



Research
Intelligent Manufacturing—Article

基于自组织映射的增材制造中数据驱动式微观组织和显微硬度设计

甘政涛^{a,*}, 李恒阳^a, Sarah J. Wolff^a, Jennifer L. Bennett^{a,b}, Gregory Hyatt^b, Gregory J. Wagner^a,
曹简^a, Wing Kam Liu^{a,*}

^a Department of Mechanical Engineering, Northwestern University, Evanston, IL 60208, USA

^b DMG MORI, Hoffman Estates, IL 60192, USA

ARTICLE INFO

Article history:

Received 13 August 2018

Revised 9 December 2018

Accepted 1 March 2019

Available online 2 July 2019

关键词

增材制造
数据科学
多重物理建模
自组织映射
微观组织
显微硬度
镍基高温合金

摘要

为了在镍基高温合金的增材制造（AM）中设计微观组织和显微硬度，本研究提出了一种新的数据驱动方法，该方法结合了物理模型、实验测量和数据挖掘方法。该模拟基于计算热流体动力学（CtFD）模型，可以获得热行为、凝固参数（如冷却速度）和凝固层的稀释率。根据计算出的热信息，可利用经过充分测试的力学模型估算枝晶臂间距和显微硬度。通过实验测定试样的微观结构和显微硬度，与模拟值进行比较验证。为了实现过程-组织-性能（PSP）关系的可视化，模拟及实验数据集被输入到数据挖掘模型——自组织映射（SOM）中。在多目标下，工艺参数的设计窗口可以从可视化映射中得到。这种被提出的方法可用于AM和其他数据密集型工艺过程。过程、组织和性能之间的数据驱动联系可能会有利于在线过程监控控制，从而获得理想的微观组织和力学性能。

© 2019 THE AUTHORS. Published by Elsevier LTD on behalf of Chinese Academy of Engineering and Higher Education Press Limited Company This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

1. 引言

在现有的文献中，已经有对加速增材制造（AM）的工艺和材料设计的研究（如文献[1–3]）。在这方面，多尺度和多重物理建模以及模拟是至关重要的，因为它们有可能大大减少实验花费的成本和时间[4–5]。为了预测过程-组织-性能（PSP）的关系，人们对AM进行了大量建模和模拟[6–9]。同时，采用高度受控的实验测量手段，包括在线过程监控、微观组织表征和力学测试，对模型验证是很关键的[10–12]。

然而，在AM工艺和材料设计中，单纯地将实验和

模拟结合，难以理解和运用由模拟和实验产生的高维数据集，无法实现预期的加速。必须运用数据科学的方法来有效地整合实验和多尺度模拟数据。Popova等[13]使用数据科学方法来理解AM中的过程-组织联系，并使用提出的数据科学工作流程来试图理解过程条件与凝固晶粒组织之间的关系。人们还提议将基于物理与数据挖掘方法相结合，用于AM中的温度场预测[14,15]。利用三维（3D）有限元分析（FEA）和实验热像数据对基于功能性高斯过程的降阶模型进行了标定[14,15]。Salloum等[16]在激光洁净成型（LENS）过程中使用自适应Alpert树小波进行高维数据集压缩。Kohonen[17,18]提出的自

* Corresponding author.

E-mail address: zhengtao.gan@northwestern.edu (Z. Gan), w-liu@northwestern.edu (W.K. Liu).

组织映射 (SOM) 是一种基于神经网络的无监督机器学习算法, 能够将高维数据映射到二维 (2D) 平面, 同时保留拓扑结构[19,20]。与通常用于回归问题的人工神经网络 (ANN) 相比, SOM的主要优点是能够以低维映射的形式可视化高维数据, 这有助于研究人员直观地识别特征之间的潜在关系。SOM作为一种可视化高维数据集的工具, 也有利于对实际设计问题进行聚类分析[21]。

在本研究中, SOM被用来可视化AM中的高维数据, 这些数据来自精心设计的实验测量和多重物理模型。通过引入SOM, 可以找到AM中激光功率、粉末质量流率、能量密度、稀释率、冷却速率、枝晶臂间距和显微硬度之间的关系。另外, 还可以通过可视化SOM得到多目标下的工艺参数设计窗口。该工作的原理如图1 [22]所示。

2. 实验数据集

利用1020 nm大功率连续波激光可以在AISI 1045碳

钢盘上沉积单道Inconel 718粉末。基体处的光束直径为3 mm。激光功率为常数, 质量流率从3.35~27.2 g·min⁻¹以每次2.65 g·min⁻¹的速率递增。在每一质量流率下, 激光功率从1000 W增至2000 W, 每增加200 W, 产生60条沉积道。详细的工艺参数和条件可以在我们之前的论文中[10]找到。在这种情况下, 材料特性包括冷却速率测量、稀释率测量、枝晶臂间距测量和硬度测试。采用红外热像仪测定稳态熔池中固相至液相温度的冷却速率, 详细描述见参考文献[10]。腐蚀沉积层横截面后, 可以确定和量化稀释率和枝晶臂间距。采用维氏显微硬度测量方法, 可得平均显微硬度。图2给出了实验工作的总结和详细的稀释图表。实验细节可在参考文献[22]中找到。

3. 基于物理的模拟数据集

建立计算热流体动力学 (CtFD) 模型, 模拟定向能量沉积 (DED) 过程[23]。本文没有描述细节的建模方程, 而是提供了一些阐述以便理解CtFD模型和组织-

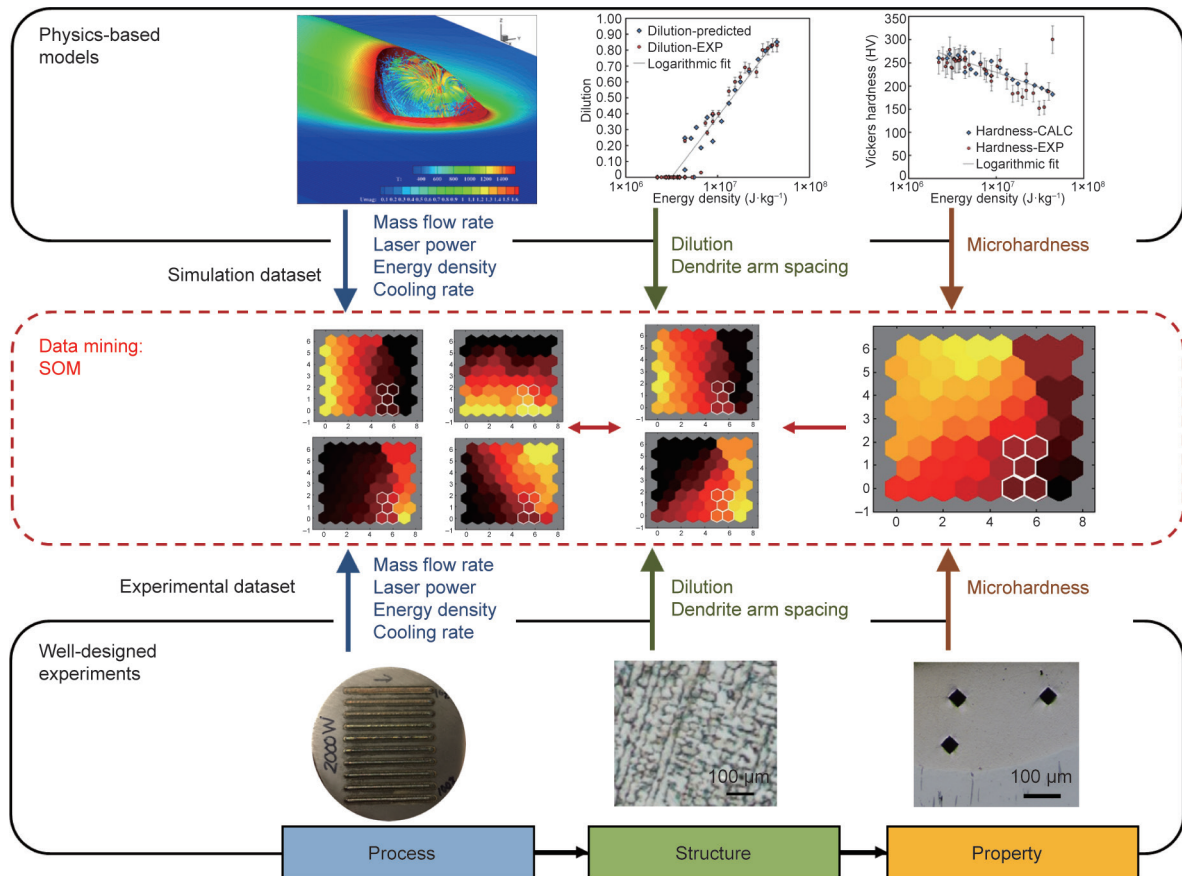


图1. 对当前计算工作 (顶行) 和实验工作 (底行) 中通常使用的工作流的示意图描述, 以及数据挖掘方法如何增强这一点, 以恢复与材料创新工作相关的高价值PSP连接。CALC: 计算得出; EXP: 实验得出。

结构模型。求解非等温Navier-Stokes (N-S) 方程，包括质量方程、动量方程和能量方程，可得熔池内的温度场和液态金属流场[24,25]。采用基于物理的拉格朗日-欧拉 (ALE) 方法来跟踪熔池的自由表面[23]。根据稳态熔池温度场，可以计算液固界面处熔池的尺寸、稀释率、二次枝晶臂间距 (SDAS) 和冷却速率。用经验公式来估算枝晶臂间距[26]。用

镍 (Ni) 当量来确定镍基高温合金的维氏硬度 (HV) [27]。这些模型的细节在我们之前的工作中描述过[22]。总共计算了25个不同激光功率级和粉末质量流率的模拟实例。每一例中，观察到的组织和性能变量是熔池的几何尺寸、稀释率、冷却速率、二次枝晶臂间距 (SDAS) 和显微硬度。模拟结果总结如图3所示。

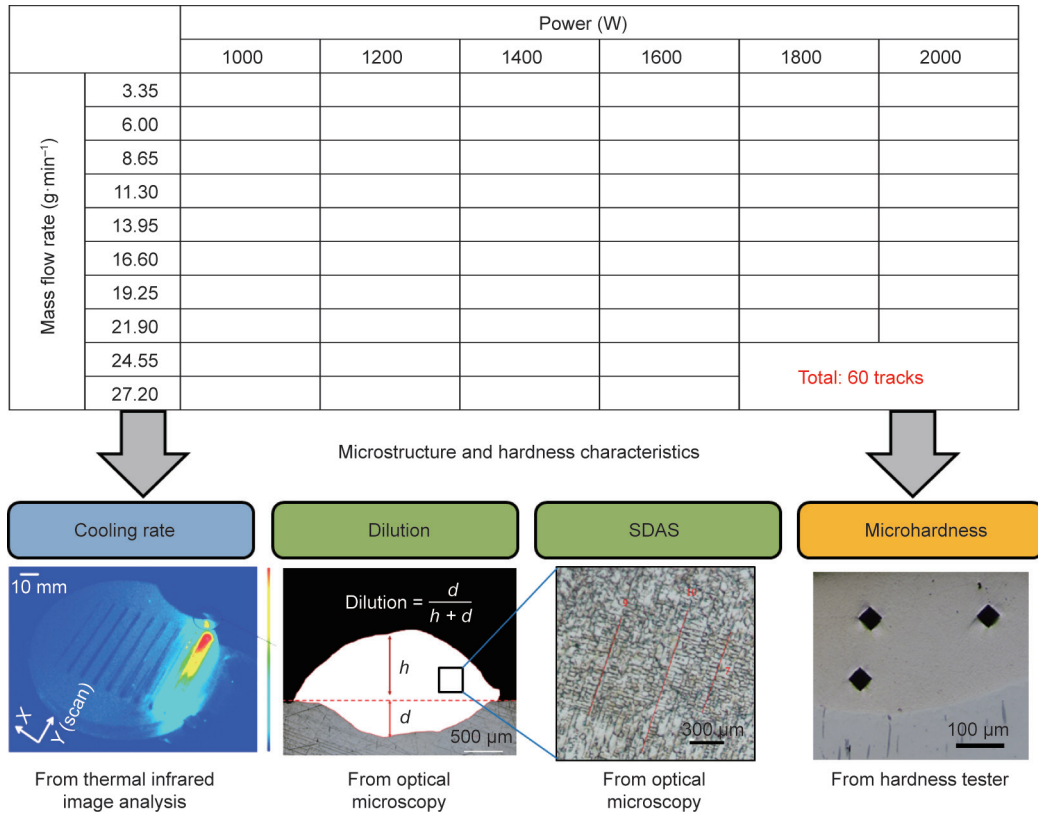


图2. 从微观组织和硬度特征得到的实验数据集的正交视图：可变激光功率、粉末质量流率和4个测量输出[冷却速率、稀释率、二次枝晶臂间距 (SDAS) 和硬度]。

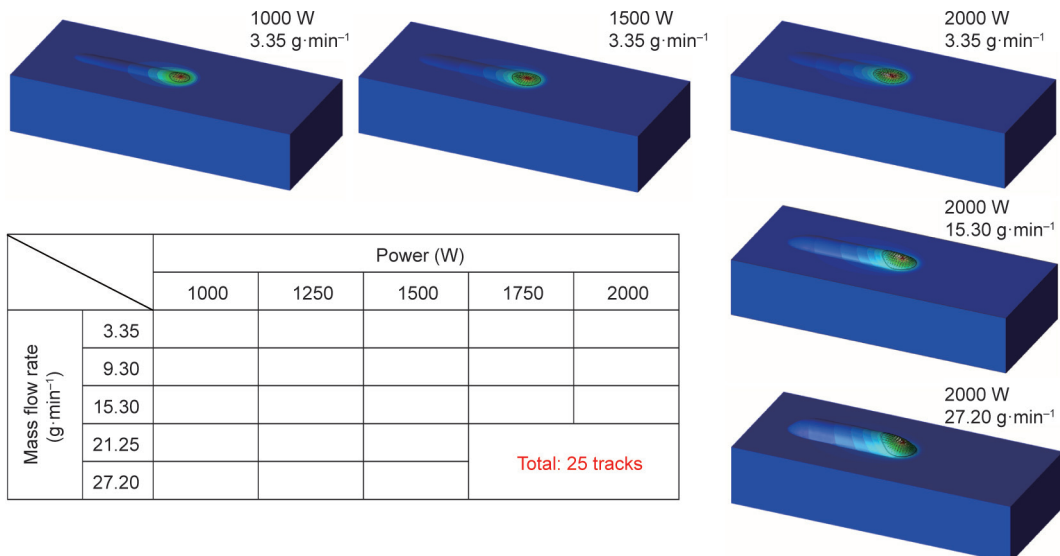


图3. 可变激光功率级和粉末质量流率的模拟数据集正交视图，以及选定的模拟结果。

4. 用于可视化 PSP 关系的数据挖掘

MATLAB [28]中的SOM工具箱被用来同时实现高维数据集的可视化和过程参数的设计。通过基于物理的仿真和实验测量，得到7维（7D）PSP数据集作为输入向量（ \mathbf{x}_m ）来挖掘数据，如图4所示。由于仿真结果与实验结果[22]吻合较好，所以采用25个仿真数据点和5个实验数据点作为输入向量，训练单个 8×8 SOM。我们比较了不同尺寸SOM的结果，发现 8×8 SOM的性能最好。如果映射尺寸太小，则分辨率很低；而SOM过大会导致过拟合。每个7D输入向量包含7个变量：4个过程变量（即激光功率、粉末质量流率、能量密度和冷却速率）、2个微观组织变量（即稀释率和SDAS），以及1个性能变量（即显微硬度）。在本研究全部60个实验点中，只有5个实验数据点作为SOM的输入，因为只有这5个实验数据点具有全部7个测量值。当前版本的SOM需要具有相同特征维度的数据点。因此，剩余的实验数据被用来对仿真结果进行验证，而不是对SOM进行训练。本工作的目标是演示数据驱动 workflow，以便在AM中理解和设计高维数据集。为了在不改变 workflow 的情况下获得更好的映射分辨率，未来我们会使用更多的实验和仿真数据集。

训练过程可以用伪代码来描述，如**Algorithm 1**所示。映射神经元是六边形交错的。 X 轴和 Y 轴上的刻度分别为整数 $1 \leq i \leq \text{Size}X$ 和 $1 \leq j \leq \text{Size}Y$ ，如图4所示。初始神经元的权值根据随机数 $[0,1]$ 被设置为 $W_0^{i,j}$ 。每个输入向量的元素被线性标准化为 $[0,1]$ 。初始化后，SOM将接受 T 次训练。对于当前次数 t 和各输入向量 \mathbf{x}_m ，首先通过式(1)计算输入向量与各神经元权值之间的距离，确定最佳匹配单元（BMU）。BMU是到输入向量 \mathbf{x}_m 距

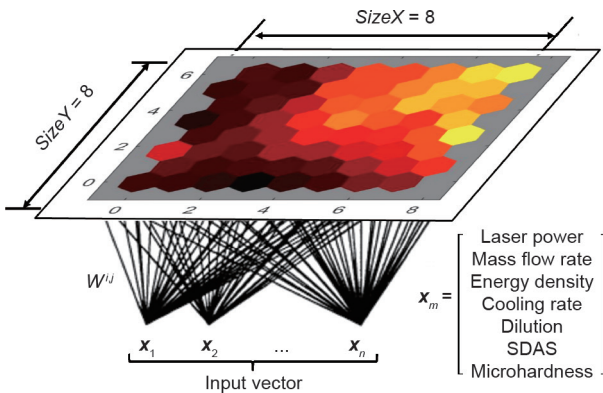


图4. 一个包含输入向量的典型SOM。 n : 全部数据集； $W^{i,j}$: 权值。

离最短的映射单元。第二，BMU周围邻域的直径可由式（2）确定，其中 $d(t)$ 为随时间单调递减的函数。初始距离系数为 d_0 ，在本研究中为8。下降速率是 λ 。第三，BMU及其邻域的权重 $W_m^{i,j}$ 是根据式（3）和（4）进行更新的。在式（3）、（4）中， $h_{\text{BMU},i,j}$ 为高斯核函数；其中 $\alpha(t)$ 为学习率参数； $r_{i,j}$ 为各单元的位置； r_{BMU} 为BMU的位置。在所有 \mathbf{x}_m 都被计算到SOM之后，当前迭代次数就完成了。在这种情况下，通过选择足够多的迭代次数 $T = 100$ ，SOM可以收敛。图5为神经元点作为迭代次数的函数，其权值的方差，表明训练后SOM的收敛性。当训练完成时，映射可以重新排列原始数据集，同时保留输入空间的拓扑属性。

Algorithm 1. Program SOM

Initialize weights of neurons $W_0^{i,j}$ with random number $[0, 1]$

Index of epoch: t

Index of input vector in the dataset: m

Do $t = 0$ to T (max index of epoch)

Do $m = 1$ to n (max index of input vector)

Find BMU:

$$W_m^{\text{BMU}} = \arg \min_{\substack{i=1 \dots \text{Size}X \\ j=1 \dots \text{Size}Y}} \|W_m^{i,j} - \mathbf{x}_m\|^2 \quad (1)$$

Determine diameter of neighborhood around BMU:

$$d(t) = d_0 \exp(-t/\lambda) \quad (2)$$

Update weights $W_{m+1}^{i,j}$ in BMU and neighborhoods:

$$W_{m+1}^{i,j} = W_m^{i,j} + h_{\text{BMU},i,j} (\mathbf{x}_m - W_m^{i,j}) \quad (3)$$

$$h_{\text{BMU},i,j} = \alpha(t) \exp\left[-\|r_{i,j} - r_{\text{BMU}}\|^2 / 2d^2(t)\right] \quad (4)$$

End do

End do

每个映射如图6所示。PSP变量之间的关系可以被直观地理解。如图6所示，粉末质量流率与SDAS呈正相关关系，因为粉末质量流率的SOM平面与SDAS的SOM平面在相似的位置具有相似的值。相反，粉末质量流率与稀释率高度负相关。因此，根据图6中可视化的SOM，本研究得到如下结果：

- 粉末质量流率比激光功率对冷却速率和SDAS的影响更大。
- 稀释率和显微硬度取决于粉末质量流率和激光功率。
- 显微硬度由稀释度决定，而不是由SDAS或冷却速率决定。

这些规律通过数据挖掘方法获得，为深入了解AM过程中复杂的潜在物理现象和物质演化提供了有价值的理解。此外，还可以获得具有多个微观组织和性能目标范围的理想工艺参数窗口。本研究中，目标稀释率在0.1~0.3之间。在此范围内，凝固轨道既可避免稀释率过低导致的未熔合缺陷，又可避免高度稀释率导致的力学性能下降[29]。为了保持良好的力学性能，应最小化SDAS，并最大化显微硬度。为了寻找满足这些限制的目标簇，要对所有SOM单元执行一个迭代过程。可以选择包含多个单元的目标簇作为白色线框，如图6所示。因此，可以得到以下期望的工艺参数：1000~1100 W的激光功率，22.4~24.8 g·min⁻¹的粉末质量流率。所需的能量密度，即激光功率除以粉末质量流率，范围为 $2.4 \times 10^6 \sim 2.9 \times 10^6$ J·kg⁻¹。

仿真误差等不确定性对SOM分辨率的影响是一个

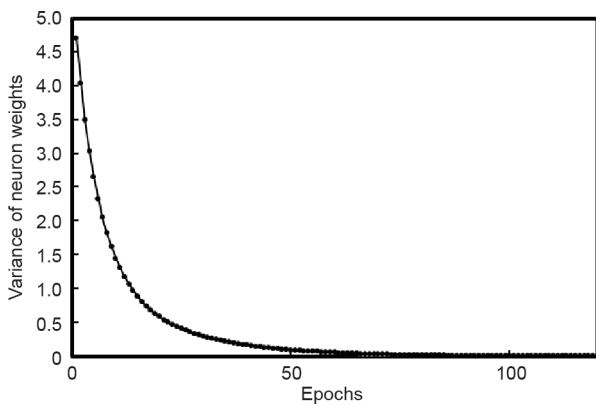


图5. 训练后SOM的方差-时间曲线。

有趣而重要的研究课题。在未来的工作中，我们将使用一个更大的数据库来研究一个具有不确定输入的改进的SOM。

5. 结论

本研究利用多物理模型、实验测量和先进的数据科学技术，提出了一种新的方法，用于AM中产生、可视化和设计高维PSP关系。本文介绍了该方法在显微结构和显微硬度定量和设计中的应用。通过物理模型和实验，得到了激光功率、质量流率、能量密度、冷却速率、稀释度、枝晶臂距、显微硬度等高维数据集。利用SOM对PSP数据之间的深层关系进行了可视化，并确定了重要的关系趋势。为了获得理想的工艺参数，多个目标优化实例已被提出并解决。该方法可应用于AM和其他数据密集型工艺过程中多种类型的PSP数据集。过程、组织和性能之间的数据驱动关系可以提供在线监测和过程控制，从而获得理想的显微结构和力学性能。

致谢

曹简、Gregory J. Wagner和Wing K. Liu感谢美国国家科学基金会（NSF）网络物理系统（CPS）（CPS/CMMI-1646592）的支持。李恒阳感谢西北数据科学计划（DSI; 171474500210043324）的支持。曹简、Gregory J. Wagner、Wing K. Liu、Jennifer L. Bennett和Sarah J. Wolff感谢来自数字制造和设计创新研究所（DMDII;

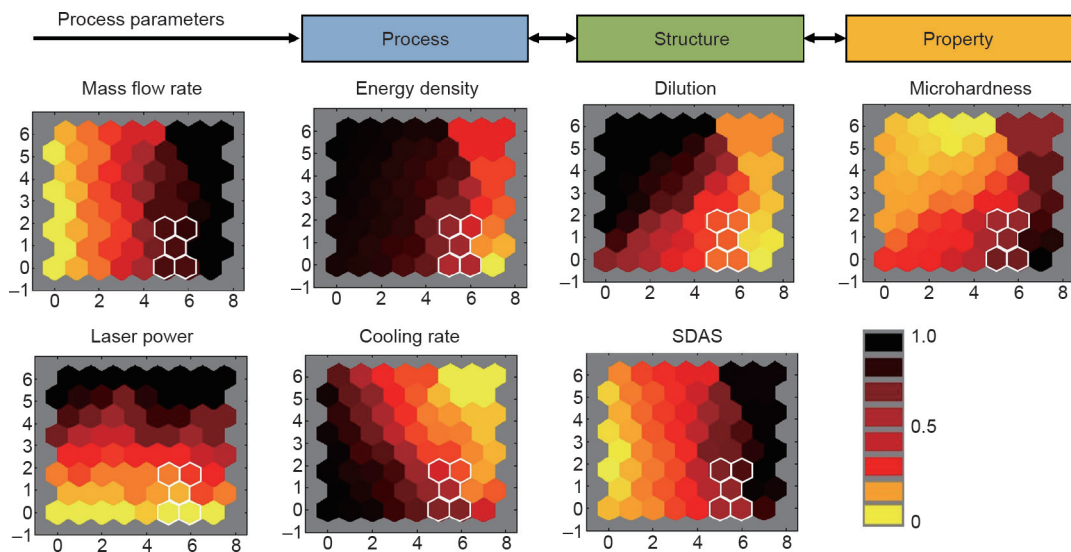


图6. 白色线框勾勒出优化设计窗口的所有设计变量的等值线图。

15-07) 的支持。曹简、Wing K. Liu、甘政涛和Jennifer L. Bennett感谢结构材料设计中心 (CHiMaD; 70 NANB14H012) 的支持。本研究利用了DMG MORI和西北大学的设备。它还利用了MatCI设施, 该设施得到了西北大学材料研究中心MRSEC项目 (NSF DMR-168 1720139) 的支持。

Compliance with ethics guidelines

Zhengtao Gan, Hengyang Li, Sarah J. Wolff, Jennifer L. Bennett, Gregory Hyatt, Gregory J. Wagner, Jian Cao, and Wing Kam Liu declare that they have no conflict of interest or financial conflicts to disclose.

References

- [1] Breneman CM, Brinson LC, Schadler LS, Natarajan B, Krein M, Wu K, et al. Stalking the materials genome: a data-driven approach to the virtual design of nanostructured polymers. *Adv Funct Mater* 2013;23(46):5746–52.
- [2] McDowell DL, Kalidindi SR. The materials innovation ecosystem: a key enabler for the materials genome initiative. *MRS Bull* 2016;41(4):326–37.
- [3] Jain A, Ong SP, Hautier G, Chen W, Richards WD, Dacek S, et al. Commentary: the materials project: a materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Mater* 2013;1(1):011002.
- [4] Thompson SM, Bian L, Shamsaei N, Yadollahi A. An overview of direct laser deposition for additive manufacturing: part I: transport phenomena, modeling and diagnostics. *Addit Manuf* 2015;8:36–62.
- [5] David SA, DebRoy T. Current issues and problems in welding science. *Science* 1992;257(5069):497–502.
- [6] Smith J, Xiong W, Yan W, Lin S, Cheng P, Kafka OL, et al. Linking process, structure, property, and performance for metal-based additive manufacturing: computational approaches with experimental support. *Comput Mech* 2016;57(4):583–610.
- [7] He X, Mazumder J. Transport phenomena during direct metal deposition. *J Appl Phys* 2007;101(5):053113.
- [8] Gan Z, Yu G, He X, Li S. Numerical simulation of thermal behavior and multicomponent mass transfer in direct laser deposition of co-base alloy on steel. *Int J Heat Mass Transfer* 2017;104:28–38.
- [9] Gan Z, Yu G, Li S, He X, Chen R, Zheng C, et al. A novel intelligent adaptive control of laser-based ground thermal test. *Chin J Aeronaut* 2016;29(4): 1018–26.
- [10] Gan Z, Lian Y, Lin SE, Jones KK, Liu WK, Wagner GJ. Benchmark study of thermal behavior, surface topography, and dendritic microstructure in selective laser melting of inconel 625. *Integr Mater Manuf Innovation* 2019;8(2):178–93.
- [11] Wolff SJ, Lin S, Faierson EJ, Liu WK, Wagner GJ, Cao J. A framework to link localized cooling and properties of directed energy deposition (DED)-processed Ti–6Al–4V. *Acta Mater* 2017;132:106–17.
- [12] Wolff S, Lee T, Faierson E, Ehmann K, Cao J. Anisotropic properties of directed energy deposition (DED)-processed Ti–6Al–4V. *J Manuf Process* 2016;24: 397–405.
- [13] Popova E, Rodgers TM, Gong X, Cecen A, Madison JD, Kalidindi SR. Process-structure linkages using a data science approach: application to simulated additive manufacturing data. *Integr Mater Manuf Innov* 2017; 6(1):54–68.
- [14] Li J, Jin R, Yu HZ. Integration of physically-based and data-driven approaches for thermal field prediction in additive manufacturing. *Mater Des* 2018; 139:473–85.
- [15] Hu Z, Wang H, Thouless MD, Lu W. An approach of adaptive effective cycles to couple fretting wear and creep in finite-element modeling. *Int J Solids Struct* 2018;139–140:302–11.
- [16] Salloum M, Johnson KL, Bishop JE, Aytac JM, Dagal D, Van Bloemen Waanders BG. Adaptive wavelet compression of large additive manufacturing experimental and simulation datasets. *Comput Mech* 2019;63(3):491–510.
- [17] Kohonen T. The self-organizing map. *Proc IEEE* 1990;78(9):1464–80.
- [18] Kohonen T. The self-organizing map. *Neurocomputing* 1998;21(1–3):1–6.
- [19] Rauber A, Merkl D, Dittenbach M. The growing hierarchical self-organizing map: exploratory analysis of high-dimensional data. *IEEE Trans Neural Netw* 2002;13(6):1331–41.
- [20] Koishi M, Kowatari N, Figliuzzi B, Faessel M, Willot F, Jeulin D. Computational material design of filled rubbers using multi-objective design exploration. In: *Proceedings of the 10th European Conference on Constitutive Models for Rubbers (ECCMR)*; 2017 Aug 28–31; Munich, German; 2017.
- [21] Vesanto J, Alhoniemi E. Clustering of the self-organizing map. *IEEE Trans Neural Netw* 2000;11(3):586–600.
- [22] Wolff SJ, Gan Z, Lin S, Bennett JL, Yan W, Hyatt G, et al. Experimentally validated predictions of thermal history and mechanical properties in laser-deposited Inconel 718 on carbon steel. *Addit Manuf* 2019;27: 540–51.
- [23] Gan Z, Liu H, Li S, He X, Yu G. Modeling of thermal behavior and mass transport in multi-layer laser additive manufacturing of Ni-based alloy on cast iron. *Int J Heat Mass Transfer* 2017;111:709–22.
- [24] Gan Z, Yu G, He X, Li S. Surface-active element transport and its effect on liquid metal flow in laser-assisted additive manufacturing. *Int Commun Heat Mass Transf* 2017;86:206–14.
- [25] Chew YX, Song J, Bi G, Chen HC, Yao X, Zhang B, et al. Thermal and fluid field modelling for laser aided additive manufacturing. In: *Proceedings of Lasers in Manufacturing Conference 2017*; Munich, German; 2017.
- [26] Hunt JD, editor. *Solidification and casting of metals*. London: Metal Society; 1979.
- [27] DebRoy T, Wei HL, Zuback JS, Mukherjee T, Elmer JW, Milewski JO, et al. Additive manufacturing of metallic components—process, structure and properties. *Prog Mater Sci* 2018;92:112–224.
- [28] Vesanto J, Himberg J, Alhoniemi E, Parhankangas J. Self-organizing map in Matlab: the SOM toolbox. In: *Proceedings of the Matlab DSP Conference*; 1999 Nov 16–17. Espoo, Finland; 1999. p. 35–40.
- [29] Mukherjee T, Zuback JS, De A, DebRoy T. Printability of alloys for additive manufacturing. *Sci Rep* 2016;6(1):19177.