

バッチ計算

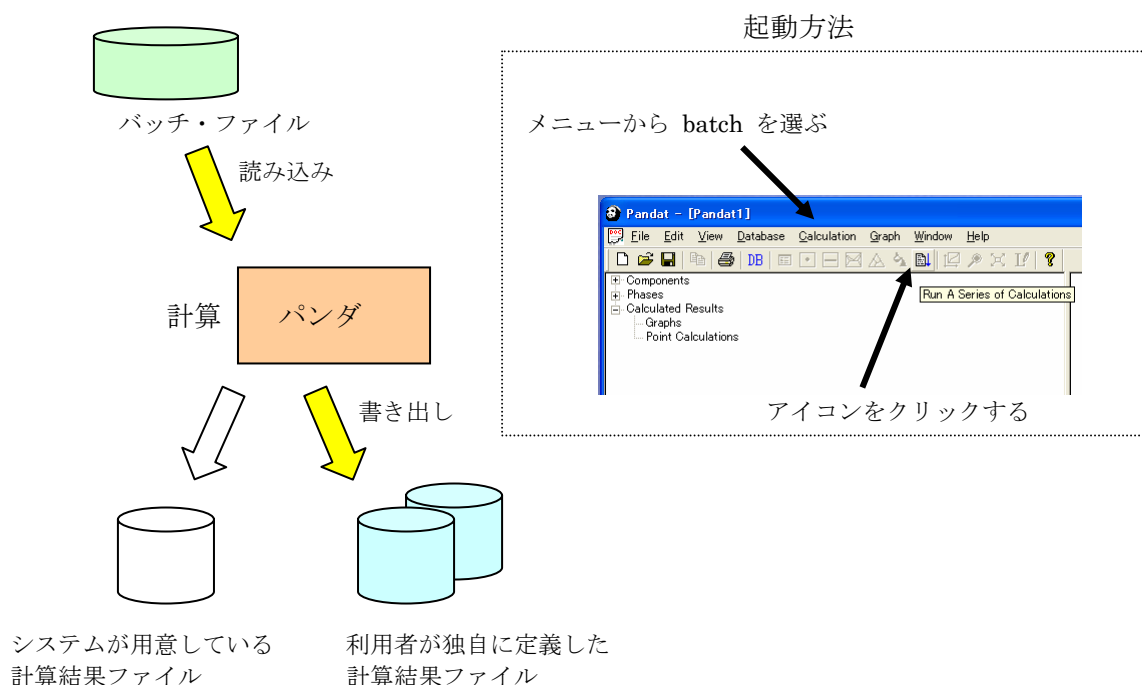
なぜこの機能を作ったのか：

過去に計算した条件を少しだけ変えて再度計算することを容易にしたい。特に多元系の合金を計算する場合、合金濃度値を毎度画面入力するのは面倒でした。そこで、画面に入力する値を保存できるようにしました。

何ができるのか：

画面入力と同じ計算ができます。この他、画面入計算では得られない熱力学データを外部ファイルに書き出すことが出来ます。例えば、凝固時の分配係数を知りたい場合、晶出相中の元素濃度値を書き出すことが出来ます。さらに、大量の計算を一括して処理出来ます。

動作環境：

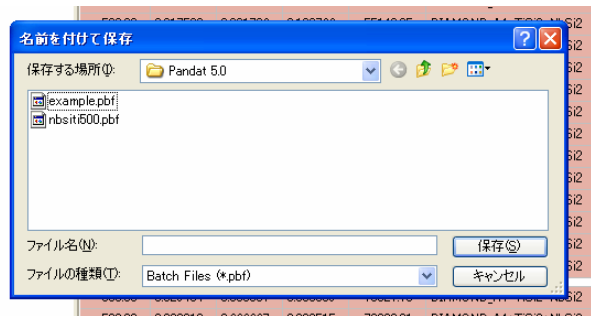


操作例：

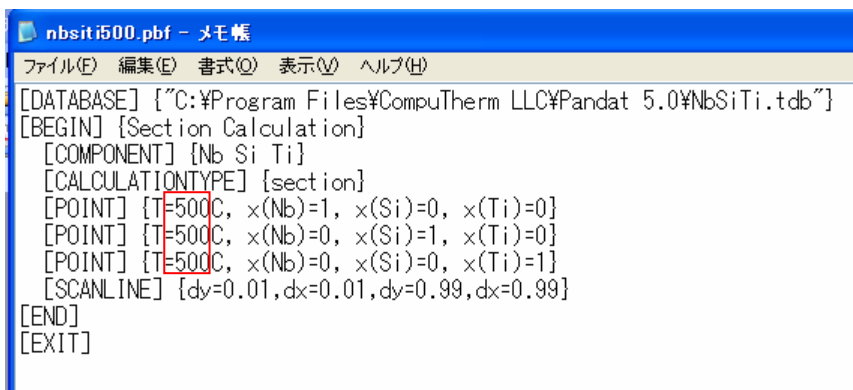
- 1) 例：Nb-Si-Ti 3元系 500°Cの等温断面図を通常に計算します。
単位は、°C、モル fraction とします。
- 2) 画面左領域にある Tables, Default table をクリックし、表を画面表示させます。
メニュー Batch から Export を選択します。

[C]	x(Nb)	x(Si)	x(Ti)	G [J]	phas
500.00	0.010000	0.886869	0.103131	-40215.76	DIAM
500.00	0.010193	0.884686	0.105121	-40598.67	DIAM
500.00	0.010579	0.880318	0.109103	-41364.48	DIAM
500.00	0.011351	0.871584	0.117065	-42896.10	DIAM
500.00	0.012895	0.854114	0.132991	-45959.33	DIAM
500.00	0.014440	0.836645	0.148916	-49022.57	DIAM
500.00	0.015984	0.819175	0.164841	-52085.81	DIAM

- 3) 名前を付けて保存。
たとえば NbSiTi500.pbf

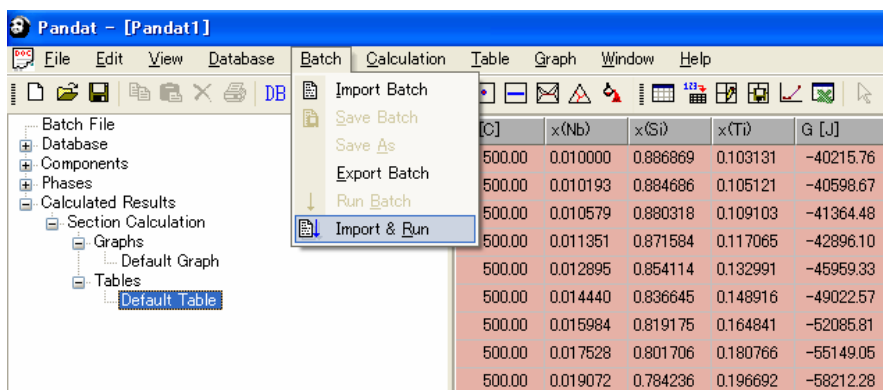


- 4) メモ帳などを
利用して、この
テキストファイル
を開きます。

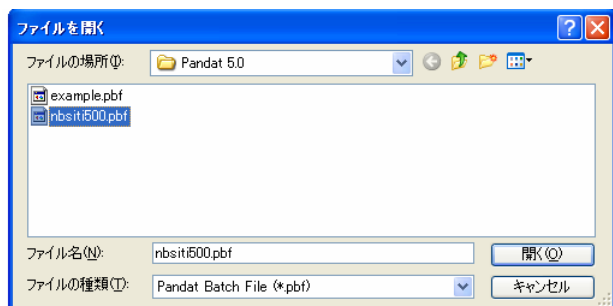


これがバッチ・ファイルの中身です。 500°Cを 800°Cに変えてみましょう。
500C が3箇所ありますので、800C に変えて上書き保存します。

- 5) Pandat に戻り、
メニュー Batch から Import & Run
を選択します。



- 6) 「開く」ボタン
をクリックすると
計算が始まります。
800°Cの
計算結果が画面上
に表示されます。



バッチ・ファイル：

- 「メモ帳」等のプログラムを用いて編集します。
- ファイル名の拡張子は、 p b f にして下さい。(パンダ・バッチ・ファイル)
- どのような計算を行うのか ①、[キーワード] で記述し、続いて具体的な数値を ②、{値} で記述します。画面入力とほぼ同じ要領で値を指示します。
[] と { } では、括弧の種類が違うことに注意して下さい。
- コメント行は // ではじめます。
- 大文字・小文字の違いはありません。
例えば、 [Begin] と [begin] と [BEGIN] とは同じです。
- ひとつの計算処理は [Begin] で始まり、[End] で終わります。

例：

```
[Begin]
    縦断面図計算
[End]
[Begin]
    等温断面図計算
[End]
```

- バッチ処理は、キーワード [Exit] 行で終了します。

① [キーワード]	② {値} の例	説明
[Database]	{ "NbSiTi.tdb" }	利用するデータベースファイル名を記述します。途中で他のデータベースに変更できます。
[Begin]	{ 計算タイトル }	ひとつの計算処理がここから始まることを記述します。計算タイトルを記述できます。このタイトルは画面上に表示されます。
[End]	なし	ひとつの計算処理がここまでであることを記述します。
[Exit]	なし	バッチ・ファイルの読み込みを終了させます。計算処理がここで終了します。
[CalculationType]		計算種類として5つの中のどれかを必ず指示します。
	{Point}	1点計算
	{Line}	ライン計算
	{Section}	状態図計算
	{Projection}	液相面図計算
	{Solidification}	凝固計算

(続く)

① [キーワード]	② {値} の例	説明
[Component]	{ Nb Si Ti }	計算に用いる元素を記述します。
[Point]	{ T=1000 } { T=1000C } { x(Nb)=0.1 } { x%(Nb)=10 } { w(Nb)=0.05 } { w%(Nb)=5 }	温度の単位はケルビンです。しかし記号Cを付ければ°C単位になります。 x: mole fraction x%: mole percent w or wt : weight fraction w% or wt%: weight percent 濃度値合計が1もしくは100以上になった場合は、補正され 指定値/合計値になります。 濃度値を記述していない1個の元素が存在する場合、その濃度値は残量とされます。
[Steps]	{ 10 }	ライン計算の場合、ステップ数を記述します。(刻み数)
[Model]	{ Scheil } { Lever }	凝固計算の場合、計算モデルをどちらか指示します。 Lever = equilibrium
[Interval]	{ 100K } { 100C }	液相面図計算の場合、等温線を付加できます。付加する場合、温度間隔を指示します。 100C と入力した場合、100°C, 200°C, 300°C, …の温度線を計算します。
[Scanline]	{ dx = 0.2, dy = 0.3 }	必要な場合、相境界を検索するスキャン位置を指示できます。
[Suspend] [Restore]	{*} {Liquid} {FCC_A1, BCC_A2}	{*} は全ての相を意味します。 計算から除外する相や、計算対象に含める相を指示します。

(続く)

① [キーワード]	② {値} の例	説明
[Output]	{ fileName="hashi01.dat", format = "T, phaseName, fs, fl, Hm" }	<p>必要な場合、 利用者が独自に定義する計算結果ファイルを作れます。</p> <p>作成するファイル名を記述します。もし既に同じ名前のファイルが在れば、上書きされます。</p> <p>一方、ファイル名に ## を含めれば、例えば、hashi##.dat とすれば、##の部分は自動的に2桁の番号が付けられ、上書きを防止します。</p> <p>hashi00.dat hahsi01.dat hashi02.dat ⋮</p> <p>T: 温度 (ケルビン) T(C): 温度 (°C) phaseName: 平衡相の名前</p> <p>fs: 固相率 fl: 液相率 Hm: 凝固中の系のエンタルピー</p>
	{format = " f(phase_name), G(phase_name), H(phase_name), S(phase_name), Cp(phase_name)"} f(liquid)	<p>指定する相の熱力学データを抽出します。</p> <p>f(相名): モル分率 G(相名): ギブスエネルギー H(相名): エンタルピー S(相名): エントロピー Cp(相名): 熱容量</p>
	{format = " f(*), G(*), H(*), S(*), Cp(*)"} }	<p>平衡状態の全ての相に対して熱力学データを抽出します。</p>
	{format = " x(comp), x%(comp), w(comp), w%(comp), mu(comp)"} }	<p>指定するコンポーネント (元素) の値を抽出します。</p> <p>x(元素名) : モル濃度フラクシオン x% : モル% w : 重量濃度フラクシオン w% : 重量% mu(元素名): 化学ポテンシャル</p>

(続く)

① [キーワード]	② {値} の例	説明
[Output]	<pre>{ format = " x(*), x%(*), w(*), w%(*), mu(*) "}</pre>	<p>全てのコンポーネント（元素）に対して値を抽出します。</p> <p>x : モル濃度フラクション x% : モル% w : 重量濃度フラクション w% : 重量% mu : 化学ポテンシャル</p>
	<pre>{ format = " x(comp@phase), x%(comp@phase), w(comp@phase), w%(comp@phase), mu(comp@phase) "}</pre> <p>x(Cu@liquid)</p>	<p>指定する相中の元素の熱力学データを抽出します。</p>
	<pre>{ format = " x(*@phase), x%(*@phase), w(*@phase), w%(*@phase), mu(*@phase) "}</pre>	<p>指定する相中の全元素に対する熱力学データを抽出します。</p>
	<pre>{ format = " x(*@*), x%(*@*), w(*@*), w%(*@*), mu(*@*) "}</pre>	<p>計算対象の全ての相に関して、相中の全ての元素に対する熱力学データを抽出します。</p>
	<pre>a(Cu@fcc:liquid) a(*@fcc:liquid) a(*@*:liquid)</pre>	<p>基準相 Liquid に対する指定相 fcc の Cu の活量 Activity</p>
	Htot	<p>{Solidification} 計算時における系の全エンタルピー値</p>
	ftot(fcc), ftot(*)	<p>{Solidification} 計算時における固相の累積 phase fraction 値</p>
	f_tot(fcc), f_tot(*)	<p>{Solidification} 計算時における固相の累積 phase fraction 値 その相が存在する温度領域でのみ表示されます。</p>

記述の注意点：

ライン計算：[CalculationType] {Line} の場合、

[Point] キーワードは2行になります。

1行目は計算開始点を、2行目は計算終了点を記述します。

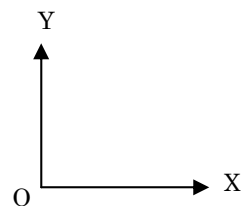
状態図計算：[CalculationType] {Section} の場合、

[Point] キーワードは3行になります。

1行目 Y点の値

2行目 O点の値

3行目 X点の値



バッチファイルに記述する内容は、画面上に入力する内容と一致しています。

```
[begin] {Nb-Si binary phase diagram}
      [CalculationType] {SECTION}
```

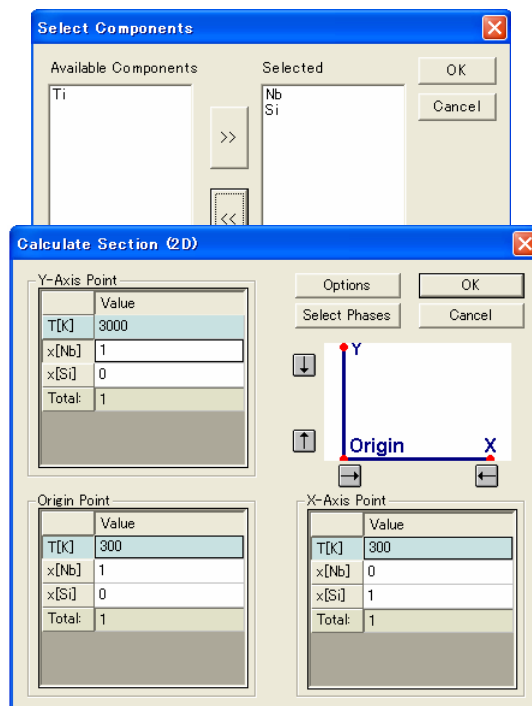
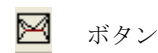
```
[COMPONENT] {Nb Si}
```

```
[POINT] {T = 3000, x(Nb) = 1}
```

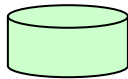
```
[POINT] {T = 300, x(Nb) = 1}
```

```
[POINT] {T = 300, x(Si) = 1}
```

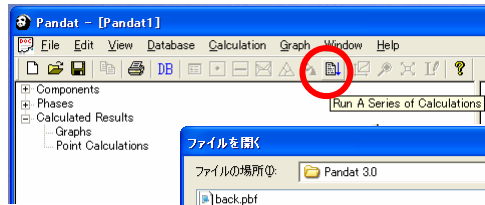
```
[end]
```



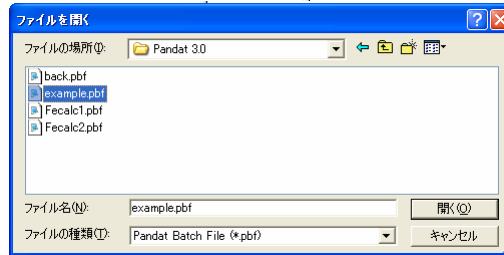
操作の流れ：



① バッチファイルを作成する。

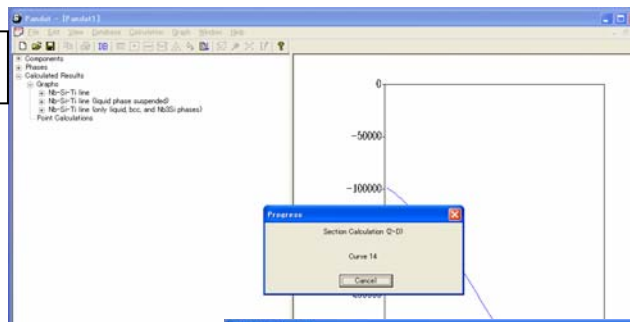


② Pandat から
バッチファイルを選択する。

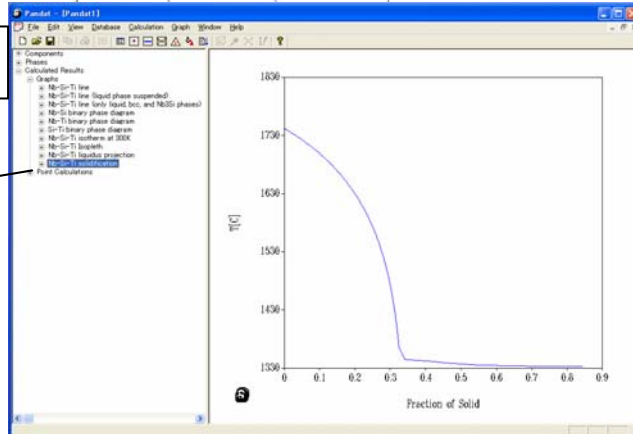


「開く」をクリックすると計算処理を始めます。

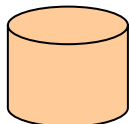
計算処理中



計算終了後



③ 計算タイトルをクリックし、その計算結果図を見る。さらに状態図の場合、ラベル機能を利用し領域の相名を確認出来る。



④ 利用者が独自に定義した計算結果ファイルを見る。ファイル名や各欄にどの値を出力させるかを利用者が指示できます。

1	phaseName	T	B	fs	fi	D	E	Hm	KLiquid	KGas	KTS	KTD	KTDIAMOND
235	Liquid+NBG	1648.18	0.322123	0.677877	37462.1	0.677877	0.322123						
236	Liquid+NBG	1646.58	0.322378	0.677622	37419.9	0.677622	0.322378						
237	Liquid+NBG	1644.98	0.322629	0.677371	37366.1	0.677371	0.322629						
238	Liquid+NBG	1643.38	0.322877	0.677123	37292.4	0.677123	0.322877						
239	Liquid+NBG	1641.78	0.323122	0.676878	37209.9	0.676878	0.323122						
240	Liquid+NBG	1640.18	0.323384	0.676636	37168.6	0.676636	0.323384						
241	Liquid+NBG	1638.58	0.323644	0.676396	37144.0	0.676396	0.323644						
242	Liquid+NBG	1636.98	0.323911	0.676155	37122.7	0.676155	0.323911						
243	Liquid+NBG	1635.38	0.324182	0.675915	37103.9	0.675915	0.324182						
244	Liquid+NBG	1633.78	0.324458	0.675677	37087.6	0.675677	0.324458						
245	Liquid+NBG+TSG	1632.18	0.324739	0.675441	37073.5	0.675441	0.324739						
246	Liquid+TSG	1630.58	0.325025	0.675207	37061.6	0.675207	0.325025						
247	Liquid+NBG	1628.98	0.325316	0.674976	37052.0	0.674976	0.325316						
248	Liquid+NBG+TSG	1627.38	0.325612	0.674748	37044.7	0.674748	0.325612						
249	Liquid+TSG	1625.78	0.325913	0.674523	37038.8	0.674523	0.325913						
250	Liquid+TSG	1624.18	0.326219	0.674301	37034.4	0.674301	0.326219						
251	Liquid+TSG	1622.58	0.326530	0.674082	37031.4	0.674082	0.326530						
252	Liquid+TSG	1620.98	0.326846	0.673866	37029.7	0.673866	0.326846						
253	Liquid+TSG	1619.38	0.327167	0.673653	37029.3	0.673653	0.327167						
254	Liquid+TSG	1617.78	0.327493	0.673443	37029.3	0.673443	0.327493						
255	Liquid+TSG	1616.18	0.327824	0.673236	37029.7	0.673236	0.327824						
256	Liquid+TSG	1614.58	0.328161	0.673032	37029.7	0.673032	0.328161						
257	Liquid+TSG	1612.98	0.328503	0.672831	37029.7	0.672831	0.328503						
258	Liquid+TSG	1611.38	0.328851	0.672632	37029.7	0.672632	0.328851						
259	Liquid+TSG	1609.78	0.329204	0.672435	37029.7	0.672435	0.329204						
260	Liquid+TSG	1608.18	0.329562	0.672241	37029.7	0.672241	0.329562						
261	Liquid+TSG	1606.58	0.329924	0.672049	37029.7	0.672049	0.329924						
262	Liquid+TSG	1604.98	0.330291	0.671859	37029.7	0.671859	0.330291						
263	Liquid+TSG	1603.38	0.330663	0.671671	37029.7	0.671671	0.330663						
264	Liquid+TSG	1601.78	0.331040	0.671485	37029.7	0.671485	0.331040						
265	Liquid+TSG	1600.18	0.331422	0.671301	37029.7	0.671301	0.331422						
266	Liquid+TSG+DIAMOND	1600.18	0.331422	0.671301	37029.7	0.671301	0.331422						0

Excel 画面

バッチ計算ファイルの例

```

////////////////////////////////////
//   Pandat Batch File Example           //
//                                       //
//   Copyright 2005 CompuTherm LLC       //
//                                       //
//           October  1, 2005           //
////////////////////////////////////

// Refer Pandat 5 manual on the batch command keywords for detail
// any line beginning with "/" is a comment line and will be ignored
// General: [command] {value list}
// All [commands] may be written in upper or lower case,
// [Begin], [begin], [BEGIN], etc are all equivalent

// [DATABASE] define a database file with extension name as "tdb" or "pdb"
// [DATABASE] is usually put at the beginning of the batch file.
// It can be anywhere in a batch file, but at least before the first [end].
// Different calculations may use different databases.
// A calculation uses the most recently defined database.
[DATABASE] {"NbSiTi.tdb"}

// Desine a point calculation 1 点計算

// begin the definition of a calculation, with the title of the calculation
// the title will shown on the tree view in PANDAT interface
[begin] {Nb-Si point}

    // point calculation type
    [CalculationType] {point}

    // select subsystem components
    [COMPONENT] {Nb Si}

    // define the point to be calculated
    [POINT] {T = 1000, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.8}

    //      Other example points:
    //      Set units:
    //      Temperature: use C or K(default)
    //      Composition: use x, x%, w (or wt), w% (or wt%)
    //      [POINT] {T = 1000c, x%(Nb) = 30,   x%(Si) = 70}
    //      [POINT] {T = 1000C, w(Nb) = 0.2,   w(Si)  = 0.8}
    //      [POINT] {T = 1000K, w%(Nb) = 20,   w%(Si) = 80}
    //      [POINT] {T = 1000K, wt(Nb) = 0.23, wt(Si) = 0.77}

    //      If composition is not defined for all components,
    //      the balance will be equally distributed to the remaining components:
    //      [POINT] {T = 1000c, x(Nb) = 0.24}
    //      in this case, x(Si) = 0.76
// end of the definition of calculation
[end]

// Define a line calculation with output files ライン計算

[begin] {Nb-Si-Ti line}
    // line calculation type
    [CalculationType] {line}

    // select components
    [COMPONENT] {Nb Si Ti}

```

```

// set endpoints of the line
[POINT] {T = 1000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0}
[POINT] {T = 1000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.8}

// number of calculation steps
[steps] {80}

// Optional:
[output] {FileName = "line_1.dat", format = "T, x(Nb), x(Si), mu(Nb), f(Liquid)}
// FileName and format are required. In format, fields are separated by ","
[output] {FileName = "line_2.dat", format = "T, x(Nb), x(Si), mu(Nb), f(*)"}
// x(component) means overall mole fraction
// f(*) means phase fractions of all related phases
// Separator in output file = TAB
[output] {FileName = "line_3.dat", format = "T, phaseName, x(Nb), x(Si), mu(Nb),
act(*@*:liquid)"}
// phaseName: names of phases in the system in equilibrium
// act(*@*:liquid) outputs activities of all components in any phase in
// equilibrium, with liquid as reference
// act(componentName@phaseName:referencePhaseName) is also acceptable

[end]

// Define a line calculation with liquid phase suspended 液相を除外した場合のライン計算
[begin] {Nb-Si-Ti line (liquid phase suspended)}
  [CalculationType] {line}
  [COMPONENT] {Nb Si Ti}

  // suspend the liquid phase
  [suspend] {liquid}

  [POINT] {T = 3000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.3}
  [POINT] {T = 1000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.3}
  [steps] {50}

[end]

// Define a line calculation with specific phases selected 指定した相だけの場合のライン計算
[begin] {Nb-Si-Ti line (only liquid, bcc, and Nb3Si phases)}
  [CalculationType] {line}
  [COMPONENT] {Nb Si Ti}

  // suspend all phases
  [suspend] {*}

  [restore] {liquid, bcc_a2, Nb3Si}
  // restore these phases
  // no need for [restore] {*} since all phases are included before using [suspend]

  [POINT] {T = 3000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.3}
  [POINT] {T = 1000C, x(Nb) = 0.2, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.3}
  [steps] {50}

[end]

// Define a section calculation
// calculate a binary phase diagram 2元系状態図計算
[begin] {Nb-Si binary phase diagram}
  [CalculationType] {SECTION}
  [COMPONENT] {Nb Si}

```

```

// Specify three points that define the section to be calculated
// Y
// |
// |
// |
// |
// O-----X
    [POINT] {T = 3000, x(Nb) = 1}
    [POINT] {T = 300, x(Nb) = 1}
    [POINT] {T = 300, x(Si) = 1}

    // scanline definition, same as the calculation option in PANDAT interface
    // if this is not given, PANDAT will use internal default value:
    // 1% from the four borders of the section
    [scanline] {dx = 0.01, dy = 0.01, dx = 0.99, dy = 0.99}

    [output] {FileName = "binary_##.dat", format = "phaseName, T, x(Nb), x(Si), f(*)"}
// "binary_##.dat" means file name will be automatically numbered as "binary_00.dat",
// "binary_01.dat", "binary_02.dat", ...
// existing files in the current working folder will not be overwritten.
[end]

[begin] {Nb-Ti binary phase diagram}
    [CalculationType] {SECTION}
    [COMPONENT] {Nb Ti}
    [POINT] {T = 3000, x(Nb) = 1}
    [POINT] {T = 300, x(Nb) = 1}
    [POINT] {T = 300, x(Ti) = 1}
    [output] {FileName = "binary_##.dat", format = "phaseName, T(C), x(Nb), x(Ti), f(*)"}
    // in format, the unit of T can be defined as T(C) or T(K), default is in K
[end]

[begin] {Si-Ti binary phase diagram}
    [CalculationType] {SECTION}
    [COMPONENT] {Si Ti}
    [POINT] {T = 3000, x(Si) = 1}
    [POINT] {T = 300, x(Si) = 1}
    [POINT] {T = 300, x(Ti) = 1}
    [output] {FileName = "binary_##.dat", format = "phaseName, T(K), x(Si), x(Ti), f(*)"}
[end]

// calculate a ternary phase diagram: Nb-Si-Ti Isotherm at 1500K  3元系等温断面図計算

// Phase diagram: Nb-Si-Ti Isotherm at 1500K
[begin] {Nb-Si-Ti isotherm at 1500K}
    [CalculationType] {SECTION}
    [COMPONENT] {Nb Si Ti}
    [POINT] {T = 1500, x(Nb) = 1}
    [POINT] {T = 1500, x(Si) = 1}
    [POINT] {T = 1500, x(Ti) = 1}
[end]

// Phase diagram: Nb-Si-Ti Isopleth 3元系縦断面図計算
[begin] {Nb-Si-Ti Isopleth}
    [CalculationType] {SECTION}
    [COMPONENT] {Nb Si Ti}
    [POINT] {T = 3000, x(Nb) = 1}
    [POINT] {T = 300, x(Nb) = 1}
    [POINT] {T = 300, x(Si) = 0.5, x(Ti) = 0.5}
[end]

```

// calculate a ternary phase diagram: Nb-Ti-Si liquidus projection 3 元系液相面図計算

```
[begin] {Nb-Si-Ti liquidus projection}
  [CalculationType] {Projection}
  [COMPONENT] {Nb Si Ti}
  [Interval] {T = 200C}
//   [Interval] {T = 200K}
//     // with interval value, PANDAT will calculate the isotherm lines
//     // with given interval value
//     // without interval value, only liquidus projection will be calculated
//     // interval value of T can be defined in unit K or C, default is in K
[end]
```

// calculate solidification sequence of a ternary alloy 3 元系凝固計算

```
[begin] {Nb-Si-Ti solidification}
  [CalculationType] {solidification}
  [COMPONENT] {Nb Si Ti}
  [POINT] {T = 3000, x(Si) = 0.8, x(Ti) = 0.1, x(Nb) = 0.1}
  [model] {Scheil}
//   [model] {Lever}
//     two options for solidification model: scheil or lever

  [output] {FileName = "Scheil_###.dat", format = "phaseName, T, fs, fl, Hm,
ftot(*), f_tot(*)"}
// for solidification simulation, fs is total accumulated fraction of solid, fl is fraction of liquid,
// ftot(*) is accumulated fraction of individual solid phase given in the
// same sequence as "phaseName"
// accumulated only for Scheil, otherwise f(*)=equilibrium fraction.
// f_tot is same as ftot, except that only the phases that solidified
// at the temperature are shown.
[end]

// exit: end of batch calculation
[exit]
```