



Thermo-Calc Software

Thermo-Calcカンファレンス

Python言語による熱力学計算と機械学習の連携

1. TC-Pythonについて
2. 複数の要件を満たすための鉄鋼材料の組成最適化
3. 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. TC-Pythonについて
2. 複数の要件を満たすための鉄鋼材料の組成最適化
3. 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 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

電気特性

電気抵抗, 電気伝導

熱特性

熱抵抗, 熱伝導

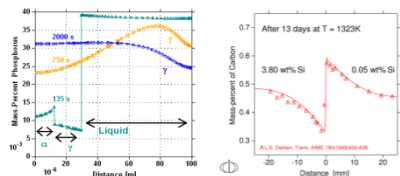
+ 拡張モジュール



拡散モジュール DICTRA

適用例

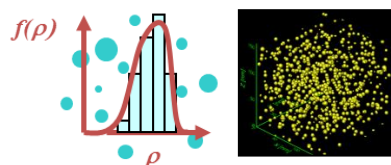
浸炭, 窒化, 接合, 均質化, 凝固, 化合物の成長・消失, ミクロ偏析, γ - α 変態...



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...



冶金プロセス モジュール

適用例

BOF, アーク炉, LF, 脱リン, 脱酸, 脱硫, 介在物除去, VOD, 塩基度, 粘性...



鉄鋼向け プロパティモデル

計算機能

鉄鋼のTTT曲線, CCT曲線, 各種変態点 (液相/固相線, A0~A4, Acem, Agraph)



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)



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

➤大量の条件での計算や他のPythonライブラリとの連携が可能

- 平衡計算

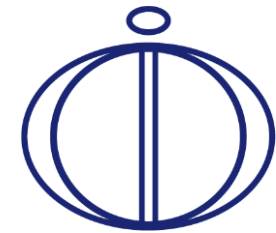
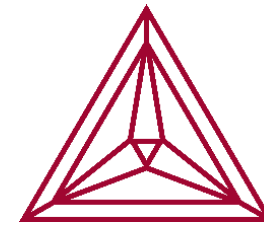
- 一点平衡計算
- step計算
- map計算
- Scheil モジュールの凝固計算

- プロパティモデルの計算

- ジェネラルモデル
- 鉄鋼向けプロパティモデル (TCFE9+MOBFE4 が必要)

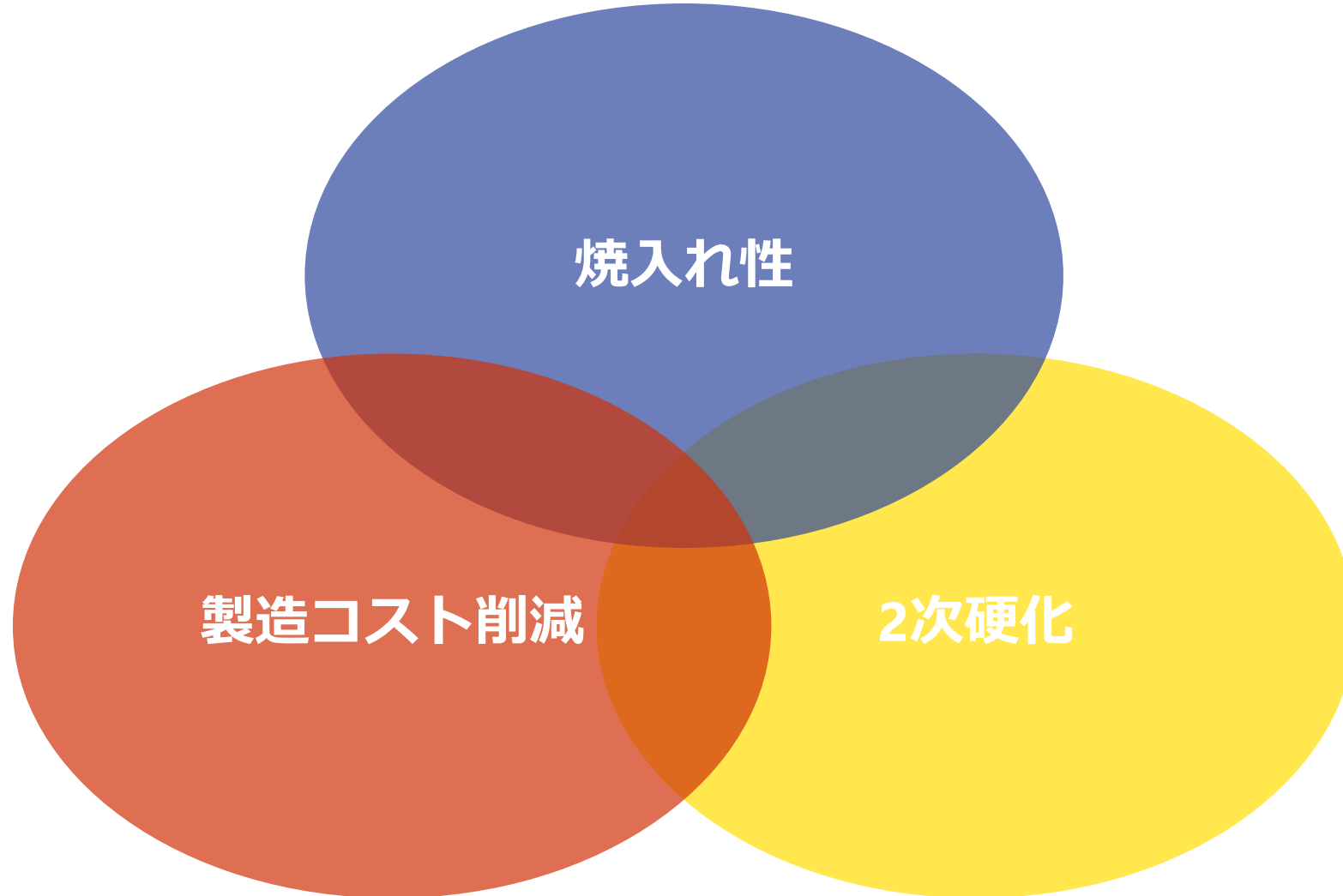
- 析出モジュール(TC-PRISMA)の計算

- 拡散モジュール(DICTRA)の計算



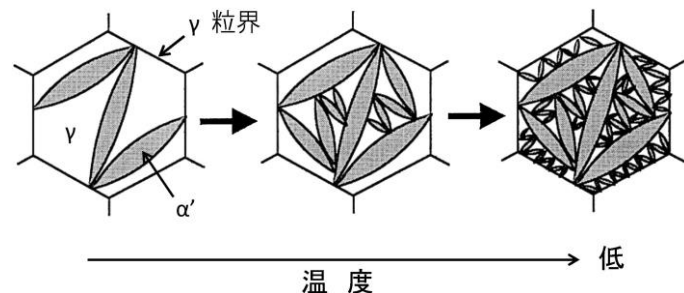
1. TC-Pythonについて
- 2. 複数の要件を満たすための鉄鋼材料の組成最適化**
3. チタン合金における β 相安定化に寄与する組成条件の可視化

3つの要件を同時に満たす組成最適化を行った事例を紹介

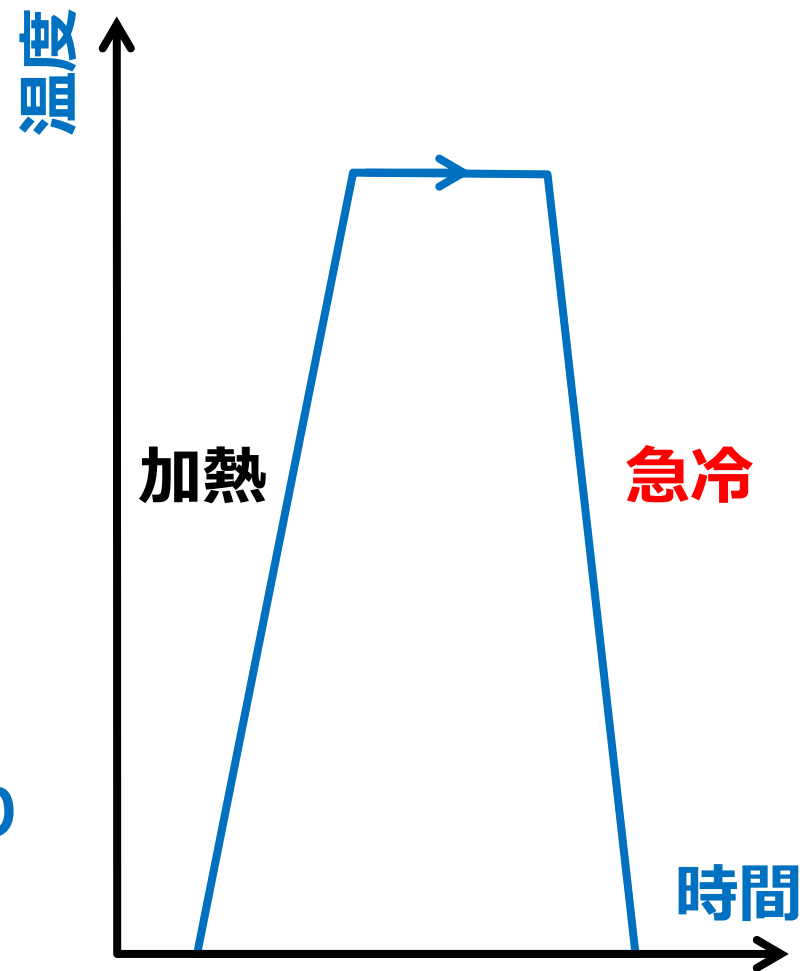


- 焼入れの効果

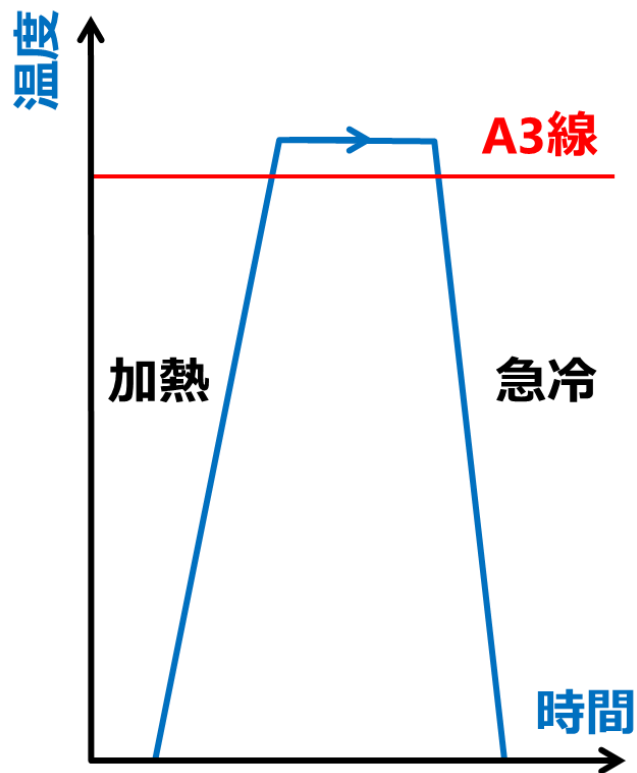
- ・ 硬質化
- ・ 引張強さの向上
- ・ 疲労強度の向上



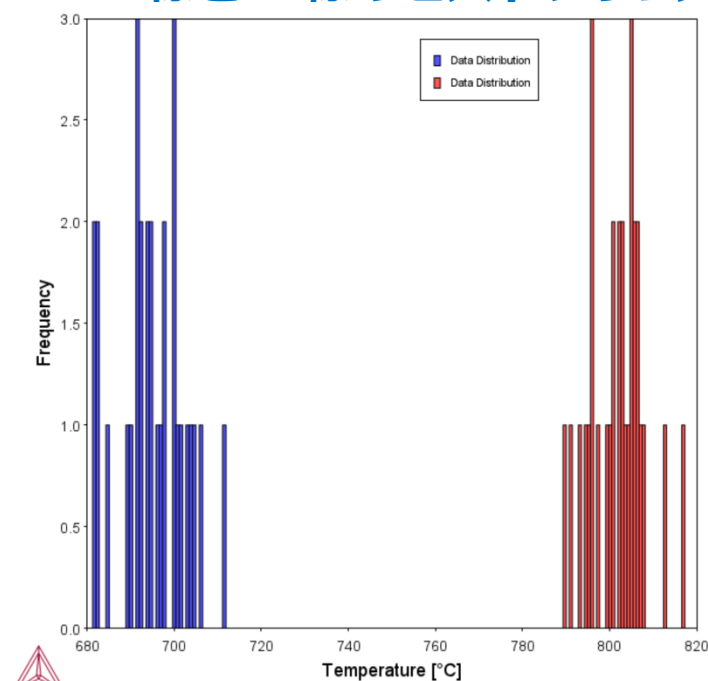
- 冷却時にオーステナイトが**マルテンサイト**に変態
- 冷却速度が遅いと**パーライト**や**ベイナイト**に変態
- 特に大型の部品は冷却速度が遅い材料内部までマルテンサイト化できる材料設計が要求される
(**焼入れ性**)
- 鉄鋼向けプロパティモデルのCCT曲線の計算により**焼入れ性の指標である臨界冷却速度の評価が可能**



- 焼入れ時の熱処理はA3線以上の温度（オーステナイト化温度）で実施される
- A3線が低いような材料であれば**焼入れ時の熱コストを削減可能**
- **鉄鋼向けプロパティモデルで評価が可能**



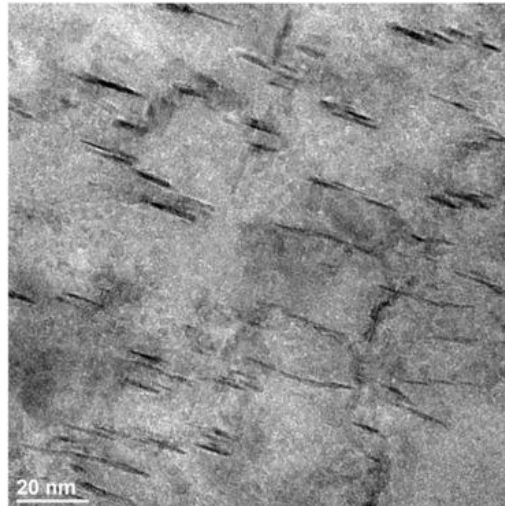
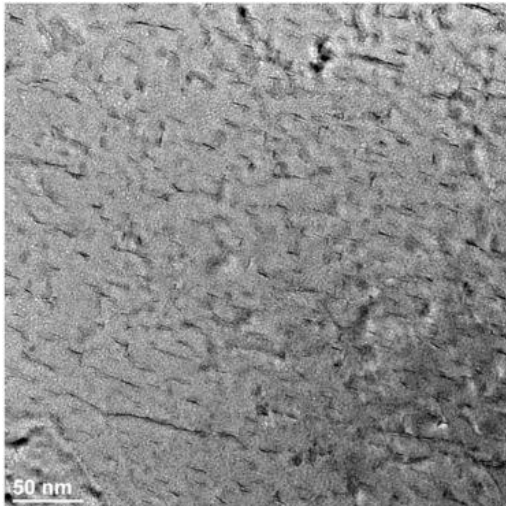
低合金鋼の規格範囲における
A1線とA3線のヒストグラム



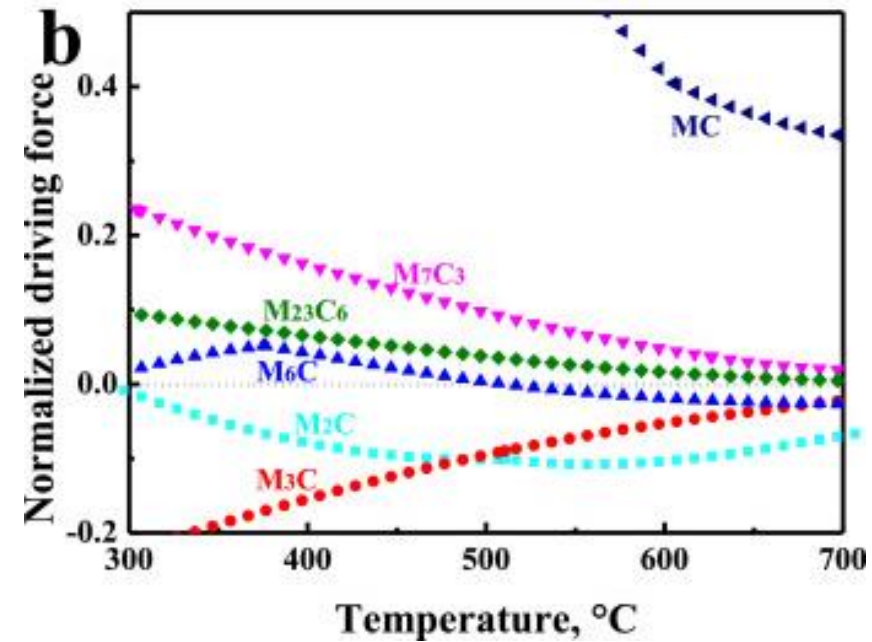
例題 PM_Fe_04: Critical Temperatures より

- 焼戻し時に2次硬化に寄与するM₂C炭化物が析出
- プロパティモデルが関数DG(phase)で駆動力の評価が可能

焼き戻し中に発生するM₂C*¹



各炭化物の駆動力*²



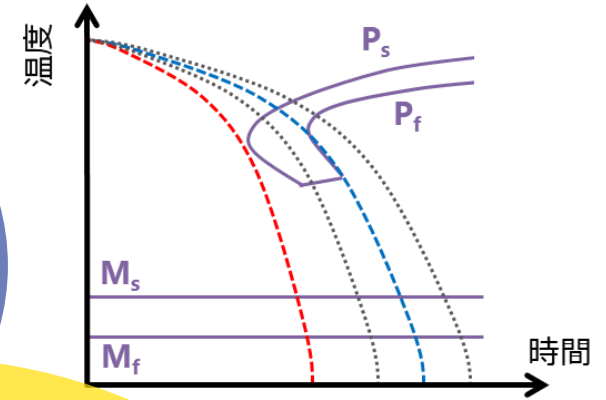
1. Mondière, Aurélien, et al. "Controlling the MC and M₂C carbide precipitation in Ferrium® M54® steel to achieve optimum ultimate tensile strength/fracture toughness balance." *Materials Characterization* 140 (2018): 103-112.

2. Zhou, Tao, et al. "Precipitation of multiple carbides in martensitic CrMoV steels-experimental analysis and exploration of alloying strategy through thermodynamic calculations." *Materialia* 9 (2020): 100630.

3つの要件を同時に満たす組成最適化を行った事例を紹介

焼入れ性

上部臨界冷却速度

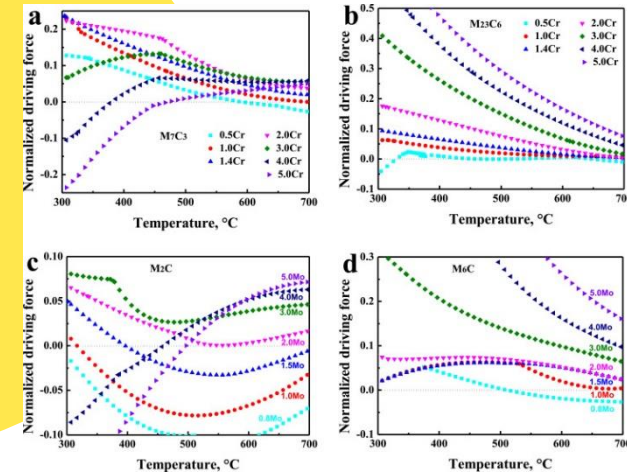
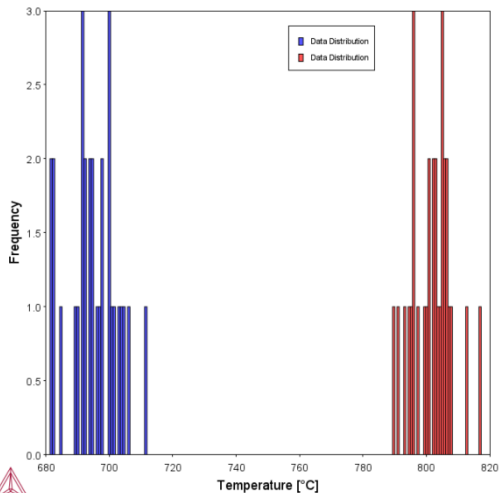


製造コスト削減

2次硬化

600℃における駆動力

A3線



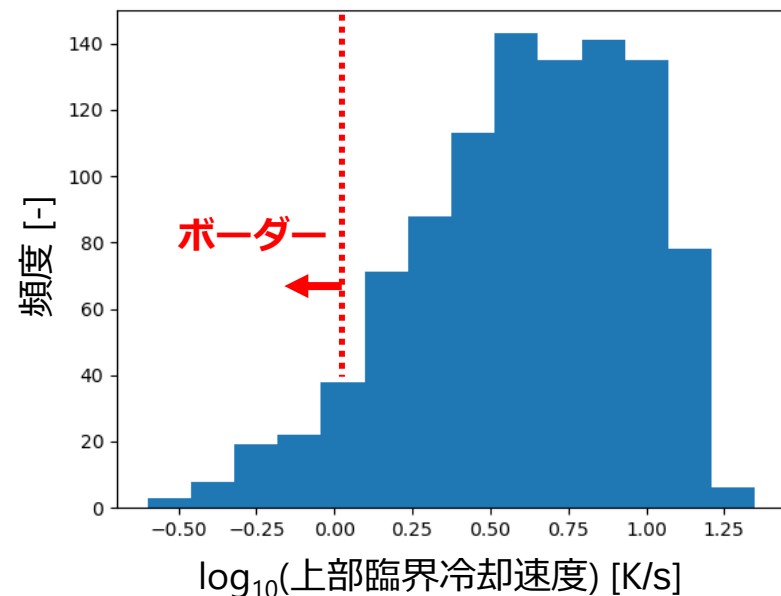
合金系：SKD61

合金組成(wt%)

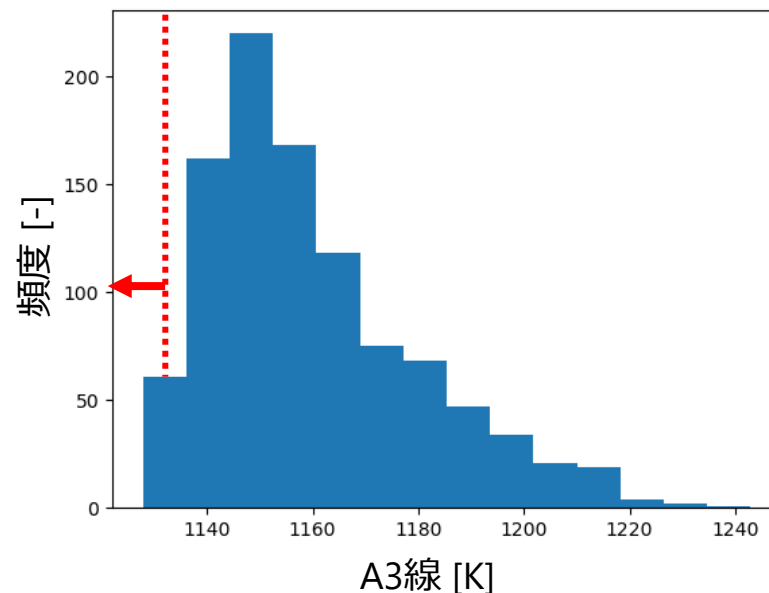
C	Si	Mn	Cr	Mo	V
0.35～0.42	0.80～1.20	0.25～0.50	4.80～5.50	1.00～1.50	0.80～1.15

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1割

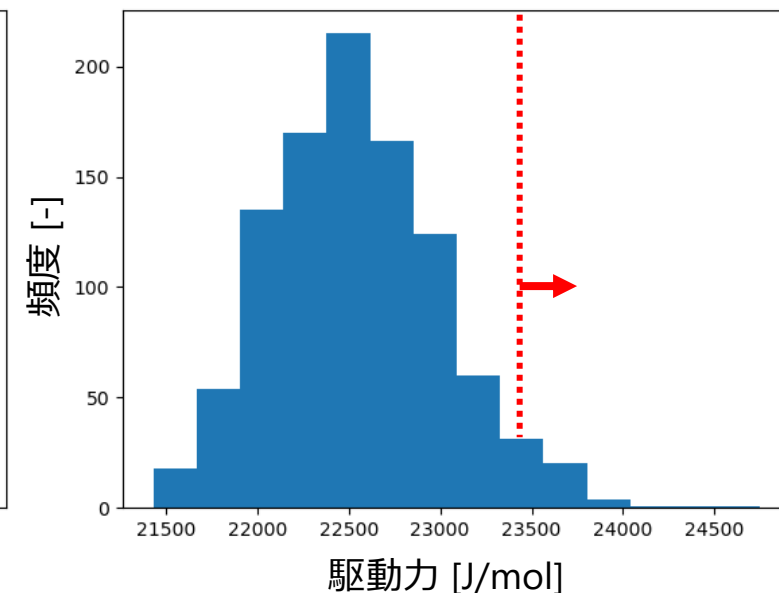
上部臨界冷却速度



A3線



600℃におけるM2Cの駆動力

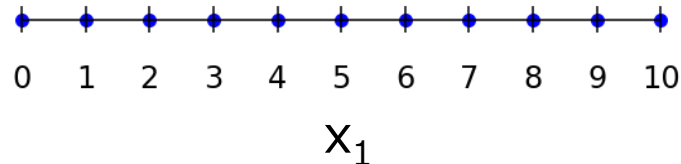


総当たりの探索する場合、考慮する元素が増えると試行回数は指数関数的に増加

各元素を10通りずつ計算すると…

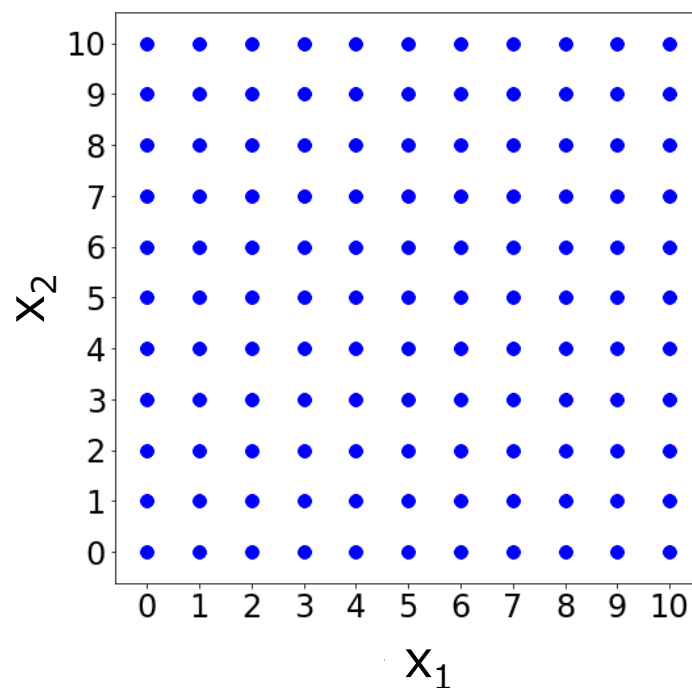
Fe- x_1 C

10^1 通り



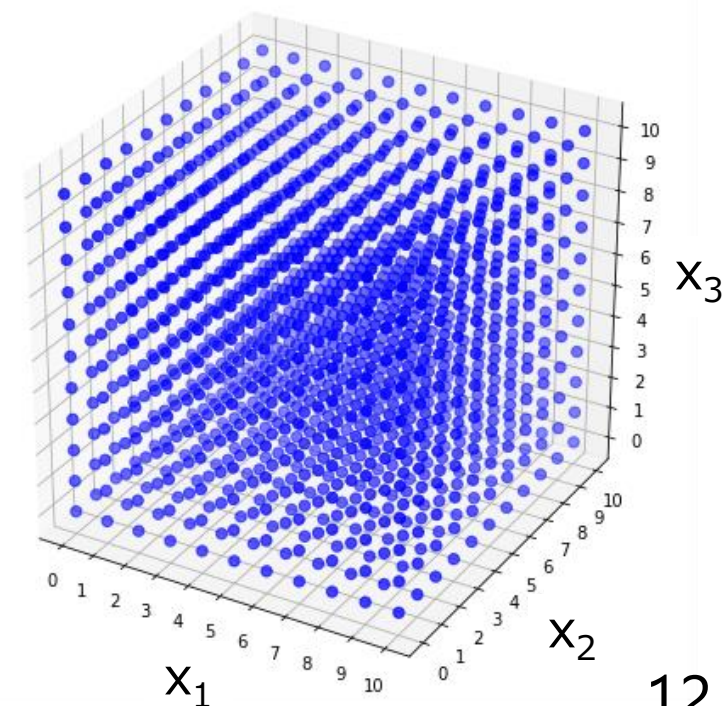
Fe- x_1 C- x_2 Mn

10^2 通り



Fe- x_1 C- x_2 Mn- x_3 Cr

10^3 通り

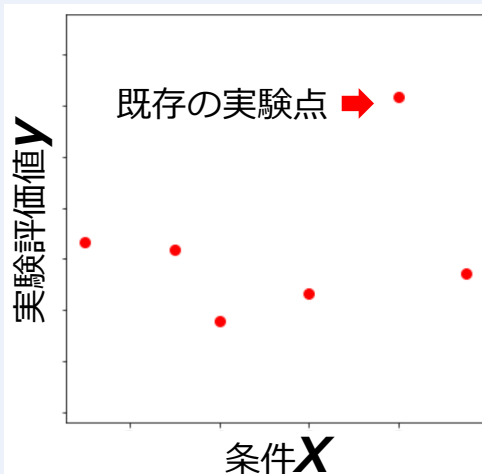


既存のデータと不確かさを考慮して次に探索する条件を決定する手法

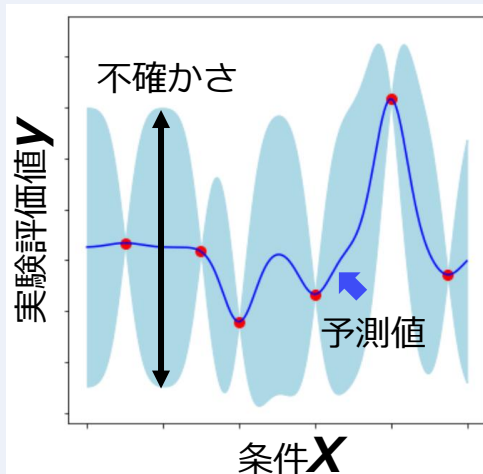
ベイズ最適化の流れ

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

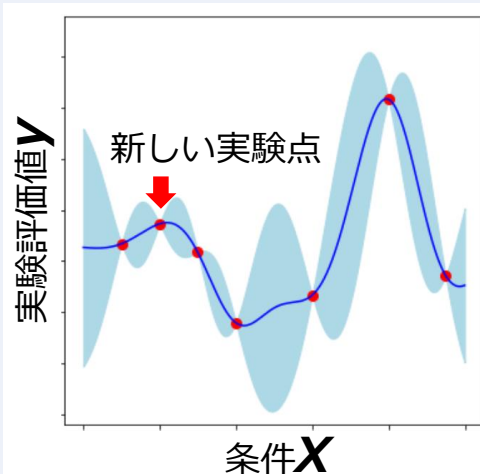
① 既存のデータから
予測モデルを作成



② 予測値と不確かさを
計算

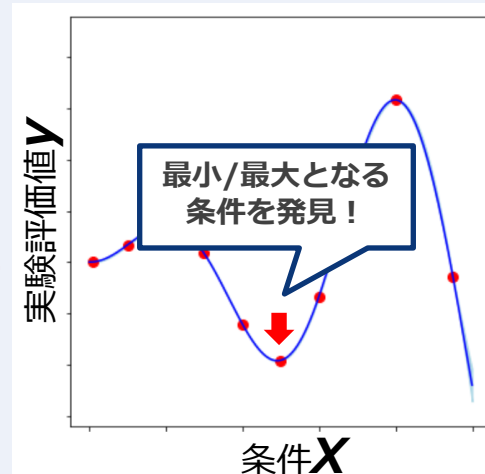


③ 既存のデータと不確かさを
考慮した条件で実験



・・・
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)

説明変数 (組成)

$\text{Fe-}x_1\text{C-}x_2\text{Si-}x_3\text{Mn-}x_4\text{Cr-}x_5\text{Mo-}x_6\text{V}$

目的変数 (特性)

y_1 : 上部臨界冷却速度

y_2 : A3線

y_3 : 600°CにおけるM2Cの駆動力

データセットに追加



計算

組成の候補

$\text{Fe-}x_{11}\text{C-}x_{12}\text{Si-}x_{13}\text{Mn-}x_{14}\text{Cr-}x_{15}\text{Mo-}x_{16}\text{V}$

⋮

$\text{Fe-}x_{n1}\text{C-}x_{n2}\text{Si-}x_{n3}\text{Mn-}x_{n4}\text{Cr-}x_{n5}\text{Mo-}x_{n6}\text{V}$

モデリング (ガウス過程回帰)

推定モデル

$y_1 = f_1(X)$

$y_2 = f_2(X)$

$y_3 = f_3(X)$

y_1, y_2, y_3 の
推定値と分散

既存の最高記録を
上回る/下回る確率

獲得関数PI
 PI_1, PI_2, PI_3

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

選ばれた組成

$\text{Fe-}x_{k1}\text{C-}x_{k2}\text{Si-}x_{k3}\text{Mn-}x_{k4}\text{Cr-}x_{k5}\text{Mo-}x_{k6}\text{V}$



計算

目的変数

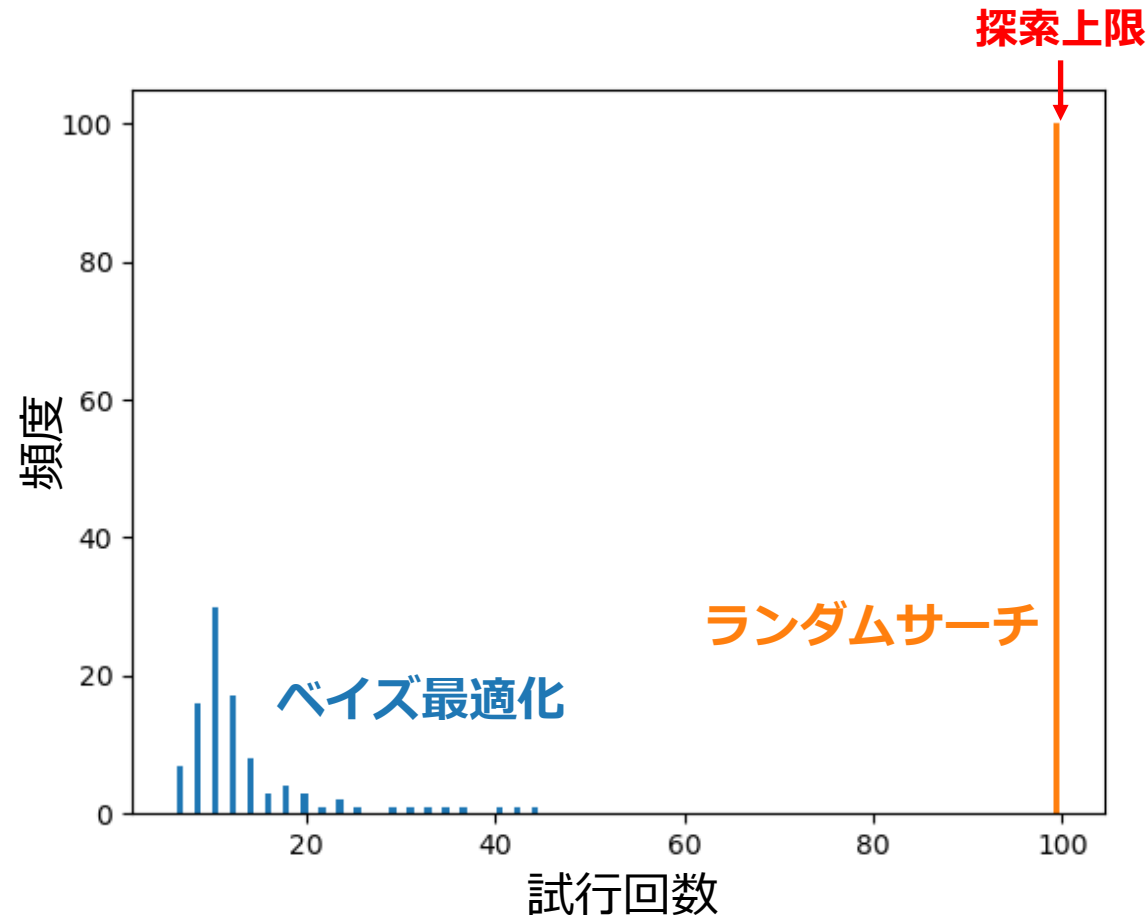
y_1, y_2, y_3

全ての目的変数で
目標達成

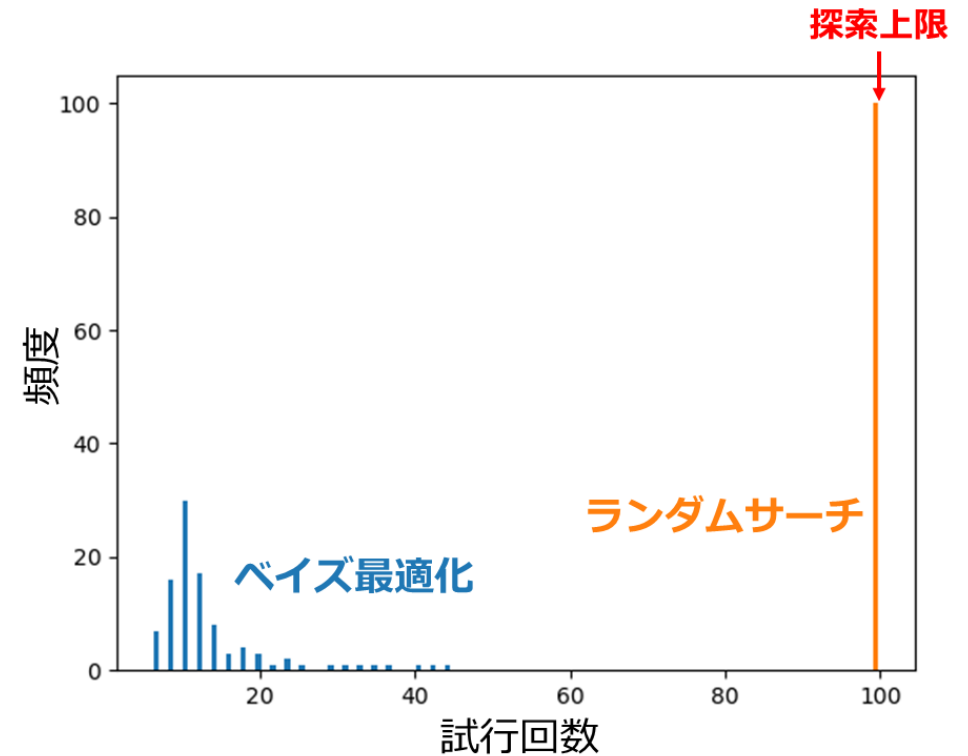
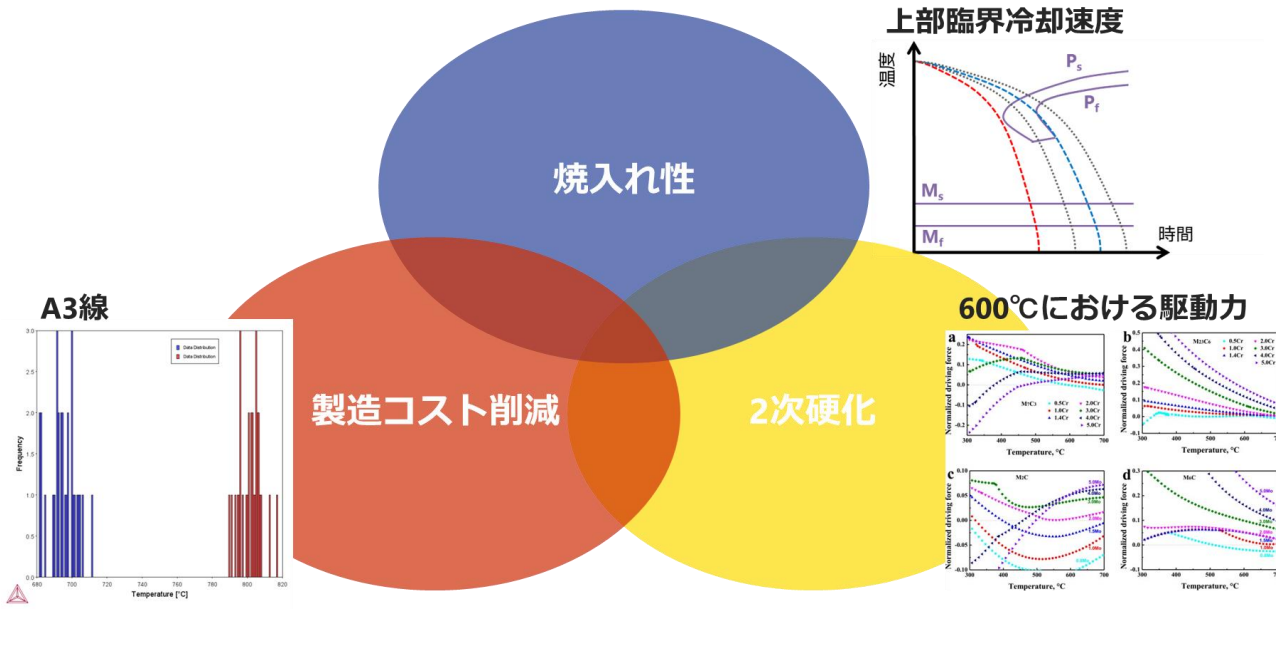
探索終了

目標未達成

- ✓ 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**

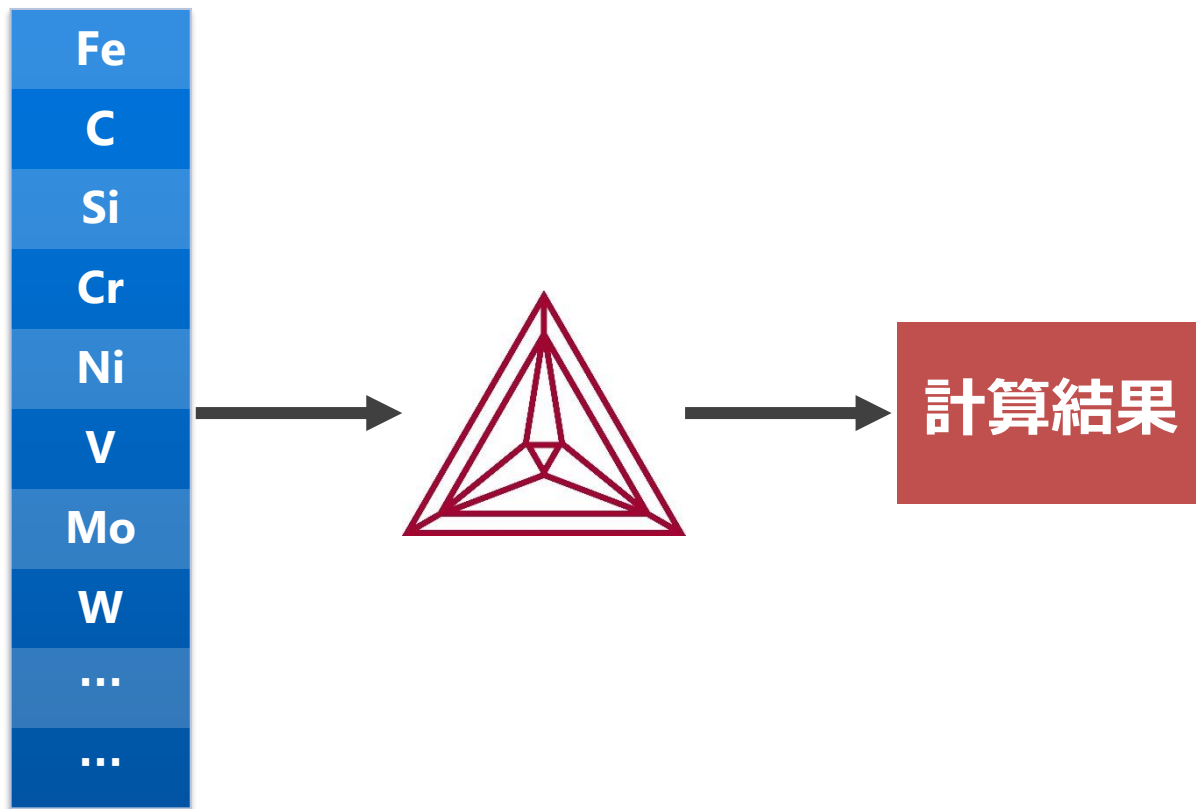


- ✓ Thermo-Calcで計算可能な特性の内、3つの要件を満たすための鉄鋼材料の組成最適化を実施
- ✓ ベイズ最適化により効率的な条件探索が可能



1. TC-Pythonについて
2. 複数の要件を満たすための鉄鋼材料の組成最適化
3. 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

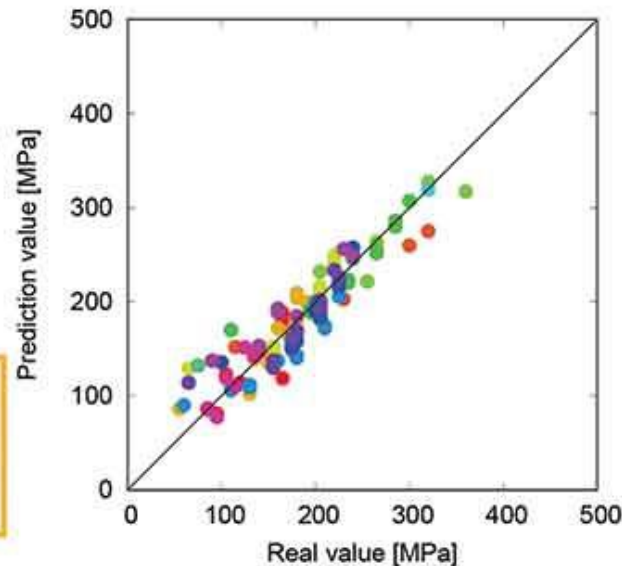
X	n	Fe (wt%)	Mn (wt%)	...	Proof stress (MPa)
1	2	0.35	0.1	...	95
1	4	0.35	0.1	...	120
1	6	0.35	0.1	...	145
1	8	0.35	0.1	...	165
2	2	0.35	0.1	...	85
2	4	0.35	0.1	...	165
3	4	0.35	0.1	...	105
3	8	0.35	0.1	...	165
1	1	0.18	0.35	...	115
:	:	:	:	:	:
1	8	0.18	0.35	...	300
1	9	0.18	0.35	...	320

Predict unknown point



Supervised learning

Regression model

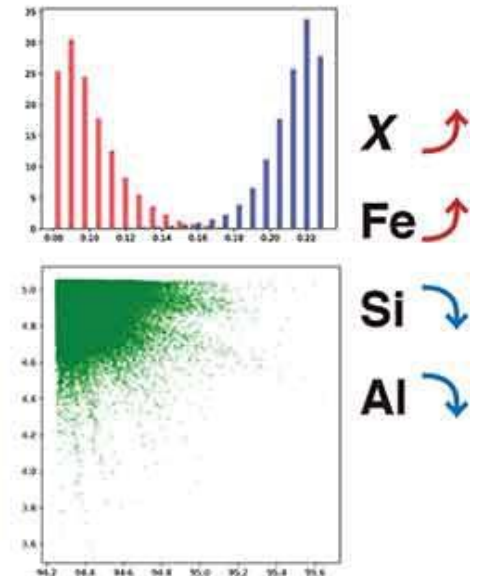


Generate many data



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

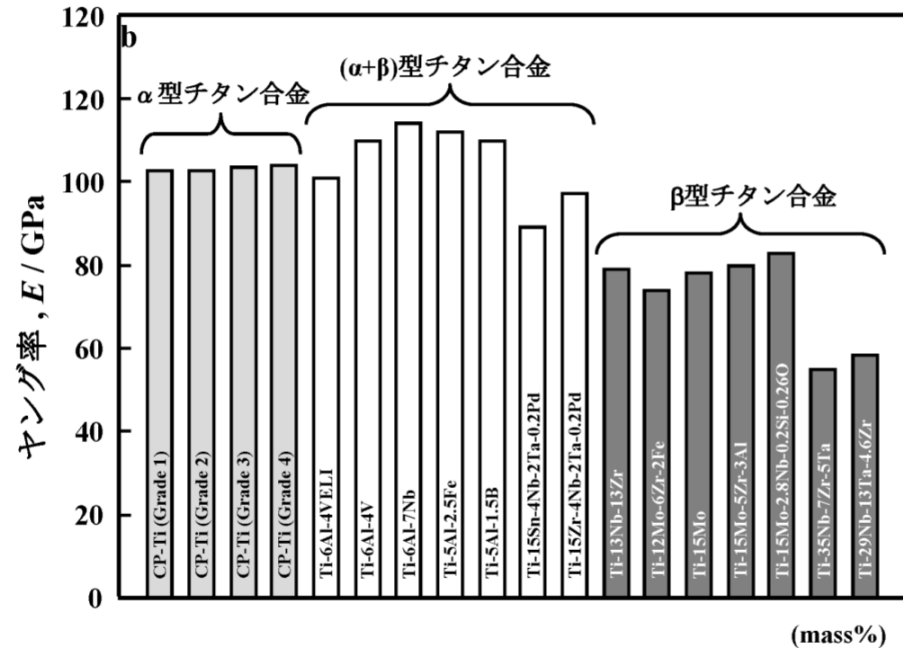


図13 代表的な生体用α型、(α+β)型およびβ型チタン合金のヤング率の比較.

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
...	...	...	...	...
...	...	...	...	...
...	...	...	...	...

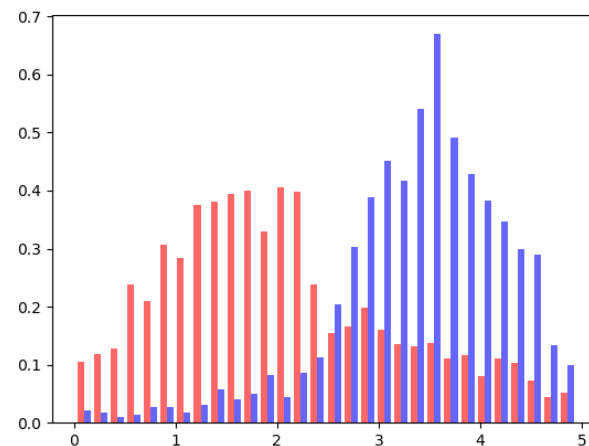
② モデリング

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

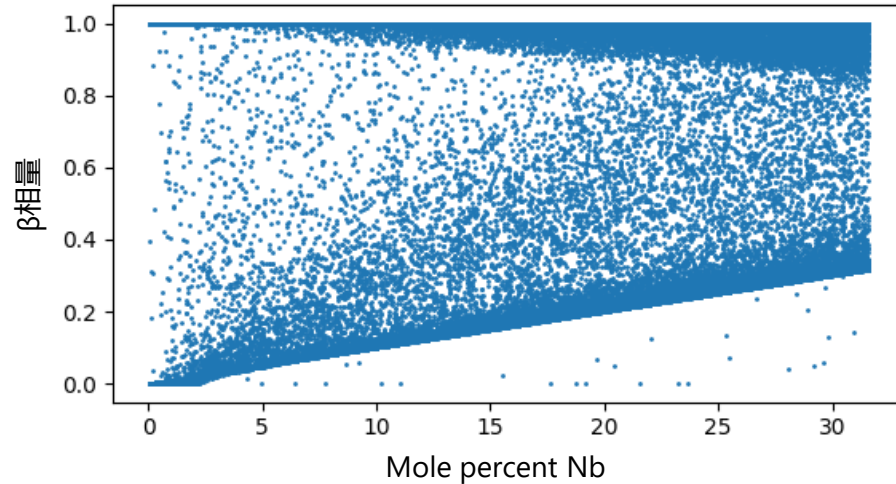
③ MCMCサンプリング

選定されたモデルを使用して
サンプリング

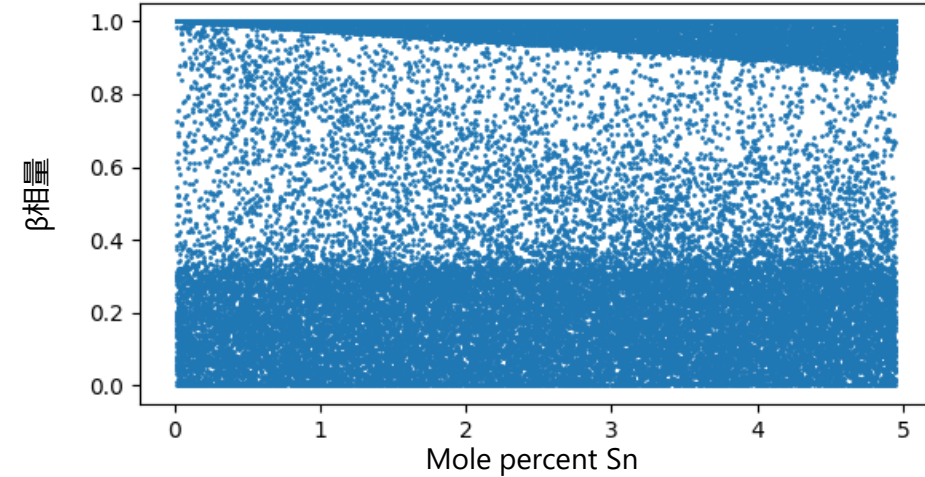


各元素-β相量の相関係数は0に近く、明確な関係は見られない

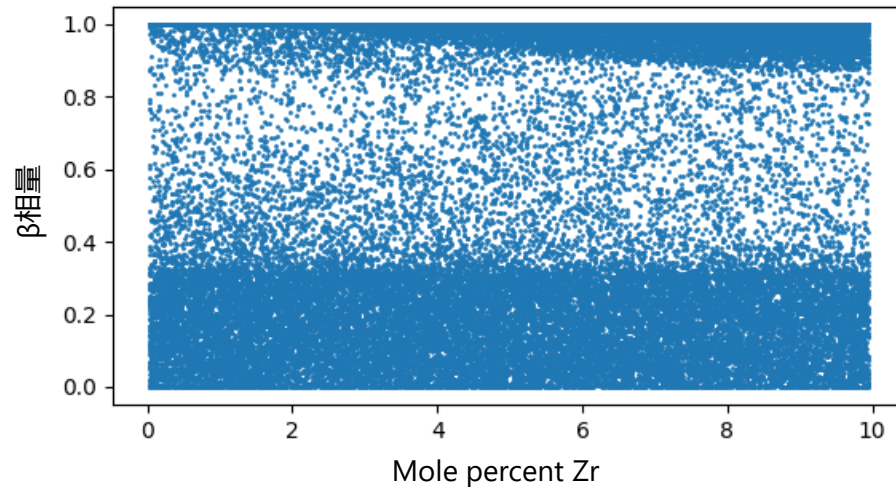
Nb : $r=0.18$



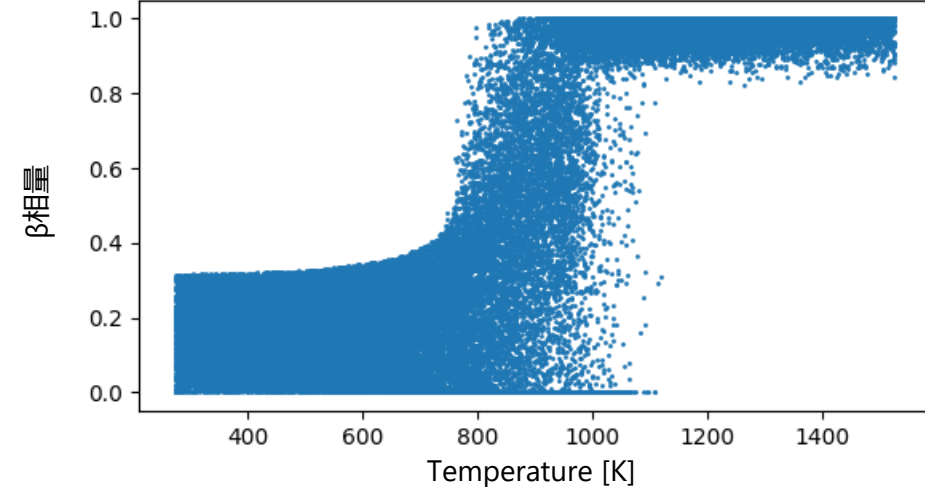
Sn : $r=-0.045$



温度 : $r=0.040$

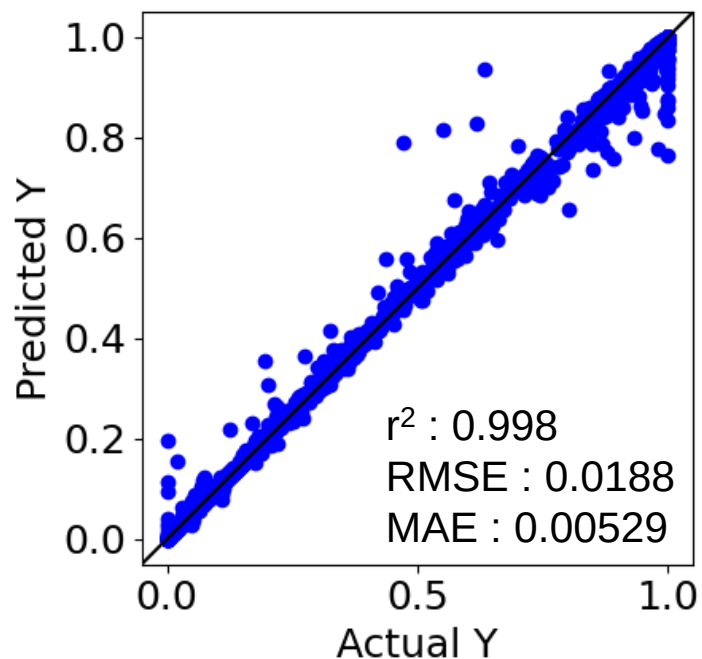


温度 : $r=0.87$



RMSEを指標にモデルを選定後、MCMCサンプリングを実施

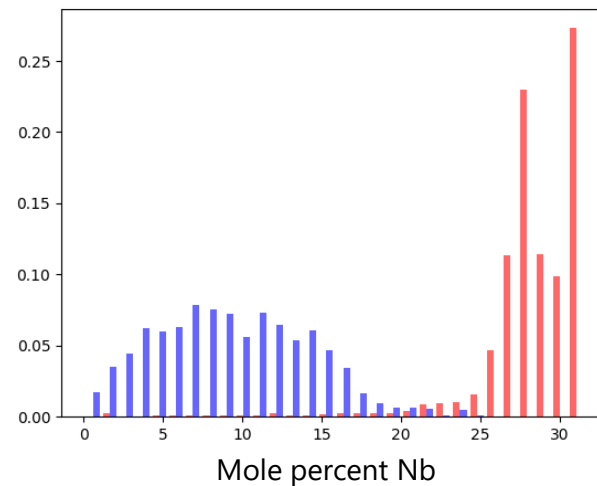
ランダムフォレスト回帰



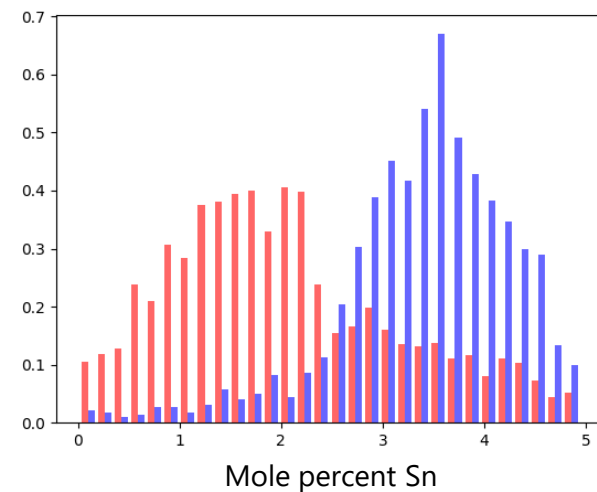
MCMC
サンプリング



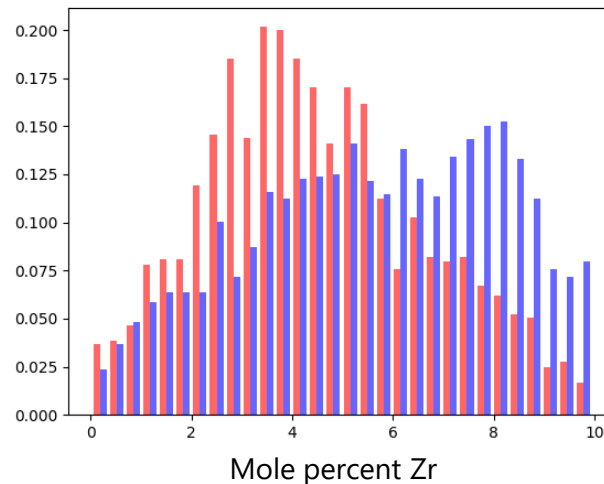
Nb



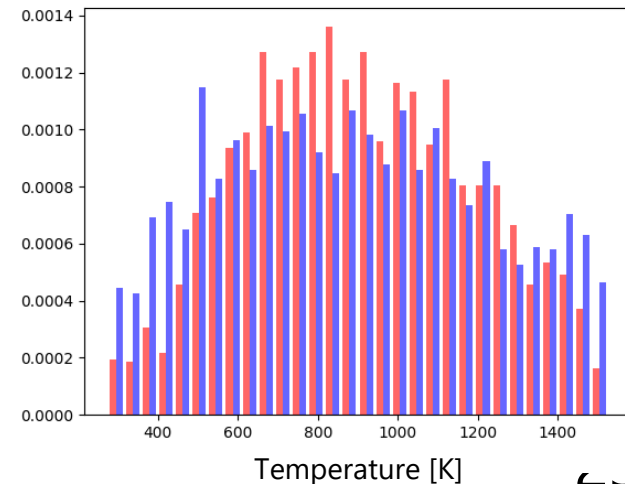
Sn



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

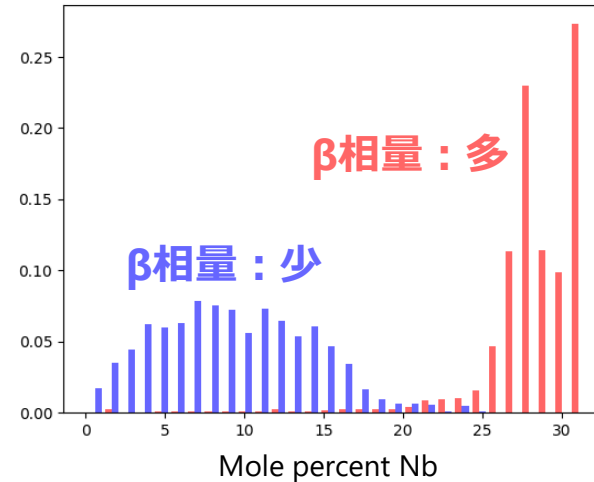
- Nb : β 相の増加に寄与

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

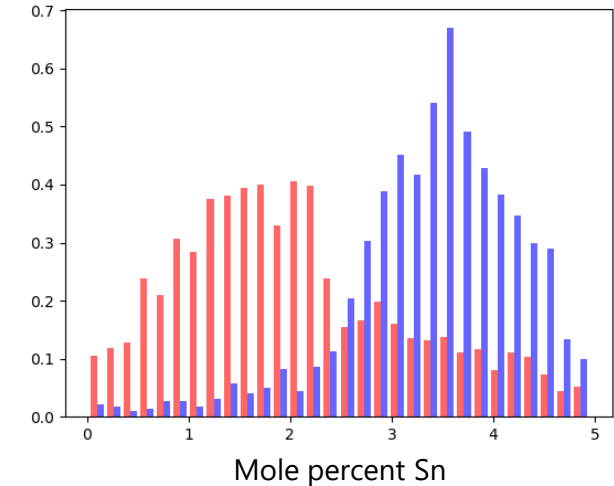
- Sn : β 相の減少に寄与

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

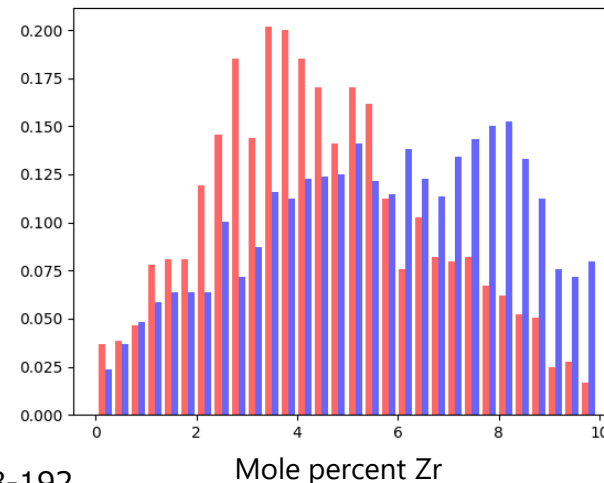
Nb



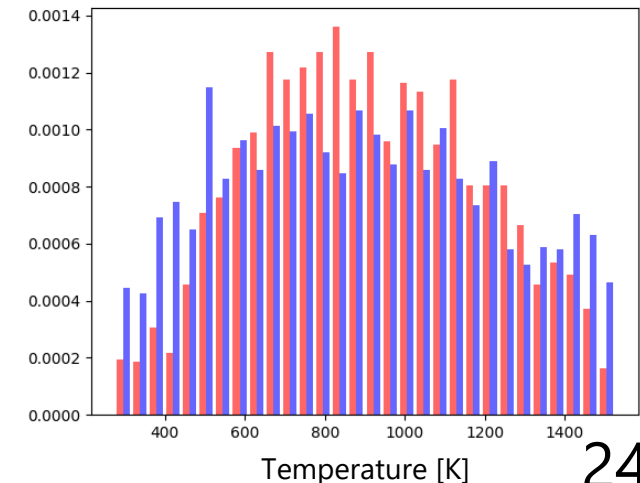
Sn



Zr



温度

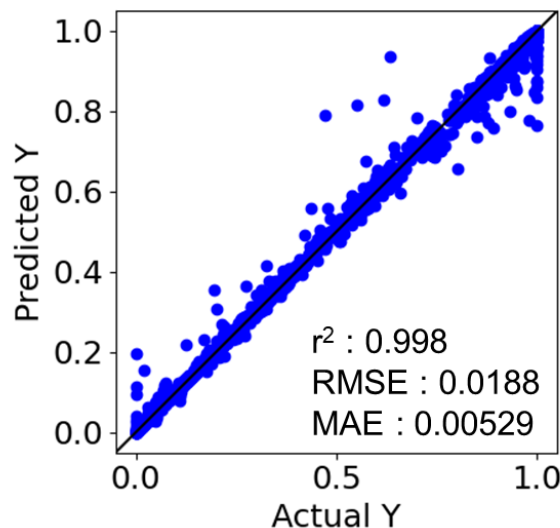


- ✓ β 型チタン合金における平衡計算結果のデータセットを用いてモデリング、MCMCサンプリングを実施
- ✓ β 相量と各元素の組成についての非線形な相関関係を可視化できた

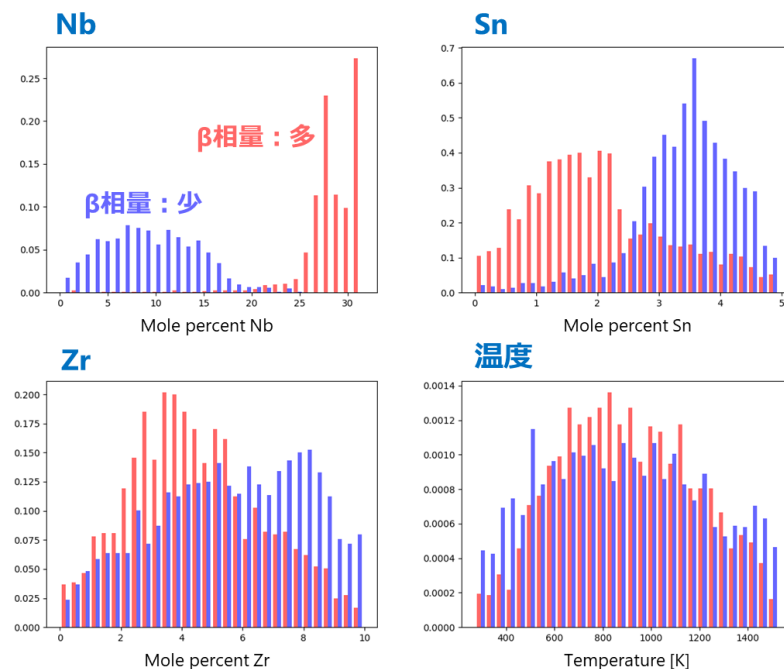
データセット

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

モデリング

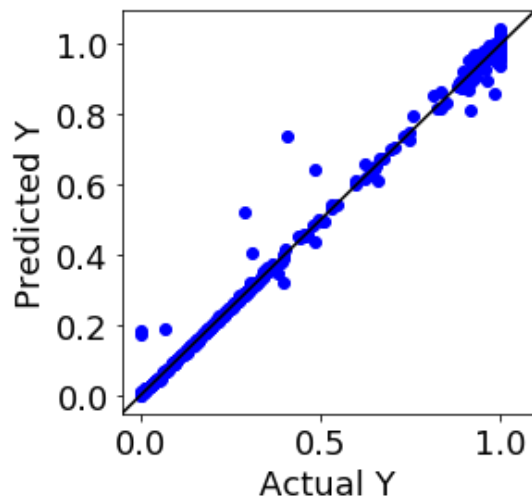
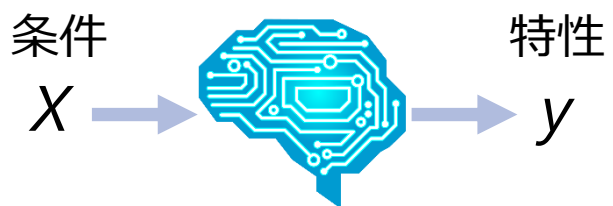


MCMC

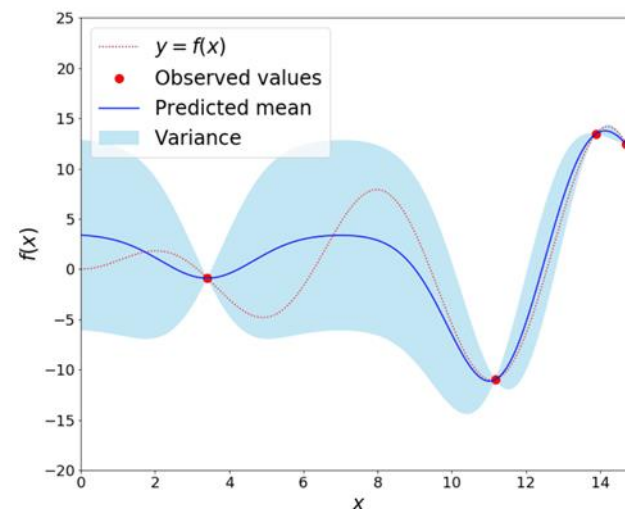
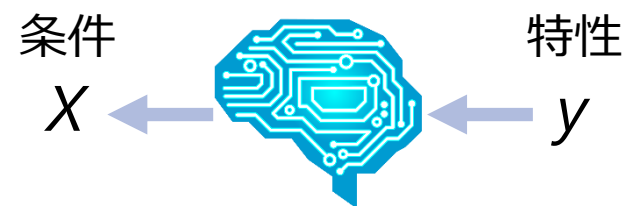


TC-Pythonにより熱力学計算と機械学習のシームレスな連携が可能
適用例：材料設計の効率化, 逆解析, 実データ予測のための記述子作成…

特性予測



逆解析、条件の最適化



TC-Python体験セミナー

日程：2022年2月10日(木) 13:00～16:00

内容：TC-Python例題の操作実習（機械学習については取り扱いません）

対象：Thermo-CalcとPythonの基本的な使用方法を習得している方*

参加費：無料（事前登録制）

URL：https://ctc-g.zoom.us/webinar/register/WN_KTz6I_2fTt6FuyhTy3z0oQ

*Thermo-Calcについては「材料設計シミュレーション体験セミナー」でご体験いただけます。

2022年2月3日(木) 13:00～16:00

https://ctc-g.zoom.us/webinar/register/WN_hXaV05pgSWSU-ln4YRDINw

Pythonの習得については個別にご相談ください。