



Thermo-Calc Software

Thermo-Calc活用事例

～レーラー図～
～シャイル凝固計算～

1. FAQサイト紹介

2. 浸炭事例紹介

3. レーラー図の描画方法

4. シャイルモジュールの凝固完了時における出力について

- TC-Pythonについて
- シャイル凝固計算について
- 凝固完了時における体積分率の出力方法
- 凝固完了時における指定した固相における元素濃度の出力方法

お客様広場よりFAQをクリック

https://secure.okbiz.okwave.jp/ctc-tg/category?site_domain=thermo-calc

HOME > プロダクト一覧 > Thermo-Calc > お客様の広場

Thermo-Calc

お客様の広場

Thermo-Calc

お客様の広場



ダウンロード

詳細

▶ ダウンロード

▶ FAQ

Thermo-Calcの最新バージョン、マニュアル等がダウンロード出来ます。

関連情報

関連カテゴリ

▶ マテリアル

関連プロダクト

FAQ

詳細

Thermo-Calcを使うための設定や、ライセンスに関するFAQを公開しております。

2020年4月1日から新FAQシステムを公開いたしました。

[新FAQシステムはこちら](#)

 ログイン

ようこそ さん

[ログアウト](#)

Thermo-Calc

-  Thermo-Calc
 -   TC-PRISMA
 -   DICTRA
 -   TC-Python
 -   合金別事例
 -  ライセンス認証とトラブルシューティング
-  その他

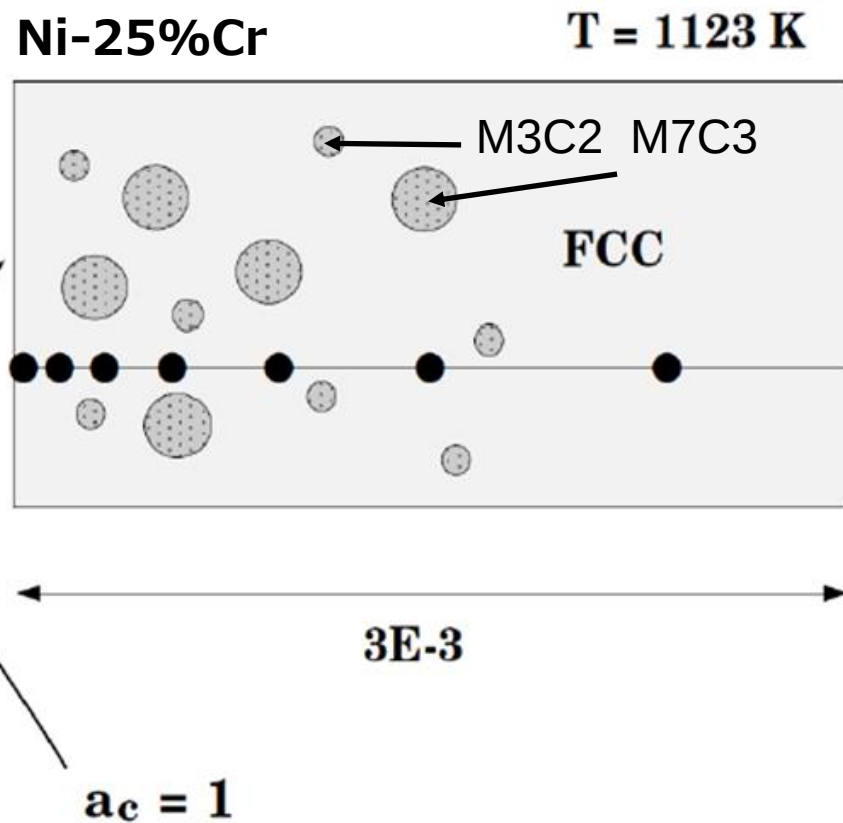
 最新のFAQ 使用できる変数について教えて キーワード検索キーワードまたは文章で検索できます(200文字以内)  FAQ種別 全てのFAQ種別を対象 ▼ 注目のキーワード[コンソールモード](#) | [グラフィカルモード](#) | [ライセンス](#) | [データベース](#) | [擬2元系](#) | [3元系](#) | [エリンガム](#) | [ユーザー](#) | [2元系](#) | [DICTRA](#) Info&News

- 2021/12/17 00:00
【12/17開催】カンファレンスのご案内
- 2021/12/06 00:00
【新規3件】FAQ追加しました
- 2021/11/29 00:00
【新規1件】FAQ追加しました

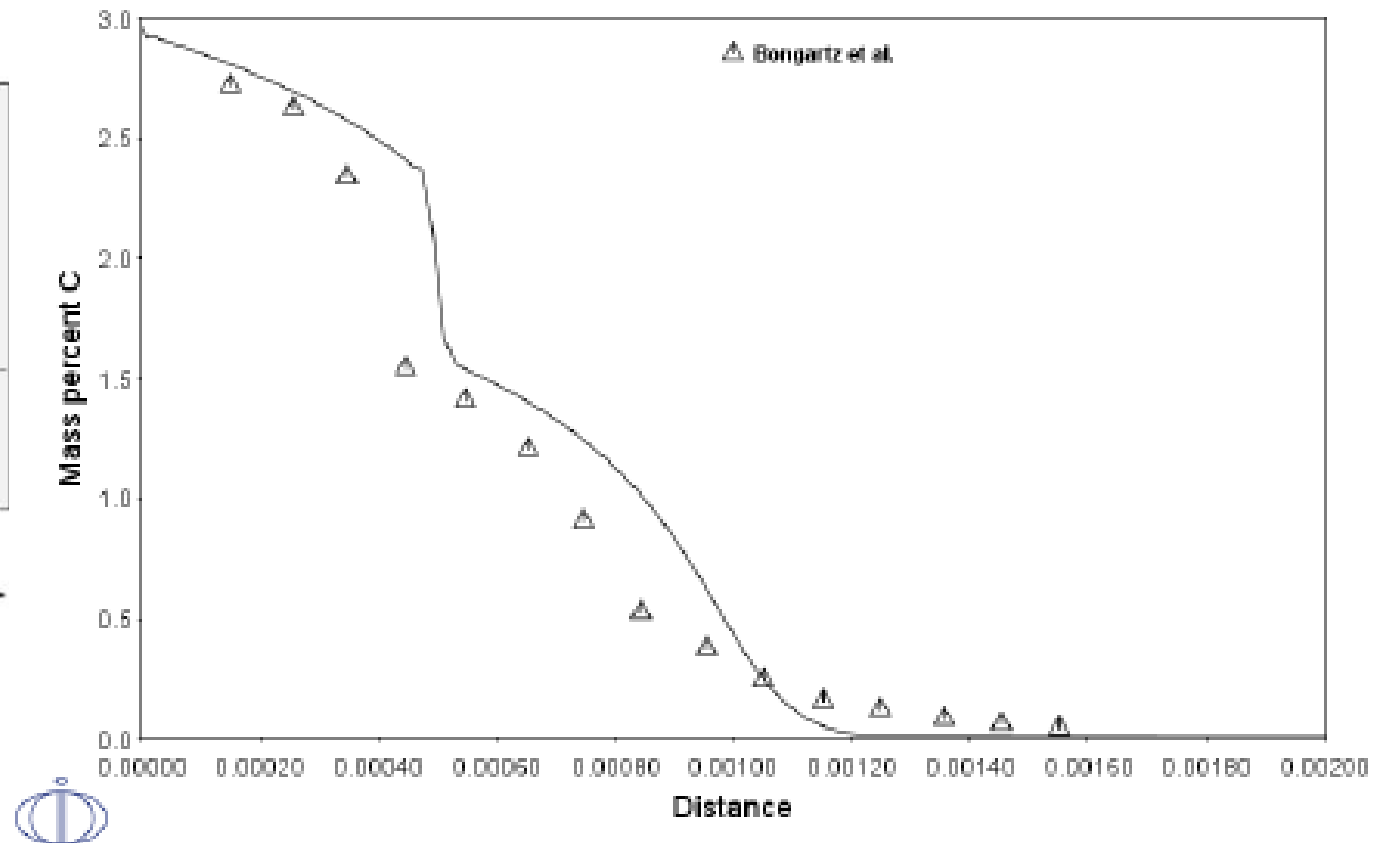
 閲覧の多いFAQ

-  使用できる変数について教えてください
-  インストーラやマニュアル、計算事例...
-  シャイル凝固計算で凝固完了時におけ...
-  ニッケル合金の計算事例について知り...
-  線膨張係数の計算(グラフィカルモード)

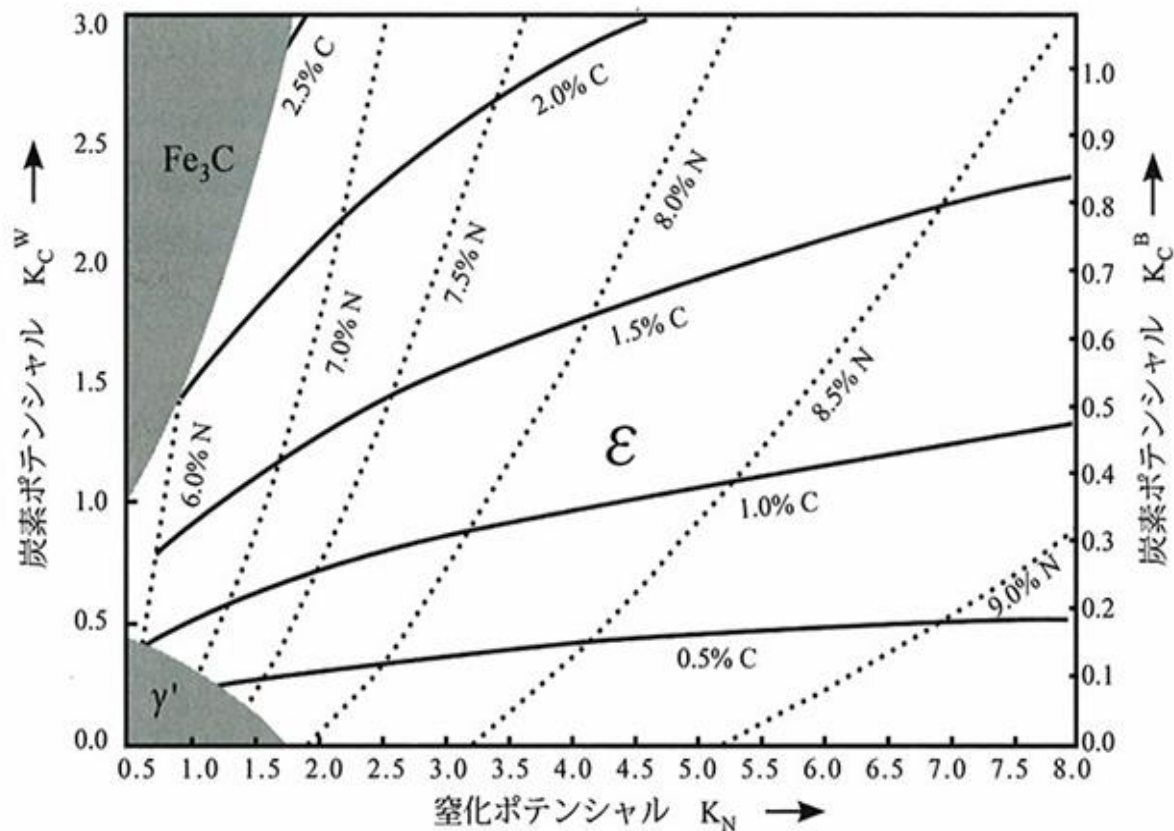
DICTRA例題:exad1a



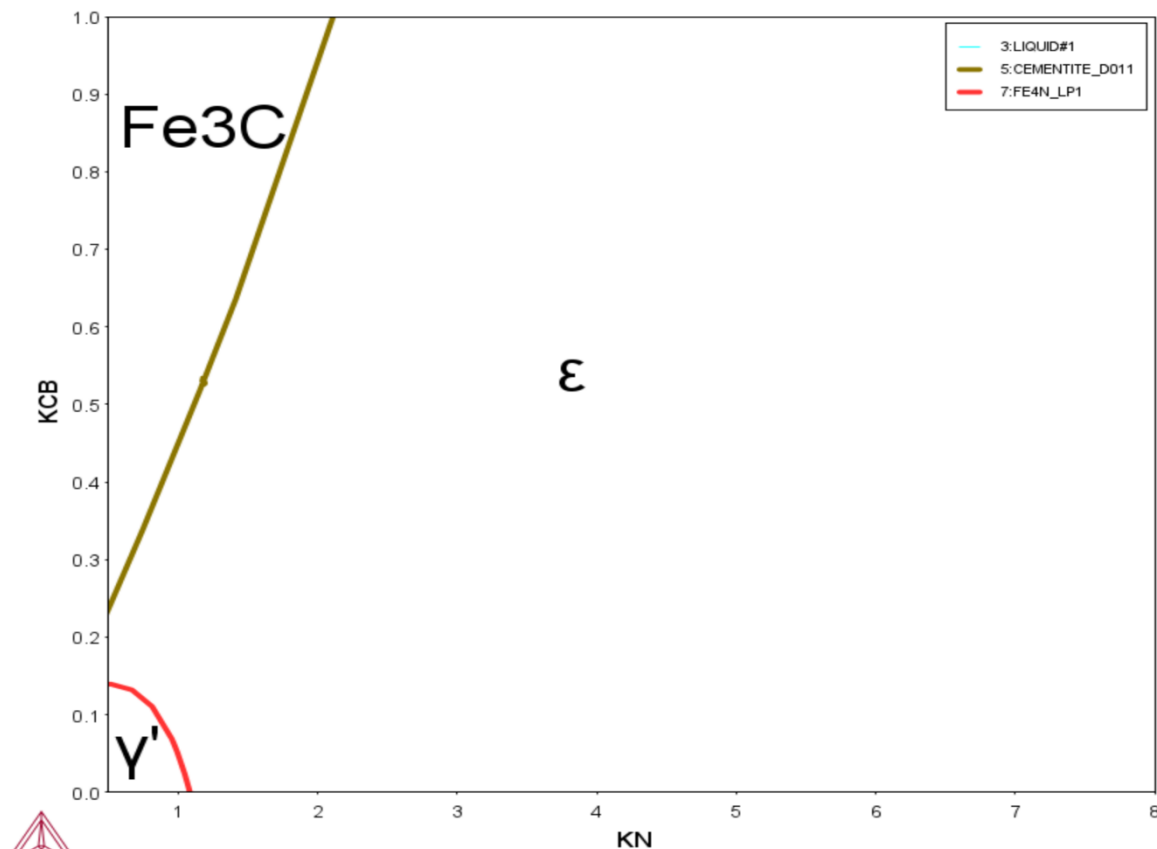
Time=3600000



窒化ポテンシャル K_N vs 炭素ポテンシャル K_C



2021.12.16.19.17.36
 TCFE11: C, Fe, H, N, O
 T=843.15, N=1, P=1E5, LNACR(C1O2,GAS)=-10, LNACR(H2,GAS)=-10





Thermo-Calc Software

純鉄におけるレーラー図の計算

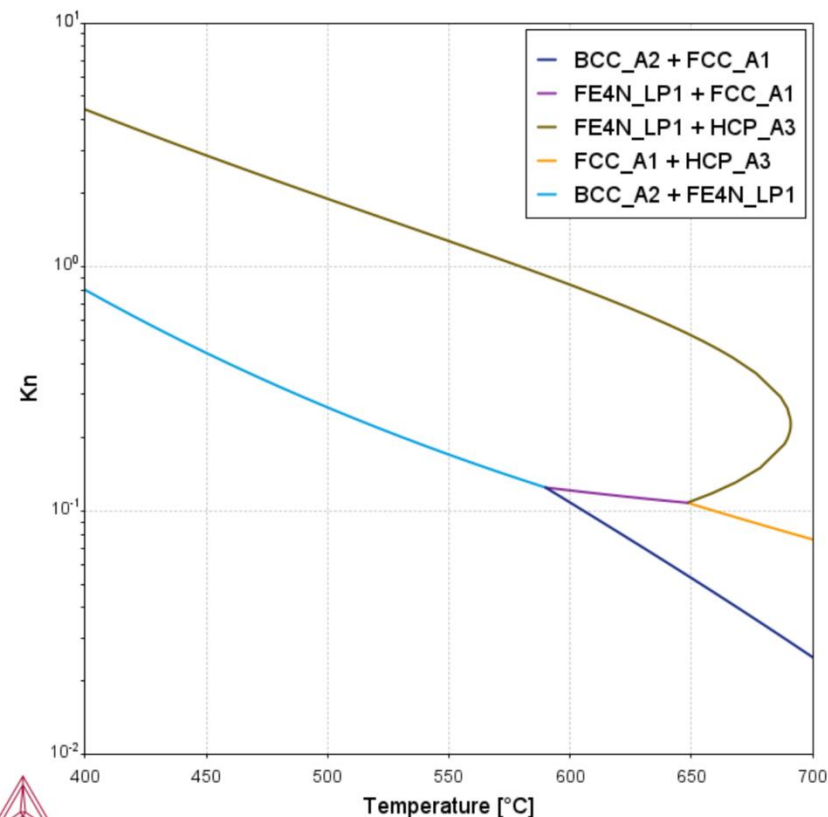
計算設定

熱力学データベース	TCFE11
温度	800 K
圧力	1e5 Pa
トータルサイズ	1 mol
元素	Fe, N, H
温度範囲	500 K～1000 K
窒素の質量分率	0～0.1

窒化ポテンシャル K_n :※

$$K_n = a_{\text{cr}}(\text{H}_3\text{N}_1, \text{gas}) / a_{\text{cr}}(\text{H}_2, \text{gas})^{**}(1.5)$$

計算結果





Thermo-Calc Software

Scheil凝固計算 with TC-Python

Python...

プログラミング言語の一種

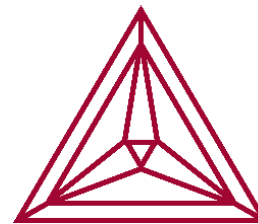
- 文法がわかりやすく習得が容易
- ライブラリが豊富
- データサイエンスを始めとした様々な分野で普及



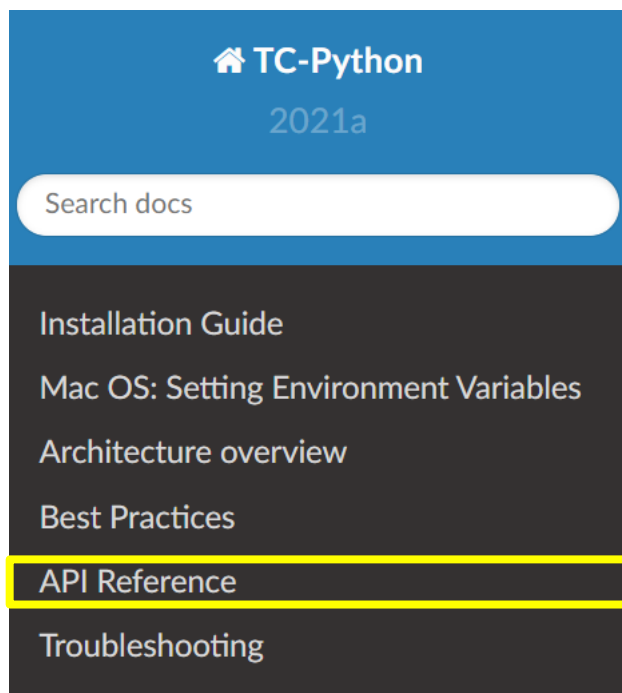
TC-Python...

ユーザが作成したプログラム中でThermo-Calc の各種計算を 呼び出すためのライブラリ

- 大量の条件での計算や機械学習との連携が可能



- モジュールやクラス、メソッドを把握した上でスクリプトを書く必要がある
- [TC-Python API Reference](#)から確認が可能
- 日本語版はお客様広場の[ダウンロード](#)より



API Reference

- Calculations
 - Module "single_equilibrium"
 - Module "batch_equilibrium"
 - Module "precipitation"
 - Module "scheil"
 - Module "step_or_map_diagrams"
 - Module "diffusion"
 - Module "propertymodel"
- Module "system"
- Module "entities"
- Module "server"
- Module "quantity_factory"
- Module "utils"
- Module "propertymodel_sdk"
- Module "exceptions"
- Module "abstract_base"

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

テーブル

- CSV
- Excel

機械学習

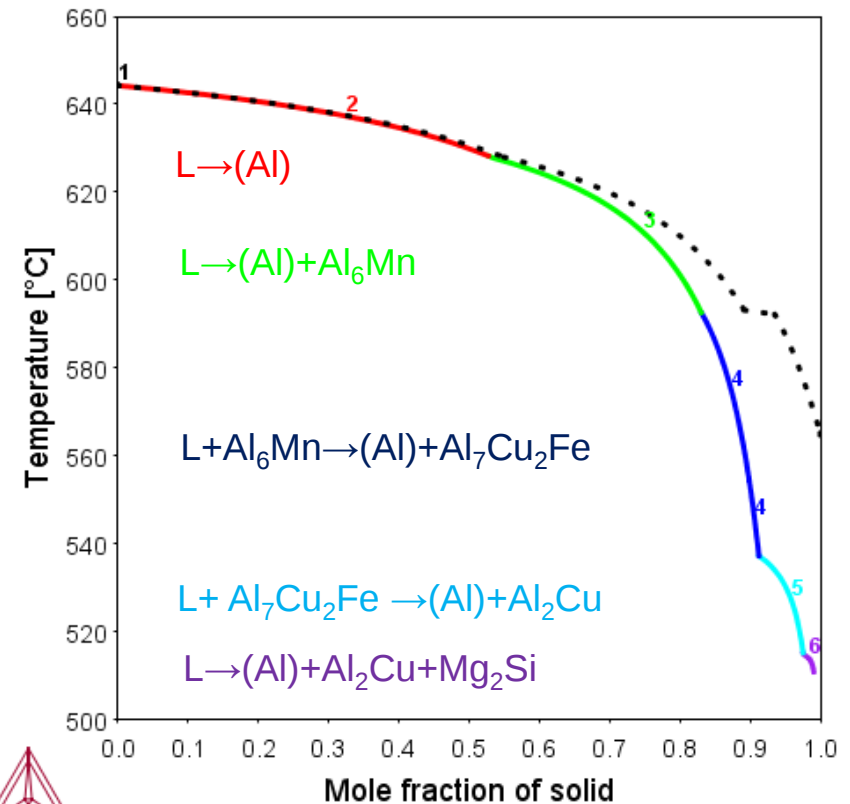
- ベイズ最適化
- 逆解析

など

Scheilモジュールによる凝固シミュレーション

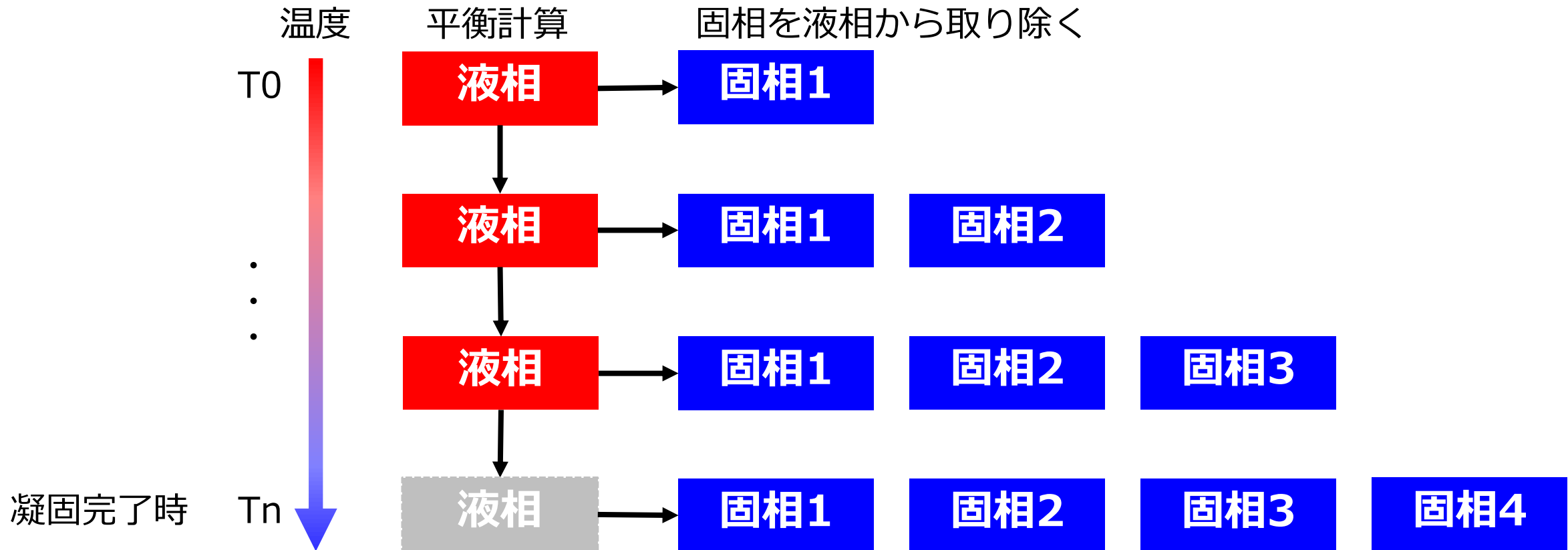
- Scheilモジュールでは、降温に伴い液相から出現する固相を計算
- Scheilモジュールにおける計算条件
 - ・ 液相内の拡散は無限に速い
 - ・ 固相内の拡散は無い
 - ・ 液相から出現する固相は平衡
 であることを仮定して、凝固過程を近似的に計算
- **組織形成過程（順序）や相変態温度を評価することが可能**
- 高速拡散元素、逆拡散、急速凝固を考慮するオプション機能

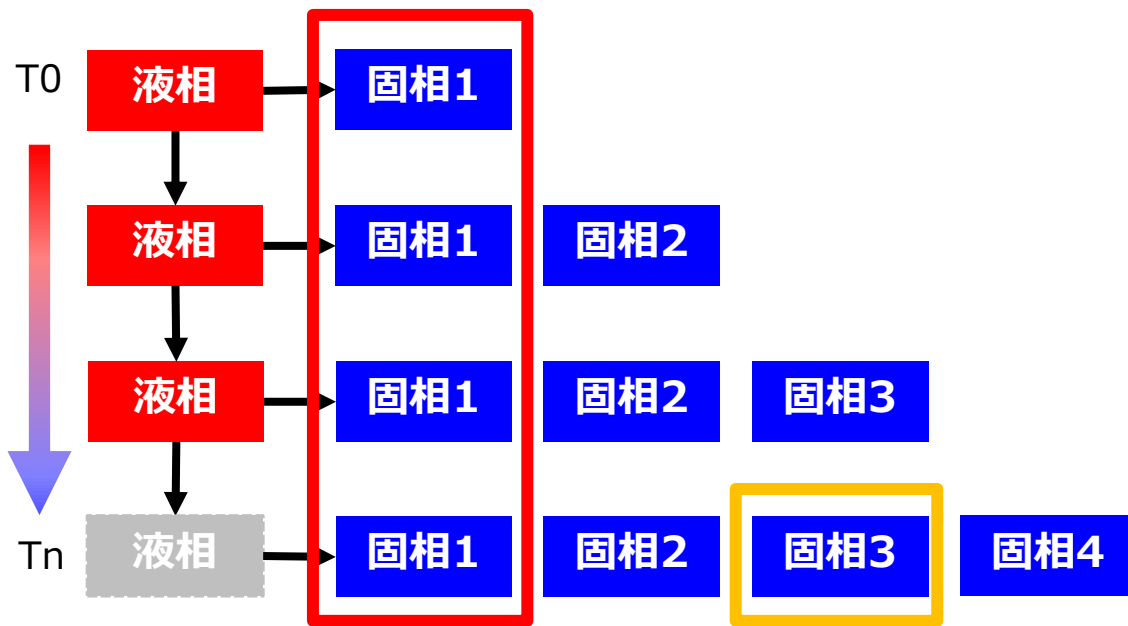
A206合金(Al-4.58Cu-0.28Mg-0.51Fe-0.07Si-0.003Mn wt%) のScheil計算



H.-L. Chen, "Thermodynamic modeling of metastable precipitate phases in Al-Cu, Al-Fe, Al-Mg-Si, and Al-Mg-Zn based alloys" (Stockholm, Sweden, 2014), unpublished work.

- 「温度を下げる→液相の平衡計算→出現した固相を取り除く」を全てが固相になるまで繰り返す。
- 各相の構成、各固相の成分や体積はその温度における平衡計算の結果を示す。





Thermo-Calc 出力変数の

- **NS(phase), BS(phase)** : 全体に対する指定した相の相分率

例, 凝固過程の温度 T_n において、

NS(固相1)を出力した場合、系全体に対し T_n までに生成した固相1の割合が出力

- **X(ph, el), VM(ph, el)** : ある温度で生じた相の成分・体積

例, 凝固過程の温度 T_n において、

X(固相3, *)を出力した場合、 T_n における平衡計算で晶出した固相3の元素構成が出力

Thermo-Calcの出力変数のみでは、ある温度における平衡計算の結果は示せるが、凝固終了時の凝固組織（各相の元素構成や体積など）の結果は示せない

→ **TC-Pythonで数値処理の必要あり**

- ① $T(i-1) \rightarrow T_i$ 間 ($i=0,1,\dots$) の固相1における相分率の増加分を求める。

$$\boxed{\text{固相1の増加分}} = \boxed{\text{NS(固相1)}_{T_i}} - \boxed{\text{NS(固相1)}_{T(i-1)}}$$

- ② 固相1の体積の増加量を求める。

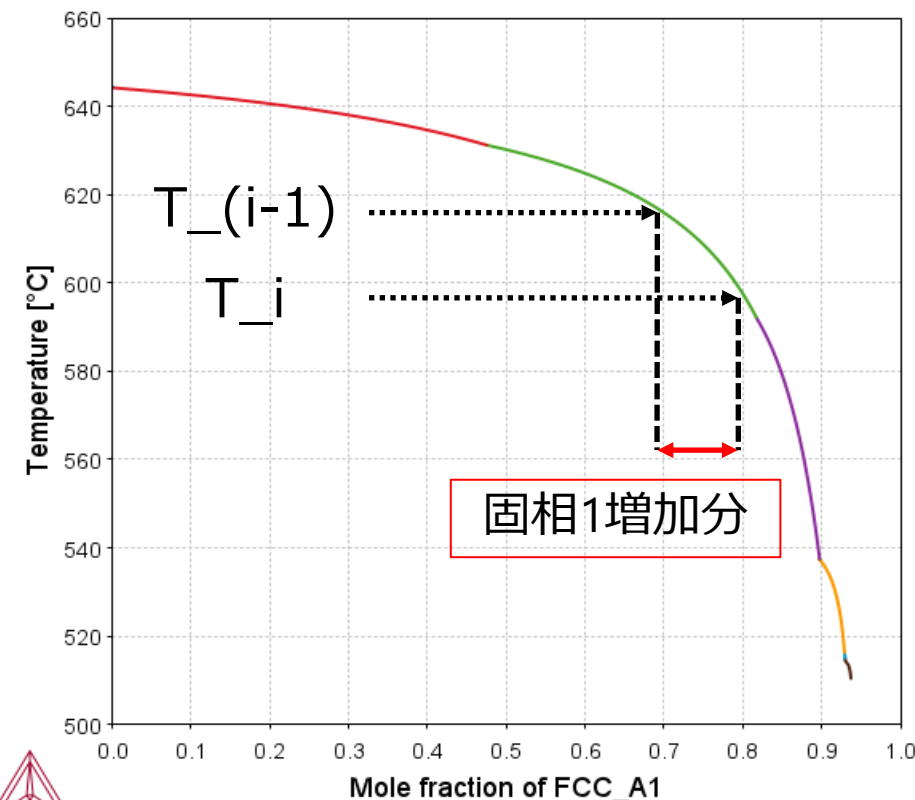
固相1の体積増加量：

$$\boxed{\text{固相1の増加分}} \times \boxed{\text{VM(固相1)}}$$

- ③ 凝固完了時温度における体積を求める。

固相1の体積増加量の総和をとる

- ④ 固相1の体積を全相の体積の合計値で割る。



$j(=1,2,\dots,m)$ 番目の固相 S_j の体積分率 $VPV_{total}(S_j)$ を求める。

※ T_0 =凝固開始温度, $NS_0(S_j) = 0$, $V_0(S_j) = 0$

温度 $T_{i-1}(i=1,2,\dots,n)$ から温度 T_i へ冷却したとき、

① $T(i-1) \rightarrow T_i$ 間の固相 S_j における相分率の増加分を求める。

固相 S_j の増加分 = $NS_i(S_j) - NS_{i-1}(S_j) \cdots A$

② 固相 S_j の体積の増加量を求める。

固相 S_j の体積の増加量 = $\underbrace{\{NS_i(S_j) - NS_{i-1}(S_j)\}}_A \times VM(S_j) \cdots B$

③ 凝固完了時温度($=T_n$)における体積を求める。

固相 S_j の体積の合計 $V_n(S_j) = V_{n-1}(S_j) + \underbrace{\{NS_n(S_j) - NS_{n-1}(S_j)\}}_B \times VM(S_j)$

④ 固相 S_j の体積を全相の体積の合計値で割る。

$$VPV_{total}(S_j) = \frac{V_n(S_j)}{\sum_{j=1}^m V_n(S_j)}$$

- ① $T(i-1) \rightarrow T_i$ 間 ($i=0,1,\dots$) の固相1における相分率および元素1の増加分を求める。

$$\text{固相1の増加分} = \text{NS(固相1)}_{T_i} - \text{NS(固相1)}_{T(i-1)}$$

$$\text{元素1の増加分} = \text{X(固相1, 元素1)}_{T_i} - \text{X(固相1, 元素1)}_{T(i-1)}$$

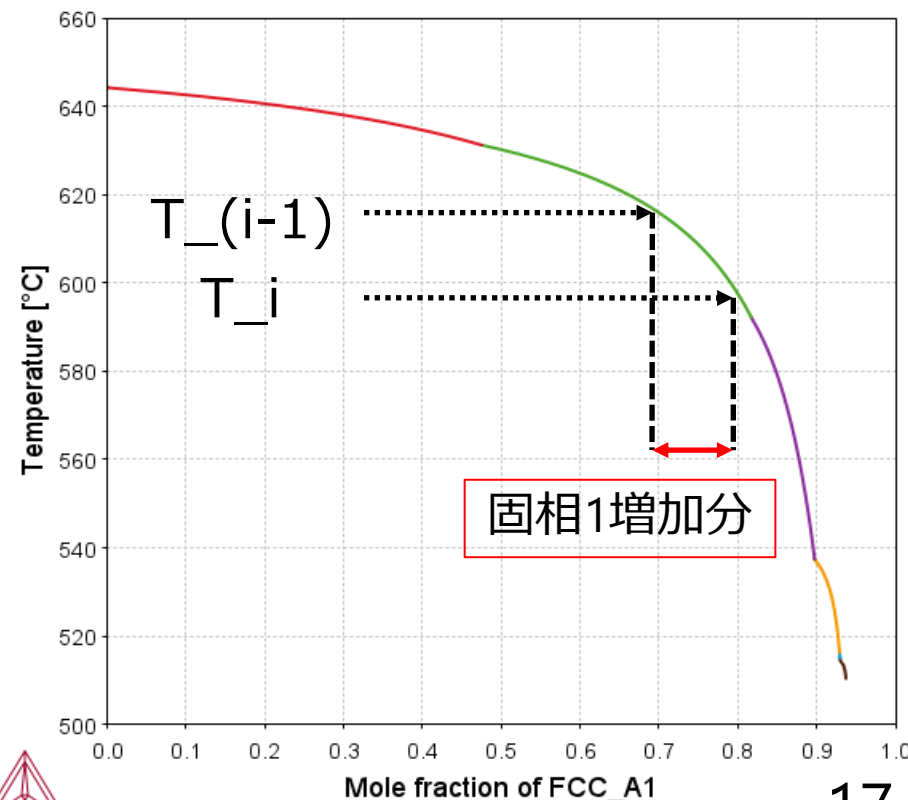
- ② 全体における元素1の増加量を求める。

全体における元素1の増加量：

$$\text{固相1の増加分} \times \text{元素1の増加分}$$

- ③ 凝固完了時温度における、固相1中の元素1の量および固相1の量を求める。

- ④ 固相1中の元素1の量を固相1の量で割る。



$j(=1,2,\dots,m)$ 番目の固相 S_j の $k(=1,2,\dots,l)$ 番目の元素濃度 $X_{total}(S_j, k)$ を求める。

※ T_0 =凝固開始温度, $NS_0(S_j) = 0$, $N_0(S_j, k) = 0$

温度 $T_{i-1}(i=1,2,\dots,n)$ から温度 T_i へ冷却したとき、

① $T(i-1) \rightarrow T_i$ 間の固相1における相分率および元素1の増加分を求める。

固相 S_j の増加分 = $NS_i(S_j) - NS_{i-1}(S_j) \cdots A$

② 全体における元素kの増加量を求める。

元素kの増加分 = $\underbrace{\{NS_i(S_j) - NS_{i-1}(S_j)\}}_A \times X_i(S_j, k) \cdots B$

③ 凝固完了時温度($=T_n$)における、固相 S_j 中の元素kの量および固相 S_j の量を求める。

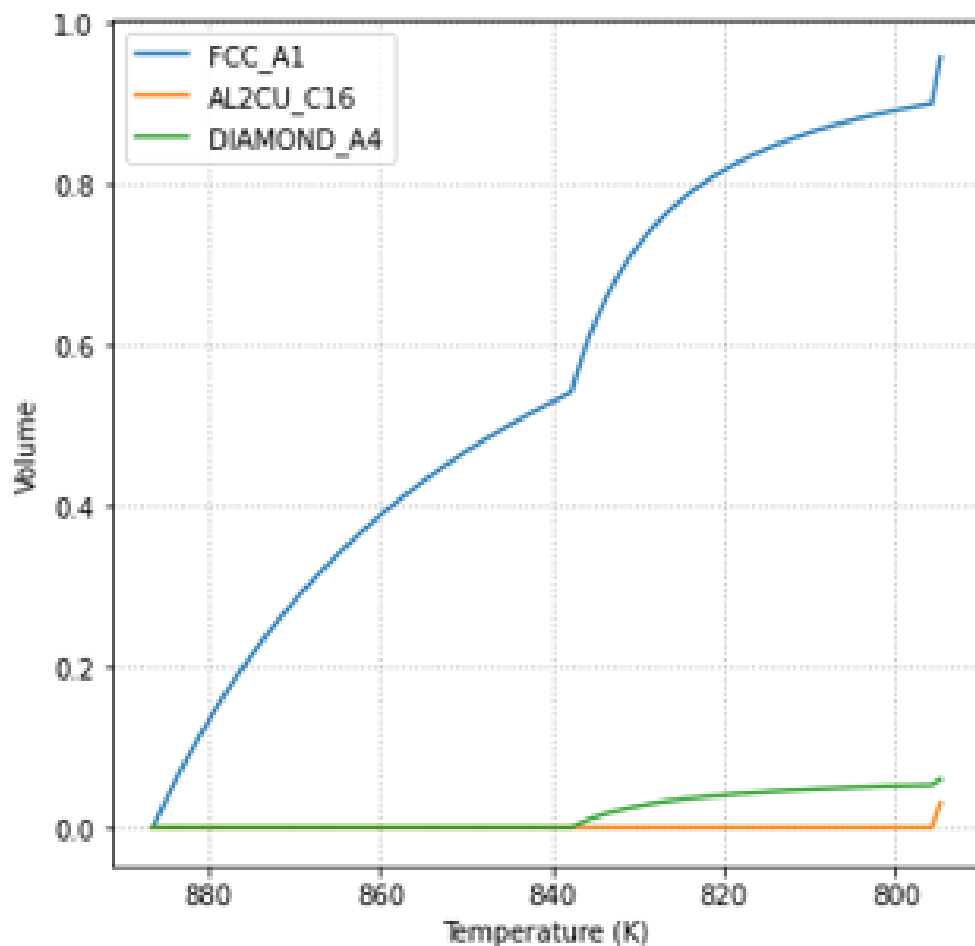
元素kの合計 $N_n(S_j, k) = N_{n-1}(S_j, k) + \underbrace{\{NS_n(S_j) - NS_{n-1}(S_j)\}}_B \times X_n(S_j, k)$

固相 S_j の合計 $NS_n(S_j) = NS_{n-1}(S_j) + \{NS_i(S_j) - NS_{i-1}(S_j)\}$

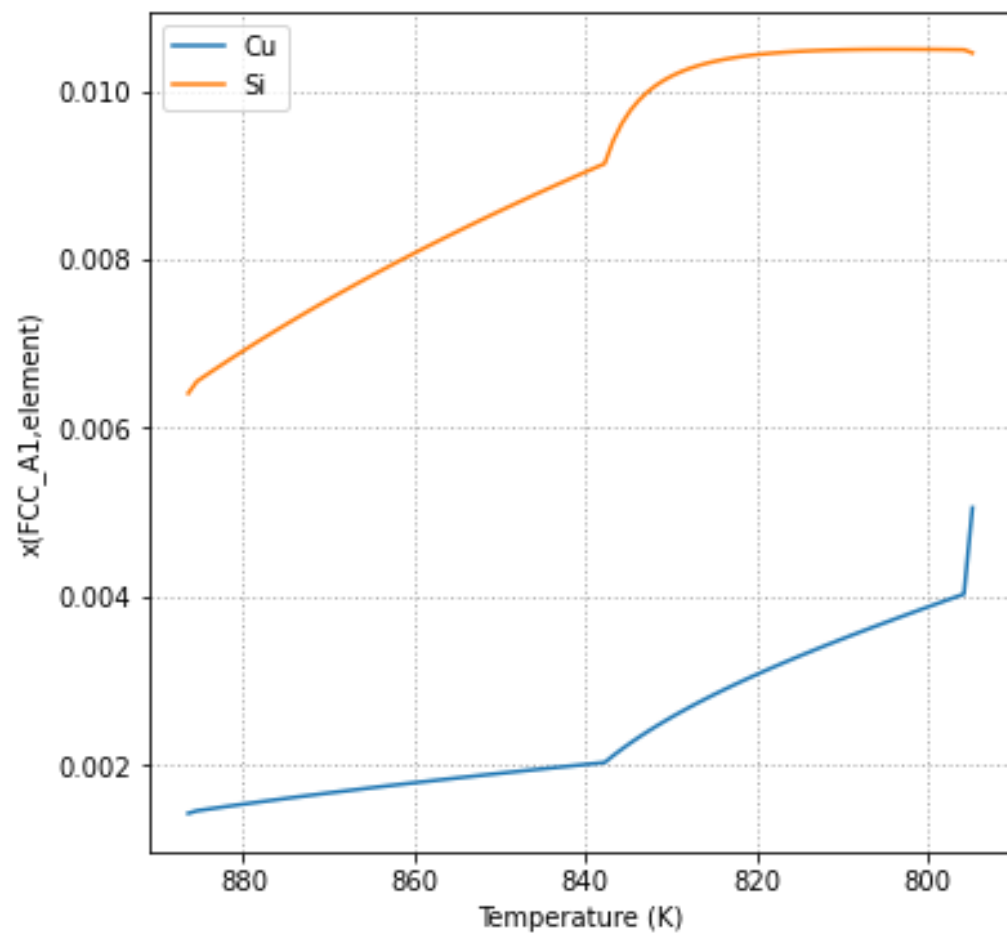
④ 固相 S_j 中の元素kの量を固相 S_j の量で割る。

$$X_{total}(S_j, k) = \frac{N_n(S_j, k)}{NS_n(S_j)}$$

各相の体積分率



FCC_A1相における 元素固溶量の増加量



FAQサイト



キーワード検索

キーワードまたは文章で検索できます(200文字以内) ?

レーラー

検索する

FAQ種別 全てのFAQ種別を対象 ▾



注目のキーワード

[コンソールモード](#) | [グラフィカルモード](#) | [ライセンス](#) | [データベース](#) | [擬2元系](#) | [3元系](#) | [エリಂಗム](#) | [ユーザー](#) | [2元系](#) | [DICTRA](#)


「レーラー」でキーワード検索した結果

3件中 1 - 3 件を表示

◀ 1 / 1ページ ▶

キーワード一致 ▾

Q レーラー図の描画方法を教えてください(グラフィカルモード)

No: 10209 公開日時: 2019/08/02 13:38 更新日時: 2021/12/08 18:46 カテゴリー: グラフィカルモード

Q レーラー図の描画方法を教えてください(TC-Python)

No: 10211 公開日時: 2021/09/03 10:51 更新日時: 2021/11/22 11:35 カテゴリー: Thermo-Calc

Q レーラー図の描画方法を教えてください(コンソールモード)

No: 10206 公開日時: 2021/09/03 10:51 更新日時: 2021/10/26 13:58 カテゴリー: コンソールモード



3件中 1 - 3 件を表示



シャイル凝固計算で凝固完了時における各固相の組成と体積分率を出力する方法を教えてください

シャイル凝固計算で凝固完了時における各固相の組成と体積分率を出力する方法を教えてください

キーワード: Scheil, 凝固

カテゴリー: Thermo-Calc > TC-Python > Thermo-Calc



回答

```
# 数値計算を効率化するためのライブラリをインポート
import numpy as np
# グラフを描画するためのライブラリをインポート
import matplotlib.pyplot as plt
# TC-Pythonをインポート
from tc_python import *
```

```
## 変数の定義
database = "ALDEMO"
dependent_element = "Al"
composition = {"Cu": 3.5, "Si": 6.0}
```

```
# "with TCPython()" ~ "の中でTC-Pythonを使用する
with TCPython() as start:
```