

ニューラルネットワークによる材料設計支援システム

—東ソー株式会社—

Development of Material Design Support System by the Neural Networks

岩淵 節男* *Setsuo Iwabuchi*
渡辺建太郎* *Kentarō Watanabe*
高野 正彦** *Masahiko Takano*
吉原 郁夫*** *Ikuo Yoshihara*



東ソー株式会社の四日市事業所(上), 研究開発風景(左下)および製品サンプル(右下) 材料設計支援システムは、製品の素材を提供する際、素材に要求される物性を満足させるための材料配合設計を支援する。

東ソー株式会社は、総合化学メーカーとして、新素材の開発や素材に対する技術サービスなど、競争優位の確立を目指して、研究・開発部門のシステム化を進めている。この一貫として、従来、専門家によって行っていたシステム化が困難であった樹脂材料の配合設計を、ニューラルネットワークで支援す

るシステムを1991年10月に開発した。過去の開発で蓄積された実験データから、ニューラルネットワークは樹脂試作品の材料と物性の関係を学習する。

このシステムにより、試作回数が削減でき、試作期間の短縮および試作材料の削減を図ることができた。

* 東ソー株式会社 情報システム部 ** 日立製作所 情報システム事業部 *** 日立製作所 システム開発研究所 工学博士

1 はじめに

樹脂は用途によって、多種多様な物性値が求められており、その要求にこたえるには、適切な材料の選定と配合比の決定が必要である。

従来は、専門技術者が複数の配合処方を考えて、製品サンプルの試作を測定し、材料の配合処方を決定していた。

専門家による配合処方の決定は、試作の繰り返しが多く、(1)時間がかかること、(2)多くの材料と設備が必要となること、(3)専門技術者の育成に時間がかかることなどの問題がある。

一方、専門家の勘とノウハウに依存する部分が多く、モデル化やルール表現が困難であると考えられていた。

このような問題を解決し、迅速かつ合理的に配合設計を行うために、経験者の判断を支援する方法の開発が必要となった。

そのため、モデル化が困難な問題を計算機で扱う手段として着目されているニューラルネットワークを用いたシステムを開発した。ここでは、ニューラルネットワークの学習結果を利用した、材料の配合設計を支援する材料設計支援システムについて述べる。

2 システム化の背景

樹脂の配合設計では、数百種類以上ある材料の中から数種ないし十数種の材料を選択し、それを何パーセントにするかを決めなければならない。配合処方をモデル化するのは困難なため、数学モデルによるシミュレーショ

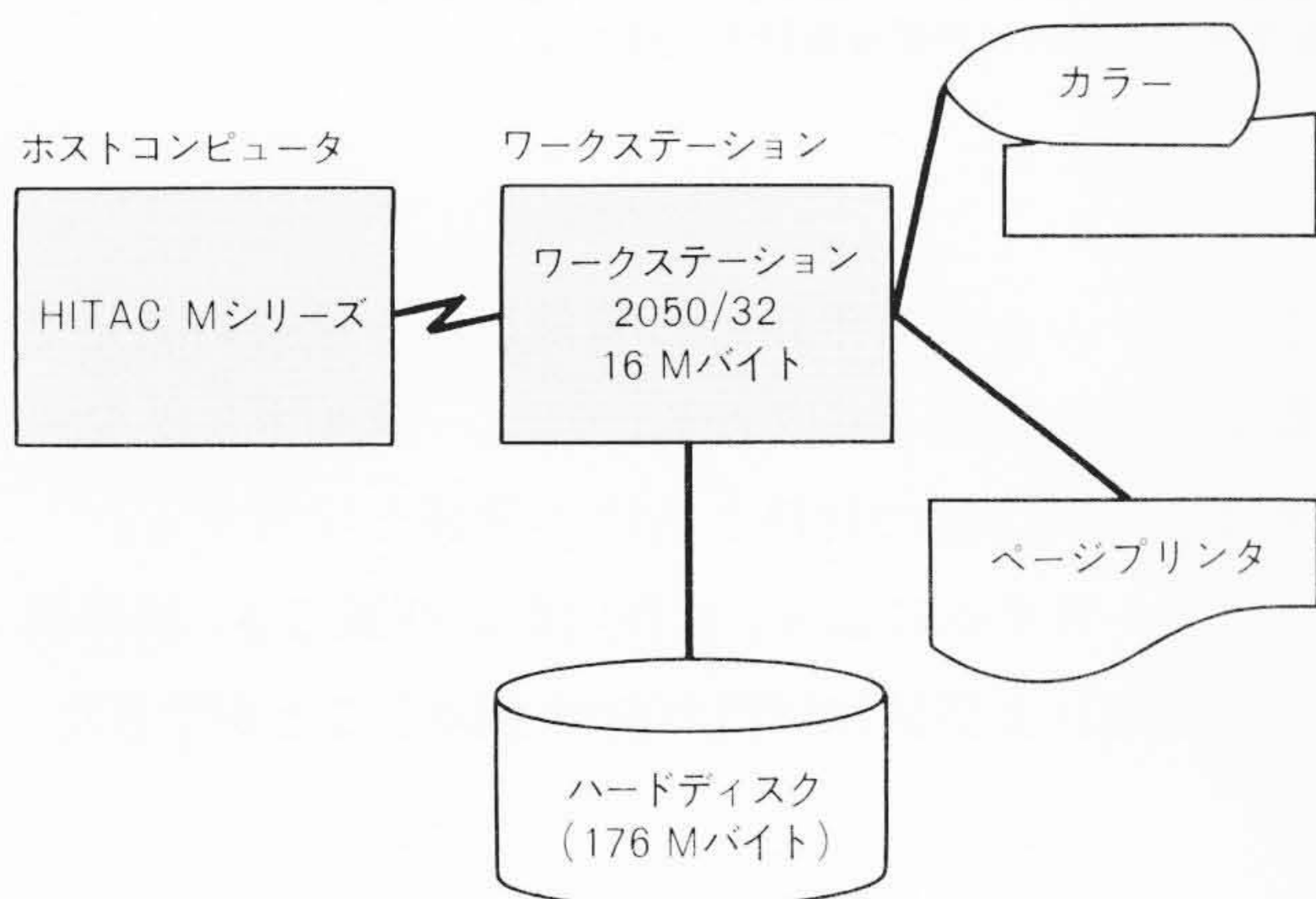


図1 ハードウェアの構成 このシステムは、ワークステーションとしてワークステーション2050/32、ホストコンピュータとして大型汎用コンピュータHITAC M-680のハードウェア構成を利用する。

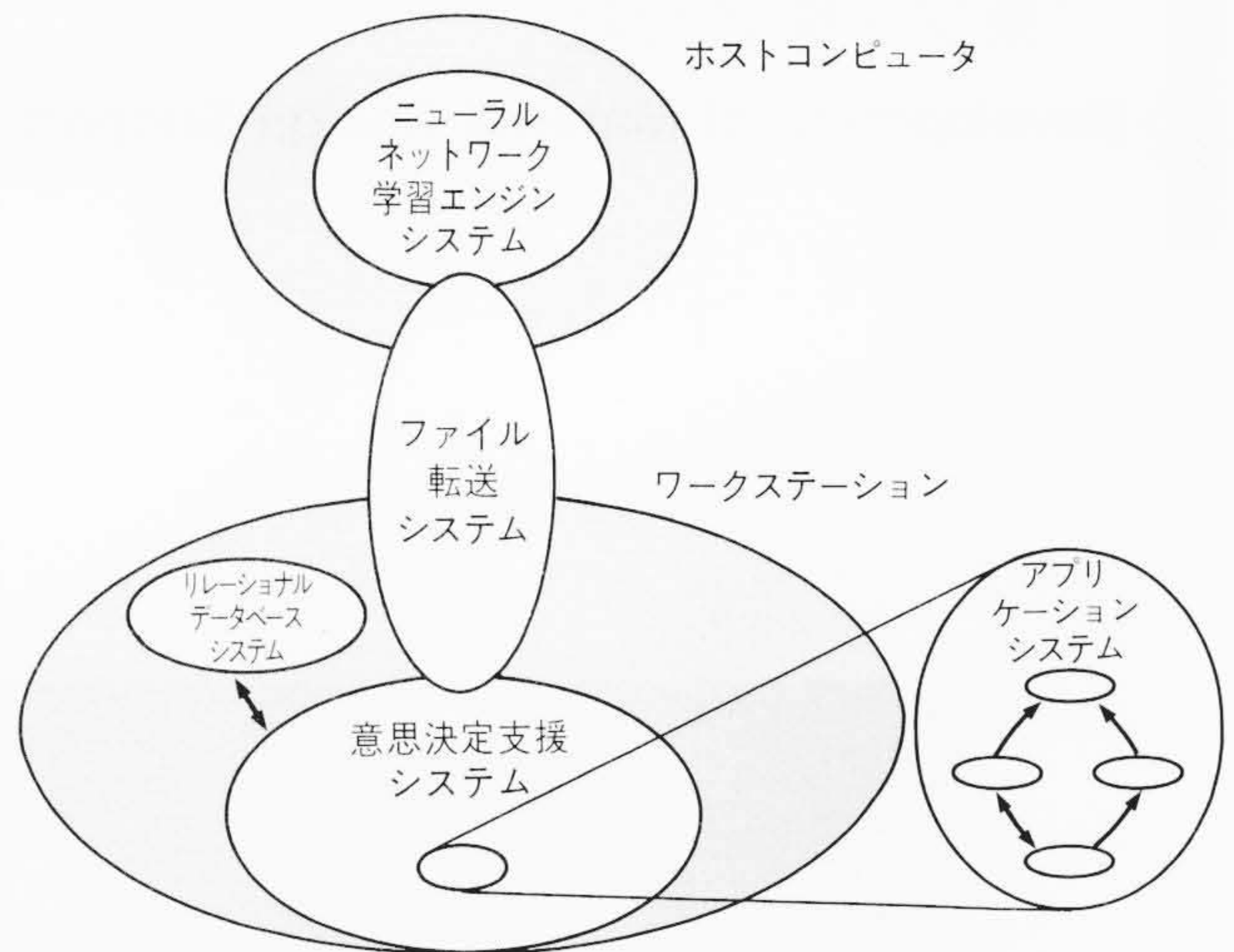


図2 ソフトウェアの構成 ワークステーション側の意思決定支援システムを中心とし、ホストコンピュータ側のニューラルネットワーク学習エンジンシステム、ワークステーション、ホストコンピュータ間のデータ転送用にファイル転送システムを利用している。

ンができない。また、専門家からの知識獲得には時間がかかり、しかも連続的に変化する配合比を5%、10%、20%といったように離散化して扱わなくてはならないので、ルールベースによる推論では誤差が大きくならざるを得ない。

以上述べたように、従来手法で配合設計を行うのは困難であると判断し、モデル化やルール表現を必要としないニューラルネットワークに着目した。

ニューラルネットワークは、過去のデータに学び、新たな問題に対する結果を出すことが可能であるからである。

従来配合設計では、専門家は実験を繰り返すことによってそのノウハウを蓄積し、配合処方を決定していた。すなわち、ノウハウの根源は実験データの中に存在すると考え、実験データを教師データとしてニューラルネットワークに学習させることにした。

所望の物性値を与え、材料の配合処方の予測をさせる学習は、物性値を入力に、材料の配合比を出力に割り当てて学習させた。また、物性値の予測は入出力を逆転し、材料の配合比を入力に、物性値を出力に割り当てて学習させた。

3 システムの概要

3.1 ハードウェア構成

このシステムは、ワークステーション2050/32上で利用することができる。また、ニューラルネットワークの学

習は、ホストコンピュータHITAC Mシリーズを利用する。ハードウェアの構成を図1に示す。

3.2 ソフトウェア構成

3.2.1 利用プログラム・プロダクト

ワークステーションとホストではプログラム・プロダクトを利用している(図2参照)。

ワークステーションのリレーショナルデータベースシステムは、実験によって得られた配合処方とその物性を蓄積する機能を持つ。意思決定支援システムは、蓄積データの検索機能とシステム開発支援機能を持ち、この下でアプリケーションシステムが稼動する。

ホストコンピュータのニューラルネットワーク学習システムは、ワークステーションに蓄積している配合処方とその物性を教師データとして学習し、学習結果である結合係数を出力する。

ファイル転送システムは、ワークステーション上の教師データをホストコンピュータへ転送し、また、学習結果をワークステーションに転送する。

3.2.2 材料設計支援システムの概要

このシステムは、五つのサブシステムで構成する。各サブシステムの関連を図3に示す。

(1) 実験データ管理サブシステム

製品サンプルの配合処方と物性を、リレーショナルデータベースに登録する。

リレーショナルデータベースの蓄積データから教師データを抽出し、ネットワークの入力層と出力層に用いるデータ項目を設定する。また、抽出データの削除など、データのスクリーニングを行う。

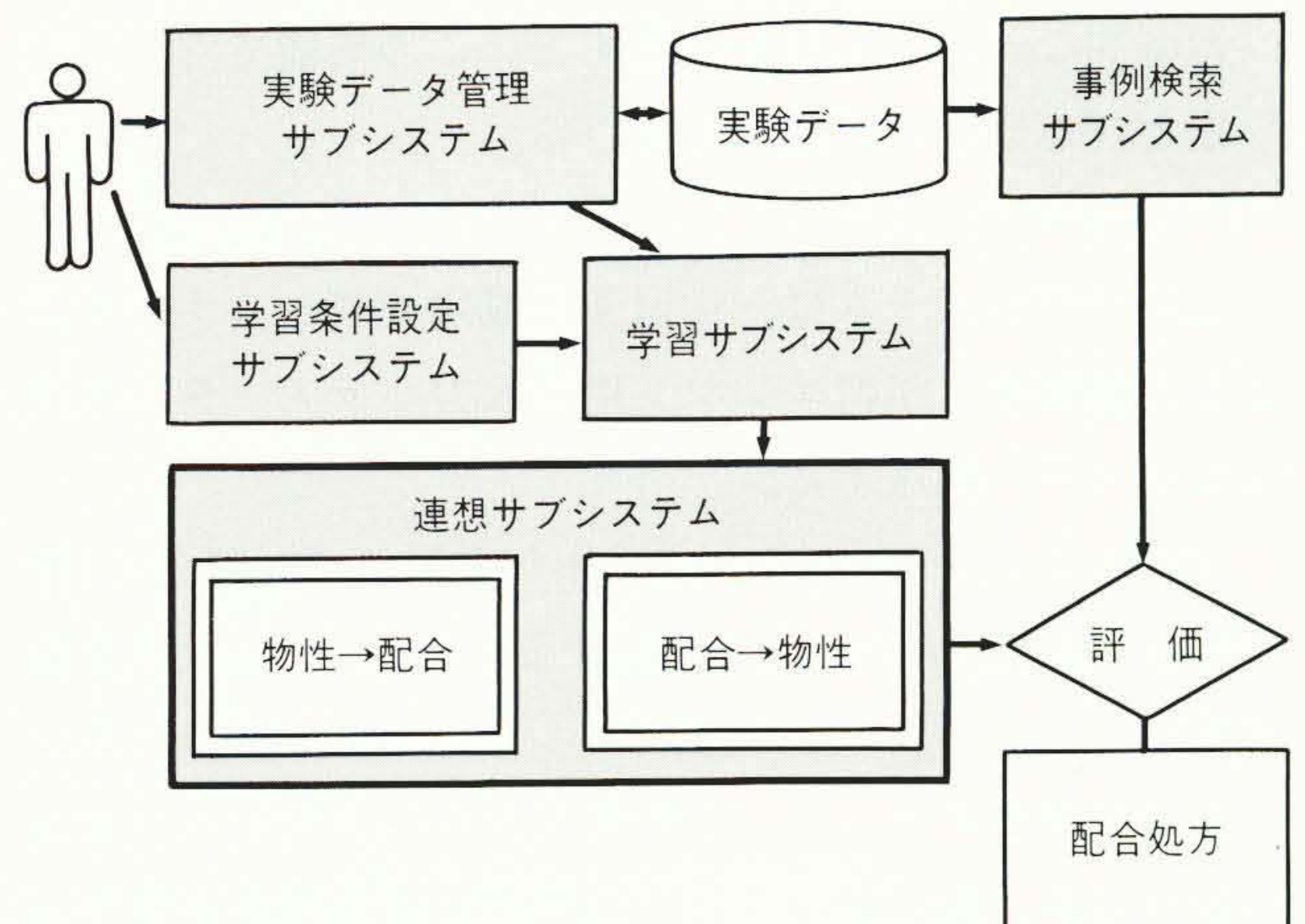


図3 材料設計支援システム関連図 このアプリケーションは、連想サブシステムを中心に5サブシステムで構成している。

(2) 学習条件設定サブシステム

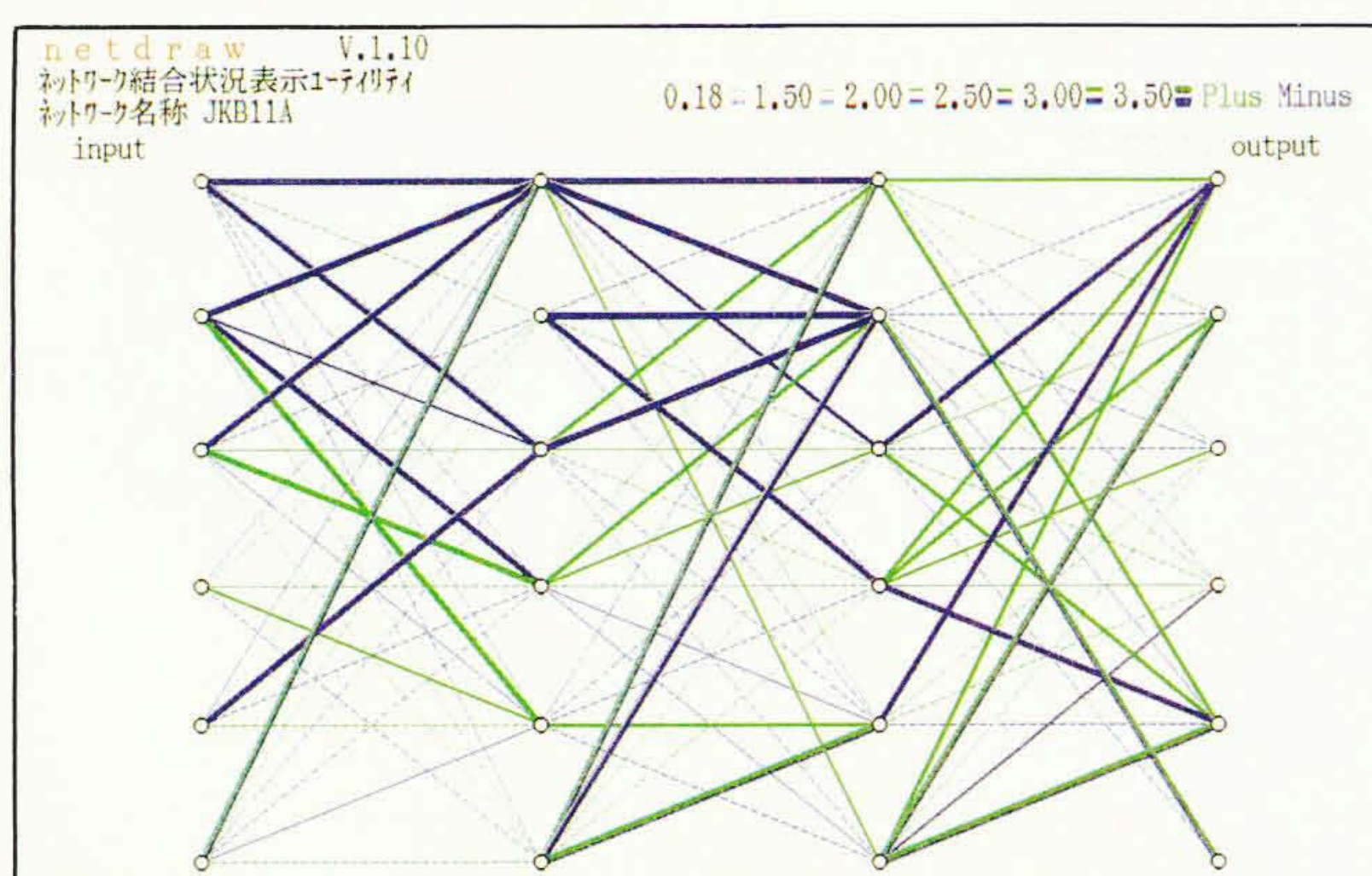
このサブシステムは、次に述べる機能で構成する。

(a) ネットワーク定義機能

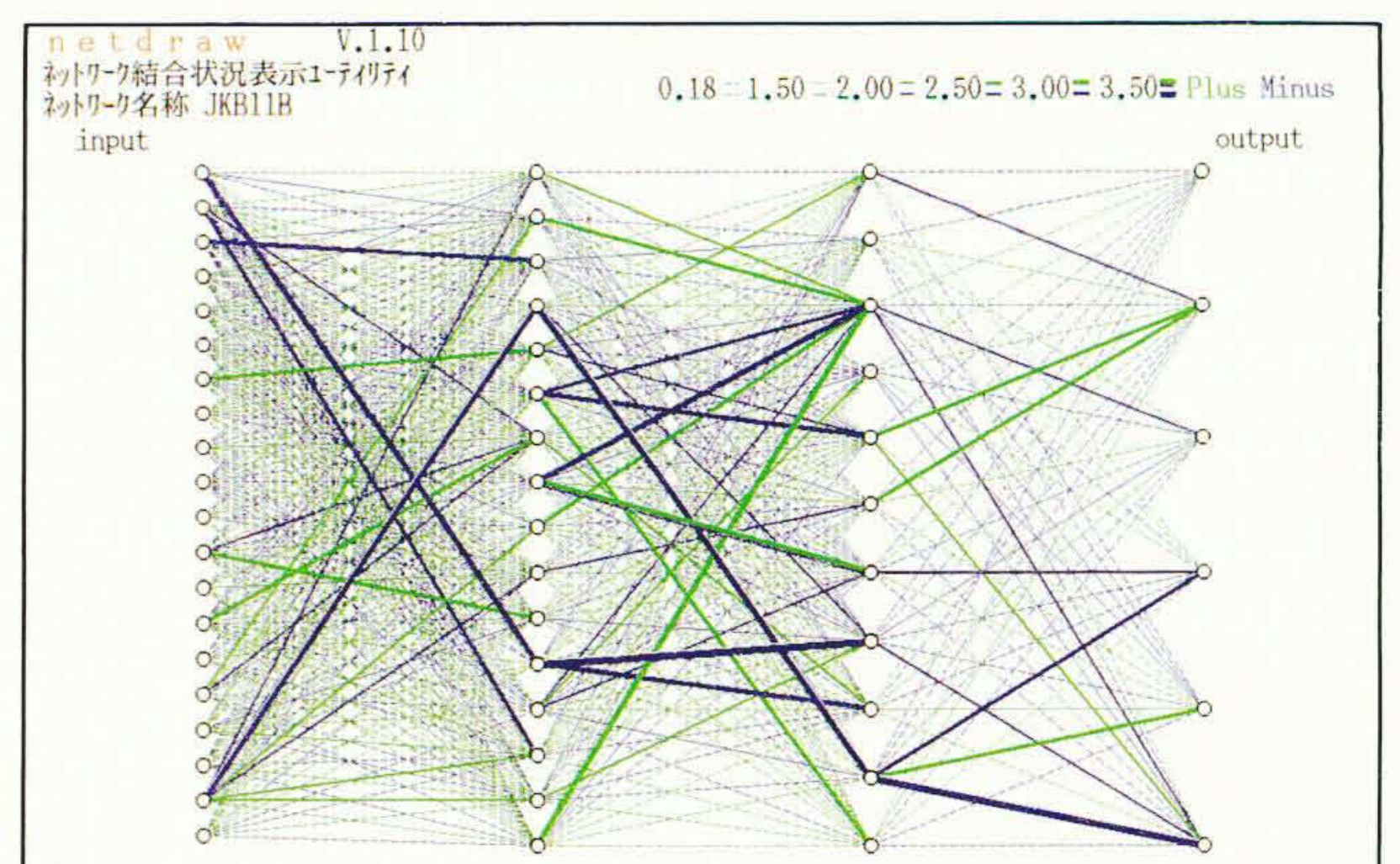
定義項目として、ネットワークの層と各層のノード数を設定する。層の数は、経験則から4階層を自動設定している。入出力層のノード数は、実験データ管理サブシステムで設定した入出力項目によって自動設定する。中間ノード数についても、経験則から自動計算し設定している。また、オプションとして任意指定を可能としている。このシステムで使用しているニューラルネットワークモデルを図4に示す。

(b) 学習条件定義機能

学習条件として、学習係数、データ取込み順序、学



(a) 物性(入力)→配合(出力)



(b) 配合(入力)→物性(出力)

図4 ニューラルネットワークモデルとその結合状況後のノード間の結合状況を示す。

このアプリケーションで利用しているニューラルネットワークモデルと、学習

習時間など、7項目を設定する。この機能でも標準設定と任意設定を可能にしている。

(3) 学習サブシステム

このサブシステムは、学習条件設定サブシステムで設定した情報を、学習エンジン用の入力パラメータに変換してホストへ転送する。

学習エンジンは、ホストで動作し多層モデルによるBP (Back Propagation)法で学習する。また、学習状況を出力する。

このサブシステムは、学習状況をワークステーションへ取り込み、教師データとの誤差の収束状況をグラフ表示する。

(4) 連想サブシステム

連想サブシステムは、配合処方予測(連想)を行う。このシステムは、要求物性を入力し該当する材料名と配合比を予測(物性→配合)する。また、材料名と配合比を入力し物性値を予測(配合→物性)する。

予測結果をみて条件を変えたいときは、該当項目の値を変更すれば、直ちにこのサブシステムが変更後の値を連想する。条件の変更は、ワークステーションとの対話で行う。画面出力例を図5に示す。

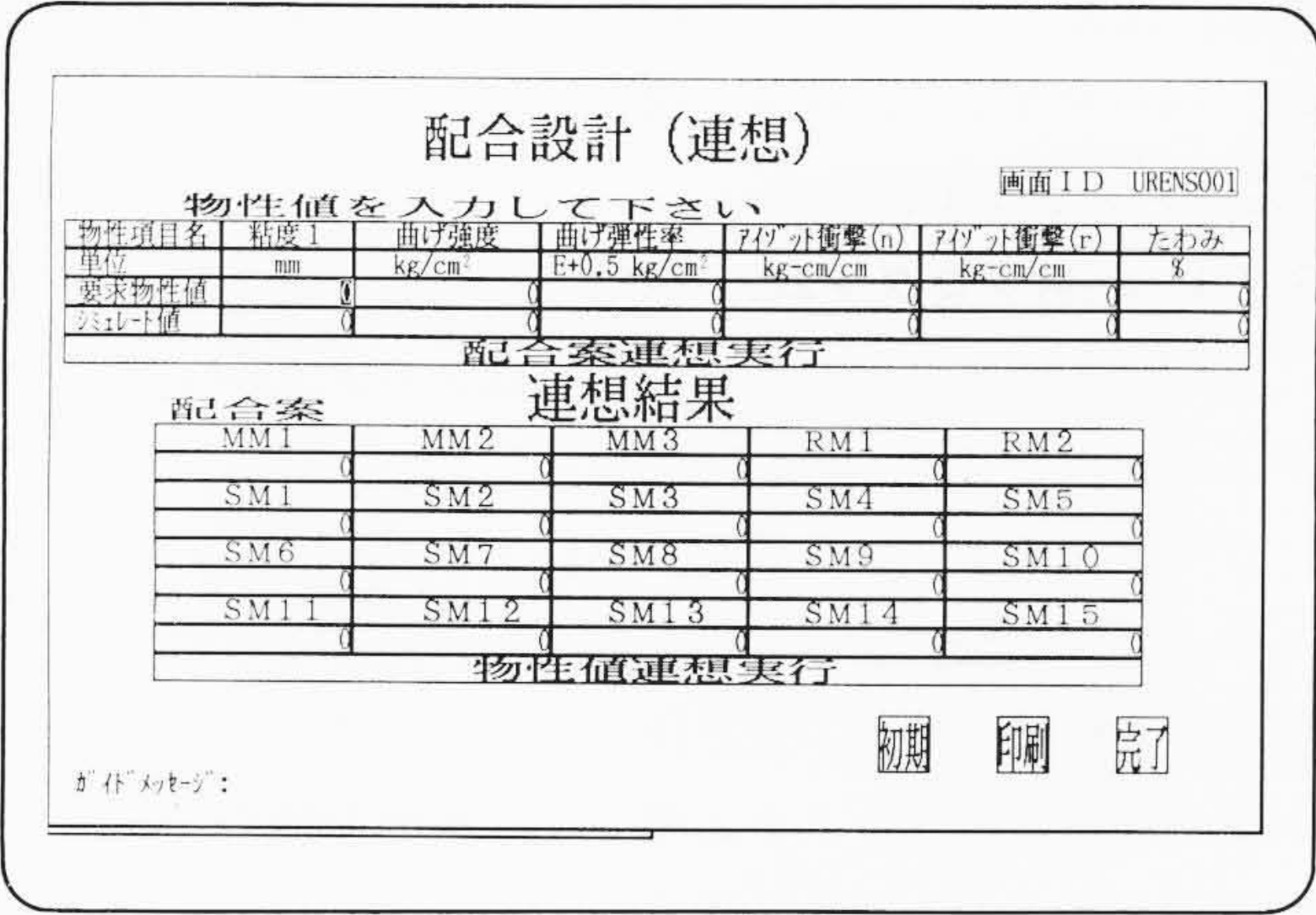
(5) 事例検索サブシステム

このサブシステムは、配合案検討にあたり、要求物性に類似の配合処方が過去になかったかどうかを検索する。これは、連想サブシステムで予測した配合処方が妥当であるかどうかの検証にも利用する。検索にあたっては、蓄積データから要求の物性に近い事例を検索し、要求の物性との相対誤差を求め、各物性の相対誤差の和の小さい順から10例を表示する。

4 適用評価

このシステムを利用し、教師データ約600件で学習し、予測した結果と過去の試作結果とで比較すると、材料はほとんど間違いなく選択する。各材料の配合比は平均誤差約6%で予測している。また、物性値は、各項目に対し平均誤差約3%で予測している。

上記結果は、従来の専門家による配合比の決定とほぼ同じ精度で予測している。



注：この画面例の物性項目名と材料名は、実用システムと異なる。

図5 画面出力例 このシステムの中心画面であり、この画面を利用して物性から配合(材料と割合)、またその逆である配合から物性を予測する。

5 システム導入の効果

- (1) このシステムは、1991年10月から稼動し、業務上次のような点で高い評価を得ている。
 - (a) 経験の浅い設計者でもほぼ1回の上記システムの適用でターゲットの配合処方ができ、むだな試作が減少した。また、専門家は配合処方案の物性シミュレーションに効果を発揮している。
 - (b) 配合設計に際して戦略的な考え(在庫、価格を考慮)を導入しやすくなり、競争力のある配合処方の立案ができるようになった。
- (2) 知識獲得では、従来に比べて知識の整理が約 $\frac{1}{3}$ に短縮できる。
- (3) ノウハウの蓄積は実験データの蓄積によって可能であり、ルール表現を用いたシステムに比べて保守性がよい。

6 おわりに

材料設計支援システムは、十分実用に耐えられるシステムであるとの評価を得ることができた。この評価を踏まえて、他の製品開発部署でもプロトタイプを開発し、評価を進めている。