

# ベイズ推定とニューラルネットワークの組み合わせによるニッケル基超合金のクリープ破断寿命の予測

藤井英俊\* D. J. C. MacKay\*\* H. K. D. H. Bhadeshia\*\*  
原田広史\*\*\* 野城清\*

\*大阪大学接合科学研究所

\*\*ケンブリッジ大学ダーウィンカレッジ

\*\*\*金属材料技術研究所

J. Japan Inst. Metals, Vol. 63, No. 7 (1999), pp. 905-911

## Prediction of Creep Rupture Life in Nickel-Base Superalloys Using Bayesian Neural Network

Hidetoshi Fujii\*, David J. C. MacKay\*\*, Harshad K. D. H. Bhadeshia\*\*, Hiroshi Harada\*\*\* and Kiyoshi Nogi\*

\*Joining and Welding Research Institute, Osaka University, Ibaraki 567-0047

\*\*Darwin College, University of Cambridge, Silver Street, Cambridge, CB3 9EU, UK

\*\*\*National Research Institute for Metals, Tsukuba, 305-0047

The creep rupture life of nickel-base superalloys has been predicted using a neural network model within a Bayesian framework. The rupture life was modelled as a function of some 42 variables, including temperature, chemical composition: Cr, Co, C, Si, Mn, P, S, Mo, Cu, Ti, Al, B, N, Nb, Ta, Zr, Fe, W, V, Hf, Re, Mg, ThO<sub>2</sub>, La, four steps of heat treatment (each has its own temperature, duration and cooling rate), sample shape, solidification method, yield strength, ultimate tensile strength and elongation. The Bayesian method puts error bars on the predicted value of the rupture life and allows the significance of each individual factor to be estimated. The scale of the error bars changes with the accuracy of the prediction: it is large when the prediction is uncertain, indicating that the whole prediction system is reliable.

(Received November 2, 1998; In Final Form April 19, 1999)

**Keywords:** neural network, bayesian inference, error bar, creep rupture life, nickel base superalloy, database, optimisation

## I. 緒 言

材料の特性を高い信頼性をもって評価するためには、実験データを十分に蓄積し、それを適切に活用する必要がある。しかし、材料の特性は試験条件として設定できる変数はもちろん、その他にもたくさんの潜在的な変数に依存しており、データ処理やモデリングを適切にすることは非常に難しいといえる。

ニューラルネットワークは様々な非線形関係を組み合わせて非常に複雑な関数を構築することができるという特長を持っており、複雑な現象の処理に対して理想的な手法である<sup>(1)</sup>。したがって、家電製品や溶接プロセスなどの制御の一手法として、ニューラルネットワークに関してすでに多くの

試みがされている<sup>(1)(2)</sup>。本研究ではニューラルネットワークの関数の柔軟性に注目し、この手法が多くの要素が複雑に絡み合う材料特性のデータの処理に適用できないかと考えた。

しかしながら、これまでのニューラルネットワークを材料の特性の予測に適用しようとすると、データのバラつきおよびフィッティングによる誤差をどう処理するかが大きな問題となる<sup>(3)</sup>。この問題に対処できなかったため、これまでニューラルネットワークはこのような分野に適用されることがなかった。本研究ではこの問題を解決するため、従来のニューラルネットワークにベイズ推定<sup>(4)</sup>の考え方を加えた新しいタイプのニューラルネットワーク<sup>(3)(5)(6)</sup>を用いることで、ニッケル基超合金のクリープ破断寿命の予測に適用することを試みた。

この手法における最大の特長は統計的なエラーバーを予測

することができる事である<sup>(3)(5)</sup>。エラーバーの大きさはその時の入力条件に依存し、データのバラつきが大きく信頼性の低い場合には、エラーバーは大きくなる。このようなエラーバーの推定は、ニューラルネットワークを材料のデータベースの再構築といった全く新しい分野に適用することを可能にする。

## II. 解析

**Fig. 1** に本研究で用いたニューラルネットワークの構造を示す。試料の化学組成、熱処理条件、試験温度等の実験条件を左から入力する。出力すなわちクリープ破断強度(実際にはクリープ破断強度の対数)を予測するために、入力と出力の間に隠れユニットを使用し、複雑な関数を表現出来るようにしている。それぞれの入力  $x_i$  と  $i$  番目の隠れユニット  $h_i$  との間の関係式は次のように表せる。

$$h_i = \tanh \left( \sum_j w_{ij}^{(1)} x_j + \theta_i^{(1)} \right) \quad (1)$$

一方、隠れユニット  $h_i$  と出力  $y$  の間の関係は次のように線形とした。

$$y = \sum_i w_i^{(2)} h_i + \theta^{(2)} \quad (2)$$

これらの関数における重み係数  $w$  としきい値  $\theta$  は、後述するように、誤差関数に適切化項を加えたエネルギー関数が最小になるように決定する。式(1)に示したように、入力と隠れユニットとの間の関係を非線形関数とすることにより、全体として、非線形関数を含めた複雑な関数を表現できるネットワークを構成することができる。

データの数が多ければ多いほど良いネットワークを構築することができる。本研究で用いたデータベースはクリープ強度と42種類の入力条件、1430個の組み合わせからなる。入力には時間、温度、試料の化学組成、熱処理条件、鍛造工程の有無、試料形状、凝固法を採用した。熱処理条件は最大4工程まで入力し、それぞれの工程は温度、保持時間、冷却速度で数値化されている。冷却速度は水冷：油冷：空冷：炉冷 = 60 : 30 : 10 : 1<sup>(7)</sup> とした。また試料形状については、丸棒

状の材料を1、板状の材料を0とし、凝固法に関しては通常凝固法を0、一方向性凝固法を1として入力した。後述するように本ニューラルネットワークでは各々の入力の出力に対する重要度を見積もることができるが<sup>(3)</sup>、その重要度を見積もるために常温での降伏強度、最大引張強度、伸びなども入力パラメータとして加えたネットワークも構築した。入力データには Inco データベース<sup>(8)</sup>および金属材料技術研究所のデータベース<sup>(9)</sup>を用いた。出力のクリープ破断強度の対数と密接な関係を持つ時間の対数も入力ファクターの一つとして取り入れている。このような入力ファクターは入力と出力の関係の最適化に効果を持つ<sup>(3)</sup>。**Table 1** に使用したデータの詳細を示す。

Table 1 Input variables for the prediction of creep rupture life.

Variable	Range	Mean	Standard Deviation
Stress, $\sigma$ /MPa	2~1085	—	—
log ( $\sigma$ /MPa)	0.30~3.04	—	—
Time, $t$ /h	1.4~89830	3438.1	8530.3
log ( $t$ /h)	0.15~4.95	2.75	0.83
Temperature, °C	600~1205	841	126
Yield strength, MPa	12~1090	454	244
Ultimate tensile strength, MPa	20~1345	628	298
Elongation, %	1.0~185.0	24.2	26.2
Forging	0 or 1	0.561	0.497
1st step heat treatment temperature, °C	0~1260	833.7	462.3
Duration, h	0~50	2.99	6.54
Cooling rate, °C/s	0~30	6.31	7.89
2nd step heat treatment temperature, °C	0~1100	510.7	455.6
Duration, h	0~82	8.39	11.34
Cooling rate, °C/s	0~30	3.21	4.08
3rd step heat treatment temperature, °C	0~850	269.7	361.6
Duration, h	0~24	6.15	8.48
Cooling rate, °C/s	0~10	1.82	2.50
4th step heat treatment temperature, °C	0~760	25.4	135.0
Duration, h	0~16	0.51	2.75
Cooling rate, °C/s	0~5	0.17	0.91
Sample shape	0 or 1	0.915	0.279
Solidification method	0 or 1	0.028	0.167
Content(mass%) C	0~0.35	0.094	0.056
Si	0~0.50	0.104	0.139
Mn	0~0.50	0.089	0.143
P	0~0.01	0.0014	0.0022
S	0~0.11	0.0042	0.0144
Cr	0~30.0	15.25	5.27
Mo	0~18.0	3.42	2.78
Cu	0~0.16	0.010	0.024
Co	0~28.9	8.12	8.92
Ti	0~5.00	1.81	1.35
Al	0~8.00	2.91	2.23
B	0~0.16	0.0095	0.0194
N	0~0.02	0.0020	0.0035
Nb	0~9.00	0.88	1.72
Zr	0~1.50	0.077	0.213
Fe	0~40.0	3.02	6.54
W	0~20.0	1.08	2.96
V	0~1.00	0.015	0.120
Hf	0~1.50	0.012	0.118
Re	0~0.50	0.0045	0.0475
Mg	0~2.00	0.0003	0.0022
ThO <sub>2</sub>	0~0.02	0.078	0.388
La	0~1.00	0.0001	0.0017

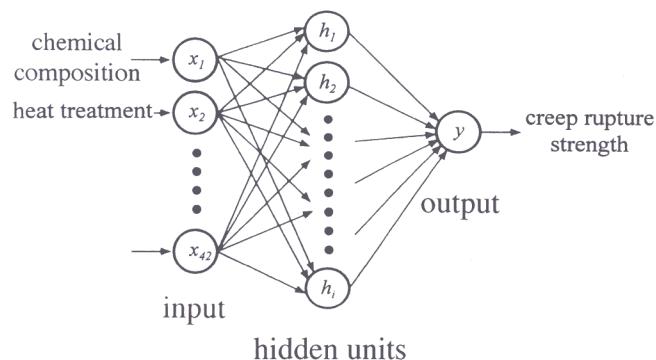


Fig. 1 Neural network model used in this study.

入力変数と出力変数の両方とも次の方法で $\pm 0.5$ の範囲に規格化している。

$$x_N = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} - 0.5 \quad (3)$$

ここで、 $x_N$  は規格化された  $x$ ,  $x_{\max}$  は元のデータの最大値,  $x_{\min}$  は最小値である。規格化はニューラルネットワークの最適化の過程で必ずしも必要でないが、それぞれの入力ファクターの出力に対する効果を比較する際に役立つ。

この規格化された値を用いて、次のエネルギー関数を最小にするように重み係数  $w$  としきい値  $\theta$  を決定した<sup>(3)(5)</sup>。

$$M(\mathbf{w}) = \beta E_D + \sum_c \alpha_c E_{w(c)} \quad (4)$$

ここでパラメータベクトル  $\mathbf{w}$  は、重み係数  $w$  としきい値  $\theta$  からなる。また、後述のように  $\alpha_c$  と  $\beta$  はモデルの複雑さを制御するパラメータである。このエネルギー関数の最小化には可変計量法<sup>(10)</sup>を用い、 $M(\mathbf{w})$  の勾配は逆誤差伝播法<sup>(11)</sup>

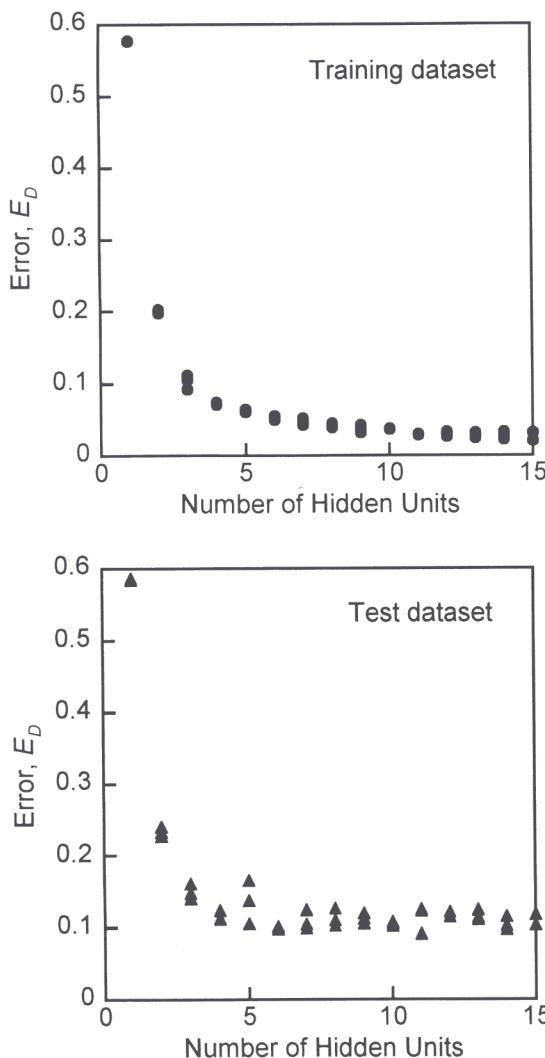


Fig. 2 Variation in error as a function of number of hidden units in training dataset and test dataset.

を用いて計算した。エネルギー関数は誤差関数  $E_D$  と適切化項(regularizer) $E_{w(c)}$  からなる。誤差関数は次のように予測値と実験値の差の 2 乗の合計である。

$$E_D(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_m (y(\mathbf{x}^m; \mathbf{w}) - t^m)^2 \quad (5)$$

ここで $\{\mathbf{x}^m, t^m\}$  はデータセットであり、 $\mathbf{x}^m$  は入力変数を  $t^m$  は実験データすなわちターゲットを示す。 $m$  はデータとターゲットの組み合わせのラベルである。モデルがデータに良く一致するとき、すなわち  $y(\mathbf{x}^m; \mathbf{w})$  が  $t^m$  に近いとき、誤差関数  $E_D$  は最小となる。

本研究では複数の適切化項  $E_{w(c)}$  を誤差関数に足しあわせエネルギー関数としている<sup>(12)</sup>。まず、入力と隠れユニット間の関数の重み係数で一つのクラス、隠れユニットから出力までの間の重み係数で一つのクラス、そして隠れユニットのしきい値で一つのクラスをつくり  $E_{w(c)}$  を計算している。 $E_{w(c)}$  はそれぞれのクラス  $c$  における係数の二乗の合計であ

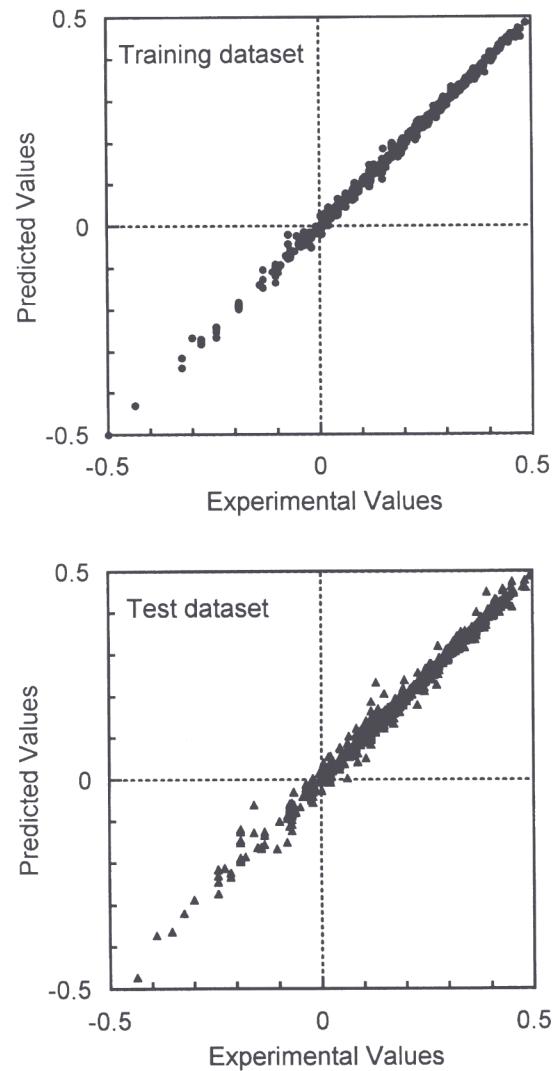


Fig. 3 Comparison between the predicted and experimental creep rupture strengths.

る<sup>(6)</sup>.

$$E_{w(c)}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i \in c} w_i^2 \quad (6)$$

これらの適切化項は  $y(\mathbf{x}; \mathbf{w})$  を  $\mathbf{x}$  の滑らかな関数にする働きがある。この項は  $\mathbf{w}$  を小さくすることを促し、モデルがデータセットのばらつきにオーバーフィットすることを少なくする。すなわち、誤差関数を最小にすることを試みると、データにはばらつきがあったとしてもそれをばらつきと解釈できずすべてのデータに完全にフィッティングをしようとする効果が生じるが、適切化項を加えたエネルギー関数を最小にすることで、このような効果を減少させることができる。

隠れユニットの数はモデルの複雑さをコントロールするが、コントロールパラメータ  $\alpha_c$  と  $\beta$  もモデルの複雑さをコントロールしている。またデータが  $\sigma_y$  の標準偏差で示されるガウス分布ではばらついていると仮定すると、 $\beta$  はデータの分散  $\sigma_y^2 = 1/\beta$  を定義し、 $\alpha_c$  は重み係数の分散  $\sigma_{w(c)}^2 = 1/\alpha_c$  を定義している。パラメータ  $\alpha_c$  は重み係数を減少させる効果がある。したがって、 $\sigma_w$  が大きいということは、それに関連する入力が出力に大きな変化を与えることを意味している。したがって、 $\sigma_w$  はそれぞれの入力の重要性を示す尺度として取り扱える。この  $\alpha_c$  および  $\beta$  はベイズ的手法<sup>(12)</sup>を用いて求めた。この手法の場合、パラメータの初期値は使用者が決定することができるが、本研究では重み係数に小さなバラつきを持たせて初期値を設定した(平均 0、標準偏差0.3のガウス分布)。

最適化の手順を示すと次のようになる。まず、エネルギー

関数  $M(\mathbf{w})$  を最小化する。その後、パラメータはベイズ近似<sup>(12)</sup>によって更新する。この更新されたパラメータのもとで、 $M(\mathbf{w})$  を再び最小化する。これを 8 回繰り返す。

**Fig. 2** のトレーニングデータセットの結果に示すように、隠れユニットの数が増えるにしたがって予測値と実験値の差が単調に減少する。ここで、トレーニングの収束性を確認するためにそれぞれの隠れユニットのモデルに対して複数の初期値を用いて計算を行っている。入力と出力の関係が複雑であればあるほど、多くの隠れユニットが必要である。しかしながら、実験データは常に誤差を含んでいるため、予測の精度を上げようとして隠れユニット数を増やし過ぎるとオーバーフィットが生じ、精度が逆に低下する。オーバーフィットを最小限に食い止めるため、データの半分の715組をランダムに選択し、その半分のデータだけでニューラルネットワークをトレーニングし、残りの半分はモデルの最適度を調べるためにテストデータとした。ニューラルネットワークのトレーニングに使用しなかったデータを用いて、エラーの測定を行った結果が Fig. 2 のテストデータセットの結果である。この図から分かるように、隠れユニットが11個の時、テストエラーは最小値をとる。したがって、この時のモデルが最適であると判断し、以降の予測に用いた。隠れユニットが11個より多い時にテストエラーが増加するのは、関数がオーバーフィットしていることを示している。しかし本研究の場合、その増加は非常に小さい。これは使用したデータがガウス分布に近く、ベイジアンモデルが十分機能を果たしたことを見ている。原理的には、ベイジアンモデルが完全に最

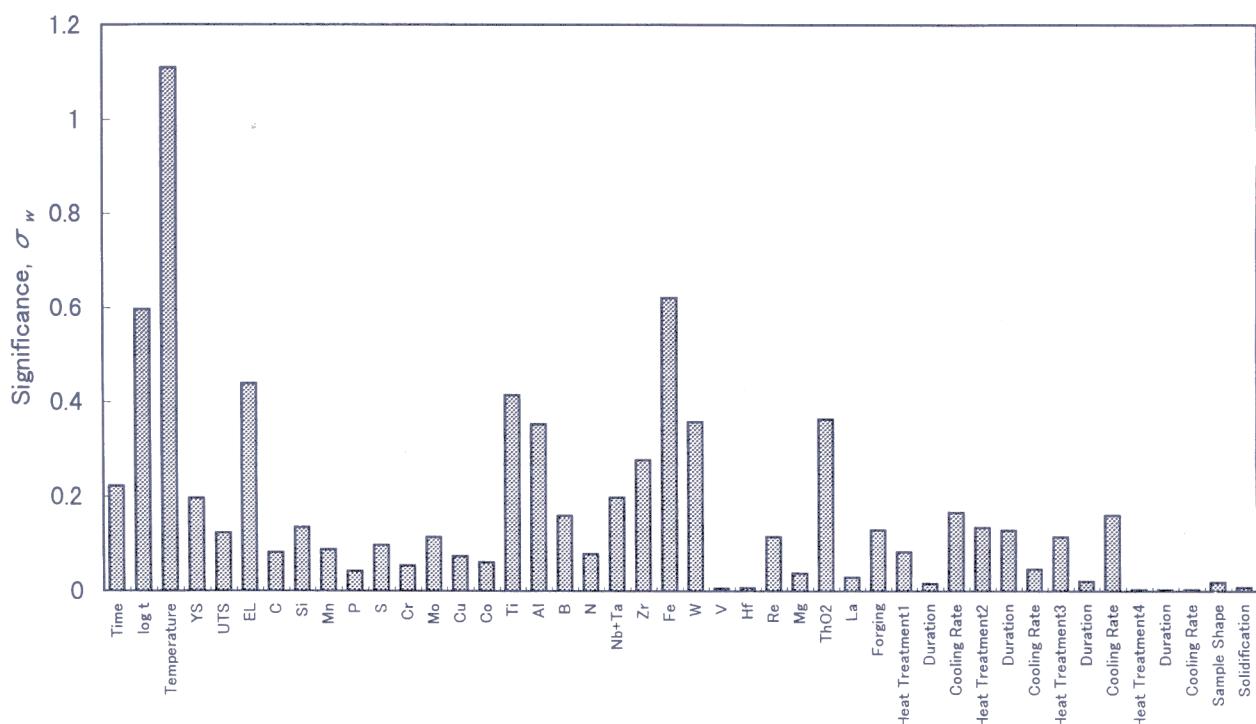


Fig. 4 Significance of individual factors on creep strength (logarithmic of creep rupture strength) of nickel-base superalloys.

適化されれば、隠れユニットの数が無限大であってもオーバーフィットは起こらない。<sup>(13)</sup>

**Fig. 3** にトレーニングデータとテストデータのそれぞれにおける実験値と予測値の一一致の度合いを示す。実験値と予測値はともに規格化した値である。このネットワークにおいては、テストデータにおいても実験値と予測値が非常に良く一致している。このことはこのネットワークでクリープ破断強度が精度よく予測できることを示している。

### III. 個々のファクターの重要度

ニューラルネットワークでは  $\sigma_w$  を用いることで、個々のファクターのクリープ強度に対する重要度を見積もることができる。 $\sigma_w$  の値が大きいとき、それに関する入力ファクターはクリープ強度に対して相対的に大きな変化をもたらす。**Fig. 4** はその結果である。この図から分かるようにクリープ破断強度(の対数)は温度と強い相関関係があることがわかる。また、明らかに時間そのものより時間の対数と強い相関関係がある。これは通常のデータが時間と強度の log-log 軸で表示されることを考えると妥当である。

### IV. 予測

適切なニューラルネットワークが構築されると、さまざまな条件下で、クリープ破断強度を見積もることができる。**Fig. 5** に一例として、MAR-M200 の組成を持つ合金の 900°Cにおける時間とクリープ破断強度の関係を示す。ここでは予測の幅を  $1\sigma$  として、すなわち 67% の信頼限界で予測をしている。この時の試験は、通常凝固で試料作製し、870°Cで 50 h で熱処理を行った後空冷し<sup>(8)</sup>、丸棒状の試験

片を用いて行ったこととした。**Fig. 6** は温度に対する依存性を示す。高温になればクリープ破断強度が減少するといった材料学的に妥当な結果を予測している。このようにいったんネットワークが構築されると、任意の条件で予測が可能である。

1000 h クリープ破断強度の組成依存性を **Fig. 7** に示す。Ni 基超合金は基本的には  $\gamma'$  による強化合金である。Al および Ti は  $\gamma'$  の生成促進元素であり、それぞれの量が多いとき  $\gamma'$  量も多いといえる。**Table 2** に MAR-M200 および Nimonic 80 における Al, Ti 量を示す。**Fig. 8** は Nimonic 80 合金における Al および Ti 量の依存性を示している。この時、鍛造した試料を 1080°C 8 h 保持後空冷し、その後 705°C, 16 h 保持後空冷の条件<sup>(8)</sup>で熱処理を行った丸棒状の試験片を用いている。凝固は通常凝固法である。この図から、もともと Al, Ti 量の少ない Nimonic 80 においては Al, Ti 量を増やすと強度を向上させることができることがわかる。とくに、Al 量を増加させると効果的である。条件によってエラーバーの大きさが異なることも重要な結果である。エラーバーが大きくなるのはデータがばらついているか、この範囲の入力データが不足していることを意味しており、エラーバーによってネットワークが自ら予測の不確かさを示している。したがって、このエラーバーの変化がニューラルネットワーク全体の信頼性の高さを示しているといえる。

一方、MAR-M200 に関しては Al は 1 mass%, Ti は 3 mass% の増加までは効果があるが、それ以上は逆にクリープ破断強度を減少させてしまう。MAR-M200 においては Al や Ti を増やし過ぎてしまうと  $\gamma'$  の量が多くなりすぎ、析出ではなく晶出してくる  $\gamma-\gamma'$  の共晶の量が増えてくることが状態図より予測できるが、この結果はそれを反映していると思われる。このような結果が物理的な仮定をせずに、ニュー

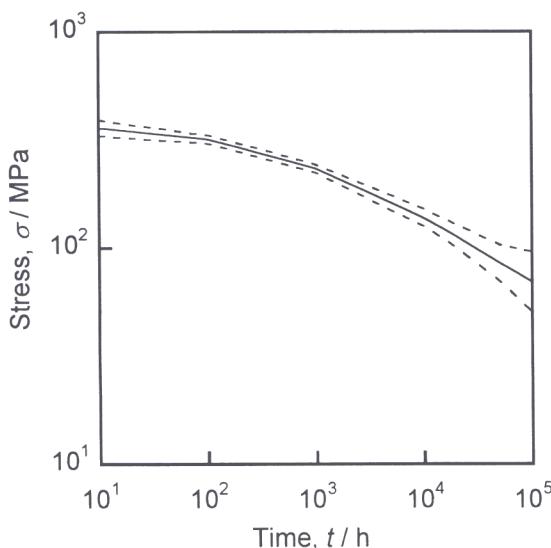


Fig. 5 Prediction of creep rupture strength ( $\sigma$ ) of MAR-M200 at 900°C as a function of rupture time.

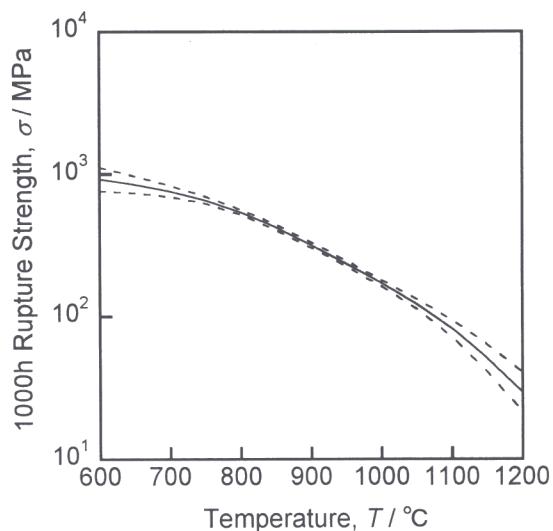


Fig. 6 Prediction of 1000 h rupture strength ( $\sigma$ ) of MAR-M200 as a function of temperature.

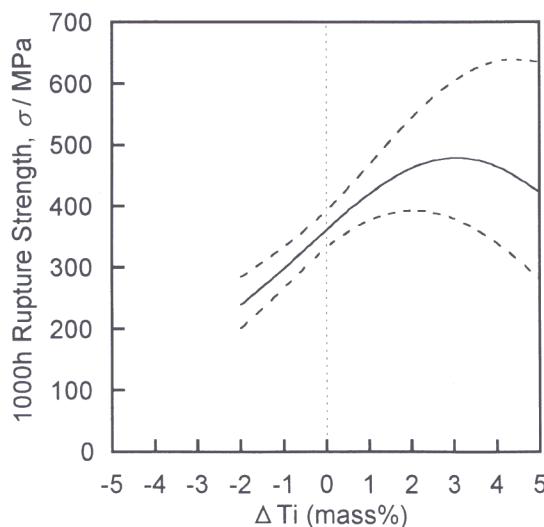
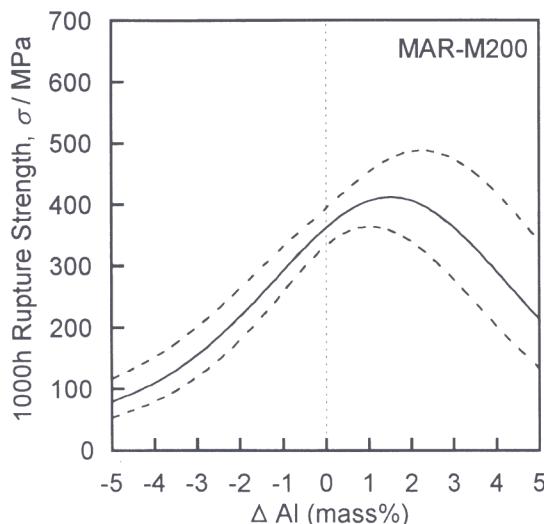


Fig. 7 Prediction of effect of content deviation of Al and Ti ( $\Delta \text{Al}$  and  $\Delta \text{Ti}$ , respectively) on 1000 h creep rupture strength of MAR-M200.

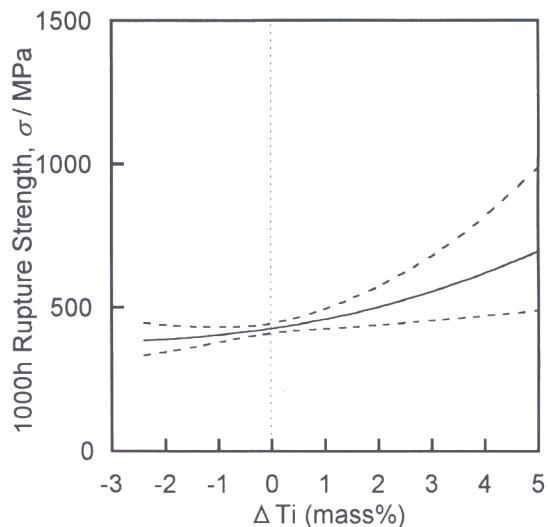
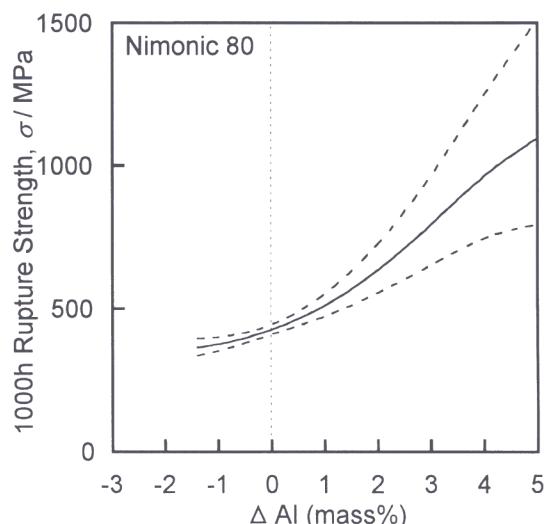


Fig. 8 Prediction of effect of  $\Delta \text{Al}$  and  $\Delta \text{Ti}$  on 1000 h creep rupture strength of Nimonic 80.

Table 2 Al and Ti content in MAR-M200 and Nimonic 80 in mass%.

Material	Al	Ti
MAR-M200	5	2.6
Nimonic 80	1.6	2

ラルネットワークの分析のみから出力されたことは非常に興味深い。

## V. 結 言

従来のニューラルネットワークにベイス推定を加えることにより、Ni 基超合金のクリープ強度の予測を試み、金属学的に妥当な結果を得た。例えば、Nimonic 80 においては、5 mass% の範囲で Al および Ti を増加させるとクリープ強度

が単調増加するのに対し、MAR-M200 においてはいったん増加し、それ以上添加するとクリープ強度が減少することを予測した。またこの予測の特長のひとつとして、予測の不確かさをエラーバーの大きさで表示できることを確認した。

終わりに、本研究は溶接学会アドホック研究会の助成を受けた。ここに謝意を表します。

## 文 献

- (1) 例えば、N. Baba, F. Kojima and S. Ozawa: *Neural Network no kiso to oyoushii*, Kyouritsu Syuppan, (1994), 6.
- (2) G. Yagawa: *Neural Network*, Baifukan, (1992).
- (3) H. Fujii, D. J. C. MacKay and H. K. D. H. Bhadeshia: ISIJ Int., 36(1996), 1373-1382.
- (4) D. V. Lindley: *Introduction to Probability and Statistics from a Bayesian View-point*, Cambridge University Press, (1965).
- (5) D. J. C. MacKay: Neural Computation, 4(1992), 415-447.
- (6) D. J. C. MacKay: Neural Computation, 4(1992), 448-472.

- (7) H. P. Degischer, W. Hein, H. Strecker, W. Wagner and R. P. Wahi: Z. Metallk., **78**(1987), 237-249.
- (8) Inco, "High Temperature High Strength Nickel Base superalloys", The International Nickel Company Inc., 3rd Edition, (1977).
- (9) National Research Institute for Metals, Creep Data Sheet, **24B**(1989), **29A**(1990), **34A**(1993), **39**(1992).
- (10) W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery: *Numerical Recipes in C*, 2nd edition, Cambridge University Press, (1992), 418.
- (11) D. E. Rumelhart, G. E. Hinton and R. J. Williams: Nature, **323**(1986), 533-536.
- (12) D. J. C. MacKay: Network: Computation in Neural Systems, **6**(1995), 469-505.
- (13) R. M. Neal: Radford Thesis '*Bayesian Learning for Neural Networks*' Dept. of Computer Science, Univ. of Toronto, (1995), 122.