

---

# **3D 積層造形プロセスにおいて亀裂発生を抑制可能な **Ni** 合金組成の探索**

リリース **1.0.0**

**SIP-MI**

**2019 年 11 月 12 日**



# 目次

第 1 章	概要	1
1.1	解析概要	1
1.1.1	解析 1	1
1.1.2	解析 2	2
1.1.3	解析 3	2
1.1.4	その他	2
1.2	最適化	2
1.2.1	最適化の概要	2
1.2.2	環境	3
1.2.3	実行結果の評価	3
1.3	bayes 推定のパラメータ	4
1.4	Dakota パラメータファイル	4
1.4.1	method、手法の詳細	4
1.4.2	variables、変数詳細	4
1.4.3	interface、目的関数	4
1.4.4	response	5
1.5	その他	5
1.6	付録	5
1.6.1	取り入れた様々な手順	5
第 2 章	解析 1 の結果	9
2.1	計算の結果	9
2.1.1	最終結果	9
2.1.2	3 候補	9
2.2	詳細	9
2.2.1	パラ平衡の場合	12



# 第 1 章

## 概要

### 1.1 解析概要

- 与えられた組成に対して、Thermo-Calc を用いた Scheil 凝固計算により、凝固開始温度と凝固完了温度の温度差（固液共存域温度、Brittle Temperature Range: BTR）を求める。
- Inconel 738LC をベースにする。

```
(Inconel 738LC)
* Ni Bal.
* Al 3.2
* C 0.1
* Co 8.5
* Cr 16.3
* Mo 1.65
* Nb 0.7
* Ta 1.8
* Ti 3.22
* W 2.7
* Zr 0.03
```

#### 1.1.1 解析 1

1. Ti と Al の組成和（Ti+Al）を 7.0 (mass%) に固定、その他の元素は上記 Inconel 738LC の成分に固定
2. Thermo-Calc の平衡計算から、 $\gamma'$  体積率 30% 以上
3. 上記の条件を満足した上で、固液共存域（BTR）が最も小さくなる Ti と Al 濃度（=7.0 - Ti 濃度）を求める。
4. ベイズ最適化などの最適化手法を適用する。
5. パラ平衡を入れる場合と、入れない場合の 2 パターンで探索を行う。
6. Ti と Al 組成の有効桁は、0.01 mass% とする。

7. BTR が最小のものから 3 個程度の候補組成を得る。
8. JMatPro で力学特性を計算してみる。※他の元素が固定のため、 $\gamma'$  量や BTR 値の変化幅は小さいかもしれないが、動作検証も兼ねる

### 1.1.2 解析 2

1. Ti と Al の組成を解析 1 の結果に基づき固定。
2. その他の元素について、1 つずつ変化させていく。
3. Thermo-Calc の平衡計算から、 $\gamma'$  体積率 30% 以上となり、
4. 固液共存域 (BTR) が最も小さくなる濃度を各元素毎に求める。
5. ベイズ最適化などの最適化手法を適用する。
6. パラ平衡を入れる場合と、入れない場合の 2 パターンで探索を行う。
7. 各有効桁 (ステップ) は、0.01 mass% とする。
8. 結果を眺めて、着目する元素を複数に絞り、解析 3 を行う。

### 1.1.3 解析 3

- 解析 2 の結果に基づき、影響の大きい元素およびその変化幅を決め、その中で  $\gamma'$  体積率 30% 以上となり、BTR 値が最小となる組成候補を探す。
- 多くの組み合わせが出てくると考えられるため、最終的にどう絞り込むか検討が必要。10~20 候補程度に絞りこみ、それぞれについて JMatPro での強度予測を行い、K 社への提案組成を決定する。※ 候補組成について、例えば 800 度での降伏応力が 500 MPa 以上などといった条件を加えられると良い (今後の検討)

### 1.1.4 その他

- Peer Review までに 1 組成、KHI へ提案したい。各チームの Peer Review 資料にも入れ込みたい (A2, A4, C1)。
- 今後、Mn, S, Si, B など探索空間に加えたい。

## 1.2 最適化

### 1.2.1 最適化の概要

Dakota を最適化のツールとして利用し、最適化の変数として Thermo-Calc 用パラメータのうち、解析概要にあるパラメータを用い、目的関数として Thermo-Calc の計算を行った。計算の結果から固液共存域 (BTR) を導出しこれが、最小となる最適化の評価を行った。なお「 $\gamma'$  体積率 30% 以上」の条件は後述の ReLU 関数を用いて 30%

以下の場合にペナルティを与えて評価値が除外される方向で対処した。最適化手法は「制約付き最小化共役勾配最適化法」を主に使用した。

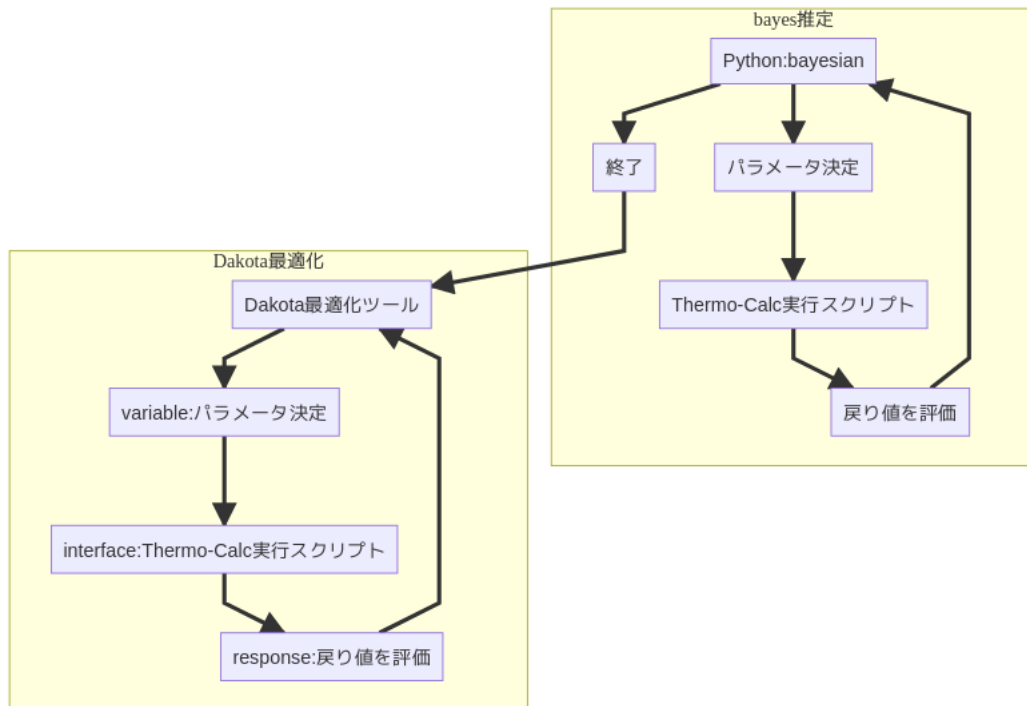


図1 最適化作業フロー

### 1.2.2 環境

検証に使用した環境を下記に記す。

- Dakota : 6.7
- Thermo-Calc2019a
- CentOS 7.x
- Python3.6 - py\_bayesian\_optimization : 1.0.1

### 1.2.3 実行結果の評価

bayes 推定および Dakota 実行時の標準出力への出力をログとして記録する。これが詳細な最適化評価の結果となる。他に、「tabulargraphics.dat」というファイルが出力される。これは変数と評価の履歴のみである。これらから最適な入力パラメータを判断することとなる。

## 1.3 bayes 推定のパラメータ

bayes 推定プログラムのためのパラメータ探索が主目的ではないので、使い方を検索して多く見受けられた、以下のパラメータを使用する。

- `init_points` : 3 を指定する。
- `i_iter` : 10 を指定する。

## 1.4 Dakota パラメータファイル

Dakota の駆動には、まずパラメータファイルが必要である。いくつかのテンプレートを Dakota が用意しているので、それを使用してパラメータファイルを作成する。パラメータファイルは以下の構造を持つ。主な変更点を以下に列挙する。それぞれについて記述する。

- `method` : 最適化手法の指定
- `variables` : 変数の指定
- `interface` : 目的関数の駆動法の指定
- `response` : 目的関数から Dakota へ戻される評価値の処理方法の指定

### 1.4.1 method、手法の詳細

最適化手法は以下のものを実施した。それぞれについて結果を後述する。- `conmin_fcgr`:制約付き最小化共役勾配最適化法- `max_iterations` : 10000 (1 万回まで試行を許可) - `convergence_tolerance` :  $1e-7$  (評価の際、小数点以下 7 桁まで見る)

### 1.4.2 variables、変数詳細

Dakota で管理する Thermo-Calc のパラメータのうち、以下を変数として採用した。- `Ti` + 初期値/最小値/最大値 : 3.22/2.9/3.54 + `Al` + `Ti` = 7.0 の条件は下記 `interface` 部で対処

### 1.4.3 interface、目的関数

- `analysis_dirver` : 実行用のスクリプトを指定する。
- スクリプトの概要
  - Thermo-Calc のパラメータファイルを組み立てる (パラメータ値は Dakota より指示あり)
  - 同パラメータファイルに対し、`Al + Ti = 7.0` の処理を実施
  - Thermo-Calc を実行
  - 計算結果から固液共存域 (BTR) と  $\gamma'$  体積率を導出



- ReLU を用いて  $\gamma'$  体積率  $< 30\%$  の処理を行い、適合すれば固液共存域 (BTR) の値にペナルティを与えた値を Dakota へ通知する

#### 1.4.4 response

- objective\_functions : 1 を指定する
- numerical\_gradient を指定。
- method\_source : dakota
- interval\_type : central
- fd\_step\_size : .01
- no\_hessians を指定

### 1.5 その他

Dakota による最適化の評価の対象外となる Thermo-Calc へのパラメータの設定について- オルソ平衡とパラ平衡での評価を実施した。- AI の値

Dakota では Ti の値のみ変化させたので、別途用意した AI の値はそのままでは出力されない。このため Al/Ti/gamma 量を別ログに出力した。

- ログ Dakota の実行時に Dakota が標準出力へ出力するログは dakota-<3桁通し番号>.log で都度保存した。

### 1.6 付録

#### 1.6.1 取り入れた様々な手順

- 「固液共存域 (BTR) の値」の取得

Thermo-Calc より出力される標準出力より、以下の範囲の最初の値から最後の値を減算したもの。

```
CALCULATING SCHEIL SOLIDIFICATION
  T(C) fraction solid
1344.239 0.000000
PHASE REGION:LIQUID + FCC\_L12#2
  T(C) fraction solid
1343.761 0.8371007E-02
1338.761 0.1111522
1333.761 0.1995743
---途中省略---
PHASE REGION:LIQUID + BCC\_B2#1 + FCC\_L12#1 + FCC\_L12#2 + H\_L21 + MU\_PHASE +
↪NI3TI\_D024 + SIGMA
  T(C) fraction solid
1131.808 0.9810916
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
PHASE REGION: LIQUID + FCC\_L12#1 + FCC\_L12#2 + H\_L21 + MU\_PHASE + NI3TI\_D024 +
↳ SIGMA
    T(C) fraction solid
    1131.648 0.9812790
    1126.648 0.9861966
    1121.648 0.9892608
    1116.648 0.9912963
    1111.648 0.9927217
    .....

```

- パラ平衡のための変更マクロファイルの最後を

```
2000
none
none
NONE
Y
N
NONE

```

を

```
2000
NONE
NONE
Y
NONE
C

```

に変更。

- 「 $\gamma'$  体積率」の取得

値は以下の行を取得。

```
FCC\_L12#3          ORD      Status ENTERED      Driving force  0.0000E+00
Moles 3.3661E-01, Mass 1.8643E+01, Volume fraction 3.3733E-01  Mass fractions:
NI  7.44127E-01  TA  4.32362E-02  NB  6.79380E-03  ZR  5.20823E-04
TI  7.17173E-02  CO  3.62730E-02  W   6.18190E-03  C   4.33771E-05
AL  6.55129E-02  CR  2.41967E-02  MO  1.39737E-03 ``

```

FCC\\_L12#で始まる行に、「ORD」である行の直下の行の「Volume fraction」の次の数字を取得する。

- 「 $\gamma'$  体積率 30 %以上」の判定 解析 1 の 2 にある計算の結果生成される  $\gamma'$  量が 30% 以上の場合のみを最適化の対象とするため、30% 以下の場合の評価に対して、ペナルティを与える方式を実装した。ペナルティは ReLU 関数 (活性化関数のまとめ (ステップ、シグモイド、ReLU、ソフトマックス、恒等関

数) ) を使用し、objective\_function の計算に以下を追加した。

```
(max - min) + 100*relu(0.3-gamma')
```



## 第 2 章

# 解析 1 の結果

解析 1 の条件のうち、以下を除いた項目での結果を記す。

- JMatPro で力学特性を計算してみる。※ 他の元素が固定のため、 $\gamma'$  量や BTR 値の変化幅は小さいかもしれないが、動作検証も兼ねる

## 2.1 計算の結果

### 2.1.1 最終結果

平衡種別	Al	Ti	BTR	$\gamma'$ の体積率
オルソ平衡	3.53641000	3.4635900000	2.3227100000e+02	0.334620
パラ平衡	4.02475400	2.975246	2.2386500000e+02	0.339880

### 2.1.2 3 候補

BTR が最小の時のパラメータを 3 つ選択する。

平衡種別	Al	Ti	BTR	$\gamma'$ 体積率
オルソ平衡 1	3.53641000	3.46359000	232.271000	0.334620
オルソ平衡 2	3.53638539	3.46361461	232.272000	0.334620
オルソ平衡 3	3.52585126	3.47414874	232.431000	0.334470
パラ平衡 1	4.02475373	2.97524627	223.865000	0.339880
パラ平衡 2	3.99500154	3.00499846	224.184000	0.339640
パラ平衡 3	4.00686439	2.99313561	224.243000	0.339740

## 2.2 詳細

計算結果の抜粋を記す。オルソ平衡の場合—————

- bayes 部分の最適化（最大を目指すので、-1.0 倍してあります）

iter	target	ti
1	-235.0	3.112
2	-235.8	3.284
3	-235.3	3.098
4	-238.3	3.184
5	-236.1	3.337
6	-237.1	3.035
7	-236.8	3.409
8	-233.3	3.54
9	-233.0	3.522
10	-232.8	3.497
11	-232.5	3.477
12	-232.3	3.464
13	-232.3	3.454

- Dakota の記録

```

ITER =      3      OBJ =    0.23227E+03      NO CHANGE IN OBJ

DECISION VARIABLES (X-VECTOR)
  1)    0.34636E+01
1

FINAL OPTIMIZATION INFORMATION

OBJ =    0.232271E+03

DECISION VARIABLES (X-VECTOR)
  1)    0.34636E+01

THERE ARE      0 ACTIVE SIDE CONSTRAINTS

TERMINATION CRITERION
  ABS(1-OBJ(I-1)/OBJ(I)) LESS THAN DELFUN FOR  3 ITERATIONS
  ABS(OBJ(I)-OBJ(I-1))   LESS THAN DABFUN FOR  3 ITERATIONS

NUMBER OF ITERATIONS =      3

OBJECTIVE FUNCTION WAS EVALUATED      10 TIMES

GRADIENT OF OBJECTIVE WAS CALCULATED      3 TIMES
<<<<< Function evaluation summary: 16 total (9 new, 7 duplicate)
<<<<< Best parameters      =
                               3.4635900000e+00 wt_ti

```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```

<<<<< Best objective function =
                2.3227100000e+02
<<<<< Best data captured at function evaluation 1

<<<<< Iterator conmin_frcg completed.
<<<<< Environment execution completed.
DAKOTA execution time in seconds:
    Total CPU      =      0.03 [parent =   0.030753, child =  -0.000753]
    Total wall clock =    3130.64

```

#### • bayse と dakota の最適化の記録

```

Al = 3.88805011 / Ti = 3.11194989 diff = 234.981000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪338670
Al = 3.71552080 / Ti = 3.28447920 diff = 235.779000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪336870
Al = 3.90222296 / Ti = 3.09777704 diff = 235.300000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪338810
Al = 3.81598984 / Ti = 3.18401016 diff = 238.329000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪337960
Al = 3.66273899 / Ti = 3.33726101 diff = 236.097000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪336250
Al = 3.96513545 / Ti = 3.03486455 diff = 237.053000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪339380
Al = 3.59144967 / Ti = 3.40855033 diff = 236.835000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪335350
Al = 3.46000000 / Ti = 3.54000000 diff = 233.328000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪333530
Al = 3.47783574 / Ti = 3.52216426 diff = 233.009000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪333790
Al = 3.50260624 / Ti = 3.49739376 diff = 232.750000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334150
Al = 3.52296814 / Ti = 3.47703186 diff = 232.531000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334430
Al = 3.53641010 / Ti = 3.46358990 diff = 232.271000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334620
Al = 3.54648103 / Ti = 3.45351897 diff = 232.272000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334760
Al = 3.53641000 / Ti = 3.46359000 diff = 232.271000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334620
Al = 3.50177410 / Ti = 3.49822590 diff = 232.750000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334140
Al = 3.57104590 / Ti = 3.42895410 diff = 236.894000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪335090
Al = 3.46000000 / Ti = 3.54000000 diff = 233.328000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪333530

```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
Al = 3.50538029 / Ti = 3.49461971 diff = 232.691000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334190
Al = 3.52585126 / Ti = 3.47414874 diff = 232.431000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334470
Al = 3.53602173 / Ti = 3.46397827 diff = 232.431000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334610
Al = 3.53638539 / Ti = 3.46361461 diff = 232.272000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334620
Al = 3.53640286 / Ti = 3.46359714 diff = 232.272000 gamma prime Volume fruction = 0.
↪334620
```

## 2.2.1 パラ平衡の場合

- bayes の最適化（最大を目指すので、-1.0 倍してあります）

iter	target	ti
1	-230.4	3.056
2	-227.7	3.475
3	-229.9	3.085
4	-226.7	3.41
5	-225.9	3.341
6	-230.1	3.271
7	-226.3	3.369
8	-226.0	3.352
9	-225.2	2.9
10	-224.9	2.929
11	-224.7	2.955
12	-223.9	2.975
13	-224.3	2.99
...		

- Dakota の記録

```
ITER = 3 OBJ = 0.22387E+03 NO CHANGE IN OBJ

DECISION VARIABLES (X-VECTOR)
1) 0.29752E+01
1

FINAL OPTIMIZATION INFORMATION

OBJ = 0.223865E+03

DECISION VARIABLES (X-VECTOR)
```

(次のページに続く)



(前のページからの続き)

```

1)      0.29752E+01

THERE ARE      0 ACTIVE SIDE CONSTRAINTS

TERMINATION CRITERION
      ABS(1-OBJ(I-1)/OBJ(I)) LESS THAN DELFUN FOR  3 ITERATIONS
      ABS(OBJ(I)-OBJ(I-1))   LESS THAN DABFUN FOR  3 ITERATIONS

NUMBER OF ITERATIONS =      3

OBJECTIVE FUNCTION WAS EVALUATED      10 TIMES

GRADIENT OF OBJECTIVE WAS CALCULATED      3 TIMES
<<<<< Function evaluation summary: 16 total (14 new, 2 duplicate)
<<<<< Best parameters           =
      2.9752460000e+00 wt_ti
<<<<< Best objective function =
      2.2386500000e+02
<<<<< Best data not found in evaluation cache

<<<<< Iterator conmin_frcg completed.
<<<<< Environment execution completed.
DAKOTA execution time in seconds:
Total CPU      =      0.05 [parent =  0.036387, child =  0.013613]
Total wall clock =  4618.72

```

#### • bayse と dakota の最適化の記録

```

Al = 3.94407019 / Ti = 3.05592981 / btr = 230.441000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339190
Al = 3.52542661 / Ti = 3.47457339 / btr = 227.691000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪334470
Al = 3.91486419 / Ti = 3.08513581 / btr = 229.922000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪338920
Al = 3.58997254 / Ti = 3.41002746 / btr = 226.734000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪335330
Al = 3.65888810 / Ti = 3.34111190 / btr = 225.938000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪336200
Al = 3.72949950 / Ti = 3.27050050 / btr = 230.141000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪337030
Al = 3.63148476 / Ti = 3.36851524 / btr = 226.256000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪335860
Al = 3.64774545 / Ti = 3.35225455 / btr = 226.038000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪336060
Al = 4.10000000 / Ti = 2.90000000 / btr = 225.240000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪340480

```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```

Al = 4.07144237 / Ti = 2.92855763 / btr = 224.922000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪340260
Al = 4.04471161 / Ti = 2.95528839 / btr = 224.662000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪340050
Al = 4.02475373 / Ti = 2.97524627 / btr = 223.865000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339880
Al = 4.00992889 / Ti = 2.99007111 / btr = 224.343000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339760
Al = 4.02475400 / Ti = 2.97524600 / btr = 223.865000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339880
Al = 3.99500154 / Ti = 3.00499846 / btr = 224.184000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339640
Al = 4.05450646 / Ti = 2.94549354 / btr = 224.762000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪340130
Al = 3.72722940 / Ti = 3.27277060 / btr = 230.140000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪337000
Al = 3.97784478 / Ti = 3.02215522 / btr = 226.415000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339490
Al = 4.02167808 / Ti = 2.97832192 / btr = 224.503000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339860
Al = 3.87599170 / Ti = 3.12400830 / btr = 228.428000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪338560
Al = 4.00686439 / Ti = 2.99313561 / btr = 224.243000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339740
Al = 4.02217011 / Ti = 2.97782989 / btr = 224.503000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339860
Al = 3.99500154 / Ti = 3.00499846 / btr = 224.184000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339640
Al = 4.05450646 / Ti = 2.94549354 / btr = 224.762000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪340130
Al = 4.02244932 / Ti = 2.97755068 / btr = 224.503000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339870
Al = 4.02471494 / Ti = 2.97528506 / btr = 223.866000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339880
Al = 4.02474869 / Ti = 2.97525131 / btr = 224.503000 / gamma prime Volume fruction = 0.
↪339880

```

# 図目次

1	最適化作業フロー . . . . .	3
---	--------------------	---



# 表目次