

CDS	Category	Material	Standard	Structure
7B	Carbon Steels	0.2C	STB 410	Ferrite/Pearlite
17B	Carbon Steels	0.3C	SB 480	Ferrite/Pearlite
40A	Carbon Steels	0.2C-1.3Mn	STB 510	Ferrite/Pearlite
25B	Carbon Steels	High Strength Steel (Class 590 MPa)	SPV 490; SM 570	Ferrite/Pearlite/Bainite
8B	Low Alloy Steels	0.5Mo	STBA 12	Ferrite/Pearlite
18B	Low Alloy Steels	1.3Mn-0.5Mo-0.5Ni	SBV 2	Ferrite/Pearlite/Bainite
20B	Low Alloy Steels	0.5Cr-0.5Mo	STBA 20	Ferrite/Pearlite
1B	Low Alloy Steels	1Cr-0.5Mo	STBA 22	Ferrite/Pearlite
35B	Low Alloy Steels	1Cr-0.5Mo	SCMV 2 NT	Ferrite/Pearlite
9B	Low Alloy Steels	1Cr-1Mo-0.25V	A470-8	Ferrite/Pearlite/Bainite
31B	Low Alloy Steels	1Cr-1Mo-0.25V	A356/A356M-9	Ferrite/Pearlite/Bainite
2B	Low Alloy Steels	1.25Cr-0.5Mo-Si	STBA 23	Ferrite/Pearlite/Bainite
21B	Low Alloy Steels	1.25Cr-0.5Mo-Si	SCMV 3 NT	Ferrite/Pearlite/Bainite
3B	Low Alloy Steels	2.25Cr-1Mo	STBA 24	Ferrite/Pearlite
11B	Low Alloy Steels	2.25Cr-1Mo	SCMV 4 NT	Ferrite/Pearlite/Bainite
36B	Low Alloy Steels	2.25Cr-1Mo	A542/A542M	Martensite/Bainite
53	Low Alloy Steels	2.25Cr-1Mo-0.3V	SFVCM F22V	
54A	Low Alloy Steels	2.25Cr-1.6W	KA-STBA 24J1; KA-STPA 24J1	Ferrite/Pearlite/Bainite
12B	Low Alloy Steels	5Cr-0.5Mo	STBA 25	Ferrite/Pearlite/Bainite
19B	High Cr Steels	9Cr-1Mo	STBA 26	Martensite/Bainite
43A	High Cr Steels	9Cr-1Mo-V-Nb	SA-213/SA-213M Grade T91; SA-387/SA-387M Grade 91; SA-335/SA-335M Grade P91	Martensite/Bainite
46A	High Cr Steels	9Cr-2Mo	KA-STBA 27	Martensite/Bainite
48B	High Cr Steels	9Cr-0.5Mo-1.8W-V-Nb	SA-213/SA-213M Grade T92; SA-335/SA-335M Grade P92	Martensite/Bainite
51A	High Cr Steels	11Cr-2W-0.4Mo-1Cu-Nb-V	KA-SUS 410J3 TP; KA-SUS410J3; KA-SUS410J3TB	Martensite/Bainite
13B	High Cr Steels	12Cr	SUS 403-B	Martensite/Bainite
10B	High Cr Steels	12Cr-1Mo-1W-0.3V	SUH 616-B	Martensite/Bainite
52A	High Cr Steels	12Cr-2W-0.4Mo-1Cu-Nb-V	KA-SUS 410J3 DTB	Martensite/Bainite

## 炭素鋼

### 使用データ数

- データシート数 : 26
- ヒート数 : 212
- データ数 : 5583

## 低合金鋼

### 説明変数

- 組成[mass%] :
  - C, Si, P, S, N, B, Mn, Ni, Cr, Mo, Cu, Al, Ti, Nb+Ta, V, W, Co, Fe, Nb, (Sn)
- 試験温度[K]
- 試験応力[MPa]

## 高クロム鋼

### 目的変数

- $\log_{10}$ (破断時間)

CDS53は除外（後に影響を検討）

図 1. 対象としたNIMSクリープデータシートの種類、データ数、説明・目的変数（文献<sup>2)</sup>から引用・編集）

## SVR

- 評価 : 10-fold CV (RMSE\*)
- 探索 : グリッドサーチ
- ハイパーパラメータ :
  - 正則化項
  - カーネル幅

## RF

- 評価 : 10-fold CV (RMSE)
- 探索 : グリッドサーチ
- ハイパーパラメータ :
  - 使用変数の最大数
  - 最小ノード数

## XGBoost

- 評価 : 10-fold CV (RMSE)
- 探索 : TPE\*\*
- 探索回数 : 1000
- ハイパーパラメータ :
  - 学習率
  - 回帰木深さ最大値
  - 葉の重み下限
  - サンプルング率
  - 使用変数割合
  - 葉の追加損失減少下限

\* RMSE: Root Mean Square Error 二乗平均平方根誤差

\*\* TPE: Tree-structured Parzen Estimator

図 2. 機械学習手法とハイパーパラメータ調整

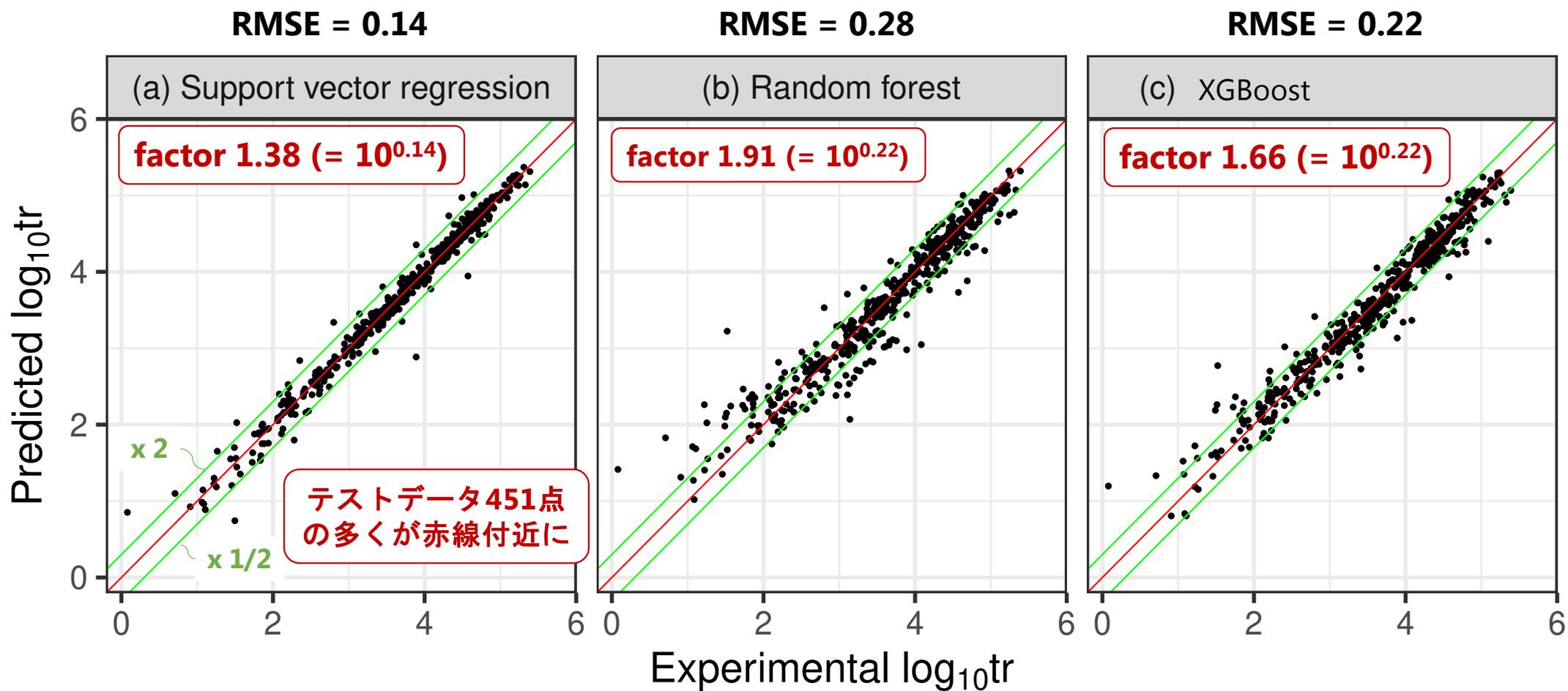


図 3. 耐熱フェライト鋼クリープ寿命の機械学習モデルの予測精度 (文献<sup>2)</sup> から引用・編集)

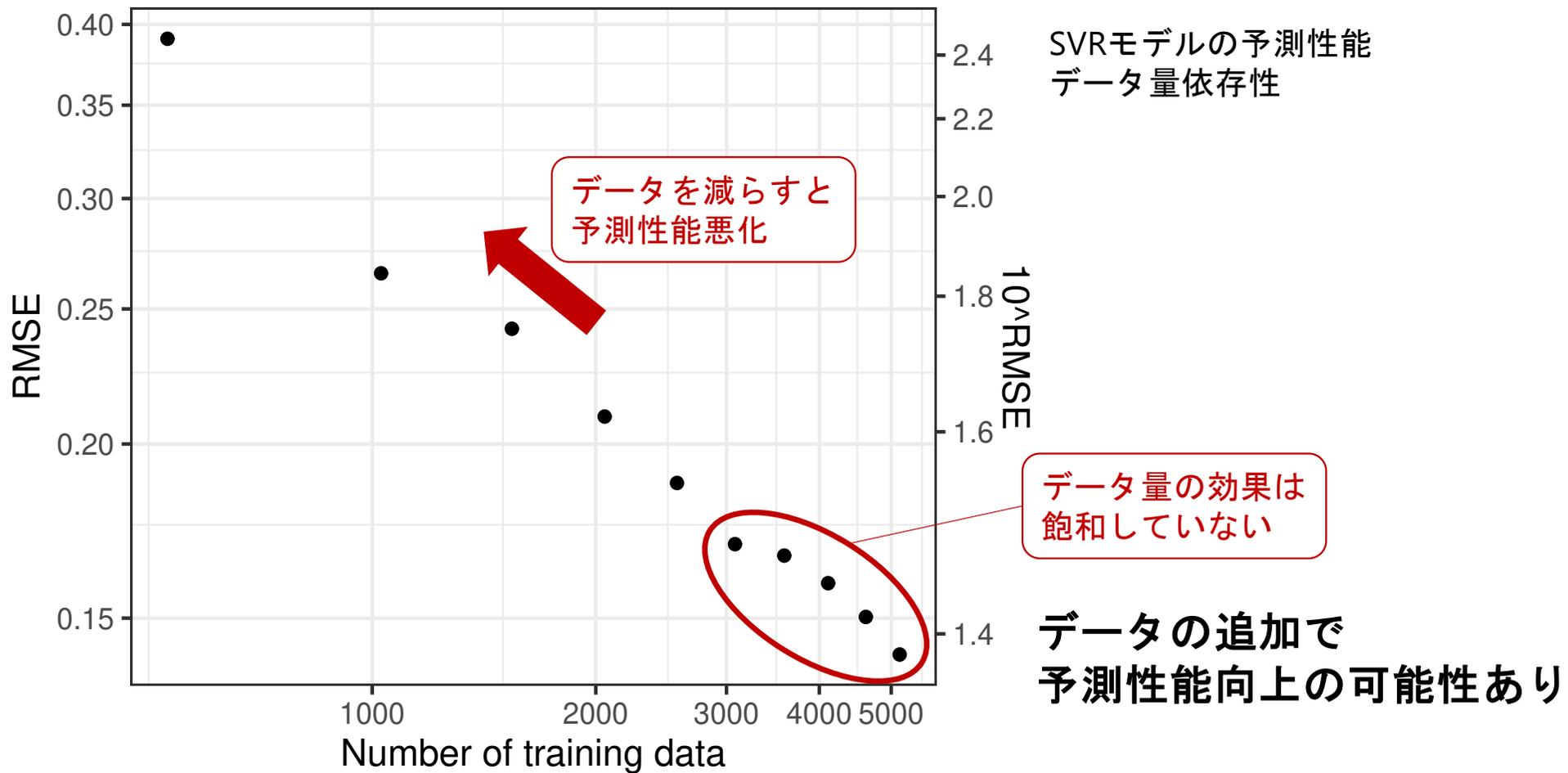


図 4. データ量の効果 (文献<sup>2)</sup> から引用・編集)

NIMS CDS#53: 2.25Cr-1Mo steel for high temperature pressure vessel

同一組成で熱処理の異なる2つのヒート

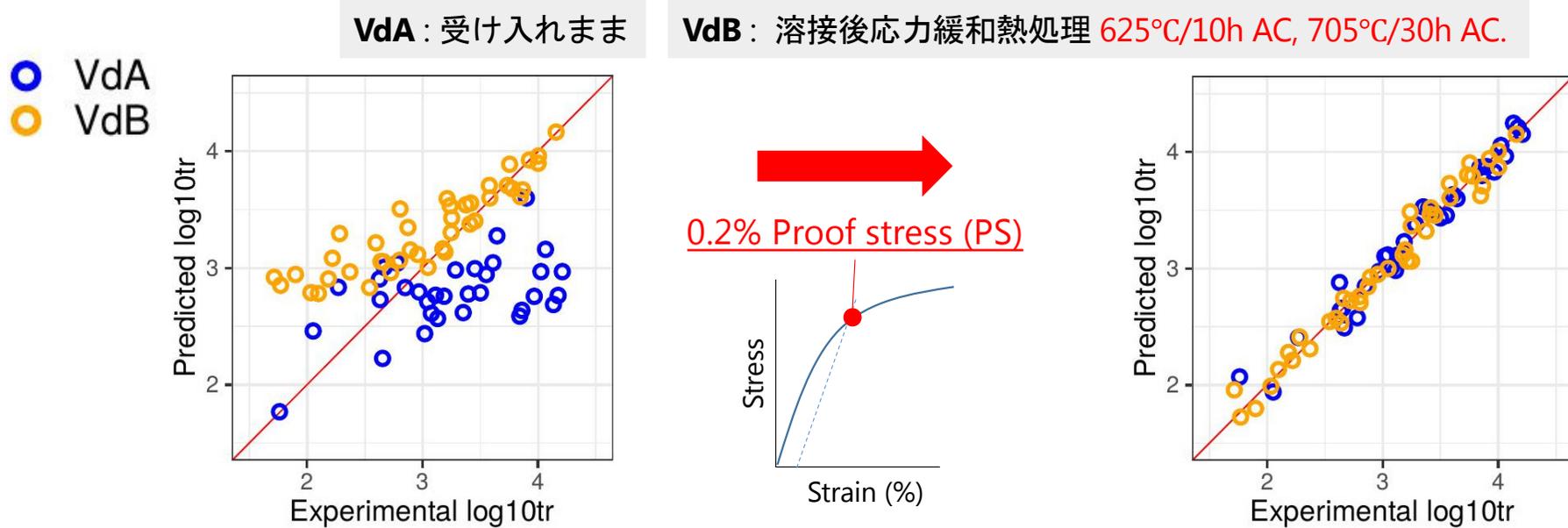


図 5. プロセス情報を反映させた予測モデルの構築 (文献<sup>2</sup>) から引用・編集)

表 1. 解析に用いた低炭素鋼の合金元素含有量 (wt%) : NIMSクリープデータシートCDS 7B<sup>9)</sup> 低炭素鋼JIS-STB410 (文献<sup>3)</sup> から引用・編集)

Heat	C	Si	Mn	P	S	Cr	Mo	Cu	Al	N
CAA	0.20	0.31	0.59	0.018	0.009	0.046	0.011	0.05	0.006	0.0056
CAB	0.20	0.28	0.60	0.018	0.008	0.045	0.010	0.05	0.005	0.0066
CAC	0.20	0.29	0.55	0.021	0.009	0.054	0.012	0.05	0.004	0.0058
CAG	0.21	0.21	0.62	0.014	0.014	0.046	0.019	0.05	0.008	0.0030
CAH	0.24	0.24	0.64	0.015	0.013	0.074	0.019	0.05	0.011	0.0060
CAJ	0.20	0.20	0.47	0.007	0.009	0.056	0.010	0.07	0.005	0.0110
CAL	0.21	0.32	0.48	0.020	0.018	0.017	0.006	0.08	0.004	0.0044
CAM	0.20	0.31	0.50	0.022	0.017	0.017	0.006	0.09	0.004	0.0037
CAN	0.23	0.32	0.53	0.023	0.016	0.022	0.005	0.07	0.005	0.0051

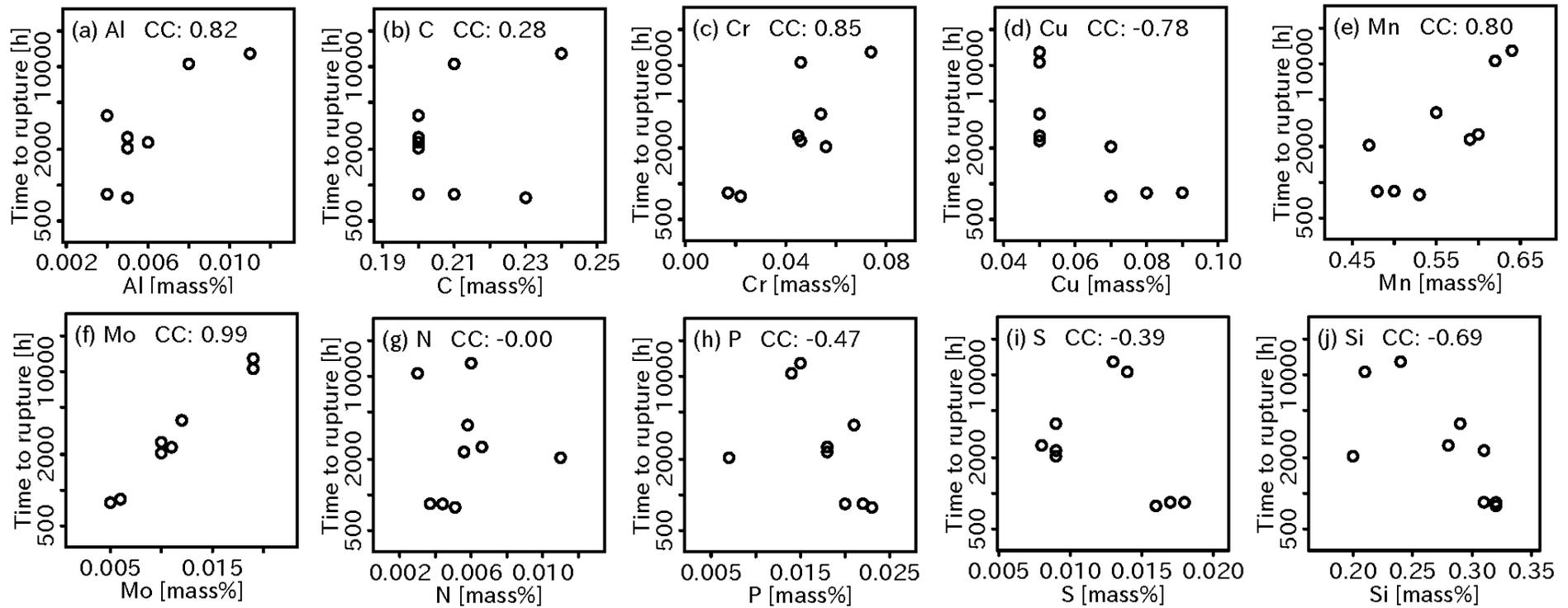


図 6. 773k-100MPaにおけるクリープ寿命と固溶元素含有量との相関（文献<sup>3</sup>から引用・編集）

Larson-Miller Parameter (LMP) \* = T (log[クリープ寿命] + C)

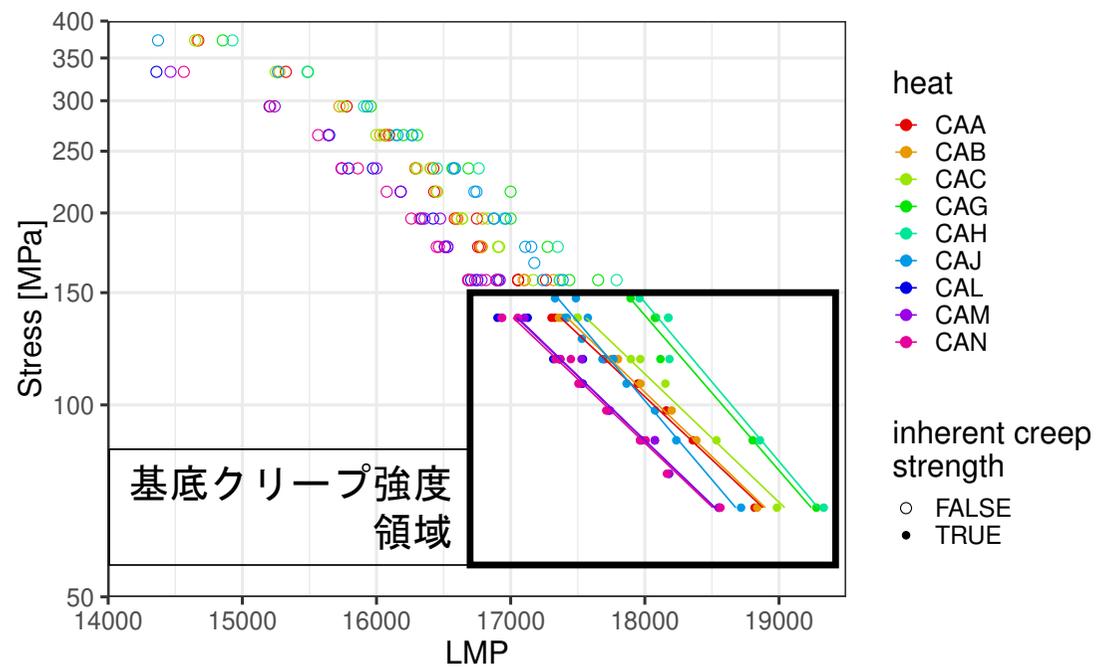


図 7. 負荷応力とLarson Miller パラメータ (LMP) との関係 (文献<sup>3</sup> から引用・編集)

## ベイズの定理

$$\text{事後確率 } p(M|D) = \frac{\text{尤度 } p(D|M) \text{ 事前確率 } p(M)}{p(D)}$$

## モデル選択 $M_1, M_2, M_3, \dots, M_n$

仮定：事前知識なし  $P(M_i) = P(M_j)$

$$p(M_i|D) = \frac{p(D|M_i)p(M_i)}{p(D)} = \frac{p(D|M_i)p(M_i)}{\sum_k p(D|M_k)p(M_k)} = \frac{p(D|M_i)}{\sum_k p(D|M_k)}$$

**ベイズ自由エネルギー**：  $F_{M_i} = -\ln(p(D|M_i))$

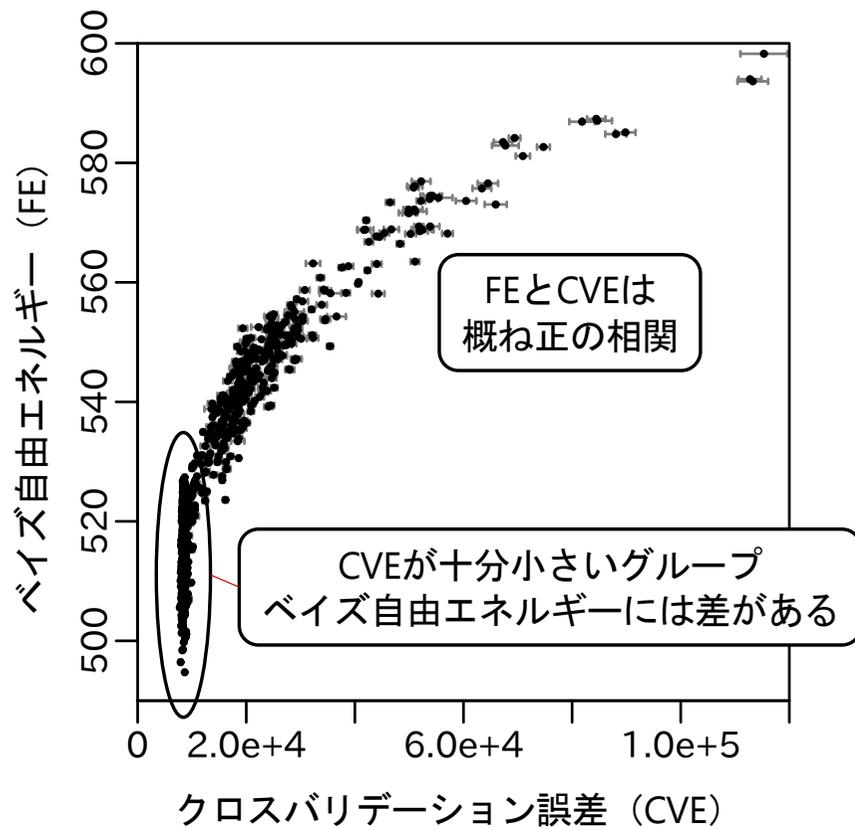
## 線形モデル $M: y = w_1x_1 + w_2x_2 + \dots + w_c x_c = \mathbf{w}\mathbf{x}$

$$F_M = \frac{1}{2} \{ (\mathbf{y} - \mathbf{w}\mathbf{x})^T I_N (\mathbf{y} - \mathbf{w}\mathbf{x}) + \mathbf{w}^T I_C \mathbf{w} + N \ln 2\pi + a \}$$

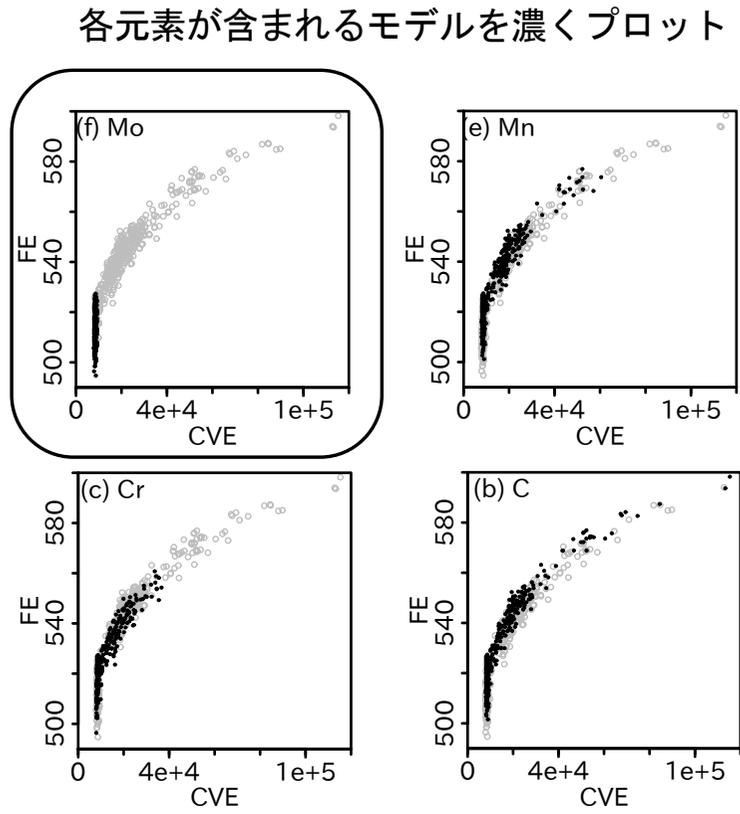
$a$  共分散行列対数の和

図 8. ベイズ統計に基づくモデル選択





Mo含むモデルは低CVE



- ベイズ自由エネルギーの方がモデル選択の解像度が高い
- Mo量をモデルに含むことが未知データの予測に重要

図 10. ベイズ自由エネルギーとクロスバリデーション誤差の相関 (文献<sup>3</sup>から引用・編集)

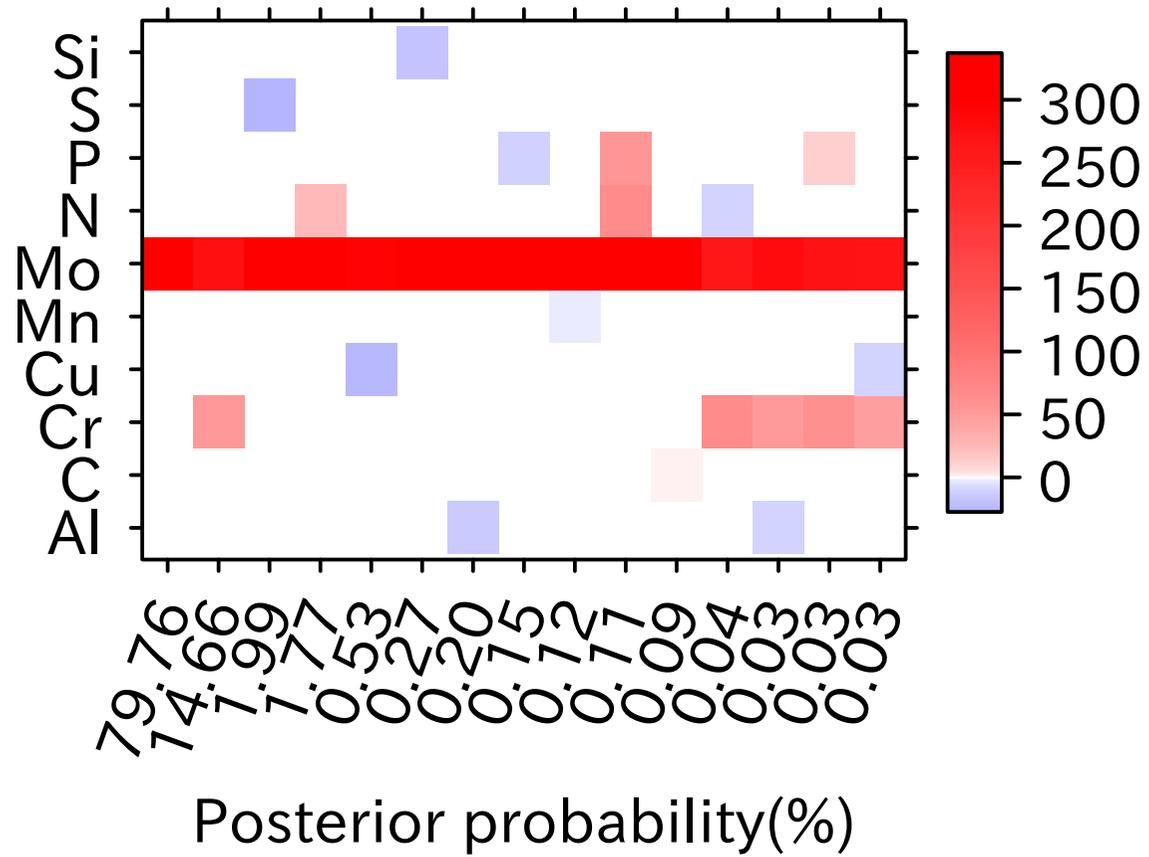


図 11. 事後確率が高い15のモデルに使用されている固溶元素と変数 (文献<sup>3)</sup> から引用)

● LMP = a log[応力] + b<sub>Mo</sub> [Mo wt%]で推定

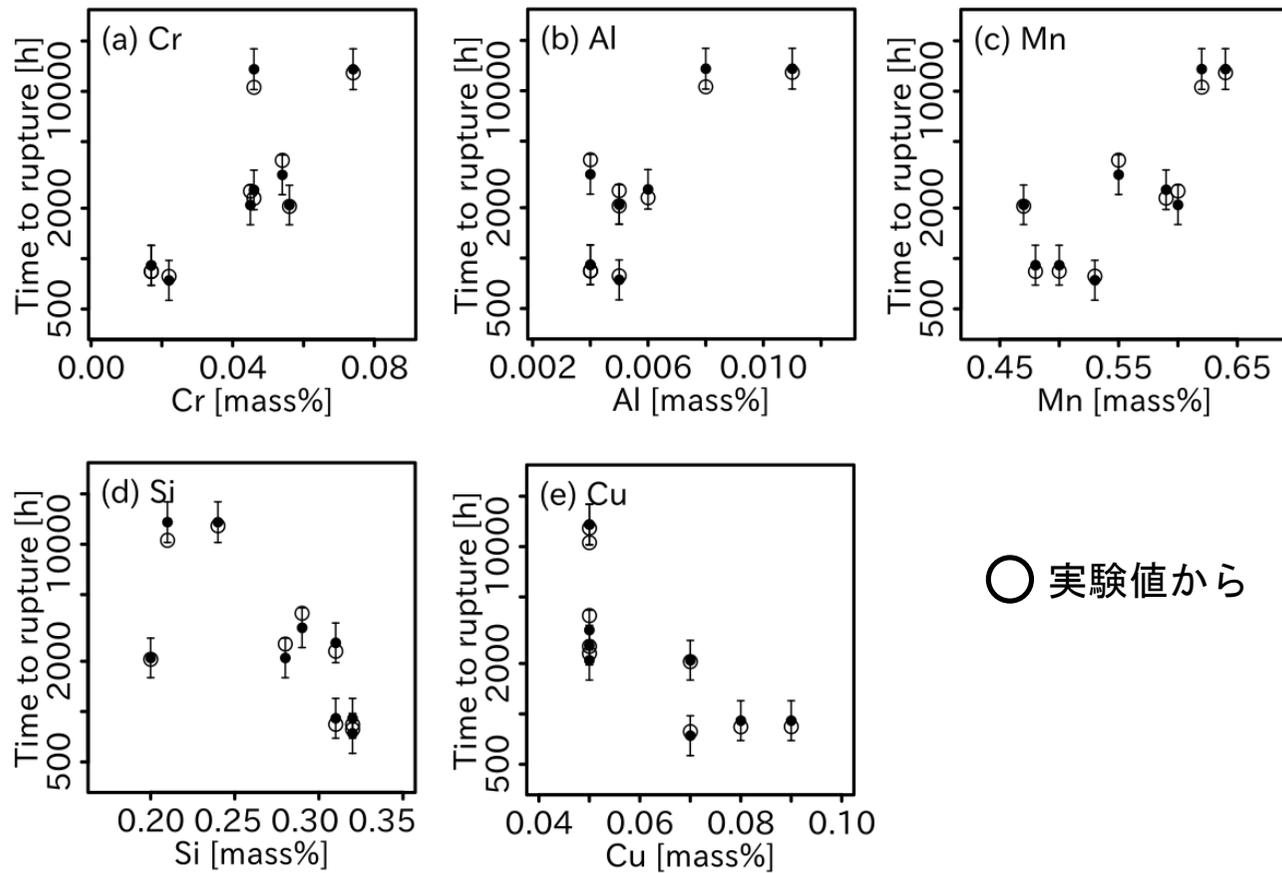


図 12. 773K-100MPaにおけるクリープ寿命の実験値からの内挿とMo単独モデル推定値の比較 (文献<sup>3</sup>)から引用・編集)

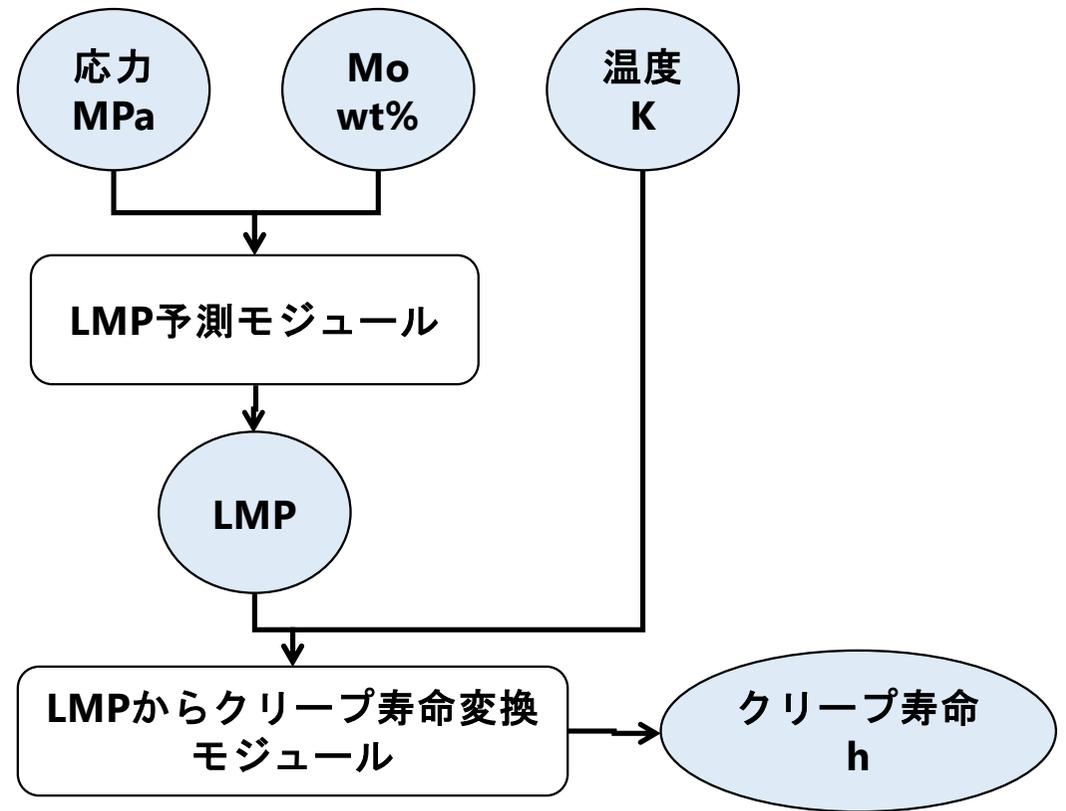
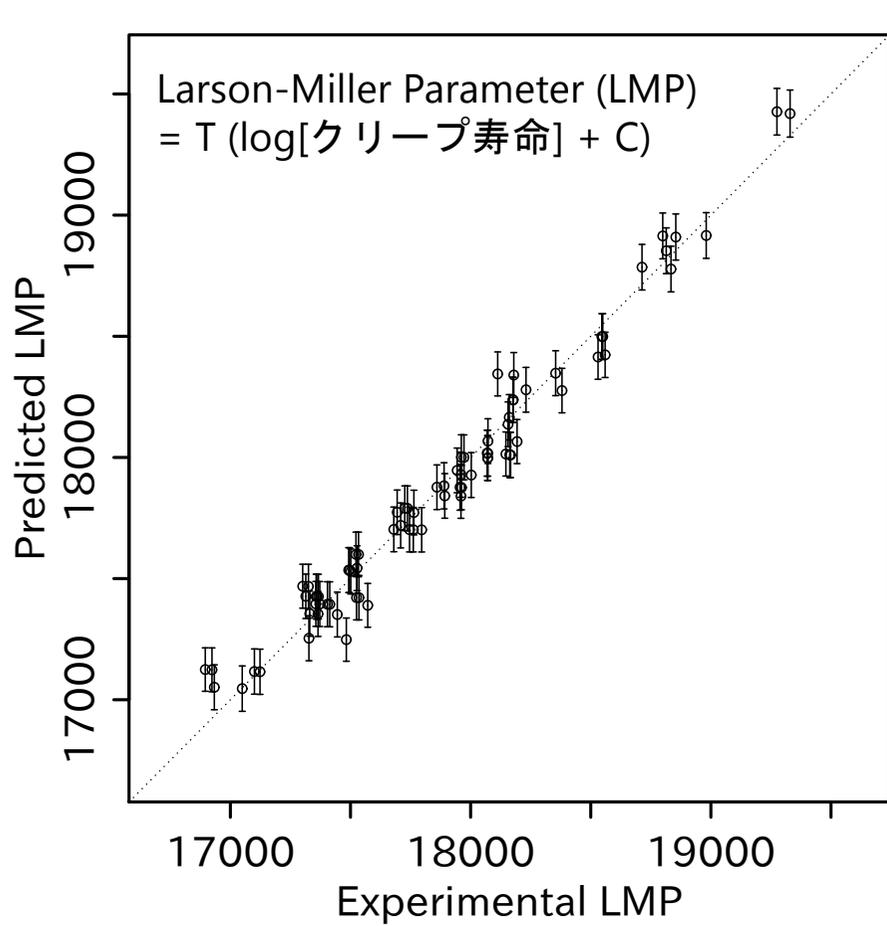


図 13. Mo単独モデルの予測性能と予測のためのワークフロー（文献<sup>3</sup>から引用・編集）