

多元系状態図計算ソフトウェア Pandat

Pandat バージョン 5.0 新機能のご紹介

1. テーブル

テーブル機能が新規に組み込まれました。

- 1-1 計算毎に必ず表形式の「(デフォルト) テーブル」が自動生成されます。例えば Ti-Si 2元系状態図を計算する場合、列として T(C)、X(Si)、X(Ti)、G、phaseName、f(*) が作られます。それぞれ、温度 (°C)、Si のモル分率、Ti のモル分率、自由エネルギー値、安定相の名前、安定相のモル分率です。
- 1-2 画面上でこのテーブル数値を確認できます。
- 1-3 新たなテーブルを作り、活量値などの各種熱力学量をテーブルの列に追加できます。
- 1-4 数値表はバッチ機能を用いて外部ファイルに書き込みできます。
- 1-5 さらにこのテーブルはグラフ機能と連動・統合されています。

画面上に2元系状態図を表示させる例の場合、X軸に X(Si) 列を、Y軸に T(C) 列を選択することになります。

2. バッチファイルの自動生成

- 2-1 従来よりバッチ機能は在りましたが、どのような計算をさせるのか指示するためのバッチ・ファイルを事前にテキスト編集ソフトを用いて作成しなければなりません。そこで画面操作した履歴より、バッチ・ファイルを自動生成させるようにしました。これによりバッチ計算時の準備作業が非常に楽になります。
バッチ機能を活用することで、多元系合金組成値の入力、同様な計算の繰り返し、数値の外部ファイルへの書き込み等が容易に行なえます。
- 2-2 活量値、サイトフラクション値などファイル出力できる熱力学量を増やしました。

3. グラフ

- 3-1 計算状態図上に実験値印を重ね合わせることが出来るようになりました。状態図計算後に、実験値をテーブルとして import し (読み込み)、両方を表示できます。
- 3-2 矢印を任意の場所に表示できるようになりました。
- 3-3 下付き文字を表示できるようになりました。 $\text{Ti}_4\text{C}_2\text{S}_2$

4. 処理速度

従来からの「計算初期点を入力しなくても状態図を計算する」「2相分離の有無を自動的に検知し、2相分離を全て網羅する」機能は備えております。

処理速度をさらに高める Level-1 search オプションを作りました。

従来通りの処理ロジックは Level-2 extensive search オプションとしてご利用できます。

以上

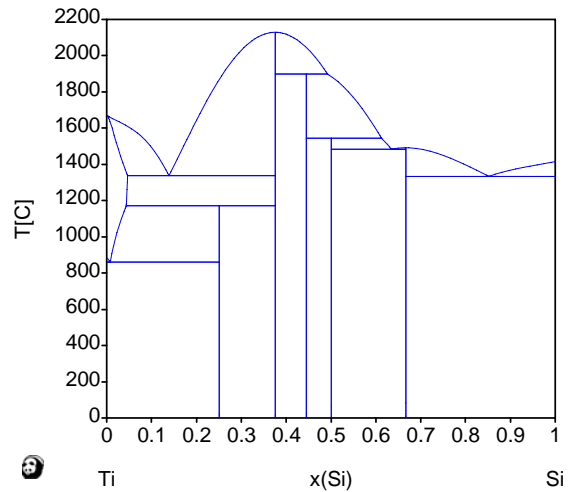


図 1-1 Ti-Si 2 元系状態図

T [C]	x(Si)	x(Ti)	G [J]	phaseName	f(DL)	f(L)	f(Liquid)
1335.71	0.140501	0.859500	-114897.09	Ti5Si3+BCC_A2+Liquid			0.989339
1335.71	0.138500	0.861500	-114572.83	Ti5Si3+BCC_A2+Liquid			0.997777
1335.71	0.137973	0.862027	-114487.39	Ti5Si3+BCC_A2+Liquid			1.00
1335.71	0.137973	0.862027	-114487.39	BCC_A2+Liquid			1.00
1336.82	0.137745	0.862255	-114552.13	BCC_A2+Liquid			1.000000
1341.27	0.136828	0.863172	-114810.25	BCC_A2+Liquid			1.000000
1350.14	0.134979	0.865021	-115322.16	BCC_A2+Liquid			1.000000
1367.78	0.131209	0.868791	-116327.01	BCC_A2+Liquid			1.000000
1402.61	0.123348	0.876652	-118246.13	BCC_A2+Liquid			1.000000
1436.70	0.114975	0.885025	-120010.93	BCC_A2+Liquid			1.000000
1469.77	0.105976	0.894024	-121571.33	BCC_A2+Liquid			1.000000
1501.48	0.096222	0.903778	-122863.94	BCC_A2+Liquid			1.000000
1531.37	0.085588	0.914412	-123812.42	BCC_A2+Liquid			1.000000
1558.89	0.073976	0.926024	-124335.37	BCC_A2+Liquid			1.000000
1571.59	0.067798	0.932202	-124415.79	BCC_A2+Liquid			1.000000
1594.73	0.054746	0.945254	-124198.67	BCC_A2+Liquid			1.000000
1615.02	0.040958	0.959042	-123519.48	BCC_A2+Liquid			1.000000
1633.42	0.026750	0.973250	-122509.90	BCC_A2+Liquid			1.000000
1651.38	0.012455	0.987545	-121339.09	BCC_A2+Liquid			1.000000
1660.63	0.005360	0.994640	-120712.68	BCC_A2+Liquid			1.000000
1665.35	0.001834	0.998166	-120365.14	BCC_A2+Liquid			1.000000
1666.54	0.000955	0.999045	-120267.03	BCC_A2+Liquid			1.000000
1667.83	0.000000	1.000000	-120139.68	BCC_A2+Liquid			1.000000
1335.71	0.375000	0.625000	-152917.21	Ti5Si3+BCC_A2+Liquid			0.000000

図 1-2 Ti-Si 2 元系状態図を計算した時のテーブル数値

図 1-3 テーブルとグラフとの関連付け

X軸としてテーブル中の X(Si) 列を、
Y軸として T 列を選択しています。

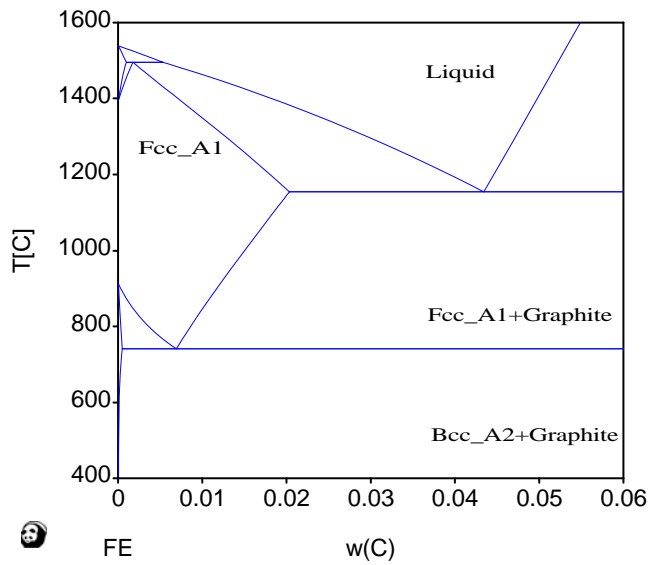


図 1-4 Fe-C 2元系状態図

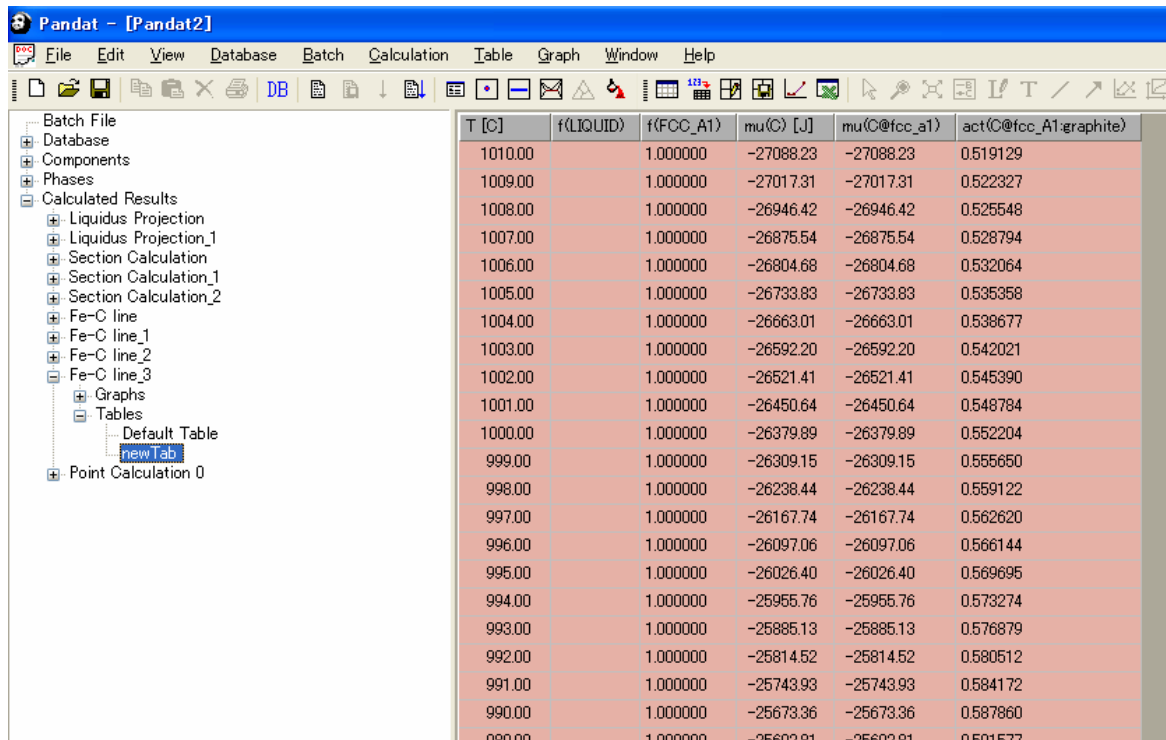
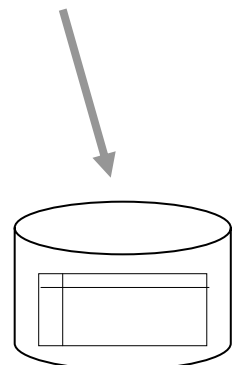


図 1-5 Fe-1mass%C における温度と化学ポテンシャルと炭素活量値

(組成値を固定し、温度変化によるライン計算を実行します。
 新しく newTab テーブルを定義します。
 温度 1000°C、1mass%C、 $a_c = 0.55$ 値を確認できます。)



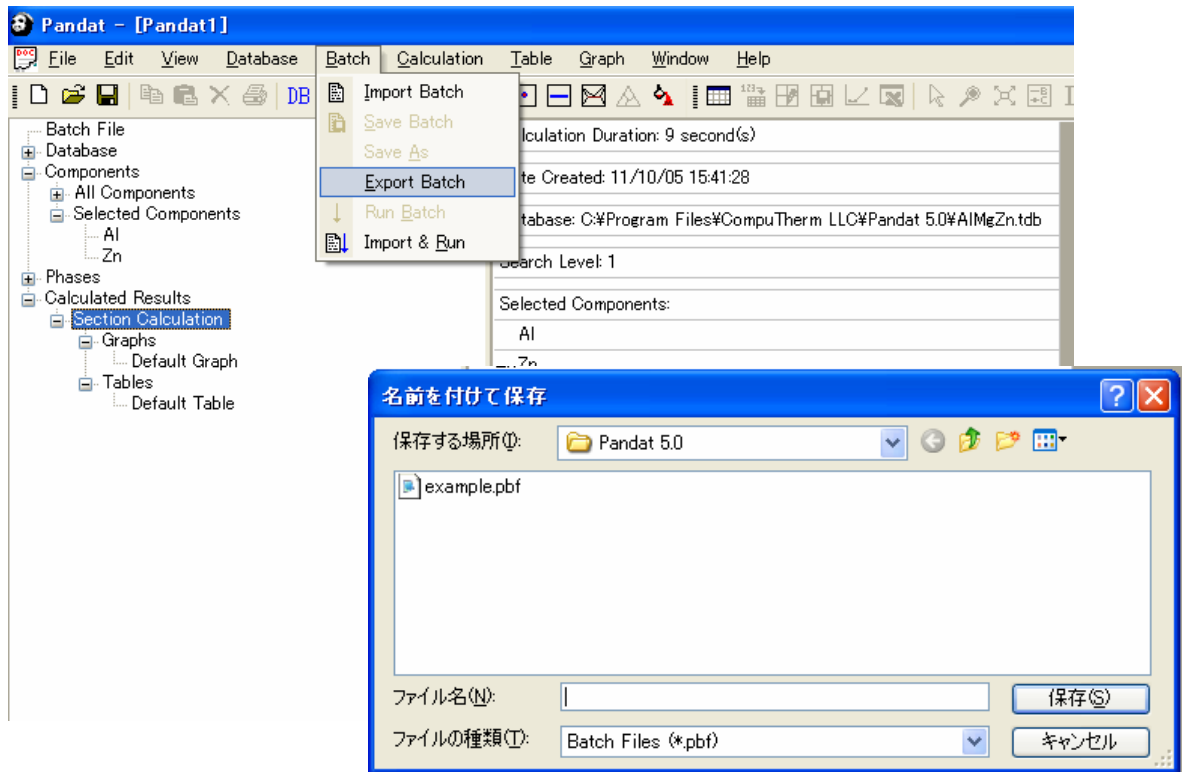


図 2-1 計算処理後におけるバッチ・ファイルの保存 (export)

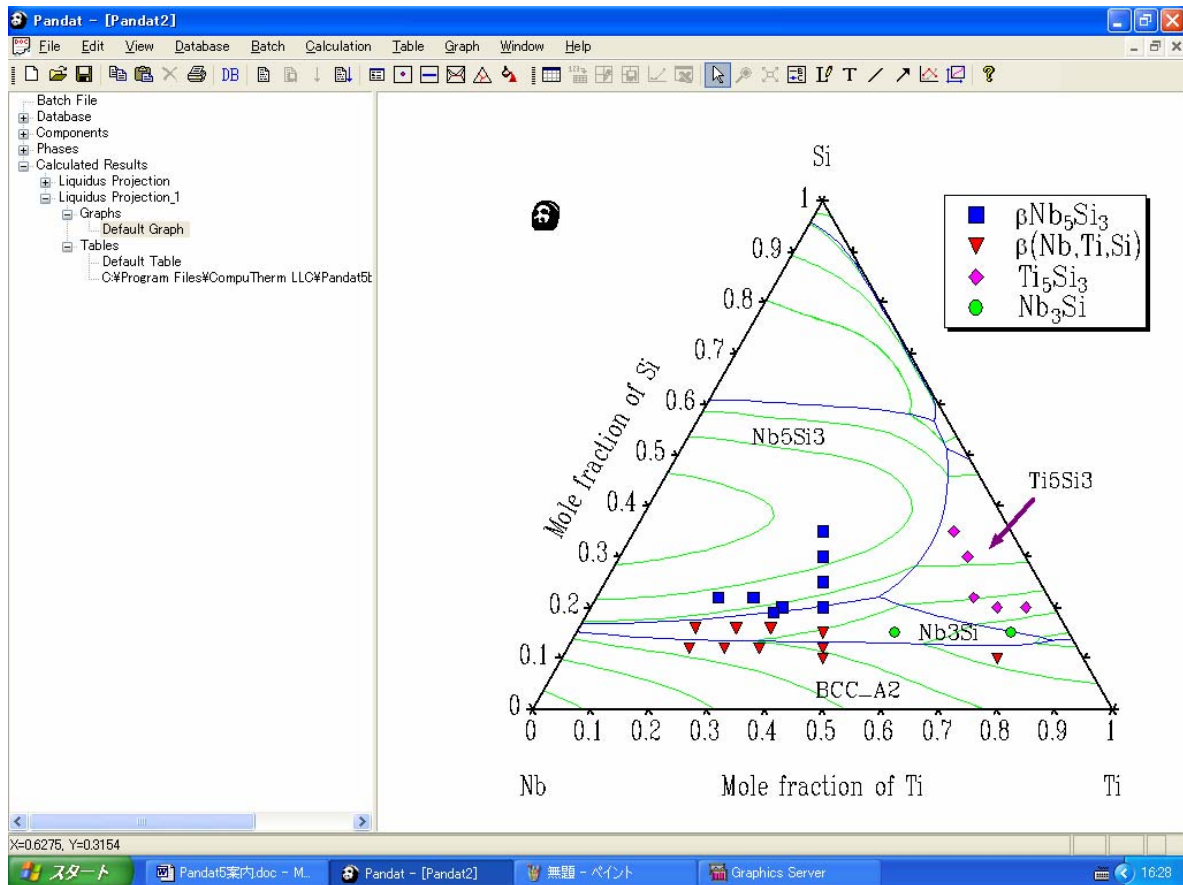


図 3-1 Nb-Si-Ti 3元系液相面図と実験値との比較例

1. New features of Pandat 5.0 (October, 2005)

A number of important new features and upgrades are available in this version of Pandat. Specifically, version 5.0 sees the release of enhanced tools in manipulating Batch files, Tables and Graphs. These new tools enable a range of exciting new functionalities. The highlights are:

Batch files – A batch file is automatically created for each calculation. Batch files may be edited in the Pandat interface and saved as a text file on disk. This allows the user to easily create and modify a batch file without being concerned about memorizing the syntax in the batch file.

Tables – Pandat 5.0 adds several new Table operations. Users can edit, save, add, delete, import and export a Table as needed. Users can also create a graph from the columns in the Tables. With these tools, the merging of graphs and comparison with experimental data can be realized.

Graphs – The graphs generated from Pandat 5.0 are of improved quality and are suitable for publication. The Graph module in Pandat 5.0 is also much more versatile and can produce customized graphs by, for example, adding legends, superscripts, subscripts, symbols, changing the color and type of line or marker, drawing a line or an arrow on a graph.

Other improvements include being able to **save and open a Pandat workspace**, being able to **calculate activities**, **weight fractions of a phase**, etc.