

Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F

TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100

URL: <http://www.aasri.jp/>

[商品シミュレータ名]

AA&S Phase Field 法 計算ソフト

(ナノ材料設計を支援するシミュレーションソフト)

[商品紹介とご提案]

温度・圧力・不純物含有量などを創製プロセスにおいてコントロールし、優れた特性を持つ材料を製造することが材料開発の鍵となります。とくに、材料物性の決定には、構成物質間のナノスケールにおける幾何学的構造が重要です。

Phase-Field 法は、その様なナノスケールにおける構成物質間の相界面ダイナミクスを計算します。この計算を支える理論的枠組みは、系の全自由エネルギーをベースに界面の動力学を表現する極めて一般的なものであり、そのため、その適応範囲は材料組織学全般の“**界面の移動を伴った**”多種多様な組織形成にわたります。例えば、 dendrite 成長・拡散相分解・各種ドメイン成長・クラックの進展・固相結晶成長・再結晶・・・などの現象をカバーしており、新材料・新素材開発において非常に有力な手段となります。

弊社ソフトは、多元多相計算ができる極めて汎用性が高いものであり、**お客様の取り扱う現象にあわせて解析ソルバーの再設計が可能です。**また、創製プロセスを忠実に実現するための外部パラメータなどの変化・組織形成過程における各種物性の評価などの付加についても、ご相談に応じさせていただきます。

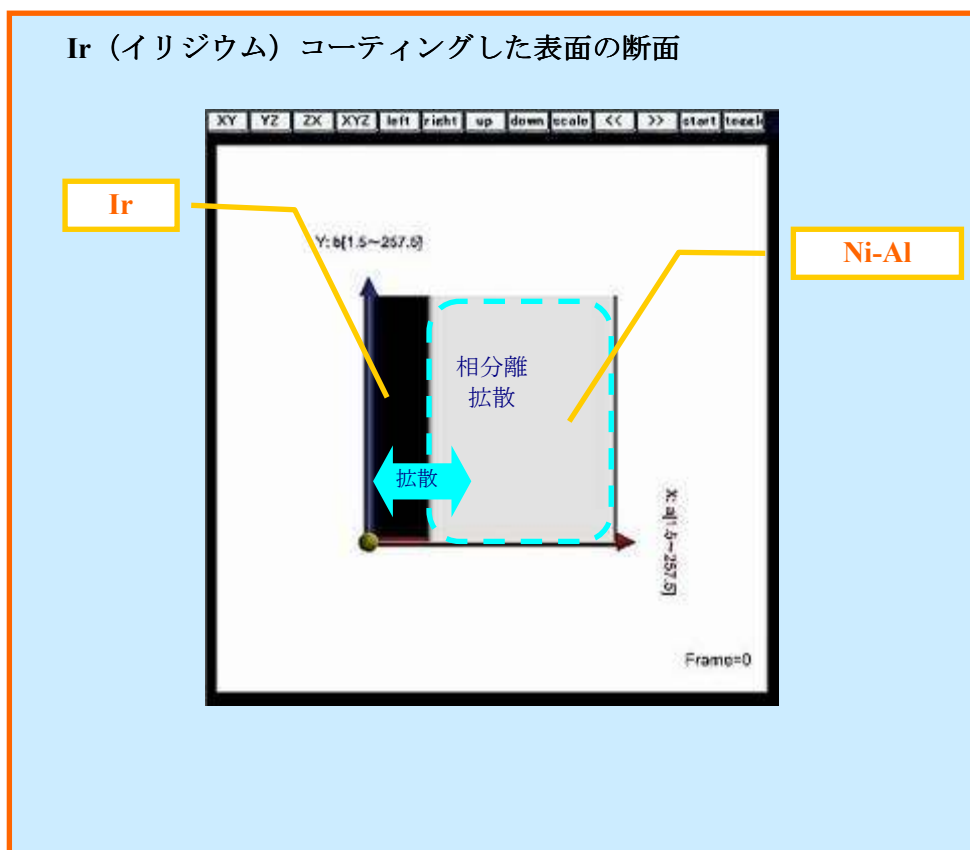


[シミュレーション結果]

Ni-Al 合金におけるシミュレーション例

① Ni-Al合金 (γ 相) をIr被膜して加熱 [$T = 1273.15$ K]。合金とIrが相互に拡散、合金内部で γ' 相が析出し、相分離する様子を可視化。
色の変化している部分が析出した γ' 相。 (弾性歪場計算なし)

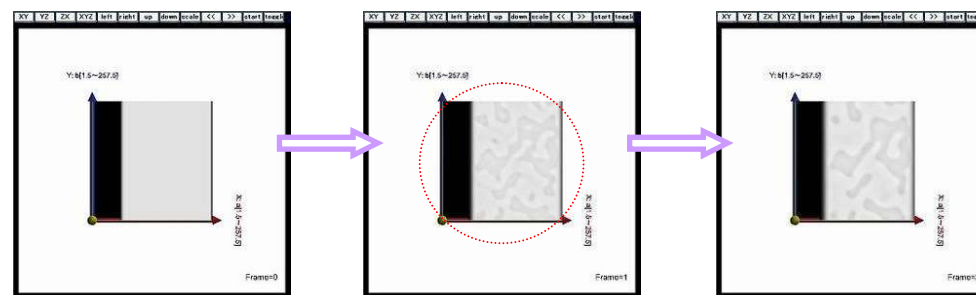
右図  内



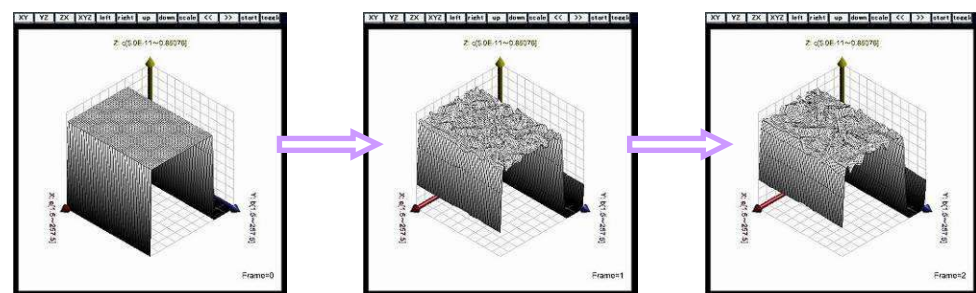
弊社HP で、GUI を使った詳細なデモをご覧ください。

(下図はスナップショットを一部抜粋)

また、マウス操作で、図を自在に回転、表示形式の変更などが可能なので、様々な角度からデータを観察できます。



下図 (↓) は、上図 (↑) の各スナップショットにおけるNiのモル分率をZ 軸にとって3次元プロットしたグラフ。



[→http://www.aasri.jp/pub/demo/demo/phase_field/no1/phaseMonitor.html](http://www.aasri.jp/pub/demo/demo/phase_field/no1/phaseMonitor.html)

【ご注意】 GUI の実行には、java3D Runtime が必要です。

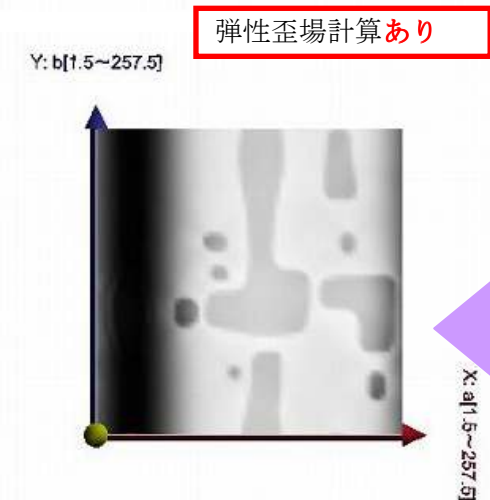
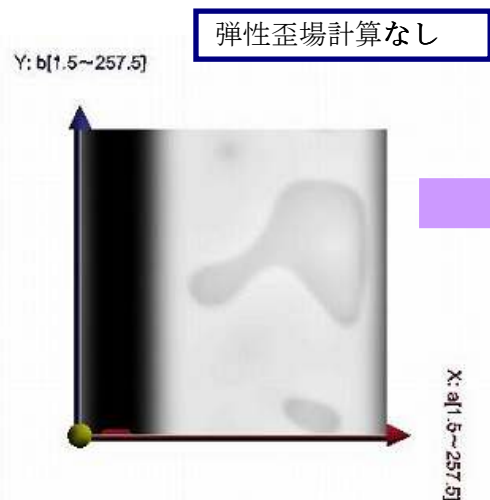
下記 URL よりダウンロードしてください。

[→http://java.sun.com/products/java-media/3D/download.html](http://java.sun.com/products/java-media/3D/download.html)

② (弾性歪場計算をした場合) の結果

→http://www.aasri.jp/pub/demo/demo/phase_field/demos/concentration1_data256.html

→http://www.aasri.jp/pub/demo/demo/phase_field/demos/concentration2_data256.html



【 弊社ソフトの特徴 】

- ① 弾性歪エネルギーを考慮することで、結晶構造による異方性を情報として取り込んだシミュレーションを実行できる。(左図参照)
- ② 多相多元系を扱える。
- ③ 3次元計算対応。
- ④ 外場の付加なども可能。

[ソフトの動作環境など]

[言語]

本体 (数値計算部分) : Fortran90

GUI (データ可視化部分) : java

[入力に必要なデータ]

- ・ 各相の自由エネルギー (熱力学データベースから)
- ・ 界面エネルギー密度 (実験結果などから)
- ・ 弾性率
- ・ 界面幅
- ・ 拡散係数

[処理状況]

- ① ソースコードを Fortran コンパイラを使って、コンパイル。(Fortran コンパイラが必要)
- ② 各種パラメータをテキストファイルに入力
- ③ 数値計算を実行、結果をファイルに出力

[出力データ]

界面組織の形態変化 (構成原子のモル分率) を時系列で数値データファイルとして、出力します。その他計測可能な物理量は、お客様のニーズに合わせて、出力データとして付加することも可能です。また、出力データの配列などもご指定いただけます。出力データは GUI で可視化できます。