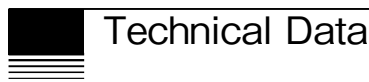


技術資料



Ni 基超合金の鍛造プロセスにおける機械学習を用いた FEM 代替シミュレーション手法の開発

小池真央*, 河合達也*, 松木隆紀*, 中川純一*

Development of a Machine Learning-Based Surrogate Model for Ni-Based Superalloy Forging Processes

Masao KOIKE, Tatsuya KAWAI, Takanori MATSUKI and Junichi NAKAGAWA

Synopsis

Controlling the microstructure of Ni-based superalloys is essential for achieving superior mechanical properties at high temperatures. In radial forging processes, it is necessary to optimize microstructural characteristics, such as grain size and precipitated phases while reducing manufacturing costs. Computed analysis by finite element method is used to design such processes. However, these simulations for radial forging are complex and entail high computational costs. To reduce computational costs and enable trials over a wider range of process conditions, a surrogate-model-based approach was investigated. In this study, a machine-learning-based surrogate model was developed to predict temperature, strain, and grain size in the radial forging process of Alloy718. The developed model was applied iteratively to simulate the entire forging process. The predictions obtained from the surrogate model showed good agreement with those from the finite element simulations.

1. 緒言

近年の温室効果ガス低減の要求により、ジェットエンジンや発電用ガスタービンなど、さらなる高能率化が求められる。エネルギー効率向上のためには燃焼温度の高温化が有効であり、素材には高温強度に優れる Alloy718 をはじめとした Ni 基超合金がしばしば用いられる。

これら超合金の優れた機械特性を実現するためには析出相や結晶粒径をはじめとした材料組織の制御が重要である。特に熱間鍛造プロセスにおいては再結晶挙動やその後の結晶粒成長挙動を考慮した製造プロセス設計が必要となる。また、製品の大型化や複雑化に伴い、素材に求められる特性も高度化しており、その製造工程が複雑

化する場合がある。そのため、製品の品質向上と製造コスト低減を両立するプロセスの開発が求められる。特に Ni 基超合金の棒鋼製品製造において、品質とコストを両立可能なプロセスの一つが四面鍛造であり、温度管理が比較的容易かつ製造能率に優れるため有用な手段となる。

今日では製造工程設計のためにはシミュレーションの活用が必要不可欠であり、当社では有限要素法 (FEM) シミュレーションを用いたデジタルエンジニアリングシステム DAINUS¹⁾ を活用した製造プロセス開発を行っている。高速四面鍛造においても同システムを適用しているが、材料のらせん状回転と四方向からの打撃が行われるため、その計算が複雑化する傾向がある。鍛造工程を最適化するためには複数の制御パラメータを複合的に検

2026年4月16日 受付

* 大同特殊鋼(株)技術開発研究所 (Corporate Research & Development Center, Daido Steel Co., Ltd.)

討することが望ましいが、すべてのパラメータを網羅的に検討する場合、計算水準数が膨大となる。そのため、限られた時間では検討する水準数にも限界が生じる。

計算時間を短縮するための新たな手法として、機械学習を活用した代理モデル（サロゲートモデル）が注目されている^{2), 3)}。サロゲートモデルはFEMなどのシミュレーション結果を教師データとした機械学習モデルであり、従来のFEMの計算とは異なり物理的な計算を介さないため、短時間での計算が可能となる。

本研究では鍛造プロセスにおけるFEMのシミュレーション負荷低減を目的に、サロゲートモデルの適用を試みた。本報では代表的なNi基超合金の一つであるAlloy718の四面鍛造プロセスにおける鍛造温度、相当塑性ひずみ、結晶粒度を予測するサロゲートモデルを構築し、計算結果の妥当性について検証を行った。

2. 予測モデルの構築

2. 1 データセット取得

解析モデルの概要および数値データ取得の代表点をFig. 1に示す。教師データとなるFEMシミュレーションはHexagon AB社の塑性加工解析ソフトウェアSimufact Formingで計算した。社内で取得したAlloy718の物性および再結晶挙動を同ソフトに組み込み、温度、相当塑性ひずみ、結晶粒度の計算を行った。結晶粒度は同ソフトウェアのユーザーサブルーチン機能を使用して計算を行った。結晶粒度の計算では未再結晶と再結晶に分割してそれぞれの結晶粒度を計算したのち、それらを面積率で平均化した平均結晶粒度をASTM結晶粒度番号として出力した。計算した際の結晶粒度における計算精度は、過去の検証結果⁴⁾と同程度であることが確認された。

機械学習の教師データとして使用するデータセットは説明変数、目的変数ともに代表点の数値データ形式とした。四面鍛造においては温度、相当塑性ひずみ、結晶粒

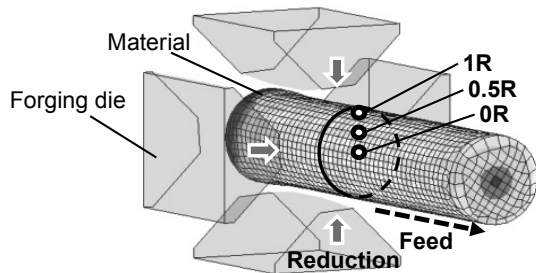


Fig. 1. FEM model of radial forging and position of output parameters: 0R, 0.5R, 1R.

度は半径方向の分布が生じる一方で、長手方向は比較的均一である。そのため代表点は材料長手方向中央部とし、半径方向は中心部と外周部、およびそれらの中間点の計3点とした。以降、これらの位置を中心側から順に0R（中心部）、0.5R（半径の50%位置）、1R（外周部）と表記する。

鍛造条件は材料径、圧下量、送り速度について、実作業条件に加えて設備仕様の上下限で解析した。教師データにおける温度、ひずみ、結晶粒度の分布Fig. 2に示す。温度、結晶粒度は材料表面からの抜熱のため外周部1Rは全体的に低温かつ細粒側に分布しているが、全体的な分布は概ね正規分布に近い形となっている。ひずみは鍛造開始からの累積値を出力しているため、低ひずみ側に偏った分布を示している。

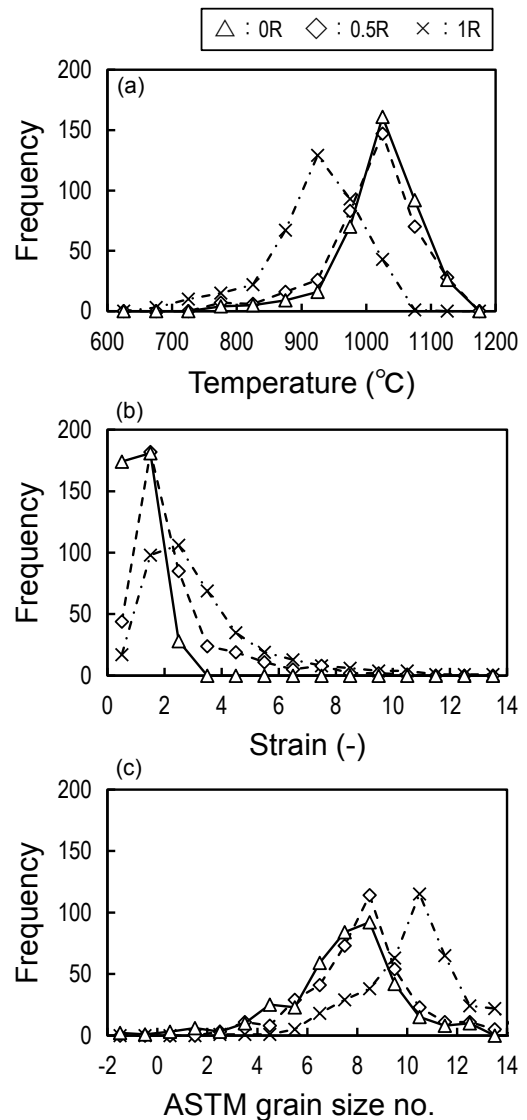


Fig. 2. Frequency distribution of FEM data sets: (a) temperature, (b) strain, (c) grain size.

2. 2 回帰モデル構築

回帰モデルにおける説明変数には鍛造の制御パラメータである圧下量, 送り速度に加え, 鍛造前の素材の状態として素材径, 長さ, 温度, 相当塑性ひずみを設定した. 目的変数は鍛造後の温度, 相当塑性ひずみ, 結晶粒度とした. なお, 結晶粒度の回帰モデルについては上記の説明変数に加えて加工前の結晶粒度を組み込んだ.

本研究では, 事前検証で比較的良好な結果の得られたアルゴリズムとして, Ridge 回帰⁵⁾, サポートベクター回帰⁶⁾ (SVR), ランダムフォレスト⁷⁾, 勾配ブースティング決定木⁸⁾ (GBDT), XGBoost⁹⁾, LightGBM¹⁰⁾ の 6 種類にて最適なアルゴリズムを検討した. 各アルゴリズムの回帰性能を比較するため, 教師データは各変数の最大, 最小値にて規格化した. また, ハイパーパラメータは Python の最適化ライブラリ Optuna を用いたベイズ最適化により設定し, それぞれの試行回数は 15 回で統一した. 以上の条件により構築したモデルにおいて, 訓練データ並びに検証データにおける決定係数と平均予測誤差を比較し, 最適なアルゴリズムを選定した.

2. 3 予測フローの構築

実際の高速四面鍛造プロセスにおいては加熱炉からの抽出後, 四面鍛造機にて段階的に径を縮小させる鍛造工程となる. 最終的な鍛造組織を予測するためには多段階の加工履歴を踏まえた計算が必要である. また, 予測に用いる回帰モデルは鍛造回数によらず共通のモデルを使用し, 一つの回帰モデルを繰り返し使用する構成とした. Fig. 3 の構成にて鍛造工程全体を予測するフローを構築した.

鍛造開始時の材料の寸法, 温度等の初期状態およびそれぞれの工程 (パス) における鍛造時の圧下量と送り速

度を設定する. 各パスの鍛造条件に従ってサロゲートモデルでの計算を行う. 以降のパスの計算については, 加工前の状態における温度, 相当塑性ひずみ, 結晶粒度は一つ前のパスでサロゲートモデルにより計算された結果を入力値として組み込む構成とした.

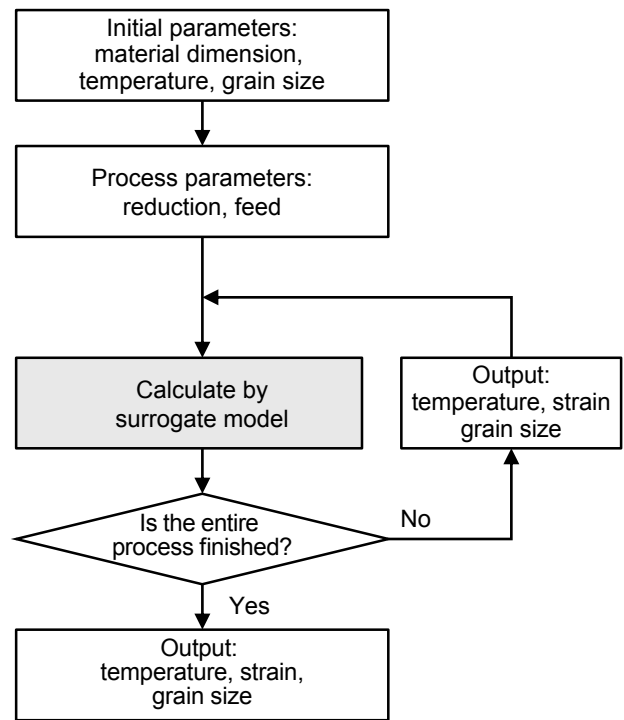


Fig. 3. Flow chart for calculation of the entire forging process using a surrogate model.

Table 1. Train and test R2 score for each model.

		Train R2 score (Test R2 score)					
		Ridge regression	SVR	Random forest	GBDT	XGBoost	LightGBM
Temperature	0R	0.99 (0.96)	0.99 (0.88)	0.99 (0.96)	1.00 (0.97)	1.00 (0.97)	0.94 (0.91)
	0.5R	0.98 (0.94)	0.99 (0.86)	0.99 (0.93)	1.00 (0.93)	1.00 (0.95)	0.95 (0.84)
	1R	0.98 (0.89)	0.99 (0.72)	0.99 (0.92)	1.00 (0.91)	0.99 (0.89)	0.96 (0.82)
Strain	0R	0.98 (0.98)	0.99 (0.95)	0.99 (0.94)	0.99 (0.98)	0.99 (0.97)	0.96 (0.92)
	0.5R	0.97 (0.90)	0.99 (0.81)	0.98 (0.86)	0.99 (0.86)	0.99 (0.85)	0.93 (0.87)
	1R	0.98 (0.94)	0.99 (0.90)	0.99 (0.93)	1.00 (0.92)	0.99 (0.93)	0.94 (0.88)
Grain size	0R	0.86 (0.77)	0.97 (0.72)	0.96 (0.83)	0.99 (0.83)	0.97 (0.78)	0.88 (0.81)
	0.5R	0.92 (0.81)	0.97 (0.79)	0.98 (0.88)	0.99 (0.90)	0.97 (0.90)	0.92 (0.86)
	1R	0.81 (0.73)	0.97 (0.75)	0.94 (0.81)	0.98 (0.82)	0.96 (0.71)	0.86 (0.75)

3. 回帰モデルの評価

3. 1 各アルゴリズムの回帰性能評価

各アルゴリズムにて構築した回帰モデルにおける決定係数を Table 1 に示す。カッコ内の数値は教師データと別で用意した 53 データにおける決定係数である。アルゴリズムで温度、ひずみは決定係数 0.9 以上と高精度な回帰結果が得られている。これらと比較して結晶粒度の回帰精度は低位な傾向であった。

決定木系のモデルが良好な回帰精度を示す傾向は得られた。本研究では GBDT のアルゴリズムが訓練データ、検証データともに良好な精度を示す結果となった。検証データにおける GBDT モデルの回帰結果を Fig. 4 に示す。実工程で主に想定される領域においては良好な回帰精度が得られることが確認された。一方で教師データが疎であるひずみ ≥ 3 および結晶粒度 ≤ 4 の領域では他の領域と比較して誤差が大きい傾向が認められた。

3. 2 変数寄与度の検証

結晶粒度の予測結果の影響度を評価するため、SHAP 解析¹¹⁾を実施した。結果を Fig. 5 に示す。グラフ横軸の SHAP 値が目的変数に対する寄与度を示し、プロットの色が説明変数の絶対値に対応する。表層部の結晶粒度を例にとると、加工前の表層部の結晶粒度と加工後の結晶粒度には正の相関があり、加工前の表層温度に対しては負の相関があることが示されている。

結晶粒度はいずれも加工前の結晶粒度と温度に強く依存することが示された。また、これらと比較すると寄与は小さいものの、0.5R 位置の結晶粒度は圧下量と負の相関を示し、中心部の結晶粒度は材料径と負の相関を示すことが確認された。FEM の解析において、圧下量は加工発熱量に影響し、鍛造径は材料の失熱量に影響するパラメータである。これらの説明変数は間接的に鍛造温度に影響するため、結晶粒度に対する影響は FEM の解析結果と整合する結果であるといえる。一方で本モデルにおけるひずみの寄与度はいずれも低い結果であった。

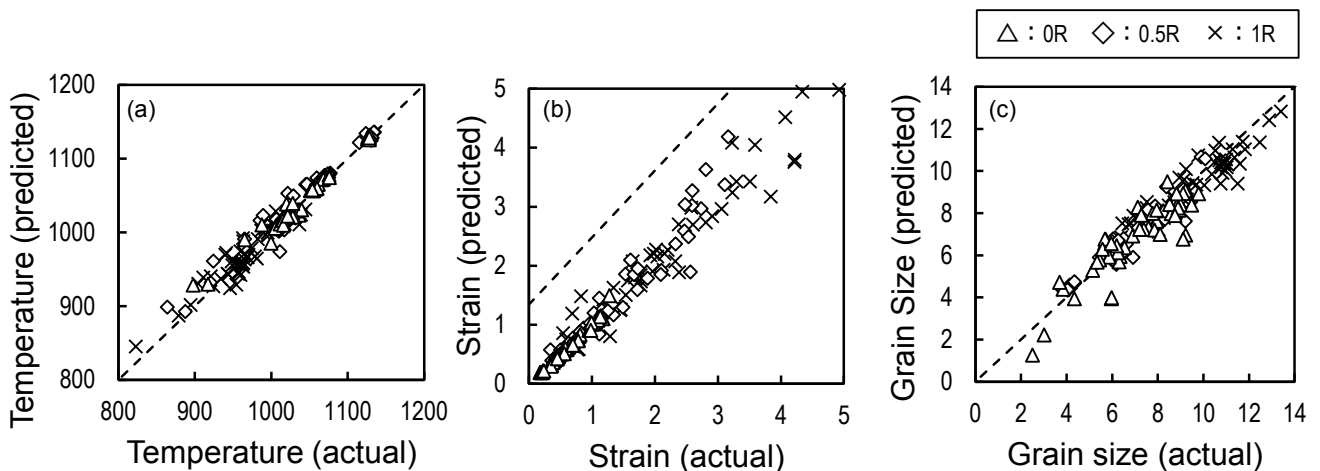


Fig. 4. Regression scatter plots: (a) temperature, (b) strain, (c) grain size.

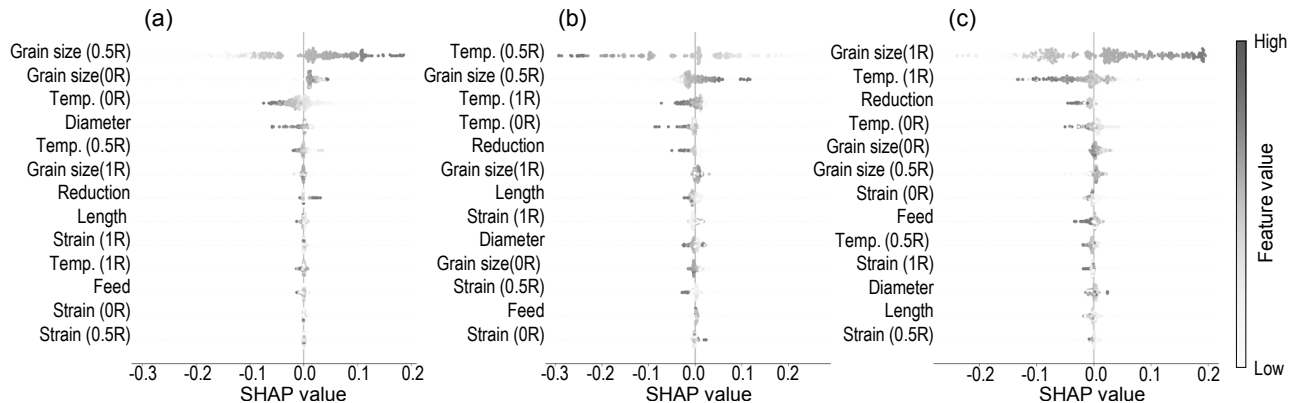


Fig. 5. SHAP analysis for grain size: (a) 0R, (b) 0.5R, (c) 1R

4. 実工程適用に向けた検証

4. 1 実工程を想定した精度検証

構築したモデルを用いて実工程を模擬した鍛造パスで FEM の解析結果とサロゲートモデルの計算結果の比較を行った。サロゲートモデルにおける計算時間は工程全体で 10 秒未満であり、数時間必要であった従来の FEM 計算と比較して計算時間の大幅な短縮が可能であることが確認された。

工程内での最大誤差を Table 2, 各部位における予測値と FEM 計算値を Fig. 6 に示す。検証した工程において、0R 位置, および 0.5R 位置においては温度, ひずみ, 結晶粒度いずれも途中工程を含めて FEM 結果とよく一致する結果が得られた。一方で表層部である 1R 位置においては温度, 結晶粒度に予測誤差が生じた。最初の工程で温度の予測誤差が発生し, 以降の工程で結晶粒度の予測誤差が拡大する傾向が認められる。Fig. 3 で示したように表層部の結晶粒度は鍛造前の同部位の結晶粒度と温度に強く依存するモデルとなっている。そのため, 温度の誤差を反映した結果誤差が拡大する結果となった。表層部については部位により鍛造金数との接触状態に差異が生じるため, 解析モデル上でもばらつきが大きい傾向がある。今回は代表点を取得したため, 他の部位と比較して回帰精度が低位であったことが推察される。

Table 2. Prediction error of entire process.

	Temperature (°C)	Strain	Grain size
0R	7	0.04	0.6
0.5R	7.9	0.24	0.6
1R	42.4	0.24	1.9

4. 2 工程最適化に向けた検討

サロゲートモデルを使用した工程最適化の実現に向けて, 2 変数を変化させた場合の結晶粒度における応答曲面の出力を試みた。基準を前項鍛造工程の第一段階とし, 0R, 0.5R, 1R の加工前温度を基準 ± 100 °C (10 °C 間隔), 送り速度は製造可能範囲である基準の 0.4 倍 ~ 2.0 倍 (0.1 倍間隔) の範囲で設定した。各変数の組み合わせに対して 21×17 の計 357 データでサロゲートモデルの計算を実施した。計算時間は約 10 sec であった。この計算により, 2 変数に対する各部位の結晶粒度の出力結果について, 3 次元の応答曲面を記述することが可能となる。

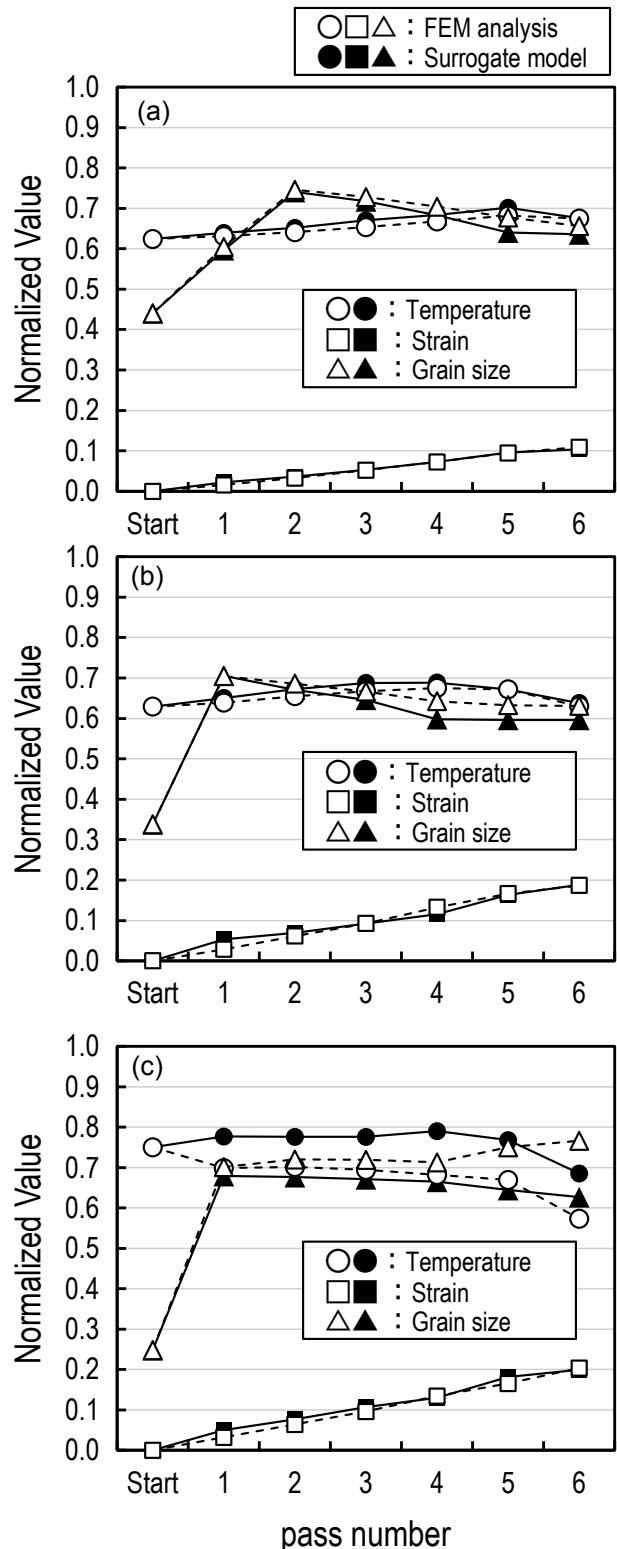


Fig. 6. Comparison of calculation results between FEM and surrogate model: (a) 0R, (b) 0.5R, (c) 1R.

Fig. 7 (a) ~ (c) に温度, 送り速度に対する 0R, 0.5R, 1R における結晶粒度の応答曲面を示す. 応答曲面は実験計画法ソフトウェアである Design - Expert を使用し, サロゲートモデルで計算した 357 点を 6 次多項式で近似した曲面として作成した. この結果より, 出力値に対してそれぞれ目標値を設定することで, その条件を満たしうる 2 変数の取りうる範囲を記述することが可能となる. Fig. 7 (d) は例示として, 0R, 0.5R, 1R の結晶粒度の目標値を ≥ 7 と設定した場合における, これらの条件を満たす領域を斜線部で示したものとなる. このように, サロゲートモデルを活用することにより, 短時間で製造条件のスクリーニングができる可能性が示された. この範囲内で FEM の計算を行うことで, より効率的に製造条件の設定が可能になると考えられる. 実際の工程設計においては設備制約や製造コストを考慮すべきであることに加え, 前項で示したように複数パスを繰り返し計算した結果で工程を評価する必要がある. これらを考慮した最適化手法の確立は今後の課題である.

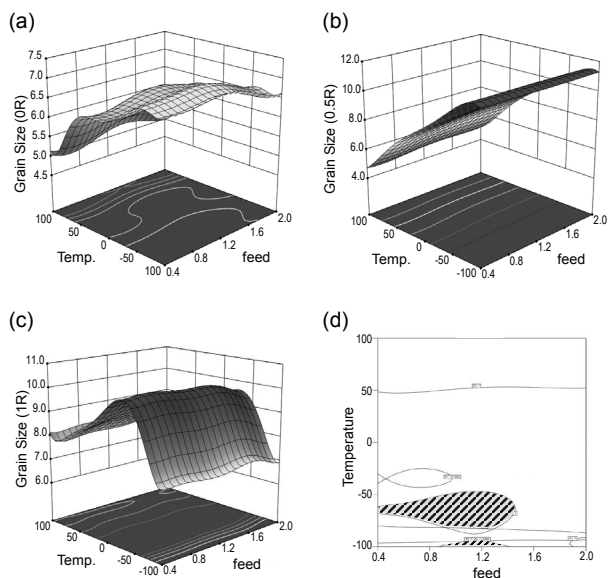


Fig. 7. Response surface for grain size (a) 0R, (b) 0.5R, (c) 1R, and (d) region with all parameters ≥ 7 .

5. 結言

本研究では有限要素シミュレーションを補完する計算手法として機械学習を活用したサロゲートモデルを構築し以下の結論を得た.

- (1) 機械学習で回帰モデルを構築し, ある程度の子測精度かつ傾向の一致するモデルを得ることができた.
- (2) 工程全体の予測においても一定の精度を持つことが示された. 繰り返し計算に伴う予測誤差の増加を抑

制することが実用化には必要であり, さらなる回帰精度向上が求められる.

- (3) サロゲートモデルで 2 変数に対する結晶粒度の応答曲面が描画可能であることが確認された. 357水準の計算時間は 10 sec.程度であり, 短時間で製造条件のスクリーニングできる可能性が示された.

(文 献)

- 1) T. Okajima, S. Sakurai, and M. Fujiwara: Int. Conf. IFM2014, (2014), 198.
- 2) N. V. Queipo, R. T. Haftka, W. Shyy, T. Goel, R. Vaidyanathan and P. K. Tucker: Prog. Aerosp. Sci., 41 (2005), 1.
- 3) J. N. Vijay, R. Niklas and B. David: Materials Research Proceedings, 41(2024), 2299.
- 4) 八田武士, 廣中智久, 吉田広明, 五十川幸宏, 益永敦郎: 電気製鋼, 78(2007), 215.
- 5) A. E. Hoerl, R. W. Kennard, Technometrics, 12(1970), 55.
- 6) H. Drucker, C. J. C. Burges, L. Kaufman and A. J. Smola: Advances in Neural Information Processing Systems, 28(1997), 779.
- 7) L. Breiman: Machine Learning, 45(2001), 5.
- 8) J. H. Friedman: The Annals of Statistics, 29, (2001), 1189.
- 9) T. Chen and C. Guestrin: KDD2016, 22(2016), 785
- 10) G. Ke, Q. Meng, T. Finley, T. Wang, W. Chen, W. Ma, Q. Ye and T. Liu: Advances in Neural Information Processing Systems, 30(2017), 3147.
- 11) S. M. Lundberg, S. I. Lee, : Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems, (2017), 4768.



小池真央



河合達也



松木隆紀



中川純一