

多元系平衡計算エンジン・モジュール

製品名： **PanEngine**

特長： ユーザプログラム（C言語）に PanEngine を組み込むことにより、
ユーザプログラムが熱力学対応ソフトウェアになります。

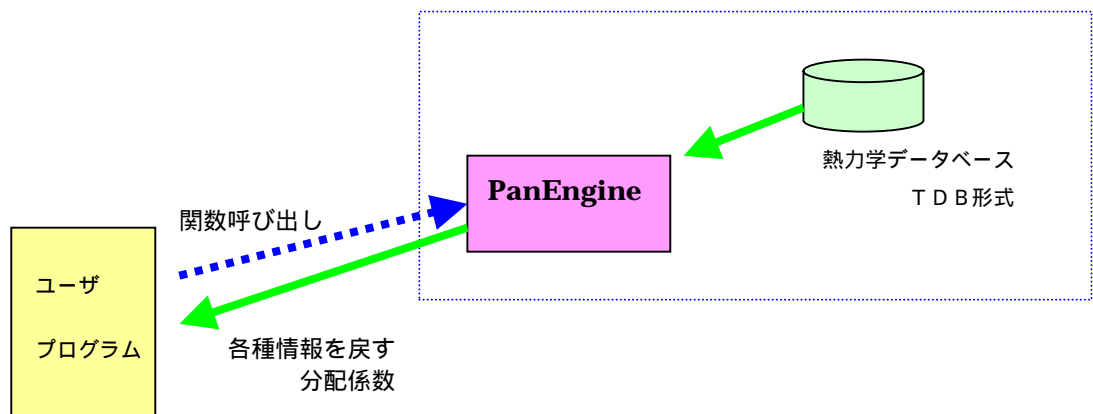
PanEngine は多元系の計算においてすぐれた能力を発揮します。従来熱力学ソフトウェアでは計算開始点が重要なノウハウでした。しかし PanEngine は安定状態を正確に求めるため、計算開始点を必要としません。また、2相分離が生じる系においても、いかなる準備コマンドをも必要としません。

PanEngine は熱力学データベースを読み込みながら、指定された条件下での平衡計算を行います。通常、この条件とは温度と合金組成値です。勿論、計算相を取捨選択でき、準安定相を計算することも出来ます。

PanEngine は数多くの関数を用意していますが、「計算条件のセット」「計算実行」関数を用いれば平衡計算を始められます。

計算後返される情報は、平衡相の数、各平衡相の名前、各平衡相の分率、各平衡相を構成する元素比率、エンタルピー値などです。したがって、ユーザプログラムから関数を呼び出すことにより、熱力学データに準拠した結果を得られます。たとえば

独自の凝固モデルを構築される際に PanEngine は強力なツールとなります。



開発元： 米国 CompuTherm 社



販売元

株式会社 材料設計技術研究所
材料科学研究部
TEL. 03-3660-5080
FAX. 03-3660-5330

〒103-0011

東京都中央区日本橋大伝馬町2番5号
電子メール info@materials-design.co.jp
http://www.materials-design.co.jp

PanEngine

PanEngine is a Dynamically Linked Library (DLL) of functions for calculating multicomponent phase equilibria and other related properties. Users can create custom software using the powerful PanEngine to meet their specific needs.

$$\text{PanEngine} + \text{User Code} = \text{Custom Software}$$

Custom Software Applications

PanEngine can be used by users to create custom software applications such as:

Microscopic solidification simulations

Microstructure: e.g. secondary dendrite arm spacing

Microsegregation: e.g. concentration profile within dendrite arm

Macroscopic solidification simulations

Casting simulations: PanEngine provides enthalpy and fraction-solid as a function of temperature

Heat treatment simulations

Diffusion simulations

PanEngine Advantage: Correct equilibrium with no guessing!

PanEngine finds the correct, stable phase equilibrium without requiring the user to guess initial values. This is especially important because it is very difficult for the user to enter initial values and verify results when the calculations are run thousands of times by a custom software program.

PanEngine Functions

Some of PanEngine's easy to use functions are listed below:

Read database

Set components

Suspend/restore a phase

Set calculation conditions

Calculate stable equilibrium

Find liquidus surface (melting point)

Calculate liquidus slope

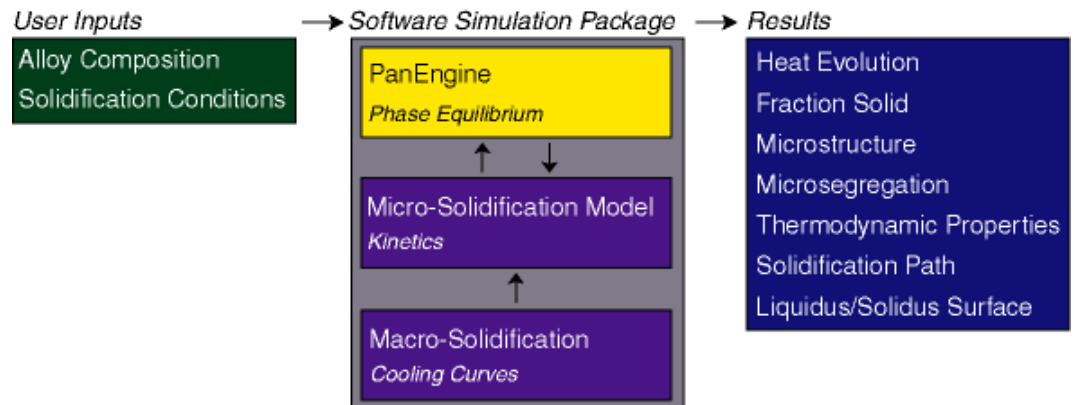
Calculate liquidus k (partition coefficient)

Calculate thermodynamic factor

Simulate solidification using Scheil or Lever model

Example: Simulating microstructure and microsegregation in aluminum 7050 alloy

PanEngine has been used to simulate the microstructure and microsegregation for alloys, such as aluminum alloy 7050. A schematic for PanEngine with macro- and micro-solidification simulations is shown below:



The figure below shows the Zn concentration profile in the primary dendrites as a function of the fraction of solid for aluminum alloy 7050 solidified with a growth rate of 0.05mm/s and a temperature gradient of 50 K/cm at the liquid/solid interface. There is good agreement between the experimental data and the PanEngine calculations.

