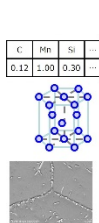


マテリアルズ・インフォマティクスによる材料強度特性の予測

Prediction of Material Strength Properties by Materials Informatics

C	Mn	Si	-
0.12	1.00	0.30	-



橋本 憩太*1
Keita Hashimoto

中村 忠暉*1
Tadaaki Nakamura

齋藤 伸彦*2
Nobuhiko Saito

駒井 伸好*3
Nobuyoshi Komai

清水 信男*4
Nobuo Shimizu

富永 公彦*5
Kimihiro Tominaga

従来、構造材料の強度特性を把握するために破壊試験による評価を行ってきたが、破壊試験数が増加するとコストや時間を要し、網羅的にデータを取得し、評価を行うことは困難であった。三菱重工株式会社(以下、当社)では、マテリアルズ・インフォマティクスと呼ばれる情報科学を構造用金属材料に適用し、材料強度特性を迅速に予測する技術確立した。本技術により、材料強度のばらつき低減や製造歩留まりの改善、更には寿命評価技術の高度化に寄与できる見込みを得た。本報では、蒸気タービン長翼及び火力発電プラントの高温蒸気配管を対象に検討した事例について述べる。

1. はじめに

当社の高温機器で使用される構造用金属材料の強度特性は、化学組成や熱処理条件等、多くの因子が複雑に影響しており、破壊試験によるそれらの定量的な評価には多大なコストや時間を要する。近年、材料設計に機械学習等の情報科学を活用するマテリアルズ・インフォマティクス(MI: Materials Informatics)が注目されており、MIの活用により主に機能性材料の分野で、短期間での新材料開発事例が報告されている⁽¹⁾。当社では、構造用金属材料にMIを適用し、迅速に材料の強度特性を予測することで、製造条件の最適化や製品の寿命評価技術の開発等に取り組んでおり、その概要を以下に紹介する。

2. 最適熱処理条件の予測技術

当社が製造している蒸気タービン長翼の外観を図1に示す⁽²⁾。長翼の製造では、丸棒形状の17-4PH鋼を調達し翼形状に鍛造後、熱処理(溶体化、安定化及び時効)を実施して、更に、長翼余剰部より試験片を採取し引張特性を確認する。引張試験では、0.2%耐力がばらつくことによって当社管理値を満足しないケースがあり、熱処理を繰り返すことや、翼の廃棄に至ることもある。0.2%耐力のばらつきは、素材化学組成のばらつきが一因と想定されたため、MIを適用して化学組成を考慮のうえ、強度に影響を及ぼす時効熱処理温度(時間は一定)の最適値を予測することで、引張試験における0.2%耐力のばらつきを低減させることを検討した。図2に蒸気タービン長翼の製造フロー及びMIの適用イメージを示す。

機械学習による予測モデルの作成条件概要を表1に示す。学習や予測精度の計測には、過去に製造した蒸気タービン長翼の素材の化学組成、熱処理条件及び引張試験で得られた0.2%耐力のデータ約8300点を標準化(各データについて、全データの平均値からの偏差を全データ

*1 総合研究所 強度・構造研究部

*2 総合研究所 強度・構造研究部 主席研究員 工学博士

*3 総合研究所 サービス技術部 主席研究員 工学博士、技術士(金属部門)

*4 エナジートランジション&パワー事業本部 GTCC 事業部 高砂ブレード・燃焼器製造部 課長

*5 エナジートランジション&パワー事業本部 SPMI 事業部 ボイラ技術部 主席技師

の標準偏差で割るデータ前処理)して使用した。また、全データの10%に相当する約800点のデータを予測精度計測用のテストデータとし、残りの約7500点を学習データとした。なお、同一材料チャージのデータが学習データとテストデータに混在すると、未知の材料チャージに対する予測精度を過大評価する可能性があるため、学習データとテストデータに同一材料チャージのデータが混在しないように考慮してテストデータを抽出した。説明変数については、化学組成や熱処理条件の他に、使用した熱処理炉の種類や鍛造時に使用した金型の種類等、0.2%耐力に影響を及ぼす可能性がある文字情報についても検討し、予測精度の向上に寄与するものを選定した。



図1 蒸気タービン長翼の外観

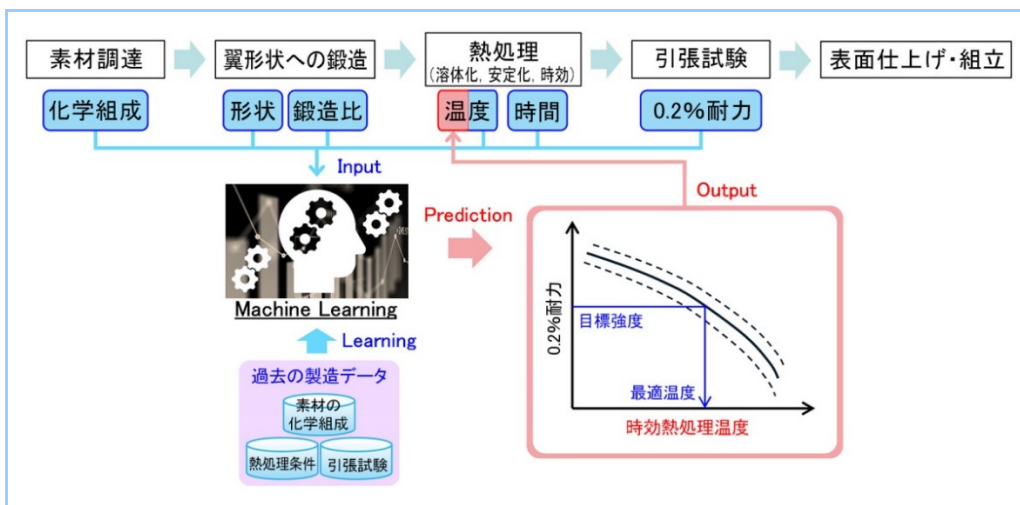


図2 蒸気タービン長翼の製造フロー及びMI適用イメージ

表1 機械学習予測モデルの概要

説明変数	<ul style="list-style-type: none"> 化学組成 (C, Si, Mn, P, S, Ni, Cr, Cu, Al, Nb+Ta, N, Ti) 時効熱処理温度 溶体化, 安定化, 時効熱処理時間 ※熱処理温度に関しては時効熱処理に注目して実施
目的変数	0.2%耐力
アルゴリズム	XGBoost
学習データ数	約7500点
テストデータ数	約800点

機械学習アルゴリズムは、Support Vector Regression⁽³⁾, RandomForest⁽³⁾, CatBoost⁽⁴⁾及びXGBoost (eXtreme Gradient Boosting)⁽⁵⁾の4種を用いてそれぞれの予測モデルを作成してテストデータで予測精度を計測し、最も予測精度が高かった XGBoost を採用した。XGBoost は、弱学

習器を複数作成し、一つ前の学習器の誤りを次の学習器が修正するという操作を繰り返すことで予測精度を向上させるブースティングと呼ばれる手法と、決定木を組み合わせた手法である。XGBoost のハイパーパラメータ(決定木の数, 決定木の深さ, 学習率等)は、学習データの中で交差検証を実施し、最も高い予測精度が得られる組み合わせを採用した。

学習データ及びテストデータの観測値(引張試験結果)と機械学習による予測値の比較結果を図3に示す。学習データ及びテストデータ共に、観測値と予測値の傾向は概ね一致しており、化学組成や熱処理条件から、0.2%耐力の傾向を予測できることがわかった。予測精度は、式(1)に示す標準誤差で評価を行った。

$$SE = \sqrt{1/(n - p - 1) \sum_{i=1}^n (y_i - f_i)^2} \quad \dots\dots\dots(1)$$

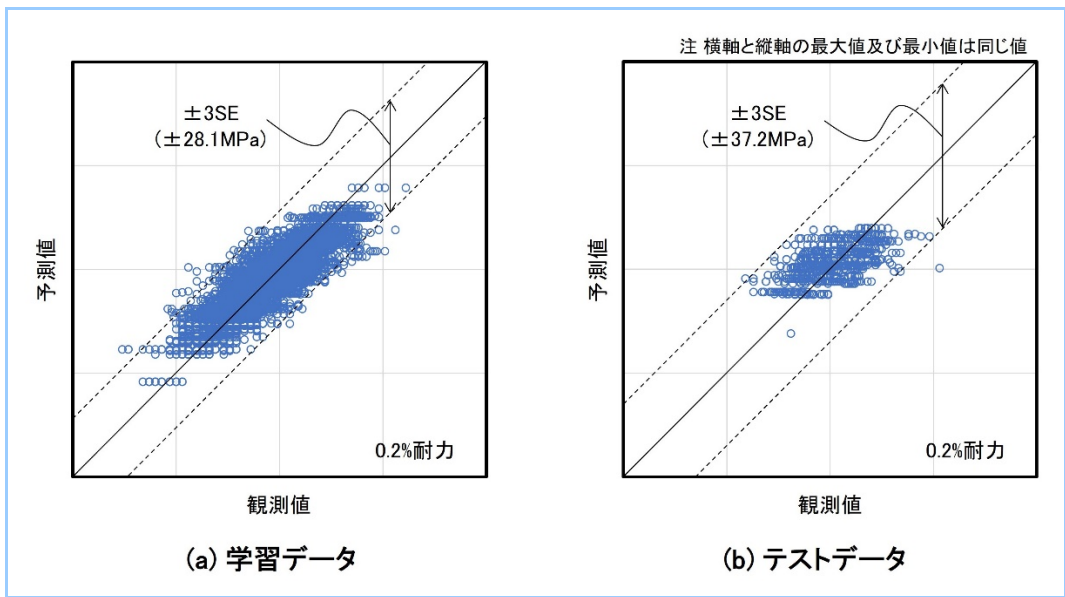


図3 0.2%耐力の観測値と機械学習による予測結果の比較

ここで、SEは標準誤差、nはデータ数、pは説明変数の数、 y_i は観測値、 f_i は推定値である。テストデータの予測精度は $\pm 3SE = \pm 37.2MPa$ であり、当社の管理幅よりも小さいことを確認した。但し、決定木を使用したアルゴリズムを使用した影響で、図4に示すように、時効熱処理温度と0.2%耐力の関係を連続的に予測した場合、階段状の不連続な関係となる。本材料は、時効熱処理中に析出するCu-rich相によって耐力を向上⁽⁶⁾させており、析出は時効熱処理時間の温度と時間に対して連続的に比例することを考慮すると、機械学習の予測結果はCu-rich相の析出挙動と整合せず実体と乖離していると想定され、逆問題解析によって最適な時効熱処理温度を予測した場合、テストデータで計測した予測精度を逸脱する可能性が考えられた。そのため、図4の曲線で示すように比較的データ数が多く、予測精度が高いと想定される代表の時効熱処理温度において機械学習で0.2%耐力を予想し、その結果を2次多項式近似することで、時効熱処理温度と0.2%耐力の関係を得ることとした。本手法によって、再度テストデータの予測精度を計測した結果、 $\pm 3SE = \pm 37.8MPa$ であり、2次多項式近似を行う前とほぼ同等の予測精度を得ることができ、時効熱処理温度と0.2%耐力の関係を連続的に予測することができるようになった。図5にMI適用前後の0.2%耐力の確率密度を示す。調達した素材の化学組成に応じた最適な時効熱処理温度をMIで予測し実製品に適用することで、従来よりも高確率で0.2%耐力が当社管理値を満足する見込みを得た。

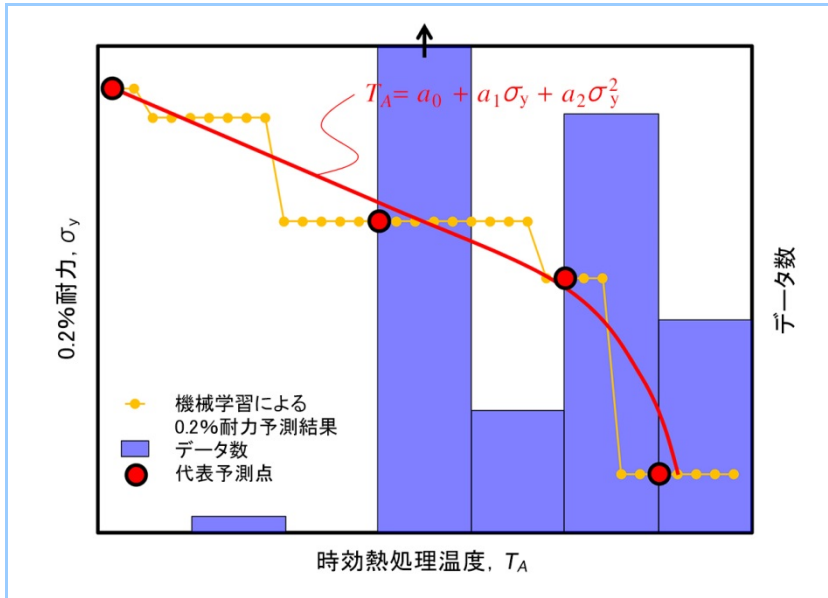


図4 時効熱処理温度と0.2%耐力及びデータ数の関係

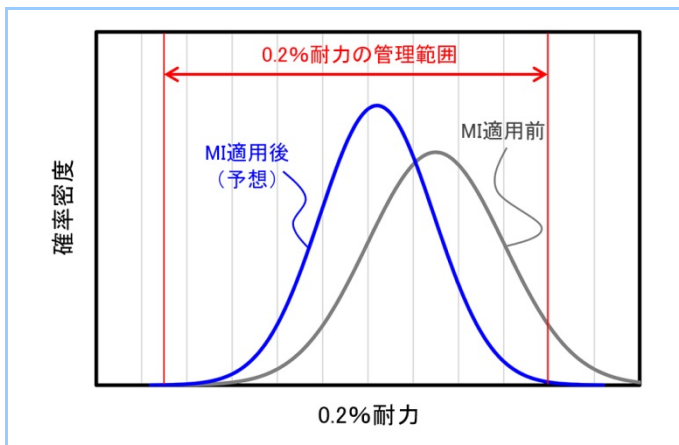


図5 MI適用前後の0.2%耐力の確率密度

3. クリープ特性の予測技術

火力発電プラントでは、高温蒸気配管の材料として 9Cr-1Mo-Nb-V 鋼(火 STPA28, ASME SA-335 P91)や 9Cr-1.8W 鋼(火 STPA29, ASME SA-335 P92)等のフェライト系耐熱鋼が多く使用されている。これらの材料は、鋼種毎にクリープ破断データを収集し、LMP (Larson-Miller Parameter) 法によるクリープ寿命評価式が算出⁽⁷⁾⁽⁸⁾されており、使用温度及び応力からクリープ寿命を予測することができる。しかしながら、クリープ寿命評価式の作成に使用したデータはまとめて解析されているため、材料チャージ間のクリープ破断強度差は考慮されず、強度予測値には一定のばらつきがさげられない。そのため、クリープ破断強度に優れた材料チャージであったとしても、寿命評価式にもとづいて、クリープ寿命が残存している場合も早期に検査を行う場合がある。

材料チャージ間のばらつきを考慮したクリープ寿命評価や、調達する材料のクリープ破断強度のばらつきを低減できれば、火力発電プラントの効率的な保守管理が可能となり、プラントの計画外停止の防止や信頼性向上にも貢献できる。そのため、MI によって化学組成や熱処理条件を考慮したクリープ寿命の予測技術を検討すると共に、クリープ破断強度に影響を及ぼす化学組成の感度解析を実施し、クリープ破断強度のばらつきを低減できる材料仕様を検討した。本報では 9Cr-1.8W 鋼を対象に検討した事例を述べる。

機械学習によるクリープ寿命予測モデルの作成条件概要を表2に示す。学習や予測精度の計

測には、当社で取得したフェライト系耐熱鋼の母材部、溶接継手部のクリープ破断データ及び NIMS Creep Data Sheet⁽⁹⁾のフェライト系耐熱鋼母材部のクリープ破断データ約 1680 点を標準化して使用した。予測精度の計測に使用するテストデータは、破断時間 1000 時間以上の 9Cr-1.8W 鋼のデータ約 100 点を抽出して使用し、残りの約 1580 点を学習データとした。ここでも、学習データとテストデータに同一材料チャージのデータが混在しないように材料チャージを考慮してテストデータを抽出し、未知の材料チャージに対しての予測精度を検証した。また、機械学習アルゴリズムは最も予測精度が高かった CatBoost を採用した。CatBoost は、XGBoost と同様にブースティングと決定木を組み合わせた手法であり、文字情報の取り扱いに優れているという特徴がある。その他の予測モデルの作成方法については2章と同様である。

表2 機械学習予測モデルの概要

説明変数	<ul style="list-style-type: none"> ・化学組成 (C, Si, Mn, P, S, Ni, Cr, Mo, V, Nb, Al, N, W, B, Cu, Ti, N/Al) ・焼ならし、焼き戻し及び溶接後熱処理の温度及び時間 ・素材形状 (Tube, pipe or plate) ・素材肉厚 ・母材 or 溶接継手 ・クリープ試験の温度及び応力 (常用対数)
目的変数	クリープ破断時間 (常用対数)
アルゴリズム	CatBoost
学習データ数	約 1580 点
テストデータ数	約 100 点

テストデータの観測値(クリープ試験での破断時間の常用対数値)と機械学習による予測値の比較結果を図6に示す。テストデータは、観測値と予測値の傾向が概ね一致しており、化学組成や熱処理条件を考慮してクリープ寿命の傾向を予測できることがわかった。本技術によって、同一鋼種でも素材化学組成のばらつきを考慮したクリープ寿命評価が可能であり、当社では従来の LMP 法と組み合わせることで、検査箇所のスクリーニング等に活用している。

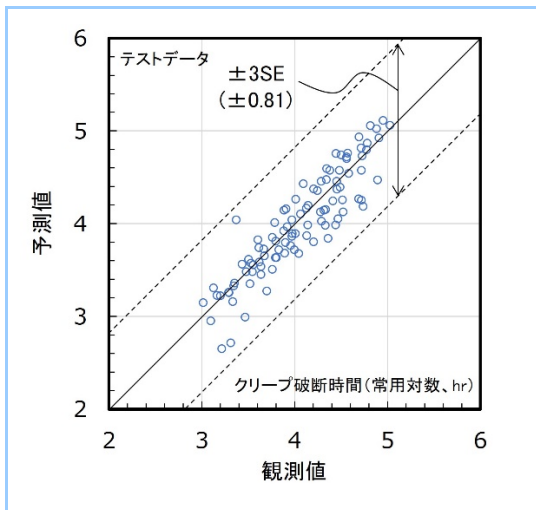


図6 クリープ破断時間の観測値と機械学習による予測結果の比較

図7に 9Cr-1.8W 鋼の Mo, N, W 及び N/Al(N と Al の比率)の部分依存プロット(Partial Dependence Plot)を示す。部分依存プロットは、ある説明変数が変化した場合の目的変数の平均的な挙動を機械学習で予測したものであり、ここでは特に長時間領域におけるクリープ破断強度に及ぼす影響を確認するために、9Cr-1.8W 鋼の6万時間以上のクリープ破断データのみを使用して、部分依存プロットを作成した。Mo は、規格(ASME SA-335 P92)の範囲内で変化してもクリープ破断時間への影響は小さいと想定された。一方で、N, W 及び N/Al はクリープ破断時間への影響が認められた。N は 0.05%程度までは添加量の増加と共にクリープ破断時間が長くなる傾

向が認められた。これは、9Cr-1.8W 鋼が MX((Nb, V)(N, C))によって析出強化されており⁽¹⁰⁾、0.05%程度まではMXの核生成量の増加に寄与しているためであると想定される。Wは、約1.7%以上でクリープ破断時間が長くなる傾向が認められた。これは、本鋼種において W は固溶強化元素としてクリープ破断強度の向上に寄与している⁽¹¹⁾ためであると想定される。また、N/Alについては4程度までは増加と共にクリープ破断時間が長くなる傾向を示しており、N/Al が大きくなることでAlと結合せずにMXとなって析出強化に寄与する有効N量が多くなる⁽¹²⁾⁽¹³⁾ためであると想定される。従来は、実験コストが高く長時間の試験を要することから、最適な化学組成範囲を定量的に評価することが困難であったが、MIを適用することで定量的な評価が行えるようになった。当社では、適宜、これらのMIによる評価結果を材料の購入仕様に反映することで、クリープ破断強度のばらつき低減及び低強度材の購入防止を検討している。

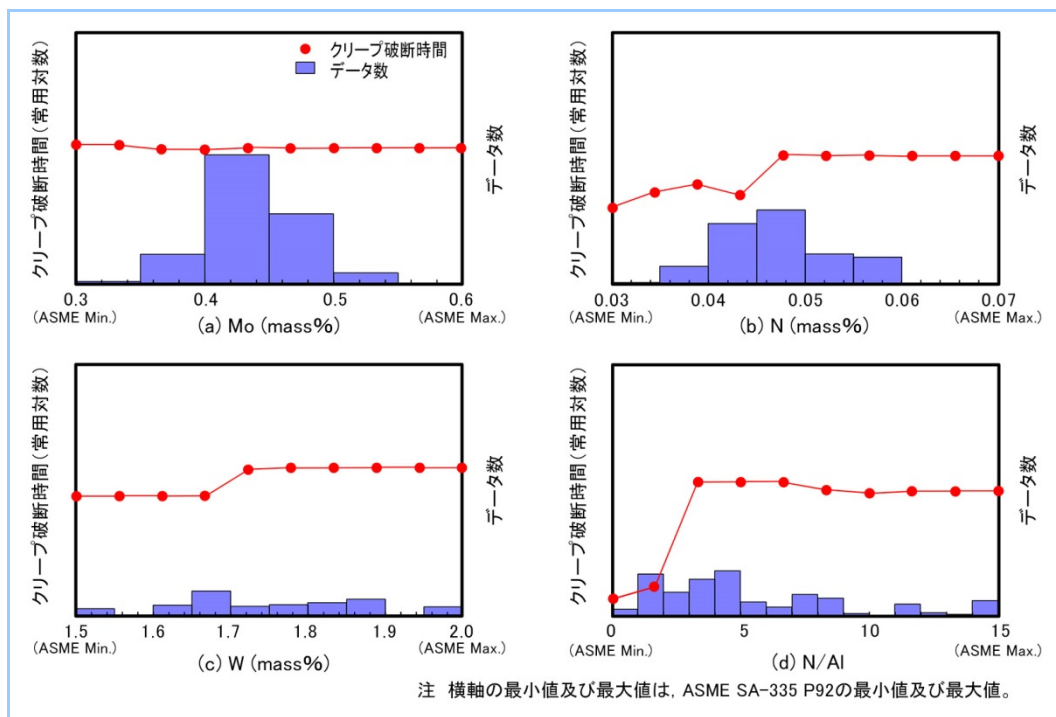


図7 9Cr-1.8W 鋼のクリープ破断時間に関する部分依存プロット

4. まとめ

MIを構造用金属材料に適用することで、過去に取得したデータに基づいて、金属材料の材料強度特性を予測できるようになった。蒸気タービン長翼では、0.2%耐力の機械学習予測モデルを作成することで、調達した素材の化学組成に応じた最適な時効熱処理温度を予測し、実製品に適用することで従来よりも高確率で0.2%耐力が当社管理値を満足する見込みを得た。火力発電プラントの高温蒸気用配管に使用しているフェライト系耐熱鋼では、化学組成や熱処理条件を考慮してクリープ寿命を予測できるようになった。また、MIを活用することでクリープ破断強度に影響を及ぼす化学組成の定量的な感度解析を行えるようになり、クリープ破断強度のばらつき低減及び低強度材の購入を防止する目途を得た。

参考文献

- (1) 大楠恵美, マテリアルズ・インフォマティクスが変える材料開発技術, MATERIAL STAGE Vol.17 No.11 (2018) p.50~54
- (2) 福田寿士ほか, 蒸気タービン超長大最終翼群 3600rpm-50IN/3000rpm-60IN の開発, 三菱重工技報, Vol.46 No.2 (2009) p.18~24
- (3) Raschka, S. et al., Python 機械学習プログラミング, インプレス, (2018)
- (4) Yandex, CatBoost, (2022)
<https://catboost.ai/>

-
- (5) Chen, T. et al., XGBoost: A Scalable Tree Boosting System, KDD'16, (2016)
 - (6) 磯部晋ほか, 17-4PH 鋼における逆変態オーステナイトの生成挙動とその諸特性に及ぼす影響, 電気製鋼 Vol.54 No.4 (1983) p.253~263
 - (7) 財団法人 発電設備技術検査会, 平成 23 年度 高効率火力発電設備健全性調査報告会, (2012)
 - (8) 経済産業省, 20190628 保局第 1 号, (2019)
 - (9) 物質・材料研究機構, Creep Data Sheet, (2022)
<https://smds.nims.go.jp/creep/>
 - (10) Hald, J., Microstructure and long-term creep properties of 9-12% Cr steels, International Journal of Pressure Vessels and Piping 85 (2008) p.30~37
 - (11) 直井久, 超々臨界圧発電用高強度フェライト系 NF616 鋼管の開発, 日本機械学会第 73 期通常総会講演会資料集(V) No.96-1, (1996) p.466~468
 - (12) Brett, S. J., UK experience with modified 9%Cr (grade 91) steel, Energy Materials Vol.2 No.2 (2007) p.117~121
 - (13) Komai, N., Creep Rupture Properties of P91 and P92 Weldments, EPRI Workshop of Grade 91/92 Steels, (2008)