

低合金鋼の組成データに対する多次元尺度構成法の適用と鋼種推定

古賀 義人^{*1}

Application of Multi Dimensional Scaling about Low-Alloy Steel Composition Data and Metal Grade Identification

Yoshito Koga^{*1}

日本産業規格（JIS）には一般機械構造用鋼や工具鋼などの低合金鋼として、100種類前後が規格化されている。機械電子研究所では現在、鋼種推定の相談を受けた際は組成分析による特徴的な元素を手がかりに、それらがJISを満たしているかを手動で照合している。しかし、この手法は分析結果確認から照合まで時間がかかり、見落としのリスクも否定できない。そこで、本報告では迅速かつ簡便に鋼種を推定できる手法として低合金鋼のJIS組成に多次元尺度構成法（Multi Dimensional Scaling, MDS）を適用し、得られた多次元尺度構成図による推定を試みた。その結果、未知試料の組成を構成図上にプロットすることで、JIS組成との類似性を把握できることが確認された。

1 はじめに

未知試料の分析・同定は化学や材料工学、環境調査など多岐にわたる分野で行われる比較的一般的なプロセスである。多くの場合、未知試料から得られた分析結果を既存のデータベースと照合し、適合度を判定することで分析や同定を試みる¹⁻³⁾。このような手法は有用である一方、対象となる試料数が限定的である場合、検索頻度がそれほど高くない場合に大規模データベースを商用契約して利用することは、経済的・運用的な負担となり頻度の低い分析業務に導入しづらい。

低合金鋼の照合に関しては、合金組成に関する日本産業規格（以下、規格）が公表されており、規格数も100種前後にとどまることから、比較的容易に全規格データを入手でき試料分析結果を人力で規格と比較して鋼種推定を行うことが可能である。しかし、低合金鋼の規格組成は多い場合は十数元素を含む高次元データとなるため、組成表を用いた比較作業は煩雑で見落としのリスクがある。

一方で、多次元尺度構成法（Multi Dimensional Scaling, MDS）は、データ間の類似度に基づいて統計的尺度を近似的に保つよう、高次元データを低次元空間に再配置する可視化手法であり、データ間の位置関係や傾向を直感的に把握しやすくなる⁴⁾。このため、MDSを低合金鋼の規格と未知試料に適用できれば、従来の全てを手作業に頼る照合より見落としリスクを低

減できる手法として期待できる。

そこで本研究では、規格の低合金鋼組成データにMDSを適用し、未知試料の組成とともに多次元尺度構成図上にプロットすることで、未知試料がどの規格と類似性が高いか簡易な推定することを試みた。

本報告では、低合金鋼の規格組成をMDSに適用する際のデータ化方法と解析手順について述べ、次に実際に未知試料を解析した事例を示し、提案手法の有用性を検討する。

2 計算方法

MDS の 計 算 は R(version 4.4.1)⁵⁾ および Rstudio(viserion 2024.04.1)⁶⁾を用いた。Microsoft Excelに整理したデータをRスクリプトにより処理した。付録に処理手順とスクリプトを例示する。解析にあたって低炭素鋼における炭素組成の重要性を考慮し、炭素組成の値を4倍にした値を炭素組成の代わりに用いている。

低合金鋼組成は規格により異なる種類の元素によって構成されているが、調査した低合金鋼の規格全体で11元素が用いられていた。本研究では全ての低合金鋼の規格に11元素の組成値を割り振り、これと未知試料の組成をデータとして用いた。この際、各元素の値は規格が示す最高値と最低値の平均を用い、最低値の規定のない組成は0%を最低値としてデータを作成した。

^{*1} 機械電子研究所

3 試料

模擬的な未知試料(以下, Un1)としてS45Cの鋼材を入手し, 履歴不明の鉄塊 (以下, Un2) とともに発光分光分析機 (サーモフィッシャーサイエンティフィック (株) 社製 iSpark8880) による組成分析を行った。Un1およびUn2の組成分析結果の一部を表1に示す。

表1 未知試料の組成

試料名	C (wt.%)	Si (wt.%)	Mn (wt.%)	P (wt.%)	S (wt.%)
Un1	0.462	0.2063	0.788	0.019	0.017
Un2	0.318	0.618	1.396	0.011	0.024

4 計算結果

計算結果として出力された多次元尺度構成図を図1, 図2に示す。これらの図は一般的なPCで数秒程度の実行時間で出力される。MDSにおける横軸縦軸はデータ間の統計的距離情報を低次元空間に再現するため, 新しく作られた座標 (軸) であり具体的な意味を持たない。このため, 図形の回転, 反転等を行っても統計的

意味は保たれる。

図1にはUn1とUn1に近い組成の規格を, 図2にはUn2とUn2に近い組成の規格をプロットした。各規格組成を表わす点は重ならない位置にプロットされており, この多次元尺度構成図上で分別可能であり, 分析値と規格値による明瞭な多次元尺度構成図を作図可能であることが判る。

図1においてUn1がS45Cの点の近くにプロットされたことから, 規格を満足する未知試料は類似する規格組成の近傍にプロットされることを示していると考えている。

図2においてはUn2がSMn433近傍にプロットされた。このため, SMn433などの規格組成との比較を行ったが, 一部成分が規格を満たしておらず, 未知試料Un2はSMn433の規格品ではないことが判った。来歴不詳であるのでこれ以上の調査は出来なかったが, SMn433を製造する際にできた規格外品の可能性も考えられる。

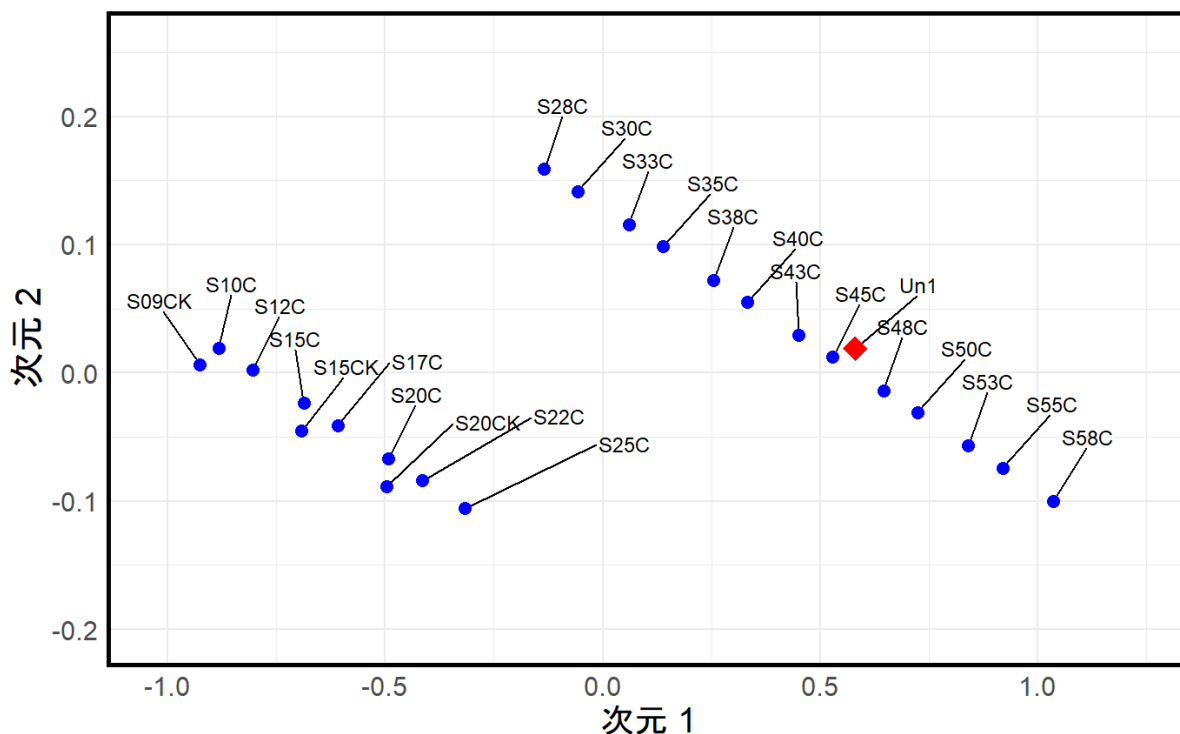


図1 Un1および低合金鋼規格 (一部) の多次元尺度構成図

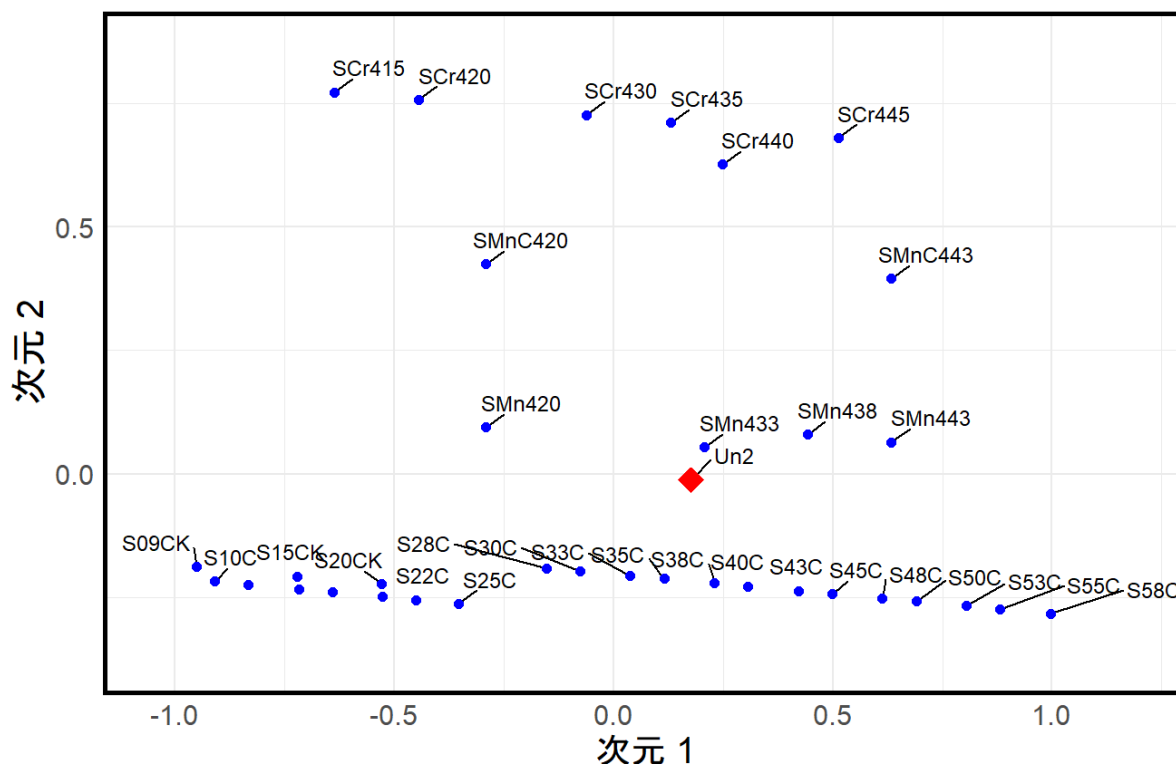


図2 Un2および低合金鋼規格（一部）の多次元尺度構成図

5 考察

一般的なMDSではプロットされるデータは平均0，標準偏差1に正規化されることが多い。本報告の場合であれば各組成ごとに正規化を行うことになるが，値のほとんどが0である組成もあるため，正規化すると極端な値を示す可能性があり，図1，図2の計算においては正規化を行っていない。

また，参照する規格によっては未知試料が規格値の近傍にプロットされないケースもあり，必ずしも最近接の点に対応している規格とは限らないことが判った。

現時点では規格を満たす低合金鋼材としてS45Cの分析しか例がなく，今後も検討・拡充を行っていく予定である。また，多次元データの低次元化による可視化には，MDS以外にも主成分分析法や階層的クラスター分析などもある⁷⁾。令和7年度以降はこれらの方法についても検討する。

6 まとめ

低合金鋼の鋼種の推定の簡便化を目的として，規格組成と模擬的なものを含む未知試料組成をMDSにより解析した結果，以下のことが判明した。

1. 鋼材分析値と規格値による多次元尺度構成図により各規格・分析値を分別できる。

2. 規格を満たす鋼材はその規格の近傍にプロットされる。
3. 任意の鋼材は構成図で近傍にある規格を必ずしも満たすとは限らない。

7 参考文献

- 1) 中山 正雄：軽金属，50巻，5号，pp.246-251 (2000)
- 2) 島 政英：Journal of Surface Analysis, Vol.26, No.1, pp.41-48 (2019)
- 3) 増谷 浩二，落合 周吉：分光研究，第59巻，第3号，pp.149-165 (2010)
- 4) 齋藤堯幸：計測と制御，Vol.22, No.1, pp.126-131 (1983)
- 5) R Core Team：R (v4.4.1)，R Foundation for Statistical Computing (2024) (オンライン) <https://cran.r-project.org/>
- 6) RStudio Team：RStudio (v2024.04.1)，Posit, PBC (2024) (オンライン) <https://posit.co/>
- 7) 秋光 淳生：データの分析と知識発見，pp.231-251，(一財)放送大学教育振興会 (2024)

付録：Rスクリプト

Excelのデータをクリップボードにコピーしたのち、以下のスクリプトをRstudioに実行させれば多次元尺度構成法の図がプロットされる。なお、Excelのデータは下表の形式を用いた。

<pre> # ggplot2 の自動インストールと読み込み if (!require("ggplot2", character.only = TRUE)) { install.packages("ggplot2", dependencies = TRUE) library(ggplot2, character.only = TRUE) } # ggrepel の自動インストールと読み込み if (!require("ggrepel", character.only = TRUE)) { install.packages("ggrepel", dependencies = TRUE) library(ggrepel, character.only = TRUE) } # クリップボードからデータを読み込む data <- read.table("clipboard", header = TRUE, sep = "\t") # 最初の列をデータ名として取り出し data_names <- data[, 1] data_for_mds <- data[, -1] # 定数列またはゼロ列を除去 data_for_mds <- data_for_mds[, apply(data_for_mds, 2, var) != 0] # データの標準化 #data_for_mds_scaled <- scale(data_for_mds) data_for_mds_scaled <- data_for_mds # 特定の列(ここでは1列目)に重みを加える data_for_mds_scaled[, 1] <- data_for_mds_scaled[, 1] * 4 # 1列目の影響をn倍にする # 距離行列を作成(ユークリッド距離を使用) dist_matrix <- dist(data_for_mds_scaled) # 多次元尺度構成法(MDS)を実行(2次元配置) mds_result <- cmdscale(dist_matrix, k = 2) # MDSの結果とデータ名を結合 plot_df <- data.frame(Name = data_names, Dim1 = mds_result[, 1], Dim2 = mds_result[, 2]) </pre>	<pre> # 1行目のみ赤色・filled diamond, サイズを6, それ以外は青色・filled circle, サイズを3とする plot_df\$point_color <- ifelse(1:nrow(plot_df) == 1, "red", "blue") plot_df\$point_shape <- ifelse(1:nrow(plot_df) == 1, 18, 16) # 18: filled diamond, 16: filled circle plot_df\$point_size <- ifelse(1:nrow(plot_df) == 1, 6, 2) # 結果をプロットし, 各点にデータ名を表示 ggplot(plot_df, aes(x = Dim1, y = Dim2, label = Name)) + geom_text_repel(size = 4, nudge_x = 0.08, # X軸方向への微調整 nudge_y = 0.05, # Y軸方向への微調整 direction = 'x', force = 1, # 押しのける強さ max.overlaps = 3 # 重なりを許容する最大数) + geom_point(aes(color = point_color, shape = point_shape, size = point_size)) + scale_color_identity() + # point_color に指定された色をそのまま使用 scale_shape_identity() + # point_shape に指定されたシンボルをそのまま使用 scale_size_identity() + # point_size に指定されたサイズをそのまま使用 theme_minimal() + theme(text = element_text(size = 18), axis.title = element_text(size = 19), plot.title = element_text(size = 22), panel.border = element_rect(colour = "black", fill = NA, size = 2)) + expand_limits(x = c(min(plot_df\$Dim1) - 0.1, max(plot_df\$Dim1) + 0.2), y = c(min(plot_df\$Dim2) - 0.1, max(plot_df\$Dim2) + 0.1)) + xlab("次元 1") + ylab("次元 2") + ggtitle("") </pre>
--	---

表 Excel のデータ形式

規格名	C	Si	Mn	P	S	Ni	Cr	Mo	Cu	W	V
Un2	0.31762	0.61766	1.39631	0.01124	0.02365	0.0796	0.09022	0.01396	0.15576	0.00297	0.03903
S10C	0.105	0.25	0.45	0.015	0.175	0.1	0.1	0	0.15	0	0
S12C	0.125	0.25	0.45	0.015	0.175	0.1	0.1	0	0.15	0	0
S15C	0.155	0.25	0.45	0.015	0.175	0.1	0.1	0	0.15	0	0
S17C	0.175	0.25	0.45	0.015	0.175	0.1	0.1	0	0.15	0	0