

機能紹介

連続計算、条件設定・抽出機能

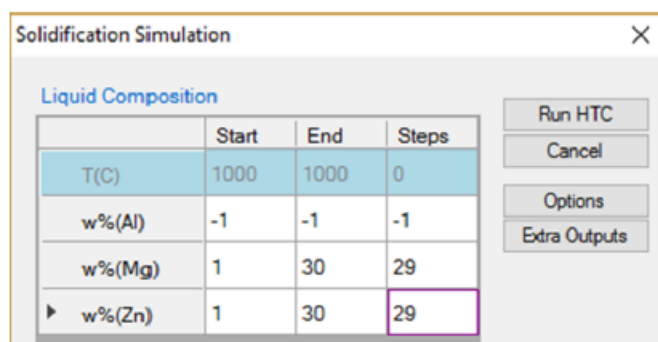
HTC (High Throughput Calculation)

HTC は、Pandat ソフトウェアに標準装備されている機能です。

Pandat は画面操作を用いて状態図計算を指示します。一方、大量の材料に対しての計算指示を毎度入力しては大変です。そこで連続計算の機能が追加されました。さらに大量の計算結果から「欲しい情報」を抽出できることが大切です。熱力学的情報を抽出するために、数学の AND, OR を利用して条件設定が出来ます。

1. 計算指示の例

Al 合金の場合、Al 濃度を残量とし、Mg を 1 から 30%まで 29 Steps、Zn を 1 から 30%まで 29 Steps 濃度を変化させます。この指定後「Run HTC」ボタンを押すと、 $30 \times 30 = 900$ 回の凝固計算を連続して行います。



2. 計算指示の例

Ti 合金の場合、1000°Cの Point 計算（1点平衡計算）各元素を 0 から 50%まで 5%刻みで連続計算を行います。

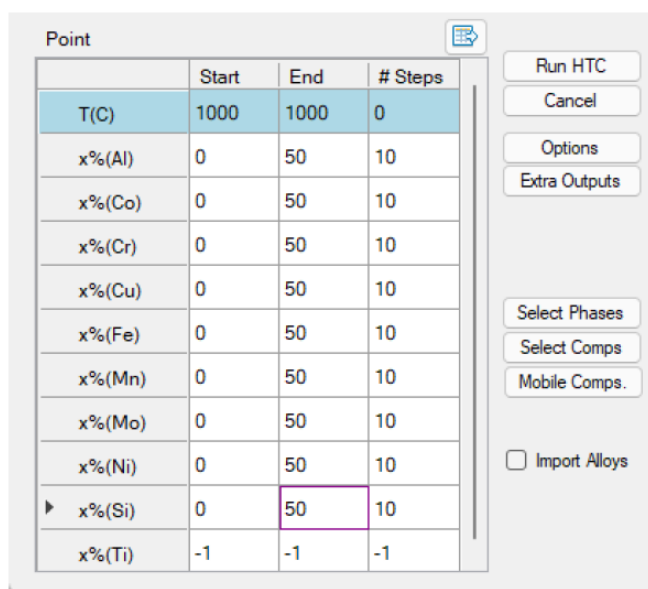


Figure 10.10: HTC composition setup dialog

3. 抽出・解析の例

計算結果はテーブルに保存されます。

この中からどのような熱力学量を抽出するか指示します。

例えば、凝固計算において、「液相線を抽出する」とは「凝固率 $f_s = 0$ 」もしくは「 $f_l = 1.0$ 」と入力します

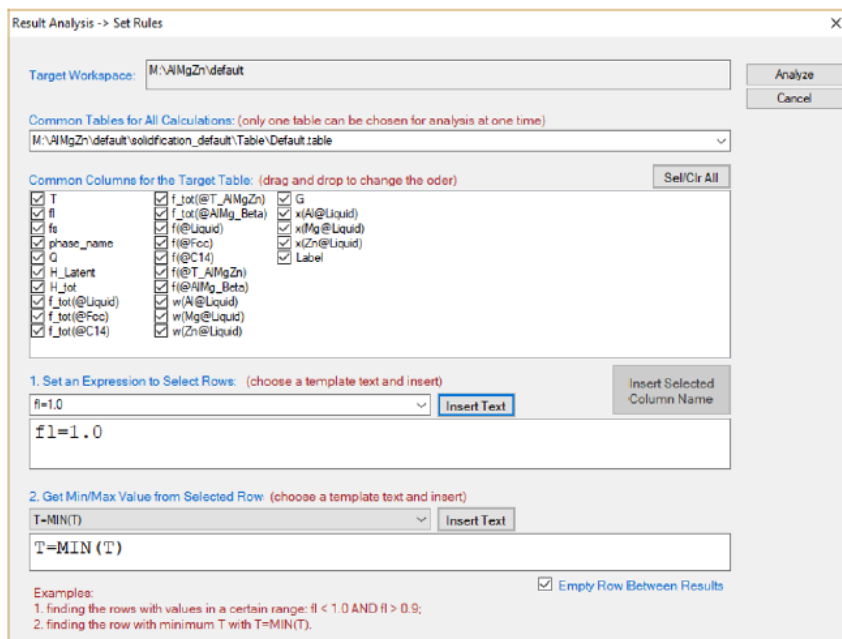


Figure 10.17: “Result Analysis” popup dialog to define the criteria of the properties

4. 解析結果

抽出したデータを図に出来ます。Al-Mg-Zn 合金の Scheil 凝固モデルを用いた連続計算結果から、凝固幅 $\Delta T = T_L - T_S$

を抽出し、この等高線を図にした例です。

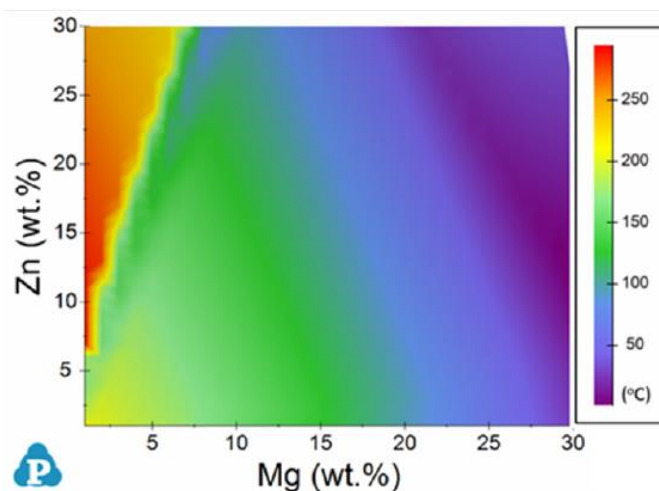


Figure 10.21: The color map of solidification range for Al-rich alloys using the Scheil model

5. 解析結果の例

Al-Mg-Zn 合金の Scheil モデル凝固モデルを用いた連続計算結果から、液相面図を作成した例です。

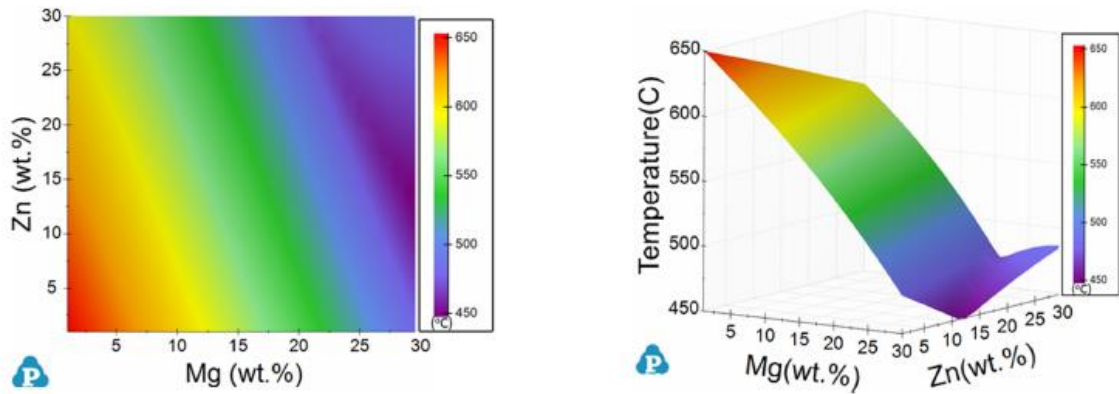


Figure 10.19: 3D diagrams of the liquidus temperatures: colormap (left) and 3D surface (right)

(図番号は英文マニュアルより)

株式会社材料設計技術研究所
〒108-6028
東京都港区港南2-15-1
品川インターシティ A棟 28階
TEL:03-6717-4096 FAX:03-6717-4097