

3E-7

ニューラルネットワークによる材料設計支援

吉原 郁夫¹ 上田 至克² 高野 正彦³
 (株式会社日立製作所¹ システム開発研究所² システム事業部³ システム工場)

1. はじめに

ニューラルネットワークは、モデル化が困難な問題を計算機で扱えるようにする手段としても期待されている。材料設計は、経験者の勘とノウハウに依存する部分が多く、計算機では扱い難いと考えられている。モデル化はもちろん、ルール表現も容易ではないからである。しかし、経験を積み重ねれば出来ることなら、過去の事例をお手本にすればある程度学習可能に違いない。

われわれは、多層モデルに実験データを学習させることにより、ある化学工業製品を作るのに必要な原材料の予測を試みた。

2. ニューロモデルの適用

2.1 材料設計とその課題

原材料は、70-80%を占める主成分(X)と、20-30%を占める添加物(Y)からなる。両者の種類は多く、合わせて数百にも及ぶが、化学製品を一種つくるには、それぞれから数種を使うに過ぎない。化学製品に要求される特性(Z)が与えられたとき、数多い原材料の中から何を選び、それを何%にするかを決めることが課題である。

2.2 ニューラルネットワーク

この問題を入力に応じたパターン選択問題の一種と捉え、多層モデルを用いることにする¹⁾。層数は予備実験の結果から4とする(図1)。学習則にはいわゆるBP(誤差逆伝播)法を用いる。

2.3 教師データ

実験データは、化学製品の種類と、それを作るのに必要な原材料と、その特性値を一組にして記録したものである。原材料選定のためには、因果関係を逆転させて捉えればよい。すなわち、特性値(Z_1, Z_2, \dots, Z_k)を入力、原材料の使用量($X_1, X_2, \dots, X_m, Y_1, Y_2, \dots, Y_n$)を出力に対応させ学習する。一方、原材料を入力、特性値を出力として、学習すれば特性推定ができる。

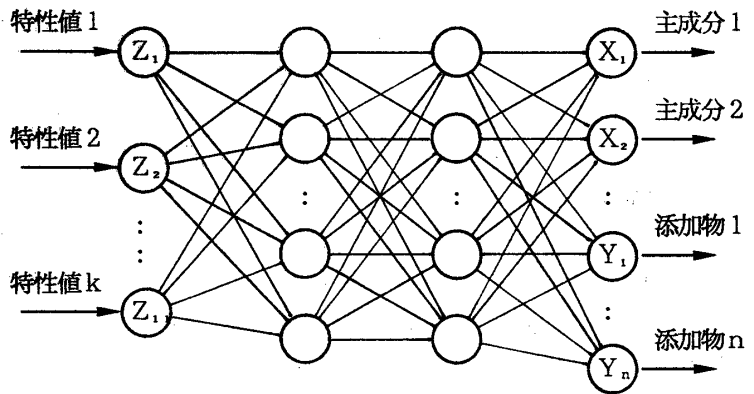


図1 4層ニューラルネット

3. ニューロによる学習実験

3.1 原材料の選定

(1) 一括学習 学習に当たっては、原材料を類似の品種ごとに括って集約し、また特性値を重要な項目に絞り、簡単化を図る。さらに、学習を容易にするため、データに適切なスケールリングを施しオーダーを揃えておく。

Support of Material Design by Neural Network

¹ Ikuro YOSHIHARA, ² Yoshikatsu UEDA, ³ Masahiko TAKANO

¹ Systems Development Lab., ² Systems Engineering Div., ³ Information Systems Works, HITACHI, Ltd.

表 1 ニューロによる原材料予測結果

検証データ	ケース 1			ケース 2			ケース 3		
化学製品	特性値			特性値			特性値		
項目Z ₁	-0.3244 (注)			-0.1940			0.2450		
項目Z ₂	-0.2494			-0.2831			-0.0201		
項目Z ₃	-0.2583			-0.1669			-0.2191		
⋮	⋮			⋮			⋮		
⋮	⋮			⋮			⋮		
原材料	実測値	計算値	誤差	実測値	計算値	誤差	実測値	計算値	誤差
材料X ₁	00 %	3.80 %	3.80 %	78	72.22	-5.78	43	41.75	1.25
材料X ₂	81	72.07	-8.93	00	0.35	0.35	00	0.50	0.50
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
材料Y ₁	15	14.42	-0.58	15	14.32	-0.68	00	0.21	0.21
材料Y ₂	4	3.99	-0.01	4	3.98	-0.02	4	3.94	-0.06
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

注) 表中の特性値は無次元量

特性値(Z)を入力、原材料の使用量(XとY)を出力に割当て、教師データを学習させる。このネットに、所望の特性値を与え原材料を予測させる検証を50ケース行った。その中から3例を表1に示す。同表でケース1は誤差が最も大きい例、ケース2、3は誤差が比較的小さい例である。誤差は主成分(X)については高々数%、添加物(Y)についてはほぼ1%未満であった。

(2) 個別学習 次に、原材料すべてではなく一つずつに分け、使用量を個別に学習してみると、主成分についてはあまり変わらないものの、添加物については精度向上が著しいことがわかる。従って、材料選定がほぼ固まった段階で、個別学習を併用すれば使用量を決定の精度を高めることができる。

(3) ルールの付加 経験者は、項目Z₁の要求値が大のとき原材料はX₁を選ぶ、という風な知識を持っている。このような知識をコード化して実験データに付加し学習させたが、はっきりした精度改善は見られなかった。実験データの中には、材料選択則が暗に含まれているはずであり、ネットは既にそれを学習していたと考えられる。

3.2 特性値の推定

入出力を逆転し、原材料を入力、特性値を出力にとり学習させる。この場合、特性値を一項目ずつ個別に予想しても精度はほとんど変わらないが、原材料の一括選定と同程度の精度が得られる。特性値の学習ネットを用いて、大略決めた値の付近で、各成分を振ってみたら特性がどう変わるかを推定でき、実験ケースを減らせると期待できる。

4. おわりに

ニューラルネットの学習機能を利用し、原材料の選択とその定量的把握が行える見通しを得た。また、逆の特性予測も可能である。特性予測は、従来、細かく場合分けした実験式で行っていたが、ニューラルネットワークの非線形分離機能を用いると、煩雑な場合分けが要らなくなり大変扱いやすくなる。これら学習機能により、材料設計支援が可能となろう。

参考文献

- 1) D. E. ラメルハート他(甘利監訳): PDPモデル、産業図書(平成1)