

第2章 順問題／逆問題解析による先進構造材料プロセスと力学特性の予測

2-2節：三次元積層造形プロセスに適した新規合金組成探索

戸田 佳明、ディープ冴／国立研究開発法人物質・材料研究機構

1. 目的

三次元積層造形法は新しい造形プロセスであるため、従来の鍛造や鋳造に適さなかった新しい組成の合金系で造形でき、既存材料よりも優れた特性を示す可能性がある。しかし、新しい合金系の探索を実験的な手法のみで行うのは、時間や経費のコストが膨大にかかり、大変非効率的である。そこで本説では、高温特性に大きく影響する析出現象を容易に迅速に予測するモデルと、情報工学に基づく最適解探索法を組み合わせることにより、多元系の広い組成空間の中から、積層造形法に適した今までに実用されていない新規の組成を有するニッケル合金の探索を試みた研究 1)を紹介する。

2. 探索条件と方法

下記の条件を満たすニッケル基合金を、積層造形に適した新しい合金として探索した。

条件 1 既存の実用耐熱ニッケル合金に主に使用されている添加元素を組み合わせ、ニッケル元素を必ず 50 at%以上にした Ni-Al-Co-Cr-Mo-Nb-Ti 七元系ニッケル基合金である。(合金組成が 1 at%刻みで、 1.5625×10^{10} 通りの候補が存在する。)

条件 2 γ 相 (FCC 不規則相) 過飽和固溶体から γ' 相 ($L1_2$ 規則相) のみが析出して強化される。第三相は析出しない。

条件 3 γ' 相の析出に伴う材料の割れを防ぐために、積層造形中や熱処理初期に γ' 相が析出しない。つまり、 γ 相過飽和固溶体から γ' 相析出までの潜伏期間が長く、等温析出曲線図における γ' 相の析出開始線が長時間側に存在する。

条件 4 高温で時効熱処理することにより多くの γ' 相が析出して強化され、より高い強度が期待される。つまり、高温での γ' 相の平衡モル分率が大きい。ただし、効果的に析出強化するために、 γ' 相の最大平衡モル分率は 60 % とす

る。

これらの条件を満たすニッケル基合金の組成を探索するために、下記の方法を組み合わせた。

方法 1 ある候補の合金組成について、状態図計算ソフトウェアを用いて平衡計算を行い、 γ 相と γ' 相以外の第三相が平衡相でないことを調べ、 γ' 相の平衡モル分率を評価する。その合金組成における γ 相過飽和固溶体から γ' 相の析出開始線を、簡易なモデルで迅速な予測が可能な**組織自由エネルギー法** 2) 3)を用いて、 γ' 相が最も早く析出する条件（析出のノーズ）での析出開始時間（析出の潜伏期間）を算出した。

方法 2 広大な合金組成空間の中を効率的に探索するために、方法 1 で γ' 相のモル分率と析出開始時間を調べる合金組成の優先順位は、**モンテカルロ木探索法** 4)-6)により決定した。この方法は機械学習の一つだが、学習データを用いることなく、探索の過程で得られているデータを活用して、より γ' 相のモル分率が大きく析出開始時間が遅い合金組成を、大規模な未知の空間から探索できる。本研究ではさらに、候補の合金組成をランダムに選択するのではなく、ニューラルネットワークを介在させて選択することで、探索の効率を上げた。

3. 組織自由エネルギー法による析出予測

3.1 組織自由エネルギー法の概要

従来の多元系実用金属材料における析出過程の理論的な解析は、複数種類で多数の析出物の核形成・成長・競合現象を一つ一つ個別に扱っており、析出過程を詳細に再現できるが多相多元系合金の計算には多くの時間がかかった。また、実験での測定が困難なパラメータや物理量として数値を明確に確定しにくいフィッティングパラメータが必要で、新規材料や実験データの少ない材料の解析には不向きであった。

それに対し組織自由エネルギー法は、過飽和固溶体から平衡状態に至る過程で現れ得る様々な組織形態の自由エネルギーを評価し、エネルギー最急降下パスの仮定より金属材料の析出過程を予測する方法である 2)3)。計算に必要な入

カパラメータの種類が少なく、エネルギーの加減のみの比較的簡易な計算で予測できることから、多相多元系の実用構造材料だけでなく、物性値が不明の新しい材料における析出過程の組成・温度・時間依存性が、パーソナルコンピュータでも短時間で計算できる。

3.2 組織自由エネルギー法の計算方法

この予測法では、計算に必要な入力パラメータを少なくし計算を容易にするため、金属組織の平均場近似を仮定する。つまり、金属組織はどの場所も一様に同じエネルギー状態であり、同じ状態・形態の γ' 相がどの場所にも均一に同時に形成され成長する。また、 γ' 相だけでなく、それらが析出する前のエンブリオ (析出核) も、時効時間の経過に伴いある速度論に従って一様に成長すると仮定する。そして、 γ 相過飽和固溶体のエネルギー G_γ と、平衡状態に至るまでに現れうる γ 相と γ' 相 (あるいは析出前のエンブリオ) が共存状態にある系全体のエネルギー (組織自由エネルギー $G_{\gamma+\gamma'}$) を、時間を変化させて比較し、後者が低くなった条件で γ' 相が析出したと予測した。 G_γ は合金組成 c_0 における γ 相の化学的自由エネルギー値のみで求められ、式(1)で表される。 $G_{\gamma+\gamma'}$ は、各相の組成 c_p ($p = \gamma, \gamma'$) における化学的自由エネルギー $G_p(c_p)$ と各相のモル分率 f_p を用いて求めた二相共存の化学的自由エネルギーと、 γ 相と γ' 相の界面の存在に起因する界面エネルギー E_{inf}^γ 、および γ 相と格子定数の異なる γ' 相が整合に析出することで生じる弾性ひずみエネルギー E_{str}^γ の和として式(2)で表した。本研究では、 γ' 相が析出したばかりで析出粒子間距離が広い段階に注目しているため、 γ' 相間の弾性相互作用エネルギーは無視した。

$$G_\gamma = G_\gamma(c_0) \quad (1)$$

$$G_{\gamma+\gamma'} = f_\gamma G_\gamma(c_\gamma) + f_{\gamma'} G_{\gamma'}(c_{\gamma'}) + E_{inf}^\gamma + E_{str}^\gamma \quad (2)$$

p 相の化学的自由エネルギー G_p は、原子間相互作用パラメータに温度と組成依存性を考慮した広義の正則溶体近似で評価され、式(3)で表される 7)。

$$G_p = \sum_i c_{p,i} \circ G_{p,i} + RT \sum_i c_{p,i} \ln c_{p,i} + \sum_{i>j} \sum_j \left\{ c_{p,i} c_{p,j} \sum_n L_{i,j}^{p,n} (c_{p,i} - c_{p,j})^n \right\} \quad (3)$$

$c_{p,i}$ と $\circ G_{p,i}$ は p 相における i 元素の濃度と i 元素から成る純物質のギブスエネルギー、 R と T はガス定数と絶対温度、 $L_{i,j}^{p,n}$ は p 相における i 原子と j 原子の原子間相互作用パラメータの n 次項の係数である。そして、式(3)の第 1 項が純金属の生成エンタルピーの組成平均、第 2 項が原子の配置のエントロピーに起因するエネルギー、第 3 項が原子間の相互作用に起因する過剰エネルギーを表す。式(3)は γ 相のような不規則相の化学的自由エネルギーを示したが、 γ' 相のような規則相や化合物の場合は副格子モデル 7) を用いて化学的自由エネルギーを表すことができる。共存する γ 相と γ' 相の組成 $c_{p,i}$ の求め方は後述する。

E_{inf}^{γ} は式(4)で表される 2)3)。

$$E_{inf}^{\gamma} = A \gamma_s V_m = \frac{f_{\gamma}}{V} S \gamma_s V_m \quad (4)$$

A , γ_s と V_m はそれぞれ、単位体積の材料に存在する γ 相と γ' 相の全界面積、 γ' 相の界面エネルギー密度とモル体積である。 V_m は組成依存性を考慮して式(5)を用いて表される。

$$V_m = \sum_i c_{\gamma,i} V_{m,i} + \sum_{i>j} \left\{ c_{\gamma,i} c_{\gamma,j} \sum_n {}^n V_{m,i,j} (c_{\gamma,i} - c_{\gamma,j})^n \right\} \quad (5)$$

ここで、 $V_{m,i}$ は純金属 i のモル体積、 ${}^n V_{m,i,j}$ は i 元素と j 元素の n 次の相互作用パラメータの係数である。 A は単位体積の材料に存在する γ 相と γ' 相の全界面積で、モル分率 f_{γ} 、析出物 1 個あたりの体積 V と界面積 S を用いて表される。本研究では、 γ' 相が析出したばかりの段階に注目しているため、1 個の γ' 相の析出物の形状を球と仮定した。その半径を r とすれば、析出物 1 個の体積 V は $V = 4/3 \pi r^3$ 、界面積 S は $S = 4 \pi r^2$ で表される。 r は析出前のエンブリオも析出後も、時間 t の (1/3) 乗に比例して粗大化すると仮定し、式(6)で表した 8)9)。この式が、エネルギー論で時間依存の等温析出曲線図を予測するために導入する簡易な速度論に対応する。

$$r^3 = \frac{8\gamma_s c_e V_m D}{9RT} t \quad (6)$$

ここで c_e は母相中の平衡溶質濃度である。また、 D は析出物粒子の成長を律速する拡散係数で、また、本研究では、 γ' 相の生成・成長が γ 母相中のニッケル元素の拡散で律速すると仮定し、多元系の拡散を取り扱ったモデル 10)を用いて、式 (7)で拡散係数 D およびその組成依存性を表した。

$$D = \exp \left[\frac{1}{RT} \left\{ \sum_i c_{\gamma,i} \Phi_i^{\gamma, \text{Ni}} + \sum_i \sum_{j>i} c_{\gamma,i} c_{\gamma,j} \sum_n^n \Phi_{i,j}^{\gamma, \text{Ni}} (c_i - c_j)^n \right\} \right] \quad (7)$$

$E_{str}^{\gamma'}$ は次式で評価した 11)12)。

$$E_{str}^{\gamma'} = \frac{E}{1-\nu} \eta^2 f_{\gamma'} (1-f_{\gamma'}) V_m \quad (8)$$

E 、 ν 、 η はそれぞれ γ' 相のヤング率、ポアソン比、母相との格子ミスマッチである。

$G_{\gamma+\gamma'}$ を計算するのに、式(3)、(4)、(8)の G_p や $E_{inf}^{\gamma'}$ 、 $E_{str}^{\gamma'}$ の各エネルギーを個別に評価するのではなく、これらのエネルギーの共通の変数である共存相の組成 c_p やモル分率 f_p を変化させて、 $G_{\gamma+\gamma'}$ が最小になるように最適化することで求めた。まず、平均組成 c_0 、時効温度 T と時効時間 t を設定すれば、式(3)、(4)、(8)より、 $G_{\gamma+\gamma'}$ は c_p や f_p の関数となる。 $G_{\gamma+\gamma'}$ の独立変数として選んだ x 個の未知の c_p や f_p の組合せをベクトル $\mathbf{C}=(c_1, c_2, \dots, c_x)$ とすると、 $G_{\gamma+\gamma'}(\mathbf{C})$ の最小値は $\partial G_{\gamma+\gamma'}(\mathbf{C})/\partial \mathbf{C}=0$ を解いて得られる。これを満足する解 \mathbf{C} を求めるためのある反復計算において、第 m 回目の \mathbf{C} の値を $\mathbf{C}^{(m)}$ とすれば、Newton-Raphson 法 13)より、

$$\mathbf{C}^{(m+1)} = \mathbf{C}^{(m)} - \left[\frac{\partial^2 G_{\gamma+\gamma'}}{\partial \mathbf{C}^2} \right]_{\mathbf{C}=\mathbf{C}^{(m)}}^{-1} \left[\frac{\partial G_{\gamma+\gamma'}}{\partial \mathbf{C}} \right]_{\mathbf{C}=\mathbf{C}^{(m)}} \quad (9)$$

ここで、

$$\left[\frac{\partial^2 G_{\gamma+\gamma'}}{\partial \mathbf{C}^2} \right]_{\mathbf{C}=\mathbf{C}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 G_{\gamma+\gamma'}}{\partial c_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 G_{\gamma+\gamma'}}{\partial c_x \partial c_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 G_{\gamma+\gamma'}}{\partial c_1 \partial c_x} & \cdots & \frac{\partial^2 G_{\gamma+\gamma'}}{\partial c_x^2} \end{bmatrix} \quad (10)$$

本研究では、設定した合金組成 c_0 と時効温度 T における平衡組成や平衡モル分率を、ベクトル \mathbf{C} の初期値 $\mathbf{C}^{(1)}$ として、式(10)の右辺に代入して反復計算を行い、 $\mathbf{C}^{(m)}$ と $\mathbf{C}^{(m+1)}$ の各独立変数の差が十分に小さくなった時の $\mathbf{C}^{(m+1)}$ を、 $G_{\gamma+\gamma'}(\mathbf{C})$ を極小とする \mathbf{C} 、つまり母相から析出相が形成された場合の各相の組成（またはモル分率）と決定した。

3.3 エネルギーの時間変化と析出開始時間の予測

G_γ と $G_{\gamma+\gamma'}$ を計算するために、式(3)-(8)へ以下のパラメータを入力した。 γ 相と γ' 相の $G_{p,i}$ と $L_{i,j}^{p,n}$ は状態図計算ソフトウェア "Thermo-Calc" と熱力学データベース "TCNI11" から取得し、その組成依存性は Redlich-Kister 多項式 (14) で表されている。式(5)の $V_{m,i}$ と ${}^nV_{m,i,j}$ は文献 (15) を、式(7)の $\Phi_i^{\gamma,\text{Ni}}$ と ${}^n\Phi_{i,j}^{\gamma,\text{Ni}}$ は文献 (16)-(20) を参照した。その他、式(4)と(8)の E 、 v 、 γ_s は文献 (21)、 η は文献 (22) を参照した。

図 1 に、ある 7 元系ニッケル合金の (a) 900°C、(b) 800°C、(c) 700°C における組織自由エネルギー $G_{\gamma+\gamma'}$ の時間変化を点線で示す。 G_γ は γ 相過飽和固溶体のエネルギーで、式(1)に示すように時間依存性がないため、図 1 中には水平線で示される。エネルギー最急降下パスを経て析出が生じると仮定すれば、計算した時効時間の範囲ではいずれの時間も、 $G_{\gamma+\gamma'}$ が G_γ よりも高いので、(a) 900°C では γ' 相が析出しない。(b) 800°C では、0.17 h で $G_{\gamma+\gamma'}$ が G_γ よりも低くなるので、この時間で γ' 相が析出すると予測できる。0.17 h よりも短時間では、 γ' 相エンブリオが小さいため、単位体積当たりの γ/γ' 相間の界面積が大きく、二相分離に伴う界面エネルギーの発生量が γ' 相析出の駆動力よりも大きくなるために、 $G_{\gamma+\gamma'}$ が G_γ よりも大きくなって γ' 相は析出しない。時効時間の経過に伴い、式(6)に従って γ' 相エンブリオが大きくなって界面積および界面エネルギーが小さくなることにより $G_{\gamma+\gamma'}$ が低下し、時効時間 0.17 h で G_γ よりも低くなって γ' 相が析出すると

図 1

解釈できる。同様に、(c) 700°Cでは 1.66 h で γ' 相が析出すると予測できる。

これらの組織自由エネルギー計算を、温度を変えて行い、 G_γ と $G_{\gamma+\gamma'}$ の曲線の交点を温度に対する軌跡として描けば、図 1(d)のように、計算対象の合金の γ 相過飽和固容体からの γ' 相の等温析出曲線図が計算で予測でき、 γ' 相が最も早く析出する条件（析出のノーズ）での析出開始時間が取得できる。

4. モンテカルロ木探索法による合金組成探索

4.1 モンテカルロ木探索法の概要

以前は人間の経験や勘に基づく試行錯誤の実験的手法で行われてきた材料開発・設計が、機械学習を用いたコンピュータ支援で、人間が行うよりもはるかに短時間、低コストで効率的に行われようとしている。ベイズ最適化や遺伝的アルゴリズムを用いて、材料特性を最大にする化学組成を自動的に探索する試みはその一部である。しかし、材料の構成元素が多くなると、探索すべき組成空間のサイズは指数関数的に増加する。機械学習ツールの中には、探索空間の増大に効率的に対応できないものもある。また、材料開発の分野では、機械学習モデルの構築に必要な十分な学習用データを確保することが困難である場合が多い。その中でモンテカルロ木探索法(4)-6)は、組成条件を少しずつ変えた組成探索の無数の選択肢に、それぞれの合金組成における目標値 (γ' 相のモル分率と析出開始時間の積) の大きさに応じた採点をして優先順位をつけ、目標値の最大化が高い確率で期待できる探索経路に沿って次の組成探索を繰り返す。そのため、事前に用意された学習用データを用いることなく組成探索を始めることが可能である。しかも、この方法は囲碁・チェス・将棋等のゲームに応用され、 10^{100} を超える局面の中から次の着手の決定に使用できることが実証されている6)。

4.2 モンテカルロ木探索法のアルゴリズム

モンテカルロ木探索法では、6種類の決められた元素の順に組成を選択し、以下の4つのステップを繰り返すことで選択肢を増やしながら、組成空間内の最適解に近づこうとする5)。その概念を図2に示す。

① **Selectionステップ** 各元素において、前回までの繰り返し作業で最も高いUCB (Upper Confidence Bound) スコア(23)を採点されたノード（ある元素で組

図 2

成が選択された状態、図2のRoot（初期値）の下の方の○の部分）を選択する。UCBスコアは④で詳述する。

② **Expansionステップ** あるノードを選択された回数がしきい値を超えた場合に、次に調べる元素において新たな組成値（ノード）を設定して選択肢を拡張する。ただし本研究では、新たな組成値の候補数が非常に多いので、ランダムにノードを拡張すると探索の効率が悪化する。そこで、1つの中間層を有する全結合型ニューラルネットワークにより新たに拡張するノードの価値を予測し、それが最大となるノードを拡張に選択することで、組成候補の中から目標値が高くなると最も期待されるノードを最初に拡張するアルゴリズムを追加した。このニューラルネットワークは事前に学習されることなく、モンテカルロ木探索法が前の反復で得た組成選択肢の候補を用いて、方策勾配法²⁴⁾に基づきその場で学習される。組成探索が進んでより多くの選択肢の候補が評価されるにつれて、ニューラルネットワークの学習データが増えると、中間層のパラメータを最適化でき、目標値の最大化に向けて、より多くの情報に基づいた拡張ができるようになる。

③ **Simulationステップ** 全ての元素の組成値が選択され、その合金組成における目標値（ γ 相のモル分率と析出開始時間の積）を前章の組織自由エネルギー法²⁾³⁾を用いて評価する。

④ **Backpropagationステップ** 選択された全てのノードに対し、式(11)で定義されるUCBスコア²³⁾を更新する。

$$ucb_i = \frac{\sum tp_i}{v_i} + C \sqrt{\frac{2 \ln v_{iparent}}{v_i}} \quad (11)$$

ここで、 ucb_i はあるノード*i*のUCBスコア、 $\sum tp_i$ はノード*i*で選択した元素よりも前に決めた元素の組成が同一の全てのノードで評価された目標値の合計、 v_i と $v_{iparent}$ は、ノード*i*とノード*i*よりも前の元素で組成を選択した時のノードを、③ **Simulation**ステップで対象にした回数である。式(11)の第1項はこれまでの組成探索で目標値の高かった選択肢をより重視する（知識利用）スコア、第2項はこれまで探索しなかった選択肢を新たに設定しようとする（拡張）スコアである。 C は知識利用と拡張のバランスをとるための定数で、本研究では探索の効率が最

適になるように、各ノードのCを動的に調整した25)。

4.3 モンテカルロ木探索法による探索結果

図3に組織自由エネルギー法とモンテカルロ木探索法を組み合わせ探索した11,407種類のニッケル合金の、 γ' 相の平衡モル分率と析出開始時間の関係を示す。図中の曲線は、 γ' 相の平衡モル分率が高く、析出開始時間が遅くなるように、冶金研究者が経験と勘に基づいて、既存の実用ニッケル基合金の組成を修正した合金のデータ点を回帰して示した。一般に、析出相の平衡モル分率が高く安定性が高い合金は、析出の駆動力が高く析出開始時間が短くなり、平衡モル分率が高いことと析出開始時間が遅いことはトレードオフの関係にある。人間の経験と勘に基づく改良合金の回帰曲線も、モル分率-析出開始時間のグラフで反比例曲線を描き、両者がトレードオフの関係であることが明瞭である。そのトレードオフの関係にかかわらず、本研究で提案した計算による組成探索では、人間の経験と勘に基づく回帰曲線よりも、 γ' 相の平衡モル分率と析出開始時間の長いニッケル合金を多数見つけることができた。人間の能力で見つけられなかった新しいニッケル合金組成を、エネルギー論による材料組織の形成予測モデルと情報工学に基づく最適解探索法を組み合わせることにより、低コストで短時間の内に効率よく、しかも事前の学習用データを準備する必要もなく見つけられることを実証できた。

図 3

5. おわりに

積層造形用ニッケル基耐熱合金に限らず、世の中に存在する物質・材料は、元素や化学組成の潜在的な組み合わせの数が極めて多く、専門家の知識と従来の実験的な手法だけでは、このような広い空間を系統的かつ効率的に調査することはほとんど不可能である。本研究では、材料組成とプロセス条件から構造や特性を予測する順方向計算の手法と、最適解探索の情報工学を上手く連携させることで、人間の能力とこれまでの手法をはるかに凌駕する広範囲の組成空間を極めて効率よく探索し、所望の性能から最適な材料を見つける逆問題を解決する方法の1つを提案できた。

私たちは、材料のプロセス・構造・特性・性能に関する評価・予測モデルやデー

タをネットワーク上で結びつけ、材料開発を加速するMaterials Integrationの概念を提案し26)、材料設計のための汎用システム"Materials Integration with Network Technology : MInt"27)-29)を構築し運営している。MIntには、様々な種類の予測モデルが実装され、それらを結びつけたワークフローを形成するために接続され順方向計算のプラットフォームとして機能する。本研究で使用した組織自由エネルギー法による析出予測モデルも、MIntのワークフローの1つとして実装されており、このワークフローを呼び出すことで、本研究で実施したのと同様の最適化探索を、MIntのアプリケーション・プログラミング・インターフェースを介して実施することができる。

引用文献

- 1) S. Dieb, Y. Toda, K. Sodeyama et al.: *Sci Technol Adv Mater: Methods*, **3**(1), 2278321 (2023).
- 2) 小山敏幸, 宮崎亨: *日本金属学会誌*, **53**(7), 643 (1989).
- 3) 小山敏幸, 宮崎亨, 土井稔: *日本金属学会誌*, **53**(7), 651 (1989).
- 4) R. Coulom, H. J. v. d. Herik (Eds.): *Computers and Games*, Springer Nature, 72 (2007).
- 5) G. M. J. B. Chaslot, M. H. M. Winands, J. W. H. M. Uiterwijk et al.: *New Math Nat Comput*, **4**(3), 343 (2008).
- 6) D. Silver, A. Huang, C. J. Maddison et al.: *Nature*, **529**(7587), 484 (2016).
- 7) M. Hillert and L. I. Staffansson: *Acta Chem Scand*, **24**(10), 3618 (1970).
- 8) I.M. Lifshitz and V.V. Slyozov: *J Phys Chem Solids*, **19**(1), 35 (1961).
- 9) C. Wagner: *Z Elektrochem*, **65**(7-8), 581 (1961).
- 10) J. O. Andersson and J. Ågren: *J Appl Phys*, **72**(4), 1350 (1992).
- 11) J.W. Cahn: *Acta Metall*, **9**(9), 795 (1961).
- 12) 村外志夫, 森勉: *マイクロメカニックス 転位と介在物*, 培風館, (1976).
- 13) 杉江日出澄, 岡崎明彦, 足達義則, et al.: *FORTRAN77 による数値計算法*, 培風館, (1990).
- 14) O. Redlich and A. T. Kister: *Ind Eng Chem*, **40**(2), 345 (1948).
- 15) W. H. Xiong, W. Liu, M. M. Dai et al.: *Calphad*, **66**, 101629 (2019).

- 16) J. Chen, Y. Liu, G. Sheng, et al.: *J Alloys Compd*, **621**, 428 (2015).
- 17) Y. Wang, N. Zhu, H. Wang et al.: *Metall Mater Trans A*, **48**(3), 943 (2017).
- 18) G. Xu, Y. Liu, Z. Kang: *J Alloys Compd*, **709**, 272 (2017).
- 19) Y. Liu, T. Fu, H. Liu et al., *Calphad*, **70**, 101780 (2020).
- 20) Y. Zeng, Y. Liu, Q. Min et al., *Calphad*, **71**, 102209 (2020).
- 21) A. Devaux, L. Naze, R. Molins et al.: *Mater Sci Eng A*: **486**(1-2), 117 (2008).
- 22) R. Cozar, A. Pineau: *Metall Trans*, **4**(1), 47 (1973).
- 23) P. Auer, N. Cesa-Bianchi, P. Fischer: *Mach Learn*, **47**(2/3), 235 (2002).
- 24) R. J. Williams: *Mach Learn*, **8**, 229 (1992).
- 25) T. M. Dieb, S. Ju, K. Yoshizoe et al.: *Sci Technol Adv Mater*, **18**(1), 498 (2017).
- 26) M. Demura and T. Koseki: *Mater Trans*, **61**(11), 2041 (2020).
- 27) S. Minamoto, T. Kadohira, K. Ito et al.: *Mater Trans*, **61**(11), 2067 (2020).
- 28) M. Demura: *Mater Trans*, **62**(11), 1669 (2021).
- 29) T. Osada, T. Koyama, D. S. Bulgarevich et al.: *Mater Design*, **226**, 111631 (2023).

キャプションリスト

- 図1 ある7元系ニッケル合金の(a) 900°C、(b) 800°C、(c) 700°Cにおける組織自由エネルギー $G_{\gamma+\gamma'}$ の時間変化を点線で示す。水平線は G_{γ} のエネルギーレベルを示す。(d)はエネルギー曲線の交点の軌跡から予測した γ 相過飽和固容体からの γ' 相の等温析出曲線図。
- 図2 モンテカルロ木探索法の、4つのステップ(Selection、Expansion、Simulation、Backpropagation)を用いて、組成空間の最適解に向かって反復的に探索する様子を示す概念図。Root(初期値)より下の○がノード(ある元素で組成が選択された状態)を表す。本研究では、新たなノードを展開する際に、全結合型ニューラルネットワークを用いて、組成候補の中から目標値が高くなると最も期待されるノードを最初に拡張した。
- 図3 組織自由エネルギー法とモンテカルロ木探索法を組み合わせ探索した11,407種類のニッケル合金の、 γ' 相の平衡モル分率と析出開始時間の関係を示す。図中の曲線は、冶金研究者が既存の実用ニッケル基合金の組成を修正した合金のデータ点を回帰して示した。

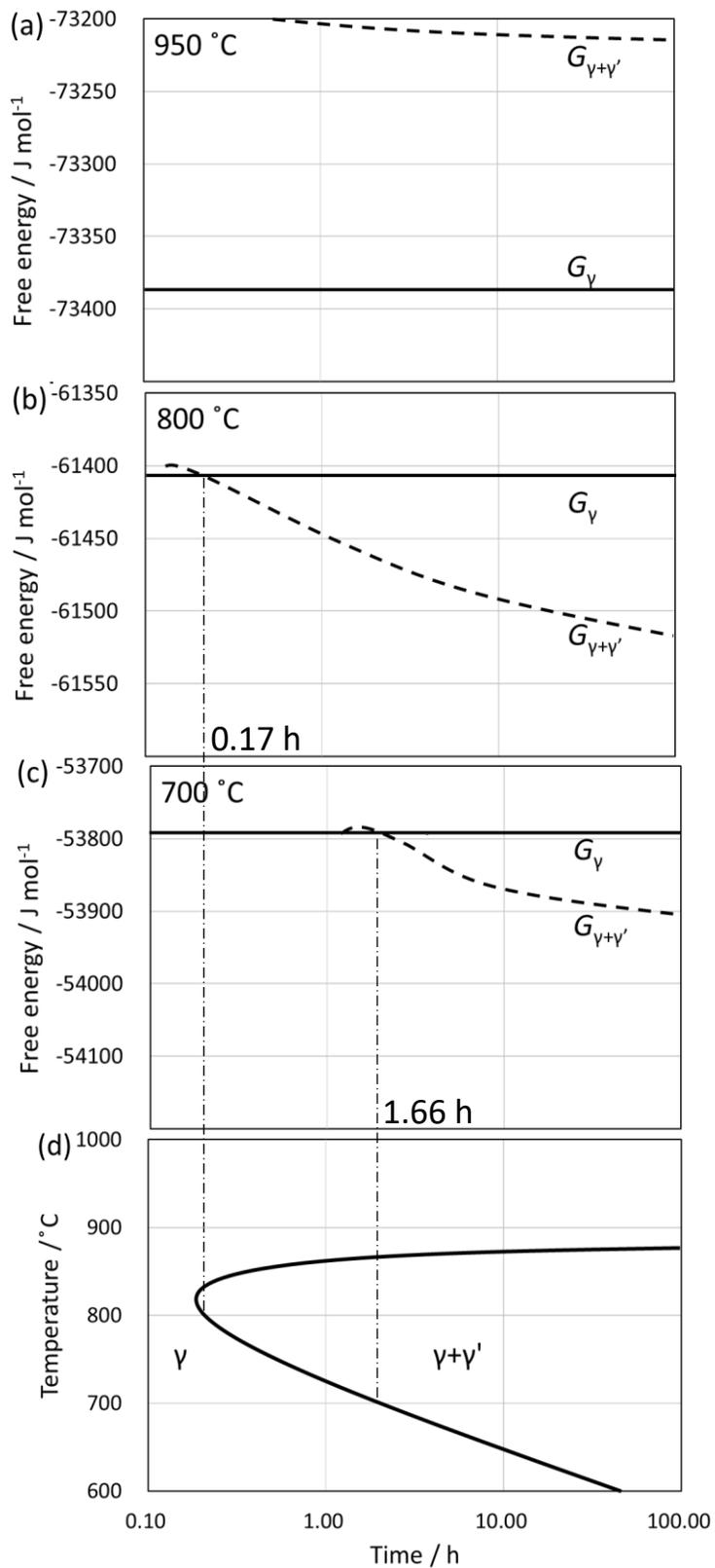
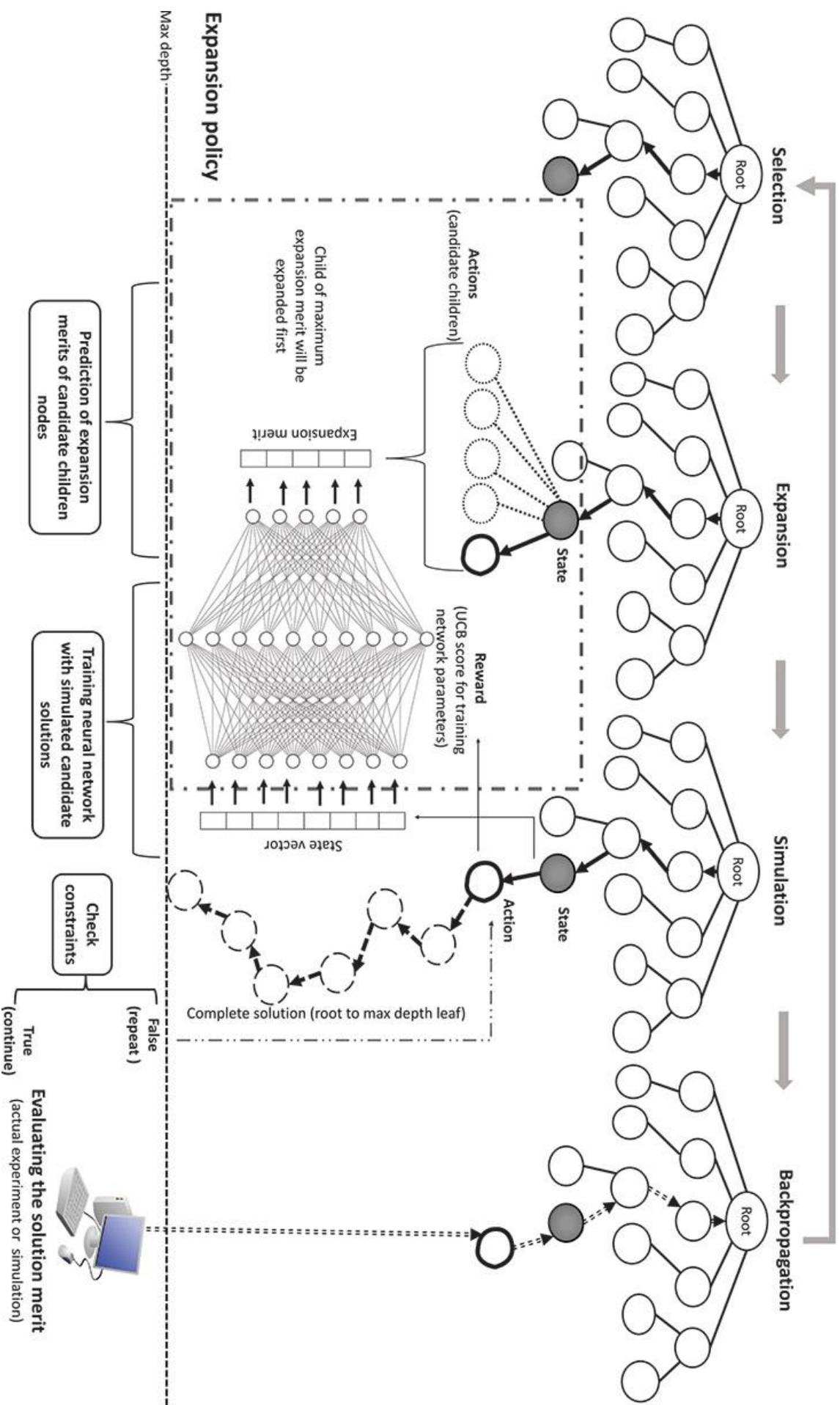


图 1

Monte Carlo tree search

Repeat till stop conditions met



Gamma prime MF

