ANNUAL REPORT 2012

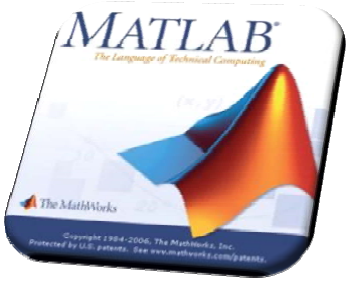
UIUC, August 16, 2012

Equilibrium Precipitation Model Graphical User Interface

Matthew L. S. Zappulla
(MS Student)

Department of Mechanical Science and Engineering
University of Illinois at Urbana-Champaign

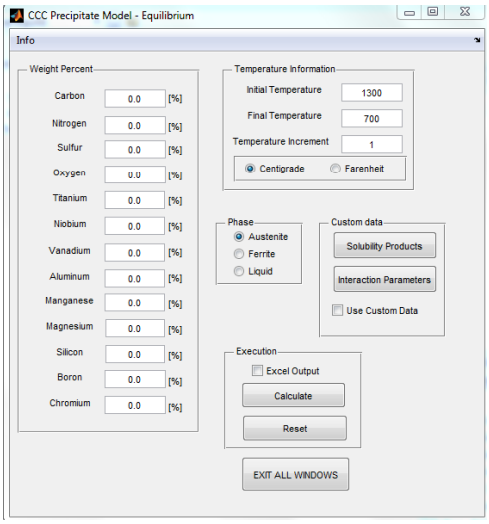
New Standalone Program



- CCC Precipitation Model – Equilibrium (Kun Xu) Demo Version now available
- The package includes:
  - The equilibrium executable
  - MATLAB Runtime Library
  - Complete installer
- After running installer once, the executable can be run
- Allows smaller program & no MATLAB license

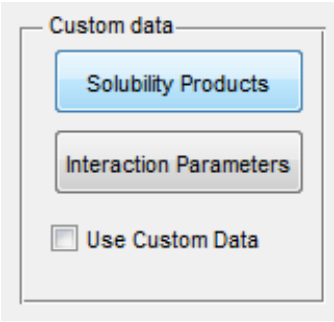
Program Operation

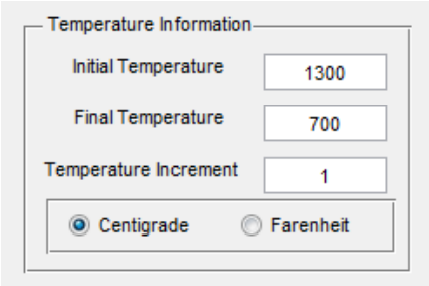
- The program contains default settings with standard options
  - Customize data or use default settings
  - Choose phase:
    - Austenite
    - Ferrite
    - Liquid
  - Choose Temperature range:
    - Initial and final temperature
    - Increment
  - Output results to figures and/or an Excel spreadsheet



Customize Data

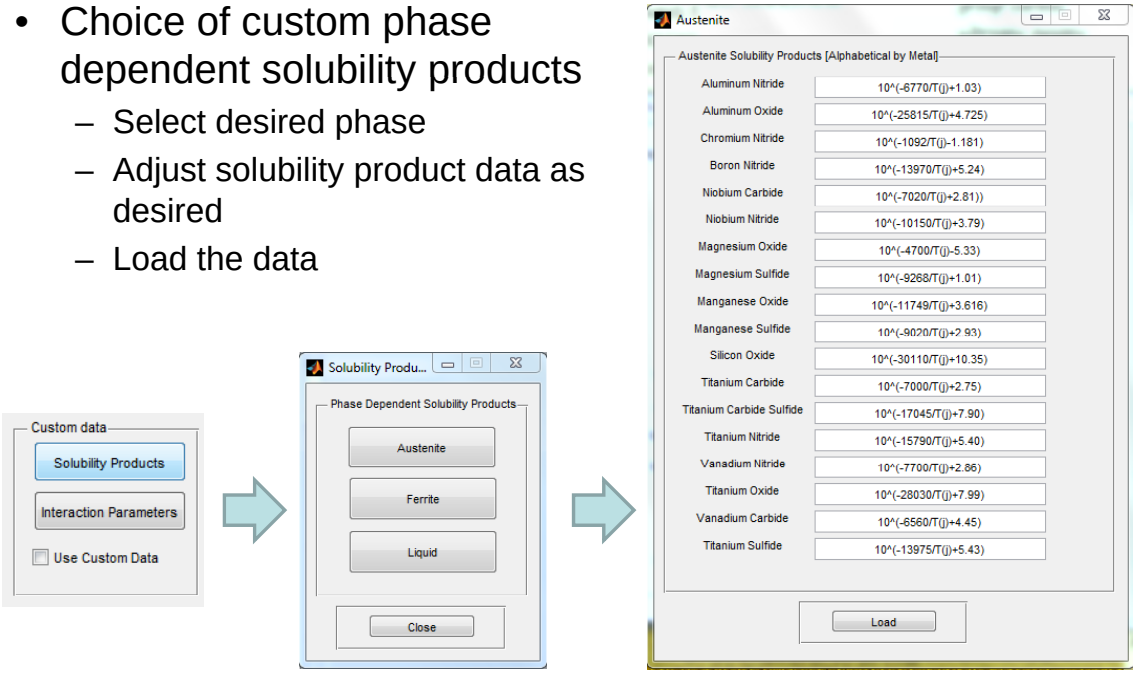
- In addition to the default settings, the program allows for use to adjust model property data
  - Phase dependent solubility products
  - Element to element interaction parameters





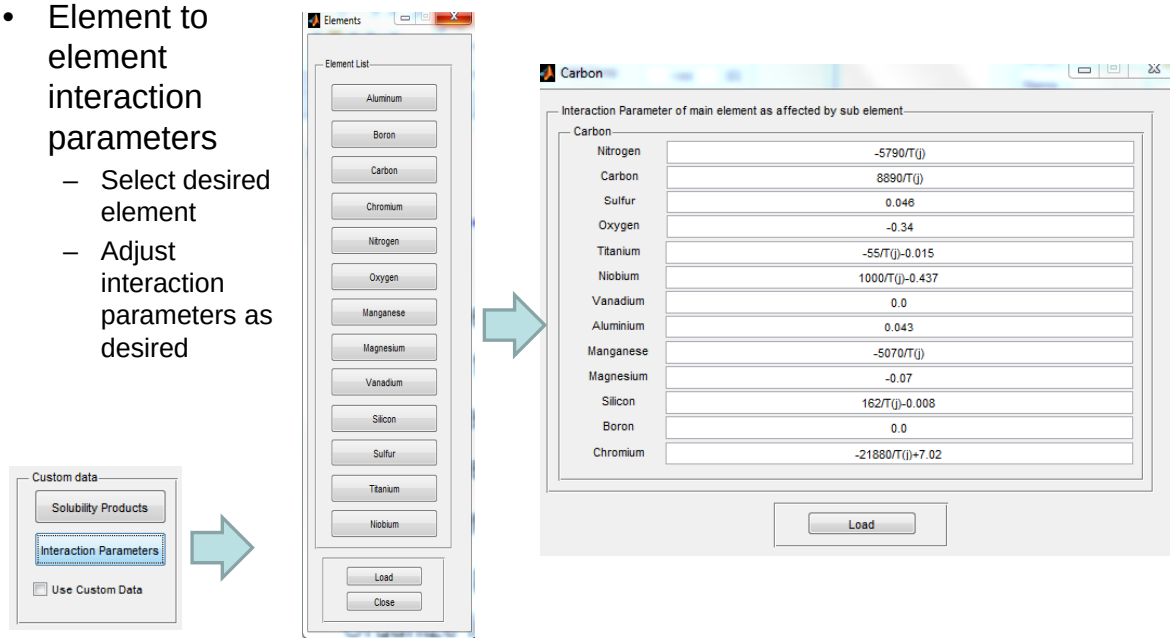
Solubility Product Options

- Choice of custom phase dependent solubility products
  - Select desired phase
  - Adjust solubility product data as desired
  - Load the data



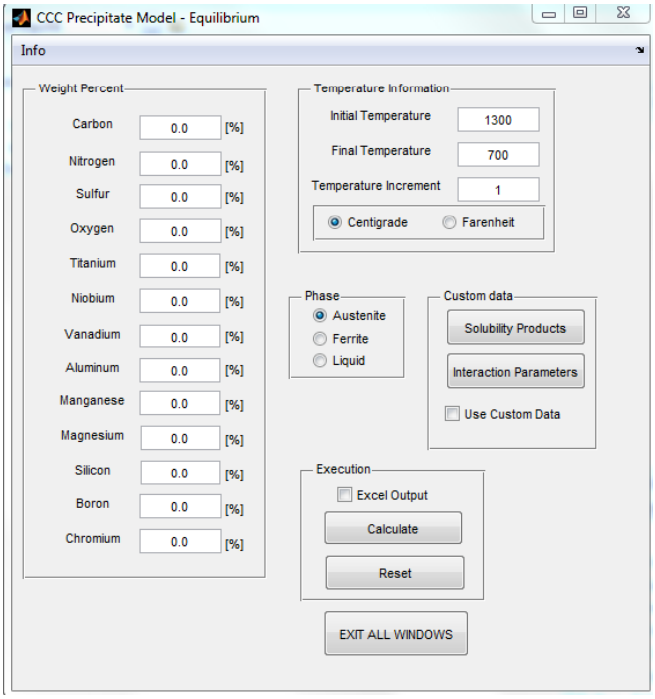
Interaction Parameters

- Element to element interaction parameters
  - Select desired element
  - Adjust interaction parameters as desired

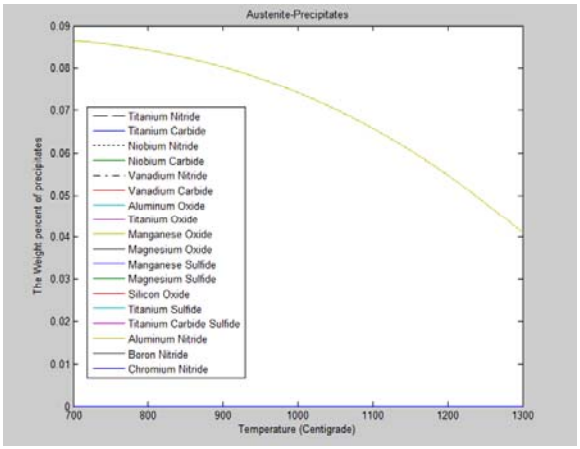


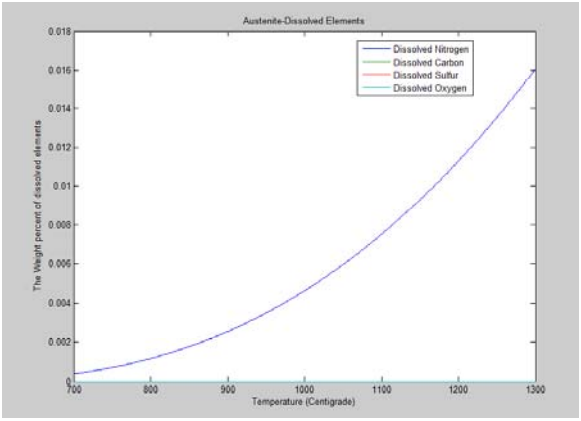
Example Problem - Inputs

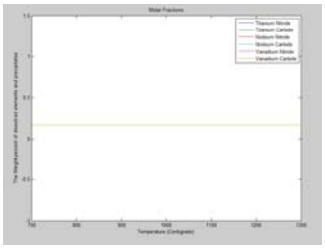
- Austenite
- 0.03% Carbon
- 0.006% Aluminum
- 1300-700°C
  - By 1°C
- Default Behavior
- Output to Excel



Example Problem – Output Plots







Example Problem - Spreadsheet

- The Output to excel option generates a detailed spreadsheet
  - Each precipitate is given in a column in relation to the temperature column to the left
  - If a precipitate is not present it does not appear, this makes reading the spreadsheet much easier

B	C	V	Y	Z	AA	AB	AC	AD
Temperature	Dissolved Nitrogen	Aluminum Nitride	xTiN	xTiC	xNBN	xNbC	xVN	xVC
1300	0.016044244	0.040857426	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1299	0.015992026	0.041010216	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1298	0.015939905	0.041162722	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1297	0.015887882	0.04131494	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1296	0.015835958	0.04146687	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1295	0.015784131	0.041618512	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1294	0.015732403	0.041769867	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1293	0.015680772	0.041920933	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1292	0.01562924	0.042071712	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1291	0.015577806	0.042222204	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1290	0.01552647	0.042372408	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1289	0.015475232	0.042522324	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1288	0.015424092	0.042671953	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1287	0.01537305	0.042821295	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1286	0.015322106	0.042970349	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1285	0.01527126	0.043119116	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1284	0.015220512	0.043267596	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1283	0.015169862	0.043415789	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1282	0.01511931	0.043563695	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1281	0.015068855	0.043711313	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1280	0.015018499	0.043858645	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1279	0.01496824	0.04400569	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1278	0.014918079	0.044152448	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1277	0.014868016	0.044298919	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1276	0.014818051	0.044445104	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1275	0.014768184	0.044591002	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1274	0.014718414	0.044736613	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1273	0.014668742	0.044881938	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1272	0.014619168	0.045026977	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1271	0.014569691	0.045171729	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667
1270	0.014520312	0.045316195	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667	0.166667

eet1 Sheet2 Sheet3 **Equilib**

Future Work

- Improve this equilibrium model
- Add ability to read phase and temperature data from Segregation Model and CON1D
- Create GUI for multiphase nonequilibrium model of precipitation

Acknowledgements

- Continuous Casting Consortium Members (ABB, ArcelorMittal, Baosteel, Tata Steel, Goodrich, Magnesita Refractories, Nucor Steel, Nippon Steel, Postech/ Posco, SSAB, ANSYS-Fluent)
- Kun Xu, Doctoral Candidate
- Prof. Brian G. Thomas

ANNUAL REPORT 2012

UIUC, August 16, 2012

Equilibrium Precipitation Model Graphical User Interface

Matthew L. S. Zappulla
(MS Student)

Department of Mechanical Science and Engineering
University of Illinois at Urbana-Champaign