

JMatPro

PRACTICAL SOFTWARE FOR MATERIALS PROPERTIES

열역학 계산 기반 고온물성 모델링

solution lab

(주) 솔루션랩

JMatPro Systems

Practical Software for Material Properties

합금에 대한 물성 계산 소프트웨어

- ✓ Fe alloys
- ✓ Cu alloys
- ✓ Co alloy

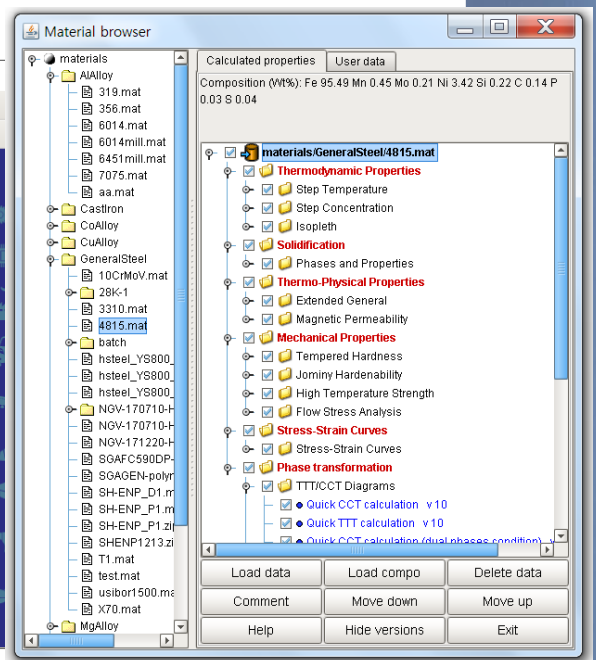
- ✓ Al alloys
- ✓ Ti alloys
- ✓ Zr alloys

- ✓ Ni alloys
- ✓ Mg alloys
- ✓ Solder alloys

JMatPro는 산업계에서 실용적으로 사용되는 다원계 합금을 대상으로 하여, 물성을 예측하기 위해 만들어진 소프트웨어입니다.

JMatPro는 다양한 출처로부터 확보된 시험 결과에 대한 단순 데이터 모음을 제공하는 것이 아니라, 광범위하게 검증된 물리적 모델에 기반하여 원하는 합금 조성에 대한 물성을 계산해줍니다. 핸드북이나 논문, 인터넷 검색으로 긴 시간동안 고통스럽게 불완전한 데이터를 찾아 헤맬 필요가 없습니다. JMatPro는 신뢰성과 일관성을 지닌 물성 모델링을 통해, 다양한 조건에서의 광범위한 물성에 대한 정보를 제공해 드리며, 전세계 1,000 여 곳에서 많은 연구자와 엔지니어들이 일상적으로 물성 예측에 사용하고 있습니다.

- ✓ 안정/준안정 평형상 계산
- ✓ 응고거동과 물성계산
- ✓ 고온 기계적 물성 계산
- ✓ 열/물리적 물성 계산
- ✓ 상변태 물성 계산



< 도입 화면과 저장결과 관리를 위한 Material Browser >

Thermodynamic Calculation

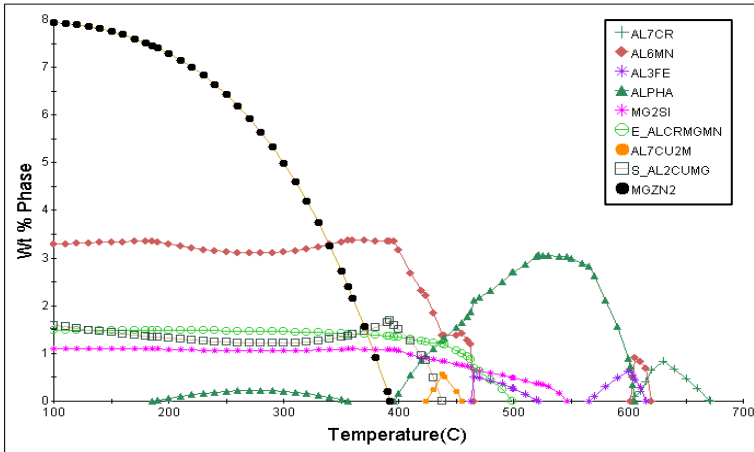
안정상/준안정상 계산, 상태도(isopleth) 계산

열역학 계산을 통해, 안정/준안정상에 대한 정보를 확인할 수 있습니다. 온도별 계산, 조성별 계산, 상태도(isopleth) 계산을 빠른 시간내에 수행하여 그래프로 결과를 도시합니다.

예시는 각 온도별 상분율 분포(AL, LIQUID 상 숨김), 보론 강판에서 BN상의 생성 억제를 통해 Austenite에서 Boron 함량을 최대화 하기 위한 Ti 원소의 최적함량, Mo 원소의 농도에 따른 상태도 변화를 보였습니다.

- ✓ 상분율
- ✓ 특정 상의 조성
- ✓ 특정 원소의 각 상별 분포
- ✓ Activity, 비열
- ✓ Enthalpy, Entropy, Gibbs Energy

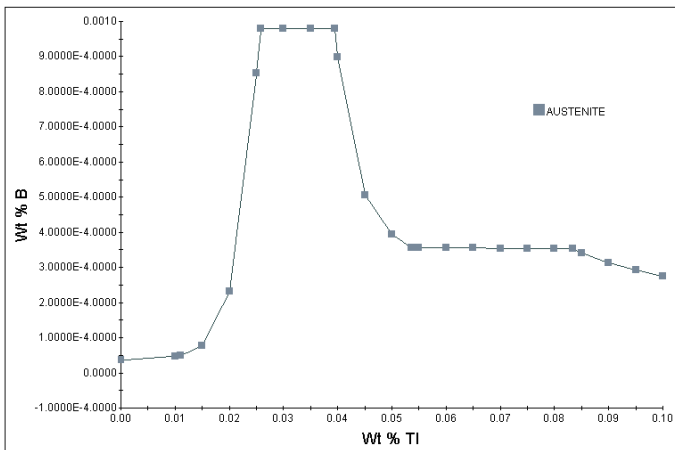
Al-0.23Cr-1.6Cu-0.5Fe-2.5Mg-0.3Mn-0.4Si-5.6Zn wt(%)



< 상분율 분포: Al 7075 >

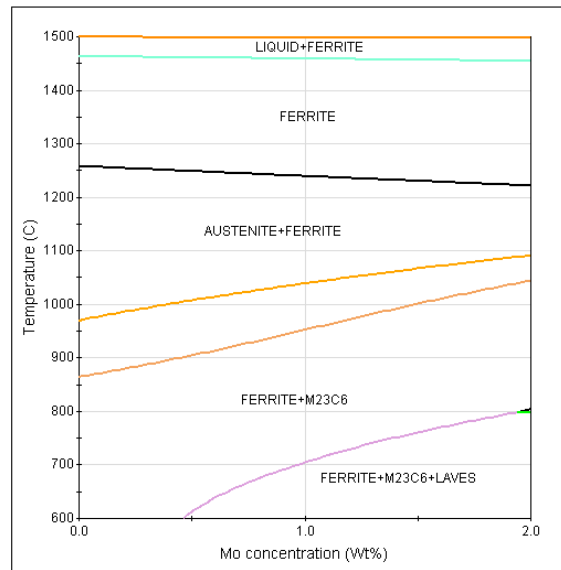
Fe-17Cr-1.25Mn-0.75Si-0.06C-xMo

Fe-0.02Al-1.0Cr-0.3Cu-1.8Mn-0.1Mo-0.2Ni-0.2Si-0.0Ti
-0.003B-0.15C-0.01N-0.007P-0.01S wt(%)



T= 1000.0C (Balance: FE)

< Ti 첨가에 따른 오스테나이트 상의 B 함량 >



< Mo 함량에 따른 상태도 >

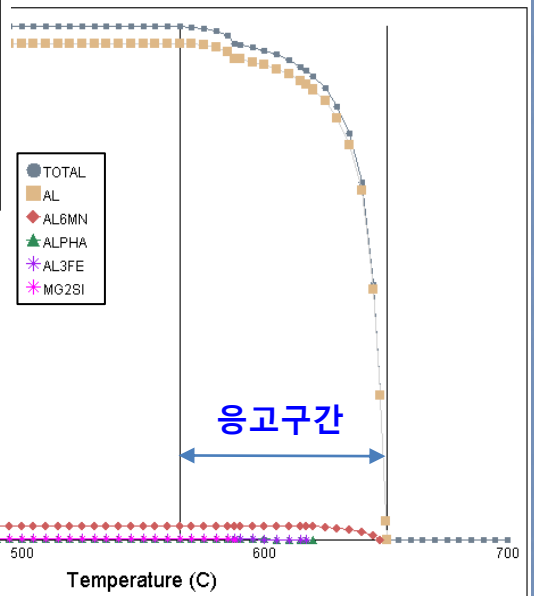
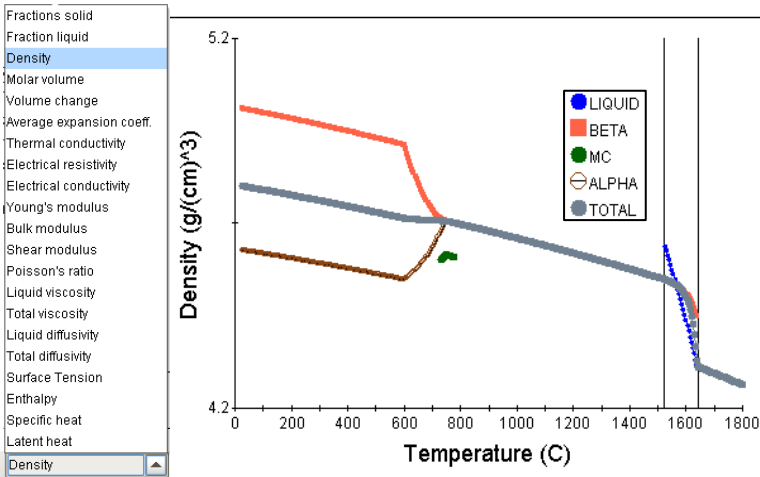
Solidification

응고 구간 물성 계산, 균질화 열처리

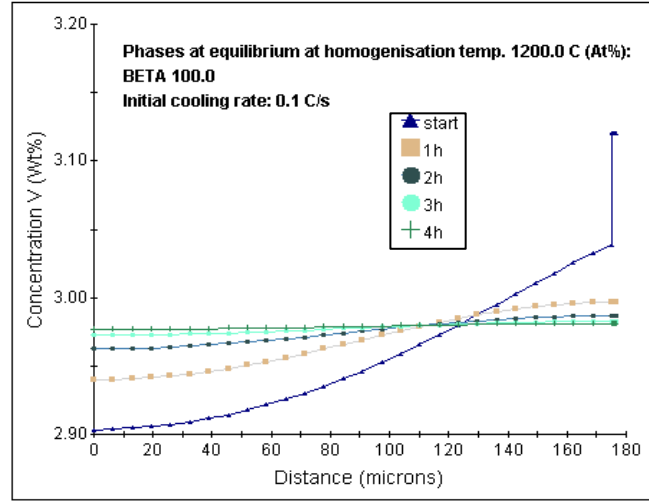
응고 물성 계산을 통해서는 온도별 응고분율과 각 상별 밀도변화, 열전도도, 전기전도도, 비열, 잠열, 점도, 확산계수, 탄성계수, 프와송비 등을 온도의 함수로 구할 수 있습니다. 또한 균질화 열처리시 SDAS내에서의 시간에 따른 농도변화를 예측해 볼 수 있습니다.

응고분율의 경우 기본적으로 Scheil-Gulliver 모델을 사용하여 계산하며, Back Diffusion 모델도 선택하여 계산해 볼 수 있습니다.

- ✓ Fraction Solid, Fraction Liquid
- ✓ 밀도, 몰체적, 체적변화
- ✓ 열/전기 전도도, 비열, 잠열
- ✓ 확산계수, 점도, 표면장력
- ✓ 균질화 열처리시 원소 분포



< 각 상의 밀도변화 외 물성예측 >



< 온도별 응고분율: AA3014 >

< 균질화 열처리시 시간별 V 원소의 SDAS에서의 농도 프로파일 >

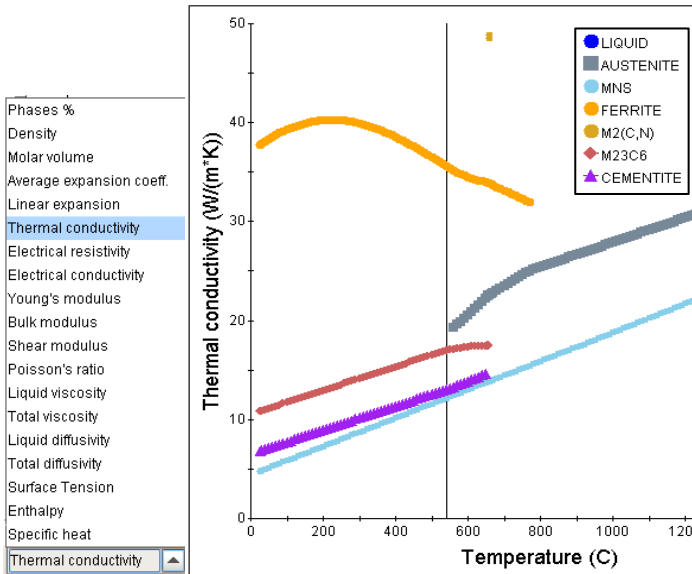
Thermo-Physical Properties

열물리적 물성

열역학 계산에서 구한 평형상분율을 기준으로 하여 각 상의 열물리적 물성을 예측해 볼 수 있습니다. JMatPro는 각 상의 물성을 계산하기 위한 모델링 식과 데이터베이스를 내재하고 있습니다.

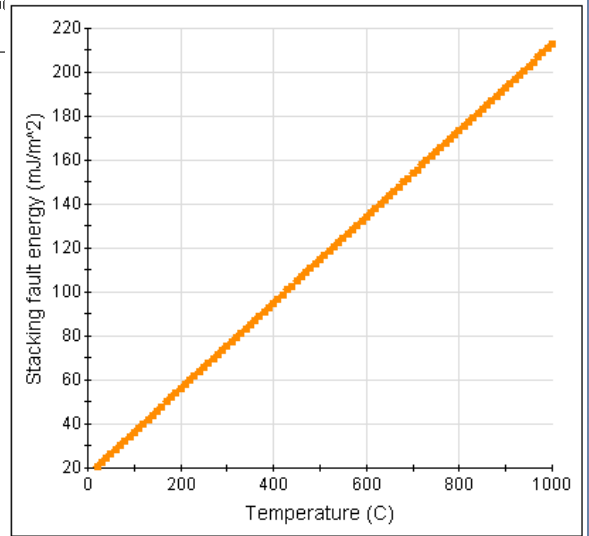
General Steel 등 일부 재질에서는 **Stacking Fault Energy**, **Magnetic Permeability** 등의 계산도 가능합니다.

- ✓ 밀도, 몰체적, 열팽창계수
- ✓ 탄성계수, 프와송비
- ✓ 열/전기 전도도, 비열, 잠열
- ✓ 적층결함에너지
- ✓ 자기투자율

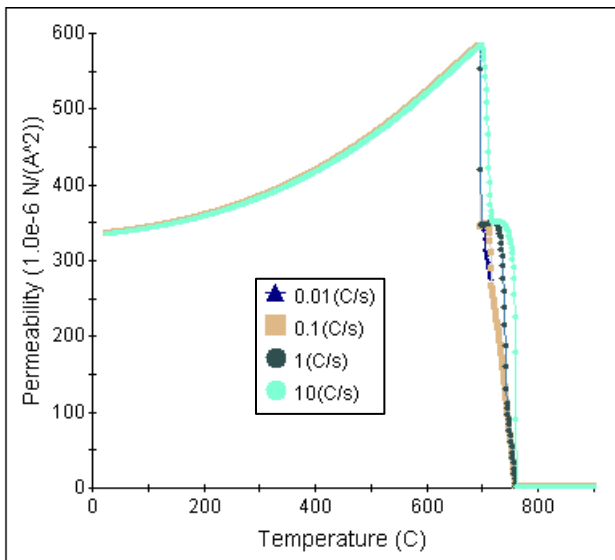


Fe-25.0Cr-1.0Mn-1.5Mo-4.0Ni-0.75Si-0.2C

< 각 상의 열전도도 외 물성예측 >



< 적층결함에너지 >



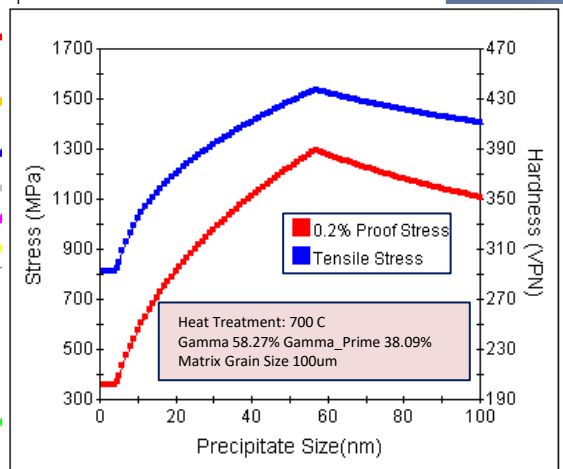
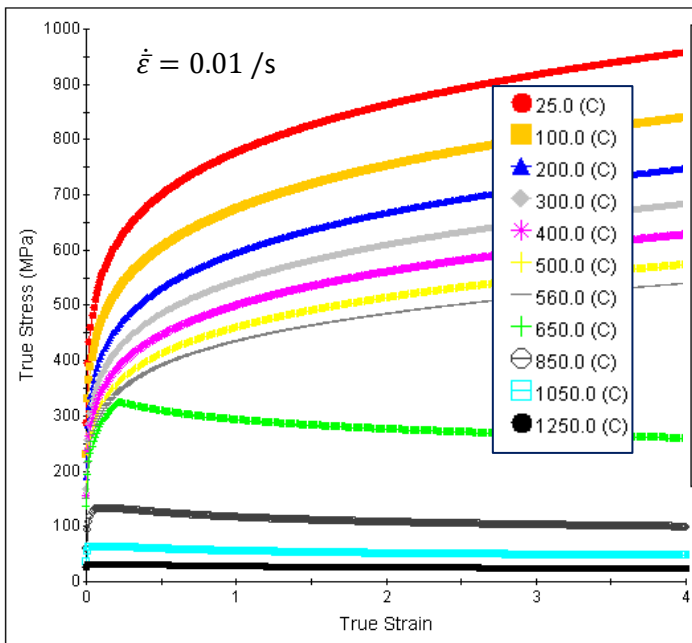
< 가열속도 별 온도에 따른 자기투자율의 변화 >

Mechanical Properties

기계적 물성

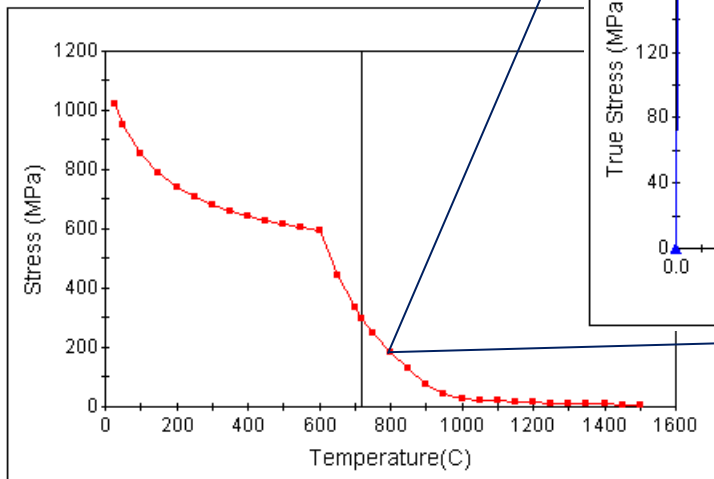
상온에서 고온까지의 항복강도, 인장강도 등을 계산하며, 또한 변형률속도에 따른 응력-변형률 선도의 계산이 가능합니다. **고온 강도** 계산을 위해서는 기준을 산정하기 위해 상온 강도 혹은 열처리 온도 등의 정보 입력이 필요할 수 있습니다. Ni 초합금에 대해서는 석출상 크기를 고려한 강도예측이 가능합니다.

- ✓ 고온 강도계산
- ✓ 유동응력선도
- ✓ Ni 합금 석출강화

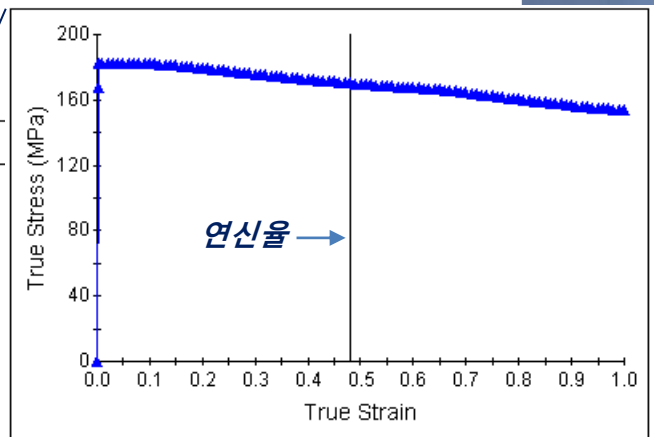


< 석출상 크기에 따른 Ni 초합금의 상온강도 >

< 온도별/변형률속도별 유동응력 >



< 고온 항복강도 변화 >



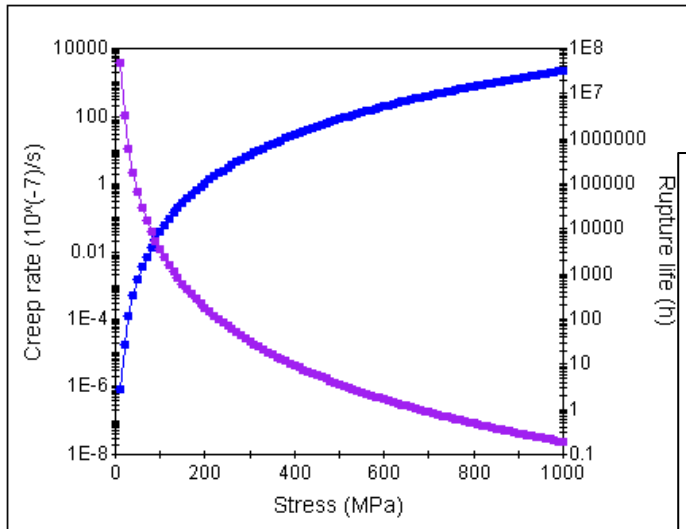
< 응력-변형률 선도 >

Mechanical Properties

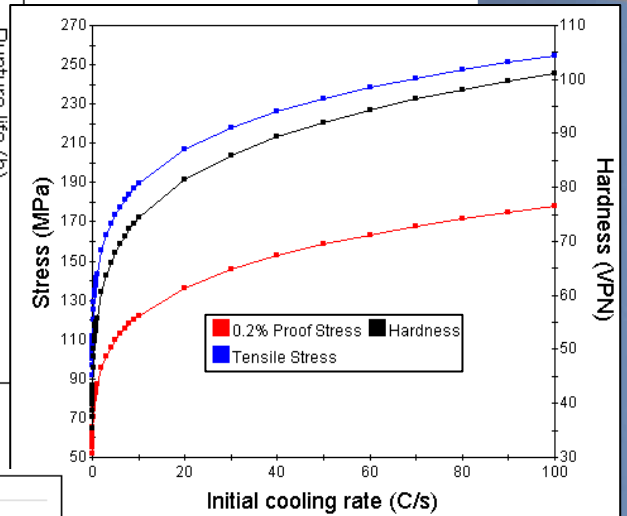
기계적 물성

Al 합금에서는 주조강도, O/F/T5/T6/H 열처리후 강도 예측이 가능합니다. General Steel 에서는 조미니 경화능, 템퍼링 정도 예측이 가능하고, Ti/Ni/Stainless Steel 등의 합금에서는 크립과 파단강도 예측이 가능합니다. 일부 재질은 FLD와 변형공정지도 계산이 가능합니다.

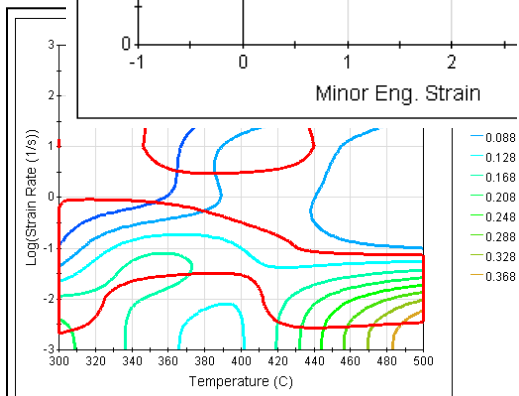
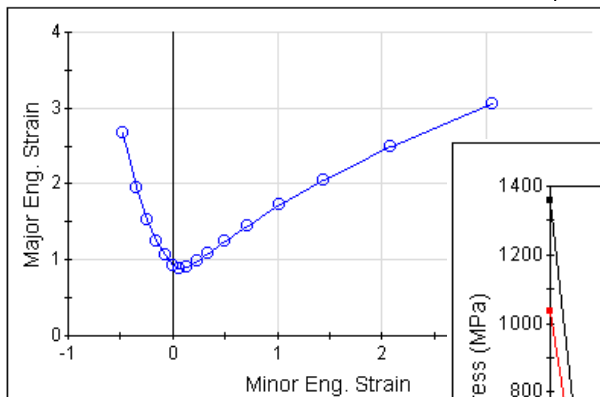
- ✓ Al 합금 주조강도/열처리강도
- ✓ 조미니 경화능, 템퍼링 정도
- ✓ 크립/파단수명
- ✓ 파단강도/고온피로물성
- ✓ 변형공정지도(Processing Map)
- ✓ 성형한계도(FLD)



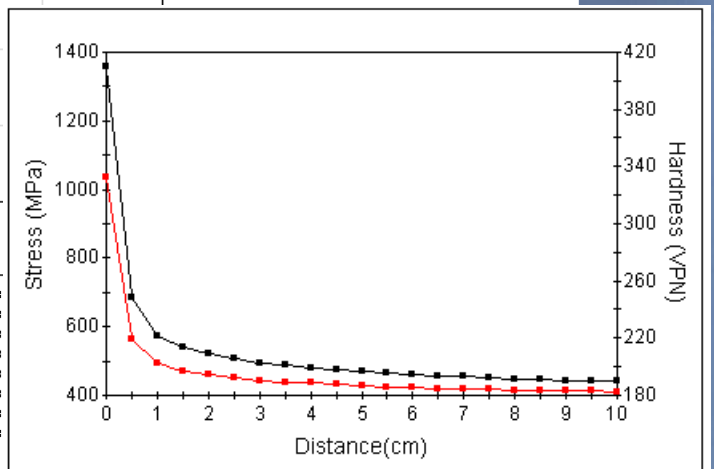
< Ni 초합금의 크립속도, 파단강도 >



< Al 합금 주조강도 >



< FLD, 변형공정지도 >



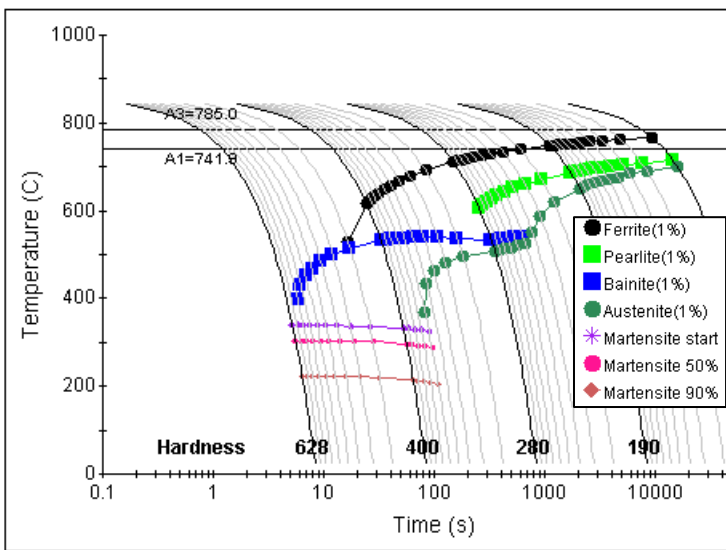
< 조미니 경화능선도 >

Phase Transformation

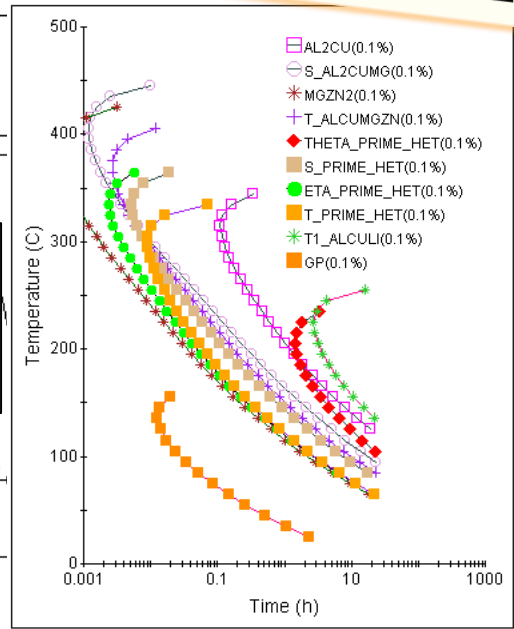
상변태 물성

합금조성과 가열온도, 결정립 크기 등을 입력하여 TTT/CCT 선도 등 상변태 정보를 예측해 볼 수 있습니다. 다양한 합금에서 등온변태 정보를 계산하며, 또한 General Steel/Ti 합금의 경우에는 냉각속도별 상변태 및 물성 계산이 가능합니다.

- ✓ TTT/CCT 선도
- ✓ 등온변태
- ✓ 냉각속도별 상변태 및 물성



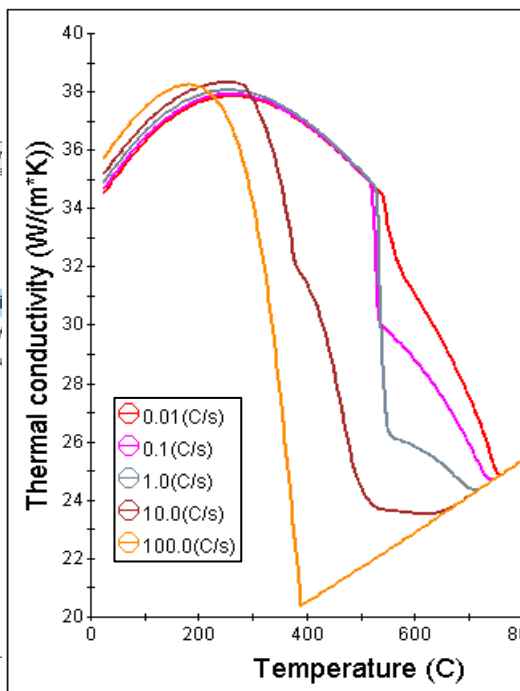
< CCT 선도: 4140 >



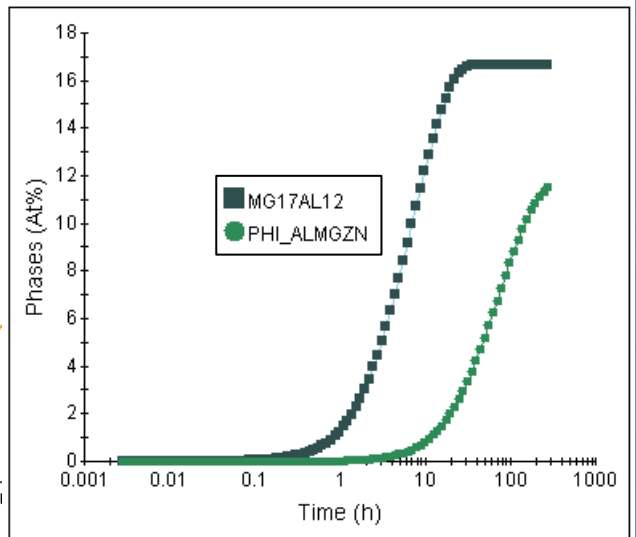
< Al 합금 주조강도 >

Mg-9.5Al-0.3Mn-0.5Zn

- Thermal conductivity
- Phases %
- Density
- Molar volume
- Linear expansion
- Thermal conductivity
- Electrical resistivity
- Electrical conducth
- Young's modulus
- Bulk modulus
- Shear modulus
- Poisson's ratio
- Yield Stress
- Tensile Stress
- Hardness
- Enthalpy
- Specific heat
- Latent heat



< 냉각속도별 물성변화 >



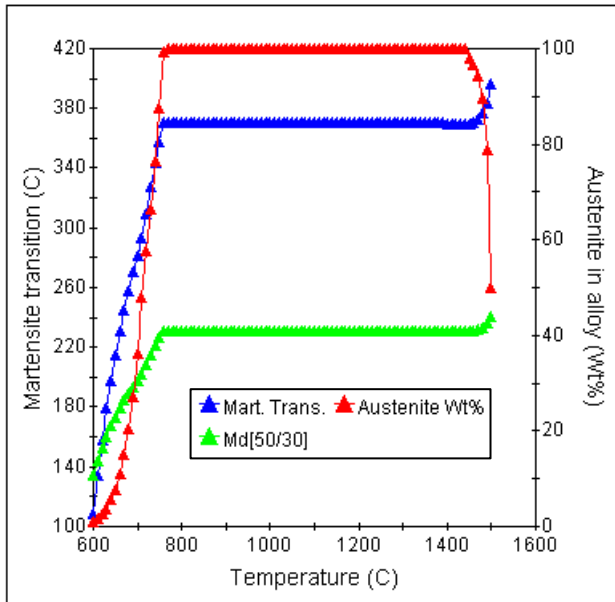
< AZ91 등온변태선도 >

Phase Transformation

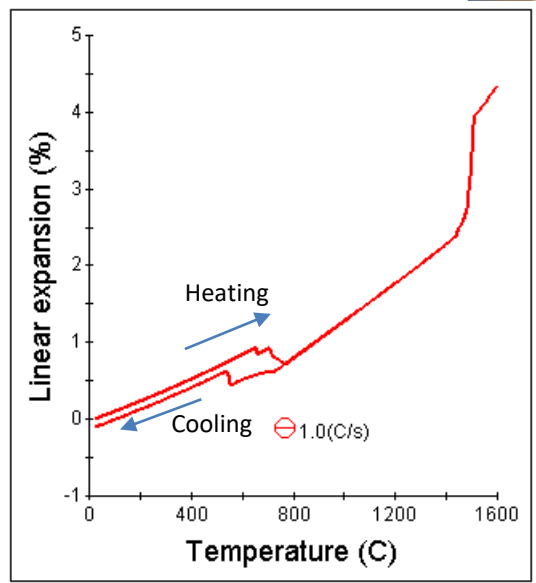
상변태 물성

General Steel은 다양한 변태소성 모델의 계수, 마르텐사이트 변태정보, 용접공정 가열/냉각 과정에서의 상 변화 및 물성, 템퍼링 과정에서의 석출상 분율/크기 변화와 강도 예측을 수행합니다.

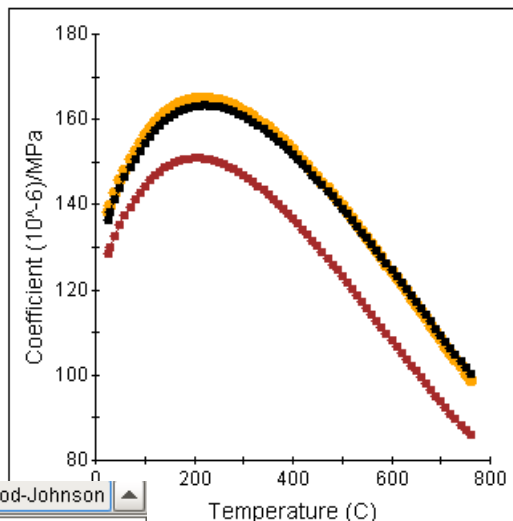
- ✓ 용접사이클에서의 물성
- ✓ 마르텐사이트 변태정보
- ✓ 템퍼링시 석출상 분율/크기
- ✓ 변태소성 모델



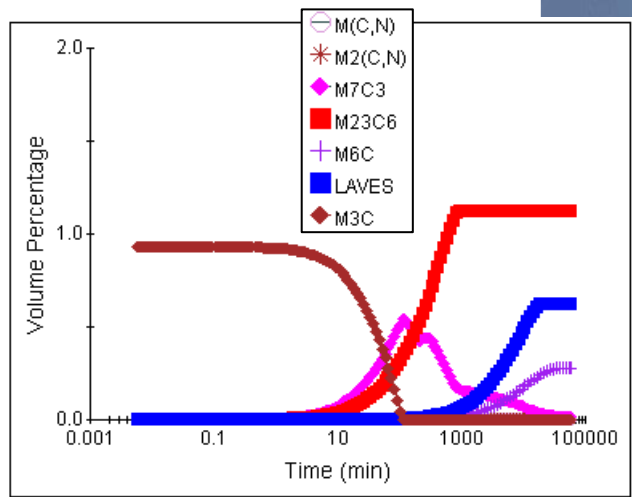
< 마르텐사이트 변태정보 >



< 용접사이클에서의 물성변화 >



< 변태소성 모델 계수 >



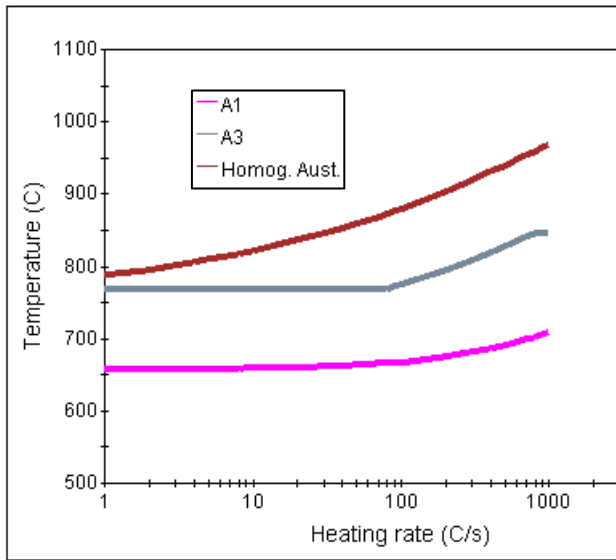
< 템퍼링시 석출상 거동 및 강도 변화 >

Phase Transformation

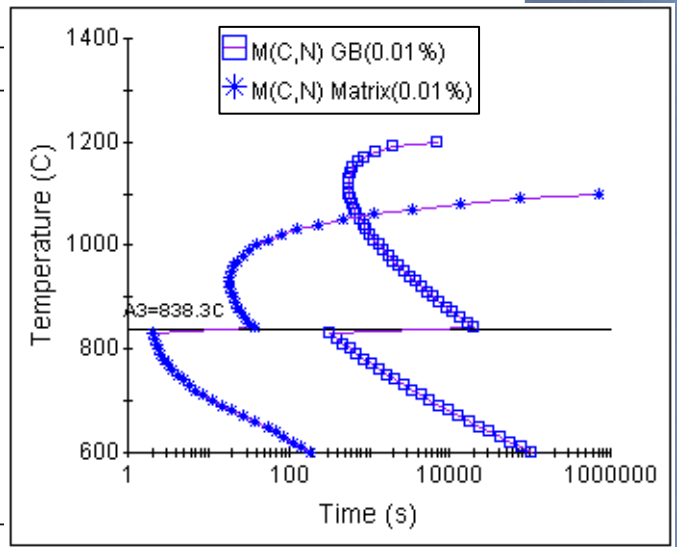
상변태 물성

General Steel은 가열공정에서 오스테나이트로의 변태정보 계산이 가능합니다. 유도가열과 같은 급속 가열에서의 A1, A3 변태온도의 상승을 확인할 수 있습니다. 또한 기지조직/입계에서의 탄질화물 등의 석출 거동을 예측하고, 이와 연계하여 micro alloyed steel에서는 제어압연공정 모사를 통해, 재결정분율, 결정립 크기, 롤하중 등의 예측이 가능합니다. Ni 초합금의 시효 열처리시 석출상의 거동을 모사해 볼 수 있습니다.

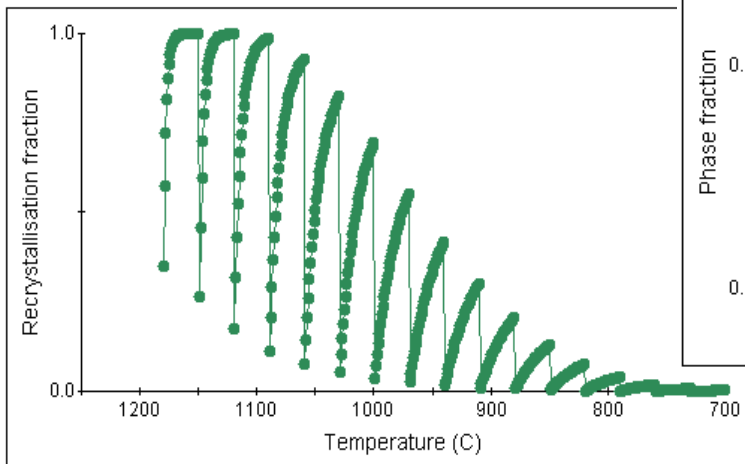
- ✓ 가열시 상변화 (TTA)
- ✓ 석출상 거동 (TTP)
- ✓ Micro Alloyed Steel 압연공정
- ✓ Ni 초합금 시효 열처리 거동



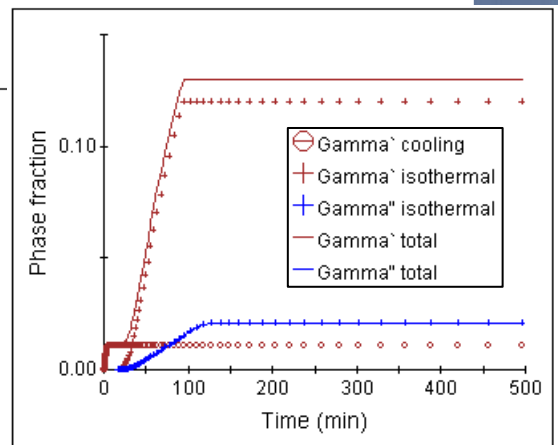
< 가열속도에 따른 변태구간 >



< 석출상 선도 >



< 제어압연에서의 재결정분율 >



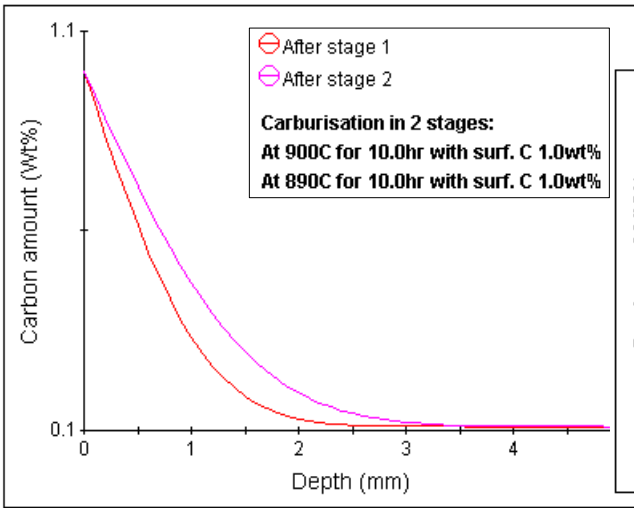
< Ni 초합금의 열처리모사 >

Miscellaneous

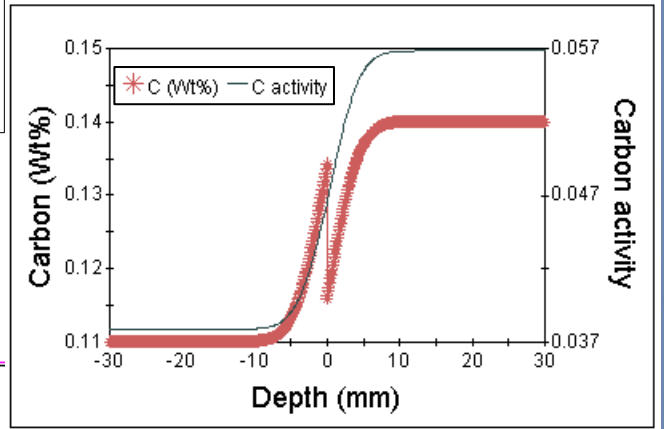
기타 기능

Fe 합금 모듈에서는 침탄공정에 대한 계산이 가능합니다. Ni 초합금 모듈은 이종재질의 접합구간에서 농도 프로파일을 예측하는 기능을 가지고 있습니다. 유틸리티에서는 단위변환, 오스테나이트 결정립 크기 예측, TTT선도를 실제와 유사하게 보정한 뒤 이후 물성을 예측하는 기능 등을 제공합니다.

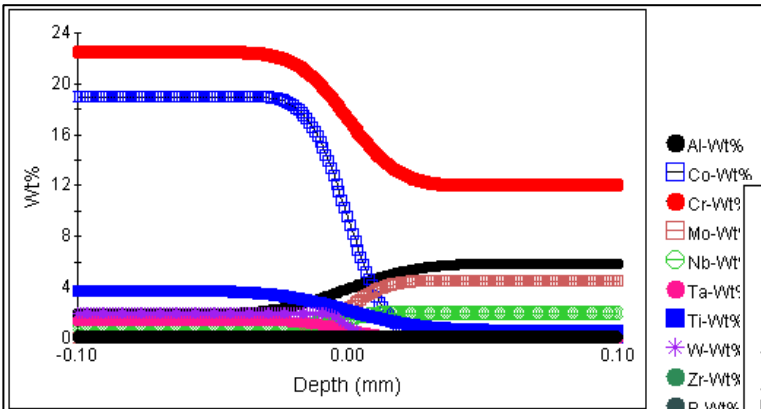
- ✓ 침탄공정
- ✓ 이종재질 접합구간 농도분포
- ✓ 스테인레스강 PRE number
- ✓ 유틸리티: TTT 선도 보정 외



< 2단계 침탄열처리 공정 >

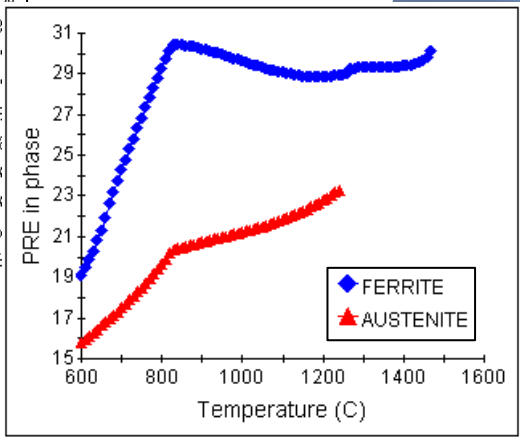


< 이종재질 접합에서의 c 농도분포 >



Alloy macro profile

Holding temperature (C) : 1200.0
 Holding time (h) : 1.0
 Left alloy elts: Ni Al Co Cr Nb Ta Ti W B C
 Left alloy (wt%): 48.341 1.9 19.0 22.5 1.0 1.4 3.7 2.0 0.009 0.15
 Right alloy elts: Ni Al Cr Mo Nb Ti Zr B C
 Right alloy (wt%): 74.84 5.9 12.0 4.5 2.0 0.6 0.1 0.01 0.05



< PRE Number >

< Ni 초합금의 이종재질 용접시 농도 프로파일 >

Data Export

공정 시뮬레이션 s/w 형식의 물성출력

주조공정, 성형공정, 용접공정, 열처리 공정 등의 전산모사에 필요한 물성을 각 상용소프트웨어의 형식에 맞게 물성을 출력합니다.

- ✓ 주조 공정 시뮬레이션용
- ✓ 비등온 성형 시뮬레이션용
- ✓ 용접 공정 시뮬레이션용
- ✓ 열처리 공정 시뮬레이션용

General Steel

Calculations **Export**

Forming Data Export:	<input type="checkbox"/>	FORGE by Transvalor	DEFORM Forming
		QForm	Abaqus
Casting Data Export:	<input type="checkbox"/>	Magma casting	Flow3D casting
		Inspire Cast casting	Theracast casting
		ProCAST casting	ProCAST mtd files
		Other casting simulation data	
Multi-Purpose Data Export:	<input type="checkbox"/>	Transvalor Steel	Simufact (single phase)
		Simufact (multi phase)	Ansys Workbench
Heat Treat. Data Export:	<input type="checkbox"/>	DEFORM-HT	Heat Treatment Data
		Sysweld Heat Treatment	QForm Heat Treatment
		COMSOL Multiphysics Heat Treatment	SIMHEAT Nitriding
		DANTE Heat Treatment	
Welding Data Export:	<input type="checkbox"/>	Sysweld	LS-DYNA CWM

< General Steel 모듈 Data Export >

Aluminium Alloy

Calculations **Export**

Forming Data Export:	<input type="checkbox"/>	FORGE by Transvalor	DEFORM Forming
		QForm	Abaqus
Casting Data Export:	<input type="checkbox"/>	Magma casting	Flow3D casting
		Inspire Cast casting	Theracast casting
		ProCAST casting	Other casting simulation data
		ProCAST mtd files	
Multi-Purpose Data Export:	<input type="checkbox"/>	Simufact (single phase)	Ansys Workbench
Welding Data Export:	<input type="checkbox"/>	LS-DYNA CWM	Sysweld

< Al alloy 모듈 Data Export >

Export

This graph data to worksheet format

More data to worksheet format

All to ProCAST xml

All to Magma format

All to JSCAST format

All to ADSTEFAN format

All to THERCAST format

All to Flow3D format

All to Novacast format

All to LVMFlow format

All to AnyCasting format

All to ANSYS format

Cancel

API 모듈 (Optional)

합금설계 최적화, 타 소프트웨어와 결합한 계산

합금설계 최적화를 위해서는 수백-수천 강종 및 조건에 대한 계산수행이 필요하며, JMatPro는 이를 위한 다양한 옵션을 제공합니다. 조성을 엑셀 표로부터 입력이 가능하고, 자동화된 배치모드 계산 등이 가능합니다. 또한 API programming 을 통해 입력조건 생성, 계산, 결과처리까지 자동화하여 합금설계 최적화, 타 소프트웨어와의 결합을 시도해 볼 수 있습니다.

- ✓ Composition input from sheet
- ✓ Batch Calculation
- ✓ API programming

API 모듈 현재 제공 기능 (JMatPro 일부 기능)

- 열역학 계산
- 열물리적 물성 계산
- 기계적 강도 계산(Al, Ti, Fe, Ni, Co 합금)
- 응고분율 및 응고시 물성 계산
- TTT/CCT 및 강도 계산(General Steel)
- 냉각시 물성 계산(General Steel)

```
int status; // Optional variable: Holds function return values and allows error-handling.
const int numElements = 9;
const int numCoolingRates = 1;
char *alloyElements [numElements] = {"Fe", "Cr", "Mn", "Mo", "Ni", "Si", "C", "P", "S"};
double alloyComposition [numElements] = {97.41, 0.98, 0.77, 0.21, 0.04, 0.15, 0.37, 0.03, 0.04};
double coolingRates [numCoolingRates] = {1.0};

jmpSetWorkingDirectory ("temp/");
jmpSetScreenOutput (JMP_FLAG_TRUE);
jmpSetMaterialType (JMP_MATERIAL_GENERAL_STEEL);
jmpSetAlloyElements (numElements, alloyElements);
jmpSetCompositionUnit (JMP_COMPOSITION_UNIT_WEIGHT_PERCENT);
jmpSetAlloyComposition (numElements, alloyComposition);
jmpSetCoolingProfileType (JMP_COOLING_PROFILE_CONSTANT);
jmpSetConstantCoolingRates (numCoolingRates, coolingRates);
jmpSetTemperatureUnit (JMP_TEMPERATURE_UNIT_CELSIUS);
jmpSetCoolingTemperatures (860.0, 5.0);
jmpSetGrainSizeUnit (JMP_GRAIN_SIZE_UNIT_ASTM);
jmpSetGrainSize (9.0);
jmpSetPhasesCheck (JMP_FLAG_TRUE);
jmpSetShiftFactors (1.0, 1.0, 1.0);
jmpUnsetPhysicalProperty (JMP_PHYSICAL_PROPERTY_ALL);

jmpSetPhysicalProperty (JMP_PHYSICAL_PROPERTY_THERMAL_CONDUCTIVITY |
JMP_PHYSICAL_PROPERTY_ELECTRICAL_RESISTIVITY |
JMP_PHYSICAL_PROPERTY_DENSITY | JMP_PHYSICAL_PROPERTY_MOLAR_VOLUME |
JMP_PHYSICAL_PROPERTY_YOUNGS_MODULUS | JMP_PHYSICAL_PROPERTY_BULK_MODULUS |
JMP_PHYSICAL_PROPERTY_SHEAR_MODULUS | JMP_PHYSICAL_PROPERTY_POISSONS_RATIO);

status = jmpRunCoolingCalculation ();

if (status == JMP_STATUS_ERROR)
{
}

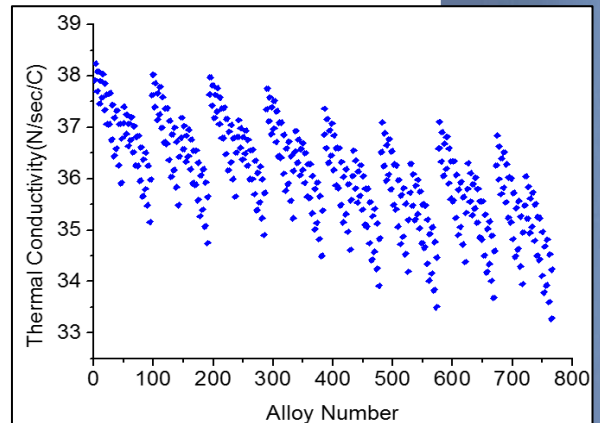
system ("pause");
exit (0);
```

< API 프로그래밍 샘플 >

JMatPro API reference guide

- Overview
- API modules
 - Core
 - Solver
 - Coldfire
 - Solidification
 - jmpExcludeSolidificationPhases()
 - jmpRunSolidificationCalculation()
 - jmpSetAustenitisationTemperatureReadMode()
 - jmpSetCastIronType()
 - jmpSetGraphiteFinalFraction()
 - jmpSetQuenchRate()
 - jmpSetSolidificationModel()
 - jmpSetSolidificationPhaseReadMode()
 - jmpSetSolidificationPhases()
 - jmpSetSolidificationTemperatures()
 - TTT
 - CCT
 - Cooling
 - jmpRunCoolingCalculation()
 - jmpSetConstantCoolingRates()
 - jmpSetCoolingProfileFilename()
 - jmpSetCoolingProfileType()
 - jmpSetCoolingTemperatures()
 - jmpSetGrainSize()
 - jmpSetPhasesCheck()
 - Troubleshooting

< API 제공함수 샘플 >



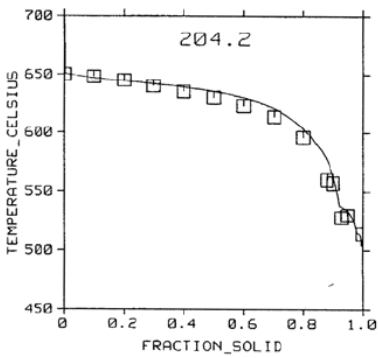
< 고열전도를 합금설계 사례 >

Validation

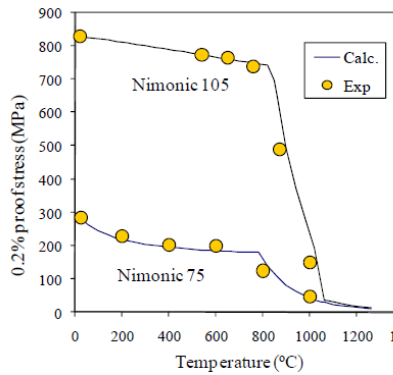
검증 사례

"JMatPro는 안정/준안정 상평형 계산, 응고 거동과 물성계산, 열-물리적 물성, 상변태 물성, Ni계 초합금, 철합금 등에 대한 기계적 강도 등의 계산이 가능한..... **유일한** 소프트웨어입니다." -사용자로부터-

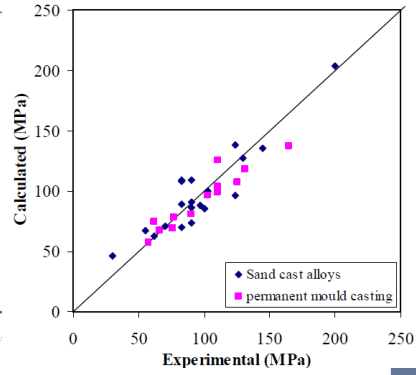
JMatPro는 다양한 검증사례들에 대해 홈페이지와 소프트웨어에 내재된 문서 형태로 자료를 제공하고 있습니다.



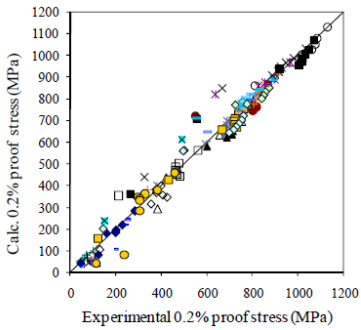
< AI 응고분율 >



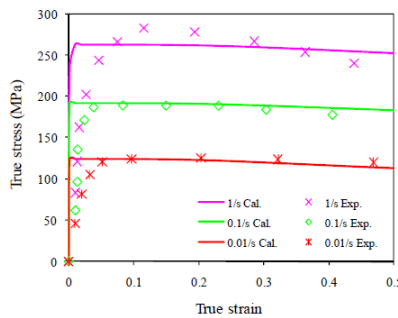
< Ni 초합금 고온강도 >



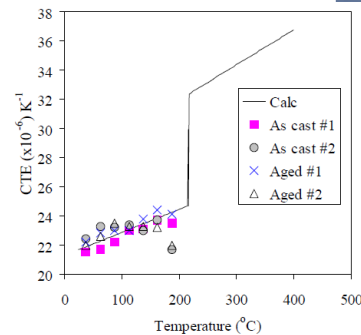
< AI 주조강도 >



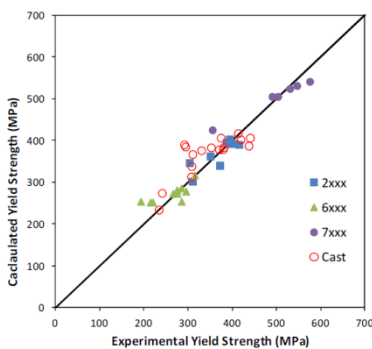
< Ni 초합금 항복강도 >



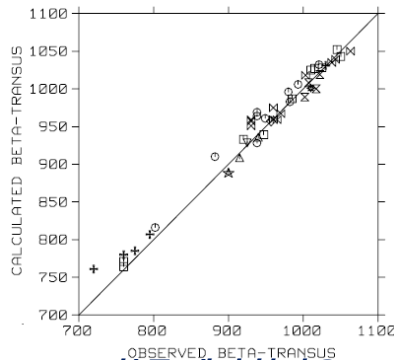
< 718 유동응력 >



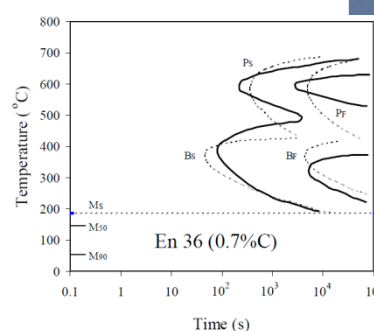
< Solder 열팽창계수 >



< AI 합금 열처리후 강도 >



< Ti 합금 베타전이온도 >



< TTT 선도 >

Version 14.0
 (Data export to 3rd party simulation S/W)
 (Additional API module available)***

	Al alloys	Mg alloys	Cast Irons	General Steels	Stainless Steels	Ni alloys	Co alloys	Ti alloys	Zr alloys	Solder alloys	Copper alloys
Phases	Temperature/Concentration stepping	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Isopleth	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Metastable phases	✓	✓								
Physical properties	Standard physical properties*	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Stacking fault energy				✓	✓	✓				
	Gamma/Gamma' mismatch					✓					
	Magnetic permeability				✓						
Solidification	Phases and physical properties	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Back diffusion/Secondary dendrite arm spacing	✓	✓		✓	✓	✓	✓	✓		
	Cooling curve	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Cast Strength	✓	✓	✓	✓						
	Homogenisation	✓	✓		✓	✓	✓	✓	✓	✓	
Mechanical properties**	O F H T5 T4/T6 T8 Heat treatment strength	✓									
	Room temp strength/hardness	✓			✓	✓	✓	✓			
	High temp strength/hardness	✓			✓	✓	✓	✓			
	Flow-stress curve & rupture strength	✓	✓		✓	✓	✓	✓	✓		
	Creep and rupture life					✓	✓	✓	✓		
	Jominy hardenability				✓						
	Fatigue tool				✓	✓	✓	✓	✓		
	FLD/Processing Map	✓	FLD		✓	✓	✓	✓	✓		
Fracture toughness	✓			✓				✓			
Phase transformations	TTT/CCT diagram	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓		
	TTA diagram				✓						
	Reaustenitisation phases and properties				✓						
	Plasticity coefficients				✓						
	Isothermal transformations	✓	✓		✓	✓	✓	✓	✓	✓	
	Energy changes			✓	✓	✓	✓	✓			
	Cooling transformations				✓			✓	✓		
	Martensite formation				✓	✓		✓			
	Stress induced martensite				✓	✓					
	Quenching and welding data				✓						
	Simultaneous carbide precipitation/strength				✓						
	Temperature-time-precipitation of M(C,N), MN, AlN				✓	✓					
	Tempering hardness and properties				✓						
	Gamma'/Gamma" coarsening						✓				
Hot Rolling grain size/recrystallization/rolling force				✓							
Evolution of microstructure & strength						✓					
Data export	Forging simulation data	✓			✓	✓	✓	✓			
	Welding and heat treatment simulation data				✓						
	Solidification simulation	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Other	Carburisation				✓	✓					
	C diffusion in weld				✓						
	Dissimilar metal welds	✓				✓		✓			
	Pitting resistance					✓					

* Specific heat – enthalpy - density - molar volume - thermal expansion coefficient - thermal conductivity - electrical conductivity/resistivity - surface tension - liquid viscosity/diffusivity- Poisson's ratio- Young's/shear/bulk modulus. These properties can be calculated during/after heat treatment or during solidification for the whole temperature range including liquid phase. When relevant, properties are given for each phase.
 ** Proof stress, tensile stress and hardness are calculated at any temperature up to the melting point.
 *** It allows you to automate and develop tasks within your own models and to integrate them into your own software via c/c++ programming.



Sente Software

Surrey Technology Centre
The Surrey Research Park
40 Occam Road
Guildford, Surrey, GU2 7YG
United Kingdom
Phone: +44 (0)1483 685476
www.sentessoftware.co.uk
info@sentessoftware.co.uk

solution lab

(주) 솔루션랩

대전광역시 서구 둔산중로 20, 1203
Tel: 042-628-0789
Fax: 042-623-0780
www.solution-lab.co.kr
info@solution-lab.co.kr