

PanOptimizer は熱力学相互作用パラメータを**最適化**・評価するために Pandat ソフトウェアに組み込まれ統合化されています。標準偏差 (Standard Deviation) と相対標準偏差 (Relative Standard Deviation (RSD)) が各パラメータについて計算・表示されます。さらに物理的なモデルパラメータの最適化もサポートします。

目次
3. PanOptimizer Example
3.1 Rough Search
3.2 Normal Optimization

使用するファイル名	
データベースファイル :	AlZn_Sample.tdb
POP ファイル :	AlZn_Sample_Rough.pop
実験値データファイル :	1D_exp.dat, 2D_exp.dat
バッチファイル :	AlZn_1D.pbf, AlZn_2D.pbf

3. PanOptimizer Example

平成 21 年 10 月 18 日

3.1 Rough Search

略式探索

熱力学相互作用パラメータ値を最初、全てゼロ値とします。相分離が生じているかどうか、及び実験値を元に略式探索を行い、概ねの相互作用パラメータ値を求める機能です。この例題では、Al-Zn 2 元系状態図を例にし説明します。

3-1-1 AlZn_Sample.tdb データベースファイルを Pandat に Load します。

このファイルの中身を確認してみましょう。

右図のような Al-Zn 2 元系状態図が最終的な成果物となるよう目指します。この図より 3 つの相が存在します。さらに、Fcc 相には相分離が生じています。最初の段階では相互作用パラメータ値が全く不明です。そこで、

Lattice Stability (相中の純元素の自由エネルギー)

は文献 91Din を利用します。

正則溶体モデルを用いて 3 相を記述します。

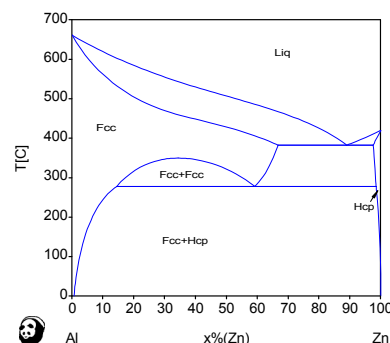
Al と Zn 間の相互作用パラメータ値を全てゼロにします。

具体的には、

Parameter L (LIQUID, AL, ZN; 0)	$a + at * T;$
Parameter L (LIQUID, AL, ZN; 1)	$b + bt * T;$
Parameter L (HCP_A3, AL, ZN; 0)	$c;$
Parameter L (FCC_A1, AL, ZN; 0)	$d + dt * T;$
Parameter L (FCC_A1, AL, ZN; 1)	$e + et * T;$
Parameter L (FCC_A1, AL, ZN; 2)	$f + ft * T;$

11 個の定数をゼロ値にして作業を開始します。

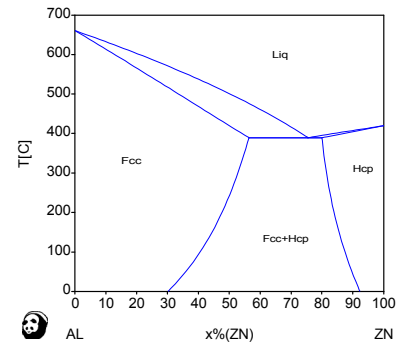
(Liq_AA, Liq_AAT, Liq_BB, Liq_BBT, Hcp_CC, Fcc_DD, Fcc_DDT, Fcc_EE, Fcc_EET, Fcc_FF, Fcc_FFT)



この図を作りたい

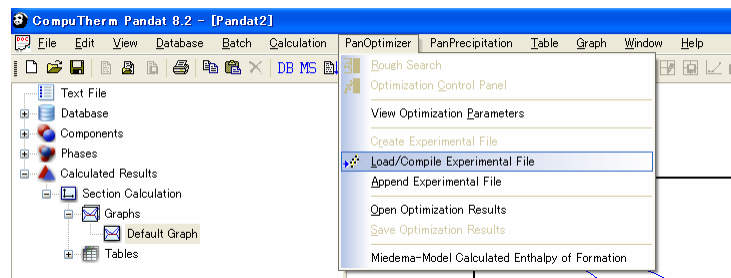
3-1-2 元素 Al と Zn を選択します。

3-1-3 2元系状態図を計算してみます。
相互作用パラメータ値を全てゼロ値にした段階での
状態図は右図のようになります。

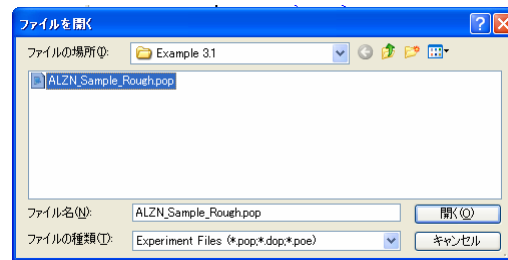


experimental ファイルを Load します。

メニュー PanOptimizer
を利用し
AlZn_Sample_Rough.pop
ファイルを選択します。



pop ファイルの記述が正し
いと、Load 時に画面上には
特に何も表示されません。



3-1-4 model parameters を確認してみましょう。

メニュー PanOptimizer
から View Optimization Parameters
を選択します。
右図が表示されます。

Name	Include	Lower Bound	Upper Bound	Value	Default	Std. Deviation	Relative Std. D.
LIQUID_AA	Active	0.0000	60000.0000	0.0000		0.0000	0.00%
LIQUID_AAT	Active	-20.0000	20.0000	0.0000		0.0000	0.00%
LIQUID_BB	Active	-60000.0000	60000.0000	0.0000		0.0000	0.00%
LIQUID_BBT	Active	-20.0000	20.0000	0.0000		0.0000	0.00%
HCP_A3_AA	Active	-60000.0000	60000.0000	0.0000		0.0000	0.00%
FCC_A1_AA	Active	0.0000	60000.0000	0.0000		0.0000	0.00%
FCC_A1_AAT	Active	-20.0000	20.0000	0.0000		0.0000	0.00%
FCC_A1_BB	Active	-60000.0000	60000.0000	0.0000		0.0000	0.00%
FCC_A1_BBT	Active	-20.0000	20.0000	0.0000		0.0000	0.00%
FCC_A1_CC	Active	-60000.0000	60000.0000	0.0000		0.0000	0.00%
FCC_A1_CCT	Active	-20.0000	20.0000	0.0000		0.0000	0.00%

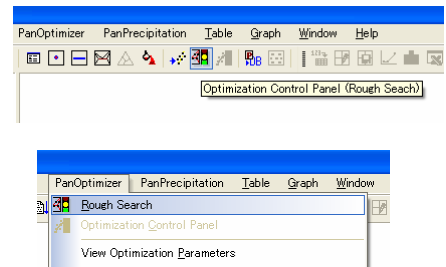
Done ボタンで画面を閉じます。

ここで、それぞれのパラメータの
Low bound, upper bound,
initial value 値を変更できます。

3-1-5 実験データ値がある場合は、そのデータと計算結果図を重ねて表示させ、
どの程度の差があるか理解しやすいように表示します。
主に、相境界の点、(T=953K) 液相のエンタルピー値をプロットします。

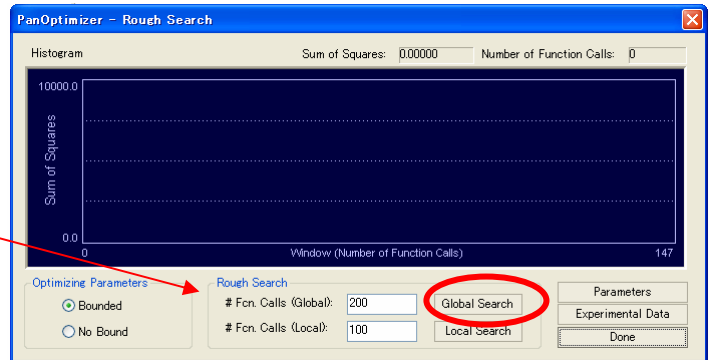
3-1-6 Rough search を実行します。

アイコン・ボタンもしくはメニュー **PanOptimizer** から **Rough Search** を選択します。



右図が表示されます。

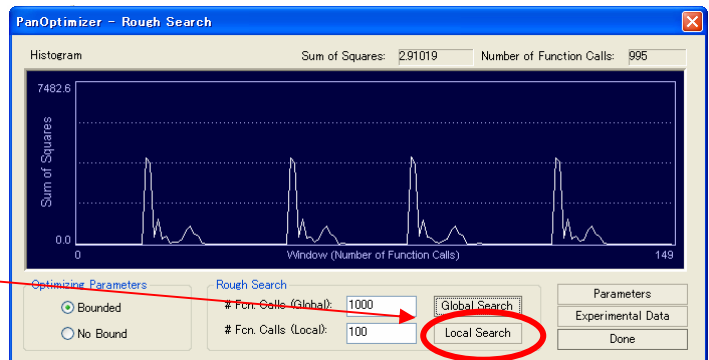
関数評価最大値
(#Fcn. Calls (Global))
を 1000 に変更して
Global Search ボタンを
クリックします。



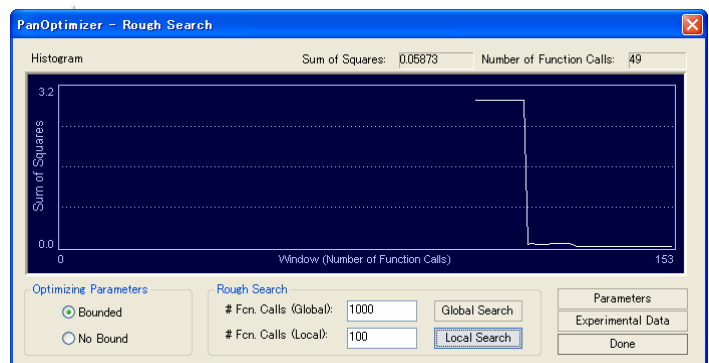
パラメータ評価計算が開始され
最小二乗法の要領で、平方和 (Sum of Squares) がグラフ表示されます。

平方和が 2.91 にてとまります。

次に
Local Search ボタンを
クリックします。



さらに処理が続き
Local Search により
平方和が 0.059 まで
減ります。



3-1-7 計算結果 (パラメータ値) を確認します。

確認方法は 3 種類あります。

(1)

Parameters ボタンをクリックしてモデルパラメータ値を表示させます。

全てのモデルパラメータが評価されたことが表示されます。RSD 値 (Relative Standard Derivation) が小さいと最適化が収束したことを示す。

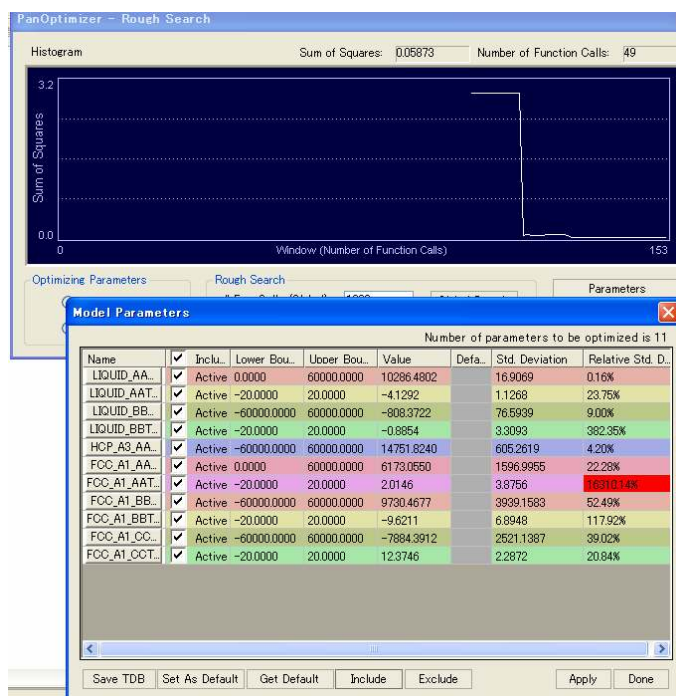


Figure 3.1.9 Check model parameters after rough search

変動変数 = 標準偏差と平均との比 = 相対標準偏差 = RSD

確認方法

(2)

Experimental Data ボタンをクリックして Experiment 値を表示させます。

$(\text{Wtd. Residual})^2$
重み付けされた余りの二乗

#17 までデータが表示されます。

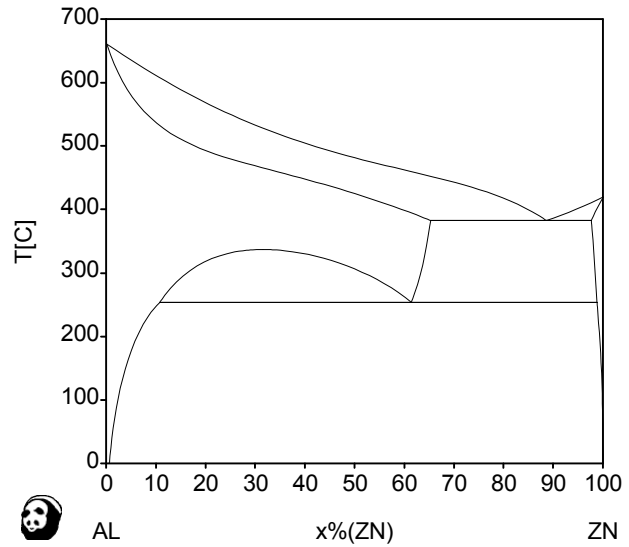


3-1-7 確認方法

(3)

状態図を計算します。

液相線が凹型ですが、
概ねの形を再現でき
ました。



Calculated phase diagram after rough search

3-1-8 作業ファイルの保存

最適化作業結果をファイルに保存できます。メニュー **PanOptimizer** から **Save Optimization Results** を選択し、**por** ファイル形式で保存します。

3-1-9 Rough search で得られたパラメータをTDBファイルに記述します。

AlZn_Sample.tdb ファイルをコピーし、名前を AlZn_Sample_setV.tdb とします。

\$ L0 parameter for LIQUID phase					
OPTIMIZATION	LIQUID_AA	0	+10286.4802;	60000	N!
OPTIMIZATION	LIQUID_AAT	-20	-4.1292;	20	N!
\$ L1 parameter for LIQUID phase					
OPTIMIZATION	LIQUID_BB	-60000	-808.3722;	60000	N!
OPTIMIZATION	LIQUID_BBT	-20	-0.8854;	20	N!
\$ L0 parameter for HCP_A3 phase					
OPTIMIZATION	HCP_A3_AA	-60000	+14751.8240;	60000	N!
\$ L0 parameter for FCC_A1 phase					
OPTIMIZATION	FCC_A1_AA	0	+6173.0550;	60000	N!
OPTIMIZATION	FCC_A1_AAT	-20	+2.0146;	20	N!
\$ L1 parameter for FCC_A1 phase					
OPTIMIZATION	FCC_A1_BB	-60000	+9730.4677;	60000	N!
OPTIMIZATION	FCC_A1_BBT	-20	-9.6211;	20	N!
\$ L2 parameter for FCC_A1 phase					
OPTIMIZATION	FCC_A1_CC	-60000	-7884.3912;	60000	N!
OPTIMIZATION	FCC_A1_CCT	-20	+12.3746;	20	N!

3.2 Normal Optimization

熟練最適化

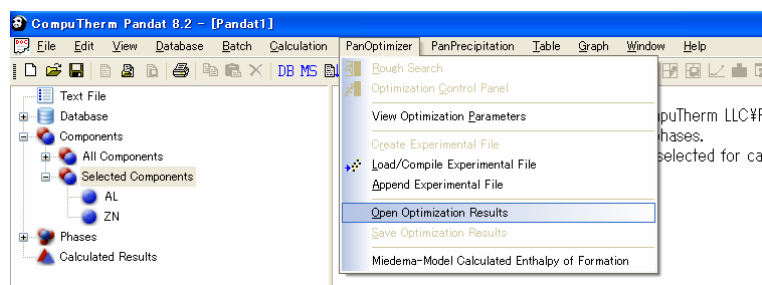
概ねの相互作用パラメータ値を初期値とし、実験値に合致するように相互作用パラメータを最適化する機能です。この例題では、Al-Zn 2元系状態図を例にし説明します。

3-2-1 ~~AlZn_Sample.tdb~~ データベースファイルを Pandat に Load します。
AlZn_Sample_setV.tdb

3-2-2 元素 Al と Zn を選択します。

3-2-3 ~~前節で保存した AlZn_Rough.pop 作業ファイルを Open します。~~

Pandat v8.2 に
不具合があるため
この操作を止めます。

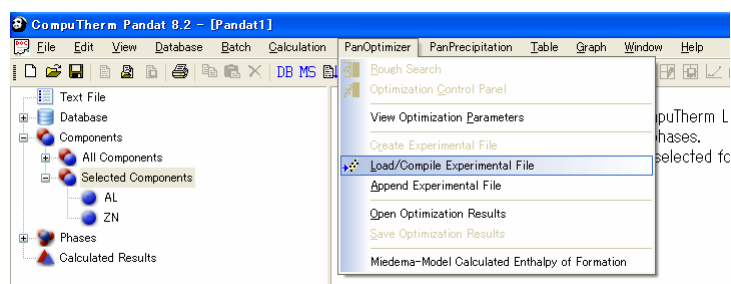


3-2-4 ~~experimental ファイルを Append (追加) 読み込みます。~~ AlZn_Sample.pop

experimental ファイル AlZn_Sample.pop を Load します。

注意： 前節で用いた AlZn_Sample_Rough.pop ファイルとは内容が異なります。

注意： 「Load experimental file」と「Append experimental file」とは異なります。
前者は新規にファイルを読み込む場合です。

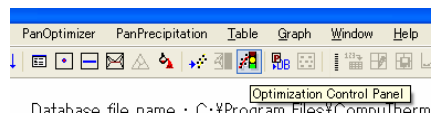


pop ファイルの記述が正しいと、Load 時に画面には特に何も表示されません。

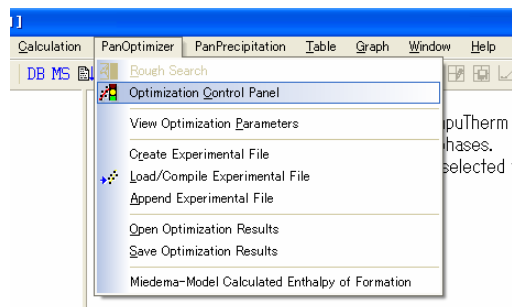
3-2-5 Normal optimization の実行

まず

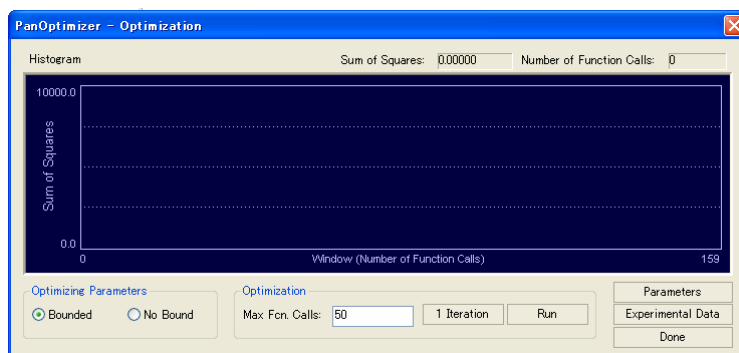
Optimization Control Panel を開きます。



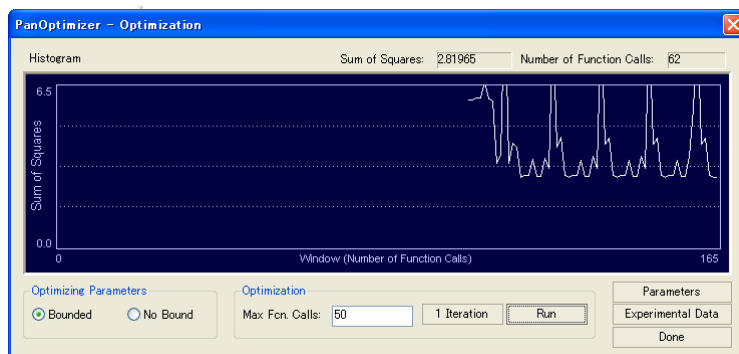
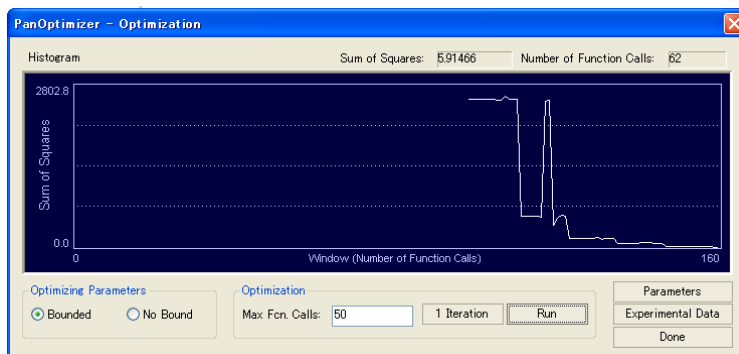
もしくは



Run ボタンを1度クリック
します。計算処理が始まり
sum of squares 値が 5.9
を示します。



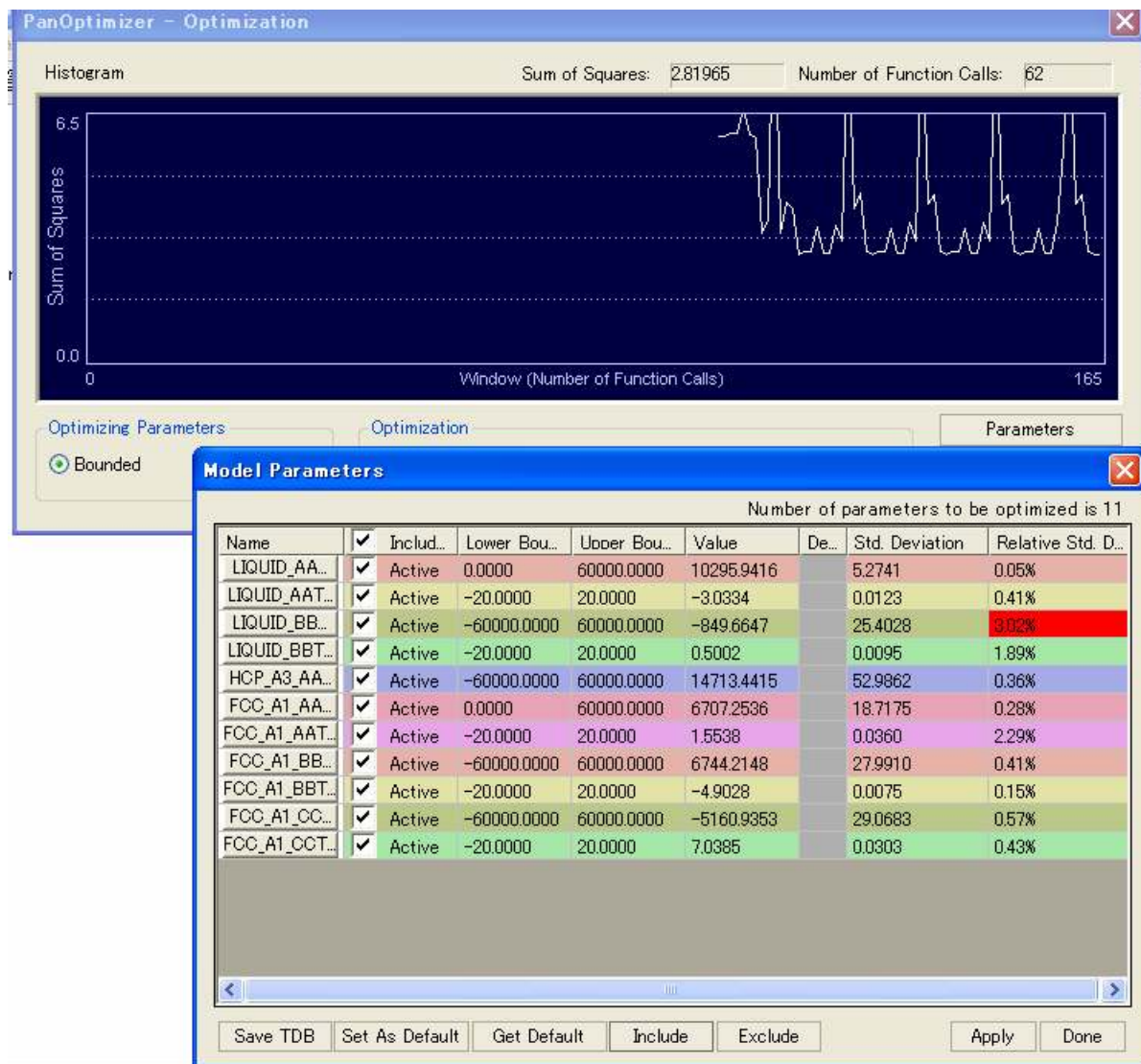
Run ボタンを再度クリック
します。sum of squares 値
が 5.9 から 2.8 になります。



3-2-6 計算結果（パラメータ値）を確認します。

(1)

Parameters ボタンをクリックしてモデルパラメータ値を表示させます。



平方和 sum of squares

分散 Variance σ^2

標準偏差 Standard deviation σ

変動係数 Relative Standard Deviation = σ / x

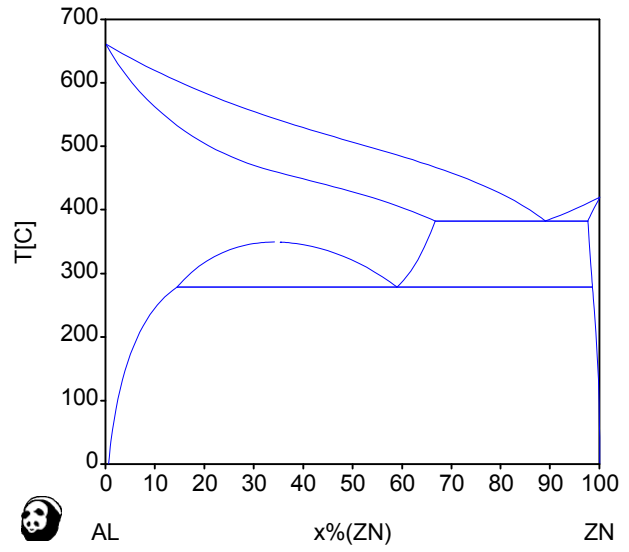
= 標準偏差と平均との比 = 相対標準偏差 = RSD

RSD は assessment 変数の重要さ significance を示す。

RSD が 0.5 以下 (= 50%以下) になるまで評価を続ける。

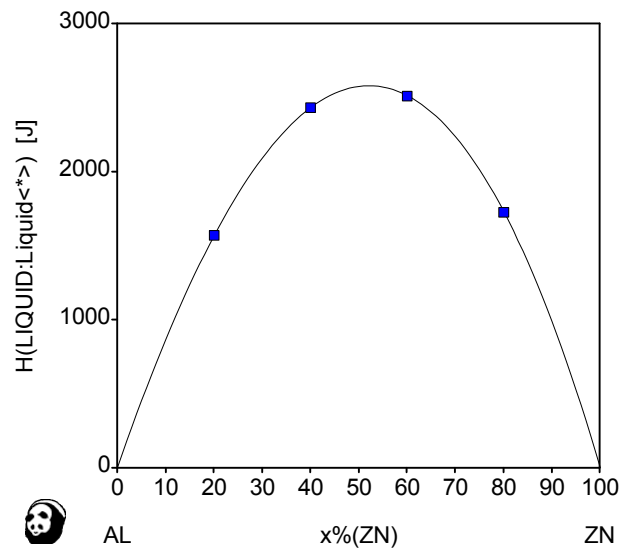
0.1 > RSD > 0.01 の場合 (10% > RSD > 1%)、有効ケタ数は2と考える

状態図を計算します。



953K = 680°Cにおける液相のエントルピーを計算してみます。

実験値を■印でプロット。



■ 標準偏差計算例

8個のデータ、**27,6,10,21,8,15,14,18**、について

平均は、 $(27,6,10,21,8,15,14,18) / 8 = 14.875$ となるので、

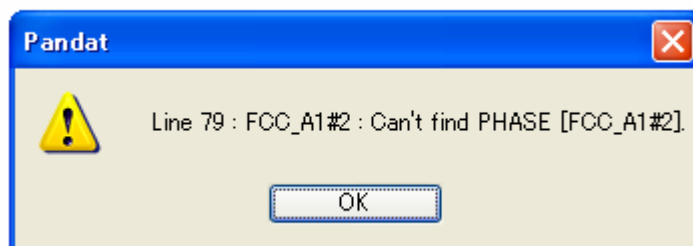
分散は、 $\{(27-14.875)^2 + (6-14.875)^2 + (10-14.875)^2 + (21-14.875)^2 + (8-14.875)^2 + (15-14.875)^2 + (14-14.875)^2 + (18-14.875)^2\} / 8 = 43.1094$

標準偏差は、 $\sqrt{43.1094} = 6.5658$

変動係数 RSD は、 $6.5658 / 14.875 = 0.4414 = 44.14\%$

3.3

pop ファイルの記述に誤りがある場合、pop ファイルを読み込み時にエラーメッセージが表示されます。



このエラーを解決するには、「自由度」の概念を理解する必要があります。

先ず、弊社にお問い合わせください。

株式会社 材料設計技術研究所
〒108-6028
東京都港区港南 2-15-1
品川インターシティ A棟 28階
TEL:03-6717-4096 FAX:03-6717-4097