

CTC

Challenging Tomorrow's Changes

Thermo-Calc Software



TC-Pythonのご紹介

1. TC-Pythonの概要
2. TC-Pythonの計算方法
3. TC-Pythonの活用例

- 1. TC-Pythonの概要**
2. TC-Pythonの計算方法
3. TC-Pythonの活用例

Thermo-Calc Software

平衡計算

平衡相, 多元系状態図, 準安定相, パラ平衡, 駆動力, エンタルピー, 固溶限, 液相/固相面, 比熱, 潜熱, ポテンシャル図, 電位-pH図, 凝固過程...

体積

密度, 熱膨張係数

液相の特性

表面張力, 粘性

プロパティモデル

液相/固相温度, 界面エネルギー, 割れ感受性係数, 降伏応力, T0温度, スピノーダル, 凍結温度での平衡特性, 柱状晶-等軸晶遷移, ...

電気特性

電気抵抗, 電気伝導

熱特性

熱抵抗, 熱伝導

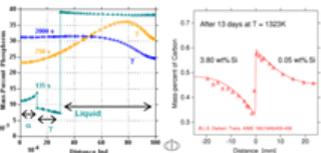
+ 拡張モジュール



拡散モジュール DICTRA

適用例

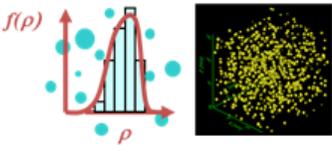
浸炭, 窒化, 接合, 均質化, 凝固, 化合物の成長・消失, ミクロ偏析...



析出モジュール TC-PRISMA

計算機能

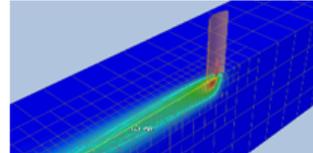
粒径分布, 数密度, 平均粒径, 体積分率, 降伏応力, TTP曲線, CCP曲線...



AMモジュール

適用例

AMプロセスにおける温度分布, 溶融池形状, 溶融池の物性の評価...



冶金プロセス モジュール

適用例

BOF, アーク炉, LF, ...

鉄鋼向け プロパティモデル

計算機能

TTT, CCT曲線, 変態点, 強度, ...

Ni合金向け プロパティモデル

計算機能

APBエネルギー, ひずみ時効割れ, ...

Ti合金向け プロパティモデル

計算機能

合金強度, マルテンサイト温度, ...

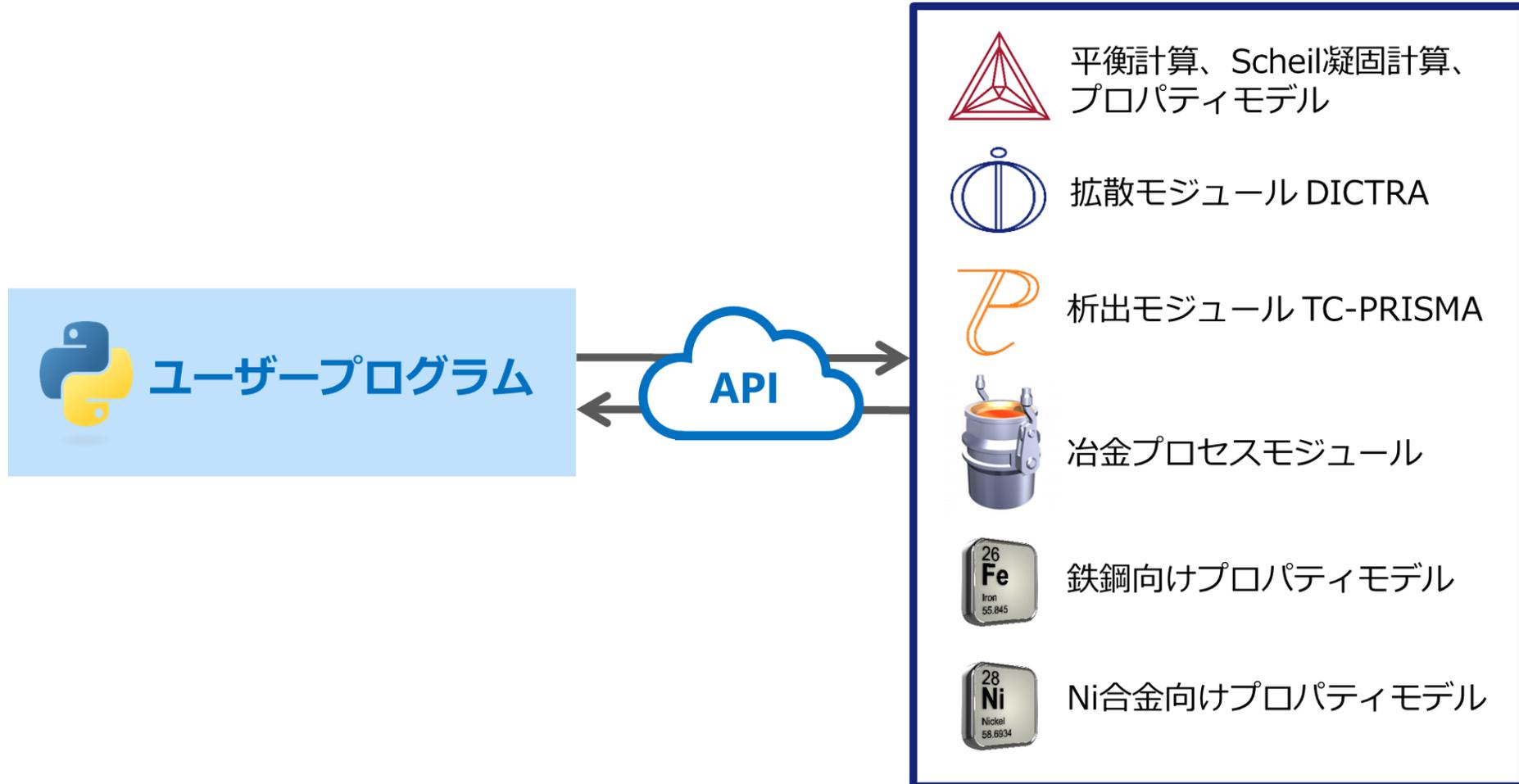
プログラミング インターフェース

SDK

- TC-Python (Python)
- TQ-interface (Fortran)
- TC-Toolbox (MATLAB)



ユーザが作成したPythonプログラム中で Thermo-Calcの各種計算ルーチン呼び出すためのPython-API



1. TC-Pythonの概要

2. TC-Pythonの計算方法

- TC-Pythonを使用したコーディングの流れ
- 温度-相平衡分率の計算

3. TC-Pythonの活用例

ライブラリ

Thermo-Calc

- ・ TC-Python

プロット

- ・ Matplotlib

数値計算

- ・ Scipy
- ・ Numpy

機械学習

- ・ Scikit-learn
- ・ Pytorch

など

系の定義

データベース

元素の選択

相の設定

化学種の設定

GESバージョン
など

計算

一点平衡計算

一軸計算

状態図計算

バッチ平衡計算

Scheilモジュール

プロパティモデル

DICTRA

TC-PRISMA

活用

グラフ

- ・ 等高線図

テーブル

- ・ CSV
- ・ Excel

データサイエンス

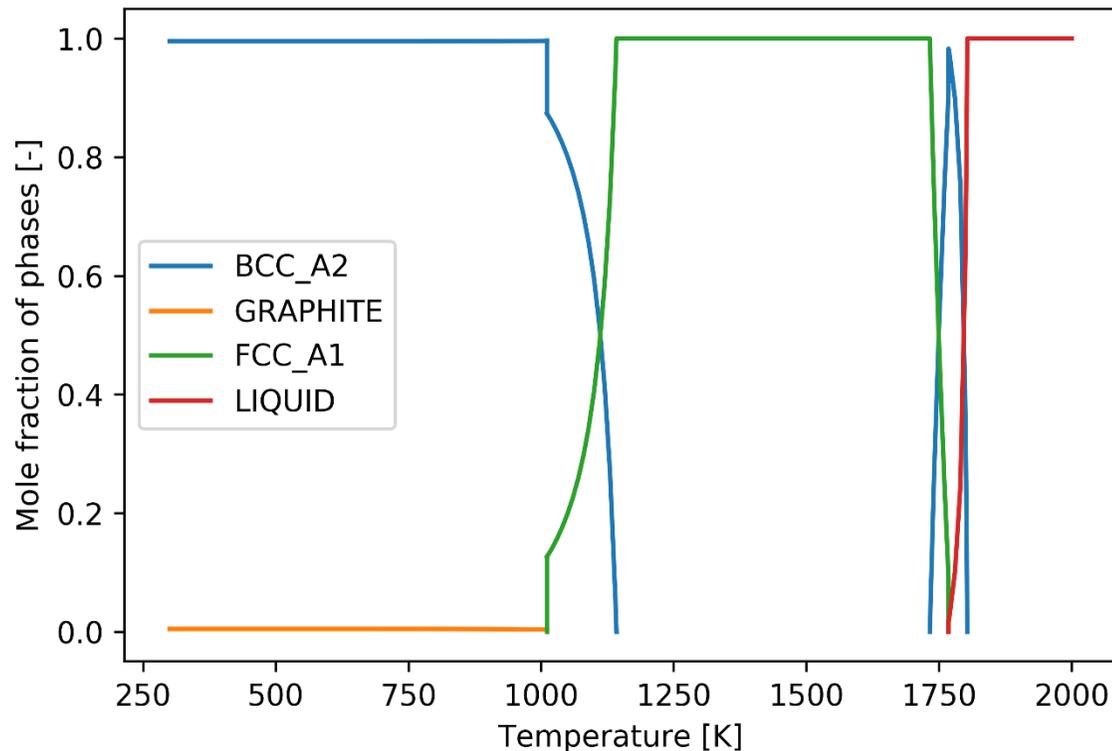
- ・ データの蓄積
- ・ 機械学習
- ・ ベイズ最適化

など

```
#TC-Pythonのインポート
from tc_python import *
#グラフを描画するライブラリのインポート
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
with TCPython() as sess:
    #データベースや系の設定
    sys = (sess.select_database_and_elements("TCFE9", ["Fe", "C"]).
           get_system())
    #プロパティ図計算の呼び出し
    poly = sys.with_property_diagram_calculation()
    #計算の初期条件
    poly = poly.set_condition("T", 1000)
    poly = poly.set_condition("W(C)", 0.001)
    #変数の範囲設定
    axis1 = CalculationAxis("T").set_min(300).set_max(2000)
    poly = poly.with_axis(axis1)
    #計算
    result = poly.calculate()
    #結果の取得
    lineGroup = result.get_values_grouped_by_quantity_of("T", "NP(*)")
#グラフの描画
plt.figure(dpi=600)
for line in lineGroup.values():
    print(line)
    plt.plot(line.x, line.y, label = line.label)
plt.legend()
plt.ylabel("Mole fraction of phases [-]")
plt.xlabel("Temperature [K]")
plt.show()
```

Fe-0.1C wt%における温度-平衡相分率



1. TC-Pythonの概要

2. TC-Pythonの計算方法

3. TC-Pythonの活用例

- ① 複数の条件やプロセスでの自動計算・出力
- ② 等高線図による分析
- ③ 数値計算ライブラリとの連携
- ④ 機械学習ライブラリとの連携

1. TC-Pythonの概要

2. TC-Pythonの計算方法

3. TC-Pythonの活用例

- ① 複数の条件やプロセスでの自動計算・出力
- ② 等高線図による分析
- ③ 数値計算ライブラリとの連携
- ④ 機械学習ライブラリとの連携

計算のサブルーチンを実装することで、計算条件を入力するだけで自動的な計算の実行と結果の取得が可能

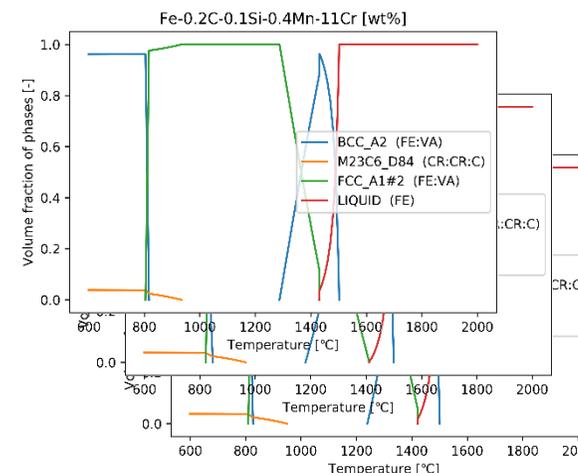
計算条件

C	Mn	Si	Ni	Cr
0.1	1.0	0.1	2	18
0.2	1.5	0.2	4	20
0.3	2.0	0.3	6	22
		⋮		

TC-Pythonで計算

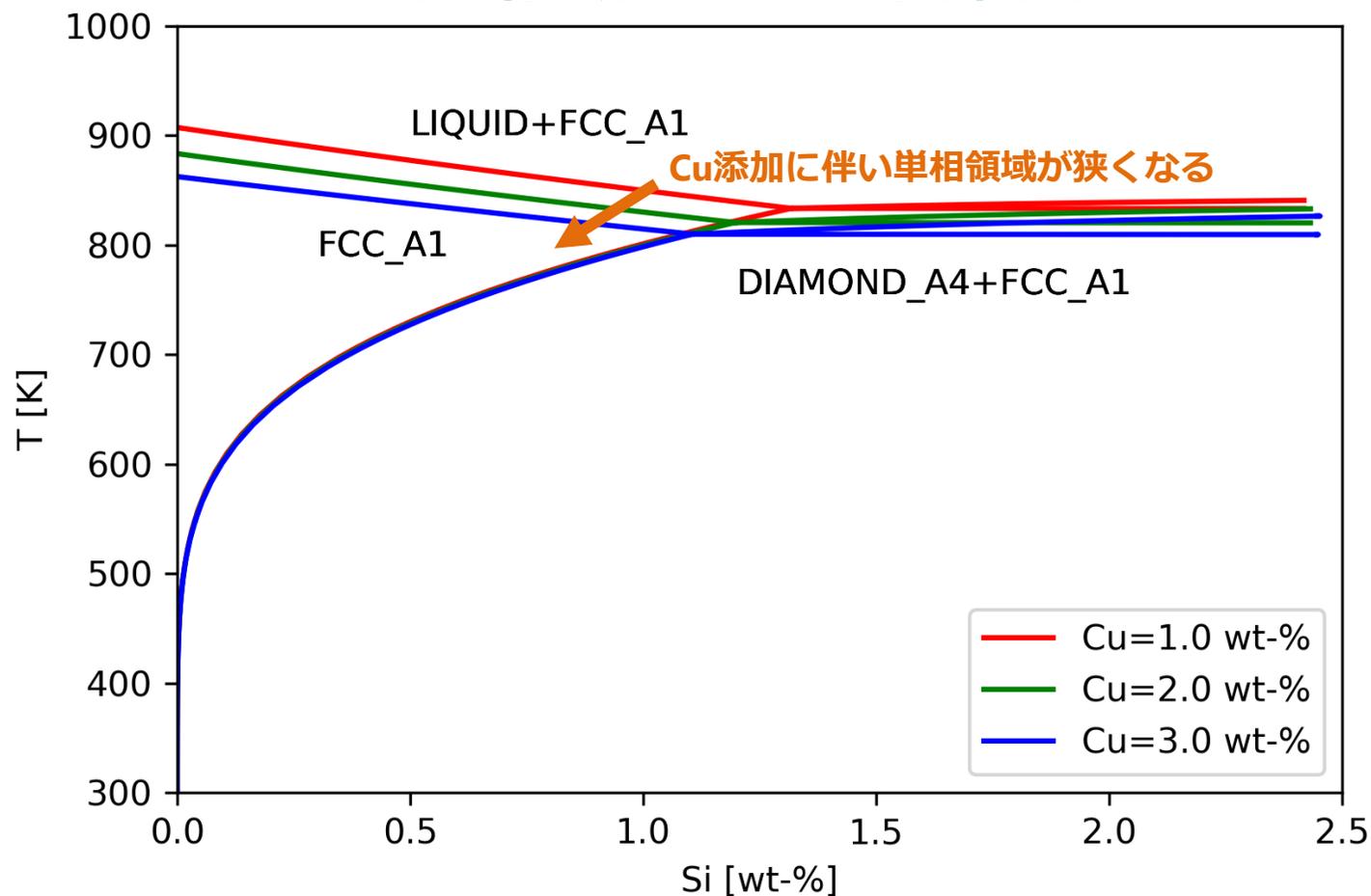


結果の出力（グラフやテーブル）



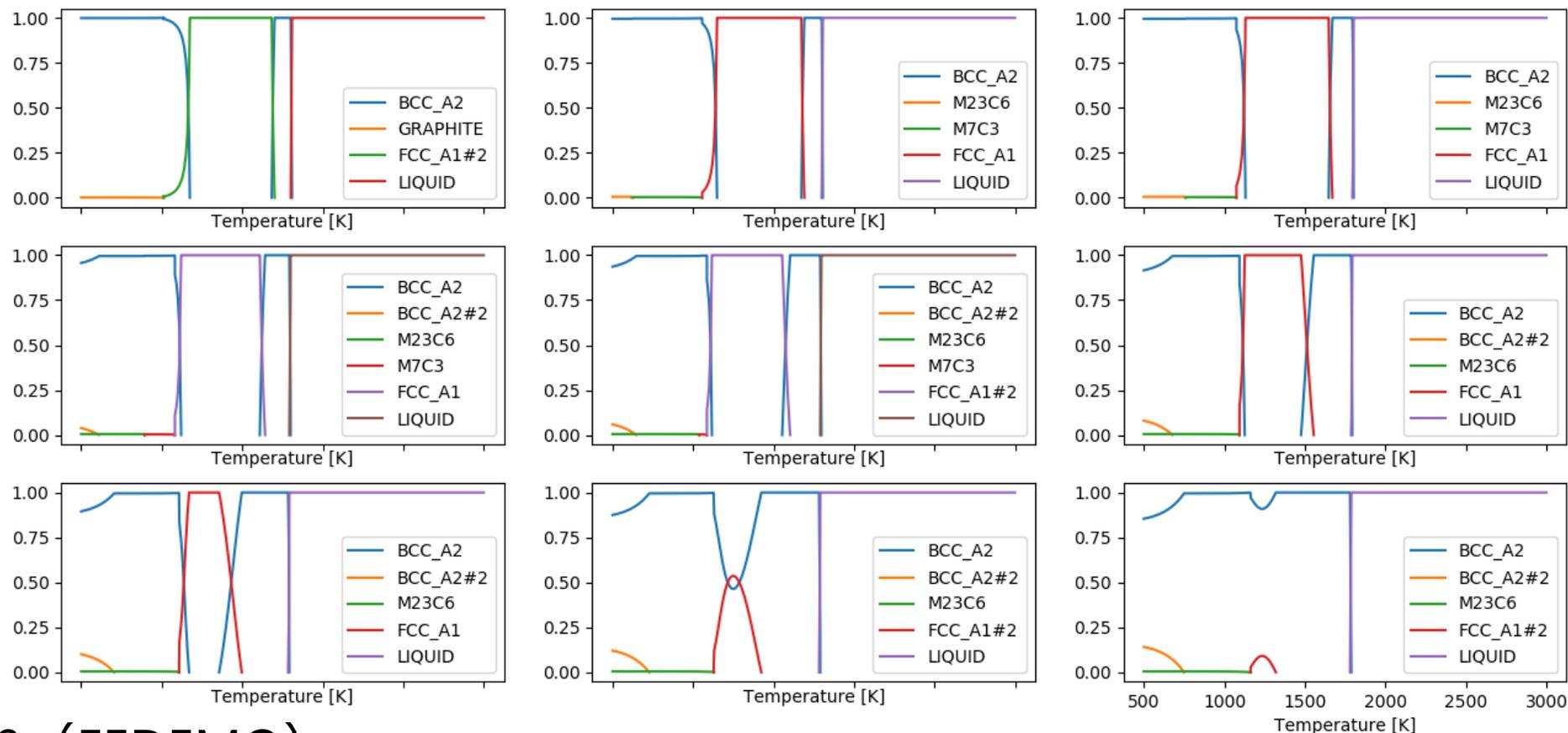
アルミニウム合金の各Cu含有量でのFCC単相領域の評価

Cuの含有量が1~3wt%での状態図



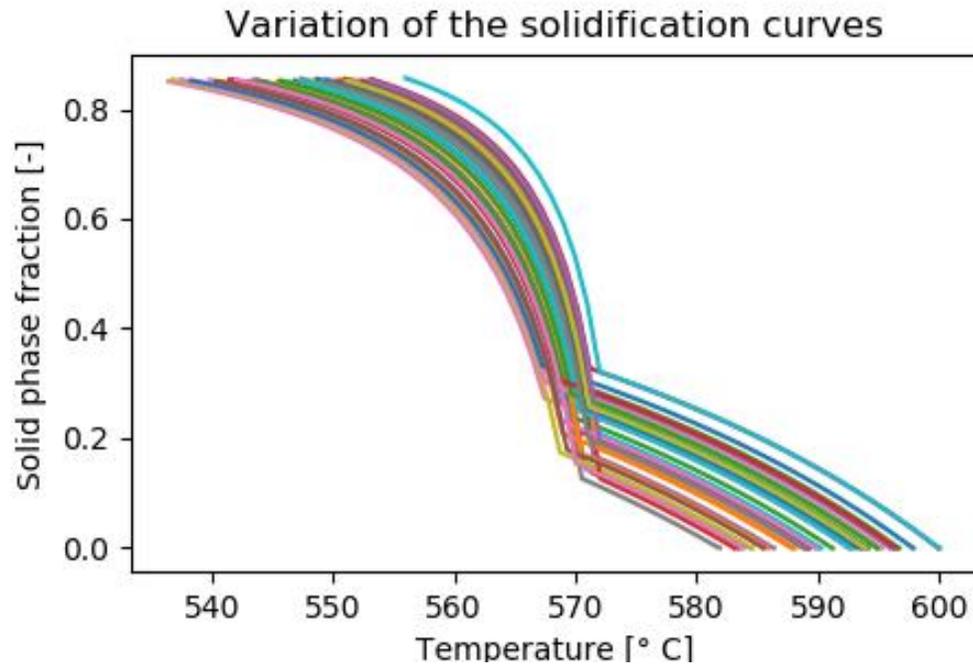
並列処理によりFe合金の各Cr含有量における温度-平衡相分率の計算を逐次処理に比べて高速に実行可能

Crの含有量が0~2.5 wt%での温度-平衡相分率

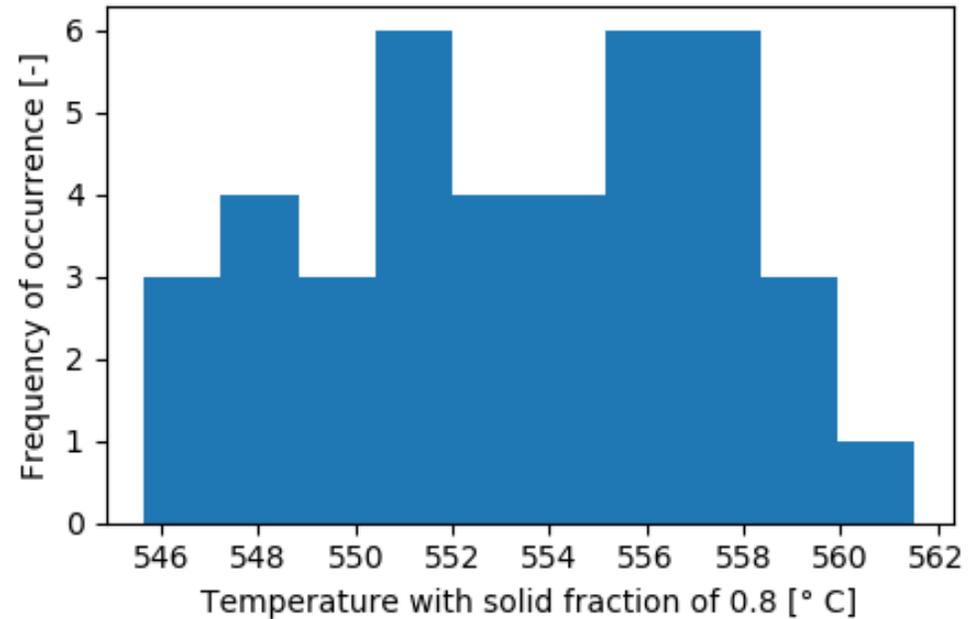


- 仕様の範囲内のランダムな初期組成のAl合金における凝固計算
- グラフの重ね合わせやヒストグラムでの結果の取得が容易に可能

温度-凝固分率



8割凝固完了時の温度の分布



1. TC-Pythonの概要

2. TC-Pythonの計算方法

3. TC-Pythonの活用例

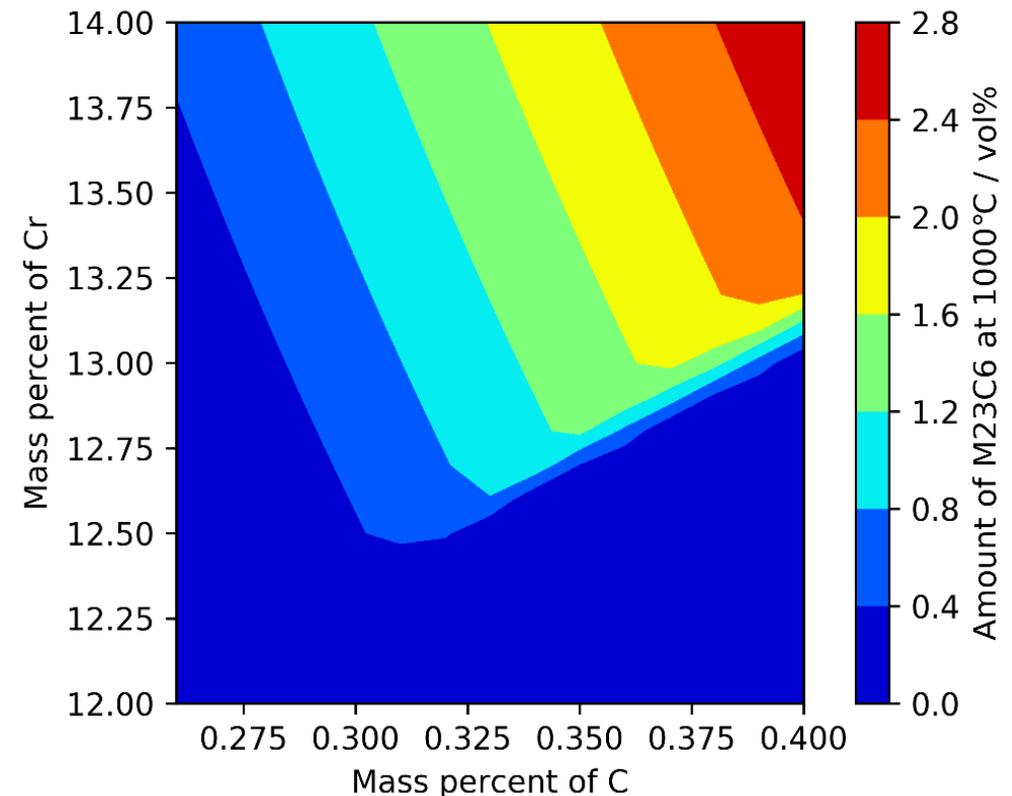
- ① 複数の条件やプロセスでの自動計算・出力
- ② **等高線図による分析**
- ③ 数値計算ライブラリとの連携
- ④ 機械学習ライブラリとの連携

Thermo-Calcで計算できるパラメータへの2変数による影響を可視化

Thermo-Calcから得られる情報

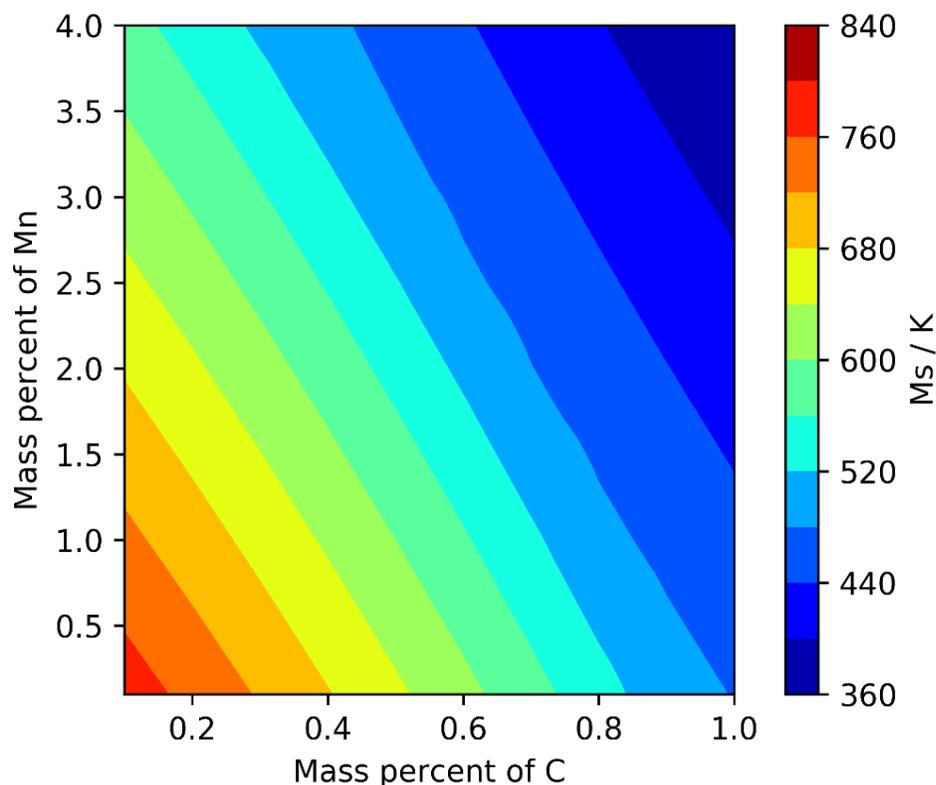
- 平衡相分率
- 固相線、A1点、Acm線などの変態点
- 密度、粘度、表面張力、電気特性、熱特性
- 割れ感受性などのプロパティモデル
など

SUS420J2におけるCとCrの組成による炭化物M₂₃C₆の体積分率の変化

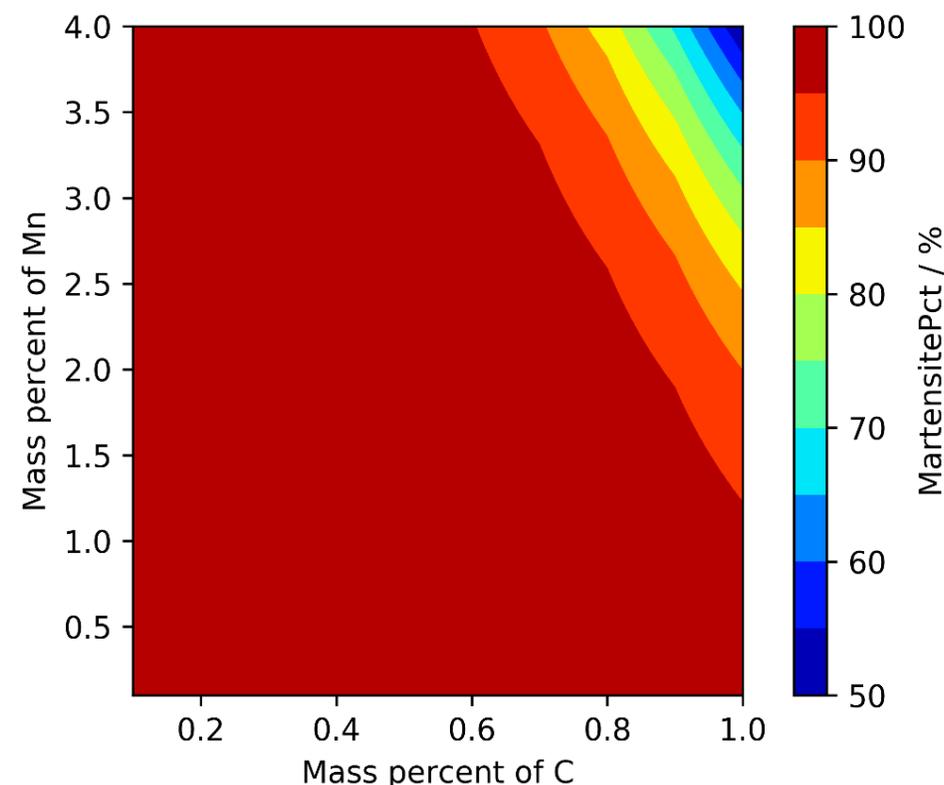


マルテンサイトモデルによりCとMnの添加による焼き入れ性への影響を評価
(鉄鋼向けプロパティモデルを使用)

マルテンサイト変態開始温度

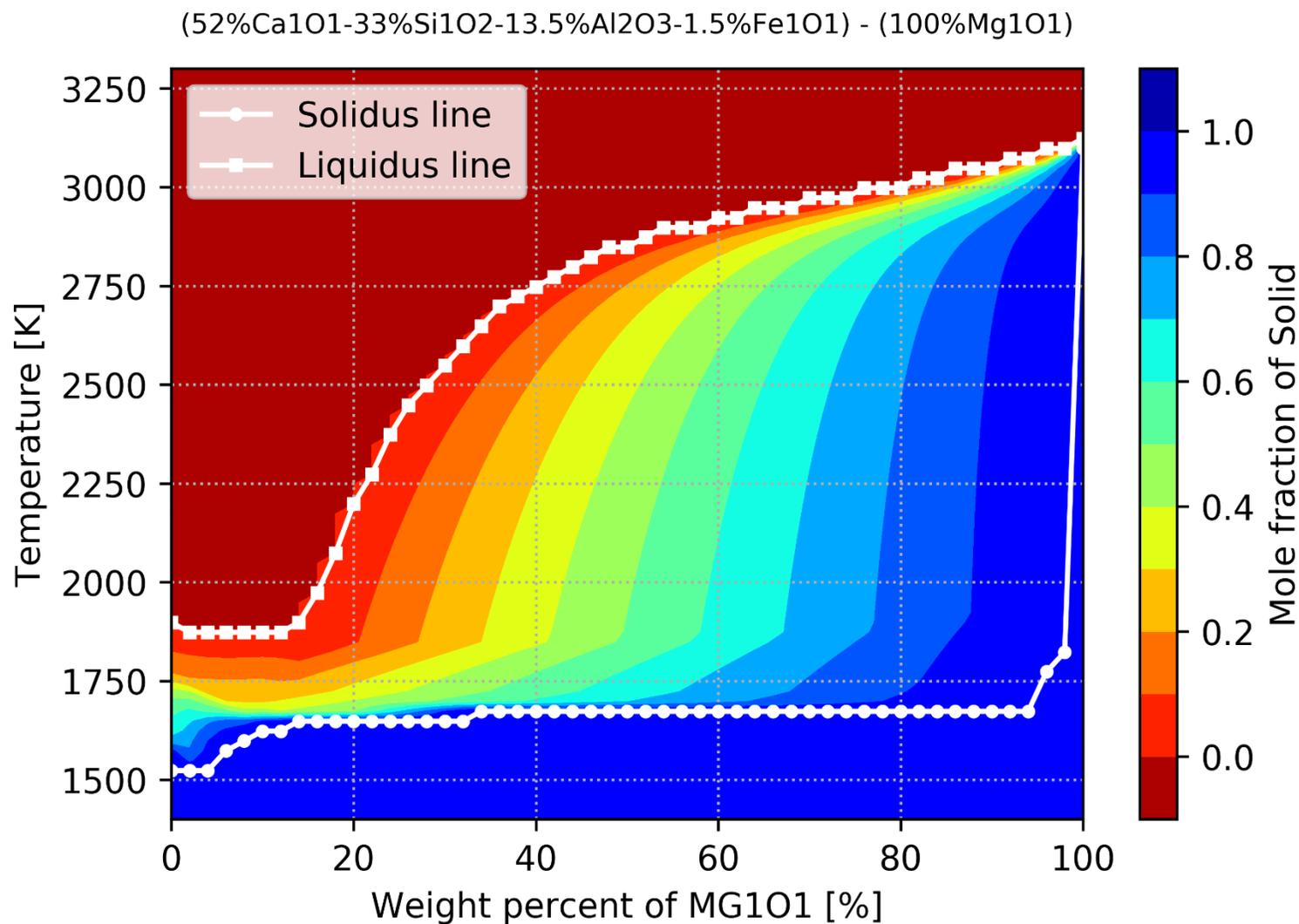


室温でのマルテンサイト分率

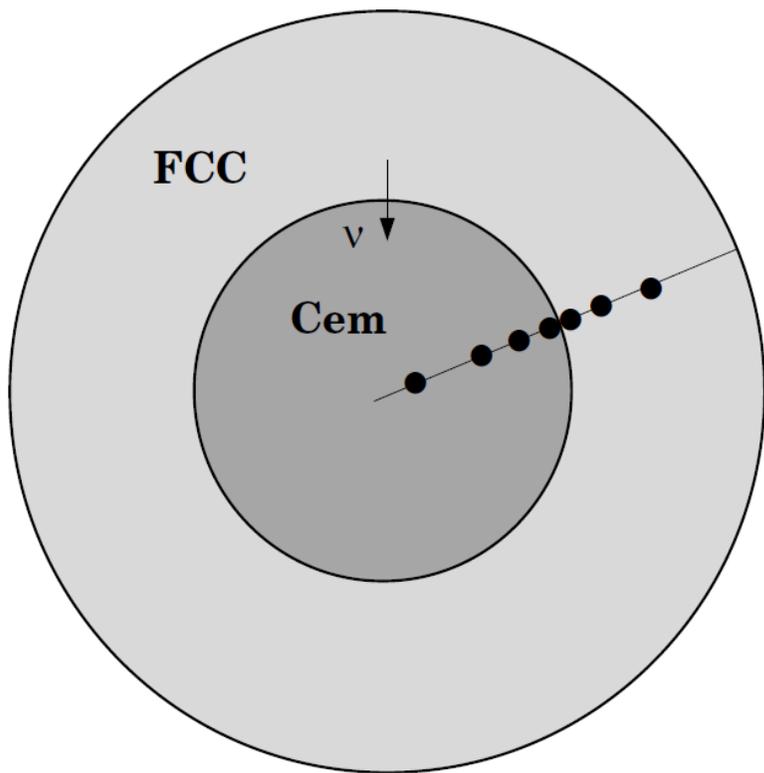


※鉄鋼向けプロパティモデルはTCFE9 + MOBFE4以降のライセンスが必要です。

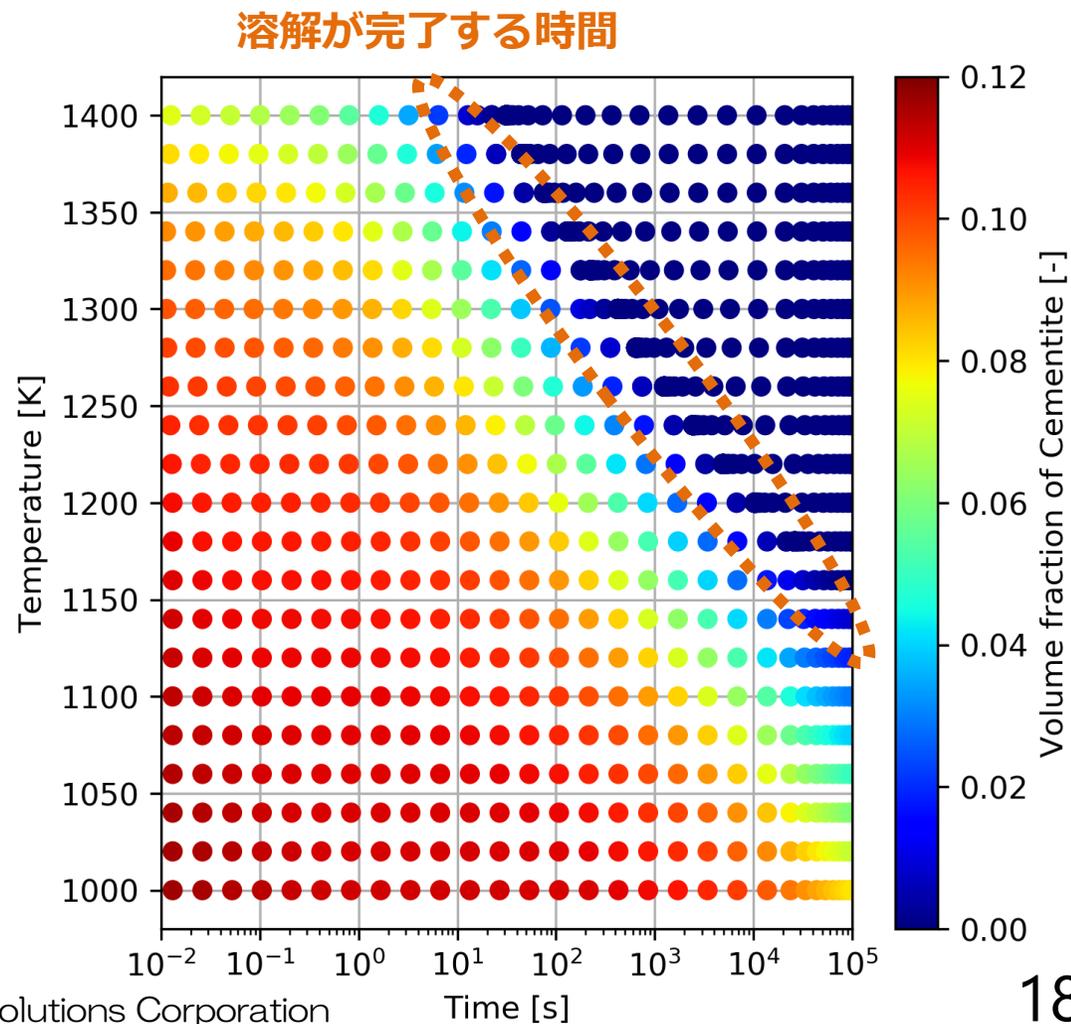
固液混合時の見かけのスラグの粘度に関する固相分率を評価



各温度で等温熱処理を行った際のセメントタイトの溶解に要する時間を評価
(DICTRAを使用)



CUI例題exb2を応用(FEDEMO, MOBFE4)



1. TC-Python

2. TC-Pythonの計算方法

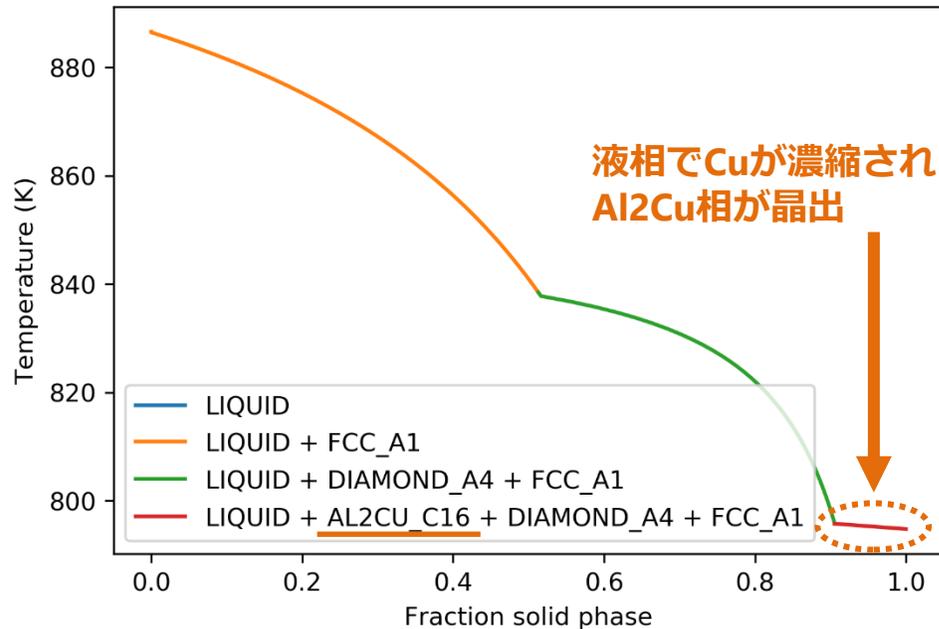
3. TC-Pythonの活用例

- ① 複数の条件やプロセスでの自動計算・出力
- ② 等高線図による分析
- ③ **数値計算ライブラリとの連携**
- ④ 機械学習ライブラリとの連携

計算対象：鋳物用アルミニウム合金(AC2B.2)

1. Scheilモジュールで鋳造(凝固)後の組織を評価し、固相中の元素濃度を導出
2. 1で得られた結果を用いて各格子点の組成を設定し、DICTRAで均質化処理

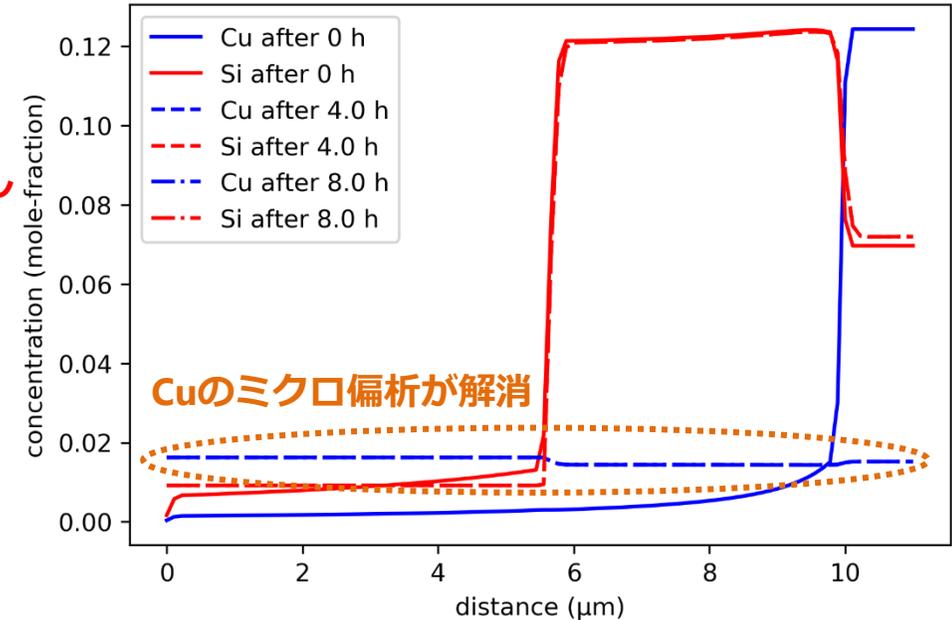
Scheilモジュールによる凝固シミュレーション



凝固完了時の固相中の元素濃度を導出し DICTRAにインプット



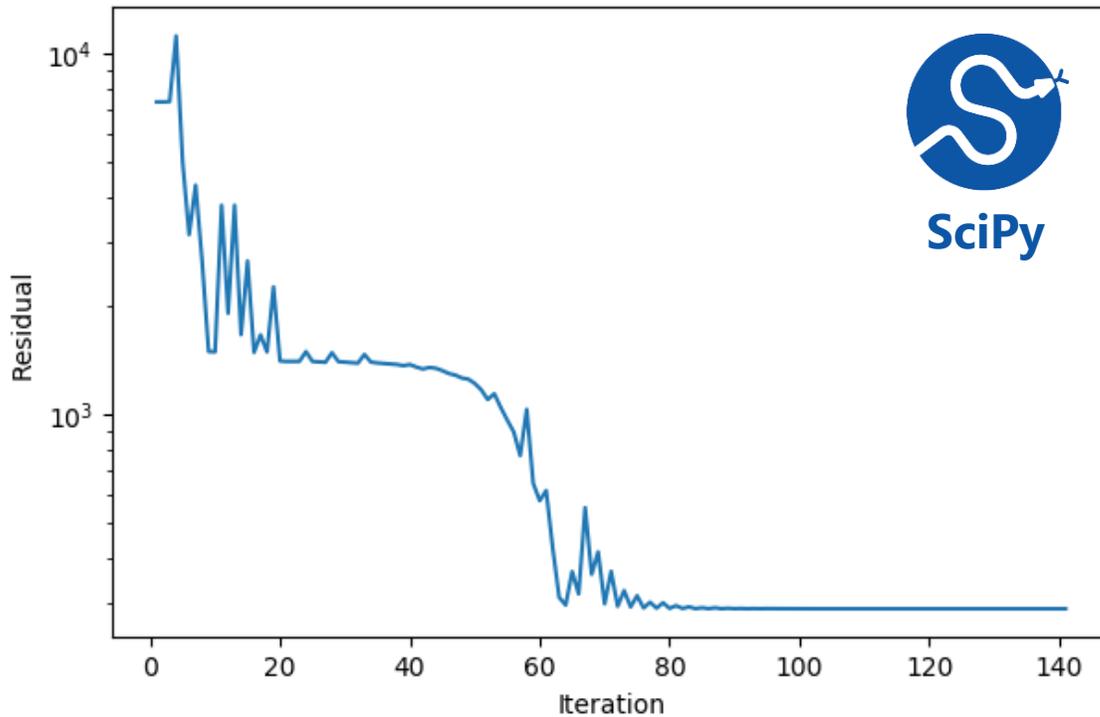
DICTRAによる均質化シミュレーション



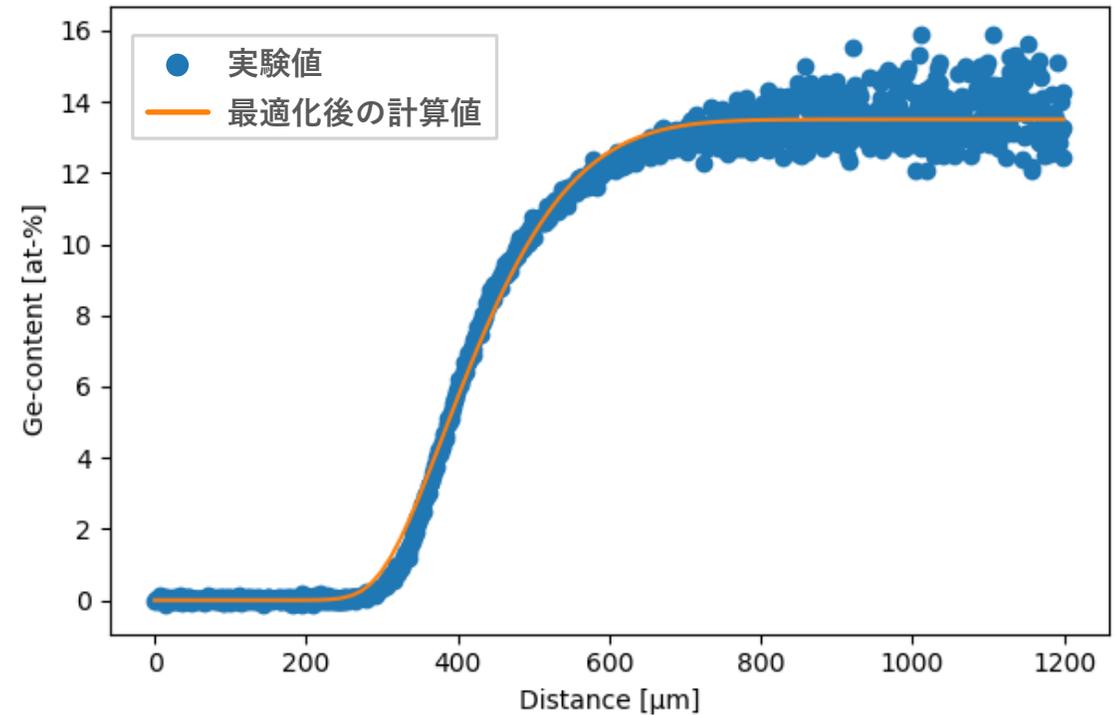
例題D07 (ALDEMO, MALDEMO)

最小二乗法により実験値の濃度プロファイルを用いて動力学データベース中のNi-Geの移動度パラメータを最適化

試行回数 vs 残差平方和 (実験値との乖離)



Geの濃度プロファイル



* Rettig, Ralf, Susanne Steuer, and Robert F. Singer. 2011. "Diffusion of Germanium in Binary and Multicomponent Nickel Alloys". Journal of Phase Equilibria and Diffusion 32 (3): 198-205.

* Liu, Y.Q., D.J. Ma, and Y. Du. 2010. "Thermodynamic Modeling of the Germanium-nickel System." Journal of Alloys and Compounds 491 (1-2): 63-71.

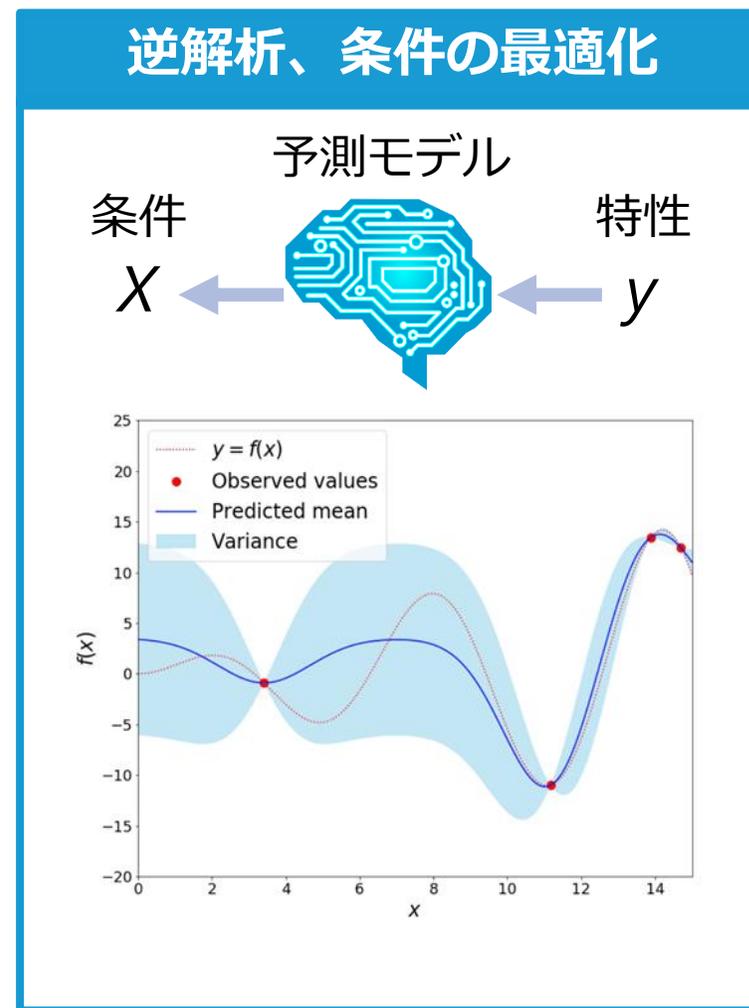
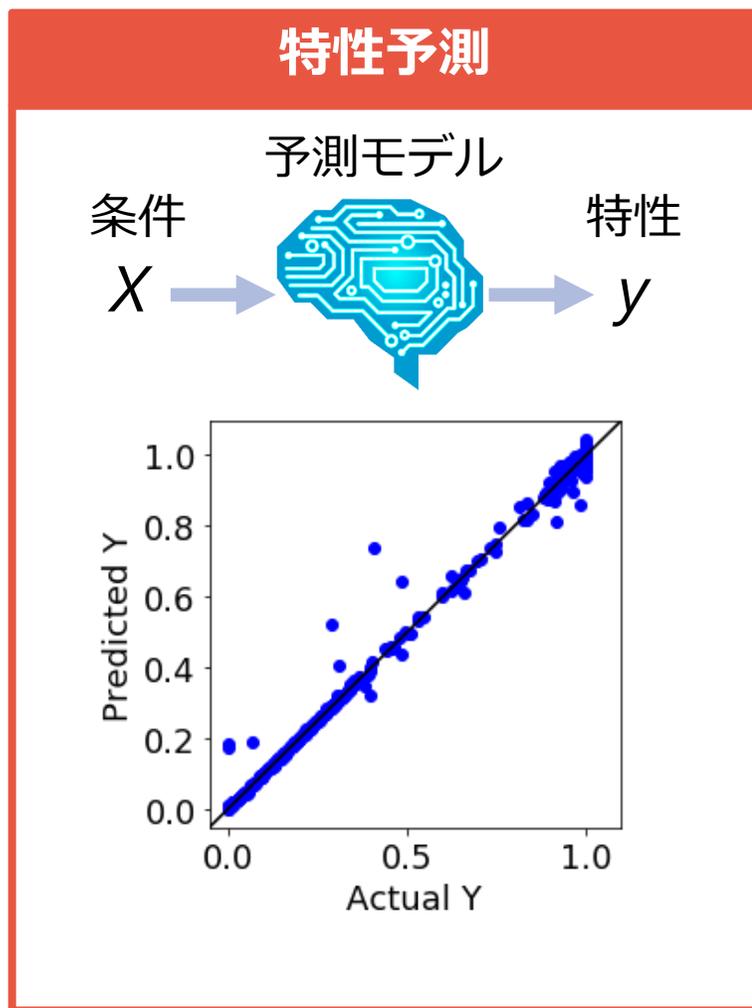
1. TC-Pythonの概要

2. TC-Pythonの計算方法

3. TC-Pythonの活用例

- ① 複数の条件やプロセスでの自動計算・出力
- ② 等高線図による分析
- ③ 数値計算ライブラリとの連携
- ④ **機械学習ライブラリとの連携**

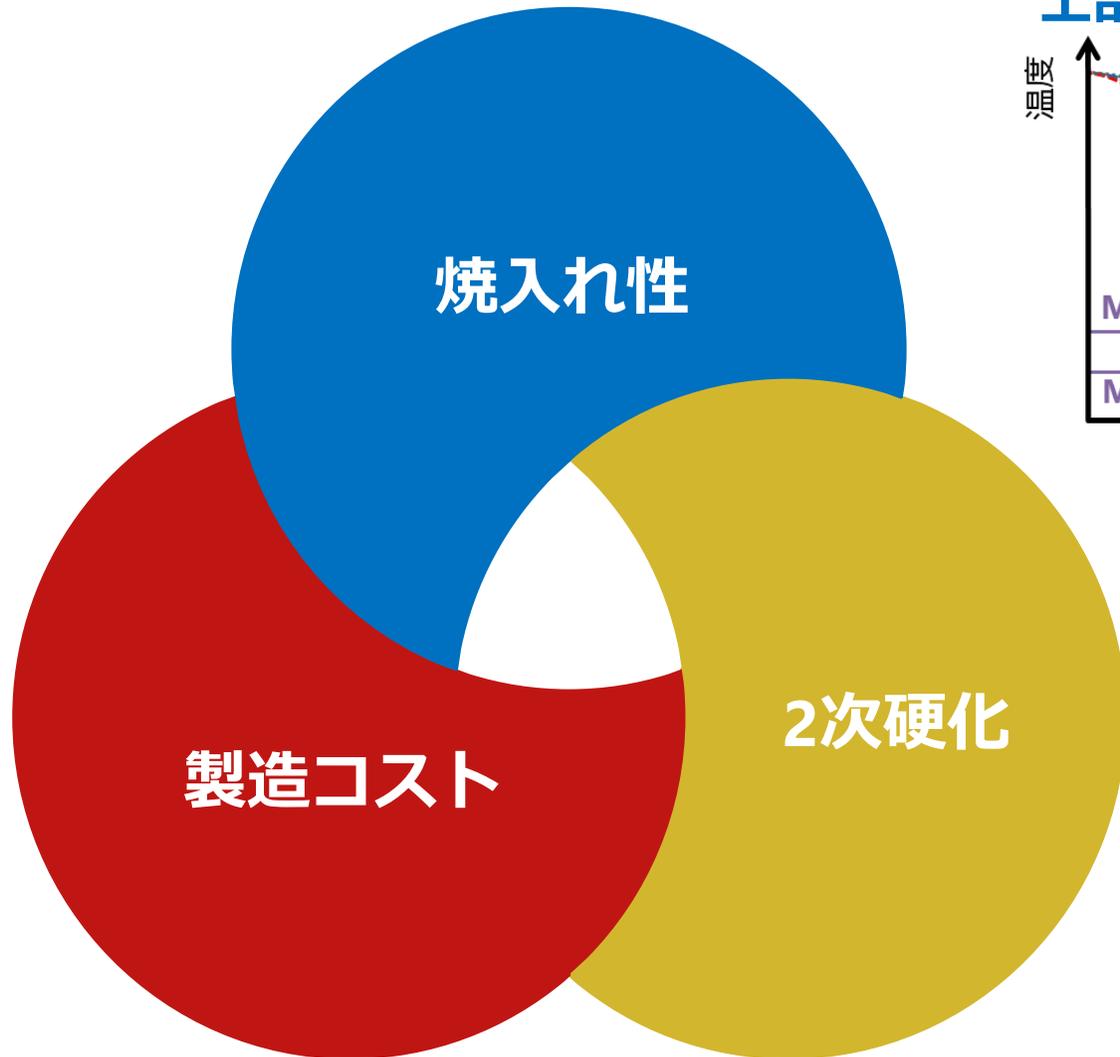
機械学習ライブラリと連携することで特性予測や条件の最適化が可能



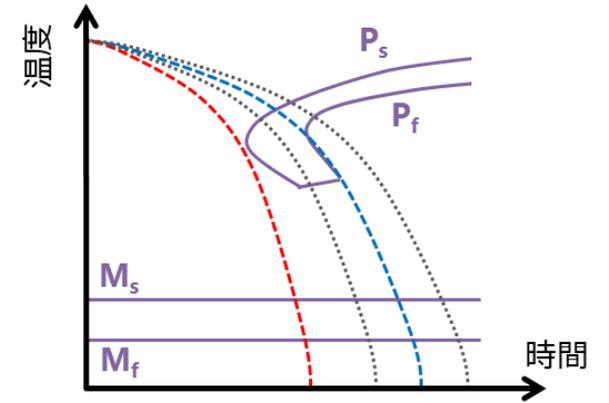
1. 複数の要件を満たすための鉄鋼材料の組成最適化
2. チタン合金における β 相安定化に寄与する組成条件の可視化

1. 複数の要件を満たすための鉄鋼材料の組成最適化
2. チタン合金における β 相安定化に寄与する組成条件の可視化

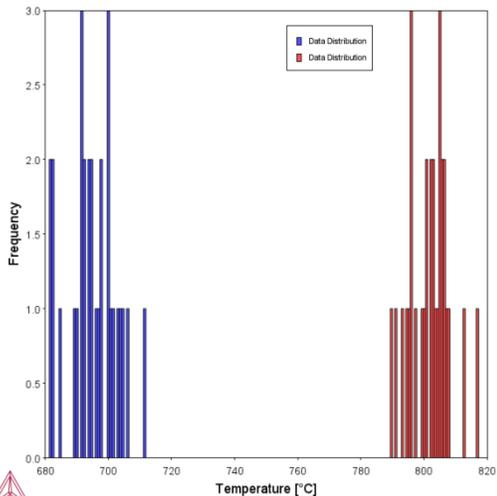
3つの要件を同時に満たす組成最適化を実施



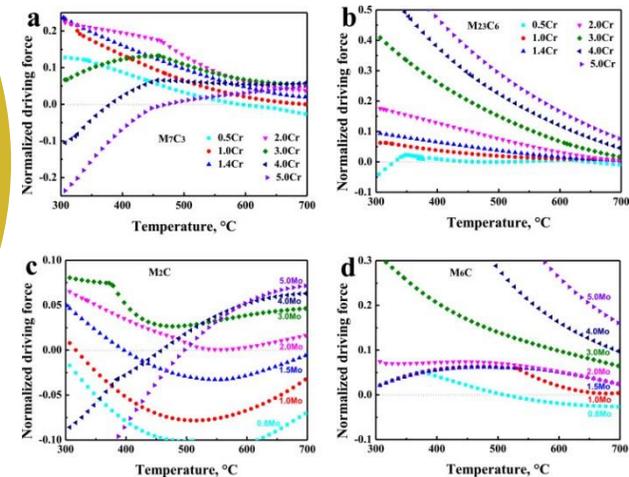
上部臨界冷却速度



A3点



600°Cにおける駆動力



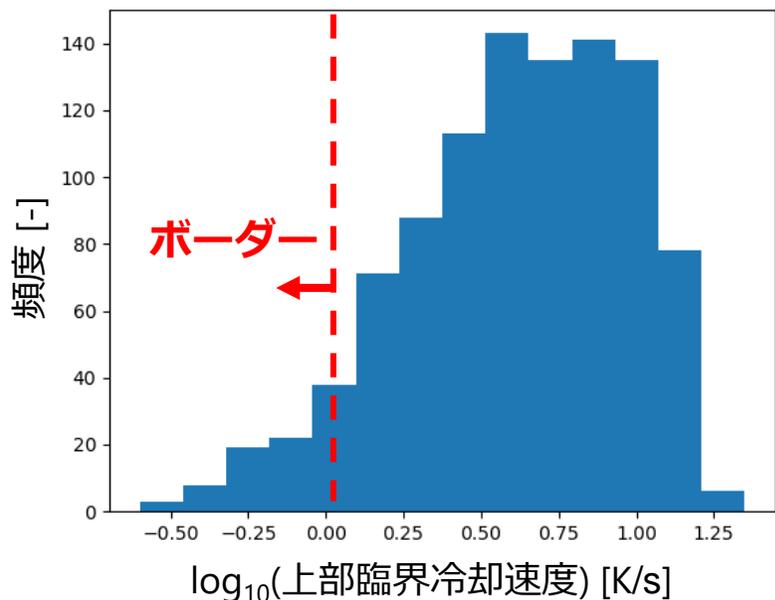
合金系：SKD61

合金組成(wt%)

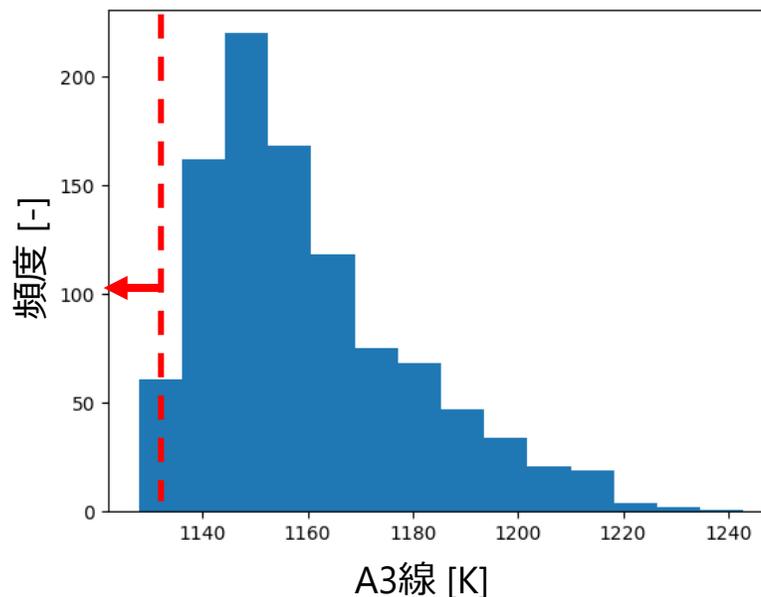
C	Si	Mn	Cr	Mo	V
0.35~0.42	0.80~1.20	0.25~0.50	4.80~5.50	1.00~1.50	0.80~1.15

目標値：事前に規格範囲内でランダムに1000サンプル計算した結果の上位10%

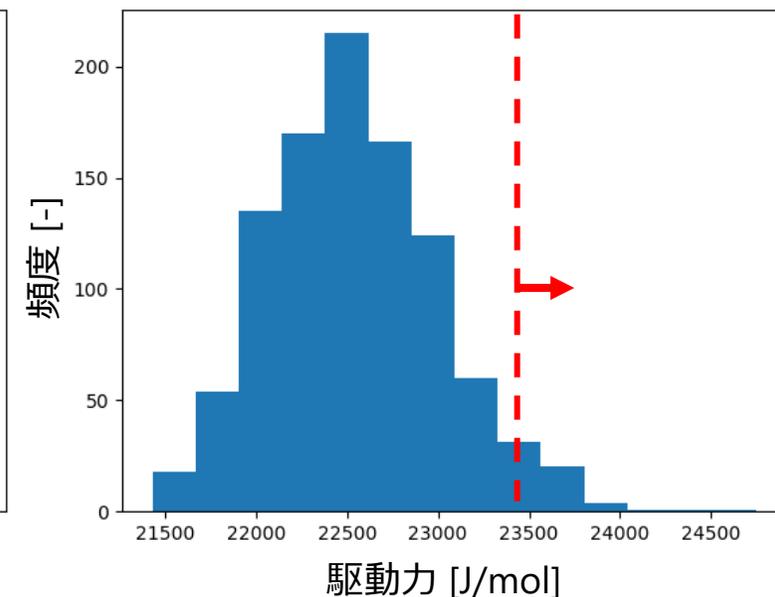
上部臨界冷却速度



A3点



600°CにおけるM2Cの駆動力

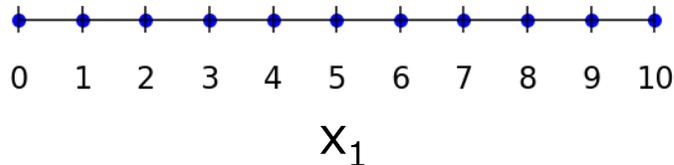


総当たりの探索する場合、考慮する元素が増えると試行回数は指数関数的に増加

各元素を10通りずつ計算すると…

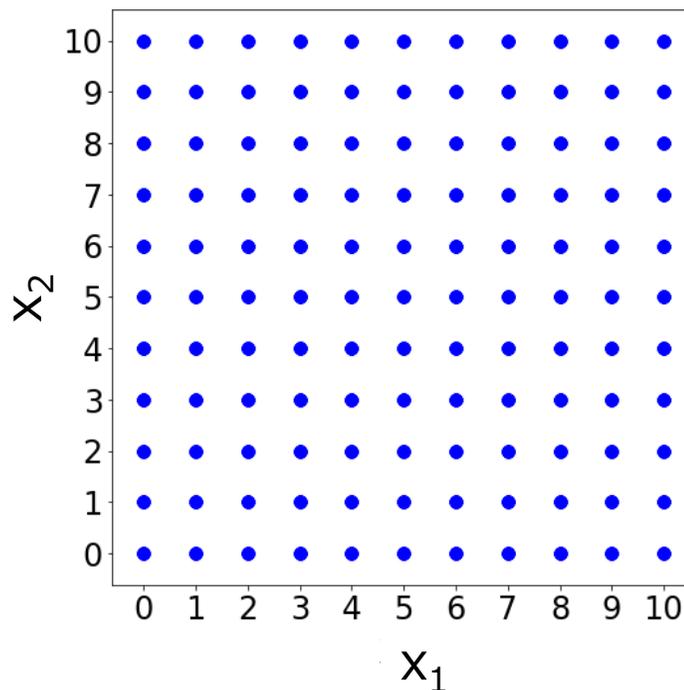
Fe- x_1 C

10^1 通り



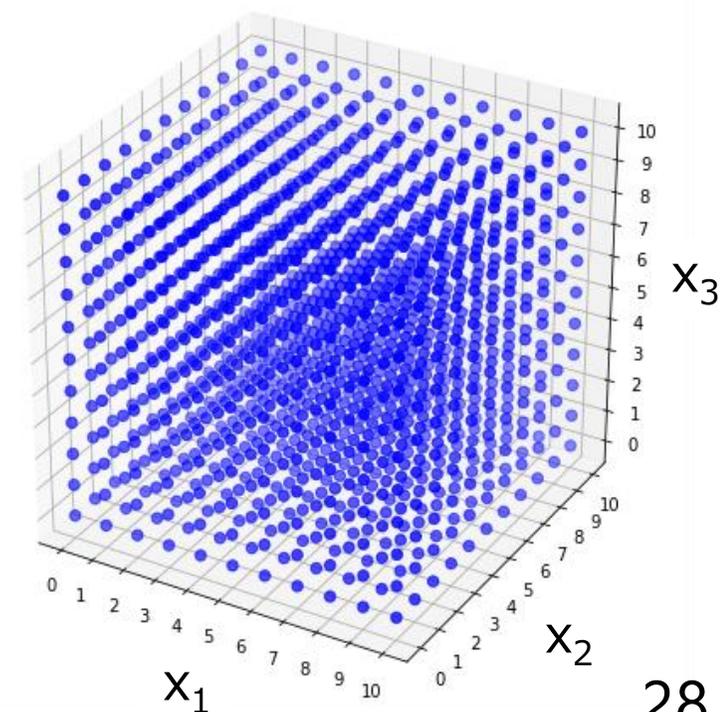
Fe- x_1 C- x_2 Mn

10^2 通り



Fe- x_1 C- x_2 Mn- x_3 Cr

10^3 通り

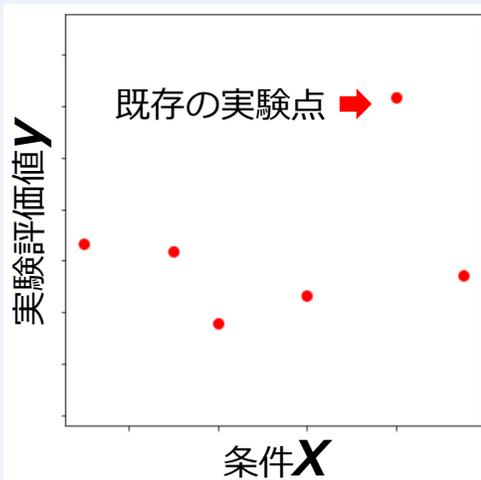


既存のデータと不確かさを考慮して次に探索する条件を決定する手法

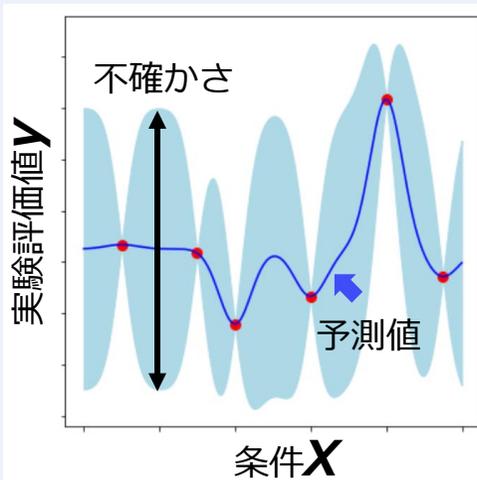
ベイズ最適化の流れ

条件を X , 実験評価値を y とし, y が最小値となる X を探索

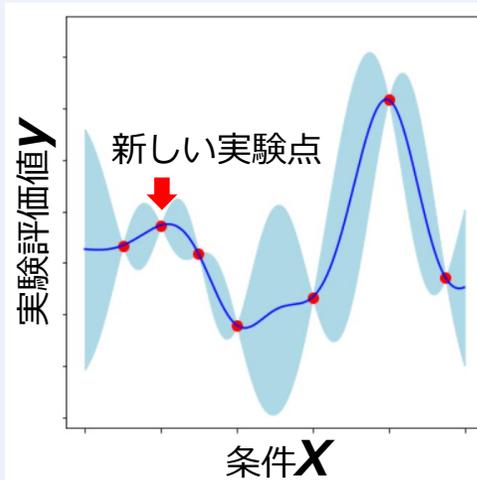
① 既存のデータから
予測モデルを作成



② 予測値と不確かさを
計算

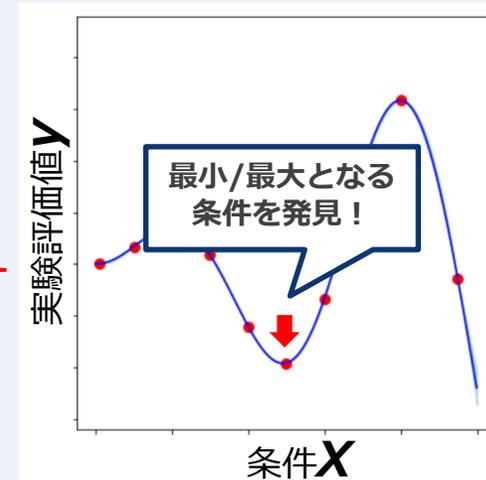


③ 既存のデータと不確かさを
考慮した条件で実験



・・・
繰り返す

④ 繰り返すことで最適値が
得られる



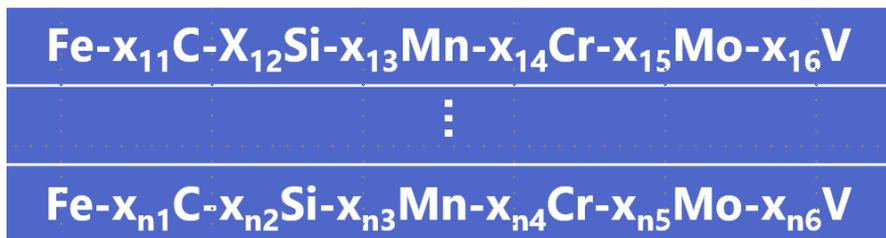
利点

すべての条件を評価しなくても**効率的に最適値に到達**できる

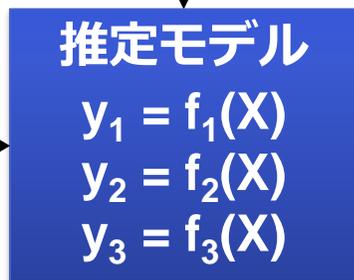
データセット (ランダムサーチ5回分のデータを使用)



組成の候補



モデリング (ガウス過程回帰)



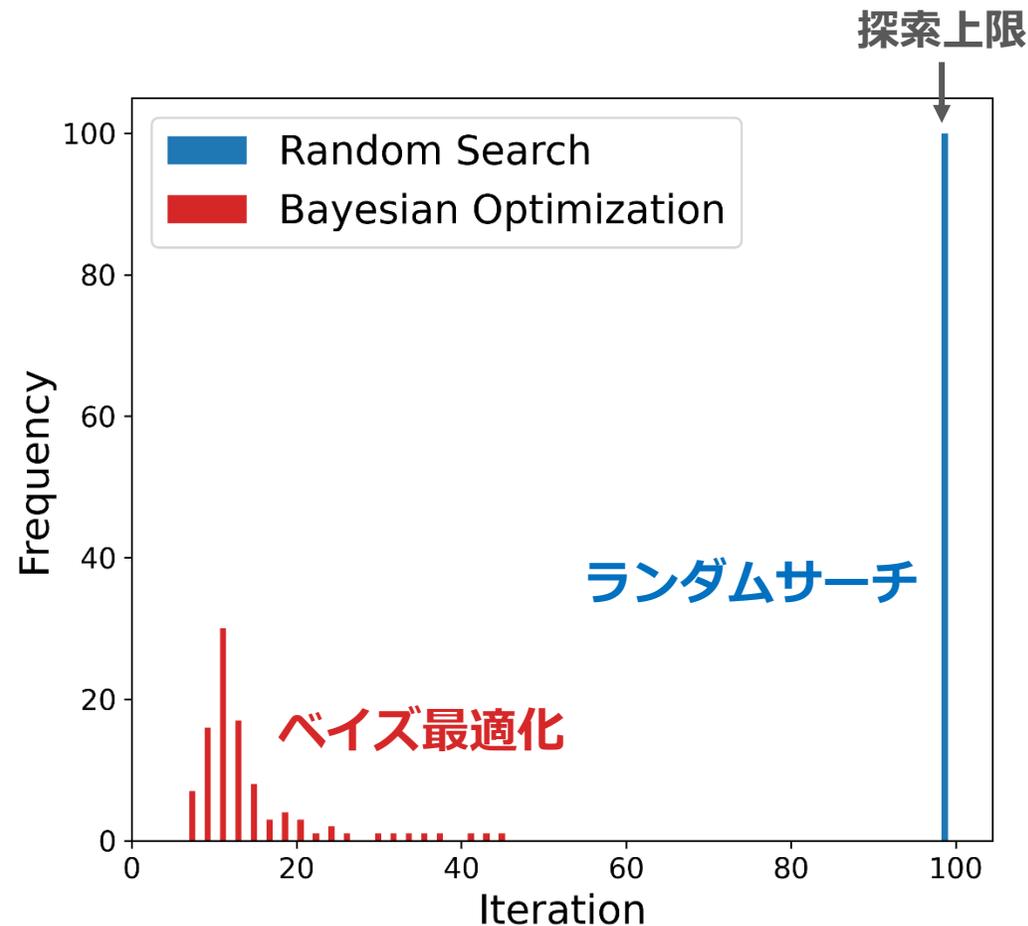
既存の最高記録を上回る/下回る確率



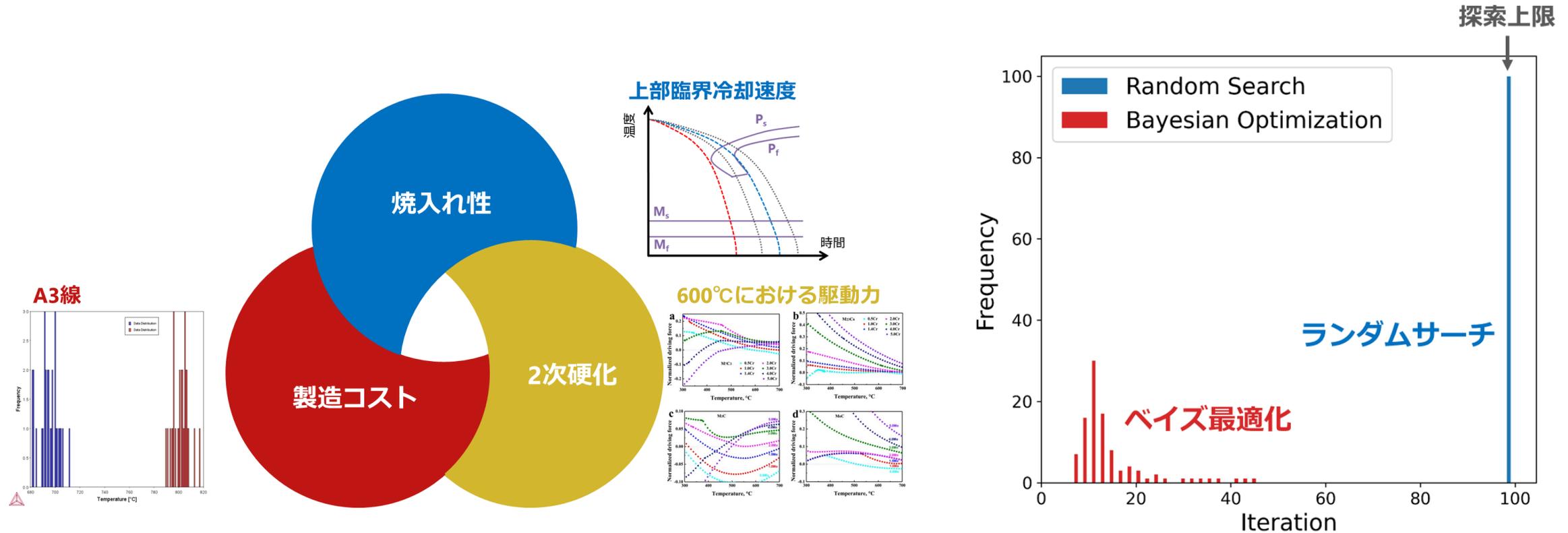
$PI_1 \times PI_2 \times PI_3$ が最大となる組成を次の計算条件とする



- ✓ 両手法で100回探索を実施（試行回数を100回超えた場合は打ち切る）
- ✓ ランダムサーチでは一度も目標値を達成できなかった
- ✓ ベイズ最適化では**平均14回で探索を終了**

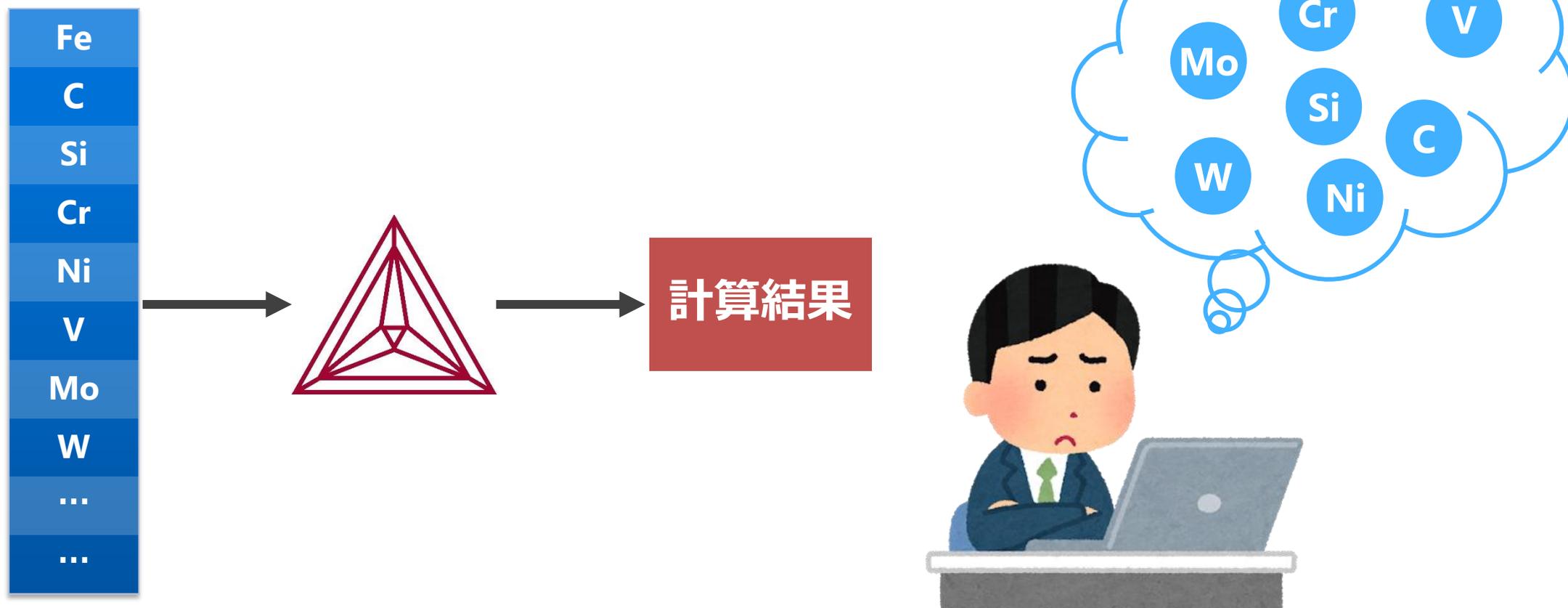


- ✓ Thermo-Calcで計算可能な特性の内、3つの要件を満たすための鉄鋼材料の組成最適化を実施
- ✓ ベイズ最適化により効率的な条件探索が可能



1. 複数の要件を満たすための鉄鋼材料の組成最適化
2. チタン合金における β 相安定化に寄与する組成条件の可視化

- ✓ Thermo-Calcでは多元系合金を対象とした平衡計算、特性の計算などが可能
- ✓ 一方で計算結果の解釈は多元系になるほど困難



- ✓ 回帰モデルとマルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC) のサンプリングにより、所望の特性を持つための組成やプロセス条件などの要件を予測
- ✓ 非線形な場合でも変数間の相関関係を可視化することが可能

Training dataset

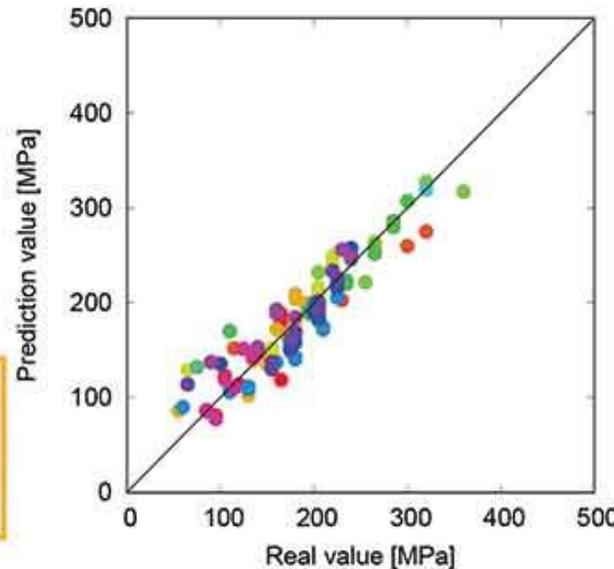
X	n	Fe (wt%)	Mn (wt%)	...	Proof stress (MPa)
1	2	0.35	0.1	...	95
1	4	0.35	0.1	...	120
1	6	0.35	0.1	...	145
1	8	0.35	0.1	...	165
2	2	0.35	0.1	...	85
2	4	0.35	0.1	...	165
3	4	0.35	0.1	...	105
3	8	0.35	0.1	...	165
1	1	0.18	0.35	...	115
:	:	:	:	:	:
1	8	0.18	0.35	...	300
1	9	0.18	0.35	...	320

Predict unknown point



Supervised learning

Regression model

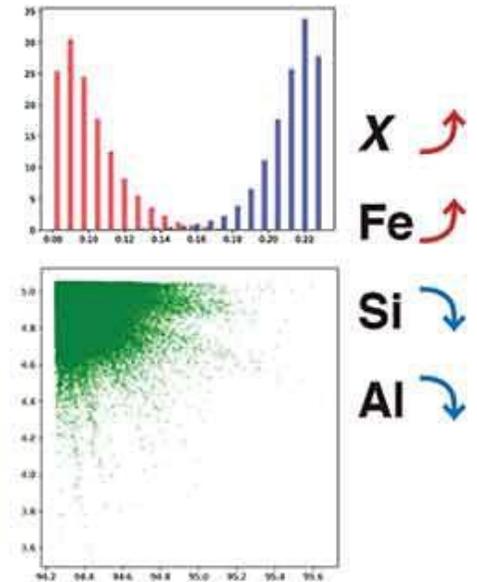


Generate many data



MCMC sampling

Relations



- ✓ α型、(α+β)型よりも弾性率が低く、生体適合性が高い
- ✓ この事例ではTi-Nb-Sn-Zr合金を対象に、β相安定化に寄与する元素を分析

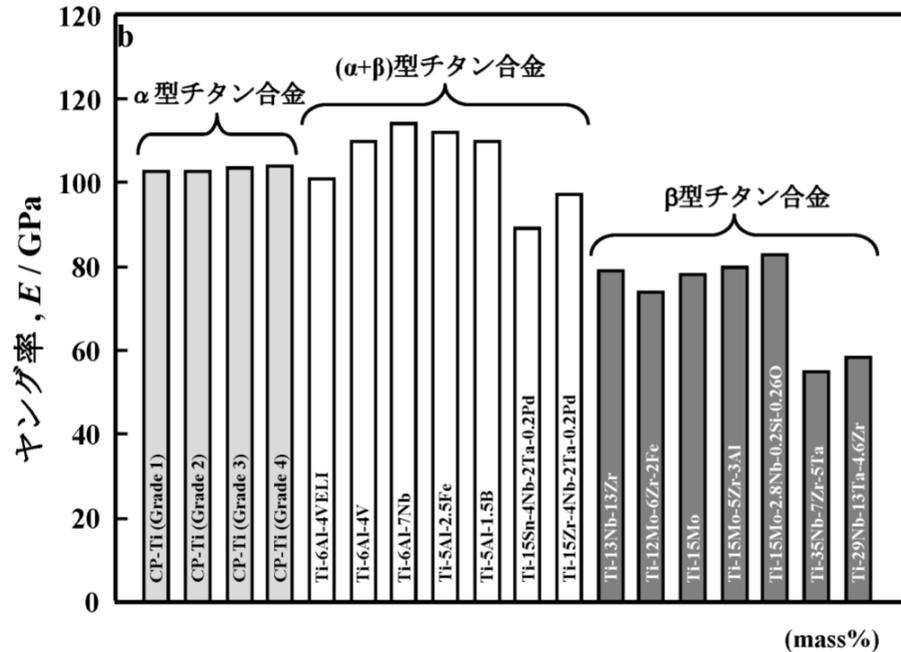


図13 代表的な生体用α型、(α+β)型およびβ型チタン合金のヤング率の比較.

計算設定

熱力学データベース	TCTI3
温度 / °C	0~1300
Nb / at%	0~32
Sn / at%	0~5
Zr / at%	0~10

① データセット生成

ランダムな条件で
50000サンプルを計算

X				Y
T / °C	Nb	Zr	Sn	β相
...
...
...

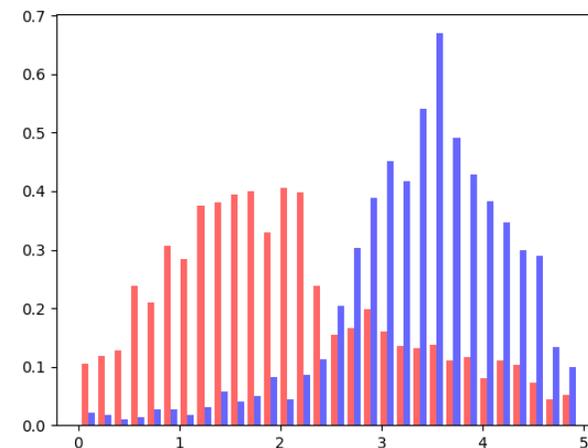
② モデリング

クロスバリデーションで
回帰モデルを選定

- ロジスティック回帰
- Elastic Net回帰
- サポートベクター回帰
- ランダムフォレスト回帰
- ガウス過程回帰
- ニューラルネットワーク

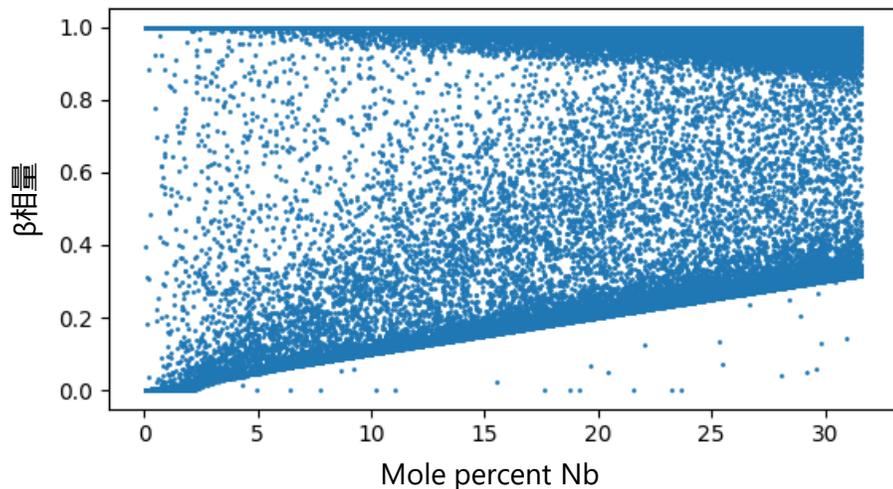
③ MCMCサンプリング

選定されたモデルを使用して
サンプリング

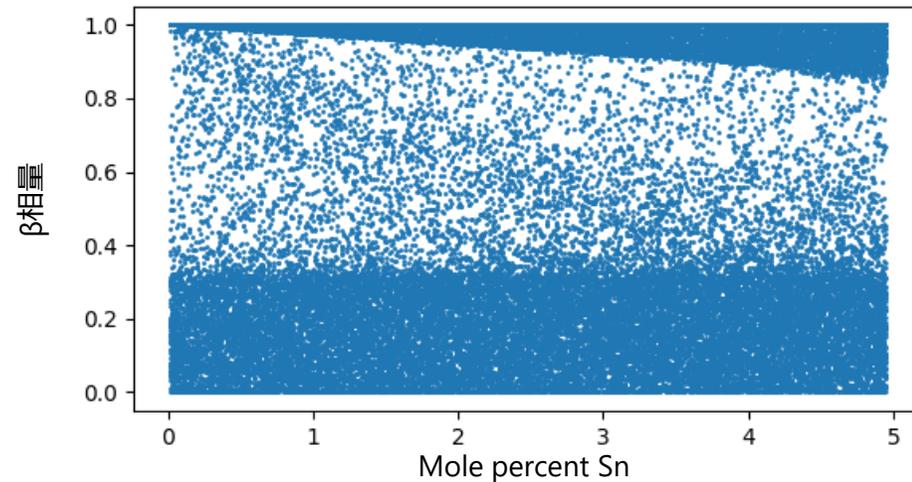


各元素-β相量の相関係数は0に近く、明確な関係は見られない

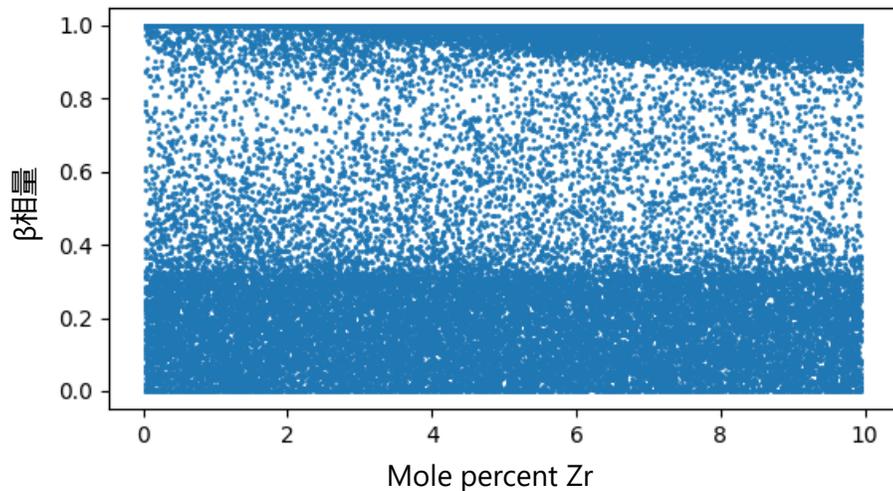
Nb : $r=0.18$



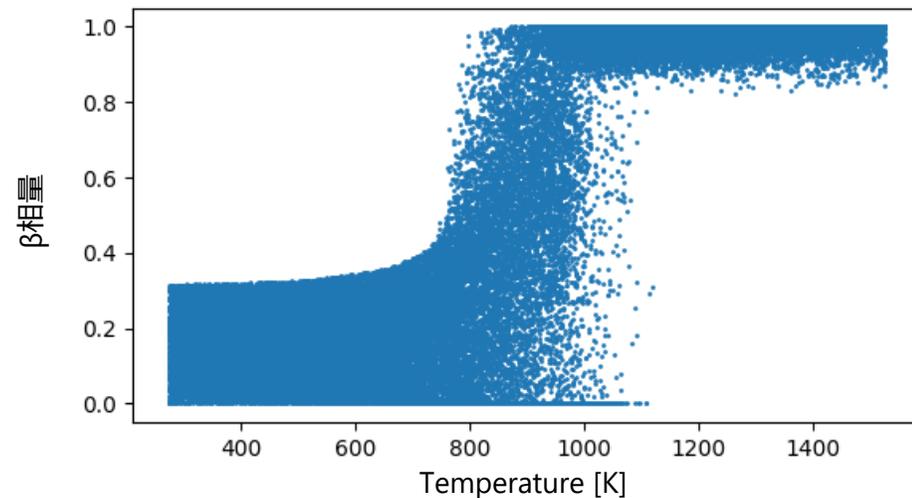
Sn : $r=-0.045$



Zr : $r=0.040$

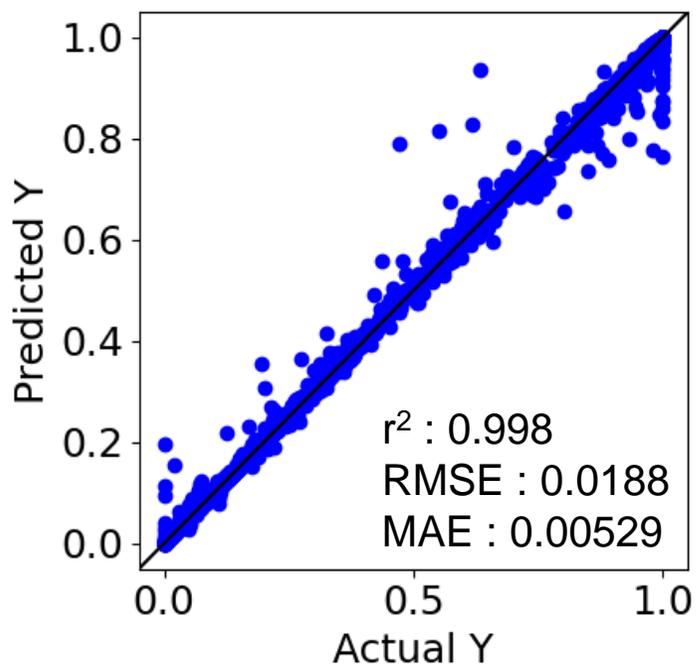


温度 : $r=0.87$



RMSEを指標にモデルを選定後、MCMCサンプリングを実施

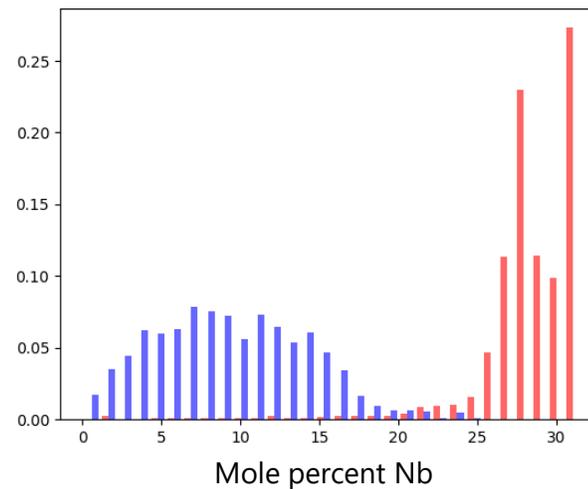
ランダムフォレスト回帰



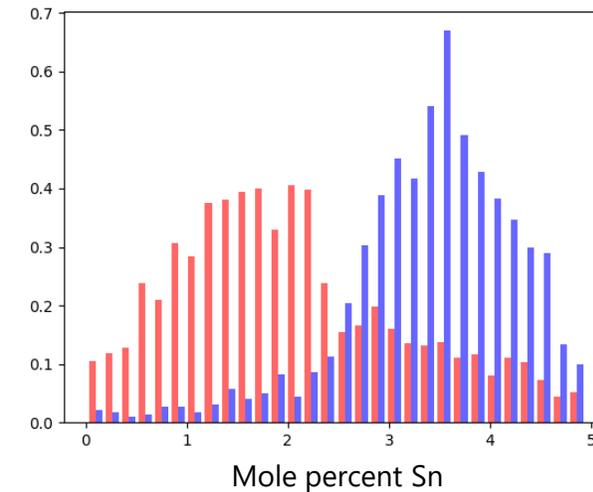
MCMC
サンプリング



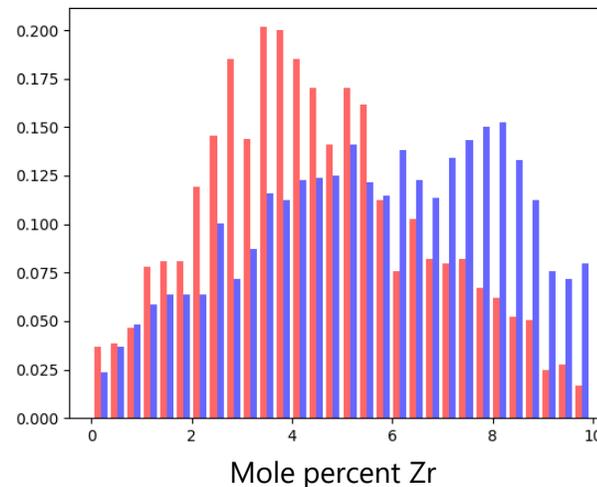
Nb



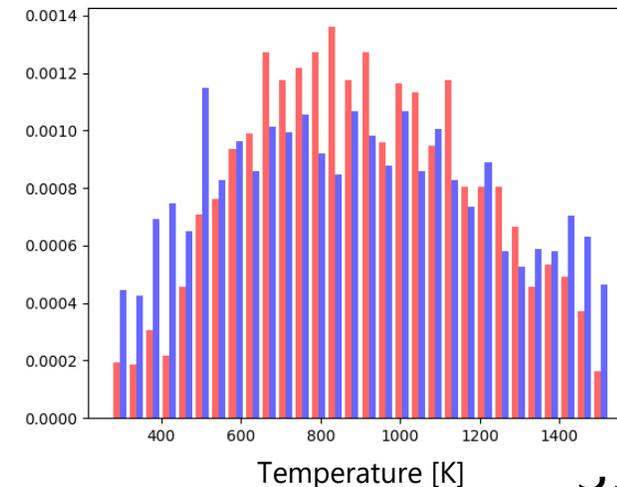
Sn



Zr



温度



赤い分布 : β 相量が多い

青い分布 : β 相量が少ない

α/β 相安定化の指標である
Al/Mo当量と同様の傾向

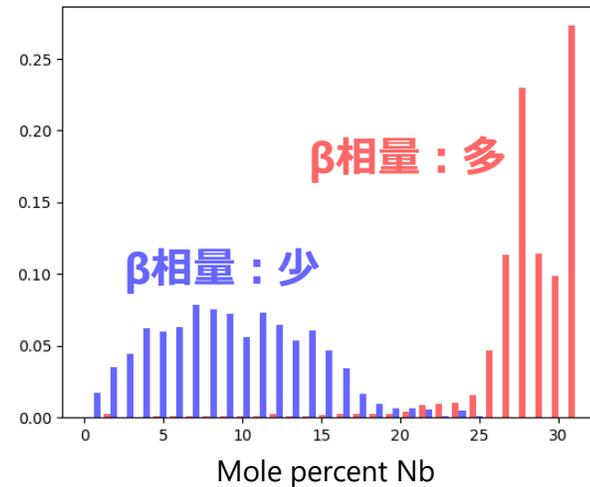
- Nb : β 相の増加に寄与

$$Mo_{eq} = Mo + 0.67V + 0.44W + 0.28Nb + \dots$$

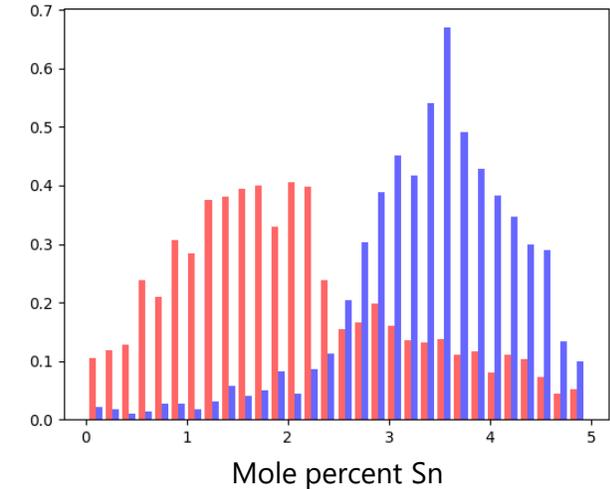
- Sn : β 相の減少に寄与

$$Al_{eq} = Al + 1/3Sn + 1/6Zr + 10(O+N)$$

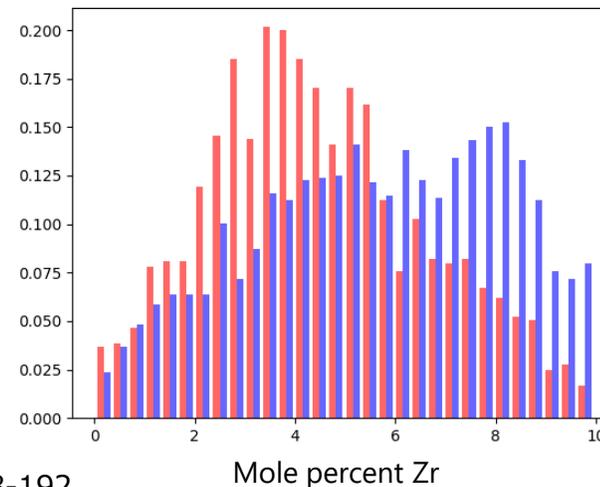
Nb



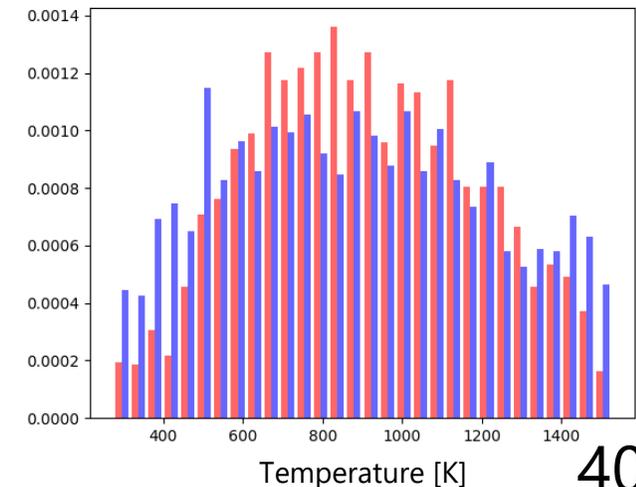
Sn



Zr



温度

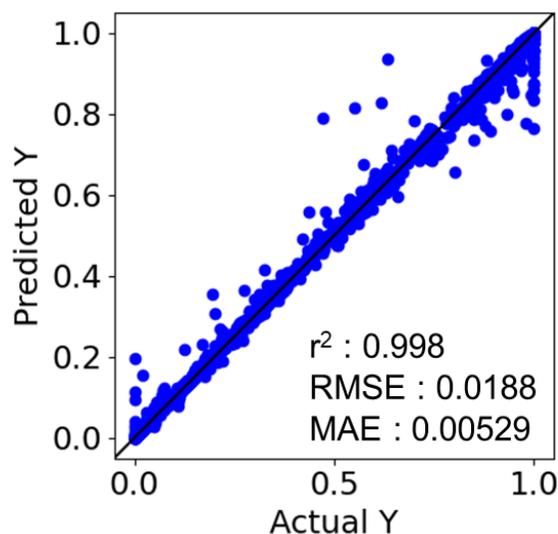


- ✓ β 型チタン合金における平衡計算結果のデータセットを用いてモデリング、MCMCサンプリングを実施
- ✓ β 相量と各元素の組成についての非線形な相関関係を可視化できた

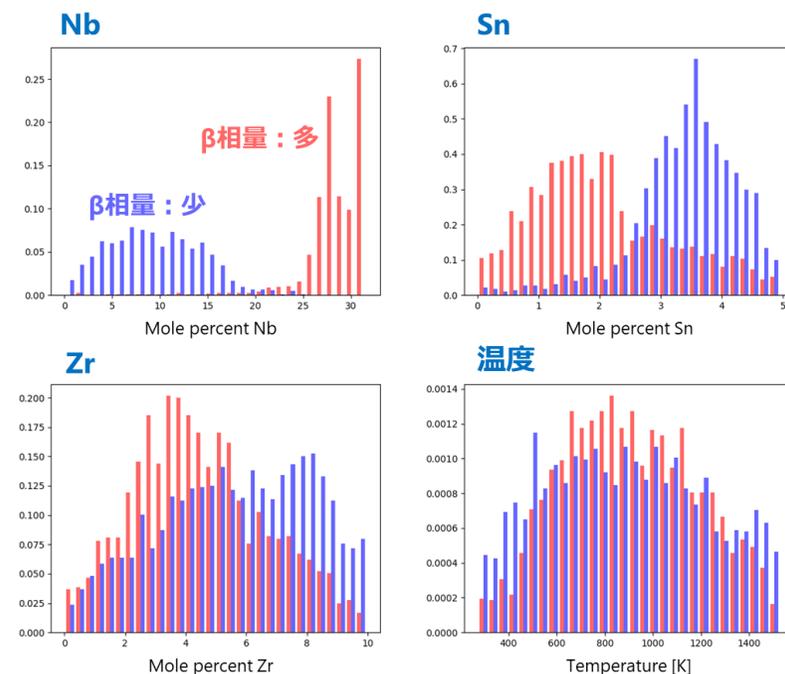
データセット

X				Y
T / °C	Nb	Zr	Sn	β 相
...
...
...

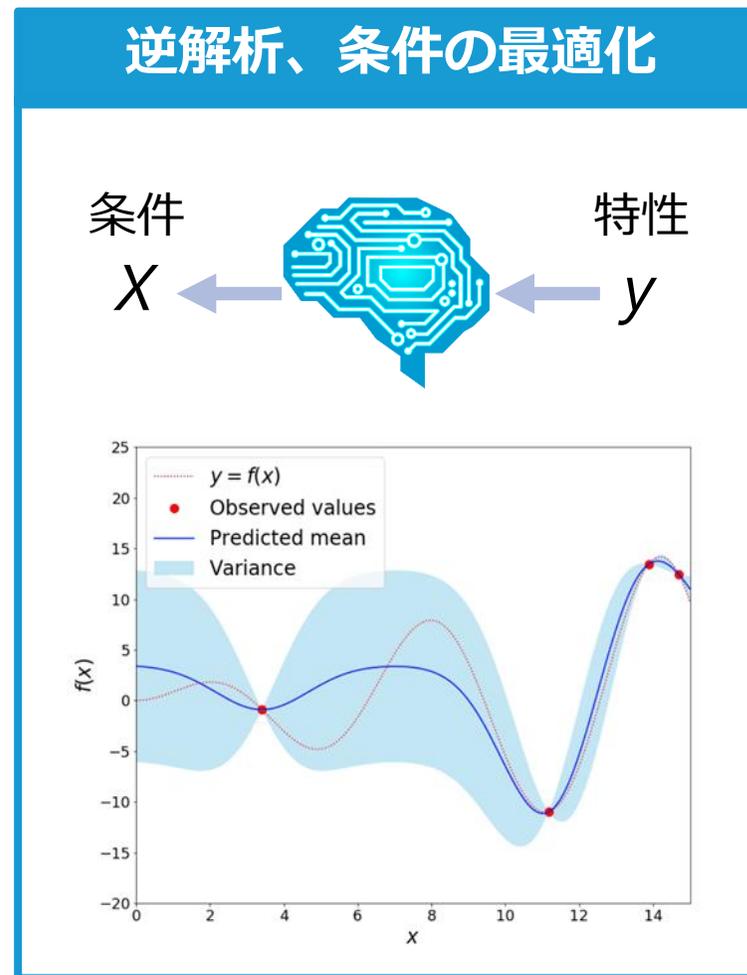
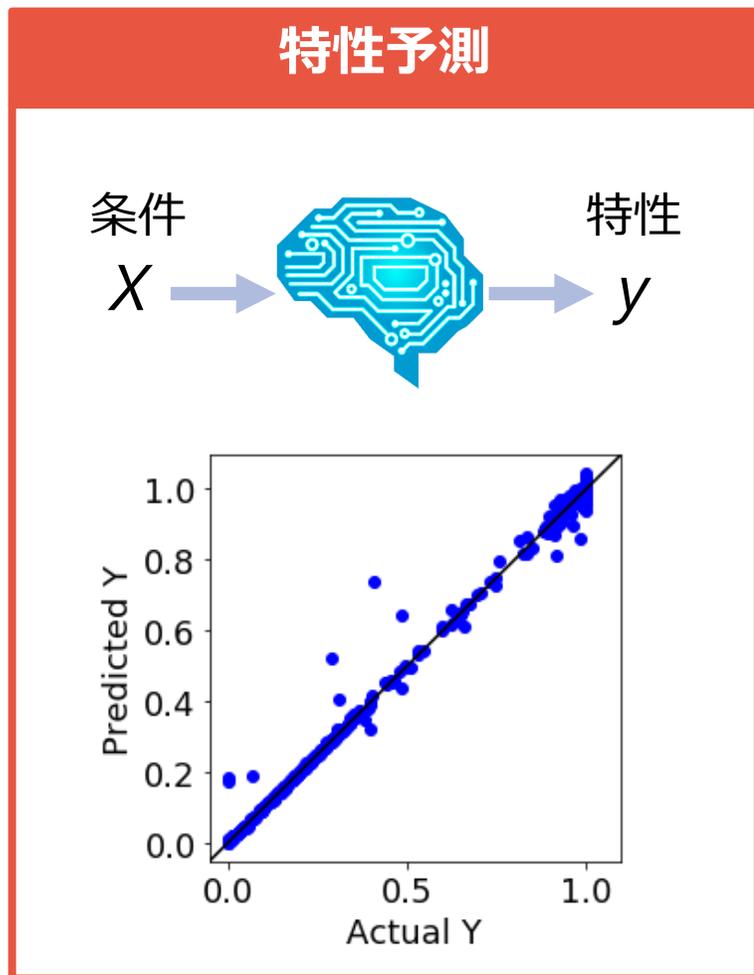
モデリング



MCMC



TC-Pythonにより熱力学計算と機械学習のシームレスな連携が可能
 適用例：材料設計の効率化, 逆解析, 実データ予測のための記述子作成...



ユーザー次第で多種多様な用途に利用可能

複数の条件やプロセスでの自動計算・出力

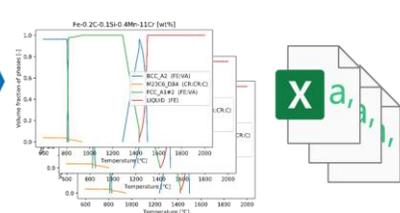
計算条件

C	Mn	Si	Ni	Cr
0.1	1.0	0.1	2	18
0.2	1.5	0.2	4	20
0.3	2.0	0.3	6	22
⋮				

TC-Pythonで計算

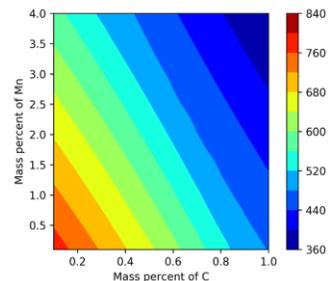


結果の出力 (グラフやテーブル)

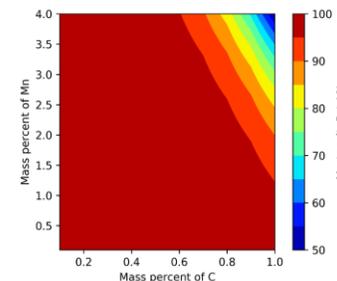


等高線図による分析

マルテンサイト変態開始温度

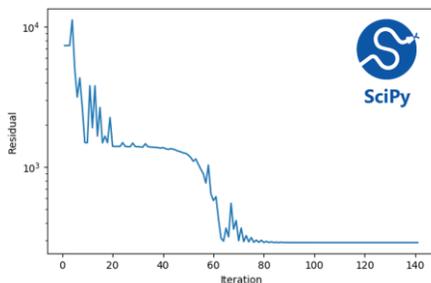


室温でのマルテンサイト分率

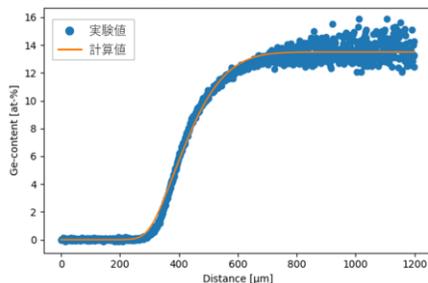


数値計算ライブラリとの連携

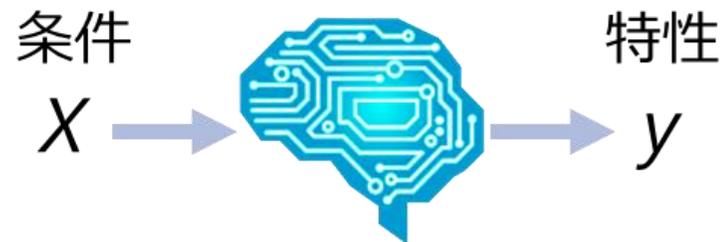
試行回数 vs 残差平方和



最適化して得られたGe濃度プロファイル



機械学習ライブラリとの連携



活用事例

- **ベイズ最適化を用いた鋼の焼入れ性向上のための組成最適化**
http://www.engineering-eye.com/rpt/column/2021/0129_material.html
- **データサイエンスとの連携事例**
<https://www.engineering-eye.com/THERMOCALC/case02/machine-learning.html>

解説集

- **TC-Python例題 日本語解説 (FAQサイト)**
https://secure.okbiz.okwave.jp/ctc-tg/category/show/635?site_domain=thermo-calc
- **TC-Python ライブラリ 日本語解説書 (FAQサイト)**
https://secure.okbiz.jp/ctc-tg/category/show/678?site_domain=thermo-calc
- **TC-Python API reference documentation (開発元資料)**
<https://www2.thermocalc.com/docs/tc-python/2024b/html/>

伊藤忠テクノソリューションズ株式会社

科学システム本部

東京都港区虎ノ門4-1-1 神谷町トラストタワー

E-mail.: thermo-calc@ctc-g.co.jp

URL: <http://www.engineering-eye.com/>