



**HAL**  
open science

## Diphasic Domain Approach Method (DDAM) : tracé des diagrammes de phases binaires et ternaires.

Bertrand Cheynet, Damien Barbier, Sébastien Ricoud

### ► To cite this version:

Bertrand Cheynet, Damien Barbier, Sébastien Ricoud. Diphasic Domain Approach Method (DDAM) : tracé des diagrammes de phases binaires et ternaires.. 2007. hal-00124818

**HAL Id: hal-00124818**

**<https://hal.science/hal-00124818v1>**

Preprint submitted on 16 Jan 2007

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## **Diphasic Domain Approach Method (DDAM)** **Tracé des diagrammes d'équilibres de phases binaires et ternaires.**

Bertrand CHEYNET\*, Damien BARBIER, Sébastien RICOUD  
THERMODATA-INPG-CNRS  
6, rue du Tour de l'Eau, 38400 Saint Martin d'Hères, France.  
Téléphone +33 4 76 42 76 90. Télécopie +33 4 76 63 15 37.  
E-mail : bertrand.cheynet@grenet.fr

### Abstract

If someone wants to plot an isobaric temperature-composition binary or an isobarothermal section of a ternary equilibria phase diagram he only needs to plot the limits of biphasic domains, it automatically gives the limits of the monophasic and triphasic fields.

In such diagrams each biphasic domain is defined by two lines joining all the extremities of the tie-lines of the domain and limited by the first and the last one. These tie-lines are segments whose the extremities are in the plane of the diagram and can easily be determined by equilibria calculation codes. Then binary or ternary phase diagrams can be plotted only using conodes of the biphasic fields and the method used to determine the biphasic domains becomes the major point in binary and ternary phase diagrams plotting.

A meshing of the surface of the diagram is certainly not the best way to obtain a rapid result. We propose a curvature following approach which allows a rapid and robust determination of binary and ternary diagrams.

### Résumé

Si nous voulons tracer un diagramme d'équilibres de phases binaire température-composition ou une section isobarothermique ternaire il suffit de tracer les frontières des domaines biphasés, cela donne automatiquement les limites des domaines monophasés et triphasés.

Dans de tels diagrammes chaque domaine biphasé est défini par deux lignes joignant toutes les extrémités des conodes du domaine et limité par la première et la dernière. Ces conodes sont des segments dans le plan du diagramme et peuvent être facilement déterminés par les codes de calcul d'équilibre. Ainsi les diagrammes de phases binaires et ternaires peuvent être tracés en utilisant uniquement les conodes des domaines biphasés et la méthode utilisée pour déterminer les frontières de ces domaines devient le point majeur dans le tracé des diagrammes de phases binaires et ternaires.

Un maillage de la totalité de la surface du diagramme n'est certainement pas la meilleure façon pour obtenir rapidement un résultat. Nous proposons une approche par suivi de courbure des domaines biphasés qui conduit à une détermination rapide et fiable des diagrammes binaires et ternaires.

**Keywords** : Phase diagram, Thermodynamics, Plot, Biphasic domains, Calphad

**Mots clés** : Diagramme de phase, Thermodynamique, Tracé, Domaines biphasés, Calphad

## 1. Introduction

L'ultime étape de la méthode CALPHAD (Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermodynamics) [1] est la représentation graphique des résultats et en particulier le tracé des diagrammes d'équilibres de phases binaires et ternaires. Chacun d'entre nous a été confronté à ce problème et il faut bien l'avouer il n'y a pas pour l'instant de procédure entièrement automatique et satisfaisante qui à partir du fichier des paramètres optimisés des potentiels énergétiques des différentes phases donne les diagrammes d'équilibre correspondants sans l'intervention de l'utilisateur. Le sujet semble trivial, il n'en est rien, nombreux sont ceux qui s'y sont frottés sans obtenir un total succès.

A la base de notre travail il y a une constatation : si quelqu'un veut tracer un diagramme d'équilibres de phases binaire isobarique température-composition ou une section ternaire isobarothermique il lui suffira de tracer l'ensemble des domaines biphasés, cela donne automatiquement les limites des domaines monophasés et triphasés.

Dans de tels diagrammes chaque domaine biphasé est délimité par sa première et sa dernière conode et par deux lignes qui joignent les extrémités des conodes intermédiaires du domaine. Ces conodes sont des segments dont les extrémités donnent les compositions des deux phases à l'équilibre, elles sont dans le plan du diagramme et peuvent être aisément déterminées par les codes de calcul d'équilibres. Les diagrammes binaires et ternaires peuvent donc être tracés en utilisant uniquement les extrémités des conodes des domaines biphasés et dans ce cas la robustesse du logiciel de tracé graphique ne reposera que sur la robustesse de la méthode de détermination des domaines biphasés.

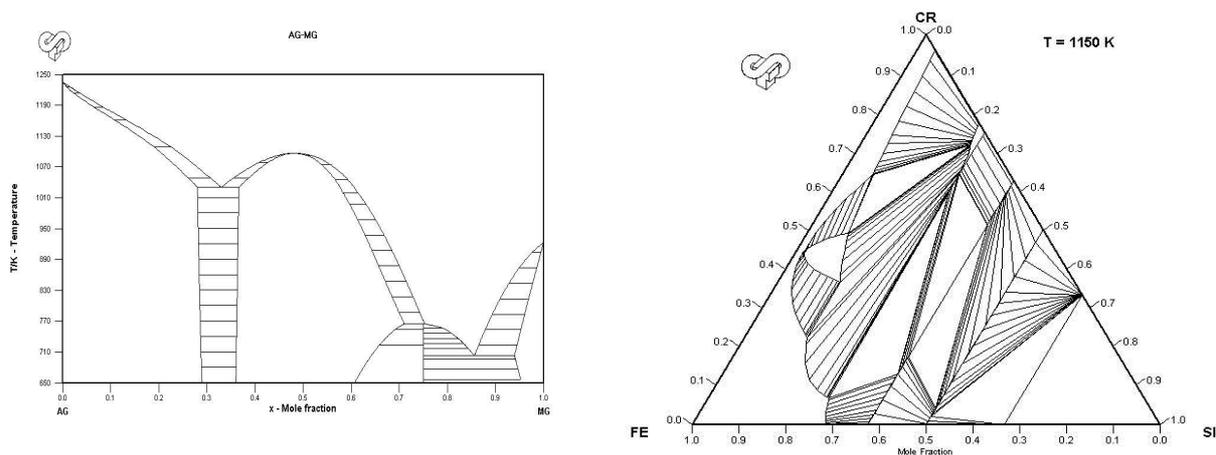


Fig. 1. Diagramme binaire et ternaire obtenus à partir des conodes des domaines biphasés.

La première idée qui vient à l'esprit pour tracer de tels diagrammes est d'effectuer un maillage fin de toute la surface du diagramme. Chacun pourra s'apercevoir très rapidement que ce n'est pas forcément la meilleure méthode car

elle fait appel à de nombreux pas de calcul et est de ce fait gourmande en temps, de plus les limites de phases sont déterminées dans ce cas par des calculs au voisinage, zone dans laquelle les équilibres sont les plus difficiles à déterminer. Nous proposons une nouvelle approche par suivi de la courbure des domaines biphasés, adaptée à chacun des cas, qui permet une détermination rapide et robuste des diagrammes.

## 2. Biphase dans un binaire

La première conode d'un domaine biphasé est facile à obtenir en balayant les limites du diagramme. Ici, sur la Fig. 1, la première conode est réduite à un point, c'est la transition HCP/Liquide du cadmium. A partir de ce point n°1 il s'agit d'effectuer un pas  $\delta$  en température et composition à l'intérieur du diagramme pour trouver la deuxième conode. Une analyse sur la circonférence du cercle centré sur le point n°1 et de rayon  $\delta$  permet de trouver rapidement, en trois calculs la conode n°2. A partir de ces deux conodes le segment allant du milieu de la dernière conode, de longueur  $\delta$  et dans la direction donnée par la ligne reliant les milieux des deux dernières conodes permet de déterminer la composition globale et la température du calcul suivant qui conduira à l'obtention de la troisième conode dans des conditions optimales. Le processus est alors poursuivi en utilisant les deux dernières conodes jusqu'aux limites du diagramme. Le pas  $\delta$  ne doit pas forcément être très petit pour aboutir à une précision suffisante du diagramme, il dépend de la forme des limites de phases et de la méthode d'interpolation utilisée entre les points calculés. Il est aussi possible d'accélérer ou de ralentir la procédure en agissant sur la valeur de  $\delta$  en fonction de la monotonie de la courbure qui peut être évaluée sur une conode par la comparaison de la distance qui sépare le milieu de la conode et la composition globale utilisée pour le calcul de cette conode à la longueur de la conode. L'exemple de la Fig.2 montre que généralement moins d'une dizaine de conodes suffisent à déterminer très précisément un domaine biphasé lorsque celui-ci ne présente pas d'extravagance.

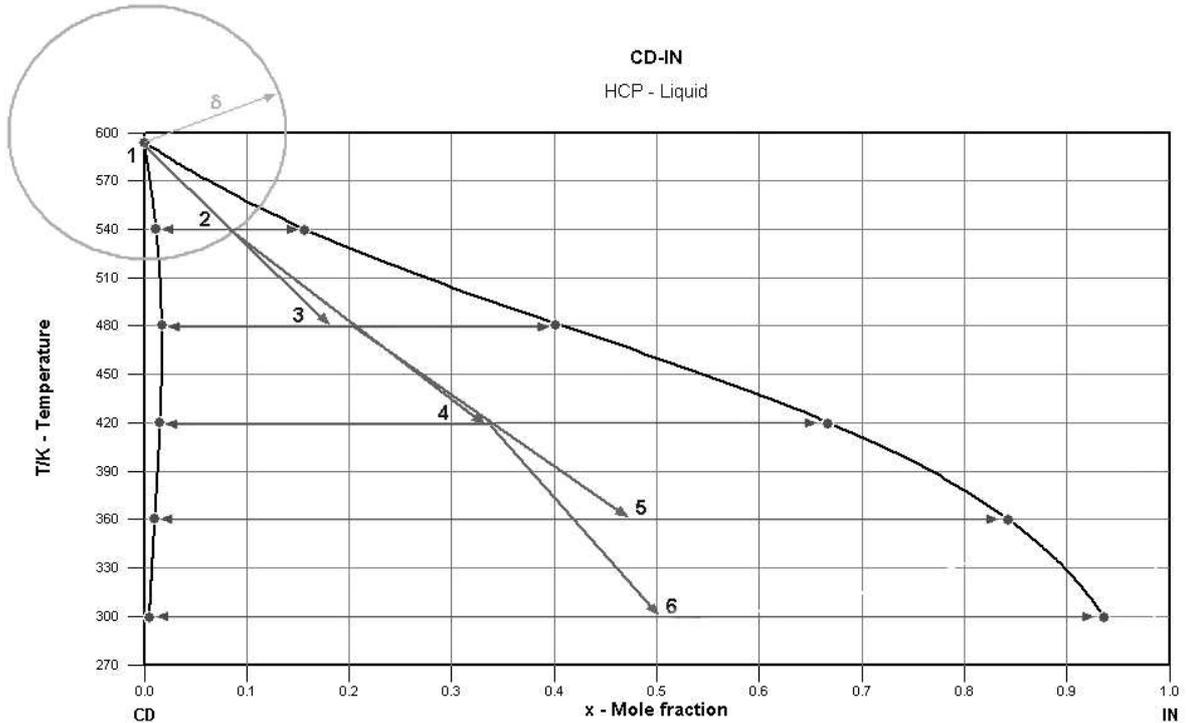


Fig. 2. Suivi de la courbure des frontières d'un diphasé dans un binaire.

Certaines complications peuvent apparaître, c'est le cas lorsque le domaine biphasé devient très étroit et/ou présente un passage par un optimum. La Fig. 3 illustre ce cas et la méthode de suivi proposée.

Le début de la procédure est la même que précédemment décrite ce qui permet la détermination des 7 premières conodes. Puis le calcul de la huitième conode, faite à partir du point de composition globale et de température donné par le segment qui passe par les milieux des conodes 6 et 7 et de longueur  $\delta$  indique le passage dans un domaine monophasé. A ce moment là le pas  $\delta$  est divisé par deux, ce qui permet le calcul de la conode n°9. Le point suivant de calcul, avec un pas  $\delta/2$ , donne un monophasé. Admettons que le critère d'arrêt de diminution du pas soit atteint, alors pour continuer il faudra de nouveau appliquer la procédure de départ, celle appliquée au point 1 pour trouver la conode 2. Nous appliquons cette procédure au point 10, avec le pas initial  $\delta$ , ce qui permet de trouver rapidement la conode n°12. Pour définir le point n°11 il suffit de se rappeler la règle empirique de Konovalov qui dit ceci : « Dans un diagramme binaire, à P constant, T prend des valeurs extrêmes pour un équilibre biphasé si les deux phases en équilibre ont la même composition. »

Il suffit donc d'introduire dans la procédure d'interpolation, qui à partir des extrémités des conodes calculées permet de tracer les limites du biphasé, ce point singulier pour lequel les tangentes aux courbes doivent être confondues et horizontales.

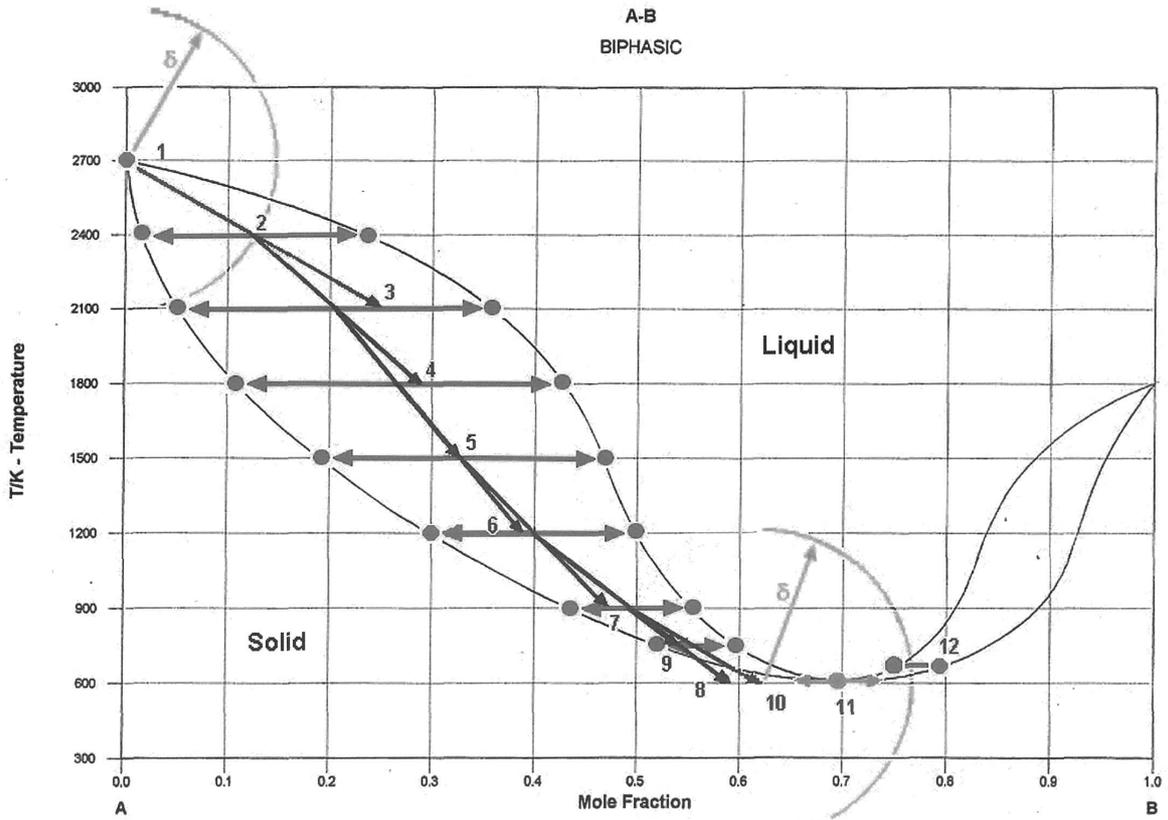


Fig. 3. Suivi d'un biphasé présentant un optimum.

Cette méthode de la médiane donne des résultats très satisfaisants même dans les cas les plus difficiles comme le montrent les Fig. 4 et 5.

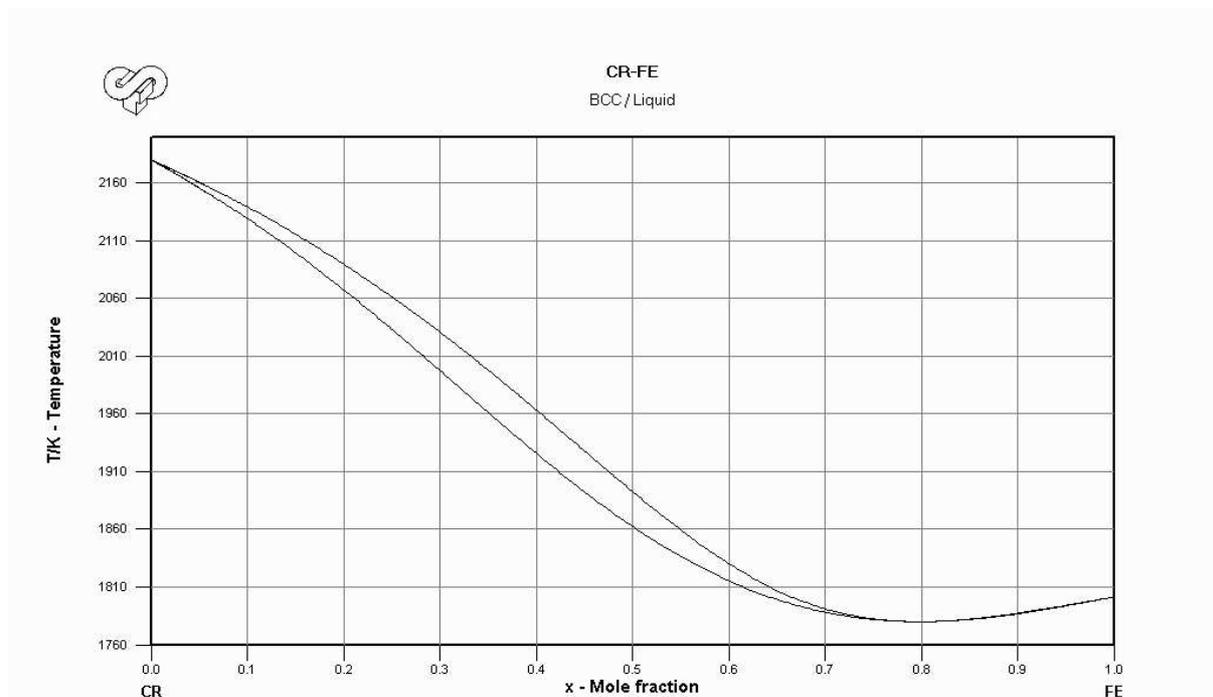


Fig. 4. Domaine biphasé BCC/Liquid dans le binaire Cr-Fe

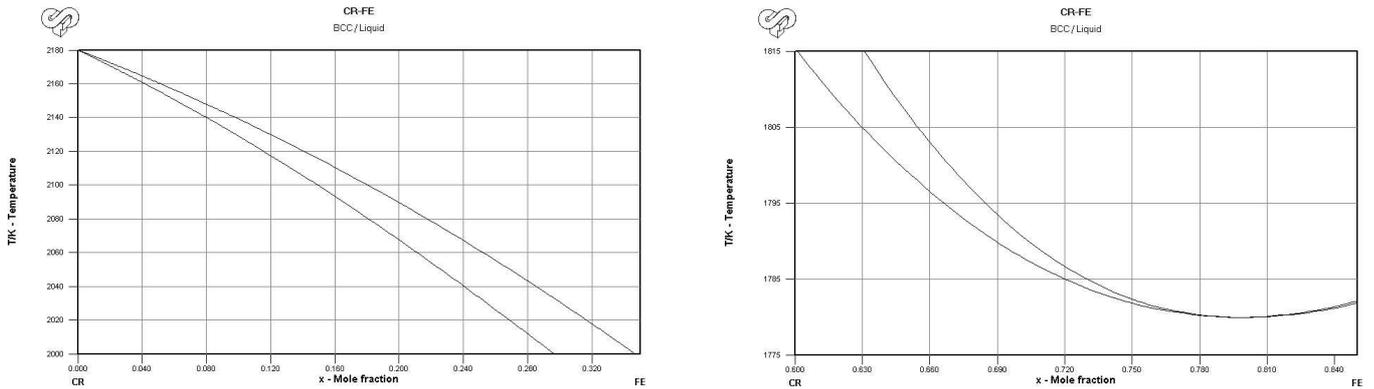


Fig. 5. Domaine biphasé BCC/Liquid dans le binaire Cr-Fe : détails.

### 3. Biphasé dans un ternaire

La procédure mise au point pour le suivi des domaines biphasés dans les ternaires est sensiblement différente. On se servira dans ce cas de la médiatrice de la conode pour effectuer le pas en composition. Il faut donc à partir de l'un des sommets parcourir un binaire limitrophe jusqu'à trouver une première conode. Puis un pas en composition est fait dans le sens donné par la médiatrice de cette première conode pour déterminer la conode suivante et ainsi de suite jusqu'à sortir du biphasé. Si la sortie s'effectue sur un monophasé il faut réitérer sur le binaire limitrophe à partir du point où il avait été quitté. Si la sortie du biphasé se fait sur un triphasé il faut poursuivre l'analyse en prenant comme première conode chacun des deux autres côtés du triphasé. La Fig. 6 illustre cette procédure.

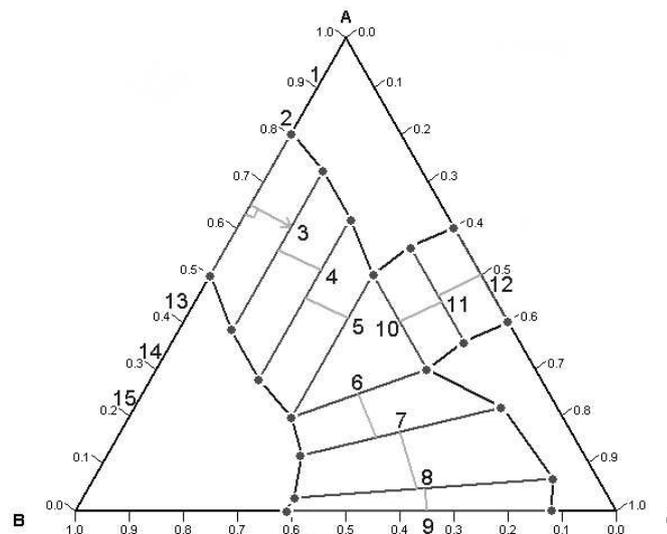


Fig. 6. Suivi de la courbure des frontières des biphasés dans un ternaire.

Cette méthode de la médiatrice donne d'excellents résultats comme le montre la Fig. 7.

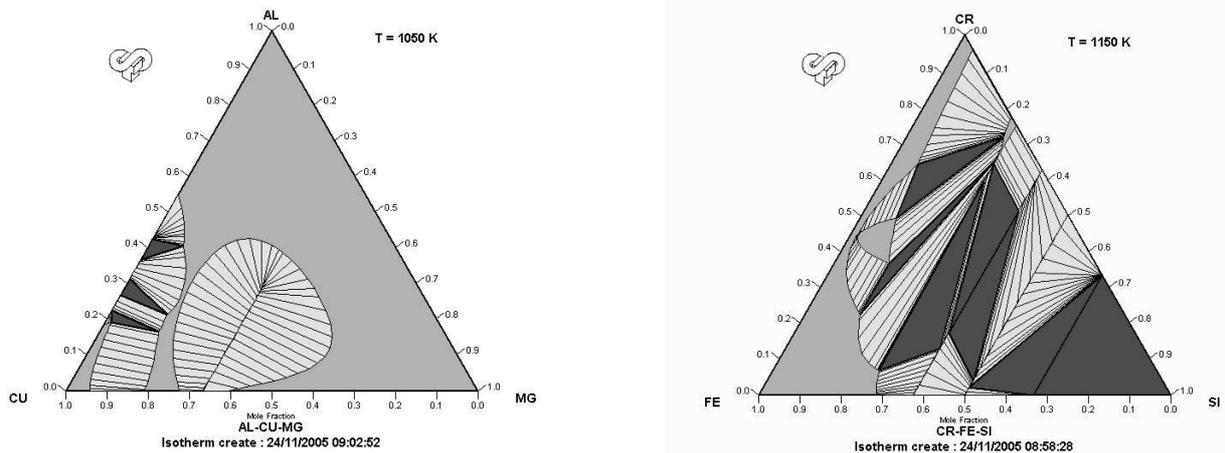


Fig. 7. Exemples de diagrammes ternaires calculés.

#### 4. « DiagPlot »

Cette application efficace et flexible a été développée pour tracer les diagrammes d'équilibre de phases binaires et ternaires calculés à partir des procédures décrites précédemment. Facile d'utilisation, « DiagPlot » permet une maîtrise totale de l'édition des diagrammes. Cette application est partie intégrante de « ThermoSuite » [2], une suite logicielle dont l'objectif est de permettre aux chimistes et aux ingénieurs matériaux d'avoir une approche thermodynamique de leurs problèmes complexes.

Les points, lignes et surfaces, calculés avec n'importe quel logiciel de détermination d'équilibre doivent être structurés sous un format ASCII très convivial. Ci-après la Fig. 8 nous montre un exemple d'un binaire tracé avec seulement trois points calculés par domaine, dans la présentation Noir&Blanc par défaut.

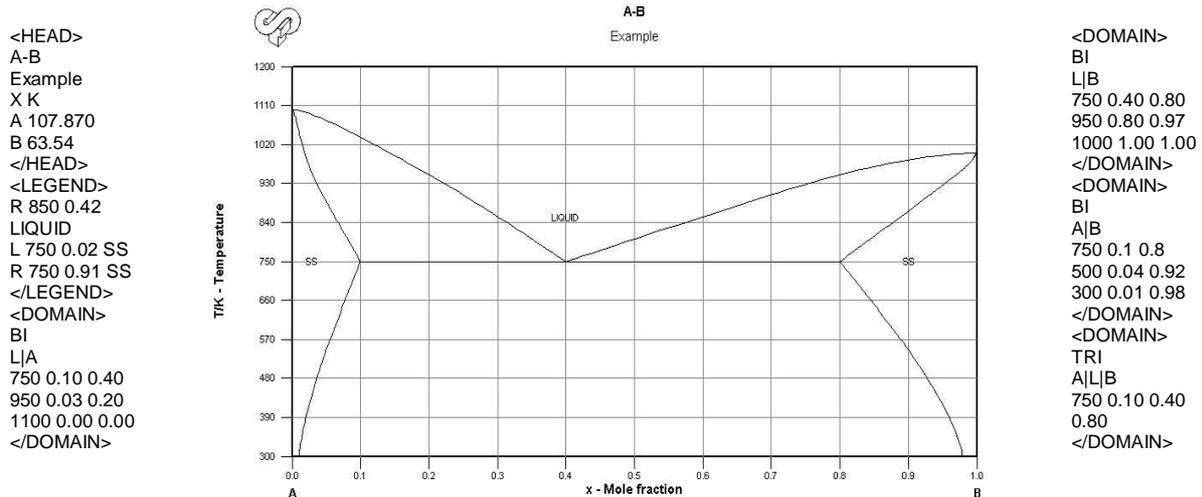


Fig. 8. Fichier et tracé correspondant.

## 5. Conclusions

Ces deux procédures de suivi des domaines biphasés sont simples à mettre en œuvre, efficaces et robustes. Nous les avons intégrées dans notre progiciel de tracé automatique de diagrammes de phases binaires et ternaires et les résultats obtenus sont plus que satisfaisants tant sur le plan rapidité du calcul que précision des résultats.

## Remerciements

Cette étude a été soutenue par THERMODATA, INPG, CNRS, EDF R&D et ARCELOR RESEARCH.

## Références

- [1] <http://www.calphad.org>.
- [2] Calphad, Vol. 26, No. 2, pp. 167-174, 2002.