

**Wissenschaft im Dialog:  
Zyklus «Modellierung und Simulation»**

# **Computer Based Materials Modelling – fortschrittliche Möglichkeiten der Werkstoffentwicklung**

---

**Montag, 26. November 2001  
Beginn 15.00 Uhr**

**ca. 17.15 Uhr wird ein Apéro offeriert**

**EMPA Dübendorf, AKADEMIE**

**Eintritt frei  
Gäste willkommen**

**Sprache deutsch/englisch**

Weitere Veranstaltungen im Zyklus «Modellierung und Simulation»  
folgen in unregelmässigen Abständen

## Vorwort

*Die Traumvorstellung, dass gewünschte Werkstoffeigenschaften mit modernen Hochleistungsrechnern ab initio vom Atom/Molekül modelliert werden könnten, ist zwar heute noch weit von der Realität entfernt. Zur Vereinfachung werden deshalb meist kombinierte Ansätze gewählt, um einerseits zu den gewünschten «Structure-Property-Relations» zu kommen, andererseits aber auch produktnahe «Processing-Performance-Relations» zu erhalten.*

*In drei Vorträgen werden konkrete Vorgehensweisen für die zielführende Modellierung und Optimierung von ganz bestimmten Werkstoffsystemen dargestellt. Damit soll den interessierten Werkstoffachleuten das praktische Einsatz- und künftige Entwicklungspotenzial aufgezeigt werden.*

## **Modeling of Microstructure Formation during Solidification**

**Prof. Michel Rappaz, Laboratory of Physical Metallurgy (LPM), EPFL, 1015 Lausanne**

The present contribution will describe two methods developed at LPM to model microstructure formation during solidification of metallic alloys at various scales.

The first one is a *Pseudo-Front Tracking (PFT)* technique which allows to solve the solute diffusion equations at the scale of the dendrites, with appropriate boundary conditions at the solid-liquid interface. This method allows to predict the development of the primary phase from one or several nuclei.

At the larger scale of a whole casting, a physically-based *Cellular Automation* has been developed for the prediction of dendritic grain structures. Coupled with Finite Element Methods such models can predict complex grain morphologies, for example in superalloy castings.

### ***Advanced Methods for the Simulation of Advanced Materials***

***Dr. Wanda Andreoni, IBM, Zurich Research Laboratory, 8803 Rüschlikon***

This presentation will provide an overview of methodologies currently used to investigate materials of interest for advanced technologies and of the results of recent computer simulations aimed at the understanding of their functioning and at the design of novel compounds. In particular, it will be shown how high performance computing can be of real help to solve materials issues in diverse areas, including semiconductor, display, nano- and bio-technologies.

### ***Massgeschneiderte Verbundwerkstoffe: Design von heterogenen Materialien am Computer***

***Dr. Albert H. Widmann, MatSim GmbH – Material Simulation, 8002 Zürich***

Die grosse Mehrheit der uns umgebenden Werkstoffe sind heterogene Materialien oder Komposite. Neue Anwendungen – von der Transportindustrie über Elektronik und Bauwesen bis zur Medizinaltechnik – erfordern Werkstoffe mit ganz spezifischen Eigenschaften, die man nur durch geeignete Komposition verschiedener Materialien erhält. Die Entwicklung solcher Komposite ist aufwändig.

Die Software *Palmyra* macht es zum ersten Mal möglich, durch Simulation die Eigenschaften von Verbundwerkstoffen zuverlässig vorherzusagen, womit Laborexperimente viel gezielter gesteuert werden können.

**Diskussionsleitung**

**W.J. Muster, Vizedirektor EMPA Dübendorf**

