



解説

研究会成果報告-16

鉄鋼インフォマティクス研究会の成果と今後の展開

Cutting Edge of Steel Informatics and Future Prospects

足立吉隆

Yoshitaka Adachi

名古屋大学
材料デザイン工学専攻
教授

1 はじめに

物理空間とバーチャル空間が融合する世界が眼前に迫っており、材料工学も確実にその潮流の中にある。人工知能 (AI) は、理論、実験、計算工学と組み合わせ、材料工学における効率化、推定、解明に多大な影響を及ぼし始めている。合金元素の組み合わせは無限であるが、目標値を最大化する合金元素の組み合わせを、第一原理計算とベイズ的最適化という機械学習を連携させてバーチャル実験で最適解を求めること¹⁾や、材料組織という“写真”の特徴値を数値化するディープラーニング²⁾や機械学習型画像処理技術³⁾の適用、トレードオフの関係にある特性のバランスを最大化する材料組織やプロセスの設計を逆解析により成し遂げることなど、AIと材料工学の融合はこの数年で飛躍的な進歩を遂げている。情報関連企業が自動運転機能を有する自動車を開発する時代が到来しているが、情報関連企業がデータサイエンスに基づいて、材料開発の指針やバーチャル実験をすることももはや夢物語ではなくなってきている。実際、世界を代表する情報関連企業が、国際会議において「我々は創薬と新物質探索をターゲットに絞って、画期的に効率的な設計を行う」と宣言したとも聞く。

社会基盤材料である鉄鋼材料の研究開発にAIをどのように融合するのか本研究会では暗中模索の状況であったが、様々な点でAIを取り入れると従来と比較して効率的に、しかも手動で行うよりも精度よく推定できる事例を提示することができた。特に、説明変数であるプロセスや材料組織が複雑な時に、目的変数である特性や特性バランスを最適化するには極めて有力な手法となる。同時に、AIは目的変数に及ぼ

す説明変数の影響度を定量的に把握する事にも長けており、AIの使い方によっては冒頭に述べたように効率化、推定、解明のいずれの点においても絶大な効果を発揮する可能性を秘めている。

本研究会はこのような時代の萌芽期に活動を開始した。そして、マテリアルズインフォマティクスという材料研究の一分野が形成されようとしている今日、本研究会から生まれた成果の意義や今後の課題を俯瞰的に見る機会として本稿を執筆する。

2 材料情報統合型研究の成果

2.1 二つのAI搭載材料情報統合システム (MIPHAとrMIPHA)

本研究会での成果をもとに、二つのAI搭載材料情報統合システムを開発した。一つはvisual basic言語でスクリプトが書かれたMaterials Genome Integration System for Phase and Property Analysis: MIPHA⁴⁾*1 (図1)であり、材料情報入力、AI画像認識、AI画像処理、二次元画像定量解析、三次元画像定量解析、AI順解析、AI逆解析モジュールで構成されている。また、全設定を一括で行える一括設定モジュールが実装されている。各モジュールは連動しており、一括設定モジュールにおいて、画像を与えればワンクリックでその特徴 (平均値、分散) をcsvファイルとして出力する。現在の評価項目は以下のとおりである。

- ・ 2D Count (2Dでの粒子数 (シリアルセクション像の場合はその総数))
- ・ 2D 面積 (2Dでの面積 (同上))
- ・ 2D % Area (面積率 (シリアルセクション像の場合

*1 国家プロジェクトSIP「革新的構造材料の開発」で開発したシステムである。

はその平均値))

- ・ 2D Circ. (真球度平均値 (同上))
- ・ 2D Solidity (凸度 (同上))
- ・ 3D Count (粒子数)
- ・ 3D Volume (体積)
- ・ 3D Area (表面積 蓋・側面の面積を含まず)
- ・ 3D Genus (種数)
- ・ 3D Euler-Poincare (オイラー標数 χ (surface))
- ・ 3D 貫通する第二相粒子 (表面蓋なしの場合、母相の tunnel に対応)
- ・ 3D 内在する第二相粒子 (母相の void に対応)
- ・ 3D 内在する第二相粒子でその中に母相粒子が孤立して存在している粒子
- ・ オプション1: 平均・ガウス曲率
- ・ オプション2: 分岐点

順解析モジュールでは、組織データから特性を推定するモデルを作成することができる⁵⁾。また、スパース学習によるデータ変換・変数選択機能が実装されており選択された変数がどのようなデータ変換の結果選択されたのかを示す結果や、モデルの精度を表す相関係数 (学習データ、テストデータ) や、データ変換後の入力ノード数・隠れ層のノード数・出力ノード数ならびに感度解析 (重み係数の平均、その二乗、その分散、重み平均値の二乗/分散) の結果が表示される。目的変数は最大2つまで設定することが可能である。

逆解析モジュール (図2) では、望む特性を得るための組織因子の候補値を提示する。目的変数の数は最大二つまで設定可能である。要望する特性として特性曲線 (応力-ひずみ曲線など) あるいは特性値 (硬さなど) を選択し、曲線の場合はファイル (応力-ひずみ関係のデータ) を指定し、単独の特性値の場合はその値を入力するか最大値、最小値探索機能を利用する。目標値が二つある場合は、予め作成した順解析モデルを

選択すると、「特性1」とともに「特性2」が入力可能となり、2目的変数の積や和が最大になるように逆解析することが可能となる。逆解析の探索は遺伝的アルゴリズムで行われる。

もう一つのシステムは、R言語で書かれたrMIPHA (図3) であり、赤池情報量規準AIC⁵⁾ やlassoによる最適モデルの提案、各種識別器 (ANN, SVR, RandomForest, 重回帰) による機械学習モデルの構築、GridSearch/ ベイズの最適化⁶⁻⁹⁾ による識別器のハイパーパラメータの最適化、新規データに対する特性推定、ベイズ最適化を使った逆解析による最高出力 (特性) を得るための最適入力因子 (組織) の提案 (実験計画法)、トレードオフの関係にある2目的変数のバランス最適化探索、主成分分析の一貫解析が可能である。ニューラルネットワークモデルで、説明変数が目的変数に及ぼす影響度を評価する荷重結合法も実装されている (図4)。rMIPHAの最大の特徴は複数の識別機を使った解析が可能なことと、各識別器のハイパーパラメータ探索や逆解析実験計画法をベイズの最適化で実施できることである。



図2 遺伝的アルゴリズムによる逆解析 (特性→組織候補) (MIPHA)

~~~~~

rMIPHA

~~~~~  
menu: 1:AIC, 2:lasso, 3:PCA*, 4:Autoencoder*

5:Accuracy_SUM
6:GS-->ANN, 7:BO-->ANN-->Inverse analysis**, 8:ANN
9:GS-->SVR, 10:BO-->SVR-->Inverse analysis**, 11:SVR
12:GS-->RF, 13:BO-->RF-->Inverse analysis**, 14:RF
15:Multiple regression
16:Output prediction by tuned model***
100:New data, 200:help

option modules
300:Inverse_PCA, 301:PCA-->ANN

0:Exit

~~~~~



図1 MIPHAのモジュール構成

図3 ベイズの最適化をフル活用した rMIPHA

目的変数 説明変数

[1] "k(1)m=0.991410746788991"  
 [1] "k(2)m=1.81093928546328"  
 [1] "k(3)m=1.87480793588146"  
 [1] "k(4)m=2.4569792083507"  
 [1] "k(5)m=1.37193400766052"  
 [1] "k(6)m=1.99726930223849"  
 [1] "k(7)m=2.69826358540852"

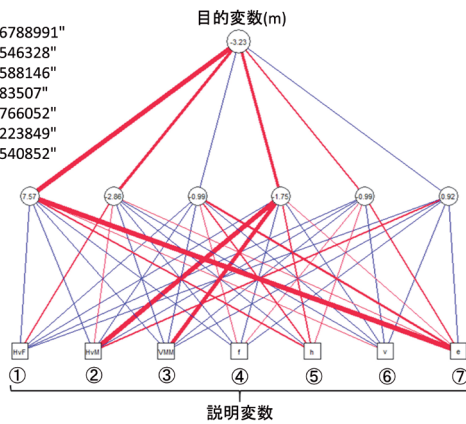


図4 荷重結合法 (実装済み) による感度解析 (rMIPHA)

## 2.2 材料組織の特徴値の数値化 (MIPHA)

鉄鋼協会の研究ロードマップにも書かれているように、材料情報を統合するシステム開発は今後の鉄鋼工学にとって重要な意味を持つものと考えている。精度のいいデータを効率よく、しかも普遍的に取得できれば、データサイエンスへの道が開ける。材料工学とは、プロセス、材料組織、特性、(場合によっては性能)を論理的に関連付ける学問といえるが、これらすべての情報が数値化されていることがAI材料工学には必要である。プロセスや特性は数値情報で与えられているのに対し、材料組織は“写真”であり、しかも二次元情報でしか与えられていない場合がほとんどである。この材料組織特徴 (材料ゲノムといえる) の数値化は極めて重要な課題である。本研究会では、畳み込みニューラルネットワーク (CNN) および機械学習型画像処理技術と位相幾何学、微分幾何学を融合し、効率的に材料ゲノムを取得することを試みた。後述する順解析、逆解析機能も本研究会で開発したものであり、MIPHAにモジュールとして実装されている。別途開発した全自動シリアルセクション3D顕微鏡<sup>10)</sup>で得た三次元組織像を本システムで解析することにより、より多くの材料ゲノム情報を、効率的に、しかも普遍的に取得することができる。フェライト-マルテンサイト二相鋼に対して、MIPHAを使って解析した一例を図5に示す。

## 2.3 重要な説明変数の選択と高精度な順解析モデルの構築 (rMIPHA)

工学データには限りがあり、決してビッグデータ化は望めない場合が多い。このような場合に、機械学習で問題になるのが過学習である。この説明は他<sup>11)</sup>で行っているのも興味を持たれた方は参照願いたい。過学習を抑制する一つの手段は、説明変数の数を影響度の高いものに絞ることである。このような説明変数の選択はスパース学習の重要な項目の一つ

ノイズ: 0.5 $\mu\text{m}^3$ 以下

|     | Class      | Count | Volume( $\mu\text{m}^3$ ) | Colony size ( $\mu\text{m}$ ) | $f_v$   | V <sub>v</sub> (%) | $S_v(\mu\text{m}^2/\mu\text{m}^3)$ | $\chi^2/\nu$ | $r_{1/2}$ | $r_{1/4}$ | $r_{1/8}$ | $r_{1/16}$ | Max $\chi$ | Max $\chi$ |
|-----|------------|-------|---------------------------|-------------------------------|---------|--------------------|------------------------------------|--------------|-----------|-----------|-----------|------------|------------|------------|
| DP1 | Ferrite    | 1     | 1399405                   | 139.9                         | 6.5E-07 | 91.3               | 0.079                              | 7413         | 0.0E+00   | 0.0E+00   | 0.0E+00   | 0.0E+00    | 3381       | 3381       |
|     | Martensite | 342   | 120969                    | 9.1                           | 2.0E-04 | 8.7                | 0.079                              | 14417        | 2.1E-05   | 5.9E-05   | 2.6E-05   | 2.6E-05    | -716       | 7          |
| DP2 | Ferrite    | 9     | 202459                    | 81.3                          | 2.0E-05 | 23.6               | 0.161                              | -17160       | 2.0E-07   | 1.7E-06   | 3.0E-06   | 3.0E-06    | -6026      | 3          |
|     | Martensite | 94    | 964387                    | 27.0                          | 2.7E-05 | 21.4               | 0.161                              | -11681       | 2.3E-08   | 1.1E-05   | 0.0E+00   | 0.0E+00    | -11916     | 2          |

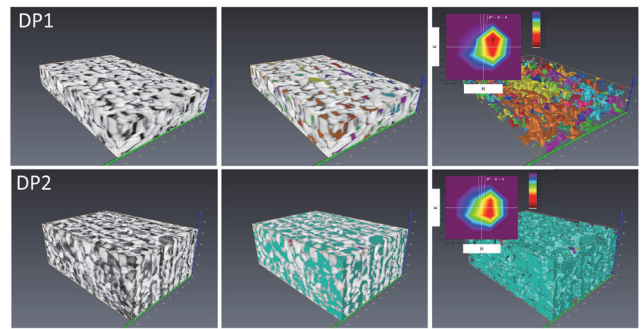


図5 DP鋼組織特徴値の解析例 (MIPHA)

である。影響度の高い説明変数を選択する手法としては、赤池情報量規準 (AIC)<sup>12)</sup>、lasso、データ変換・変数選択 (ニューラルネットワークの場合)、ジニ係数 (ランダムフォレストの場合)、荷重結合法による感度解析、感度係数法による感度解析、ベイズ推定など、複数ある。一つの手法による評価は危険であり、複数の手法によって説明変数をスクリーニングする集団学習 (アンサンブル学習) が必要と思われる。説明変数を選択する手法以外に、rMIPHAには説明変数の次数を削減するモジュールとして、主成分分析 (PCA) とオートエンコーダーが実装されている。

説明変数のスクリーニングが終わった後は、機械学習の識別器を最適化することが重要となる。最適化をするときの指標は、推定結果と実際の結果の差の二乗の和 (残差二乗和) をデータ数で平均したものの平方根 (二乗平均平方根誤差, RMSE) が用いられることが多い。RMSEが最小となるように、各識別器のハイパーパラメータを最適化する。このハイパーパラメータの最適化を手動で行うにはあまりにも時間がかかりすぎる。そこで、最適なハイパーパラメータを効率よく探索するために、グリッドサーチによる全探索や、より効率の良いベイズ的最適化が行われる。

## 2.4 ベイズ的最適化による識別器ハイパーパラメータの最適化

ニューラルネット回帰、サポートベクター回帰、ランダムフォレスト回帰は、いずれも説明変数と目的変数の関連モデルを構築する識別器である。それぞれの識別器にはハイパーパラメータと呼ばれる定数があり、回帰精度をあげるためにはそれを最適化することが重要である。ハイパーパラメータの最適化は従来グリッドサーチなどの全探索が行われてきたが、時間がかかるため、最近では事後確率が高くなるパラメータの領域を重点的に探索するベイズ的最適化法が目まがみされている。



ここでベイズ的最適化の要点を説明する。例として、数点の実験結果（入力 $x$ , 出力 $y$ の事前分布）があったとき（ $t=t$ ）に、未知のブラック関数の最大値を求めることを考える。この場合評価関数は出力 $y$ そのものである。実験結果のあるところを結べばその中間点での値 $\mu_t(x)$ がおおよそ推定できる。この期待値が高そうなところを次は調べるべきであるという判断は正しいであろう。これはいわば実験結果を活用した判断である。一方で、実験結果がないところは不確定性 $\sigma_t(x)$ が大きく探索すべきであるという判断も正しいものと思われる。これは探索である。活用と探索の両観点を評価関数に取り入れるために、評価関数として次式を採用する。

$$\text{評価関数} = \mu_t(x) + \kappa \sigma_t(x)$$

評価関数が最大になるところが次の評価対象である。この戦略を上限信頼限界（UCB）戦略<sup>\*2</sup>という。ここで活用と探索のバランスを決めている係数が $\kappa$ である。これをわずかに数回繰り返すうちに、最大の出力値を得る入力値を見出すことができる。

この不確定性を表現するために、カーネルが用いられる。ここではよく使われるRBFカーネルを使うことにする。二点 $(x_i, y_i)$ があり、その時の出力が $(y_i, y_j)$ とすると、例えば $x_i$ は実験点 $(x_i)$ であり、 $x_j$ はこれから探索しようとする点 $(x_{t+1})$ とする。 $x_i$ と $x_j$ が近くなるほど $x_i - x_j$ はゼロに近くなり次式のRBFカーネルのexpの値（ $\gamma$ はここでは1とする）は1に近くなり、離れるほどその値は0に近くなる。

$$k(x_i, x_j) = \exp(-\gamma |x_i - x_j|^2)$$

このカーネル関数を使って、評価点 $(x_{t+1})$ における不確定性 $\sigma$ を次の式で得る<sup>13)</sup>。

$$\sigma^2 t(x_{t+1}) = k(x_{t+1}, x_{t+1}) - k^T (K + \rho^2 I)^{-1} k$$

ここで、

$$k = [k(x_{t+1}, x_1), \dots, k(x_{t+1}, x_t)]^T$$

$K$ :  $k(x_i, x_j)$ をij要素とするカーネルのグラム行列

$$\text{例: } k = \begin{bmatrix} k(x_1, x_1) & k(x_1, x_2) & k(x_1, x_3) \\ k(x_2, x_1) & k(x_2, x_2) & k(x_2, x_3) \\ k(x_3, x_1) & k(x_3, x_2) & k(x_3, x_3) \end{bmatrix}$$

$I$ : 単位行列

$\rho$ : データノイズの標準偏差

RBFカーネルの係数 $\gamma$ は、実験点における不確定性 $\sigma$ の和が最小になるように決定する期待値は次式で得られる<sup>13)</sup>。

$$\mu_t(x_{t+1}) = k^T (K + \rho^2 I)^{-1} y_{1:t}$$

ここで、

$$y_{1:t} = [y_1, \dots, y_t]^T$$

である。

このカーネル法によるベイズ的最適化の主旨は、 $x$ 座標が似ているのであれば、 $y$ 座標も似ているであろうとする考え方である。事前分布を使って、事後分布を求めていることから、逐次ベイズ的な推定手法といえる。

上述した例では評価関数が最大になるところを探索したが、二乗平均平方根誤差の場合は最小となる候補値（あるいはベクトル）を探索することになる。

一例として、ニューラルネットワークのハイパーパラメータ（sizeとdecay）の最適化をグリッドサーチとベイズ的最適化で行った結果を図6に示す。ベイズ最適化を行うにあたり、プログラミング言語RではrBayesianOptimization<sup>14)</sup>というパッケージが有用である。UCB戦略の $\kappa$ 値は3とした。グリッドサーチではsize（1～7）とdecay（0.05間隔で0～1）の

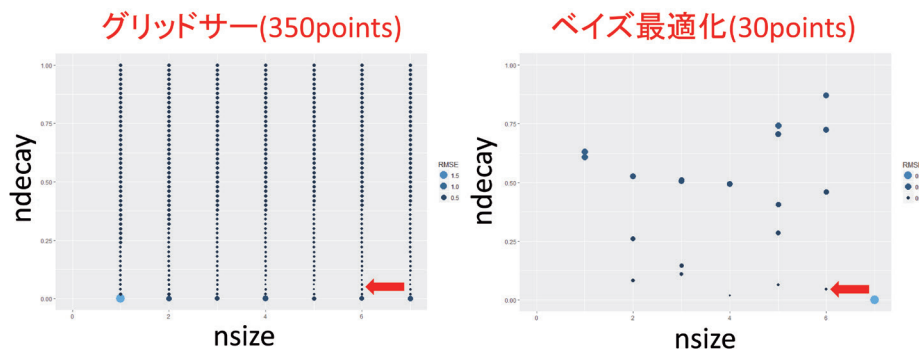


図6 グリッドサーチとベイズ的最適化によるハイパーパラメータの最適化（rMIPHA）

\*2 その他にも、期待改善値（Expected improvement: EI）戦略、改善確率（Probability of improvement: PI）戦略などがある。

全組み合わせ140通りをモデル式に入れて二乗平均平方根誤差を計算しており時間がかかるが、ベイズ的最適化では30通り（初期に10通りの組み合わせを与えて、その後20通りを探索）の組み合わせだけで効率よく最適値（size=6, decay=0.05）を割り出している。

各識別器のハイパーパラメータをベイズ的最適化で最適化した上で、各識別器の精度比較を行った一例を図7に示す。図7の横軸は実験値、縦軸は推定値である。学習に使ったデータ（train）と学習には使わなかったデータ（test）に対して、RMSE値と相関係数（CC）を図中に示している。左上の

初期データ20点+探索結果50点  
識別器：ニューラルネット

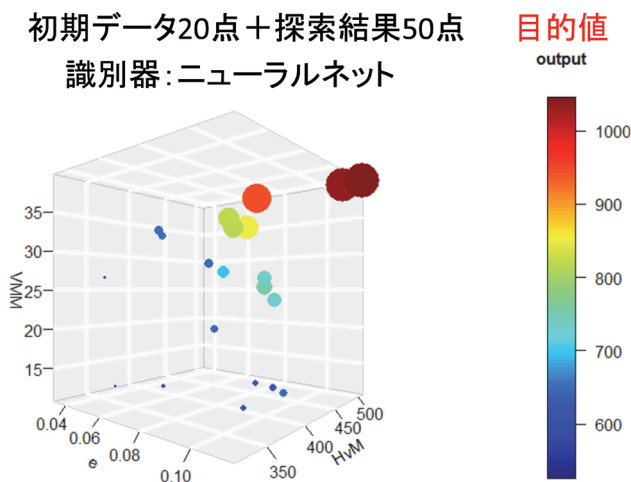


図7 ベイズ的最適化を利用した逆解析による実験計画（rMIPHA）

重回帰と比較して、ニューラルネット（用いたRのパッケージ：nnet）、サポートベクター回帰（e1071）、ランダムフォレスト（randomForest）の精度が高いことが分かる。

## 2.5 ベイズ的最適化による逆解析・実験計画（rMIPHA）

上述したベイズ的最適化は、目標とする目的変数値（最大値や最小値を含む）を得るための説明変数候補の探索にも活用することができる。MIPHAとrMIPHAを本研究会の成果を集約して構築したが、その中でもrMIPHAにはベイズ的最適化を取り入れた逆解析による説明変数候補の探索機能が実装されている。目的変数を最大化する3つの説明変数の探索を行った一例を図8に示す。なお、MIPHAには遺伝的アルゴリズムを使ったランダムサーチによる逆解析機能が実装されている。MIPHA、rMIPHAともに、1目的変数の目標値、最大値、最小値探索および2目的変数の場合のバランス最適化機能が備わっている。

## 3 現象解明型研究の成果

本研究会では、材料情報を統合する研究とともに、塑性変形挙動や延性破壊挙動を解明するための解析型研究も併せて行い、変形や延性破壊を支配する材料組織因子（記述子）を解明することも試みた。主な手法としては、デジタル画像相関法（DIC）や、陽電子消滅法、放射光X線ラミノグラフィー法を採用した。

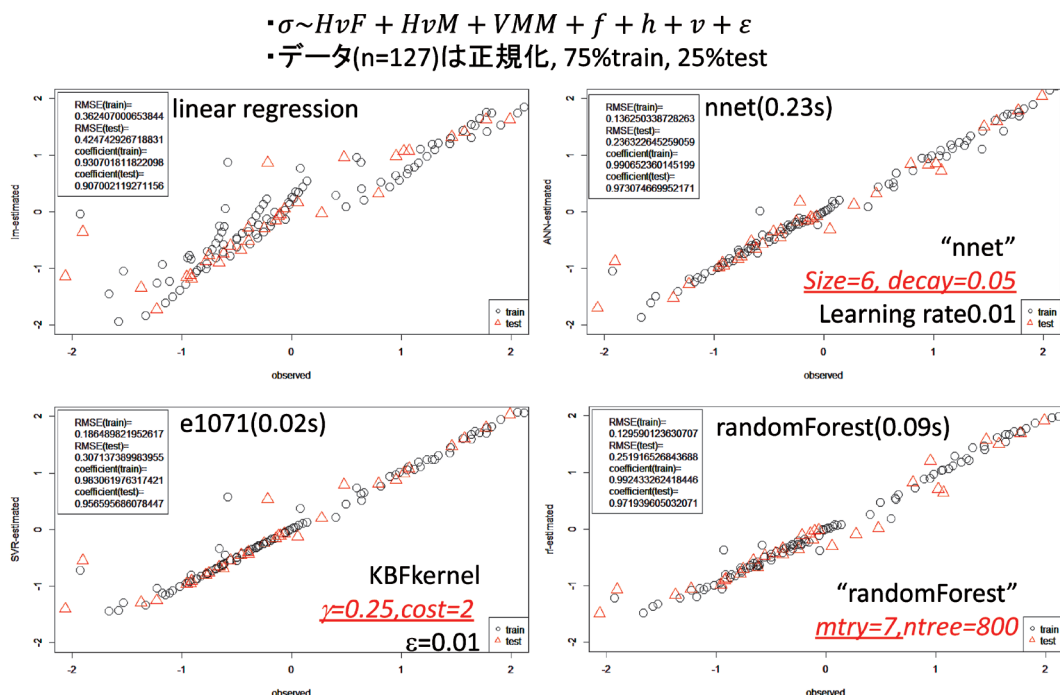


図8 識別器の精度比較（rMIPHA）

塑性変形挙動をDICにより解析した研究では、フェライト、フェライト-パーライト、フェライト-マルテンサイト、パーライト、フェライト-オーステナイト鋼を対象とした。いずれの供試材においても、初期に優先的に塑性変形するサイトはそれぞれの組織の特徴ある場所であるが、それ以降は初期に塑性変形した部位が引張方向45度方向に連結するように塑性ひずみ帯を形成して変形が進むことが明らかとなった。微視的な粒応力や、相応力に加えて、“塑性ひずみ帯”と“非塑性ひずみ部位”間で応力-ひずみ分配が起こりながら、塑性変形が進むことが判明した(図9)。この準巨視的な応力-ひずみ分配を生じさせる“塑性ひずみ帯”の幅や間隔は、結晶粒径や第二相の分散状態、変形温度、粒内析出物の影響を受けることも明らかとなった。しかし、塑性ひずみ帯の幅や間隔を初期組織特徴値から推定するまでには至らず、強度の記述子の一つとして昇華させるまでには至らなかった。

Ti 添加Interstitial Free (IF) 鋼の局部伸び特性が優れる機構を、引張試験の局部伸び領域におけるボイドの発生、成長、連結の観点から工業用純鉄と比較して解析した<sup>15)</sup>。ボイド発生起点のelectron back scatter diffraction解析によると、本試験に用いたIF鋼でのボイド発生界面は粒界が50%、粒界のTi (C,N) が20%、粒内のTi (C,N) が30%であり、工業用純鉄では70%が大傾角粒界、30%が未再結晶粒界で確認された。引張試験を逐次途中止めした試験片について、放射光X線ラミノグラフィー法によりボイド発生、成長、連結を観察した結果によると、IF鋼では工業用純鉄に比較してボイドが大きく成長するものの、高ひずみまで連結が生じなかった。引張試験を最大荷重で途中止めした試験片について、ナノインデンテーション硬さ試験を行い粒界からの硬さ (HIT) 変化を測定したところ、IF鋼に比較して工業用純鉄では粒界と粒内とのHIT差が大きく、均一伸び領域においてすでに粒界

近傍でのひずみ不均一化が生じていることが明らかとなった。工業用純鉄ではこの不均一化が大きいことに起因して低ひずみ域でボイド連結が進み、一方、不均一化が小さいIF鋼では高ひずみ域までボイド連結が抑制され、その結果、高い局部伸びを示したと考察された。

陽電子消滅分光法を用いて、IF鋼および純Feの塑性ひずみ量に対する原子空孔集合体の成長過程を調べた<sup>16)</sup>。変形が進行すると、IF鋼では平均すると原子空孔、純Feでは原子空孔が5個からなる原子空孔集合体が形成していることが分かった。IF鋼では塑性変形で形成した原子空孔が溶質原子に捕獲され、集合体の形成が妨げられたと考えられる。ただし、延性破壊は進行するため、陽電子消滅では捉えられない低濃度のボイドは形成しているものと考えられる。

## 4 今後の課題と期待

プロセス、組織、特性の相関を機械学習によりモデルを作成するには、組織特徴値の数値化がキーとなる。形態情報に加えて、集合組織情報、各相の物性も記述子として準備した方がよい場合もあるであろう。これらの豊富な情報が、簡単に、そして普遍的に得られることがAI材料工学の発展にとって重要である。その為には、各種計測機器で得た情報を効率よく取得することを意識した計測インフォマティクスの今後の発展が期待される。同時に、プロセスと組織の相関に焦点を当てたプロセスインフォマティクスも一層注力する研究者が増えることが望まれる。

理論、実験、計算工学は連続して発展してきたが、機械学習的アプローチは源流を別とする不連続的なアプローチなのかもしれない。その理由は、前者が入出力関数を意味ある形で表現する物理モデルの構築を目指してきたことに対して、後者は入出力関数の究極的な近似により表現する経験モデルを構築することを目指していると考えられるからである。機械学習による経験モデルは便利でありまた精度も高いが、それでも物理的モデルには意義があることを忘れるべきではない。機械学習による経験的モデルは常に真の入出力関数の究極的な近似にすぎず、シンプルな物理モデルを導くことができる場合は、物理モデルを優先するべきである。そのことはその分野の学理の理解に必ず役立つに違いない。一方、複雑系になるほど、経験的モデルが活躍する場面が出てくると思われる。

最後に、この研究分野を一相発展させるためにはなによりも人材育成が極めて重要である。教育機関においては、数学、情報工学、および材料工学を、縦横に自由自在に融合できる人材を育成する教育システムへの抜本的改革の必要性を強く訴えたい。鉄鋼は世界に冠たる我が国のお家芸であり、材料

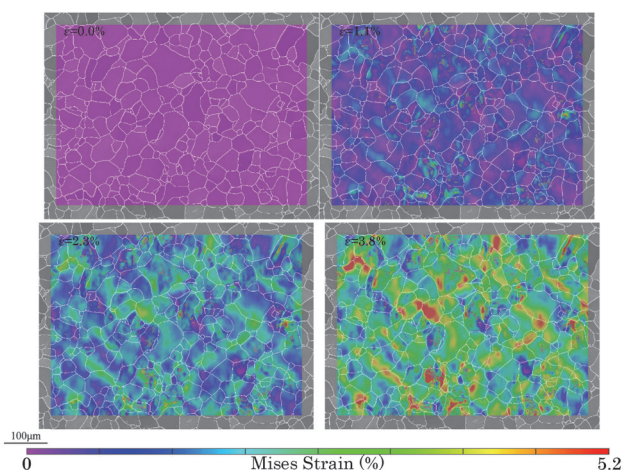


図9 デジタル画像相関法によるフェライト鋼のひずみ分配挙動解析例

分野における真の未来：国家100年の計を創るのは、日本鉄鋼協会からと信じる次第である。

## 謝辞

本稿の内容は日本鉄鋼協会鉄鋼インフォマティクス研究会で得た成果の一部を紹介したものである。研究会を進めるにあたって、企画、共通試料作製、実験、議論と精力的に活動をしてくださったメンバー各位に衷心より感謝の意を表する。

## 参考文献

- 1) A.Seko, A.Togo, H.Hayashi, K.Tsuda, L.Chaput and I.Tanaka : Physical Review Letters, 115 (2015) 20, 1.
- 2) 足立吉隆, 田口茂樹, 弘川奨悟 : 鉄と鋼, 102 (2016) 12, 722.
- 3) 田口茂樹, 弘川奨悟, 安田格, 徳田耕平, 足立吉隆 : 鉄と鋼, 103 (2017) 3, 142.
- 4) 足立吉隆, 松下康弘, 上村逸郎, 井上純哉 : システム／制御／情報, 61 (2017) 5, 188.
- 5) 足立吉隆, 新川田圭介, 奥野晃弘, 弘川奨悟, 田口茂樹, 定松直 : 鉄と鋼, 102 (2016) 1, 47.
- 6) J.Mockus : Bayesian approach to global optimization : theory and applications, Kluwer Academic, (2013)
- 7) J.Mockus : On Bayesian Methods for Seeking the Extremum, Optimization Techniques, Springer, (1974), 400.
- 8) J.Mockus : On Bayesian Methods for Seeking the Extremum and their Application, IFIP Congress, North-Holland, (1977), 195.
- 9) J.Mockus : Bayesian Approach to Global Optimization, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, (1989)
- 10) Y.Adachi : Proc. The First International Conference on 3D Materials Science, 2012, TMS, Springer, (2016)
- 11) 弘川奨悟, 田口茂樹, 松下康弘, 足立吉隆 : 鉄と鋼, 103 (2017) 8, 468.
- 12) H.Akaike : Information theory and an extension of the maximum likelihood principle, Proc. of the 2nd International Symposium on Information Theory, B.N.Petrov and F.Caski (eds.), Akadimiai Kiado, Budapest, (1973), 267 .
- 13) E.Brochu, V.M.Cora and N.de Freitas : arxiv : 1012.2599v1.
- 14) Y.Yan : rBayesian Optimization : Bayesian Optimization of Hyperparameters. R package, version 1.1.0. <https://CRAN.R-project.org/package=rBayesianOptimization>, (2016)
- 15) 古君修, 竹田祐, 山本正之, 荒牧正俊, 宗藤伸治, 竹内晃久, 井手洋文, 中崎盛彦 : 鉄と鋼, 103 (2017) 8, 475.
- 16) 田中雄太, 廣佐古晃, 佐藤紘一, 足立吉隆 : 陽電子消滅分光法を用いたIF鋼の延性破壊ボイド生成挙動の解析, 鉄鋼インフォマティクス研究会成果報告書, 日本鉄鋼協会, (2017), 203.

(2018年2月21日受付)