum statt. Hierdurch reduziert sich die Triebkraft und damit auch die Wachstumsrate des Einkristalls in den Polykristall. Nimmt die Wachstumsrate des Einkristalls in den Polykristall mit der Zeit

zu stark ab, können sich die Poren unter Umständen nicht mehr von der Korngrenze ablösen. Daher hat die initiale Postion der Poren einen starken Einfluss darauf, ob sich Poren ablösen oder nicht. Deshalb ist aufgrund der statistisch nicht gleich verteilten Poren kein klarer Trend in Abbildung 7.16 zu beobachteten. Größere Simulationen oder eine gezielte initiale Platzierung könnten es ermöglichen, einen statistischen Trend zu beobachten. Das generelle Ablöse- und Haftverhalten der Poren in den Simulationen entspricht den analytischen Vorhersagen aus (7.16) sowie den experimentellen Ergebnissen von Roedel und Glaeser [406].

Die hier gezeigten Simulationsergebnisse auf Basis des erweiterten Phasenfeldmodells erlauben es, das Haften und Ablösen von Poren in realistischen Mikrostrukturen zu simulieren. Die guten Übereinstimmungen der Simulationsergebnisse mit den analytischen Modellen ermöglichen es, das Verhalten von Poren an komplexeren Mikrostrukturen sowie den Einfluss weiterer Parameter zu untersuchen.

7.4 Schlussfolgerungen

Auf Basis eines um Druck erweiterten Phasenfeldmodells wurde in diesem Abschnitt analog zu [76] der Einfluss von mobilen Poren an Korngrenzen untersucht. Die Druckerweiterung wurde für einzelne wie auch sich vereinigende Poren mit der Young-Laplace-Gleichung in 2D und 3D validiert. Für die Untersuchung der Poren-Korngrenzen-Interaktion an der Grenzfläche zwischen einem Einkristall und Polykristall wurde eine gute Übereinstimmung mit den analytischen Gleichungen sowie experimentellen und simulativen Beobachtungen gefunden. Für die idealisierten Mikrostrukturen wurde der Einfluss der Poren an verschiedenen Korngrenzen untersucht und eine gute Übereinstimmung der Korngrenzengeschwindigkeit für porenbehaftete sowie porenfreie Korngrenzen mit analytischen Gleichungen gefunden. In den Simulationen mit einer realistischen Mikrostruktur wurden drei Fälle wie auch in Experimenten von [406] beobachtet: haftende Poren, komplettes Ablösen der Poren und teilweises Ablösen. Basierend auf einer analytischen Gleichung zur Bestimmung des kritischen Korndurchmessers im Polykristall für das Ablösen der Poren wurde eine Ablösekarte in Abhängigkeit des Porenabstands und der Korngröße erstellt, um diese Effekte zu quantifizieren.

Die Schlussfolgerungen dieser Untersuchungen sind:

(i) Das um Druck erweiterte Phasenfeldmodell stimmt mit den analytischen Gleichungen für den Druck, die Korngrenzengeschwindigkeit und dem kritischen Korndurchmesser im Polykristall überein.

(ii) Das Ablösen der Poren hängt von der Position der Poren wie z.B. an Mehrfachvereinigungen oder an Korngrenzen ab.

(iii) Zum Ablösen der Poren vom Einkristall wandern diese von Vierfach- über Dreifachverzweigungen zu einer Korngrenze, von der sie sich schließlich ablösen.

(iv) Das Ablösen der Poren von der Korngrenze hängt von der Korngrenzengeschwindigkeit und damit auch von der Korngröße im Polykristall ab.

(v) In realistischen Mikrostrukturen kann neben reinem Haften und Ablösen aufgrund der unterschiedlichen Porenpositionen und Korndurchmesser ein teilweises Ablösen beobachtet werden.

(vi) Die analytischen Gleichungen vernachlässigen sowohl in den idealisierten wie auch realen Mikrostrukturen die Porenposition und die Verformung der Poren. Vor allem in realistischen Mikrostrukturen ist daher nur eine grobe Abschätzungen möglich.

(vii) Der Porenabstand hat für die untersuchten Abstände nur einen untergeordneten Effekt auf das Ablösen der Poren, obwohl sich die Porendichte hierdurch verändert.

7.5 Ausblick

Basierend auf den guten Übereinstimmungen der Simulationen mit den analytischen Gleichungen kann mit dem hier vorgestellten Phasenfeldmodell ein weitergehendes Verständnis der Poreninteraktion an Korngrenzen aufgebaut werden. Hierzu kann des Weiteren der Einfluss auf das Ablöseverhalten abhängig von der Porenform und der Position genauer untersucht werden. Für die weitere Untersuchung des Haft- und Ablöseverhaltens von Poren an Korngrenzen in realistischen Mikrostrukturen ist der Einfluss der Korngrößenverteilung im Polykristall, die Anisotropie der Korngrenzenergie sowie unterschiedliche Mobilitäten genauer zu betrachten. Zur Erhöhung der statistischen Aussagekraft sind zudem größere Simulationsgebiete notwendig, was zur effizienten Berechnung weitere Optimierungen des Lösers sowie die Vektorisierung des Modells erfordert.

8

Abschließende Diskussion und Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die Mikrostrukturentwicklung von großskaligen Gebieten in 3D bei der Erstarrung von Legierungen und dem Endstadium des Sinterprozesses untersucht.
Im ersten Teil wurde das Phasenfeldmodell auf Basis des Großkanonischen Potentialansatzes zur Simulation der ternären eutektischen gerichteten Erstarrung im hoch optimierten Löser des massiv-parallelen waLBerla-Frameworks umgesetzt. In Performancemessungen wurde auf einem Rechenkern eine Peak Performance von 27,1% sowie ein gutes Skalierungsverhalten mit bis zu 1 048 576 Prozessen gezeigt. Aufbauend auf dem Löser wurde ausgehend von gekipptem Wachstum in 2D das in Experimenten vermutete Spiralwachstum in 3D nachgewiesen. Für das ternäre eutektische System Al-Ag-Cu wurde die Musterbildung während der Erstarrung sowohl vor als auch nach der Löslichkeitsänderung untersucht. Zudem wurde der Einfluss von verschiedenen Geschwindigkeitswechseln auf die Musterbildung untersucht. Hierbei wurde eine gute qualitative wie auch quantitative Übereinstimmung zu Experimenten gefunden.
Im zweiten Teil wurde der Einfluss von Poren an Korngrenzen während des Endstadiums des Sinterprozesses analysiert. Im Pace3D-Löser wurde für die Modellierung der Poren-Poren-Interaktion mit Hilfe von Zusammenhangskomponenten ein effizienter und paralleler Algorithmus zur Beschreibung von Topologieänderungen umgesetzt. Abhängig von der Korngröße, dem Porenabstand, der Porengröße und der Porenposition wurde von den Poren ein Ablösen bzw. ein Haften an den Korngrenzen beobachtet. Für das Ablöseverhalten wurde zudem eine Separationskarte erstellt.

Durch die hoch optimierten und parallelen Löser für Hochleistungsrechner war es möglich, die Mikrostrukturentwicklung von komplexen dreidimensionalen Effekten in großskaligen Gebieten auf Basis von Phasenfeldsimulationen zu untersuchen. Hierdurch konnten experimentelle Vermutungen nachgewiesen sowie verschiedene Effekte von unterschiedlichen Materialien untersucht werden. Neuartige Auswertetechniken zur Beschreibung der dreidimensionalen Strukturen wie Graphen, Ereignisse der Fasern und Hauptkomponentenanalysen auf Basis von Zweipunktkorrelationen ermöglichten es, neue Erkenntnisse und Vergleiche zwischen den Mikrostrukturen herzustellen.

Literatur

[1] J. Hötzer*, M. Kellner*, P. Steinmetz* und B. Nestler (*equal authors). "Applications of the phase-field method for the solidification of microstructures in multi-component systems". In: *Journal of the Indian Institute of Science* (2016).

[2] G. E. Moore u. a. "Cramming more components onto integrated circuits". In: *Proceedings of the IEEE* 86.1 (1998), S. 82–85.

[3] P. Steinmetz, Y.C. Yabansu, J. Hötzer, M. Jainta, B. Nestler und S.R. Kalidindi. "Analytics for microstructure datasets produced by phase-field simulations". In: *Acta Materialia* 103 (2016), S. 192–203.

[4] P. Steinmetz, J. Hötzer, M. Kellner, A. Dennstedt und B. Nestler. "Large-scale phase-field simulations of ternary eutectic microstructure evolution". In: *Computational Materials Science* 117 (2016), S. 205–214.

[5] H. Sutter. "The free lunch is over: A fundamental turn toward concurrency in software". In: *Dr. Dobb's journal* 30.3 (2005), S. 202–210.

[6] R. Qin und H. Bhadeshia. "Phase field method". In: *Materials science and technology* 26.7 (2010), S. 803–811.

[7] A. Dennstedt. private communication. 2016.

[8] J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, B. Nestler, A. Dennstedt, A. Genau, M. Bauer, H. Köstler und U. Rüde. "Large scale phase-field simulations of directional ternary eutectic solidification". In: *Acta Materialia* 93 (2015), S. 194–204.

[9] J. Hötzer, O. Tschukin, M.B. Said, M. Berghoff, M. Jainta, G. Barthelemy, N. Smorchkov, D. Schneider, M. Selzer und B. Nestler. "Calibration of a multi-phase field model with quantitative angle measurement". In: *Journal of Materials Science* 51.4 (2016), S. 1788–1797.

[10] J.S. Rowlinson. "Translation of J.D. van der Waals'"The thermodynamik theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density"". In: *Journal of Statistical Physics* 20.2 (1979), S. 197–200.

[11] "On the Theory of superconductivity". In: *Collected Papers of L.D. Landau*. Hrsg. von D.T. HAAR. Pergamon, 1965, S. 546–568.

[12] L.D. Landau und I.M. Khalatikow. *The Selected Works of L.D. Landau (Engl. transl.)* 1963.

[13] J. W. Cahn und J. E. Hilliard. "Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy". In: *The Journal of Chemical Physics* 28.2 (1958), S. 258–267.

[14] J. W. Cahn. "Free Energy of a Nonuniform System. II. Thermodynamic Basis". In: *The Journal of Chemical Physics* 30.5 (1959), S. 1121–1124.

[15] J. W. Cahn und J. E. Hilliard. "Free Energy of a Nonuniform System. III. Nucleation in a Tow-Component Incompressible Fluid". In: *The Journal of Chemical Physics* 31.3 (1959), S. 688–699.

[16] J.E. Hilliard und J.W. Cahn. "On the nature of the interface between a solid metal and its melt". In: *Acta Metallurgica* 6.12 (1958), S. 772–774.

[17] S. M. Allen und J. W. Cahn. "A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening". In: *Acta Metallurgica* 27.6 (1979), S. 1085–1095.

[18] S.M. Allen und J.W. Cahn. "Ground state structures in ordered binary alloys with second neighbor interactions". In: *Acta Metallurgica* 20.3 (1972), S. 423–433.

[19] S. M. Allen und J. W. Cahn. "A correction to the ground state of {FCC} binary ordered alloys with first and second neighbor pairwise interactions". In: *Scripta Metallurgica* 7.12 (1973), S. 1261–1264.

[20] B.I. Halperin, P.C. Hohenberg und S.K. Ma. "Renormalization-group methods for critical dynamics: I. Recursion relations and effects of energy conservation". In: *Physical Review B* 10 (1 Juli 1974), S. 139–153.

[21] P. C. Hohenberg und B. I. Halperin. "Theory of dynamic critical phenomena". In: *Reviews of Modern Physics* 49 (3 Juli 1977), S. 435–479.

[22] J.S. Langer und R.F. Sekerka. "Theory of departure from local equilibrium at the interface of a two-phase diffusion couple". In: *Acta Metallurgica* 23.10 (1975), S. 1225–1237.

[23] J. B. Collins und H. Levine. "Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth". In: *Physical Review B* 31.9 (1985), S. 6119.

[24] G. Caginalp und P. Fife. "Phase-field methods for interfacial boundaries". In: *Physical Review B* 33.11 (1986), S. 7792.

[25] G. Caginalp und P. Fife. "Higher-order phase field models and detailed anisotropy". In: *Physical review B* 34.7 (1986), S. 4940.

[26] J.S. Langer. "Models of pattern formation in first-order phase transitions". In: *Directions in condensed matter physics* 1 (1986), S. 165–186.

[27] R. Kobayashi. "Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 63.3 (1993), S. 410–423.

[28] A. A. Wheeler, W. J. Boettinger und G. B. McFadden. "Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys". In: *Physical Review A* 45 (10 Mai 1992), S. 7424–7439.

[29] A.A. Wheeler, W.J. Boettinger und G.B. McFadden. "Phase-field model of solute trapping during solidification". In: *Physical Review E* 47.3 (1993), S. 1893.

[30] A. Karma. "Phase-field model of eutectic growth". In: *Physical Review E* 49.3 (1994), S. 2245.

[31] J.A. Warren und W.J. Boettinger. "Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method". In: *Acta Metallurgica et Materialia* 43.2 (1995), S. 689–703.

[32] I. Loginova, G. Amberg und J. Ågren. "Phase-field simulations of non-isothermal binary alloy solidification". In: *Acta materialia* 49.4 (2001), S. 573–581.

[33] H. Emmerich, M. Jurgk und R. Siquieri. "Multiscale simulations of micro-structure selection in binary alloy solidification". In: *physica status solidi (b)* 241.9 (2004), S. 2128–2135.

[34] A. Karma. "Phase-field formulation for quantitative modeling of alloy solidification". In: *Physical Review Letters* 87.11 (2001), S. 115701.

[35] H.J. Diepers, D. Ma und I. Steinbach. "History effects during the selection of primary dendrite spacing. Comparison of phase-field simulations with experimental observations". In: *Journal of Crystal Growth* 237–239, Part 1 (2002). The thirteenth international conference on Crystal Growth in conjunction with the eleventh international conference on Vapor Growth and Epitaxy, S. 149–153.

[36] W. L. George und J. A. Warren. "A parallel 3D dendritic growth simulator using the phase-field method". In: *Journal of Computational Physics* 177.2 (2002), S. 264–283.

[37] L. Gránásy, T. Börzsönyi und T. Pusztai. "Crystal nucleation and growth in binary phase-field theory". In: *Journal of crystal growth* 237 (2002), S. 1813–1817.

[38] L. Gránásy, T. Börzsönyi und T. Pusztai. "Nucleation and bulk crystallization in binary phase field theory". In: *Physical review letters* 88.20 (2002), S. 206105.

[39] H. Kobayashi, M. Ode, S. G. Kim, W. T. Kim und T. Suzuki. "Phase-field model for solidification of ternary alloys coupled with thermodynamic database". In: *Scripta Materialia* 48.6 (2003), S. 689–694.

[40] L. Gránásy, T. Pusztai, T. Börzsönyi, J. Warren und J. Douglas. "A general mechanism of polycrystalline growth". In: *Nature materials* 3.9 (2004), S. 645–650.

[41] D. Danilov und B. Nestler. "Dendritic to globular morphology transition in ternary alloy solidification". In: *Physical review letters* 93.21 (2004), S. 215501.

[42] P.R. Cha, D.H. Yeon und J.K. Yoon. "Phase-field model for multicomponent alloy solidification". In: *Journal of crystal growth* 274.1 (2005), S. 281–293.

[43] B. Böttger, J. Eiken, M. Ohno, G. Klaus, M. Fehlbier, R. Schmid-Fetzer, I. Steinbach und A. Bührig-Polaczek. "Controlling Microstructure in Magnesium Alloys: A Combined Thermodynamic, Experimental and Simulation Approach". In: *Advanced Engineering Materials* 8.4 (2006), S. 241–247.

[44] P.K. Galenko, S. Reutzel, D.M. Herlach, S.G. Fries, I. Steinbach und M. Apel. "Dendritic solidification in undercooled Ni–Zr–Al melts: Experiments and modeling". In: *Acta Materialia* 57.20 (2009), S. 6166–6175.

[45] J. Eiken. *A phase-field model for technical alloy solidification*. Shaker Verlag, 2010.

[46] N. Ofori-Opoku und N. Provatas. "A quantitative multi-phase field model of polycrystalline alloy solidification". In: *Acta Materialia* 58.6 (2010), S. 2155–2164.

[47] T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, A. Yamanaka, A. Nukada, T. Endo, N. Maruyama und S. Matsuoka. "Peta-scale phase-field simulation for dendritic solidification on the TSUBAME 2.0 supercomputer". In: *2011 International Conference for, High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC)* (2011), S. 1–11.

[48] A. Yamanaka, T. Aoki, S. Ogawa und T. Takaki. "GPU-accelerated phase-field simulation of dendritic solidification in a binary alloy". In: *Journal of Crystal Growth* 318.1 (2011), S. 40–45.

[49] E. Wesner, A. Choudhury, A. August, M. Berghoff und B. Nestler. "A phase-field study of large-scale dendrite fragmentation in Al–Cu". In: *Journal of Crystal Growth* 359 (2012), S. 107–121.

[50] T. Takaki, T. Shimokawabe, M. Ohno, A. Yamanaka und T. Aoki. "Unexpected selection of growing dendrites by very-large-scale phase-field simulation". In: *Journal of Crystal Growth* 382 (2013), S. 21–25.

[51] T. Takaki. "Phase-field Modeling and Simulations of Dendrite Growth". In: *ISIJ International* 54.2 (2014), S. 437–444.

[52] J. Eiken. private communication. 2015.

[53] S. Kim, W. Kim und T. Suzuki. "Phase-field model for binary alloys". In: *Physical review e* 60.6 (1999), S. 7186.

[54] J. Tiaden, B. Nestler, H. Diepers und I. Steinbach. "The multiphase-field model with an integrated concept for modelling solute diffusion". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 115.1 (1998), S. 73–86.

[55] T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe und T. Aoki. "Two-dimensional phase-field study of competitive grain growth during directional solidification of polycrystalline binary alloy". In: *Journal of Crystal Growth* (2016),

[56] J. Zhang, C. Zhou, Y. Wang, L. Ju, Q. Du, X. Chi, D. Xu, D. Chen, Y. Liu und Z. Liu. "Extreme-scale Phase Field Simulations of Coarsening Dynamics on the Sunway Taihulight Supercomputer". In: *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*. SC '16. Salt Lake City, Utah: IEEE Press, 2016, 4:1–4:12.

[57] O. Penrose und P.C. Fife. "Thermodynamically consistent models of phase-field type for the kinetic of phase transitions". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 43.1 (1990), S. 44–62.

[58] H.W. Alt und I. Pawlow. "A mathematical model of dynamics of non-isothermal phase separation". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 59.4 (1992), S. 389–416.

[59] A. A. Wheeler, G.B. McFadden und W.J. Boettinger. "Phase-field model for solidification of a eutectic alloy". In: *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. Bd. 452. 1946. The Royal Society. 1996, S. 495–525.

[60] Z. Bi und R.F. Sekerka. "Phase-field model of solidification of a binary alloy". In: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 261.1 (1998), S. 95–106.

[61] I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler, M. Seeßelberg, R. Prieler, G.J. Schmitz und J.L.L. Rezende. "A phase field concept for multiphase systems". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 94.3 (1996), S. 135–147.

[62] H. Garcke, B. Nestler und B. Stoth. "On anisotropic order parameter models for multi-phase systems and their sharp interface limits". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 115.1 (1998), S. 87–108.

[63] B. Nestler und A. Wheeler. "A multi-phase-field model of eutectic and peritectic alloys: numerical simulation of growth structures". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 138.1 (2000), S. 114–133.

[64] N. Moelans. "A quantitative and thermodynamically consistent phase-field interpolation function for multi-phase systems". In: *Acta Materialia* 59.3 (2011), S. 1077–1086.

[65] H. Garcke, B. Nestler und B. Stinner. "A diffuse interface model for alloys with multiple components and phases". In: *SIAM J. APPL. MATH.* 64.3 (2004), S. 775–779.

[66] B. Nestler, H. Garcke und B. Stinner. "Multicomponent alloy solidification: Phase-field modeling and simulations". In: *Physical Review E 71, 041609* (2005).

[67] B. Nestler. "A 3D parallel simulator for crystal growth and solidification in complex alloy systems". In: *Journal of Crystal Growth* 275.1 (2005), e273–e278.

[68] J. Eiken, B. Böttger und I. Steinbach. "Multiphase-field approach for multicomponent alloys with extrapolation scheme for numerical application". In: *Physical Review E* 73.6 (2006), S. 066122.

[69] G. Caginalp. "Stefan and Hele-Shaw type models as asymptotic limits of the phase-field equations". In: *Physical Review A* 39.11 (1989), S. 5887.

[70] S.G. Kim, W.T. Kim, T. Suzuki und M. Ode. "Phase-field modeling of eutectic solidification". In: *Journal of crystal growth* 261.1 (2004), S. 135–158.

[71] A. Karma und W. Rappel. "Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics". In: *Physical Review E* 53.4 (1996), R3017.

[72] A. Karma und W. Rappel. "Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions". In: *Physical review E* 57.4 (1998), S. 4323.

[73] S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim und Y. B. Park. "Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth". In: *Physical Review E* 74 (6 Dez. 2006), S. 061605.

[74] I. Steinbach und F. Pezzolla. "A generalized field method for multiphase transformations using interface fields". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 134.4 (1999), S. 385–393.

[75] M. Selzer. "Mechanische und Strömungsmechanische Topologieoptimierung mit der Phasenfeldmethode". Diss. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2014.

[76] J. Hötzer, V. Rehn, W. Rheinheimer, M. Hoffmann und B. Nestler. "Phase-field study of pore-grain boundary interaction". In: *Journal of the Ceramic Society of Japan* 124.4 (2016), S. 329–339.

[77] T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Hisakuni, A. Yamanaka und Y. Tomita. "Multi-phase-field model to simulate microstructure evolutions during dynamic recrystallization". In: *Materials transactions* 49.11 (2008), S. 2559–2565.

[78] J.C. Ramirez und C. Beckermann. "Quantitative modeling of binary alloy solidification with coupled heat and solute diffusion via the phase-field method". In: *Aerospace sciences meeting, Reno, Nevada* (2003).

[79] S.G. Kim, W.T. Kim und T. Suzuki. "Phase-field model with a reduced interface diffuseness". In: *Journal of crystal growth* 263.1 (2004), S. 620–628.

[80] S.G. Kim, W.T. Kim und T. Suzuki. "Interfacial compositions of solid and liquid in a phase-field model with finite interface thickness for isothermal solidification in binary alloys". In: *Physical Review E* 58.3 (1998), S. 3316.

[81] P.R. Cha, D.H. Yeon und J.K. Yoon. "A phase field model for isothermal solidification of multicomponent alloys". In: *Acta materialia* 49.16 (2001), S. 3295–3307.

[82] U. Grafe, B. Böttger, J. Tiaden und S. Fries. "Coupling of multicomponent thermodynamic databases to a phase field model: application to solidification and solid state transformations of superalloys". In: *Scripta Materialia* 42.12 (2000), S. 1179–1186.

[83] U. Grafe, B. Böttger, J. Tiaden und S. Fries. "Simulations of the initial transient during directional solidification of multicomponent alloys using the phase field method". In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 8.6 (2000), S. 871–879.

[84] R.S. Qin und E.R. Wallach. "A phase-field model coupled with a thermodynamic database". In: *Acta materialia* 51.20 (2003), S. 6199–6210.

[85] R.S. Qin, E.R. Wallach und R.C. Thomson. "A phase-field model for the solidification of multicomponent and multiphase alloys". In: *Journal of crystal growth* 279.1 (2005), S. 163–169.

[86] I. Steinbach, B. Böttger, J. Eiken, N. Warnken und S.G. Fries. "CALPHAD and phase-field modeling: a successful liaison". In: *Journal of phase equilibria and diffusion* 28.1 (2007), S. 101–106.

[87] S.Z. Zhang, R.J. Zhang, X.H. Qu, W. Fang und M.Z. Liu. "Phase field simulation for non-isothermal solidification of multicomponent alloys coupled with thermodynamics database". In: *Transactions of Nonferrous Metals Society of China* 23.8 (2013), S. 2361–2367.

[88] G.J. Schmitz, B. Zhou, B. Böttger, S. Klima und J. Villain. "Phase-Field Modeling and Experimental Observation of Microstructures in Solidifying Sn–Ag–Cu Solders". In: *Journal of electronic materials* 42.8 (2013), S. 2658–2666.

[89] A. Choudhury, M. Kellner und B. Nestler. "A method for coupling the phase-field model based on a grand-potential formalism to thermodynamic databases". In: *Current Opinion in Solid State and Materials Science* (2015).

[90] B. Böttger, U. Grafe, D. Ma und S.G. Fries. "Simulation of microsegregation and microstructural evolution in directionally solidified superalloys". In: *Materials science and technology* 16.11-12 (2000), S. 1425–1428.

[91] B. Böttger, J. Eiken und I. Steinbach. "Phase field simulation of equiaxed solidification in technical alloys". In: *Acta materialia* 54.10 (2006), S. 2697–2704.

[92] B. Böttger, J. Eiken und M. Apel. "Multi-ternary extrapolation scheme for efficient coupling of thermodynamic data to a multi-phase-field model". In: *Computational Materials Science* 108, Part B (2015). Selected Articles from Phase-field Method 2014 International Seminar, S. 283–292.

[93] W. Huang und Y.A. Chang. "Thermodynamic properties of the Ni–Al–Cr system". In: *Intermetallics* 7.8 (1999), S. 863–874.

[94] N. Dupin, I. Ansara und B. Sundman. "Thermodynamic re-assessment of the ternary system Al–Cr–Ni". In: *Calphad* 25.2 (2001), S. 279–298.

[95] V. T. Witusiewicz, U. H., S. Rex und F. Sommer. "Partial and integral enthalpies of mixing of liquid Ag–Al–Cu and Ag–Cu–Zn alloys". In: *Journal of Alloys and Compounds* 337.1–2 (2002), S. 189–201.

[96] V. Witusiewicz, U. Hecht, S. Fries und S. Rex. "The Ag–Al–Cu system: Part I: Reassessment of the constituent binaries on the basis of new experimental data". In: *Journal of alloys and compounds* 385.1 (2004), S. 133–143.

[97] V.T. Witusiewicz, U. Hecht, S. Rex und M. Apel. "In situ observation of microstructure evolution in low-melting Bi–In–Sn alloys by light microscopy". In: *Acta Materialia* 53.13 (2005), S. 3663–3669.

[98] V.T. Witusiewicz, A.A. Bondar, U. Hecht, S. Rex und T.Ya. Velikanova. "The Al–B–Nb–Ti system: II. Thermodynamic description of the constituent ternary system B–Nb–Ti". In: *Journal of Alloys and Compounds* 456.1–2 (2008), S. 143–150.

[99] V.T. Witusiewicz, A.A. Bondar, U. Hecht und T.Ya. Velikanova. "The Al–B–Nb–Ti system: IV. Experimental study and thermodynamic re-evaluation of the binary Al–Nb and ternary Al–Nb–Ti systems". In: *Journal of Alloys and Compounds* 472.1–2 (2009), S. 133–161.

[100] V.T. Witusiewicz, A.A. Bondar, U. Hecht, J. Zollinger, L.V. Artyukh und T.Ya. Velikanova. "The Al–B–Nb–Ti system: V. Thermodynamic description of the ternary system Al–B–Ti". In: *Journal of Alloys and Compounds* 474.1–2 (2009), S. 86–104.

[101] V.T. Witusiewicz, A.A. Bondar, U. Hecht, V.M. Voblikov, O.S. Fomichov, V.M. Petyukh und S. Rex. "Experimental study and thermodynamic modelling of the ternary Al–Ta–Ti system". In: *Intermetallics* 19.3 (2011), S. 234–259.

[102] V.T. Witusiewicz, A.A. Bondar, U. Hecht, J. Zollinger und T.Ya. Velikanova. "The Al–B–Nb–Ti system. VI. Experimental studies and thermodynamic modeling of the constituent Al–B–Nb system". In: *Journal of Alloys and Compounds* 587 (2014), S. 234–250.

[103] A.V. Khvan, I.V. Fartushna, M. Mardani, A.T. Dinsdale und V.V. Cheverikin. "An experimental investigation of the liquidus projection in the Fe–Ce–C system". In: *Journal of Alloys and Compounds* 651 (2015), S. 350–356.

[104] V.T. Witusiewicz, B. Hallstedt, A.A. Bondar, U. Hecht, S.V. Sleptsov und T.Ya. Velikanova. "Thermodynamic description of the Al–C–Ti system". In: *Journal of Alloys and Compounds* 623 (2015), S. 480–496.

[105] V.T. Witusiewicz, A.A. Bondar, U. Hecht und T.Ya. Velikanova. "Thermodynamic re-modelling of the ternary Al–Cr–Ti system with refined Al–Cr description". In: *Journal of Alloys and Compounds* 644 (2015), S. 939–958.

[106] I. Fartushna, A. Khvan, A. Dinsdale, V. Cheverikin, D. Ivanov und A. Kondratiev. "An experimental investigation of liquidus and solidus projections for the Fe–Mn–Ce system". In: *Journal of Alloys and Compounds* 654 (2016), S. 424–434.

[107] M. Conti. "Solidification of binary alloys: Thermal effects studied with the phase-field model". In: *Physical Review E* 55 (1 Jan. 1997), S. 765–771.

[108] M. Conti. "Thermal and chemical diffusion in the rapid solidification of binary alloys". In: *Physical Review E* 61 (1 Jan. 2000), S. 642–650.

[109] L. Zhang, Y. Du, I. Steinbach, Q. Chen und B. Huang. "Diffusivities of an Al–Fe–Ni melt and their effects on the microstructure during solidification". In: *Acta Materialia* 58.10 (2010), S. 3664–3675.

[110] K. Wu, Y.A. Chang und Y. Wang. "Simulating interdiffusion microstructures in Ni–Al–Cr diffusion couples: a phase field approach coupled with CALPHAD database". In: *Scripta Materialia* 50.8 (2004), S. 1145–1150.

[111] Q. Chen, N. Ma, K. Wu und Y. Wang. "Quantitative phase field modeling of diffusion-controlled precipitate growth and dissolution in Ti–Al–V". In: *Scripta Materialia* 50.4 (2004), S. 471–476.

[112] G. Caginalp und W. Xie. "Phase-field and sharp-interface alloy models". In: *Physical Review E* 48.3 (1993), S. 1897.

[113] R.F. Almgren. "Second-Order Phase Field Asymptotics for Unequal Conductivities". In: *SIAM Journal on Applied Mathematics* 59.6 (1999), S. 2086–2107.

[114] R.F. Sekerka. "Morphology: from sharp interface to phase field models". In: *Journal of crystal growth* 264.4 (2004), S. 530–540.

[115] W.J. Boettinger, J.A. Warren, C. Beckermann und A. Karma. "Phase-field simulation of solidification 1". In: *Annual review of materials research* 32.1 (2002), S. 163–194.

[116] L. Chen. "Phase-field models for microstructure evolution". In: *Annual review of materials research* 32.1 (2002), S. 113–140.

[117] K. Thornton, J. Ågren und P.W. Voorhees. "Modelling the evolution of phase boundaries in solids at the meso-and nano-scales". In: *Acta Materialia* 51.19 (2003), S. 5675–5710.

[118] U. Hecht, L. Gránásy, T. Pusztai, B. Böttger, M. Apel, V. Witusiewicz, L. Ratke, J. De Wilde, L. Froyen, D. Camel u. a. "Multiphase solidification in multicomponent alloys". In: *Materials Science and Engineering: R: Reports* 46.1 (2004), S. 1–49.

[119] L. Gránásy, T. Pusztai und J. Warren. "Modelling polycrystalline solidification using phase field theory". In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 16.41 (2004), R1205.

[120] N. Provatas, M. Greenwood, B. Athreya, N. Goldenfeld und J. Dantzig. "Multiscale Modeling of Solidification: Phase-field Methods to Adaptive Mesh Refinement". In: *International Journal of Modern Physics B* 19.31 (2005), S. 4525–4565.

[121] L. Granasy, T. Pusztai, T. Börzsönyi, G. Toth, G. Tegze, J.A. Warren und J.F. Douglas. "Phase field theory of crystal nucleation and polycrystalline growth: A review". In: *Journal of materials research* 21.02 (2006), S. 309–319.

[122] N. Moelans, B. Blanpain und P. Wollants. "An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution". In: *Calphad* 32.2 (Juni 2008), S. 268–294.

[123] I. Singer-Loginova und H. M. Singer. "The phase field technique for modeling multiphase materials". In: *Reports on Progress in Physics* 71.10 (Okt. 2008), S. 106501.

[124] H. Emmerich. "Advances of and by phase-field modelling in condensed-matter physics". In: *Advances in Physics* 57.1 (2008), S. 1–87.

[125] H. Emmerich. "Phase-field modelling for metals and colloids and nucleation therein—an overview". In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 21.46 (2009), S. 464103.

[126] M. Asta, C. Beckermann, A. Karma, W. Kurz, R. Napolitano, M. Plapp, G. Purdy, M. Rappaz und R. Trivedi. "Solidification microstructures and solid-state parallels: Recent developments, future directions". In: *Acta Materialia* 57.4 (2009), S. 941–971.

[127] I. Steinbach. "Phase-field models in materials science". In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17.7 (Okt. 2009), S. 073001.

[128] B. Nestler und A. Choudhury. "Phase-field modeling of multi-component systems". In: *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 15.3 (Juni 2011), S. 93–105.

[129] S. Akamatsu und M. Plapp. "Eutectic and peritectic solidification patterns". In: *Current Opinion in Solid State and Materials Science* (2015).

[130] N. Provatas und K. Elder. *Phase-field methods in materials science and engineering*. John Wiley & Sons, 2011.

[131] W. Kurz und P. Sahm. *Gerichtet erstarrte eutektische Werkstoffe: Herstellung, Eigenschaften und Anwendungen von In-situ-Verbundwerkstoffen*. Springer, 1975.

[132] K. Fisher und W. Kurz. "Fundamentals of solidification". In: *Trans Tech Publications* (1986).

[133] S.H. Davis. *Theory of solidification*. Cambridge University Press, 2001.

[134] D. M. Herlach und R Kirchheim, Hrsg. *Phase Transformations in Multicomponent Melts*. 1. Auflage. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Okt. 2008.

[135] J. A. Dantzig und M. Rappaz. *Solidification*. EPFL press, 2009.

[136] G. I. Tóth, T. Pusztai und L. Gránásy. "Consistent multiphase-field theory for interface driven multidomain dynamics". In: *Physical Review B* 92.18 (2015), S. 184105.

[137] J. Hötzer, P. Steinmetz, M. Jainta, S. Schulz, M. Kellner, B. Nestler, A. Genau, A. Dennstedt, M. Bauer, H. Köstler und U. Rüde. "Phase-field simulations of spiral growth during directional ternary eutectic solidification". In: *Acta Materialia* 106 (2016), S. 249–259.

[138] M. Bauer, J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, M. Berghoff, F. Schornbaum, C. Godenschwager, H. Köstler, B. Nestler und U. Rüde. "Massively parallel phase-field simulations for ternary eutectic directional solidification". In: *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*. ACM. 2015, S. 8.

[139] M. Berghoff. *Skalenübergreifende Modellierung und Optimierung vom atomistischen kristallinen Phasenfeldmodell bis zur mesoskopischen Phasenfeldmethode*. 2015.

[140] S.L. Wang, R.F. Sekerka, A.A. Wheeler, B.T. Murray, S.R. Coriell, R.J. Braun und G.B. McFadden. "Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 69.1 (1993), S. 189–200.

[141] A. Choudhury, B. Nestler, A. Telang, M. Selzer und F. Wendler. "Growth morphologies in peritectic solidification of Fe–C: A phase-field study". In: *Acta Materialia* 58.10 (2010), S. 3815–3823.

[142] B. Grossmann, K.R. Elder, M. Grant und J.M. Kosterlitz. "Directional solidification in two and three dimensions". In: *Physical review letters* 71.20 (1993), S. 3323.

[143] A.A. Wheeler und G.B. McFadden. "A ξ-vector formulation of anisotropic phase-field models: 3D asymptotics". In: *European Journal of Applied Mathematics* 7.04 (1996), S. 367–381.

[144] R. Folch und M. Plapp. "Towards a quantitative phase-field model of two-phase solidification". In: *Physical Review E* 68.1 (2003), S. 010602.

[145] M. Plapp. "Unified derivation of phase-field models for alloy solidification from a grand-potential functional". In: *Physical Review E* 84.3 (2011), S. 031601.

[146] A. Choudhury und B. Nestler. "Grand-potential formulation for multicomponent phase transformations combined with thin-interface asymptotics of the double-obstacle potential". In: *Physical Review E* 85.2 (2012), S. 021602.

[147] S. Schulz. "Phase-field simulations of multi-component solidification and coarsening based on thermodynamic datasets". Diss. 2016.

[148] W.J. Boettinger, A.A. Wheeler, B.T. Murray und G.B. McFadden. "Prediction of solute trapping at high solidification rates using a diffuse interface phase-field theory of alloy solidification". In: *Materials Science and Engineering: A* 178.1 (1994), S. 217–223.

[149] N.A. Ahmad, A.A. Wheeler, W.J. Boettinger und G.B. McFadden. "Solute trapping and solute drag in a phase-field model of rapid solidification". In: *Physical Review E* 58.3 (1998), S. 3436.

[150] M. Conti und M. Fermani. "Interface dynamics and solute trapping in alloy solidification with density change". In: *Physical Review E* 67.2 (2003), S. 026117.

[151] H. Wang, F. Liu, G.J. Ehlen und D.M. Herlach. "Application of the maximal entropy production principle to rapid solidification: a multi-phase-field model". In: *Acta Materialia* 61.7 (2013), S. 2617–2627.

[152] B. Echebarria, R. Folch, A. Karma und M. Plapp. "Quantitative phase-field model of alloy solidification". In: *Physical Review E* 70.6 (2004), S. 061604.

[153] S.G. Kim. "A phase-field model with antitrapping current for multicomponent alloys with arbitrary thermodynamic properties". In: *Acta materialia* 55.13 (2007), S. 4391–4399.

[154] A. Carré, B. Böttger und M. Apel. "Implementation of an antitrapping current for a multicomponent multiphase-field ansatz". In: *Journal of Crystal Growth* 380 (2013), S. 5–13.

[155] S. Williams, A. Waterman und D. Patterson. "Roofline: an insightful visual performance model for multicore architectures". In: *Communications of the ACM* 52.4 (2009), S. 65–76.

[156] J. D. McCalpin. *STREAM: Sustainable Memory Bandwidth in High Performance Computers*. `https://www.cs.virginia.edu/stream/`. [Online; zugegriffen März 2016]. 2016.

[157] D. Padua, Hrsg. *Encyclopedia of Parallel Computing*. 2011. Aufl. Springer, Sep. 2011.

[158] H. Garcke, B. Nestler und B. Stoth. "A multiphase field concept: numerical simulations of moving phase boundaries and multiple junctions". In: *SIAM Journal on Applied Mathematics* 60.1 (1999), S. 295–315.

[159] A. Vondrous, B. Nestler, A. August, E. Wesner, A. Choudhury, and J. Hötzer. "Metallic Foam Structures, Dendrites and Implementation Optimizations for Phase-Field Modeling". In: *High Performance Computing in Science and Engineering '11: Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2011*. Hrsg. von W. Nagel, D. Kröner und M. Resch. 2015. Aufl. Springer, 2011.

[160] A. Vondrous, M. Selzer, J. Hötzer und B. Nestler. "Parallel Computing for Phase-field Models". In: *International Journal of High Performance Computing Applications* 28.1 (Feb. 2014), S. 61–72.

[161] M. Berghoff, M. Selzer, A. Choudhury und B. Nestler. "Efficient techniques for bridging from atomic to mesoscopic scale in phase-field simulations". In: *Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering* 13.5, 6 (2013), S. 441–454.

[162] M. Berghoff und B. Nestler. "Scale-Bridging Phase-Field Simulations of Microstructure Responses on Nucleation in Metals and Colloids". English. In: *The European Physical Journal Special Topics* 223.3 (2014), S. 409–419.

[163] J. Hötzer, A. Vondrous, J. Ettrich, M. Jainta, A. August, D. Studenvoll, M. Reichardt, M. Selzer und B. Nestler. "Phase-field simulations of large-scale microstructures by integrated parallel algorithms". In: *High Performance Computing in Science and Engineering '14: Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2014*. Hrsg. von Wolfgang E. Nagel, Dietmar H. Kröner und Michael M. Resch. 2015. Aufl. Springer, Mai 2015.

[164] J. Hötzer, M. Jainta, M. Ben Said, P. Steinmetz, M. Berghoff und B. Nestler. "Application of large-scale phase-field simulations in the context of high-performance computing". In: *High Performance Computing in Science and Engineering '15: Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2015*. Hrsg. von Wolfgang E. Nagel, Dietmar H. Kröner und Michael M. Resch. Springer.

[165] A. Choudhury. *Quantitative phase-field model for phase transformations in multi-component alloys (Schriftenreihe des Instituts für Angewandte Materialien, Karlsruher Institut fuer Technologie)*. KIT Scientific Publishing, Juni 2013.

[166] J. Ettrich. *Fluid Flow and Heat Transfer in Cellular Solids*. Bd. 39. KIT Scientific Publishing, 2014.

[167] C. Mennerich. *Phase-field modeling of multi-domain evolution in ferromagnetic shape memory alloys and of polycrystalline thin film growth*. Bd. 19. KIT Scientific Publishing, 2013.

[168] M. Berghoff und B. Nestler. "Phase field crystal modeling of ternary solidification microstructures". In: *Computational Condensed Matter* 4 (2015), S. 46–58.

[169] M. Ben Said, M. Selzer, B. Nestler, D. Braun, C. Greiner und H. Garcke. "A phase-field approach for wetting phenomena of multiphase droplets on solid surfaces". In: *Langmuir* 30.14 (2014), S. 4033–4039.

[170] F. Weyer, M.B. Said, J. Hötzer, M. Berghoff, L. Dreesen, B. Nestler und N. Vandewalle. "Compound Droplets on Fibers". In: *Langmuir* 31.28 (2015). PMID: 26090699, S. 7799–7805.

[171] C. Feichtinger, S. Donath, H. Köstler, J. Götz und U. Rüde. "WaLBerla: HPC software design for computational engineering simulations". In: *Journal of Computational Science* 2.2 (2011), S. 105–112.

[172] C. Godenschwager, F. Schornbaum, M. Bauer, H. Köstler und U. Rüde. "A framework for hybrid parallel flow simulations with a trillion cells in complex geometries". In: *Proceedings of SC13: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*. ACM. 2013, S. 35.

[173] C. Feichtinger, J. Habich, H. Köstler, U. Rüde und T. Aoki. "Performance Modeling and Analysis of Heterogeneous Lattice Boltzmann Simulations on CPU–GPU Clusters". In: *Parallel Computing* (2014).

[174] H. Köstler, C. Feichtinger, U. Rüde und T. Aoki. "A Geometric Multigrid Solver on Tsubame 2.0". In: *Efficient Algorithms for Global Optimization Methods in Computer Vision*. Springer, 2014, S. 155–173.

[175] HLRS. *Cray XE6 (Hermit)*. `https://www.hlrs.de/systems/cray-xe6-hermit`. [Online; zugegriffen März 2016]. 2015.

[176] HLRS. *Cray XC40 (Hornet)*. `https://www.hlrs.de/systems/cray-xc40-hornet`. [Online; zugegriffen März 2016]. 2015.

[177] J. Kim, W.J. Dally, S. Scott und D. Abts. "Technology-Driven, Highly-Scalable Dragonfly Topology". In: *Computer Architecture, 2008. ISCA '08. 35th International Symposium on*. Juni 2008, S. 77–88.

[178] J. D. McCalpin. "Memory bandwidth and machine balance in current high performance computers". In: *IEEE Computer Society Technical Committee on Computer Architecture (TCCA) Newsletter* (1995), S. 19–25.

[179] HLRS. *Cray XC40 (Hazel Hen)*. `https://www.hlrs.de/systems/cray-xc40-hazel-hen`. [Online; zugegriffen März 2016]. 2016.

[180] *TOP500 List*. `http://www.top500.org/lists/2014/11/`. [Online; accessed April-2015]. 2015.

[181] LRZ. *SuperMUC Petascale System*. `https://www.lrz.de/services/compute/supermuc/systemdescription`. [Online; zugegriffen März 2016]. 2015.

[182] FZJ. *IBM BlueGene/Q (JUQUEEN)*. `http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/EN/Expertise/Supercomputers/JUQUEEN/Configuration/Configuration_node.html`. [Online; zugegriffen März 2016]. 2016.

[183] A. Vondrous. "Grain growth behavior and efficient large scale simulations of recrystallization with the phase-field method". Diss. 2014.

[184] IMP. *PACE Book)*. IMP interne Dokumentation. [Online; zugegriffen März 2016]. 2016.

[185] W. E. Lorensen und H. E. Cline. "Marching cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm". In: *ACM siggraph computer graphics*. Bd. 21. 4. ACM. 1987, S. 163–169.

[186] M. Plapp und A. Karma. "Eutectic colony formation: A phase-field study". In: *Physical Review E* 66.6 (2002), S. 061608.

[187] W.J. Boettinger und J.A. Warren. "Simulation of the cell to plane front transition during directional solidification at high velocity". In: *Journal of crystal growth* 200.3 (1999), S. 583–591.

[188] Z. Bi und R.F. Sekerka. "Phase field modeling of shallow cells during directional solidification of a binary alloy". In: *Journal of crystal growth* 237 (2002), S. 138–143.

[189] C. Lomont. "Fast inverse square root". In: *Technical Report* (2003).

[190] Message Passing Interface Forum. *MPI: A Message-Passing Interface Standard, Version 3.0*. 3.1. High Performance Computing Center Stuttgart, 2012.

[191] J. Treibig, G. Hager und G. Wellein. "LIKWID: A lightweight performance-oriented tool suite for x86 multicore environments". In: *Proceedings of PSTI2010, the First International Workshop on Parallel Software Tools and Tool Infrastructures*. San Diego CA, 2010.

[192] A. Rosenfeld und J. L. Pfaltz. "Sequential Operations in Digital Picture Processing". In: *J. ACM* 13.4 (Okt. 1966), S. 471–494.

[193] H.M. Alnuweiti und V.K. Prasanna. "Parallel architectures and algorithms for image component labeling". In: *Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on* 14.10 (1992), S. 1014–1034.

[194] P. Netzel und T. F. Stepinski. "Connected components labeling for giga-cell multi-categorical rasters". In: *Computers & Geosciences* 59 (2013), S. 24–30.

[195] A. AbuBaker, R. Qahwaji, S. Ipson und M. Saleh. "One Scan Connected Component Labeling Technique". In: *2007 IEEE International Conference on Signal Processing and Communications*. IEEE, 2007, S. 1283–1286.

[196] J. E. Rodríguez, I. Cruz, E. Vergés und D. Ayala. "A connected-component-labeling-based approach to virtual porosimetry". In: *Graphical Models* 73.5 (2011), S. 296–310.

[197] G. M. Amdahl. "Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities". In: *Proceedings of the April 18-20, 1967, spring joint computer conference*. ACM. 1967, S. 483–485.

[198] H. Ipser. *Number of Metallic Phase Diagrams*. `http://homepage.univie.ac.at/herbert.ipser/Lehre/Phase_Diagrams_Introduction.pdf`. [Online; zugegriffen März 2016]. 2016.

[199] E. Çadırlı, U. Böyük, H. Kaya und N. Maraşlı. "Determination of mechanical, electrical and thermal properties of the Sn–Bi–Zn ternary alloy". In: *Journal of Non-Crystalline Solids* 357.15 (2011), S. 2876–2881.

[200] E. Çadırlı, U. Böyük, H. Kaya und N. Maraşlı. "Effect of solidification parameters on the microstructure of directionally solidified Sn–Bi–Zn lead-free solder". English. In: *Metals and Materials International* 18.2 (2012), S. 349–354.

[201] F. Ebrahimi und S. Shrivastava. "Brittle-to-ductile transition in NiAl single crystal". In: *Acta materialia* 46.5 (1998), S. 1493–1502.

[202] D.B. Miracle. "Overview No. 104 The physical and mechanical properties of NiAl". In: *Acta Metallurgica et Materialia* 41.3 (1993), S. 649–684.

[203] H. Bei und E. P. George. "Microstructures and mechanical properties of a directionally solidified NiAl–Mo eutectic alloy". In: *Acta Materialia* 53.1 (2005), S. 69–77.

[204] L. Hu, G. Zhang, W. Hu, G. Gottstein, S. Bogner und A. Bührig-Polaczek. "Tensile creep of directionally solidified NiAl–9Mo in situ composites". In: *Acta Materialia* 61.19 (2013), S. 7155–7165.

[205] J. L. Walter und H. E. Cline. "The effect of solidification rate on structure and high-temperature strength of the eutectic NiAl-Cr". In: *Metallurgical and Materials Transactions B* 1.5 (1970), S. 1221–1229.

[206] S. M. Merchant und M. R. Notis. "A review: Constitution of the Al-Ni-Cr system". In: *Materials Science and Engineering* 66.1 (1984), S. 47–60.

[207] C.T. Rios, S. Milenkovic, S. Gama und R. Caram. "Influence of the growth rate on the microstructure of a Nb–Al–Ni ternary eutectic". In: *Journal of crystal growth* 237 (2002), S. 90–94.

[208] U. Böyük und N. Maraşlı. "Dependency of eutectic spacings and microhardness on the temperature gradient for directionally solidified Sn–Ag–Cu lead-free solder". In: *Materials Chemistry and Physics* 119.3 (2010), S. 442–448.

[209] U. Böyük. "Physical and mechanical properties of Al–Si–Ni eutectic alloy". English. In: *Metals and Materials International* 18.6 (2012), S. 933–938.

[210] DLR - Institut für Materialphysik im Weltraum. *Eutektika*. `http://www.dlr.de/mp/Desktopdefault.aspx/tabid-1820/2553_read-3936/`. [Online; zugegriffen November 2016]. 2016.

[211] F. Habashi. *Alloys: preparation, properties, applications*. John Wiley & Sons, 2008.

[212] W. W. Mullins und R. F. Sekerka. "Morphological stability of a particle growing by diffusion or heat flow". In: *Journal of applied physics* 34.2 (1963), S. 323–329.

[213] W. W. Mullins und R.F. Sekerka. "Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy". In: *Journal of applied physics* 35.2 (1964), S. 444–451.

[214] R.F. Sekerka. "Morphological stability". In: *Journal of Crystal Growth* 3 (1968), S. 71–81.

[215] K. A. Jackson und J. D. Hunt. "Lamellar and rod eutectic growth". In: *Transactions of the Metallurgical Society of AIME* 236 (1966), S. 1129–1142.

[216] D.A. Kessler, J. Koplik und H. Levine. "Pattern selection in fingered growth phenomena". In: *Advances in Physics* 37.3 (1988), S. 255–339.

[217] R.F. Sekerka. "Role of instabilities in determination of the shapes of growing crystals". In: *Journal of crystal growth* 128.1 (1993), S. 1–12.

[218] W.J. Boettinger, S.R. Coriell, A.L. Greer, A. Karma, W. Kurz, M. Rappaz und R. Trivedi. "Solidification microstructures: recent developments, future directions". In: *Acta materialia* 48.1 (2000), S. 43–70.

[219] A.A. Wheeler, B.T. Murray und R.J. Schaefer. "Computation of dendrites using a phase field model". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 66.1–2 (1993), S. 243–262.

[220] K.R. Elder, F. Drolet, J.M. Kosterlitz und M. Grant. "Stochastic eutectic growth". In: *Physical review letters* 72.5 (1994), S. 677.

[221] A. Karma und W.J. Rappel. "Phase-field model of dendritic sidebranching with thermal noise". In: *Physical review E* 60.4 (1999), S. 3614.

[222] K.R. Elder, M. Grant, N. Provatas und J.M. Kosterlitz. "Sharp interface limits of phase-field models". In: *Physical Review E* 64.2 (2001), S. 021604.

[223] K. Vetsigian und N. Goldenfeld. "Computationally efficient phase-field models with interface kinetics". In: *Physical Review E* 68.6 (2003), S. 060601.

[224] J. Fan, M. Greenwood, M. Haataja und N. Provatas. "Phase-field simulations of velocity selection in rapidly solidified binary alloys". In: *Physical Review E* 74.3 (2006), S. 031602.

[225] J. W. Gibbs. "On the equilibrium of heterogeneous substances". In: *American Journal of Science* 96 (1878), S. 441–458.

[226] D. Mogk. *Gibbs' Phase Rule: Where it all Begins*. `http://serc.carleton.edu/research_education/equilibria/phaserule.html`. [Online; zugegriffen Dezember 2016]. Montana State University, 2016.

[227] A. Genau und L. Ratke. "Morphological characterization of the Al–Ag–Cu ternary eutectic". In: *International Journal of Materials Research* 103.4 (Apr. 2012), S. 469–475.

[228] A. L. Genau und L. Ratke. "Crystal orientation and morphology in Al–Ag–Cu ternary eutectic". In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 27.1 (2012), S. 012032.

[229] A. Dennstedt und L. Ratke. "Microstructures of Directionally Solidified Al–Ag–Cu Ternary Eutectics". English. In: *Transactions of the Indian Institute of Metals* 65.6 (2012), S. 777–782.

[230] A. Dennstedt, L. Ratke, A. Choudhury und B. Nestler. "New Metallographic Method for Estimation of Ordering and Lattice Parameter in Ternary Eutectic Systems". English. In: *Metallography, Microstructure, and Analysis* 2.3 (2013), S. 140–147.

[231] A. Dennstedt, L. Helfen, P. Steinmetz, B. Nestler und L. Ratke. "3D Synchrotron Imaging of a Directionally Solidified Ternary Eutectic". In: *Metallurgical and Materials Transactions A* (2015), S. 1–4.

[232] A. Orth. "Gerichtete Erstarrung von Al-Si und Al-Si-Mn Legierungen unter dem Einfluss von magnetischen Wechselfeldern". Diss. Fachgruppe für Materialwissenschaft und Werkstofftechnik, 2013.

[233] D.G. Mccartney, R.M. Jordan und J.D. Hunt. "The structures expected in a simple ternary eutectic system: Part II. The Al–Ag–Cu ternary system". English. In: *Metallurgical Transactions A* 11.8 (1980), S. 1251–1257.

[234] D.G. Mccartney, J.D. Hunt und R.M. Jordan. "The structures expected in a simple ternary eutectic system: Part 1. Theory". English. In: *Metallurgical Transactions A* 11.8 (1980), S. 1243–1249.

[235] S. Akamatsu und M. Plapp. "Eutectic and peritectic solidification patterns". In: *Current Opinion in Solid State and Materials Science* (2015).

[236] J.W. Cahn. "On spinodal decomposition". In: *Acta metallurgica* 9.9 (1961), S. 795–801.

[237] J.S. Langer. "Theory of spinodal decomposition in alloys". In: *Annals of Physics* 65.1 (1971), S. 53–86.

[238] R.W. Balluffi, S. Allen und W.. Carter. *Kinetics of materials*. John Wiley & Sons, 2005.

[239] M. Tang, A. Karma u. a. "Surface Modes of Coherent Spinodal Decomposition". In: *Physical review letters* 108.26 (2012), S. 265701.

[240] F. Wang, A. Choudhury, C. Strassacker und B. Nestler. “Spinodal decomposition and droplets entrapment in monotectic solidification”. In: *The Journal of chemical physics* 137.3 (2012), S. 034702.

[241] F. Wang, A. Choudhury, M. Selzer, R. Mukherjee und B. Nestler. “Effect of solutal Marangoni convection on motion, coarsening, and coalescence of droplets in a monotectic system”. In: *Physical Review E* 86.6 (2012), S. 066318.

[242] G.P. Ivantsov. “The temperature field around a spherical, cylindrical, or pointed crystal growing in a cooling solution”. In: *Dokl. Akad. Nauk SSSR*. Bd. 58. 1947, S. 567–569.

[243] S.L. Wang und R.F. Sekerka. “Computation of the dendritic operating state at large supercoolings by the phase field model”. In: *Physical Review E* 53 (4 Apr. 1996), S. 3760–3776.

[244] A. Karma und W. Rappel. “Numerical simulation of three-dimensional dendritic growth”. In: *Physical review letters* 77.19 (1996), S. 4050.

[245] W.J. Boettinger und J.A. Warren. “The phase-field method: simulation of alloy dendritic solidification during recalescence”. English. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 27.3 (1996), S. 657–669.

[246] D. Ma und P.R. Sahm. “Primary spacing in directional solidification”. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 29.13 (1998), S. 1113–1119.

[247] N. Provatas, N. Goldenfeld und J. Dantzig. “Efficient computation of dendritic microstructures using adaptive mesh refinement”. In: *Physical Review Letters* 80.15 (1998), S. 3308.

[248] Y.-T. Kim, N. Provatas, N. Goldenfeld und J. Dantzig. “Universal dynamics of phase-field models for dendritic growth”. In: *Physical Review E* 59.3 (1999), R2546.

[249] G. Caginalp und J. Jones. “A derivation and analysis of phase field models of thermal alloys”. In: *Annals of physics* 237.1 (1995), S. 66–107.

[250] A. Choudhury, K. Reuther, E. Wesner, A. August, B. Nestler und M. Rettenmayr. “Comparison of phase-field and cellular automaton models for dendritic solidification in Al–Cu alloy”. In: *Computational Materials Science* 55 (2012), S. 263–268.

[251] D. Danilov und B. Nestler. “Phase-field simulations of solidification in binary and ternary systems using a finite element method”. In: *Journal of Crystal Growth* 275.1 (2005), e177–e182.

[252] H. Fredriksson und U. Akerlind. *Solidification and crystallization processing in metals and alloys*. John Wiley & Sons, 2012.

[253] M. Ruggiero und J. Rutter. “Origin of microstructure in the 332 K eutectic of the Bi–In–Sn system”. In: *Materials science and technology* 13.1 (1997), S. 5–11.

[254] D. Lewis, S. Allen, M. Notis und A. Scotch. “Determination of the eutectic structure in the Ag–Cu–Sn system”. English. In: *Journal of Electronic Materials* 31.2 (2002), S. 161–167.

[255] J. Hunt, D. Hurle, K. Jackson und E. Jakeman. “On the theory of the stability of lamellar eutectics”. In: *Metallurgical and Materials Transactions B* 1.1 (1970), S. 318–320.

[256] J.S. Langer. “Eutectic Solidification and Marginal Stability”. In: *Physical Review Lett.* 44 (15 Apr. 1980), S. 1023–1026.

[257] S.R. Coriell, G.B. McFadden, P.W. Voorhees und R.F. Sekerka. “Stability of a planar interface during solidification of a multicomponent system”. In: *Journal of Crystal Growth* 82.3 (1987), S. 295–302.

[258] K. Kassner, A. Valance, C. Misbah und D. Temkin. “New broken-parity state and a transition to anomalous lamellae in eutectic growth”. In: *Physical Review E* 48.2 (1993), S. 1091.

[259] K. Kassner, C. Misbah und R. Baumann. “Eutectic dynamics: A host of new states”. In: *Physical Review E* 51.4 (1995), R2751.

[260] A. Karma und A. Sarkissian. “Morphological instabilities of lamellar eutectics”. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 27.3 (1996), S. 635–656.

[261] C. Caroli und G. Faivre. "Lamellar Eutectic Growth: A Discussion of the Question of Pattern Selection". In: *Solid State Phenomena*. Bd. 42. Trans Tech Publ. 1995, S. 1–10.

[262] G. Faivre. "Morphological instabilities of lamellar eutectic growth fronts: a survey of recent experimental and numerical results". In: *Journal of crystal growth* 166.1 (1996), S. 29–39.

[263] M. Ginibre, S. Akamatsu und G. Faivre. "Experimental determination of the stability diagram of a lamellar eutectic growth front". In: *Physical Review E* 56 (1 Juli 1997), S. 780–796.

[264] S. Akamatsu, S. Bottin-Rousseau und G. Faivre. "Experimental evidence for a zigzag bifurcation in bulk lamellar eutectic growth". In: *Physical review letters* 93.17 (2004), S. 175701.

[265] S. Bottin-Rousseau, M. Perrut, C. Picard, S. Akamatsu und G. Faivre. "An experimental method for the in situ observation of eutectic growth patterns in bulk samples of transparent alloys". In: *Journal of Crystal Growth* 306.2 (2007), S. 465–472.

[266] S. Akamatsu, S. Bottin-Rousseau, M. Şerefoğlu und G. Faivre. "Lamellar eutectic growth with anisotropic interphase boundaries: Experimental study using the rotating directional solidification method". In: *Acta Materialia* 60.6–7 (2012), S. 3206–3214.

[267] S. Akamatsu, S. Bottin-Rousseau, M. Şerefoğlu und G. Faivre. "A theory of thin lamellar eutectic growth with anisotropic interphase boundaries". In: *Acta Materialia* 60.6–7 (2012), S. 3199–3205.

[268] S. Akamatsu, S. Bottin-Rousseau, G. Faivre, S. Ghosh und M. Plapp. "Lamellar eutectic growth with anisotropic interphase boundaries". In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 84.1 (2015), S. 012083.

[269] S. Rex, B. Böttger, V. Witusiewicz und U. Hecht. "Transient eutectic solidification in In–Bi–Sn: Two-dimensional experiments and numerical simulation". In: *Materials Science and Engineering: A* 413–414 (2005). International Conference on Advances in Solidification Processes, S. 249–254.

[270] S. Akamatsu und H. Nguyen-Thi. "In situ observation of solidification patterns in diffusive conditions". In: *Acta Materialia* (2016),

[271] M. Apel, B. Boettger, H.J. Diepers und I. Steinbach. "2D and 3D phase-field simulations of lamella and fibrous eutectic growth". In: *Journal of Crystal Growth* 237–239, Part 1 (2002). The thirteenth international conference on Crystal Growth in conj unction with the eleventh international conference on Vapor Growth and Epitaxy, S. 154–158.

[272] R. Folch und M. Plapp. "Quantitative phase-field modeling of two-phase growth". In: *Physical Review E* 72.1 (2005), S. 011602.

[273] S. Ghosh, A. Choudhury, M. Plapp, S. Bottin-Rousseau, G. Faivre und S. Akamatsu. "Interphase anisotropy effects on lamellar eutectics: A numerical study". In: *Physical Review E* 91 (2 Feb. 2015), S. 022407.

[274] S. Ghosh und M. Plapp. "Influence of Interphase Anisotropy on Lamellar Eutectic Growth Patterns". English. In: *Transactions of the Indian Institute of Metals* 68.6 (2015), S. 1235–1238.

[275] A. Choudhury, M. Geeta und B. Nestler. "Influence of solid–solid interface anisotropy on three-phase eutectic growth during directional solidification". In: *EPL (Europhysics Letters)* 101.2 (2013), S. 26001.

[276] S. Ghosh. "Effects of solid-solid boundary anisotropy on directional solidification microstructures". Diss. Ecole Polytechnqiue, 2015.

[277] M. Apel, B. Böttger, V. Witusiewicz, U. Hecht und I. Steinbach. "Lamellar Pattern Formation during 2D-Directional Solidification of Ternary Eutectic Alloys". In: *Solidification and Crystallization* (2004), S. 271–279.

[278] A. Choudhury, M. Plapp und B. Nestler. "Theoretical and numerical study of lamellar eutectic three-phase growth in ternary alloys". In: *Physical Review E* 83.5 (2011), S. 051608.

[279] P. R. Sahm und M. Lorenz. "Strongly coupled growth in faceted-nonfaceted eutectics of the monovariant type". In: *Journal of Materials Science* 7.7 (1972), S. 793–806.

[280] M. D. Rinaldi, R. M. Sharp und M. C. Flemings. “Growth of ternary composites from the melt: Part II”. In: *Metallurgical Transactions* 3.12 (1972), S. 3139–3148.

[281] U. Böyük, N. Maraşlı, H. Kaya, E. Çadırlı und K. Keşlioğlu. “Directional solidification of Al–Cu–Ag alloy”. English. In: *Applied Physics A* 95.3 (2009), S. 923–932.

[282] D.J.S. Cooksey und A. Hellawell. “The Microstructures of Ternary Eutectic Alloys in the Systems Cd–Sn–(Pb, In, Tl), Al–Cu–(Mg, Zn, Ag) and Zn–Sn–Pb”. In: *J. Inst. Met.* 95 (1967), S. 183–187.

[283] M. Ruggiero und J. Rutter. “Microstructure of Bi–Cd–Sn ternary eutectic”. In: *Materials science and technology* 8.6 (1992), S. 523–530.

[284] M. Ruggiero und J. Rutter. “Origin of microstructure in 350 K eutectic of Bi–In–Sn ternary system”. In: *Materials science and technology* 11.2 (1995), S. 136–142.

[285] M. Ruggiero und J. Rutter. “Microstructure of Bi–Cd–Pb ternary eutectic”. In: *Materials science and technology* 12.1 (1996), S. 7–11.

[286] M. Ruggiero und J. Rutter. “Formation of microstructure in the Cd–In–Sn ternary eutectic”. In: *Materials science and technology* 14.3 (1998), S. 177–181.

[287] M. Ruggiero und J. Rutter. “Formation of microstructure during solidification of Bi–Pb–Sn ternary eutectic”. In: *Materials science and technology* 15.10 (1999), S. 1110–1114.

[288] T. Himemiya und T. Umeda. “Three-phase planar eutectic growth models for a ternary eutectic system”. In: *Materials Transactions, JIM* 40.7 (1999), S. 665–674.

[289] P. J. Fehrenbach, H. W. Kerr und P. Niessen. “Unidirectional solidification of monovariant eutectic Cu–Mg–Ni alloys: I. Planar interface stability criterion”. In: *Journal of Crystal Growth* 16.3 (1972), S. 209–214.

[290] P. J. Fehrenbach, H. W. Kerr und P. Niessen. “Unidirectional solidification of monovariant Cu–Ni–Mg eutectic alloys II. Microstructures and properties”. In: *Journal of Crystal Growth* 18.2 (1973), S. 151–158.

[291] J.D. Holder und B.F. Oliver. “The directional solidification of Pb–Sn–Cd alloys”. In: *Metallurgical Transactions* 5.11 (1974), S. 2423–2437.

[292] M. Perrut, S. Akamatsu, S. Bottin-Rousseau und G. Faivre. “Long-time dynamics of the directional solidification of rodlike eutectics”. In: *Physical Review E* 79.3 (2009), S. 032602.

[293] M. Perrut, S. Bottin-Rousseau, G. Faivre und S. Akamatsu. “Dynamic instabilities of rod-like eutectic growth patterns: A real-time study”. In: *Acta Materialia* 61.18 (2013), S. 6802–6808.

[294] J. De Wilde, L. Froyen und S. Rex. “Coupled two-phase [α (Al)+ θ (Al 2 Cu)] planar growth and destabilisation along the univariant eutectic reaction in Al–Cu–Ag alloys”. In: *Scripta materialia* 51.6 (2004), S. 533–538.

[295] I. Sargin. “Invariant and univariant eutectic solidification in ternary alloys”. Diss. Iowa State University, 2015.

[296] A. Dennstedt, A. Choudhury, L. Ratke und B. Nestler. “Microstructures in a ternary eutectic alloy: devising metrics based on neighbourhood relationships”. In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* (2014, accepted).

[297] S. Rex. *ACCESS e.V., RWTH Aachen, SETA - Das Erstarrungsverhalten von mehrkomponentigen Legierungen*. Accessed: 2016-02-25. 2014-03-07. URL: `http://www.dlr.de/dlr/desktopdefault.aspx/tabid-10337/1346_read-10047//usetemplate-print/`.

[298] U. Böyük, S. Engin und N. Maraşlı. “Microstructural characterization of unidirectional solidified eutectic Al–Si–Ni alloy”. In: *Materials Characterization* 62.9 (2011), S. 844–851.

[299] S. Engin, U. Böyük und N. Maraşlı. “Determination of solid–liquid interfacial energy for a solid Sn in equilibrium with a Sn–Ag–Zn eutectic liquid”. In: *Current Applied Physics* 11.4 (2011), S. 1060–1066.

[300] D. Lewis, J. Warren, W. Boettinger, T. Pusztai und L. Gránásy. "Phase-field models for eutectic solidification". In: *JOM* 56.4 (2004), S. 34–39.

[301] F.S Drolet, K.R. Elder, M. Grant und J.M. Kosterlitz. "Phase-field modeling of eutectic growth". In: *Physical Review E* 61.6 (2000), S. 6705.

[302] B. Nestler und A. Wheeler. "Phase-field modeling of multi-phase solidification". In: *Computer Physics Communications* 147.1 (2002), S. 230–233.

[303] B. Nestler, A. Wheeler und H. Garcke. "Modelling of microstructure formation and interface dynamics". In: *Computational materials science* 26 (2003), S. 111–119.

[304] J.R. Green, P.K. Jimack und A.M. Mullis. "Phase field analysis of eutectic breakdown". In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 38.7 (2007), S. 1426–1432.

[305] J. Kundin, E. Pogorelov und H. Emmerich. "Phase-field modeling of the microstructure evolution and heterogeneous nucleation in solidifying ternary Al–Cu–Ni alloys". In: *Acta Materialia* 83 (2015), S. 448–459.

[306] D. A. Cogswell und W. C. Carter. "Thermodynamic phase-field model for microstructure with multiple components and phases: The possibility of metastable phases". In: *Physical Review E* 83.6 (2011), S. 061602.

[307] D. A. Cogswell. "A phase-field study of ternary multiphase microstructures". Diss. Citeseer, 2009.

[308] A. Parisi, M. Plapp, S. Akamatsu, S. Bottin-Rousseau, M. Perrut und G. Faivre. "Three-dimensional phase-field simulations of eutectic solidification and comparison to in situ experimental observations". In: *Morphological stability of lamellar and rod eutectic growth. TMS (The Minerals, Metals & Materials Society)* (2005).

[309] A. Parisi und M. Plapp. "Stability of lamellar eutectic growth". In: *Acta Materialia* 56.6 (2008), S. 1348–1357.

[310] A. Parisi und M. Plapp. "Defects and multistability in eutectic solidification patterns". In: *EPL* 90.2 (2010), S. 26010.

[311] M. Plapp. "Three-dimensional phase-field simulations of directional solidification". In: *Journal of crystal growth* 303.1 (2007), S. 49–57.

[312] M. Perrut, A. Parisi, S. Akamatsu, S. Bottin-Rousseau, G. Faivre und M. Plapp. "Role of transverse temperature gradients in the generation of lamellar eutectic solidification patterns". In: *Acta Materialia* 58.5 (2010), S. 1761–1769.

[313] M. Kellner, I. Sprenger, P. Steinmetz, J. Hötzer, B. Nestler und M. Heilmaier. "Phase-field simulation of the microstructure evolution in the eutectic NiAl-34Cr system". In: *Computational Materials Science* 128 (2017), S. 379–387.

[314] A. Choudhury. "Pattern-Formation During Self-organization in Three-Phase Eutectic Solidification". In: *Transactions of the Indian Institute of Metals* (2015), S. 1–7.

[315] J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, A. Dennstedt und B. Nestler. "Die Vielfalt der Musterbildung in Metallen". In: *horizonte* 45 (2015).

[316] P. Steinmetz, M. Kellner, J. Hötzer, A. Dennstedt und B. Nestler. "Phase-field study of the pattern formation in Al-Ag-Cu under the influence of the melt concentration". In: *Computational Materials Science* 121 (2016), S. 6–13.

[317] Y.C. Yabansu, P. Steinmetz, J. Hötzer, B. Nestler und S.R. Kalidindi. "Extraction of reduced-order process-structure linkages from phase-field simulations". In: *Acta Materialia* 124 (2017), S. 182–194.

[318] R.F. Sekerka. "A Stability Function for Explicit Evaluation of the Mullins-Sekerka Interface Stability Criterion". In: *Journal of Applied Physics* 36.1 (1965), S. 264–268.

[319] S. Akamatsu und G. Faivre. "Traveling waves, two-phase fingers, and eutectic colonies in thin-sample directional solidification of a ternary eutectic alloy". In: *Physical Review E* 61.4 (2000), S. 3757.

[320] S. Akamatsu und T. Ihle. “Similarity law for the tilt angle of dendrites in directional solidification of non-axially-oriented crystals”. In: *Physical Review E* 56.4 (1997), S. 4479.

[321] S. Akamatsu und G. Faivre. “Anisotropy-driven dynamics of cellular fronts in directional solidification in thin samples”. In: *Physical Review E* 58.3 (1998), S. 3302.

[322] S. Akamatsu, G. Faivre und S. Moulinet. “The formation of lamellar-eutectic grains in thin samples”. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 32.8 (2001), S. 2039–2048.

[323] W. Losert, D.A. Stillman, H.Z. Cummins, P. Kopczyński, W.J. Rappel und A. Karma. “Selection of doublet cellular patterns in directional solidification through spatially periodic perturbations”. In: *Physical Review E* 58.6 (1998), S. 7492.

[324] C.W. Lan und Y.C. Chang. “Efficient adaptive phase field simulation of directional solidification of a binary alloy”. In: *Journal of Crystal Growth* 250.3 (2003), S. 525–537.

[325] C.W. Lan, C.J. Shih und W.T. Hsu. “Long-time scale morphological dynamics near the onset of instability during directional solidification of an alloy”. In: *Journal of crystal growth* 264.1 (2004), S. 379–384.

[326] C. Beckermann, H.J. Diepers, I. Steinbach, A. Karma und X. Tong. “Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification”. In: *Journal of Computational Physics* 154.2 (1999), S. 468–496.

[327] C.W. Lan, C.J. Shih und M.H. Lee. “Quantitative phase field simulation of deep cells in directional solidification of an alloy”. In: *Acta materialia* 53.8 (2005), S. 2285–2294.

[328] C.W. Lan, M.H. Lee, M.H. Chuang und C.J. Shih. “Phase field modeling of convective and morphological instability during directional solidification of an alloy”. In: *Journal of crystal growth* 295.2 (2006), S. 202–208.

[329] A. Lahiri und A. Choudhury. “Theoretical and numerical investigation of diffusive instabilities in multi-component alloys”. In: *Journal of Crystal Growth* 459 (2017), S. 1–12.

[330] M. Durand-Charre und F. Durand. “Effects of growth rate on the morphology of monovariant eutectics: MnSb–(Sb, Bi) and MnSb–(Sb, Sn)”. In: *Journal of Crystal Growth* 13 (1972), S. 747–750.

[331] U. Hecht, V. Witusiewicz und A. Drevermann. “Coupled growth of A-l-Al2Cu eutectics in Al–Cu–Ag alloys”. In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 27.1 (2012), S. 012029.

[332] S.V. Raj und I.E. Locci. “Microstructural characterization of a directionally-solidified Ni–33 (at.%) Al–31Cr–3Mo eutectic alloy as a function of withdrawal rate”. In: *Intermetallics* 9.3 (2001), S. 217–227.

[333] T. Himemiya. “Growth models of two-phase eutectic cell in a ternary eutectic system: a phase selection map”. In: *Materials Transactions, JIM* 40.7 (1999), S. 675–684.

[334] M. Plapp und A. Karma. “Eutectic colony formation: A stability analysis”. In: *Physical Review E* 60.6 (1999), S. 6865.

[335] V. Datye und J. Langer. “Stability of thin lamellar eutectic growth”. In: *Physical Review B* 24.8 (1981), S. 4155.

[336] A. Lahiri und A. Choudhury. “Effect of Surface Energy Anisotropy on the Stability of Growth Fronts in Multiphase Alloys”. English. In: *Transactions of the Indian Institute of Metals* 68.6 (2015), S. 1053–1057.

[337] A. Lahiri, C. Tiwary, K. Chattopadhyay, D. Banerjee und A. Choudhury. “Eutectic colony formation in systems with interfacial energy anisotropy: A phase field study”. In: *arXiv preprint arXiv:1607.02722* (2016).

[338] S. Akamatsu, M. Perrut, S. Bottin-Rousseau und G. Faivre. “Spiral Two-Phase Dendrites”. In: *Physical Review Letters* 104 (5 Feb. 2010), S. 056101.

[339] T. Pusztai, L. Rátkai, A. Szállás und L. Gránásy. “Spiraling eutectic dendrites”. In: *Physical Review E* 87.3 (2013), S. 032401.

[340] L. Rátkai, A. Szállás, T. Pusztai, T. Mohri und L. Gránásy. "Ternary eutectic dendrites: Pattern formation and scaling properties". In: *The Journal of chemical physics* 142.15 (2015), S. 154501.

[341] J.P Simmons, C. Shen und Y. Wang. "Phase field modeling of simultaneous nucleation and growth by explicitly incorporating nucleation events". In: *Scripta Materialia* 43.10 (2000), S. 935–942.

[342] L. Gránásy und D. Oxtoby. "Cahn–Hilliard theory with triple-parabolic free energy. I. Nucleation and growth of a stable crystalline phase". In: *The Journal of Chemical Physics* 112.5 (2000), S. 2399–2409.

[343] L. Gránásy und D. Oxtoby. "Cahn–Hilliard theory with triple-parabolic free energy. II. Nucleation and growth in the presence of a metastable crystalline phase". In: *The Journal of Chemical Physics* 112.5 (2000), S. 2410–2419.

[344] R. Siquieri und H. Emmerich. "Phase-field investigation of the nucleation kinetics and of the influence of convection on growth in peritectic systems". In: *Philosophical Magazine Letters* 87.11 (2007), S. 829–837.

[345] T. Pusztai, G. Tegze, G.I. Tóth, L. Környei, G. Bansel, Z. Fan und L. Gránásy. "Phase-field approach to polycrystalline solidification including heterogeneous and homogeneous nucleation". In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 20.40 (2008), S. 404205.

[346] J.A. Warren, T. Pusztai, L. Környei und L. Gránásy. "Phase field approach to heterogeneous crystal nucleation in alloys". In: *Physical Review B* 79 (1 Jan. 2009), S. 014204.

[347] T.W. Heo und L.Q. Chen. "Phase-Field Modeling of Nucleation in Solid-State Phase Transformations". In: *JOM* 66.8 (2014), S. 1520–1528.

[348] Z. Guo, J. Mi und P.S. Grant. "Phase field simulation of multi-dendrite growth in a coupled thermal-solute-convective environment". In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. Bd. 33. 1. IOP Publishing. 2012, S. 012101.

[349] R. Rojas, T. Takaki und M. Ohno. "A phase-field-lattice Boltzmann method for modeling motion and growth of a dendrite for binary alloy solidification in the presence of melt convection". In: *Journal of Computational Physics* 298 (2015), S. 29–40.

[350] T. Takaki, R. Rojas, M. Ohno, T. Shimokawabe und T. Aoki. "GPU phase-field lattice Boltzmann simulations of growth and motion of a binary alloy dendrite". In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 84.1 (2015), S. 012066.

[351] Y. Lu, C. Beckermann und J.C. Ramirez. "Three-dimensional phase-field simulations of the effect of convection on free dendritic growth". In: *Journal of Crystal Growth* 280.1–2 (2005), S. 320–334.

[352] S. Sakane, T. Takaki, R. Rojas, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe und T. Aoki. "Multi-GPUs parallel computation of dendrite growth in forced convection using the phase-field-lattice Boltzmann model". In: *Journal of Crystal Growth* (2016),

[353] B. Nestler, A.A. Wheeler, L. Ratke und C. Stöcker. "Phase-field model for solidification of a monotectic alloy with convection". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 141.1–2 (2000), S. 133–154.

[354] J. Rosam. "A fully implicit, fully adaptive multigrid method for multiscale phase-field modelling". Diss. Citeseer, 2007.

[355] J. Rosam, P.K. Jimack und A. Mullis. "A fully implicit, fully adaptive time and space discretisation method for phase-field simulation of binary alloy solidification". In: *Journal of Computational Physics* 225.2 (2007), S. 1271–1287.

[356] C. Graser und R. Kornhuber. "On preconditioned Uzawa-type iterations for a saddle point problem with inequality constraints". In: *Lecture notes in computational science and engineering* 55 (2007), S. 91.

[357] J. Rosam, P.K. Jimack und A.M. Mullis. "An adaptive, fully implicit multigrid phase-field model for the quantitative simulation of non-isothermal binary alloy solidification". In: *Acta Materialia* 56.17 (2008), S. 4559–4569.

[358] J.R. Green, P.K. Jimack, A.M. Mullis und J. Rosam. "Towards a Three-Dimensional Parallel, Adaptive, Multilevel Solver for the Solution of Nonlinear, Time-Dependent, Phase-Change Problems". In: *Parallel, Distributed and Grid Computing for Engineering* 21 (2009), S. 251–274.

[359] A.M. Mullis, J. Rosam und P.K. Jimack. "Solute trapping and the effects of anti-trapping currents on phase-field models of coupled thermo-solutal solidification". In: *Journal of Crystal Growth* 312.11 (2010), S. 1891–1897.

[360] Z. Guo, J. Mi und P.S. Grant. "An implicit parallel multigrid computing scheme to solve coupled thermal-solute phase-field equations for dendrite evolution". In: *Journal of Computational Physics* 231.4 (2012), S. 1781–1796.

[361] C. Gräser, R. Kornhuber und U. Sack. "Time discretizations of anisotropic Allen–Cahn equations". In: *IMA Journal of Numerical Analysis* 33.4 (2013), S. 1226–1244.

[362] C.E. Goodyer, P.K. Jimack, A.M. Mullis, H. Dong und Y. Xie. "On the fully implicit solution of a phase-field model for binary alloy solidification in three dimensions". In: *Advances in Applied Mathematics and Mechanics* 4.6 (2012), S. 665–684.

[363] L. Vanherpe, F. Wendler, B. Nestler und S. Vandewalle. "A multigrid solver for phase field simulation of microstructure evolution". In: *Mathematics and Computers in Simulation* 80.7 (2010). Multiscale modeling of moving interfaces in materials, S. 1438–1448.

[364] R. Kornhuber und R. Krause. "On multigrid methods for vector–valued Allen–Cahn equations with obstacle potential". In: *Domain decomposition methods in science and engineering* (2002), S. 307.

[365] G. Amberg. "Semisharp phase field method for quantitative phase change simulations". In: *Physical review letters* 91.26 (2003), S. 265505.

[366] T. Takaki, T. Fukuoka und Y Tomita. "Phase-field simulation during directional solidification of a binary alloy using adaptive finite element method". In: *Journal of Crystal Growth* 283.1–2 (2005), S. 263–278.

[367] Y. Li und J. Kim. "Phase-field simulations of crystal growth with adaptive mesh refinement". In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 55.25–26 (2012), S. 7926–7932.

[368] R. Altenfeld, M. Apel, Dieter an Mey, B. Böttger, S. Benke und C. Bischof. "OpenMP in the Petascale Era: 7th International Workshop on OpenMP, IWOMP 2011, Chicago, IL, USA, June 13-15, 2011. Proceedings". In: Hrsg. von Barbara M. Chapman, William D. Gropp, Kalyan Kumaran und Matthias S. Müller. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2011. Kap. Parallelising Computational Microstructure Simulations for Metallic Materials with OpenMP, S. 1–11.

[369] T. Aoki, S. Ogawa und A. Yamanaka. "Multiple-GPU scalability of phase-field simulation for dendritic solidification". In: *Progress in Nuclear Science and Technology* 2 (2011), S. 639–642.

[370] R.J. Contieri, C.T. Rios, M. Zanotello und R. Caram. "Growth and three-dimensional analysis of a Nb–Al–Ni ternary eutectic". In: *Materials Characterization* 59.6 (2008), S. 693–699.

[371] B. Zhou und L. Froyen. "Combined Two- and Three-Dimensional (2D and 3D) Characterization of Directionally Solidified Al-Cu-Ag-Mg Quaternary Eutectic". In: *Metallography, Microstructure, and Analysis* 3.3 (2014), S. 164–173.

[372] A. Dennstedt und L. Ratke. "Microstructures of Directionally Solidified Al–Ag–Cu Ternary Eutectics". English. In: *Transactions of the Indian Institute of Metals* 65.6 (2012), S. 777–782.

[373] U. Böyük, N.Marasli, H.Kaya, E.Cadirli, K. Keslioglu. "Directional solidification of Al–Cu–Ag alloy". In: *Applied Physics A* 95 (2009), S. 923–932.

[374] L. Bai und D. Breen. "Calculating center of mass in an unbounded 2D environment". In: *Journal of Graphics, GPU, and Game Tools* 13.4 (2008), S. 53–60.

[375] J.P. MacSleyne, J.P. Simmons und M. De Graef. "On the use of 2-D moment invariants for the automated classification of particle shapes". In: *Acta Materialia* 56.3 (2008), S. 427–437.

[376] J. Hötzer, P. Steinmetz, M. Kellner, J. Dietze und B. Nestler. "Large-scale phase-field simulations of directional solidified ternary eutectics using high-performance computing". In: *High Performance Computing in Science and Engineering '16: Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2016*. Hrsg. von Wolfgang E. Nagel, Dietmar H. Kröner und Michael M. Resch. Springer, 2016, S. 635–646.

[377] G. Faivre, S. D. Cheveigne, C. Guthmann und P. Kurowski. "Solitary tilt waves in thin lamellar eutectics". In: *EPL (Europhysics Letters)* 9.8 (1989), S. 779.

[378] S. Akamatsu, S. Bottin-Rousseau und G. Faivre. "Determination of the Jackson–Hunt constants of the In–In2Bi eutectic alloy based on in situ observation of its solidification dynamics". In: *Acta Materialia* 59.20 (2011), S. 7586–7591.

[379] D. Double, P. Truelove und A. Hellawell. "The development of preferred orientations in eutectic alloys". In: *Journal of Crystal Growth* 2.4 (1968), S. 191–198.

[380] R. Hopkins und A. Stewart. "Lamellar rotations in the Pb–Sn eutectic". In: *Philosophical Magazine* 22.175 (1970), S. 199–203.

[381] D.P. Mourer und J.D. Verhoeven. "On the spiral growth of Pb–Sn eutectic alloys". In: *Journal of Crystal Growth* 37.3 (1977), S. 197–203.

[382] T. Attallah und J. Gruzleski. "An investigation of spiral growth in lamellar eutectics". In: *Journal of Crystal Growth* 34.2 (1976), S. 164–172.

[383] S. Akamatsu, S. Bottin-Rousseau, G. Faivre und E. A. Brener. "Scaling Theory of Two-Phase Dendritic Growth in Undercooled Ternary Melts". In: *Physical review letters* 112.10 (2014), S. 105502.

[384] A. Genau. private communication. 2016.

[385] A. Bode, Th. Lippert und M. M. Resch. *inside*. http://inside.hlrs.de: GAUSS Center, 2014.

[386] V.T. Witusiewicz, U. Hecht, S.G. Fries und S. Rex. "The Ag–Al–Cu system: Part I: Reassessment of the constituent binaries on the basis of new experimental data". In: *Journal of Alloys and Compounds* 385.1–2 (2004), S. 133–143.

[387] V. Witusiewicz, U. Hecht, S. Fries und S. Rex. "The Ag–Al–Cu system: Part II: A thermodynamic evaluation of the ternary system". In: *Journal of alloys and compounds* 387.1 (2005), S. 217–227.

[388] Y. A. Chang, D. Goldberg und J. P. Neumann. "Phase diagrams and thermodynamic properties of ternary copper-silver systems". In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 6.3 (1977), S. 621–674.

[389] "Light Metal Systems. Part 1: Selected Systems from Ag-Al-Cu to Al-Cu-Er". In: Hrsg. von G. Effenberg und S. Ilyenko. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004. Kap. Ag-Al-Cu (Silver - Aluminium - Copper), S. 1–7.

[390] V. Raghavan. "Ag-Al-Cu (Silver-Aluminum-Copper)". In: *Journal of Phase Equilibria and Diffusion* 29.3 (2008), S. 256–258.

[391] L. F. Mondolfo. *Aluminum alloys: structure and properties*. Elsevier, 2013.

[392] J. M. Rosalie und L. Bourgeois. "Silver segregation to θ'(Al 2 Cu)–Al interfaces in Al–Cu–Ag alloys". In: *Acta Materialia* 60.17 (2012), S. 6033–6041.

[393] J De Wilde. "Multicomponent, multiphase solidification: microstructure formation during the ternary eutectic reaction". Diss. Katholieke Universiteit Leuven, 2005.

[394] A. Bulla, C. Carreno-Bodensiek, B. Pustal, R. Berger, A. Bührig-Polaczek und A. Ludwig. "Determination of the Solid-Liquid Interface Energy in the Al–Cu–Ag System". English. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 38.9 (2007), S. 1956–1964.

[395] K. B. Kim, J. Liu, N. Marasli und J. D. Hunt. "The effect of different atomic volumes in the three phases during lamellar eutectic growth. A comparison of experiment and theory in the Al-Al2Cu system". In: *Acta Metallurgica et Materialia* 43 (1995), S. 2143.

[396] J. Hötzer, M. Jainta, M. Bauer, P. Steinmetz, M. Kellner, H. Köstler, U. Rüde und B. Nestler. "High Performance Computing in Science und Engineering – Garching/Munich 2016 (2016)". In: Hrsg. von S. Wagner, A. Bode, H. Brüchle und M. Brehm. Bayerische Akademie der Wissenschaften, 2016. Kap. Study of complex microstructure evolution in ternary eutectic alloys with massive parallel large-scale phase-field simulations.

[397] Z. Hengzhi, Peng L. und Shuangming F. "Three-dimensional microstructure reconstruction and the eutectic spacing adjustment during directional solidification of Al-40% Cu hypereutectic alloy". In: *Acta Metall Sin* 48.1 (2012), S. 33–40.

[398] H. Salmang und H. Scholze. *Keramik (German Edition)*. 7., vollst. neubearb. und erw. Aufl. Springer, Okt. 2006.

[399] L. J. Gauckler, J. Helbig und U. Schönholzer. *Grundzüge der Keramik*. Hrsg. von Eidgenössische Technische Hochschule Zürich Professur für nichtmetallische Werkstoffe ETH. Skript zur Vorlessung. 2001.

[400] S.J. L. Kang. *Sintering: Densification, Grain Growth and Microstructure*. 1. Aufl. Butterworth-Heinemann, Feb. 2005.

[401] M. N. Rahaman. *Ceramic processing and sintering*. Revised. New York: Taylor & Francis, 2003.

[402] R. L. Coble. "Sintering Crystalline Solids .2. Experimental Test of Duffusion Models In Powder Compacts". In: *Journal of Applied Physics* 32.5 (1961), S. 793–&.

[403] S.-J. L Kang und Y.-I. Jung. "Sintering kinetics at final stage sintering: model calculation and map construction". In: *Acta materialia* 52.15 (2004), S. 4573–4578.

[404] R. J. Brook. "Pore-Grain Boundary Interactions and Grain Growth". In: *Journal of the American Ceramic Society* 52.1 (Jan. 1969), S. 56–57.

[405] G. Gottstein und L.S. Shvindlerman. "Theory of g rain boundary motion in the presence of mobile pores". In: *Acta Metallurgica* 41.11 (1993), S. 3267–3275.

[406] J. Rödel und A. M. Glaeser. "pore drag and pore-boundary separation in Alumina". In: *Journal of the American Ceramic Society* 73.11 (Nov. 1990), S. 3302–3312.

[407] V. Tikare, M. A. Miodownik und E. A. Holm. "Three-Dimensional Simulation of Grain Growth in the Presence of Mobile Pores". In: *Journal of the American Ceramic Society* 84.6 (2001), S. 1379–1385.

[408] MA. Miodownik, JW. Martin und A. Cerezo. "Mesoscale simulations of particle pinning". In: *Philosophical Magazine A* 79.1 (Jan. 1999), S. 203–222.

[409] M. Selzer. "Mechanische und Strömungsmechanische Topologieoptimierung mit der Phasenfeldmethode". Diss. 2014.

[410] K. Ankit, B. Nestler, M. Selzer und M. Reichardt. "Phase-field study of grain boundary tracking behavior in crack-seal microstructures". In: *Contrib. Mineral. Petr.* 166.6 (2013), S. 1709–1723.

[411] K. Ankit, J.L. Urai und B. Nestler. "Microstructural evolution in bitaxial crack-seal veins: A phase-field study". In: *Journal of Geophysical Research B: Solid Earth* 120.5 (2015), S. 3096–3118.

[412] K. Ankit, M. Selzer, C. Hilgers und B. Nestler. "Phase-field modeling of fracture cementation processes in 3-D". In: *Journal of Petroleum Science Research* 4.2 (2015), S. 79–96.

[413] X. N. Jing, J. H. Zhao, G. Subhash und X. L. Gao. "Anisotropic grain growth with pore drag under applied loads". In: *Materials Science and Engineering A* 412.1–2 (2005), S. 271–278.

[414] Y. U. Wang. "Computer modeling and simulation of solid-state sintering: A phase field approach". In: *Acta Materialia* 54.4 (2006), S. 953–961.

[415] V. Kumar, Z. Z. Fang und P. C. Fife. "Phase field simulations of grain growth during sintering of two unequal-sized particles". In: *Materials Science and Engineering: A* 528.1 (2010), S. 254–259.

[416] K. Asp und J. Ågren. "Phase-field simulation of sintering and related phenomena – A vacancy diffusion approach". In: *Acta Materialia* 54.5 (2006), S. 1241–1248.

[417] A. Kazaryan, Y. Wang und B. R. Patton. "Generalized phase field approach for computer simulation of sintering: incorporation of rigid-body motion". In: *Scripta Materialia* 41.5 (1999), S. 487–492.

[418] K. Shinagawa. "Simulation of grain growth and sintering process by combined phase-field/discrete-element method". In: *Acta Materialia* 66 (2014), S. 360–369.

[419] S. G. Kim, D. Ik. Kim, W. T. Kim und Y. B. Park. "Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth". In: *Physical Review E* 74 (6 Dez. 2006), S. 061605.

[420] JW. Cahn. "The impurity-drag effect in grain boundary motion". In: *Acta Metallurgica* 10.9 (1962), S. 789–798.

[421] K. Lücke und HP. Stüwe. "On the theory of impurity controlled grain boundary motion". In: *Acta Metallurgica* 19.10 (1971), S. 1087–1099.

[422] S.M. An, B.K. Yoon, S.Y. Chung und S.J. L. Kang. "Nonlinear driving force–velocity relationship for the migration of faceted boundaries". In: *Acta Materialia* 60.11 (2012), S. 4531–4539.

[423] R. D Monahan und J. W. Halloran. "Single-Crystal Boundary Migration in Hot-Pressed Aluminum Oxide". In: *Journal of the American Ceramic Society* 62.11-12 (1979), S. 564–567.

[424] Y. Finkelstein, S. M. Wiederhorn und B. J. Hockey. "Migration of sapphire interfaces into vitreous bonded aluminum oxide". In: *Ceramic Transactions, 7 pp.* 258 (1990).

[425] R. Akiva, A. Katsman und W. D. Kaplan. "Anisotropic grain boundary mobility in undoped and doped alumina". In: *Journal of the American Ceramic Society* 97.5 (2014), S. 1610–1618.

[426] W. Rheinheimer, M. Bäurer, C. A. Handwerker, J. E. Blendell und M. J. Hoffmann. "Growth of single crystalline seeds into polycrystalline strontium titanate: Anisotropy of the mobility, intrinsic drag effects and kinetic shape of grain boundaries". In: *Acta Materialia* 95 (2015), S. 111–123.

[427] W. Rheinheimer, M. Bäurer und M. J. Hoffmann. "A reversible wetting transition in strontium titanate and its influence on grain growth and the grain boundary mobility". In: *Acta Materialia* 101 (2015), S. 80–89.

[428] J. Rödel und A. M. Glaeser. "Anisotropy of grain growth in alumina". In: *Journal of the American Ceramic Society* 73.11 (1990), S. 3292–3301.

[429] M. Hillert. "On the theory of normal and abnormal grain growth". In: *Acta Metallurgica* 13 (1965), S. 227–238.

[430] J. E. Burke und D. Turnbull. "Recrystallization and grain growth". In: *Progress in Metal Physics* 3 (1952), S. 220–292.

[431] P. Steinmetz, M. Kellner, J. Hötzer und B. Nestler. "Quantitative Comparison of Phase-Field Simulations with a Ternary Eutectic Three-Dimensional Jackson-Hunt Approach". In: *Computational Materials Science (submitted* (2016).

Eigene Veröffentlichungen

[1] J. Hötzer*, M. Kellner*, P. Steinmetz* und B. Nestler (*equal authors). "Applications of the phase-field method for the solidification of microstructures in multi-component systems". In: *Journal of the Indian Institute of Science* (2016).

[3] P. Steinmetz, Y.C. Yabansu, J. Hötzer, M. Jainta, B. Nestler und S.R. Kalidindi. "Analytics for microstructure datasets produced by phase-field simulations". In: *Acta Materialia* 103 (2016), S. 192–203.

[4] P. Steinmetz, J. Hötzer, M. Kellner, A. Dennstedt und B. Nestler. "Large-scale phase-field simulations of ternary eutectic microstructure evolution". In: *Computational Materials Science* 117 (2016), S. 205–214.

[8] J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, B. Nestler, A. Dennstedt, A. Genau, M. Bauer, H. Köstler und U. Rüde. "Large scale phase-field simulations of directional ternary eutectic solidification". In: *Acta Materialia* 93 (2015), S. 194–204.

[9] J. Hötzer, O. Tschukin, M.B. Said, M. Berghoff, M. Jainta, G. Barthelemy, N. Smorchkov, D. Schneider, M. Selzer und B. Nestler. "Calibration of a multi-phase field model with quantitative angle measurement". In: *Journal of Materials Science* 51.4 (2016), S. 1788–1797.

[76] J. Hötzer, V. Rehn, W. Rheinheimer, M. Hoffmann und B. Nestler. "Phase-field study of pore-grain boundary interaction". In: *Journal of the Ceramic Society of Japan* 124.4 (2016), S. 329–339.

[137] J. Hötzer, P. Steinmetz, M. Jainta, S. Schulz, M. Kellner, B. Nestler, A. Genau, A. Dennstedt, M. Bauer, H. Köstler und U. Rüde. "Phase-field simulations of spiral growth during directional ternary eutectic solidification". In: *Acta Materialia* 106 (2016), S. 249–259.

[138] M. Bauer, J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, M. Berghoff, F. Schornbaum, C. Godenschwager, H. Köstler, B. Nestler und U. Rüde. "Massively parallel phase-field simulations for ternary eutectic directional solidification". In: *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*. ACM. 2015, S. 8.

[159] A. Vondrous, B. Nestler, A. August, E. Wesner, A. Choudhury, and J. Hötzer. "Metallic Foam Structures, Dendrites and Implementation Optimizations for Phase-Field Modeling". In: *High Performance Computing in Science and Engineering '11: Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2011*. Hrsg. von W. Nagel, D. Kröner und M. Resch. 2015. Aufl. Springer, 2011.

[160] A. Vondrous, M. Selzer, J. Hötzer und B. Nestler. "Parallel Computing for Phase-field Models". In: *International Journal of High Performance Computing Applications* 28.1 (Feb. 2014), S. 61–72.

[163] J. Hötzer, A. Vondrous, J. Ettrich, M. Jainta, A. August, D. Studenvoll, M. Reichardt, M. Selzer und B. Nestler. "Phase-field simulations of large-scale microstructures by integrated parallel algorithms". In: *High Performance Computing in Science and Engineering '14: Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2014*. Hrsg. von Wolfgang E. Nagel, Dietmar H. Kröner und Michael M. Resch. 2015. Aufl. Springer, Mai 2015.

[164] J. Hötzer, M. Jainta, M. Ben Said, P. Steinmetz, M. Berghoff und B. Nestler. "Application of large-scale phase-field simulations in the context of high-performance computing". In: *High Performance Computing in Science and Engineering '15: Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2015*. Hrsg. von Wolfgang E. Nagel, Dietmar H. Kröner und Michael M. Resch. Springer.

[170] F. Weyer, M.B. Said, J. Hötzer, M. Berghoff, L. Dreesen, B. Nestler und N. Vandewalle. "Compound Droplets on Fibers". In: *Langmuir* 31.28 (2015). PMID: 26090699, S. 7799–7805.

[313] M. Kellner, I. Sprenger, P. Steinmetz, J. Hötzer, B. Nestler und M. Heilmaier. "Phase-field simulation of the microstructure evolution in the eutectic NiAl-34Cr system". In: *Computational Materials Science* 128 (2017), S. 379–387.

[315] J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, A. Dennstedt und B. Nestler. "Die Vielfalt der Musterbildung in Metallen". In: *horizonte* 45 (2015).

[316] P. Steinmetz, M. Kellner, J. Hötzer, A. Dennstedt und B. Nestler. "Phase-field study of the pattern formation in Al-Ag-Cu under the influence of the melt concentration". In: *Computational Materials Science* 121 (2016), S. 6–13.

[376] J. Hötzer, P. Steinmetz, M. Kellner, J. Dietze und B. Nestler. "Large-scale phase-field simulations of directional solidified ternary eutectics using high-performance computing". In: *High Performance Computing in Science and Engineering '16: Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2016*. Hrsg. von Wolfgang E. Nagel, Dietmar H. Kröner und Michael M. Resch. Springer, 2016, S. 635–646.

[396] J. Hötzer, M. Jainta, M. Bauer, P. Steinmetz, M. Kellner, H. Köstler, U. Rüde und B. Nestler. "High Performance Computing in Science und Engineering – Garching/Munich 2016 (2016)". In: Hrsg. von S. Wagner, A. Bode, H. Brüchle und M. Brehm. Bayerische Akademie der Wissenschaften, 2016. Kap. Study of complex microstructure evolution in ternary eutectic alloys with massive parallel large-scale phase-field simulations.

[431] P. Steinmetz, M. Kellner, J. Hötzer und B. Nestler. "Quantitative Comparison of Phase-Field Simulations with a Ternary Eutectic Three-Dimensional Jackson-Hunt Approach". In: *Computational Materials Science (submitted* (2016).

Betreute Abschlussarbeiten

Hochleistungsrechnen:

- Christian Lamparter - Bachelorarbeit - Anwendung der Cache-Optimierung Blocking in der Materialsimulation
- Christopher Serr - Bachelorarbeit - Packung von 3-dimensionalen Mesh-Strukturen zur Generierung von initialen Mikrostrukturen
- Christopher Serr - Projektarbeit - Implementierung eines meshbasierten Ausgabeformats für einen parallelen Löser
- Constantin Heisler - Masterarbeit - Framework für einen adaptiven numerischen Gleichungslöser
- Daniel Stubenvoll - Bachelorarbeit - Graphenbasierte Analyse für Phasenfeld-Simulationen mit gerichteter Erstarrung
- Fabian Hafner - Bachelorarbeit - Vektorisierung eines Phasenfeld-Modells mit intrinsischen Compilerfunktionen
- Gert-Jan Rozing - Bachelorarbeit - Generische Iterationsvorschriften für parallele Laufzeit Algorithmen
- Henrik Hierl - Bachelorarbeit - Optimierung eines Phasenfeld-Modells zur
- Martin Napiwotzky - Bachelorarbeit - Dynamische Gebietsaufteilung für Hochleistungsrechner
- Michael Röll - Masterarbeit - Raumfüllende Algorithmen mit 3D Objekten
- Philip Weißenstein - Bachelorarbeit - Parallelisierung von Gitterverfahren Ausnutzung moderner Hardware

Simulation der ternäre eutektische gerichtete Erstarrung:

- Johannes Dietze - Bachelorarbeit - Gefügeentwicklung während der gerichteten Erstarrung ternärer Eutektika in Abhängigkeit der Erstarrungsgeschwindigkeit mit der Phasenfeldmethode
- Julian Mood - Bachelorarbeit - Untersuchung des Einflusses der Oberflächenenergien bei der gerichteten Erstarrung ternärer Eutektika mit der Phasenfeld-Methode
- Laura Promberger - Bachelorarbeit - Hauptkomponentenanalyse von Phasenfeldsimulationen
- Markus Linnenberg - Bachelorarbeit - Modellierung und Simulation eutektischer Kolonien im binären und ternären System

Simulation des Sinterprozess:

- Georges Barthelemy - Diplomarbeit - Untersuchung von porösen Keramiken mit der Phasenfeldmethode
- Nikolay Smorchkov -Masterarbeit - Phase-field modell for solid-state sintering
- Veronika Rehn - Bachelorarbeit - Phase-field studies of pore-drag-drop at grain boundaries during the final sintering stage