

基于 TPE-XGBoost 算法的镍基 600 合金应力腐蚀 裂纹扩展速率预测模型

梅金娜, 王 鹏, 韩姚磊, 蔡 振, 彭群家, 薛 飞

(苏州热工研究院有限公司, 江苏 苏州 215004)

摘 要: 运行经验表明, 应力腐蚀开裂 (SCC) 是镍基 600 合金在压水堆核电站一回路高温高压水环境中的主要失效形式。针对镍基 600 合金 SCC 影响因素多、机理复杂, 现有预测模型应用性不高的问题, 利用 TPE-XGBoost 算法, 通过机器学习挖掘应力强度因子、温度、屈服强度、溶解氢含量、裂纹扩展方向、载荷类型、热处理工艺等影响因素与裂纹扩展速率之间的关系, 建立反映多维数据关联关系的非参数镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展速率预测模型。结果表明, TPE-XGBoost 算法可以实现高维度数据集超参数快速优化, 且有效避免优化结果陷入局部最优解, 使得预测模型具有良好的泛化能力, 将应用于压水堆核电站镍基 600 合金部件反应堆冷却剂条件应力腐蚀裂纹扩展工程预测。

关键词: 贝叶斯优化; XGBoost; 应力腐蚀; 裂纹扩展

中图分类号: TG146.1⁺5; TG172.9; TP181

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2021)07-2399-10

核安全始终是核电发展首要关注的问题。压水堆核电站一回路设备长期处于高温高压水、应力及中子辐照等苛刻环境中, 材料的环境损伤已成为影响核电站长期安全运行的关键问题之一。早期的一回路系统中镍基 600 合金大量使用, 如反应堆压力容器仪表贯穿件及焊缝、反应堆压力容器接管安全端焊缝、蒸汽发生器传热管和水室分隔板等。运行经验表明, 镍基 600 合金在一回路高温高压水环境中具有应力腐蚀开裂 (SCC) 敏感性, 由此导致的一回路关键部件失效事故严重威胁核电站安全运行^[1-3]。

高温高压水环境 SCC 行为影响因素多达 20 余种^[4-6], 包括材料 (化学成分、冷加工和变形组织、焊接结构和组织、晶界结构、表面状态等)、高温高压水环境 (腐蚀电位、水中的溶解氢和溶解氧、pH 值、杂质离子、水流速、辐照中子通量等) 以及应力 (静态和动态结构应力、热应力、应力松弛、焊接和冷加工产生的残余应变和应力) 等, 使得模型建立十分困难。目前, 应力腐蚀裂纹扩展预测模型可分为两类, 一类是基于应力腐蚀开裂机理提出的理论预测模型, 如滑移氧化模型^[7]、FRI 模型^[8]、环境断裂耦合模型^[9]、内氧化模型^[10]等, 具有良好的应力腐蚀现象解释性; 另一类则是依据大量的实

验室数据和工程数据建立的经验预测模型, 如 PMScott 模型^[11]、MRP-55 模型^[12]等, 具有很强的应用基础。由于应力腐蚀行为涉及多因素耦合关联, 这些模型存在应力腐蚀影响因素描述困难、普适性不足和精度不高的问题。比如环境断裂耦合模型可以很好地解释轻水堆核电站中敏化 304 不锈钢的 SCC 行为, 但不能很好地解释镍基 600 合金在阴极电位的开裂行为^[13], 再如 Macdonald 认为滑移氧化模型未考虑 SCC 过程的电荷守恒问题^[14]。而 MRP-55 模型是针对镍基 600 合金依靠大量试验数据拟合建立, 与 SCC 过程和机理无关, 缺少理论依据, 且离散程度大^[15]。因此, 如何建立覆盖影响因素多、适用性广、准确度高的预测模型是当前面临的难题。

机器学习技术具有强大的信息发现和处理能力, 通过算法对数据进行“学习”, 获取数据之间的依赖关系, 从而对未知数据做出预测和判断。近年来, 基于数据驱动的机器学习技术在机器视觉^[16]、模式识别^[17,18]、数据挖掘^[19]等领域的应用愈益广泛。在材料服役行为研究方面, 材料基因工程理论和技术的发展推动材料服役行为模拟计算和实验数据大量产出, 为数据驱动的材料服役行为预测

收稿日期: 2020-08-11

基金项目: 国家重点研发计划项目(2017YFB0702204); 江苏省基础研究计划 (自然科学基金) 面上项目(BK20181177); 姑苏创新创业领军人才专项 (ZXL2017112); 中国博士后科学基金 (2018M642319)

作者简介: 梅金娜, 女, 1981 年生, 博士, 高级工程师, 苏州热工研究院有限公司, 江苏 苏州 215004, E-mail: 393992689@qq.com

奠定了基础,如钛合金的局部腐蚀预测^[20],反应堆压力容器的辐照脆化预测^[21],铁基合金的辐照损伤计算^[22]等。因机器学习技术采用数据驱动,没有固定的模型结构要求,对于处理复杂服役条件核电关键部件材料老化预测问题较采用理论或经验(半经验)方法更加适用。

目前,通常采用线性回归、k近邻、决策树、支持向量机等传统机器学习算法进行建模^[23,24]。这些算法适用于低维数据建模,而在高维数据空间中,易出现处理效率低、欠拟合等问题。镍基600合金应力腐蚀裂纹扩展影响因素多,需要采用适应复杂数据结构的机器学习算法进行建模。极端梯度提升(eXtreme Gradient Boosting, XGBoost)算法能够利用CPU多线程进行高效并行计算,具有非线性切分能力以及良好的过拟合控制机制,相较于传统机器学习算法在针对大样本、高维度数据集的运算方面优势显著,可以有效提高模型运算效率^[25]。因此本文采用XGBoost算法开展建模。

超参数优化是机器学习建模的核心步骤。超参数是指对建模质量起决定性作用的特定变量,如神经网络的隐藏层数、支持向量机的核函数、聚类中类的个数等。目前,常用的超参数优化方法包括:网格搜索^[26]和随机搜索法^[27]。网格搜索是对参数空间所有候选组合的一种穷举搜索,通过给定参数范围和网格步长,建立参数组合的搜索空间,通过循环遍历获得模型最优超参数组合。网格搜索适用于低维度参数搜索空间,当超参数类型增多,步长缩小,则穷举组合的规模就会指数级增长,消耗大量计算资源和时间,而且由于目标参数一般具有非凸特征,网格搜索容易陷入局部最优解。随机搜索与网格搜索建立参数组合搜索空间的方法相同,在超参数组合选择过程中不再是循环遍历,而是采用随机跳转策略,搜索速度有较大提升,但由于随机搜索采样的不确定性,同样容易陷入局部最优解。贝叶斯优化算法是一种基于概率代理模型的近似优化算法^[28],通过先验知识逼近未知函数的后验分布从而调节超参数,极大提高了超参数采样效率,同时可以有效获得全局最优解。

本文针对核电关键部件材料镍基600合金在一回路服役环境条件下的SCC问题,提出一种基于贝叶斯优化的XGBoost算法,采用镍基600合金在模拟压水堆反应堆冷却剂条件下应力腐蚀裂纹扩展实验数据进行建模,基于XGBoost重要性排序与皮尔逊相关系数结合的方法筛选特征变量,与梯度提升决策树、支持向量机、线性回归算法以及不同的超

参数优化方法进行对比,最后通过与MRP-55模型比较分析工程应用性。

1 贝叶斯优化 XGBoost 算法

1.1 XGBoost 算法

XGBoost 算法以分类与回归树(classification and regression tree, CART)作为元学习器,根据上一棵树的训练残差构建下一棵树,经过多次迭代训练建立强学习器,逐步递进优化目标函数,从而获得最佳预测值。

假设模型有 t 个决策树,则模型在第 i 个样本 x_i 下的预测值为:

$$Y_i^{(t)} = \sum_{k=1}^t f_k(x_i) = y_i^{(t-1)} + f_t(x_i), f_k \in F, i \in n, k \in t \quad (1)$$

式中, $y_i^{(t-1)}$ 代表对第 i 个样本进行 $t-1$ 个决策树相加后的值作为预测值, n 为样本总数, F 为所有 CART 决策树的函数集合空间, f_k 为第 k 棵树的决策函数。

目标函数为:

$$L^{(t)} = \sum_{i=1}^n l(y_i, y_i^{(t-1)} + f_t(x_i)) + \Omega(f_t) \quad (2)$$

式中, $l(y_i, y_i^{(t-1)} + f_t(x_i))$ 为损失函数,即预测值和真实值的误差值; $\Omega(f_t)$ 为正则项,用于控制模型复杂程度。

对目标函数进行 2 阶泰勒展开:

$$L^{(t)} \approx \sum_{i=1}^n \left[l(\hat{y}_i^{(t-1)}, y_i) + g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(x_i) \right] + \Omega(f_t) \quad (3)$$

式中, g_i 和 h_i 分别为一阶和二阶导数:

$$g_i = \partial_{y_i^{(t-1)}} l(y_i^{(t-1)}, y_i) \quad (4)$$

$$h_i = \partial_{y_i^{(t-1)}}^2 l(y_i^{(t-1)}, y_i) \quad (5)$$

移除常数项为:

$$L^{(t)} \approx \sum_{i=1}^n \left[g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(x_i) \right] + \Omega(f_t) \quad (6)$$

定义正则项 $\Omega(f_t)$ 为:

$$\Omega(f) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2 \quad (7)$$

式中, T 为树 f 中叶子节点数; w_j 为树 f 中第 j 个叶子节点上的权重; γ 和 λ 为惩罚系数,使每个叶子

节点的得分更加平滑，同时控制树的复杂程度和缓解过拟合， γ 和 λ 值越大，树的结构越简单。

定义， $G_j = \sum_{i \in I_j} g_i$ ， $H_j = \sum_{i \in I_j} h_i$ ，其中 $I_j = \{i | q(x_i) = j\}$ 为每片叶子上的样本集合，对式 (6) 进行求导，可求得叶子节点最优值 $w_j^* = -\frac{G_j}{H_j + \lambda}$ 。对于由 t 棵决策树组成的树结构 q ，代入最优解得到目标函数为：

$$L^{(t)}(q) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{\left(\sum_{i \in I_j} g_i \right)^2}{\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda} + \gamma T \quad (8)$$

1.2 TPE-XGBoost 算法

贝叶斯优化算法作为一种全局优化算法^[29, 30]，优化过程利用贝叶斯定理，使用概率代理模型拟合目标函数，并根据前序采样结果选择下一个评估点，从而快速达到最优解。

$$p(f | H_i) = \frac{p(H_i | f) p(f)}{p(H_i)} \quad (9)$$

$$H_i = \{(x_1, f(x_1)), \dots, (x_i, f(x_i))\} \quad (10)$$

式中， $p(f)$ 和 $p(H_i | f)$ 分别为 f 的先验概率分布和似然分布， $p(f | H_i)$ 表示在已给定观测数据集合 H_i 时参数 f 条件概率分布，即后验概率分布。

本文选择树结构概率密度估计 (tree-structured Parzen estimator, TPE) 作为概率代理模型，将式 (9) 中 $p(H_i | f)$ 定义为：

$$p(x | y) = \begin{cases} l(x) & \text{if } y < y^* \\ g(x) & \text{if } y \geq y^* \end{cases} \quad (11)$$

式中， $y^* = \min\{(x_1, f(x_1)), \dots, (x_i, f(x_i))\}$ ，表示观测阈值上的最优值； $l(x)$ 为观测值 x 的损失函数小于 y^* 的密度估计， $g(x)$ 表示观测值 x 的损失函数大于等于 y^* 的密度估计。TPE 采用预期改进 (expected improvement, EI) 作为采样函数，选择对目标函数值有优化作用的下一个评估点。

$$EI_{y^*}(x) = \int_{-\infty}^{y^*} (y^* - y) p(y/x) dy = \int_{-\infty}^{y^*} (y^* - y) \frac{p(x/y) p(y)}{p(x)} dy \quad (12)$$

当 $p(y | x)$ 在 $y < y^*$ 处积分为正，设置超参数 x 进行算法建模将产生比观测阈上最优值更好的结果。

令 $\gamma = p(y < y^*)$ ，构造：

$$p(x) = \int_R p(x/y) p(y) dy = \gamma l(x) - (1 - \gamma) g(x) \quad (13)$$

$$\int_{-\infty}^{y^*} (y^* - y) p(x/y) p(y) dy = \gamma y^* l(x) - l(x) \int_{-\infty}^{y^*} p(y) dy \quad (14)$$

代入式 (12) 可得：

$$EI_{y^*}(x) = \frac{\gamma y^* l(x) - l(x) \int_{-\infty}^{y^*} p(y) dy}{\gamma l(x) - (1 - \gamma) g(x)} \propto \left(\gamma + \frac{g(x)}{l(x)} (1 - \gamma) \right)^{-1} \quad (15)$$

式 (15) 表明，当超参数 x 具有最大概率 $l(x)$ 和最小概率 $g(x)$ 时，取得最大 EI 值。TPE 通过 $l(x)$ 和 $g(x)$ 构造样本超参数集合，以 $l(x)/g(x)$ 的形式对 x 进行评估，在每次迭代过程中，算法返回具有最大 EI 值的点 x^* 。

TPE-XGBoost 算法流程见图 1，执行步骤如下：

- 第 1 步：导入原始数据，设定 XGBoost 超参数范围，并随机产生一组初始化参数组合。
- 第 2 步：进行 TPE 概率密度估计，即利用采样函数计算 EI 值，根据前序采样 EI 值选取下一个需要评估的参数组合。
- 第 3 步：将具有最大 EI 值的参数组合输入到 XGBoost 预测模型中进行训练，输出当前超参数下的模型预测结果。
- 第 4 步：若新选出的参数组合的误差符合精度要求，则终止算法执行，输出对应的参数组合以及模型的预测误差。若不符合精度要求，则对采样函数进行修正，重新执行第 2 步，直到满足设定的精度要求为止。

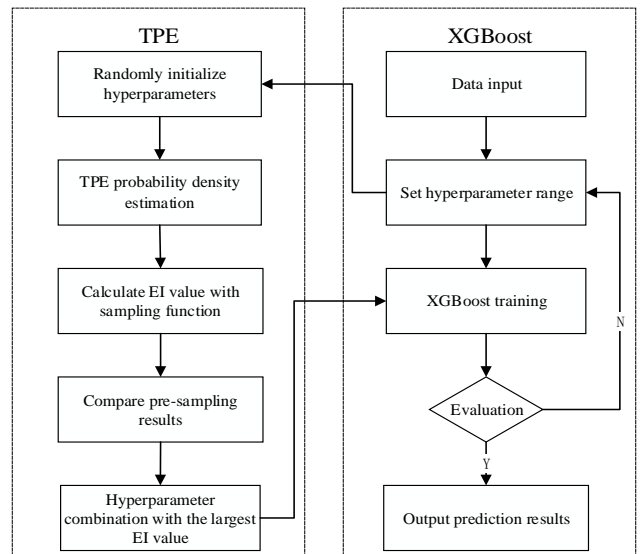


图 1 TPE-XGBoost 算法流程图

Fig.1 Flowchart of TPE-XGBoost algorithm

2 基于 TPE-XGBoost 算法预测镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展速率

2.1 样本及数据预处理

根据核电关键材料服役行为数据特性，开展数据规范化研究，建设核电关键材料服役行为基因工程数据库，数据集由材料基本信息、制造工艺、组织结构、服役环境、服役性能、其他信息和数据来源信息七部分构成，本文利用 340 条镍基 600 合金在模拟压水堆反应堆冷却剂条件下应力腐蚀裂纹扩展实验数据进行建模^[31]，数据特征涵盖材料性能、加工条件、水化学环境等（见表 1）。

XGBoost 算法只接受定量特征值作为输入，而应力腐蚀裂纹扩展速率数据中试样条件、热处理方式、试样类型、裂纹扩展方向和载荷类型属于非连续的类别型变量，因此采用数字编码方式将定性特征值映射为定量特征值，并采用式（16）“Min Max Scaler”方法对数据进行归一化处理，以消除不同量级特征数据对目标函数的影响。

$$X_i = \frac{x_i - \min(x_i)}{\max(x_i) - \min(x_i)} \quad (16)$$

式中， $\max(x_i)$ 为特征数据 x_i 的最大值， $\min(x_i)$ 为特征数据 x_i 的最小值， X_i 为变换之后的数据。

2.2 特征量选择

表 1 镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展数据特征值

Table 1 Characteristic value of stress corrosion crack growth data of Ni-based alloy 600

No.	Characteristic parameters	Value
1	As received condition	AR, MA, HTMA
2	Cold work/%	0~32
3	Processing method	CF, CR, HAZ, HT, TS
4	Product form	CRDM, bar, plate
5	Orientation	C-L, C-R, L-T, S-L, S-T, T-L, T-S
6	Yield strength/MPa	166~827
7	Load type	CK, CL, PPU, bolt
8	K/MPa·m ^{1/2}	7~69
9	Temperature/°C	252~363
10	Dissolved H ₂ /cm ³ ·kg ⁻¹	3~80

Note: AR-as received; MA-mill anneal; HTMA-high temperature mill anneal; CF-cold forged; CR-cold rolled; HAZ-heat affected zone; HT-heat treatment; TS-treat surface; CRDM-control rod drive mechanism; CK-constant stress intensity factor; CL-constant load; PPU-periodic partial unloading

特征丰富的数据集有助于挖掘数据中的信息，提高模型预测准确率。但当数据集中存在冗余特征时，将增加模型分析的复杂度，降低模型泛化性能。XGBoost 算法根据结构分数的增益情况，计算出最优特征变量作为决策树分割点，并对特征变量的重要性进行排序^[32]。由于该排序结果仅体现单个特征变量对预测结果影响的重要程度，无法剔除存在显著线性关系的重复特征；而皮尔逊相关系数是一种准确评价 2 个连续型变量间线性相关程度的统计方法^[33]。皮尔逊相关系数 p 定义为：

$$p = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (17)$$

式中， x_i 和 y_i 为特征变量； \bar{x} 和 \bar{y} 为 n 个数据的平均值； p 取值范围[-1,1]， p 为正值和负值分别表明两变量互为正相关和负相关。皮尔逊相关系数评价标准见表 2。本研究采用 XGBoost 重要性排序与皮尔逊相关系数结合的方法筛选特征变量。

2.3 超参数优化

XGBoost 算法包含常规参数、提升器 (booster) 参数、学习目标参数三类超参数。其中，Booster 参数确定提升树的生成结构，是对模型性能影响最大的参数。本研究选择非线性结构 gbtree 类型 booster 参数进行参数调节，范围如表 3 所示。

2.4 评价标准

通常采用均方根误差 (RMSE) 和拟合优度 (R^2) 作为机器学习回归模型评价指标，但由于 RMSE 是基于平均误差，对异常值敏感，如果回归值产生较

表 2 皮尔逊相关系数评价标准

Table 2 Evaluation standard of Pearson correlation coefficient

Range	Correlation
$0.8 \leq p \leq 1$	Extreme
$0.6 \leq p \wedge 0.8$	Strong
$0.4 \leq p \wedge 0.6$	Moderate
$0.2 \leq p \wedge 0.4$	Low
$0 \leq p \wedge 0.2$	Extremely low or uncorrelated

表 3 XGBoost 算法的主要参数及说明

Table 3 Main parameters and description of XGBoost

No.	Parameter	Range
1	Learning_rate	$1 \times 10^{-5} \sim 1 \times 10^{-1}$
2	Max_depth	1~15
3	Min_child_weight	1~6
4	N_estimators	1~300

大偏差，将导致模型鲁棒性差，因此本文采用分位数误差 (MAPE) 代替 RMSE 作为模型评价指标，提高模型对异常点的鲁棒性。

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (18)$$

3 结果与讨论

3.1 特征量分析结果

图 2a 和 2b 分别为镍基 600 合金裂纹扩展数据皮尔逊相关性分析和特征重要性排序。由于裂纹扩展方向、热处理方式、试样类型、载荷类型为类别型变量，因此未采用皮尔逊系数分析。从图 2a 中可以看出，屈服强度和冷加工程度之间皮尔逊系数值为 0.94，说明两者存在极强线性相关性，且屈服强度特征重要性评分为 53，大于冷加工程度，因此机器学习建模时剔除冷加工程度特征变量。另外，应力强度因子 K 、温度 T 和屈服强度与裂纹扩展速率 CGR 的皮尔逊系数为正，溶解氢含量 DH 与裂纹扩展速率 CGR 的皮尔逊系数为负。从图 2b 可以看出，特征重要性评分由高到低依次为应力强度因子 K 、温度 T 、屈服强度、载荷类型、溶解氢含量 DH、裂纹扩展方向、热处理方式、冷加工程度、试样类型和试样条件。因此，综合皮尔逊相关系数分析和特征重要性排序结果，确定最优特征子集为应力强度因子、温度、屈服强度、载荷类型、溶解氢含量、裂纹扩展方向、热处理方式。这些特征参数均对应力腐蚀裂纹扩展速率有不同程度的影响，这与前人实验研究结果相一致^[34-38]，如：应力强度因子增大导致裂纹尖端应变速率增加，裂纹扩展速率随之升高；由于裂纹扩展过程中所涉及的离子扩散速率、界面反应速率和电化学电位等都是温度的函数，因

此温度 T 对裂纹扩展速率 CGR 的影响极其复杂；屈服强度增大会限制塑性区尺寸，增大裂纹尖端的应变梯度，促进应力腐蚀开裂等。

3.2 XGBoost 建模结果

将镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展数据随机分为训练集和测试集两部分，其中训练集有 300 组数据，用于训练模型，测试集有 40 组数据，用于评估模型训练效果。建模结果见图 3。为说明 XGBoost 算法的性能和准确度，图中同时给出了采用梯度提升决策树、支持向量回归机 (support vector regression, SVR) 和线性回归算法的建模结果。预测值和实验值的 R^2 和线性拟合斜率越接近 1，则模型关联性越强。可以看出，基于非线性的 XGBoost 算法、GBDT 算法和 SVR 算法 R^2 均优于基于线性的 Linner 算法，表明镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展速率与各特征值之间呈现复杂的非线性关系。其中，SVR 算法出现大量异常偏差点，线性拟合斜率偏差大，可能是其核函数在向高维空间映射时稳定性变差的原因。基于树模型的 XGBoost 算法和 GBDT 算法建模结果 R^2 分别为 0.929 和 0.924，MAPE 分别为 0.140 和 0.129，拟合效果显著优于 SVR 算法和 Linner 算法，说明 XGBoost 算法和 GBDT 算法在处理高维度数据集方面具有显著优势。

利用测试集验证模型泛化能力，结果见图 4。可以看出，4 种算法拟合效果均有不同程度下降，但 XGBoost 和 GBDT 算法在测试集上的 R^2 和 MAPE 值仍保持较高水平，线性拟合斜率更接近 1，说明模型泛化能力明显优于 Linner 和 SVR 算法。这是由于 XGBoost 和 GBDT 算法通过构建多棵决策树作为元学习器，基于集成思想对训练数据进行学习，相较于基于单一模型的 SVR 和 Linner 算法，鲁棒性更强，对复杂特征的拟合效果更好；而 XGBoost

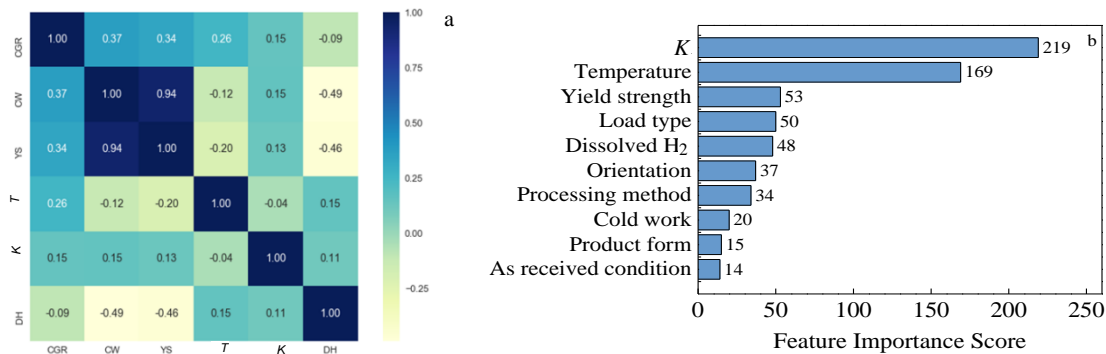


图 2 镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展数据皮尔逊相关性分析和特征重要性排序

Fig.2 Stress corrosion crack growth data of Ni-based alloy 600: (a) Pearson correlation analysis and (b) feature importance ranking

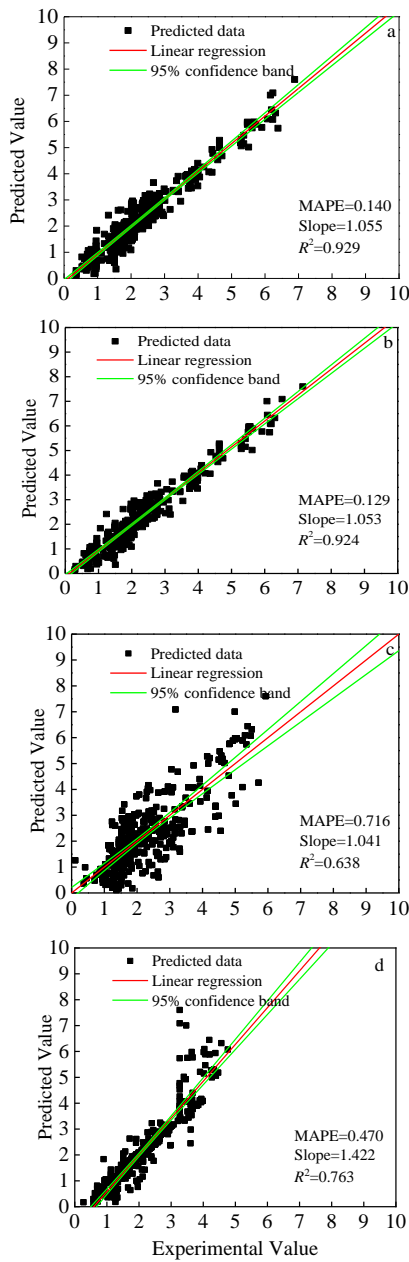


图 3 XGBoost、GBDT、Linner 和 SVR 算法在镍基 600 合金应力腐蚀开裂训练集预测上的结果

Fig.3 Prediction results of XGBoost (a), GBDT (b), Linner (c) and SVR (d) algorithms on stress corrosion cracking training set of Ni-based 600 alloy

算法相较于 GBDT 算法在代价函数中加入正则项，同时对叶子节点上的权重 w_j 进行了平滑处理，能够对训练过程中的模型进行简化，使模型泛化能力增强， R^2 更高，并有效防止过拟合。

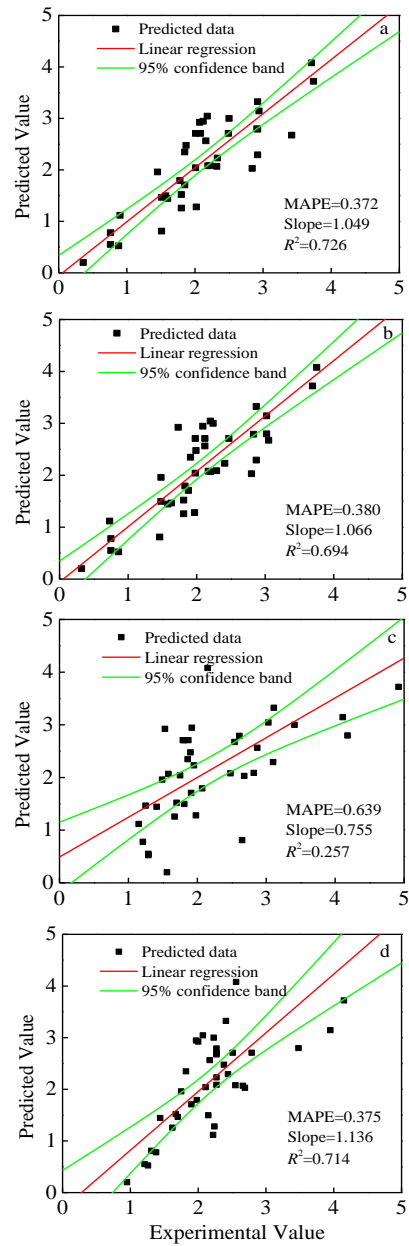


图 4 XGBoost、GBDT、Linner 和 SVR 算法在镍基 600 合金应力腐蚀开裂测试集上的预测结果

Fig.4 Prediction results of XGBoost (a), GBDT (b), Linner (c), and SVR (d) algorithms on the stress corrosion cracking test set of Ni-based alloy 600

3.3 超参数优化结果

贝叶斯优化算法获得超参数组合及参数寻优时间见表 4，为与随机搜索 (rand search)、网格搜索 (grid search) 参数优化算法进行比较，将 3 种算法的参数调节范围设置为相同组合，其他参数采

表 4 不同算法超参数寻优结果

Table 4 Hyperparameter optimization results of different algorithms

Algorithms	XGBoost	TPE	Grid search	Rand search
Learning_rate	0.3	0.028	0.1	0.078
Max_depth	6	3	5	6
Min_child_weight	1	4	3	3
N_estimators	10	257	151	91
Time/s	0	47	1013.75	295.18

用默认值进行建模。发现由于网格搜索算法需遍历参数空间内所有参数组合，产生大量不必要的迭代计算，导致运算时间长，寻优速度慢；贝叶斯优化和随机搜索算法通过对参数空间的随机取样，寻优速度较网格搜索算法分别提升 21 倍和 3 倍。图 5 为贝叶斯优化过程中超参数采样的核密度估计图。虚线表示贝叶斯优化得到的超参数最优值。可以看出，贝叶斯优化算法由于采用主动选择前序采样的策略，相较随机搜索算法的随机跳转寻优策略，可有效地减少不必要的采样，寻优效率提升 6 倍。

采用表 4 所列基于各寻优算法得到的超参数对镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展速率进行建模，训练集

上的模型预测结果见图 6。可以看出，原生 XGBoost 模型，数据点分布较为分散，参数调优后， R^2 提高，MAPE 下降，线性拟合斜率更接近 1，算法精度得到提升。其中贝叶斯算法、网格搜索算法和随机搜索算法优化超参数模型 R^2 分别提高 6%、5% 和 4%，MAPE 分别降低 79%、69% 和 57%。测试集上的模型预测结果见图 7，与原生 XGBoost 模型相比，贝叶斯算法优化超参数使得模型 R^2 提高 8.4%、MAPE 降低 8.3%，网格搜索算法优化超参数使得模型 R^2 提高 0.55%、MAPE 降低 1.88%，随机搜索算法优化超参数使得模型 R^2 降低 1.65%、MAPE 提高 0.8%。说明针对镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展速率建模问题，在相同超参数搜索范围内，贝叶斯优化算法相较于网格搜索算法和随机搜索算法可有效地进行全局搜索，避免超参数优化结果陷入局部最优解。

3.4 TPE-XGBoost 模型工程应用性分析

EPRI 的 MRP-55 模型^[12]是行业内应用较为广泛的镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展预测模型，本文通过与 MRP-55 模型比较，分析 TPE-XGBoost 模型的工程应用性。MRP-55 模型表达式为：

$$CGR = \alpha K^\beta \exp\left(\frac{-Q}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \frac{f_{H_2}}{f_{H_2ref}} \quad (19)$$

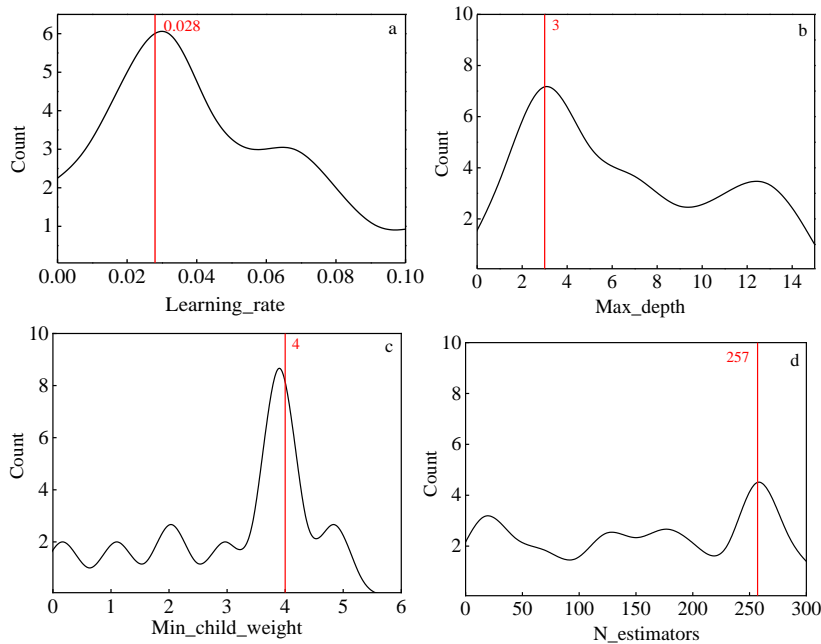


图 5 贝叶斯优化超参数采样的核密度估计图

Fig.5 Kernel density estimation diagram of Bayesian optimization hyperparameter sampling: (a) Learning_rate, (b) Max_depth, (c) Min_child_weight, and (d) N_estimators

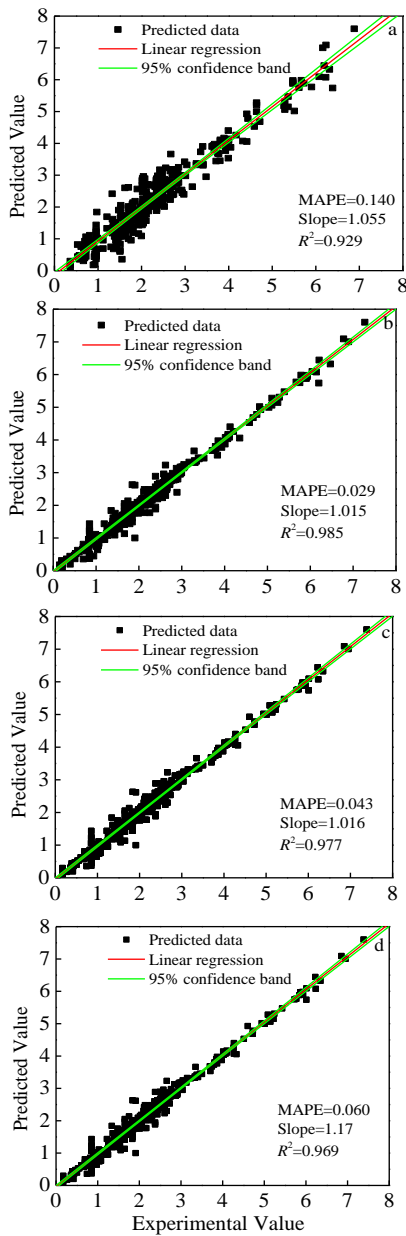


图 6 XGBoost、TPE-XGBoost、Grid-XGBoost、Rand-XGBoost 优化算法在镍基 600 合金应力腐蚀开裂训练集上的预测结果

Fig.6 Prediction results of XGBoost (a), TPE-XGBoost (b), Grid-XGBoost (c), and Rand-XGBoost (d) optimization algorithms on the stress corrosion cracking training set of Ni-based 600 alloy

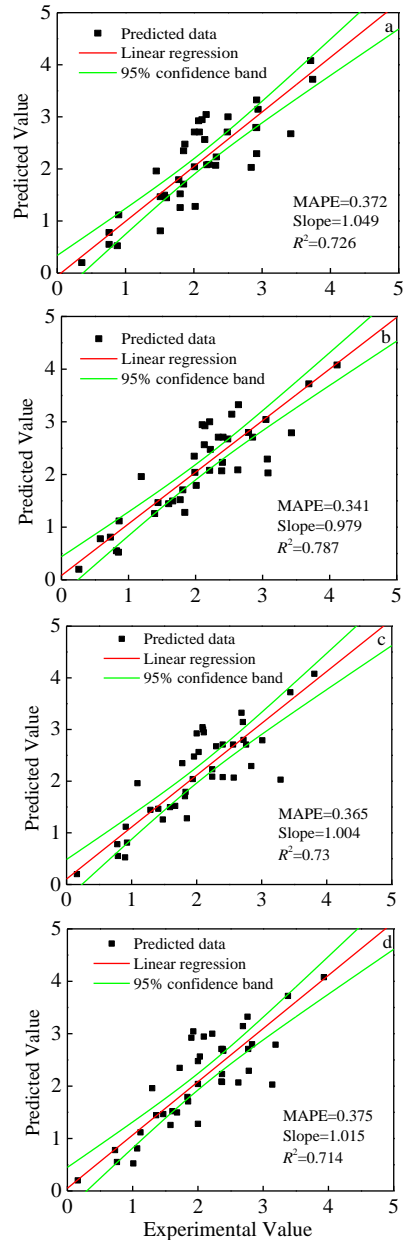


图 7 XGBoost、TPE-XGBoost、Grid-XGBoost、Rand-XGBoost 优化算法在镍基 600 合金应力腐蚀开裂测试集上的预测结果

Fig. 7 Prediction results of XGBoost (a), TPE-XGBoost (b), Grid-XGBoost (c), and Rand-XGBoost (d) optimization algorithms on the stress corrosion cracking test set of Ni-based alloy 600

式中，CGR (m/s) 为温度 T 下裂纹生长速率； Q 为裂纹扩展激活能，约为 120 kJ/mol； R 为气体常量，值为 8.314×10^{-3} kJ/mol K； T 为裂纹扩展时对应的绝对温度； $T_{ref}=598.15$ K (325 °C) 为归一化数据时所对应的参考温度； α 为裂纹扩展速率系数，325 °C

时 $\alpha=1.19 \times 10^{-13}$ m/s； K (MPa m^{1/2}) 为裂纹尖端应力强度因子； β 为指数，其值为 2； $\frac{f_{H_2}}{f_{H_2ref}}$ 为溶解氢因子，通过镍基 600 合金不同温度和氢浓度条件下溶解氢因子数据表查寻或者线性内插计算得到。

由于 MRP-55 模型适用于材料屈服强度小于 600 MPa 的情况, 因此, 本文筛选出符合上述条件的 32 条数据作为测试集进行预测。图 8 为 TPE-XGBoost 模型和 MRP-55 模型在镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展测试集上的预测结果。可以看出, TPE-XGBoost 模型较 MRP-55, R^2 由 0.197 提高至 0.819、MAPE 由 0.286 降低至 0.104、线性拟合斜率更接近 1, 较 MRP-55 模型分别提高 315.7% 和降低 63.6%。说明其预测效果更优, 可以更好地表征 SCC 特征参数与裂纹扩展速率之间的关联。这是由于与 MRP-55 模型相比, TPE-XGBoost 模型通过挖掘 SCC 特征参数与裂纹扩展速率之间的关系来建立反映多类型、高维度数据关联关系的非参数预测模型, 影响因素考虑更全, 预测精度提升更大, 为压水堆核电站镍基 600 合金部件反应堆冷却剂条件下应力腐蚀裂纹扩展工程预测提供了新方法。

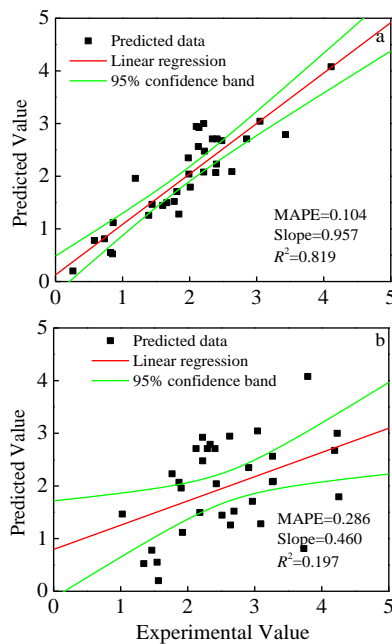


图 8 TPE-XGBoost 和 MRP-55 模型在镍基 600 合金应力腐蚀开裂测试集预测结果

Fig.8 Prediction results of TPE-XGBoost (a) and MRP-55 (b) on the stress corrosion cracking test set for Ni-based 600 alloy

4 结 论

1) 基于皮尔逊相关系数和 XGBoost 特征重要性评分结果, 得到机器学习建模最优特征子集为应力强度因子、温度、屈服强度、载荷类型、溶解氢含量、裂纹扩展方向、热处理方式。

2) XGBoost 算法和 GBDT 算法在处理高维度数据集方面具有显著优势, 模型泛化能力显著优于 SVR 算法和 Linner 算法。

3) 贝叶斯优化算法由于采用主动选择前序采样的策略, 通过有效的全局搜索, 可实现较网格搜索算法和随机搜索算法优化效率提升数倍、避免超参数优化结果陷入局部最优解。

4) 基于 TPE-XGBoost 算法的镍基 600 合金应力腐蚀裂纹扩展速率预测模型通过挖掘各影响因子与裂纹扩展速率之间的关系, 建立反映多维数据关联关系的非参数预测模型, R^2 和 MAPE 分别为 0.819 和 0.104, 较 MRP-55 模型分别提高 315.7% 和降低 63.6%, 可应用于压水堆核电站镍基 600 合金部件反应堆冷却剂条件下应力腐蚀裂纹扩展工程预测。

参考文献 References

- [1] Fang Xiurong(方秀荣), Yang Jinhui(杨锦辉), Shao Yanru(邵艳茹) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(8): 2424
- [2] Xue He(薛 河), Cui Yinghao(崔英浩), Li Gangbo(李岗博) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2018, 47(8): 2365
- [3] Hwang S S. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2013, 443(3): 321
- [4] Seo D, Ogawa K, Makao Y *et al. Surface and Coatings Technology*[J], 2009, 203(14): 1979
- [5] Yamazaki S, Lu Z P, Ito Y *et al. Corrosion Science*[J], 2008, 50(3): 835
- [6] Xue H, Wang Z W, Zhao L Y *et al. Applied Mechanics and Materials*[J], 2014, 457: 593
- [7] Andresen P L, Ford F P. *Materials Science and Engineering A*[J], 1988, 103: 167
- [8] Shoji T, Lu Z, Murakami H. *Corrosion Science*[J], 2010, 52(3): 769
- [9] Macdonald D D, Lu P C, Yeh T K. *Corrosion*[J], 1996, 52(10): 768
- [10] Scott P M, Calvar M L. *Sixth International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems—Water Reactors*[C]. San Diego: The Minerals, Metals & Materials Society, 1993: 657
- [11] Scott P M. *Proc. of the Specialists Meeting on Operating Experience with Steam Generators, Brussels*[C]. Brussels: Committee on the Safety of Nuclear Installations, 1991: 5
- [12] Hickling J, McIlree A, Pathania R. *Materials Reliability Program (MRP): Crack Growth Rates for Evaluating Primary Water Stress Corrosion Cracking (PWSCC) of Thick-wall Alloy 600 Materials (MRP-55) Revision 1,1006695*[R]. Palo Alto: EPRI, 2002

- [13] Li Z, Lu Y, Wang X. *Journal of Materials Science*[J], 2020, 55(3): 439
- [14] Macdonald D D. *Corrosion Science*[J], 1996, 38(6): 1003
- [15] Lu Z P, Shoji T, Xue H *et al.* *Journal of Pressure Vessel Technology*[J], 2013, 135(2): 235
- [16] Shin H C, Roth H R, Gao M *et al.* *IEEE Transactions on Medical Imaging*[J], 2016, 35: 1285
- [17] Miao S F, Vespier U, Cachucho R *et al.* *Information Sciences*[J], 2016, 329(2): 950
- [18] Gong X Y, Fong S, Wong R K *et al.* *The Journal of Supercomputing*[J], 2016, 72(10): 3850
- [19] Tsai C W, Lai C F, Chiang M C *et al.* *IEEE Communications Surveys & Tutorials*[J], 2014, 16: 77
- [20] Kamrunnagar M, Urquidi-Macdonald M. *Corrosion Science*[J], 2010, 52(3): 669
- [21] Mathew J, Parfitt D, Wilford K *et al.* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2018, 502: 311
- [22] Castin N, Pascuet M I, Messina L *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2018, 148: 116
- [23] Preacher K J, Curran P J, Bauer D J *et al.* *Journal of Educational and Behavioral Statistics*[J], 2006, 31(4): 437
- [24] Jindal A, Dua A, Kaur K *et al.* *IEEE Transactions on Industrial Informatics*[J], 2016, 12(3): 1
- [25] Chen T Q, Guestrin C. *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*[C]. New York: Association for Computing Machinery, 2016: 785
- [26] Bhat P C, Prosper H B, Sezen S *et al.* *Computer Physics Communications*[J], 2018, 228: 245
- [27] Bergstra J, Bengio Y. *Journal of Machine Learning Research*[J], 2012, 13(1): 281
- [28] Guo J, Yang L, Bie R *et al.* *Computer Networks*[J], 2019, 151(14): 166
- [29] Xia Y F, Liua C Z, Li Y. *Expert Systems with Applications*[J], 2017, 78(2): 225
- [30] Zhang L, Tang Y, Hua C *et al.* *Applied Soft Computing*[J], 2015, 28: 138
- [31] Jenks A, White G, Burkardt M. *Materials Reliability Program: Crack Growth Rates for Evaluating Primary Water Stress Corrosion Cracking (PWSCC) of Thick-wall Alloy 600 Materials and Alloy 82, 182, and 132 Welds (MRP-420, Revision 1)*, 3002014244[R]. Palo Alto: EPRI, 2018
- [32] Ma X J, Sha J L, Wang D H. *Electronic Commerce Research and Applications*[J], 2018, 31: 24
- [33] Biesiada J, Duch W. *Computer Recognition Systems 2*[J], 2007, 45: 242
- [34] Moshier W, Brown C. *Corrosion*[J], 2000, 56(3): 307
- [35] Hou J, Peng Q J, Shoji T. *Corrosion Science*[J], 2011, 53(9): 2956
- [36] Zhai Z, Toloczko B, Olszta M J *et al.* *Corrosion Science*[J], 2017, 123: 76
- [37] Terachi T, Yamada T, Miyamoto T *et al.* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2012, 426(1-3): 59
- [38] Han E H, Wang J Q, Wu X Q *et al.* *Acta Metallurgica Sinica*[J], 2010, 46(11): 1379

Prediction of Stress Corrosion Crack Growth Rate of Ni-base Alloy 600 Based on TPE-XGBoost Algorithm

Mei Jinna, Wang Peng, Han Yaolei, Cai Zhen, Peng Qunjia, Xue Fei
(Suzhou Nuclear Power Research Institute, Suzhou 215004, China)

Abstract: Stress corrosion cracking (SCC) endangers structural integrity of the nickel-base alloy 600 components widely used in the water environment of high temperature and high pressure in pressurized water reactors (PWRs). Due to the complexity of the interweaving influences, the existing prediction models developed for SCC are limited for engineering assessment by accuracy. In this study, a non-algebraic model with multi-dimensional data associations was developed for predicting the SCC growth rate of the Ni-base alloy 600, which utilized the TPE-XGBoost machine learning algorithm to describe the correlation between the multiple characteristic parameters including stress intensity factor, temperature, yield strength, dissolved hydrogen content, crack propagation direction, load type, heat treatment process and SCC growth rate. It is found that the TPE-XGBoost algorithm could achieve rapid global optimization of multi-dimensional data sets rather than the local optimal values. The obtained SCC model with sound generalization ability demonstrates potential engineering application on SCC growth rate prediction of Ni-base alloy 600 components in PWRs.

Key words: Bayesian optimization; XGBoost; SCC; crack growth

Corresponding author: Mei Jinna, Ph. D., Senior Engineer, Life Management Technology Center, Suzhou Nuclear Power Research Institute, Suzhou 215004, P. R. China, E-mail: 393992689@qq.com