

ライブラリー開発 (1)

—Thermo-Calc の使用法—

長谷部 光弘¹

1 はじめに

Thermo-Calc はスウェーデン王立工科大学 (KTH) 物理冶金学科 Hillert 教授の下で Dr.Jansson と Dr.Sundman を中心としたグループが開発したもので、合金状態図をはじめとした多くの熱力学的計算が行える。この度、九州工業大学情報科学センターの研究用ワークステーション (gogyoh) に移植しライブラリーとして登録した。Thermo-Calc(以下 TC と略す) はいくつかのモジュールから成り、いろいろな計算や作図などを会話的に行う。まず概要を順を追って説明すると以下の通りである。

- SYSTEM_UTILITIES MODULE

Thermo-Calc(TC) を起動したときの最初のモジュール。ここでは普通何もしなくてよい。主に TC 全体にわたる設定を行う。

- DATABASE_RETRIEVAL MODULE

相平衡を計算しようとする系を定義し、計算に必要な熱力学的パラメータをデータベースから取り込む。利用者が独自のデータベースを作成することもできる。

- GIBBS_ENERGY_SYSTEM MODULE

DATABASE モジュールで取り込んだパラメータから系の自由エネルギー関数を組み立てる。固溶体の熱力学的モデルは基本的には副格子モデルを用いている。ここではパラメータを表示したり、追加や修正変更も可能である。

- POLY_3 MODULE

設定した自由エネルギー関数を用いて各相間の平衡計算を行い、その結果を表示する。状態図の計算はここで行うが、いろいろな熱力学的関数の計算も行わせることができる。

- POST MODULE

このモジュールは POLY_3 のサブモジュールで計算結果をディスプレイ上にグラフィック表示したり、プロッター用の作図データとしてファイルに出力する。

¹工学部物質工学科材料工学教室

これらの操作を計算機と会話形式で行う。また、これら以外の機能として、

- TABULATION_REACTION MODULE

データベース上の熱力学的数値を表として出力する作表機能。

- PARROT(ASSESSMENT) MODULE

実験データから熱力学的パラメータを決める自由エネルギー関数評価機能。ただし、別プログラムとなっている。

などもある。

TC の機能は極めて豊富でその総てを記述することはできないが、TC ではオンラインヘルプが充実しているので、そちらを利用して多くの機能を学んでほしい。ここでは状態図の計算にのみの絞って順に説明する。

2 TC の起動と終了

Thermo-Calc(TC) の起動はコマンド入力レベルで単に

```
gogyoh% tc
```

とすればよい。TC が起動するとまず SYSTEM_UTILITIES モジュールとなる。TC では各モジュールごとに応じたプロンプトが表示される。終了は TC のモジュールプロンプトのレベルで `exit` と入力する。

```
SYS: exit
```

3 計算の流れ

一般的な計算の流れを示すと次のようになる。

SYSTEM_UTILITIES MODULE(モジュールの選択)

↓

DATABASE_RETRIEVAL MODULE(合金系の定義, パラメータの取り込み)

↓

GIBBS_ENERGY_SYSTEM MODULE(熱力学的パラメータの確認, 追加変更)

↓

POLY MODULE(温度, 組成など計算条件の設定, 平衡計算, 結果の出力)

↓

POST MODULE(結果のグラフ化)

4 Thermo-Calc のコマンド

TC は各モジュールごとに多くのコマンドを持っている。またモジュールごとにプロンプトが異なっており (例 SYSTEM_UTILITIES → SYS: , GIBBS_ENERGY_SYSTEM → GES:), これにより現在どのモジュールにいるかすぐに分かる。なお、総てのモジュールに、直前のモジュールへ戻るためのコマンドとして BACK がある。

UNIX ではシステムのコマンドやファイル名では英字の大文字・小文字の区別をするのに対して、TC 内のコマンドやパラメータはファイル名を除いて大文字・小文字の区別はされない。ただし、一部のモジュール (DATABASE モジュール) では、モジュールプロンプトに続く入力行は総て大文字に変換されるので注意を要する。

4.1 コマンドの省略形

UNIX などのコマンドは、できるだけ少ないキー入力での考えから、普通ある命令を表す言葉の頭文字をとるなど省略形を用いている。

例) c hange d irectory → cd

これに対して TC のコマンドは、命令をできるだけそのまま用いているので意味が分かり易いのが特徴である。

例) LIST_VARIABLE_STATUS

反面各コマンドは長く入力が煩わしくなる。このため TC では省略形による入力もできるようになっている。省略形にするための規則は各モジュール内で、他のコマンドと区別がつけばよい。例えば、LIST_VARIABLE_STATUS の場合ほかに L から始まるコマンドが無ければ L だけに省略できる。また、省略は L-V-S のように単語単位で行える。なお、このように単語の区切りには _ (アンダスコア) の代わりに - (ハイフン) を用いてもよい。以後の説明にもこの省略形を用いる²。

ここで述べた省略形の規則はコマンド以外の種々の質問に対して入力するパラメータにも適用される。

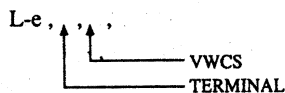
TC の質問行の最後に // で囲まれたものはデフォルトの答を示している。従って、そのままよいときには単に [RETURN](改行) を入力すればよい。ただし、前回の入力が次のデフォルトになる質問もある。また、質問のあるコマンドの多くは、続く質問に対する応答をコマンドと同じ行に空白あるいは、(コンマ) で区切って入力してよい。

²省略の規則は各モジュール内でのことである。従って、例えばほとんどのモジュールにある GOTO_MODULE コマンドは、あるモジュールでは g の 1 文字でよいが、別のモジュールでは go の 2 文字でなければならないというようなことがある。

注) デフォルトの応答には、区切り記号としてコンマを使う。

例) L-e TERMINAL VWCS

TERMINAL,VWCSがデフォルトの場合



4.2 先行入力

TC ではコマンドを処理中に、その終了を待たずに次のコマンドやパラメータを先行入力できる。前のコマンドによるメッセージ中に先行入力コマンドが混在した形で表示されることがあるが、実行に影響はない。

4.3 ヘルプコマンド

TC のコマンドは非常に多いので、総てのコマンドを覚えることは難しい。しかし、よく使われるコマンドは大体限られるので、慣れれば不自由はない。また、各モジュールプロンプトに対して ? を入力すれば、そのモジュールで使用可能なコマンドのリストを表示させることができる。? はコマンド入力レベルだけでなく、大抵のサブコマンドや質問に対して何を入力するか分からないときにも用いることができる。

HELP コマンドを用いれば、さらに詳しい説明を得ることができる。以下でも状態図計算ではあまり使わないコマンドやデフォルトで十分なものは説明を省略しているので ? や HELP を活用してもらいたい。

4.4 その他

TC ではコマンド入力レベル(各モジュールプロンプトの状態)で現在使用しているシステム (UNIX) のコマンドを実行できる。そのためには各コマンドの頭に @ (アットマーク) を付けて入力する。

例) ls → @ls

また既入力コマンドやデータを再入力するのに便利な UNIX システムのヒストリーと似た機能³を持っている。

³ただし、!! および ! は UNIX システムとは働きが違うので注意すること。

- !! 既入力コマンド / データのヒストリー表示
- ! 直前のコマンド / データを再入力
- ! n n 番目のコマンド / データを再入力
- ! xx xx で始まるコマンド / データのうち最も新しいものを再入力.
ここで xx は 2 文字以上を指定する.

5 SYSTEM_UTILITIES MODULE

TC を起動したときの最初のモジュールで、プロンプトは SYS: である。ここでは普通何もしなくてよく、すぐに DATABASE_RETRIEVAL モジュールへ行ってよい。

```
SYS: go      [GOTO_MODULE]          (注 [] 内は非省略形, 以下同)
MODULE-NAME: da      [DATABASE_RETRIEVAL]
短縮形 SYS: go da
```

この GOTO_MODULE のように、質問をしてくるタイプのコマンドでは、短縮形として例示したように、それに対する応答をコマンドと同じ行に空白あるいは、(コンマ) で区切って入力してしまってもよい。

このモジュールで用いるコマンドとして1つ挙げるならば SET_LOG_FILE である。

```
SYS: s-L-f   [SET_LOG_FILE]
FILE NAME: ファイル名
短縮形 SYS: s-L-f   ファイル名
```

ファイル名の拡張子を省略したときには、自動的に .LOG(大文字) が付けられる。以後コマンドやパラメータなど入力した総てが、このファイルに保存される。

6 DATABASE_RETRIEVAL MODULE

プロンプトは TDB_nnn: である。ここで、nnn は現在選択されているデータベースの名前であり、例えば FE データベースのときにはプロンプトは TDB_FE: となる。

6.1 DATABASE の選択

利用できるデータベースには次のものがある。

FE = Fe-base database, KTH
 KP = Larry Kaufman binary systems
 PURE = SGTE unary database
 GEO = Saxena geochemical database
 SLAG = Liquid Fe and slag with Al₂O₃-CaO-FeO-Fe₂O₃-MgO-MnO-SiO₂
 ION = KTH oxides systems with liquids
 USER = User defined Database

これらの種類やその内容は、変更 / 更新されることがある。最後の USER は利用者が作成したデータベースを用いたいときのものである。

現在のデータベースを別なものに切り替えるには

```
TDB_FE: sw      [SWITCH_DATABASE]
DATABASE NAME /FE/: kp
短縮形 TDB_FE: sw kp
```

2行目の質問で / / で囲まれたものはデフォルトの答を示している。従ってそのままでもよいときには、単に [RETURN](改行) を入力するだけでよい。

6.2 系の定義

まず計算を行う系を定義する。これには DEFINE_SYSTEM または DEFINE_ELEMENT コマンドを用いる。

```
TDB_FE: d-sys   [DEFINE_SYSTEM]
SPECIES: fe c   [Fe C] ← 構成成分の元素記号の並び
短縮形 TDB_FE: d-sys fe c
```

上の例では Fe-C 2元系を定義している。また、一般の合金系では SPECIES(化学種) は ELEMENT(元素) と同じと考えてよい。

6.3 相の選択

系を定義した段階では、TC は系に関連するデータベース内の総ての相を計算の対象とする。例えば Fe-C 系に直接には関係がない Fe₄N 相をも対象にしてしまう。従って、あらかじめ不必要な相は除いて必要な相のみを残すのがよい。現在どのような相が対象となっているかは LIST_SYSTEM コマンドで見ることができる。

```
TDB_FE: L-sys   [LIST_SYSTEM]
ELEMENTS, SPECIES, PHASES OR CONSTITUENTS: /PHASES/:
短縮形 TDB_FE: L-sys p
```

相の選択の仕方には3つの方法がある。

◇ 方法1 ... 不要な相のみを除く

```
TDB_FE:rej      [REJECT]
ELEMENTS, SPECIES, PHASES, CONSTITUENT OR SYSTEM: /PHASES/:
PHASES: ga liq fe4n      [GAS LIQUID FE4N] ← 相の並び
      短縮形 TDB_FE: rej p ga liq fe4n
```

◇ 方法2 ... 総ての相ごとに REJECT するかどうか対話式に選択する

```
TDB_FE: rej p /?      [REJECT PHASE /?]
To be REJECTED GAS No/Quit/* /Yes/:
```

: - 総ての相について問い合わせがある -

REJECT する場合は [RETURN](y [Yes]), 残す場合は n [No] で答える。q [Quit] は、中断(残りは REJECT しない)。* は残りを総て REJECT。

参) REJ P /? の / は次に続く文字列が特殊なキーワードであること (? や次の例にある all は相の名前ではないこと) を示す記号である。これは例のようにコマンド (REJECT や RESTORE) と同じ行でのみ用いられる。

◇ 方法3 ... 一旦総ての相を除いてから、必要な相を戻す。

```
TDB_FE: rej p /all      [REJECT PHASE /ALL]
```

: - REJECT された相のリストが表示される -

```
TDB_FE: res      [RESTORE]
ELEMENTS, SPECIES, PHASES, CONSTITUENT OR SYSTEM: /PHASES/:
PHASES: aus fer cem      [AUSTENITE FERRITE CEMENTITE] ← 相の並び
      短縮形 TDB_FE: res p aus fer cem
```

系についての情報は LIST_SYST EM コマンドで確かめられる。

```
TDB_FE: L-sys      [LIST_SYSTEM]
```

6.4 パラメータの取り込み

計算する系や考慮する相が確定したら、次にデータベースより計算に必要なパラメータを取り込む。

```
TDB_FE: get      [GET_DATA]
```

-OK- が表示されればデータの取り込みは完了である。なお、通常はあるコマンド処理中に次のコマンド等を先行入力できるが、DATABASE モジュールの GET_DATA コマンド処理中は先行入力できない。

もし、エラーメッセージが表示されたときは、その系やあるいはある相についての情報が不足している場合であるので注意が必要である。パラメータがデータベースにない場合はそれはゼロとして計算されるが、生成自由エネルギーに関連する場合にはその後の計算は続行不能な場合がある。これら不足しているパラメータについてはその情報が MISSING.PAR(大文字) というファイルに記録される。

参考) MISSING.PAR ファイルは、UNIX では cat コマンドを用いて

```
@cat MISSING.PAR
```

とすれば TC 内からも参照できる。ただし、DATABASE モジュールではモジュールプロンプトに続く入力は総て大文字化 (cat → CAT) されるので cat コマンドを使えない。別モジュールに移動して実行するか、WINDOW が使えるときには別ウィンドウでエディタなどを用いて参照することもできる。

この MISSING.PAR ファイルは不足のパラメータが無くても作成され、その 1 行目は次のタイトルが書かれている。

```
LIST OF UNARY AND BINARY PARAMETERS MISSING IN THE DATASET
```

不足のパラメータがある場合にはこのタイトルの後に記録される。

7 GIBBS_ENERGY_SYSTEM MODULE その 1

モジュールプロンプトは GES: である。

```
TDB_FE: go g      [GOTO_MODULE GIBBS_ENERGY_SYSTEM]
```

GIBBS_ENERGY_SYSTEM(GES) モジュールは TC の流れの中では、DATABASE と POLY の中間に位置するモジュールである。このモジュールでは、系の情報の追加、変更、削除などを行うことができ、ある種の計算においては非常に重要である。しかし、これらの使用法は別の章であらためて述べることにし、ここではとりあえず DATABASE モジュールで取り込んだパラメータを

確認したり、セーブする方法を説明する。従って、以下に述べることは状態図計算に必ずしも必要なことではないので、飛ばしてPOLY モジュールに進んでもよい。

パラメータを確認するには次のようにする。

```
GES: L-d      [LIST_DATA]
OUTPUT FILE: ファイル名
OPTIONS?:
    短縮形 GES: L-d ファイル名, ,
```

ファイル名を省略([RETURN]のみ)したときは画面に表示される。オプションは出力の形式に関するものであるが、省略(デフォルト)で普通は十分である。ただし、短縮形でファイル名やオプションなどを省略するには、入力パラメータの区切り記号として、(コンマ)を用いる。

これらパラメータなど系の現在の情報を後のためにファイルにセーブしておくには

```
GES: sa      [SAVE_GES_WORKSPACE]
WORKSPACE FILE: ファイル名
    短縮形 TDB_FE: sa ファイル名
```

ファイル名の拡張子を省略したときには、.GES5(大文字)が自動的に付けられる。

こうして作成したファイルを後日の計算で利用するには

```
SYS: go g    [GOTO_MODULE GIBBS_ENERGY_SYSTEM]
```

— DATABASE モジュールを略して GES へ行ってよい —

```
GES: r-g     [READ_GES_WORKSPACE]
WORKSPACE FILE: ファイル名
    短縮形 GES: r-g ファイル名
```

ファイル名の拡張子を省略したときには .GES5 とみなされる。以後は WORKSPACE をファイルにセーブした直前の状態になる。このように GES WORKSPACE をファイルにしておくことは、同じ合金系について何度も計算する場合にいちいち DATABASE モジュールでの操作を行わなくてよいので有用である。

8 POLY_3 MODULE

POLY_3 モジュールは多相間の平衡計算を行う TC の中でもっとも重要なモジュールで多様な熱力学的計算が行えるように設計されている。ここでは POLY_3 の機能のうち状態図計算に必要な事項について説明する。

プロンプトは POLY_3: である.

TDB_FE: go p-3 [GOTO_MODULE POLY_3]

POLY_3 における状態図計算の手順を概説すると

条件の設定	→	コマンド	SET_CONDITION	温度、組成などの設定
平衡計算	→	コマンド	COMPUTE_EQUILIBRIUM	条件における相平衡の計算
軸の設定	→	コマンド	SET_AXIS_VARIABLE	状態図としての縦・横軸の設定
状態図の計算	→	コマンド	MAP	
状態図の描画	→	コマンド	POST	

のようになる.

TC ではある相が2相分離を起こすかどうかを自動的に調べることをしない. 従って, 一つの相が2つあるいはそれ以上に相分離する可能性のある場合には, 利用者が積極的にそのことを TC に指示しなければならない. この方法については 10.2.1 で説明し, ここでは相分離 (Miscibility Gap) については考えない.

8.1 条件の設定

POLY_3 で状態図を計算するためには, 一つ以上の平衡値を計算しておかなければならない. そのためまず条件設定を行う. つまり, 温度 T, 圧力 P, 全原子数 N および組成などである.

POLY_3: s-c [SET_CONDITION]
 State variable expression: p=101325 ← Pressure(1気圧)
 短縮形 POLY_3: s-c p=101325

用いる単位は, Tは絶対温度 K, Pは Pa, Nは mole である. これらの条件は一行にいっしょに並べて入力してよい.

POLY_3: s-c t=1300 p=101325 n=1 w(c)=0.02

状態図計算でもっともよく使う濃度には, 単位として, 質量分率 と モル分率 があり, それぞれ次のように記述する.

w (成分記号) ← mass fraction 例) w (c r)
 x (成分記号) ← mole fraction 例) x (s i o 2)

なお, State variable expression: に対して入力できるものには, 上記のほか活量などのいわゆる状態量だけでなく, これらを組み合わせた条件式でもよい.

```
POLY_3: s-c x(cr)-0.2*x(fe)=0
```

条件式の場合には, 左辺は状態変数の1次結合したものならば何でもよい(変数同士を掛けたり割ったりはできない). 上の例では Cr/Fe の比を 1/5 にしている. このように SET_CONDITION で設定できる条件は非常に種類が多く, 特に3元系以上の多元系を扱う場合に有用である(詳しくは HELP コマンドで).

条件設定は平衡計算が可能になるまで, つまり自由度がゼロになるまで行わなければならない. 現在の自由度がいくらかをみるには LIST_CONDITION コマンドがある.

```
POLY_3: L-c [LIST_CONDITION]
```

8.2 平衡計算

条件の設定が終わったら平衡計算を行うが, その前に SET_ALL_START_VALUES コマンドで計算の初期値(解の近似値)を設定しなければならない.

```
POLY_3: s-a-s [SET_ALL_START_VALUES]
```

Automatic start values for phase constituents? /Y/:

短縮形 POLY_3: s-a-s y

通常はこのように自動的に総て POLY_3 にまかせてよい. このコマンドでの設定は新たに変更しない限り有効なので, 条件設定の度に実行する必要はない.

平衡計算は COMPUTE_EQUILIBRIUM コマンドで行われる.

```
POLY_3: c-e [COMPUTE_EQUILIBRIUM]
```

計算結果を見るには

```
POLY_3: L-e [LIST_EQUILIBRIUM]
```

Output file: /TERMINAL/:

Options /VWCS/:

短縮形 POLY_3: L-e . . .

とする. 結果を保存したいときには Output file: に対してファイル名を入力すればよい. Options は出力形式に関するものである.

単一の平衡計算のみであれば、条件の設定—平衡計算を繰り返せばよい。状態図の計算のためには、こうして得られた結果を初期値(出発値)として用いるために

```
POLY_3: ad      [ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM]
```

```
Direction /ALL/:
```

```
短縮形 POLY_3: ad , ,
```

とする。ここで Direction /ALL/: は状態図の計算を初期条件からどの方向へ進めるかを指定するものであるが、通常はデフォルトのままでもよい。もし指定するときは次に述べる軸と矛盾しないようにする。

参) TC はこの初期値から出発し、相境界を一筆書きのようになぞりながら状態図を計算して行く。従って、状態図の相境界が連続しているならば、普通初期値(出発値)は1つあればよい。しかし、そうでない場合(例えば Fe-Cr 系では LIQ/ α (δ)平衡と α / γ 平衡の領域は間に α (δ)単相の部分があって、それぞれは孤立している)には初期値は複数必要となるので、条件を変えて別の平衡計算を行い、初期値に加える。

初期値としてはできるだけ2相(以上の)平衡を選ぶのが状態図計算のコツである。計算結果が初期値として不適不要ならば ADD_INITIAL_EQUILIBRIUM コマンドを実行しない。

8.3 軸の設定および状態図の計算

初期値が計算できたならば次に状態図を計算する範囲を設定する。

```
POLY_3: s-a-v    [SET_AXIS_VARIABLE]
```

```
Axis number: 1      ← 第1の軸
```

```
Condition /NONE/: w(c) ← C の mass fraction
```

```
Min value /0/: 0    ← 0 から
```

```
Max value /0/: 0.1  ← 0.1(10mass%C) まで
```

```
Increment /.0025/:
```

```
短縮形 POLY_3: s-a-v 1 w(c) 0 0.1 , ,
```

```
POLY_3: s-a-v 2 t 900 1900 25 ← 第2の軸を温度に 900K から 1900K まで 25K 間隔で
```

Axis number はグラフの X軸・Y軸に相当するもので、POLY_3では1か2である。状態図の計算には両方とも設定しなければならない。Condition はその軸の持つ条件で、SET_CONDITION コマンドで設定したものであれば何でもよいが、通常はある成分の濃度(例 w(c): 炭素の質量分率)や温度である。Increment はほとんどデフォルトのままでもよい。これを小さくすればきめ細かな状態図を計算するがそれだけ長い時間を要する。また大きくとると計算は早く終了するが細かい点で計算もれを生じる恐れがある。

状態図の計算は単に

POLY_3: m [MAP]

とすればよい。計算の経過が画面上に刻々と表示される。

1つ1つの計算に異常に時間がかかったり繰り返し回数 (Iteration) が多い場合には SET_NUMERICAL_LIMITS コマンドで計算の収束判定に用いている値を変更してみるとよい。ただし、計算精度は落ちることに気をつけること。

GES モジュールと同様に POLY_3 でも計算のための諸情報を後のためにファイルにセーブしておくことができる。

POLY_3: sa [SAVE_WORKSPACES]

File name: /RESULTS.POLY3/: ファイル名
短縮形 POLY_3: sa ファイル名

ファイル名の拡張子を省略したときには、.POLY3(大文字) が自動的に付けられる。当然ながらこのファイルには GES WORKSPACE の内容も含まれる。

こうして作成したファイルを後日の計算で利用するには

POLY_3: r-w [READ_WORKSPACES]

File name: /RESULTS.POLY3/: ファイル名
短縮形 POLY_3: r-w ファイル名

ファイル名の拡張子を省略したときには .POLY3(大文字) とみなされる。これ以後は WORKSPACE をファイルにセーブした直前の状態になる。

9 POST MODULE

POLY_3 モジュールでの計算結果をグラフ化するには POST モジュールを用いる。POST は POLY_3 のサブモジュールで、これまでのモジュールと違い GOTO_MODULE コマンドで移動するのでなく

POLY_3: po [POST]

とする。

プロンプトは POST: である。なお POST から他のモジュールへ行くには、BACK コマンドで一度 POLY_3 モジュールへ戻ってから GOTO_MODULE で移動する。

9.1 作図装置の選択

TC の POST モジュールでは図形結果をグラフィック画面ばかりでなく、X - Yプロッターやポストスクリプトプリンターなど多くの作図装置に描かせられる。ただし、画面以外の装置には TC から直接作図するのではなく、作図データを一旦個々の装置用に変換してファイルに出力し、後でこのファイルのデータを各装置に送って作図させる。この場合、装置が現在使用しているコンピュータとは別のコンピュータに接続されている場合でも何等かの方法でファイル転送を行えば作図できる。

TC がサポートしている作図装置は SET_PLOT_FORMAT コマンドで確認できる。装置の選択変更もこのコマンドで行う。なお、表示される作図装置全部が現在使用中のシステムで使える訳ではない。

```
POST: s-p-f      [SET_PLOT_FORMAT]
```

```
  CURRENT DEVICE: Tektronix 4010    ←現在の装置名を表示
```

```
  GRAPHIC DEVICE NUMBER /1/: ?     ←? でサポート装置のリストを表示
```

```
Available Graphic Devices:
```

```
Device 1 is Tektronix 4010
```

```
Device 2 is VT240/Kermit Tek.4010 emulation
```

```
Device 3 is COMPIS Tek.4010 emulation
```

```
Device 4 is Regis graphics
```

```
Device 5 is Postscript portrait mode
```

```
Device 6 is Postscript landscape mode
```

```
Device 7 is HPGL plotter (HP7475 low A4 paper)
```

```
Device 8 is HPGL plotter (HP7475 high A4 paper)
```

```
Device 9 is X-windows
```

```
Device 10 is Tandberg 2200/9S, Tek.4010 emulation
```

```
  GRAPHIC DEVICE NUMBER /1/: 2     ←新装置の番号を入力
```

```
  NEW DEVICE: VT240/Kermit Tek.4010 emulation ←新装置名を表示
```

```
  短縮形 POST: s-p-f 2
```

SET_PLOT_FORMAT で選択した作図装置は、たとえ一度 POST モジュールを抜けてもまた変更しない限り TC を終了するまで有効である。

なおパソコンの kermit 端末エミュレーションで使用しているときには

```
POST: s-p-f 2
```

で Kermit Tek.4010 emulation を選択しておくのがよい。

9.2 座標軸の選択

結果をグラフ化するための座標軸を定義する。状態図のプロットではこの座標軸は POLY モジュールで設定した軸と 1 対 1 に対応するのが普通である。

```
POST: s-d-a      [SET_DIAGRAM_AXIS]
  AXIS (X, Y OR Z) : x          ← X 軸
  VARIABLE : w-p      [WEIGHT-PERCENT] ← 質量%
  FOR COMPONENT : c          ← 成分は C
  短縮形 POST: s-d-a x w-p c
```

```
POST: s-d-a y t-c      [SET_DIAGRAM_AXIS Y TEMPERATURE-CELSIUS]
```

この例では炭素の質量%を X 軸とし、温度 (°C) を Y 軸として作図することに設定している。もちろん X 軸と Y 軸を入れ替えてプロットすることもできる。

VARIABLE タイプとして一般的なものは

```
TEMPERATURE-KELVIN  TEMPERATURE-CELSIUS
ACTIVITY
MOLE-PERCENT        MOLE-FRACTION
WEIGHT-PERCENT      WEIGHT-FRACTION
```

である。ACTIVITY 以下は成分の指定も必要である。また、温度軸の °C - K 変換や濃度軸の mole - mass 変換、% - 分率変換、濃度 - 活量変換などは POLY モジュールでの計算に使用した軸が何にかかわらず自動的に行える。

POLY_3 の POST モジュールでは VARIABLE タイプとして、上記のほかいろいろな熱力学量や利用者が定義した変数など、多くのものを指定できる。

参) また、この POST モジュールは POLY モジュールでの計算とは無関係にグラフ描画の道具としても利用できる。

9.3 作図描画

X 軸・Y 軸の設定が終れば PLOT_DIAGRAM コマンドで作図する。

```
POST: p      [PLOT_DIAGRAM]
PLOTFILE : /SCREEN/
  短縮形 POST: p , ,
```

作図結果を確認したら [RETURN] で元の POST: 状態に戻る。

パソコンを用いた Tektronix 端末では POST モジュールのプロンプト POST: に戻ってもグラフィック画面が残ったままのものがある。このような場合には

```
POST: @gcls
```

でグラフィック画面を消去できる。もしグラフィック画面を残したまま TC を終了した場合には

```
gogyoh% gcls
```

とすればグラフィック画面を消去できる。

9.4 3元系等温状態図の作図

グラフの作図は直交座標系が標準であるが、POST では3元系の等温状態図を組成三角形 (Gibbs の三角形) に描くために三角座標を用いることができる。

例として Fe-Cr-Ni 3元系について POLY_3 にて次のように第1・第2軸を設定し

```
POLY_3: s-a-v [SET_AXIS_VARIABLE]
```

```
Axis number: 1 ← 第1の軸
Condition /NONE/: x(cr) ← Cr の mole fraction
Min value /0/: 0 ← 0 から
Max value /0/: 1 ← 1(100%Cr) まで
Increment /.025/:
```

```
短縮形 POLY_3: s-a-v 1 x(cr) 0 1 , ,
```

```
POLY_3: s-a-v 2 x(ni) 0 1 , , ← 第2の軸を Ni の mole fraction
```

map コマンドである温度における状態図計算は終了している場合を考える。ここで POST モジュールに行き、X軸・Y軸を 9.1 に従って設定する。

```
POST: s-d-a [SET_DIAGRAM_AXIS]
```

```
AXIS (X, Y OR Z) : x ← X軸
VARIABLE : m-p [MOLE-PERCENT] ← モル%
FOR COMPONENT : cr ← 成分は Cr
```

```
短縮形 POST: s-d-a x m-p cr
```

```
POST: s-d-a y m-p ni [SET_DIAGRAM_AXIS Y MOLE-PERCENT NI] ← Y軸 モル%
成分は Ni
```


次に SET_DIAGRAM_TYPE コマンドを用いて三角座標系を設定する。

```
POST: s-d-t      [SET_DIAGRAM_TYPE]
TRIANGULAR DIAGRAM (Y OR N) /N/: y ←三角座標系とする
PLOT 3:RD AXIS (Y OR N) /Y/:      ←三角形の第3辺を描く
CLIP ALONG 3:RD AXIS (Y OR N) /Y/: ←三角形外は描かない
短縮形 POST: s-d-t y y y
```

また共役線 (Tie Line) を描きたいときには, SET_TIELINE_STATUS コマンドで

```
POST: s-t-s      [SET_TIELINE_STATUS]
Plotting every tie-line no /0/: 2
短縮形 POST: s-t-s 2
```

とする。ここで Plotting every tie-line no には、共役線を描かないときは 0 (ゼロ)、総て描くときは 1、1 つ置きの場合は 2、2 つ置きでは 3、……と指定する。

共役線の間隔は必ずしも等しくないが、2～3を選ぶのがよい。

9.5 作図範囲の設定

PLOT コマンドによって描かれるグラフの作図範囲は、POLY モジュールで設定した計算範囲と計算結果を参考にして POST モジュールが自動的に決める。これを変更するには SET_SCALING_STATUS コマンドで行う。

```
POST: s-s      [SET_SCALING_STATUS]
AXIS (X, Y OR Z) : x          ←X軸を
AUTOMATIC SCALING (Y OR N) /N/: ←マニュアル設定で
MIN VALUE : 0                 ←最小値 0 から
MAX VALUE : 10                ←最大値 10 まで
短縮形 POST: s-s x n 0 10
```

また、これによって作図の拡大や縮小ができる。

図形全体を拡大・縮小するには SET_PLOT_SIZE コマンドがある。また X 軸あるいは Y 軸を拡大・縮小するには SET_AXIS_LENGTH コマンドを用いる。

10 GIBBS_ENERGY_SYSTEM MODULE その2

GIBBS_ENERGY_SYSTEM(GES) モジュールは TC の流れの中では、DATABASE と POLY の中間に位置するモジュールである。ここでは、ある種の計算において非常に重要となる計算する系の情報の追加、変更、削除などの方法について述べる。

モジュールプロンプトは GES: である。

10.1 状態の変更

DATABASE モジュールで定義した計算する系について、一部の成分や相を一時的に計算の対象から除外したり、元に戻したりする。コマンドは CHANGE_STATUS である。

```
GES: c-s      [CHANGE_STATUS]
FOR ELEMENT, SPECIES OR PHASE /SPECIES/: p      [PHASE]
SUSPEND? /Y/:
LIST OF PHASE : liq cem      [LIQUID CEMENTITE]
短縮形 GES: c-s p y liq cem
```

FOR ELEMENT, SPECIES OR PHASE で、除外または元に戻す対象が何であることを指示する。SUSPEND? では、除外するときは YES、元に戻すときは NO と答える。次に除外または元に戻すもののリストを入力する。上の例では LIQUID と CEMENTITE の 2つの相を一時的に計算から除外することになっている。

注) TC では溶体を構成する成分単位は化学種 (SPECIES) としている。従って、一般に合金溶体の構成単位は元素 (ELEMENT) であるが、TC では単一の ELEMENT から成る SPECIES と扱われる。

この CHANGE_STATUS による一時的な変更は、複雑な系でうまく初期値が得られないときなどに有効である。つまり考えている成分や相の数を減らしてより単純な系として計算し、この結果を参考に順次複雑な系へと進むと比較的に計算ができる。なお、ほぼ同様のコマンドは POLY_3 モジュールにもある。

10.2 情報の追加・修正

DATABASE 情報の不足や修正を行う。ただし、ここで行う追加・修正は一時的なもので、DATABASE そのものの修正ではない。従って、修正したものを後日も利用するためには7章で述べた SAVE_WORKSPACE コマンドでファイルに保存するか、別個にユーザ・データベースとして作成する必要がある。

10.2.1 相分離の数の設定

相の自由エネルギーの表記法を一時的に変更するのに AMEND_PHASE_DESCRIPTION コマンドがある。変更できる項目はいくつかあるが、ここではこのコマンドを用いて行う、相分離の数の設定についてのみ説明する。これは2相分離の計算に重要である。

```

GES: a-ph      [AMEND_PHASE_DESCRIPTION]
  PHASE NAME: fcc      [FCC_A1]           ←対象とする相の名前
  AMEND WHAT /COMPOSITION SETS/:        ←変更する項目. ここではそのまま
  NEW HIGHEST SET NUMBER /2/:          ←通常は [RETURN]. 現在の数+1
  GIVE FOR COMPOSITION SET 2
  Major constituent(s) for sublattice 1: ti nb [Ti Nb] ←主成分の並び
  Major constituent(s) for sublattice 2: c n  [C N]   ←主成分の並び
  :
  : - 副格子の数だけ設定する -
  :

```

短縮形 GES: a-ph fcc , , , ti nb ; c n ;

変更項目の COMPOSITION SETS とは、同じ自由エネルギー関数を持ちながら2つあるいはそれ以上の組成が異なる領域に分離する可能性のあることを TC に知らせるものである。NEW HIGHEST SET NUMBER は考慮する領域の数である。デフォルトでは現在の数+1で、通常は2である。続いて各副格子ごとにその主成分を設定する。以後、第2、第3、……の領域は FCC_A1#2, FCC_A1#3, …… と相の名前の後に # n を付けて区別され、自由エネルギー関数が全く同じであるが、それぞれ独立した相として扱われる。従って、これまで述べた計算の方法で特に変更することはない。

10.2.2 系への追加

DATABASE に目的とする合金相がない場合には ENTER_PHASE コマンドを用いて相を定義し、追加する。

```

GES: e-ph      [ENTER_PHASE]
NAME OF PHASE: 相名                ←英字で始まり 英字、数字、アンダ
                                     スコアからなる文字列 例) M_C2
TYPE CODE:
NUMBER OF SUBLATTICES /1/: 2        ←通常は [RETURN] でよい
                                     ←副格子モデルでの副格子の数
NUMBER OF SITES IN SUBLATTICE 1 /1/: 1 ←副格子 1 の格子数
NUMBER OF SITES IN SUBLATTICE 2 /1/: 3 ←副格子 2 の格子数
CONSTITUENTS IN SUBLATTICE 1
NAME OF CONSTITUENT: fe cr          [Fe Cr] ←副格子 1 を占める成分の並び
NAME OF CONSTITUENT:
CONSTITUENTS IN SUBLATTICE 2
NAME OF CONSTITUENT: c va ;        [C Va:] ←副格子 2 を占める成分の並び
WILL YOU ADD CONSTITUENTS LATER /NO/: ←通常は [RETURN] でよい。
DO YOU WANT A LIST OF POSSIBLE PARAMETERS /NO/: y

```

```

: - 計算に必要なパラメータのリストが表示される -
:
: (リストされたパラメータは ENTER_PARAMETER コマンドで入力する)
:

```

短縮形 GES: e-ph m _ c2, , 2 1 3 fe cr ; c va ; , , y

10.2.3 パラメータの追加・修正

DATABASE がないパラメータを追加したり、既存のパラメータを一部修正するために ENTER_PARAMETER および AMEND_PARAMETER コマンドがある。

```

GES: e-pa      [ENTER_PARAMETER]
PARAMETER: L(m-c2,fe,cr;c;0)      [L(M_C2,FE,CR:C;0)] ←入力するパラメータ名
L(M_C2,FE,CR:C;0)

```

LOW TEMPERATURE LIMIT /298.15/: ←パラメータの温度下限
 FUNCTION: $-10000+1.3*t$ ←関数の入力. Fortran の形式
 & $-2.1*t*\ln(t)$; ←FUNCTION の続き. 最後は ;
 HIGH TEMPERATURE LIMIT /6000/: 2000 ←関数の温度上限
 ANY MORE RANGES /N/: y ←別の温度区間がある時は Y
 FUNCTION: $-5800-17.76*t$;
 HIGH TEMPERATURE LIMIT /6000/:
 ANY MORE RANGES /N/:

短縮形 GES: e-pa L(m-c2,fe,cr:c;0)

ENTER_PARAMETER と次の AMEND_PARAMETER では短縮入力は最初のパラメータ名のみで、その後の数値や数式は会話形式で入力する。パラメータ名の形式は

<identifier> (<phase> , <component array> ; <digit >)

<identifier> は自由エネルギーの場合 G, 相互作用パラメータの場合 L (ただし、<component array> の形式で識別できるので G でも可) とする。<component array> は相互作用する成分を、(コンマ) で区切った並びで、複数の副格子がある場合は、それぞれを :(コロン) で区切る。<digit> は相互作用パラメータの組成依存性の次数である。自由エネルギーでは <digit> は常にゼロである。FUNCTION は Fortran の式であればよい。1行で入力できない時は [RETURN] を入力すると次の行に & (アンパサンド) を表示するので続きを入力する。ENTER_PARAMETER では既にパラメータが定義されていても置き換えるので、一部訂正の場合は次の AMEND_PARAMETER を用いる。

GES: a-pa [AMEND_PARAMETER]

PARAMETER: L(m-c2,fe,cr:c;0) [L(M_C2,FE,CR:C;0)] ←修正するパラメータ名

L(M_C2,FE,CR:C;0) =

298.15<T< 2000.00: $-10000+1.3*T-2.1*T*\ln(T)$ ←現在のパラメータを表示

2000.00<T< 6000.00: $-5800-17.76*T$

DO YOU WANT TO CHANGE THE NUMBER OF RANGES /NO/: ←区間数変更の時
 YES

DIFFERENT FUNCTIONS IN THESE RANGES

1 298.15<T< 2000.00

2 2000.00<T< 6000.00

DO YOU WANT TO CHANGE THE RANGE LIMITS /N/:

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/: 2

:

: - 簡易コマンドによるエディット -

: - 詳しくは ? で -

:

RANGE NUMBER (0 TO EXIT) /0/:

短縮形 GES: a-pa L(m-c2,fe,cr;c;0)

数式にはユーザが定義した記号を用いることもできる。複数のパラメータで同じ数式が現れる時には便利である。コマンドは ENTER_SYMBOL と AMEND_SYMBOL で、入力方法は ENTER_PARAMETER/AMEND_PARAMETER と同じである。

11 おわりに

オンラインヘルプでも不明の点は

tcalc@gogyoh.isct.kyutech.ac.jp

までメールでどうぞ。最後に作図の1例を下図に示す。

THERMO-CALC (92. 4.15:22. 9) :EXAMI

