材料インフォマティクスによる革新的な 材料開発に向けて

小 石 正 隆

Toward Innovative Materials Development by Materials Informatics

Masataka KOISHI (The Yokohama Rubber Co., Ltd., 2-1 Oiwake, Hiratsuka, Kanagawa 259-1217, Japan) masataka.koishi@y-yokohama.com

Expectation to materials informatics increases toward innovative materials development. Materials informatics is the methodology based on numerical simulation and data mining using machine learning. The objective of this report is to mention an introductory effort for the materials informatics of filled rubber. At first, two data mining techniques i.e. self-organizing map and decision tree which is a kind of machine learning are presented to show their effectiveness with the example of the multi-objective design exploration for the tire shape design. The case for microstructure designs of rubber material becomes the same procedure, too. Next, we mention the other important issues for the materials informatics of materials having microstructure i.e. characterization of morphology and construction of simulation model using the morphological parameters. Morphological measures and random morphological modeling are introduced for their purpose.

(Received on March 10, 2016)

Key Words : Materials Informatics, Multi-objective Design Exploration, Data Mining, Machine Learning, Self-organizing Map, Morphology, Filled Rubber

1. は じ め に

FEM (Finite Element Method ; 有限要素法) に代表される数値シミュレーションは構造体や流体の挙動を表す偏微分方程式をコンピュータで計算する手法である。コンピュータで製品の評価特性を予測できるため、シミュレーションは自動車など様々な産業界において製品開発の効率化や高度化に利用され、タイヤなどゴム製品の開発においても無くてはならない基盤技術の一つとなっている。従来、シミュレーションは試験評価の代替（仮想試験）として、試作評価のコスト削減や開発時間の短縮という側面で期待を集めていた。しかしながら、本来シミュレーションの優れる点は、実際には見ることができない現象を可視化できることと、試作評価では得られない膨大なデータを様々なシナリオに沿った計算によって獲得できる点にある。

最近、様々なメディアを通じて、IoT (Internet of Things)、ビッグデータ、ディープラーニング (深層学習)

などの言葉をよく見かけるようになった。インターネットやコンピュータの発展を背景に、IoTの普及でビッグデータの取得が容易になりディープラーニングに代表される機械学習によってビジネスに役立つ情報を取得するという図式ができあがってきた。なお、機械学習などによるデータの構造化（整理・統合）と情報の取得はデータマイニングと呼ばれ、データサイエンスと呼ばれる学術領域に含まれる。これを製品や材料の設計開発に当てはめると、製品の形状・構造や材料の微細構造などを特徴付ける設計パラメータを変更したシミュレーション結果から膨大なデー

小石 正隆：横浜ゴム株式会社（〒254-8601 神奈川県平塚市追分2-1）理事、小石研究室研究室長、工博。平成10年、横浜国立大学大学院工学研究科博士課程終了。昭和60年、横浜ゴム株式会社入社、現在に至る。専門は、計算力学。日本ゴム協会ゴムの力学研究分科会主査、日本機械学会フェロー、JACMフェロー。

タ（入力と出力が対になったデータセット）を取得し、機械学習によってこのデータから設計開発に役立つ情報を取得できることになる。これに関連して材料インフォマティクス（Materials Informatics）という学術領域がある。田中功教授によると、「計算機の巨大情報処理能力（データマイニング）を材料研究に応用する学術領域」とある¹⁾。ゴム材料は高分子鎖のネットワーク、カーボンブラックやシリカなどフィラーの分散状態やポリマーの相構造など様々なスケールの微細構造を有している。データマイニングによって、フィラー充填ゴムの様々な力学特性（粘性、弾性、強度など）とその微細構造の特徴量に関する画期的な情報を獲得できれば、その情報に基づいた革新的なゴムの材料開発が期待できる。

一方、この材料インフォマティクスは、筆者らが推進している多目的設計探査^{2,3)}と類似している。多目的設計探査は、シミュレーションを革新的な設計開発に役立てるために、シミュレーションと進化計算による最適化とデータマイニングを連携させたフレームワークである。これまでは多目的設計探査を主にタイヤの形状・構造設計に適用してきたが、現在はゴム材料の微細構造設計への適用に取り組んでいる。

さて、本稿ではフィラー充填ゴムを対象とした材料インフォマティクス実現に向けた取り組みについて紹介する。まず、材料インフォマティクスの要であるデータマイニングについて、タイヤ形状の多目的設計探査を事例として解説する。タイヤの形状設計が対象ではあるが、ゴムの微細構造設計を対象とする場合も同じ手順となる。次に、微細構造を有するゴム材料の材料インフォマティクスにおいて重要な課題であるモルフォロジーの特徴表現とシミュレーションモデルの構築について一つの解決策を示す。

なお、本稿では材料インフォマティクスと多目的設計探査の位置づけを明確に区別するために、材料インフォマティクスを材料開発に必要な「シミュレーション」、「分析/計測」と「生産プロセス」の3つのステップを「データサイエンス」で連携させたフレームワークとして拡大的に定義し、多目的設計探査を「シミュレーション」と「データサイエンス（特にデータマイニング）」を連携させた方法論として定義したい。材料インフォマティクスの意味合いが拡大解釈されているかもしれないがご容赦いただきたい。

2. 多目的設計探査

タイヤに要求される特性は転がり抵抗や摩耗など多岐にわたるため、タイヤ設計の現場では多くの判断基準を考慮した意思決定が必要となる。また、タイヤの要求特性は、ある特性を良くすると他の特性が悪くなるトレードオフ関係にあることが少なくない。そのため、設計で解決すべき

課題を定式化した設計問題は多目的最適化問題となる。例えば、「転がり抵抗と偏摩耗を従来タイヤよりも改善できるタイヤの断面形状を見出す。ただし、タイヤの外径や幅は規格に収まる範囲とする。」というような問題が設定される。一般に多目的最適化では唯一無二の最適解が存在するわけではなく、パレート解と呼ばれる解集合が現れる。パレート解は何れも最適解の条件を満たすものの、トレードオフ関係にある特性比率（特性バランス）が異なる。通常、我々はパレート解を含むデータに対しデータマイニングを実施している。パレート解をデータマイニングの対象とするのは、特性の高次バランスに繋がる情報がその裏に隠れているからである。もちろん、最適化を行わず、パラメトリックスタディなどで得られたデータをデータマイニングの対象としても良い。

多目的設計探査の流れを図1に示す。まず、解決すべき設計問題を定式化する。すなわち、最適化したい評価特性（目的関数）、形状など設計対象を変更する変数（設計変数）とその変更範囲、規格などの制約（制約条件）を決定する。この問題定義によって得られる評価特性の範囲（解空間、あるいは目的関数空間）が定まるため、このステップは多目的設計探査の中で最も重要である。問題定義が悪いと、改善案が含まれない解空間となる。また、この問題設定如何では、従来の延長線上の改善情報ではなく、革新的な情報も期待できるため、この問題設定こそ技術者（人）が担うべき創造的なステップである。

次にパレート解を探索する過程からデータを取得する。シミュレーションと進化計算をツールとして使い、このステップではコンピュータが活躍する。現在のスーパーコンピュータは大量の演算装置を備えており並列計算向きとなっているが、進化計算ではお互いに独立なシミュレーションを並列計算するため並列計算向けのスーパーコンピュータとの相性が非常に良い。ここで、データとは複数の評価特性（出力）と設計変数（入力）とが対になったデータ集合である。また、設計変数以外の注目すべき寸法値などもこのデータに含めることが多い。ここでの最適化は特性改善に繋がる情報を見出せるデータを得ることが目的であり、筋の良いデータを取得するためのフィルターと見なすことができる。最適解そのものを見出すことが多目的設計

図1 多目的設計探査の流れ

探索の目的ではない。

さて、データマイニングが次のステップである。データマイニングの手法として、我々は自己組織化マップ (Self-Organizing Map)^{4,5)} と機械学習を用いている。機械学習というとコンピュータが全自動でやってくれそうな印象を抱きがちであるが、少なくとも機械学習の一種である決定木 (Decision Tree)⁶⁾ で適切に情報 (ルール) を得るには技術者のスキルと解決志向が要求される。なお、データマイニングの実例については後ほど説明する。

データマイニングで得られた設計情報は設計開発における意思決定で利用する。その設計情報はシステムに組み込むこともできるし、人が独自に判断することも可能である。なお、多目的設計探索は一度で終了するわけではなく、問題の再設定を含めて何度か繰り返すことで革新的な情報が取得できるようになっていく。

3. 多目的設計探索におけるデータマイニング

それでは、低燃費タイヤの形状設計を事例として多目的設計探索におけるデータマイニングについて説明する。ここでは、低燃費性を表す評価特性としてタイヤの転がり抵抗 (RollRes: 最小化) を、また、タイヤの基本的な機械特性を表す3つのばね特性 (横ばね (LatStiff: 最大化), 縦ばね (VertStiff: 最小化), 前後ばね (LongStiff: 最大化)) を改善するためのタイヤ断面の形状特徴を見出す問題を考える。

3.1 タイヤ断面の形状定義

対象とする基準タイヤ (195/65R15) の有限要素モデルを図2に示す。タイヤの断面形状は複数の円弧を用いて定義されるため、それらの半径や中心座標などの寸法データを設計変数とすることが考えられる。しかしながら、通常的设计範囲から取って逸脱するために、ここではベシスベクトル法という方法でタイヤ断面形状を定める。それは、複数の基本形状 (ベシスベクトル) を予め準備し、それらの線形和 (係数を乗じて足し合わせる) で新た

な形状を定める方法であり、式 (1) で表すことができる。

$$Y = Y_0 + \sum_i X_i (\chi_i - Y_0) \quad (1)$$

ここで、 Y_0 は基準タイヤの有限要素モデルの節点座標を、 χ_i は i 番目のベシスベクトルの節点座標を、 X_i は i 番目の係数を表す。

この方法では、各ベシスベクトルに乗じる係数が直接的な設計変数となる。ベシスベクトルの形状と係数の組み合わせによって設計空間が定義される。ベシスベクトルの形状は任意であるが、本事例では基準タイヤの振動固有値計算で得られる固有ベクトルを元に7つのベシスベクトルを定めた。

3.2 進化計算による多目的最適化

ここでは、先に述べた4つの目的関数が最適 (転がり抵抗: 最小化, 横ばね: 最大化, 縦ばね: 最小化, 前後ばね: 最大化) となるタイヤ断面形状を表す7つの設計変数 (ベシスベクトルの係数) を探索する最適化問題に多目的遺伝的アルゴリズムと呼ばれる進化計算を適用した。なお、遺伝的アルゴリズムによる多目的最適化については参考文献⁷⁾などを参照されたい。

3.3 データマイニング

はじめに自己組織化マップによる視覚的なデータマイニングを示し、次に機械学習によるデータマイニングについて説明する。

目的関数が2つの場合はパレート解を2次元散布図として可視化できるものの、目的関数が3つの場合はパレート解空間が3次元空間となるため図やグラフでその全容を可視化するのは難しく、まして4つ以上の場合には全く困難となる。そこで活躍するのが自己組織化マップ (以下 SOM と記す) である。SOM は教師なしニューラルネットワークの一種であり、学習過程で多次元空間のデータを2次元平面上に写像できる。SOM では目的関数など多次元空間のデータ間の距離でデータ同士の類似度を定義し、距離の近いデータ (類似するデータ) が2次元平面上でも近くなるように写像される。2次元平面の SOM はノードと呼ばれる六角形の集まりであるが、各ノードには SOM を作成した多次元データ (及びそれらに関連したデータ) を保存できる。例えば、4つの目的関数で作成した SOM の各ノードには、目的関数の4つのデータだけではなく関連する設計変数も保存できる。したがって、SOM 上に目的関数や設計変数の値をコンター表示 (可視化) することができ、それらを並べて表示することで視覚的に目的関数間の相関関係を把握できるだけでなく、目的関数と設計変数との因果関係も理解できる。また、SOM は階層的なクラスタリングも可能である。クラスタリングすることで、データマイニングが容易になると共に、得られた情報を伝達し易くなる。

図2 基準となるタイヤ形状のシミュレーションモデル

進化計算で得られた約2,000個に及ぶパレート解の目的関数で作成したSOMを図3に示し、そのSOMに各目的関数の値をコンター表示したものを図4に示す。図3に示すSOMは約2,000個の六角形のノードからなっている。また、データマイニングの結果を説明しやすくするために計16のクラスター (C1-C16) に分割している。図4より、転がり抵抗 (RollRes) が最小となるクラスターはC7であり、横ばね (LatStiff) が最大となるクラスターはC3であることが分かる。さらに、転がり抵抗と横ばねが適度にバランスしたクラスターはC1, C2とC4であることがこれらの図から分かる。また、4つのコンター図を比較することで、目的関数間の関連性を読み取ることができる。例えば、転がり抵抗 (RollRes: 最小化)、横ばね (LatStiff: 最大化) と縦ばね (VertStiff: 最小化) はそれぞれの好ましいクラスターが異なるためトレードオフの関係があることが分かる。一方、横ばね (LatStiff: 最大化) と前後ばね (LongStiff: 最大化) はコンターの色分布が非常に類似している

図3 4種類の目的関数で作成したSOM (全領域を16のクラスターで分類)

ため相関関係があることが分かる。

次に、目的関数と共に7つの設計変数 (X1-X7) を同じマップにコンター表示したものを図5に示す。なお、前後ばねは横ばねと相関しているため省略している。また、ここでは転がり抵抗と横ばねを最も重要視する評価特性とするシナリオを想定し、図5にはそのシナリオに沿ってデータマイニングをナビゲートするための2つの指標 (N値とT値)⁸⁾ も併せて示している。N値は転がり抵抗と横ばねの2目的で形成されるパレートフロントからの距離に基づいた指標を表し、T値は横ばねが最も優れるパレート解 (極限パレート解) からパレートフロントに沿った距離に基づく指標を表している。すなわち、N値は転がり抵抗と横ばねが共に改善する指標を表し、T値はそれらのバランス変化を表す指標となっている。さらに、図の設計変数のコンターは、目的関数空間において設計変数を移動平均することでノイズを取り除いているが詳細は文献³⁾を参照さ

図4 SOMに目的関数の値を表示したコンター図

図5 SOMに3つの目的関数と2つの指標 (N, T) と7つの設計変数 (X1-X7) を表示したコンター図

変数であるという情報が決定木によって得られた。このようにデータマイニングツールにはそれぞれ特徴があるものの、適切に使えばデータに潜む有用な情報をあぶりだすことができる。

- X6はN 値と相関しており，転がり抵抗と横ばねを同時に改善できる設計変数である。
- X5とX7はT 値と相関しており，転がり抵抗と横ばねのバランスを変更できる設計変数である。

4. モルフォロジーの特徴表現

微細構造を有するゴム材料開発のための材料インフォマティクスでは、モルフォロジーの特徴（位相構造）を数値データとして表現することが大きな課題である。材料インフォマティクスの3つのステップをデータサイエンスによって連携させるにはシミュレーションモデルと例えば図7に示す実サンプルのモルフォロジーの特徴を同じく表現することが望まれる。モルフォロジーの特徴を数値データで表現できれば、シミュレーションにおいてモルフォロジーをパラメトリックに変更することができ、モルフォロジーの特徴を表す数値データからシミュレーションモデルを構築することも可能となる。さらに、データマイニングにおいて、目指すべきモルフォロジーの特徴を客観的に表現できるため得られた情報を形式知として共有できるようになる。フィラーの体積含有率や一次粒子径のようなパラメータは取り扱いが容易であるが、フィラーのモルフォロジーの特徴を数値データで適切に表現するのは容易ではない。また、その数値データからシミュレーションモデルを構築する手順は逆問題と呼ばれ、数学的にも困難な問題の一つである。

この課題に対し、ゴム中のフィラーのモルフォロジーをポアソン過程に基づくマルチスケールランダム集合でモデル化する方法（ランダムモルフォロジカルモデル）がモルフォロジーを研究対象とする数学分野（Mathematical Morphology）で提案された^{10, 11)}。この方法を用いることで数値パラメータによるフィラー充填ゴムの階層的なモルフォロジーのモデル化（図8）が可能となる。さらに、同分野で用いられているモルフォロジー測度（共分散（Covariance）と累積粒度分布（Cumulative Granulometry））によって数値データによるモルフォロジーの特徴表現も可能となる。すなわち、実サンプルのTEM画像からモルフ

本事例では、SOMで得られた重要な設計変数、X6、X5、X7が決定木による機械学習でも重要な設計変数であることが確認できた。なかでも、X6は非常に重要な設計

図6 クラスター番号 (C1 - C16) と設計変数 (X1 - X7) の木構造

図7 ゴム材料の微細構造の例 (TEM 画像)

図8 ランダムモルフォロジカルモデルによる階層モデリング(左図)と階層モデルのイメージ図(右図)

図9 フィラーのモルフォロジーをパラメトリックに変更した3次元シミュレーションモデル (1,000 nm × 1,000 nm × 1,000 nm) の例 (フィラーの一次粒子径: 20 nm, フィラーの体積分率: 15%)

ォロジー測度を算出し、階層モデルのモルフォロジー測度との誤差を最小化することで階層モデルの数値パラメータを同定できる(シミュレーションモデルを構築できる)ことになる。

さらに興味深いのは、階層的モデルのパラメータを設計変数とみなすことで、モルフォロジーをパラメトリックに変更できることである。図9にフィラーのモルフォロジーを変更した3Dシミュレーションモデルを示す¹²⁾。これらは、フィラーの体積分率と一次粒子径を一定に保った状態でフィラーのモルフォロジーをパラメトリックに変化させたものである。このように、ランダムモルフォロジカルモデルとモルフォロジー測度を用いることによって、モルフォロジーを設計対象とするフィラー充填ゴムの多目的設計探索(ひいては材料インフォマティクス)における一つの課題は解決されたといえる。現在は、モルフォロジー測度として共分散と累積粒度分布を用いているが、ホモロジーという数学分野で提案されたパーシステントダイアグラム¹³⁾も有望な候補とみている。

5. お わ り に

同じ素材を使っても、切り方、混ぜ方や火入れによって味や食感が大きく変わる料理と同じく、ゴム材料の力学特

性もレシピだけではなく、生産プロセスに左右される。そのため、シミュレーションとデータサイエンスを積極的に活用した材料開発、すなわち材料インフォマティクスを目指すには、①シミュレーション、②分析/計測、③生産プロセスの技術開発と、データサイエンスを仲立ちとした3つのステップの協調が鍵となる。シミュレーションとデータサイエンスとの協調で微細構造特徴と力学特性に関する目指すべき設計情報が取得でき、分析/評価とデータサイエンスとの協調によってシミュレーション結果と実サンプルとの比較評価が可能となり、さらに、生産プロセスとデータサイエンスとの協調によって目指すべき微細構造特徴を有する材料の生産が可能となるだろう。

フィラー充填ゴムのモルフォロジーに着目した材料インフォマティクスへの取り組みはまだ始まったばかりである。本稿で取り上げなかったものも含めた課題を解決しながら、革新的なゴム材料開発のための材料インフォマティクスが進展することを期待している。そのためには、これまで材料開発に深く関わってきた分野と、シミュレーションやデータサイエンスや数学との異分野協調が必要となることはいうまでもない。また、シミュレーションやデータサイエンスというとコンピュータ任せのように誤解されるかもしれないが、材料インフォマティクスの成功においても技術者の創造的な発想と解決志向が最も重要であることを忘れてはならない。

References

- 1) <http://cms.mtl.kyoto-u.ac.jp/informatics.html>
- 2) Koishi, M.; Shida, Z.: *Tire Sci. Technol.*, **34**, 170 (2006)
- 3) Koishi, M.; Miyajima, H.; Kowatari, N.: The 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI) (2014)
- 4) Kohonen, T.: "Self-Organizing Maps", Springer (1995)
- 5) Viscosity SOMine Version 4.0 Users Manual, Eudaptics software gmbh (2001)
- 6) Witten, I.; Frank, E.: "Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques", Morgan Kaufmann Publishers, Elsevier Inc. (2005)
- 7) Koishi, M.: *Nippon Gomu Kyokaosshi*, **85**, 289 (2012)
- 8) Sagawa, M.; Akimoto, Y.; Aguirre, H.; Tanaka, K.; Koishi, M.: *Shinkakeisan Shinpojiumu* 2013 (2014)
- 9) <http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/>
- 10) Jean, A.; Jeulin, D.; Forest, S.; Cantournet, S.; N'Guyen, F.: *Journal of Microscopy*, **241**, 243 (2011)
- 11) Figliuzzi, B.; Jeulin, D.; Faessel, M.; Willot, F.; Koishi, M.; Kowatari, N.: *Technische Mechanik*, **36**, 22 (2016)
- 12) <http://www.yrc.co.jp/release/?id=2545&lang=jp&sp=20>
- 13) Nakamura, T.; Hiraoka, Y.; Hirata, A.; Escobar, E. G.; Matsue, K.; Y. Nishiura, Y.: arXiv: 1501.03611 (2015)

日本語表記参考文献

- 7) 小石正隆: 日本ゴム協会誌, **85**, 289 (2012)
- 8) 佐川美也子, 秋本洋平, アグレイルナン, 田中清, 小石正隆: 進化計算シンポジウム (2013)