

材料組織・特性計算システム仕様

本仕様は、Phase-field 法を基礎とした「材料組織計算システム」、ならびに材料組織形態イメージを入力データとした「材料特性計算システム」の基本設計案である。この2つのシステムはそれぞれ独立して活用できるので、別々に作成することが望ましいと考える。ただし、材料組織計算システムの出力データが材料特性計算システムの入力データに使用されるので、データ形式は一致させる必要がある。また材料特性計算システムの入力データには、実験で得られたイメージを直接使用できるようにしておくことも重要である（単独使用の場合を考慮して）。

1. 材料組織計算システム

本システムは、以下の3つの部分に分類される。通常のソフトウェアに対応して、プリプロセス、ソルバー、およびポストプロセスである。

1-1 プリプロセス

計算に使用する各種のパラメータ、計算の初期状態設定、出力条件や形式設定などを設定する。GUIとして、各種のパラメータを表形式に表現し、各値を入力・修正・保存できる機能が必要である。

1-2 ソルバー

組織形成過程の計算ソルバーである。これは上記のプリプロセスにて設定された値を読み、実際の組織形成の計算を行う。リアルタイム可視化が可能であることが望ましい。ただし、Phase-field法の統一的ソルバー開発は目指さない。現象別に、全くソルバーの中身が変化するためである。

1-3 ポストプロセス

計算組織の可視化およびアニメーション、断面プロファイルの表示、各種統計量（組織全体の各種の積分量など）の計算を行う。なお計算データの保存形式は、他の可視化ソフト(AVS など)やグラフソフト(Excel や Origin など)の形式に変換できるようにしておくが良い。

2. 材料特性計算システム

本システムも、プリプロセス、ソルバー、およびポストプロセスに分類される。

2-1 プリプロセス

計算に使用する各種のパラメータ、計算の初期状態設定、出力条件や形式設定などを設定する。GUIとして、各種のパラメータを表形式に表現し、各値を入力・修正・保存できる機能が必要である。

2-2 ソルバー

材料特性の計算ソルバーである。これは上記のプリプロセスにて設定された値と入力組織イメージ読み、特性計算を行う。これもリアルタイム可視化が可能であることが望ましい。

2-3 ポストプロセス

特性が局所的な組織形態と対応する場合には、特性の可視化・アニメーションを行う。また各種物性値の計算を行う。なおこの計算データの保存形式も、他の可視化ソフト(AVS など)やグラフソフト(Excel や Origin など)の形式に変換できるようにしておくが良い。

Fe-Mn-C および Fe-Mn-Si-C の γ 多結晶における α 相の析出組織形成と応力-歪曲線 (Secant 法) の計算

1. $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の組織形成計算システム GUI 全体

基礎となる GUI として、

1-0 スタートメニュー画面

1-1 各種条件設定・編集画面

1-2 組織形態を表現する秩序変数場の可視化画面

1-3 秩序変数プロファイル断面のプロット画面

1-4 組織全体に対する各種積分値の時間変化プロット画面

1-5 その他

から構成され、またソフトウェア内部の主要機能として、組織形成の計算部を有する。

1-1 各種条件設定・編集機能

入力データ一覧

(1) 物質定数関連

- ・合金組成
- ・ $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の化学的駆動力算出に必要なパラメータ (平衡状態図のデータ)

$$\Delta S, T_R, C_{\gamma}^0, m_{\gamma\alpha}$$

- ・分配係数: k
- ・ α/γ 界面エネルギー密度: σ
- ・拡散係数 (頻度因子と活性化エネルギー): D_X^C
- ・界面移動に関するキネティック定数: μ
- ・

(2) プロセス条件

- ・初期温度
- ・冷却速度
- ・ α 相の核密度 (粒界)
- ・計算領域
- ・初期 γ 多結晶組織形態 (初期入力データとして設定)
- ・

(3) 数値計算関連

- ・空間分割数
- ・時間刻み
- ・データ出力時間間隔
- ・計算終了時間

以上のデータを GUI にて、入力・修正・保存・読込が可能であることが望ましい。

1-2 組織形態を表現する秩序変数場の可視化画面

- ・組織内の局所的な RGB の値を、秩序変数の関数として定義できるようにすると良い。
- ・時間ステップを設定して、計算結果の組織を可視化
- ・アニメーション機能
- ・個々の図には、長さを表すスケール、および秩序変数の値を表すカラースケールが必要

- ・可視化画像の保存機能
- ・可視化している画像に関する部分だけの数値データを抜き出して保存する機能

1-3 秩序変数プロファイル断面のプロット画面

- ・可視化画面にて、2点を選択して、その2点を結ぶ直線上の断面 秩序変数プロファイル表示
- ・グラフであるので、縦軸と横軸の各種設定
- ・アニメーション機能
- ・プロファイルデータの保存機能（他のグラフソフトでグラフ化する場合に使用）

1-4 組織全体に対する各種積分値の時間変化プロット画面

・例えば、 α 相の体積分率の時間変化をプロット（冷却速度が一定の場合、時間をそのまま温度に変換することにより、温度に対する α 相の体積分率の変化をプロットできる）

1-5 その他

- ・ヘルプ機能（各画面における利用方法の説明等に関するヘルプ機能）
- ・システムの使用説明書（マニュアル）

2. 応力-歪曲線（Secant 法）の計算

基礎となる GUI として、

2-0 スタートメニュー画面

2-1 各種条件設定・編集画面

2-2 入力組織形態を表現する秩序変数場の可視化画面

2-3 応力-歪曲線のプロット画面

2-4 応力-歪曲線の代表値、および Swift 式等へのフィッティングの際の各種定数の算出

2-5 その他

から構成され、またソフトウェア内部の主要機能として、力学特性の計算部を有する。

2-1 各種条件設定・編集機能

入力データ一覧

(1) 物質定数関連

- ・それぞれの構成相の応力-歪曲線の関数データ
（日本鉄鋼協会の研究会資料をデータベース化すると良い）
- ・それぞれの構成相のヤング率とポアソン比

(2) プロセス条件

- ・組織イメージ（入力データ）
- ・母相をどちらの相にするかの設定
- ・歪の最大値
- ・歪の増分

以上のデータを GUI にて、入力・修正・保存・読込が可能であることが望ましい。

2-2 入力組織形態を表現する秩序変数場の可視化画面

この場合、単純に可視化のみであるので、先の組織形成計算システムの可視化機能に準じる。

2-3 応力-歪曲線のプロット画面

- ・プロファイルデータの保存機能

- ・グラフであるので、縦軸と横軸の各種設定
- ・プロファイルデータの保存機能（他のグラフソフトでグラフ化する場合に使用）

2-4 応力-歪曲線の代表値、および Swift 式等へのフィッティングの際の各種定数の算出

- ・この機能は、上記 2-3 のサブ機能としても良い

2-5 その他

- ・ヘルプ機能（各画面における利用方法の説明等に関するヘルプ機能）
- ・システムの使用説明書（マニュアル）

3. 留意事項

- ・通常の PC にて実行可能（現場で使えるもの）であること。
- ・他の可視化ソフトおよびグラフソフトとの、データの互換性