

## マテリアルズインフォマティクスの実装に関する研究

鎌倉 駿\*

### 抄 録

本報では、近年注目されている機械学習の実装について検討した。手動射出成形機により成形したバイオマスポリプロピレンのダンベル試験片について、成形条件を変化させたときの物性の変化を機械学習により解析した。相関行列による可視化では、加熱筒温度と成形品の寸法は強い正の相関があることがわかった。また、主成分分析や回帰分析を行い、機械学習についての知見を得ることができた。

### 1 はじめに

マテリアルズインフォマティクス (MI) とは、機械学習などの情報科学を用いて、さまざまな材料開発の効率を高めることである。MI を活用することにより、これまで専門家の経験や勘、能力に依存していた種々の条件決定がデータをもとにした効率的なものにできる。また、条件決定のスピードアップを図ることができ、DX の推進にもつながる。さらに、最低限の実験回数で条件決定まで行うことが可能なため、原材料や試薬、溶媒、反応に要するエネルギーなどの使用が抑制され、GX に資することも可能である。そこで、本研究では、具体的な事例に対して、MI を適用し、知見を習得することにより、当センター、ひいては県内企業の MI の実装支援につなげる。

### 2 方法と結果

手動射出成形機を用いて、バイオマスポリプロピレンをダンベル型試験片に成形し、その試験片に対して、物性の測定 (寸法測定、強度試験) を行った。得られたデータセットを機械学習へ適用するにあたっての手順は、データセットの収集、データセットの確認、データセットの可視化、回帰モデルもしくはクラス分類モデルの構築及び検証の順である<sup>1)</sup>。

#### 2・1 手動射出成形

手動射出成形機 (オリジナルマインド, INARI M12) を用いて、加熱筒温度を 200℃から 260℃まで変化させ、ダンベル型試験片を作成した。このとき、加熱筒において樹脂を加熱する時間、保圧時間、樹脂型において冷却する時間は全て 60 秒であった。

\* 材料技術担当

試験片の寸法については、JIS K 7161-2:2014 における 1BA 形試験片とした。成形した試験片については、ショートショットと呼ばれる成形不良を起こしているものがいくつかの条件で見られた (図 1)。

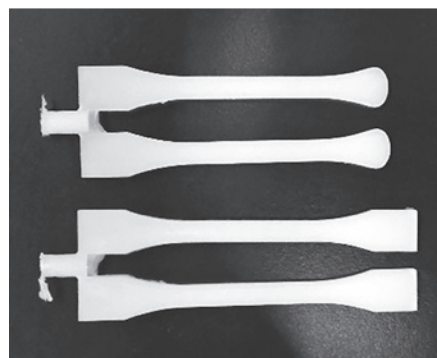


図 1 成形不良品 (上) と良品 (下)

#### 2・2 強度試験

2.方法で成形した試験片について、長さ測定 (length), 引張強度試験 (破断点強度 (tensile strain at Break), 降伏引張応力 (tensile stress at yield)) を環境制御型複合材料物性評価装置 (インストロンジャパンカンパニイリミテッド, 5985 型) を用いて行った。引張試験については、試験速度 10mm/min, つかみ具間距離 58mm とした。結果を表 1 に示す。

表 1 成形、強度試験結果

	cylinder temperature	y1 (length)	y2 (tensile strain at Break)	y3 (tensile stress at yield)
sample1	200	69.8	20.7	21.3
sample2	220	75.9	18.9	21.8
sample3	230	78.2	25.6	21.0
sample4	240	76.8	11.9	22.0
sample5	250	78.1	17.2	22.0
sample6	260	78.2	8.10	22.0

### 2・3 相関行列

2・2の表1のデータについて、散布図等で可視化によりデータセットの把握を行った。ここでは可視化の一例として相関行列のヒートマップを示す(図2)。

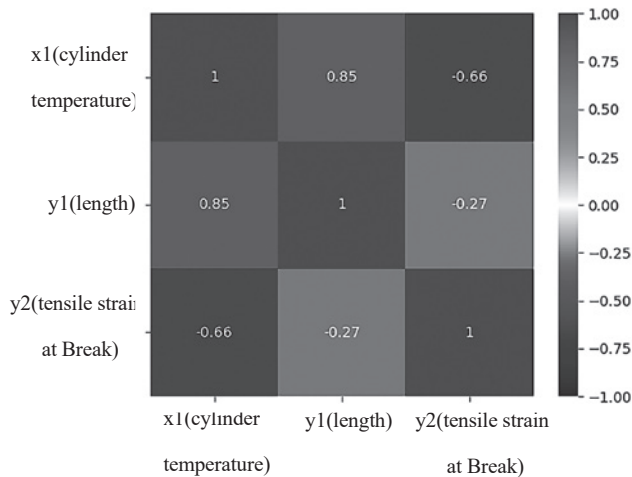


図2 相関行列

これにより、加熱筒温度と寸法(y1)は強い正の相関があることがわかった。

### 2・4 主成分分析

可視化の方法として、散布図や箱ひげ図、相関係数を計算することにより、2つの特徴量間の関係を比較することは可能であるが、比較する特徴量が多くなると、特徴量間の関係を同時に比較することはできない。主成分分析(PCA)を行うことにより特徴量が4つ以上ある多変量データにおいて、全ての特徴量を考慮した散布図を作成することができる。図3, 4に得られたデータセットにPCAを適用した結果を示す。

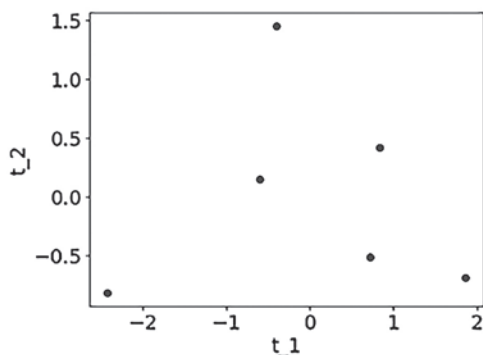


図3 第1主成分(t<sub>1</sub>)と第2主成分(t<sub>2</sub>)の散布図

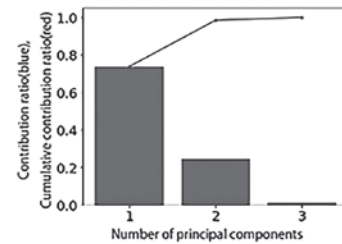


図4 寄与率・累積寄与率プロット

図3では元のデータセットの情報がほとんど反映されており、図4において、折れ線グラフは累積寄与率、棒グラフは、成分ごとの寄与率を表している。ここから、第2成分までで約99%の情報量があるため、第3成分以降は不要であることがわかる。

### 2・5 回帰分析

回帰分析とは、説明変数xによって目的変数yを回帰モデル  $y=f(x)$  の形でどれくらい説明できるかを定量的に分析することである。今回は、最小二乗法による線形回帰分析を行った。結果を図5に示す。

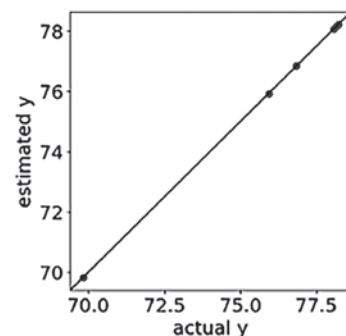


図5 yの実測値と推定値のプロット

今回はモデル構築に用いたものと同じデータセットを推定した。対角線から縦にどれだけずれているかでyの誤差が直感的にわかる。

## 3 まとめ

手動射出成形機を使用する知見や少量のデータセットではあるが、実際に行った実験に対して、回帰分析まで行うことにより機械学習の知見を得ることができた。

### 参考文献

1) 金子弘昌(2019)『化学のためのPythonによるデータ解析・機械学習入門』オーム社