OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	An Analytical Method for Microstructure-Property Linkages Using Machine Learning and Computer Simulations
Author(s)	小島, 隆嗣
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/88054
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名　（　小島　隆嗣　）	
論文題名	An Analytical Method for Microstructure-Property Linkages Using Machine Learning and Computer Simulations （機械学習と数値計算を用いた微細構造と材料特性の関係に関する解析手法）

論文内容の要旨

タイヤは路面と接する唯一の車の部品であるため、様々な性能を高次元での両立しなければならない。特に近年は、CASEやMaaSによる自動車社会の急速な変化に対応するために、著しい性能向上が求められている。これまでタイヤ製造業者は、タイヤ性能に直結する主要材料であるフィラー充填ゴムの材料特性を向上させるために、実験や数値計算を用いて材料の微細構造と材料特性の関係の解明に取り組んできた。しかし、実験は実在する試験片、つまり既に実現できている材料特性が研究対象となるため、材料特性を向上させる微細構造の特徴を実験結果から予測しなければならない。また、数値計算においても実験結果から得られた知見に基づき評価する微細構造を作成するため、実験より著しく優れた材料特性を研究対象とすることは難しい。したがって、材料特性を効率的に向上させるには、これまでにない研究方法の開発が必要である。そこで、本研究では数値計算と機械学習を用いて所望の材料特性を実現する微細構造の自動探索手法及び解析手法からなる新しい材料の微細構造と材料特性の関係解明方法を開発した。第1章では、上記のように本研究の背景及び目的について説明した。

第2章では、機械学習の手法の1つである畳み込みニューラルネットワークを用いて粗視化分子動力学シミュレーション(CGMD)のサロゲートモデルを開発した。続く3章で開発した微細構造の自動探索では、繰り返し計算を実施する。フィラー充填ゴムの微細構造を対象としたCGMDは計算コストが大きいため、この繰り返し計算に使用することはできない。そこで、深層学習を用いてCGMDに代替可能な高速で高精度なサロゲートモデルの開発を行った。CGMDの計算結果を学習データとする場合の問題は、十分な量の学習データを作成できないことである。そこで、少数のCGMD結果の部分領域を学習データとすることで多様な学習データを作成した。また、部分領域の応答の足し合わせにより、任意サイズの領域の材料特性の予測性能を向上させるため、部分領域に周囲の袖領域を加えた領域の微細構造画像を学習データとした。その結果、CGMDの全体領域を学習データとした場合比べて、外挿予測性能に優れ実用上十分な精度のサロゲートモデルを構築した。

第3章では、所望特性を実現する微細構造の自動探索方法を開発した。まず、CGMD結果から変形過程における微細構造の変化と力学応答の関係を明らかにする解析方法を構築した。ただし、これだけでは所望する力学応答特性を実現する微細構造は明らかにはならなかった。所望特性を発現する微細構造を自動探索的にモデル化し、それによって発現メカニズムを解明する方法の確立が課題となった。そこで、所望特性を実現する微細構造の効率的な探索方法を開発した。探索にはレプリカ交換Markov chain Monte Carlo methods(MCMC)と勾配法を用いた。レプリカ交換MCMCでは離散的な大域探索を実施し、続く勾配法では局所的な探索を実施した。これらの探索では、第2章で構築したサロゲートモデルを物性値やその微細構造への依存性の計算に使用することで高速な探索を実現した。最後にCGMDを実施して得られた微細構造の物性値を確認した。また、数値実験によって提案手法の探索効率を示した。

第4章では、微細構造の定量的解析手法を開発した。ロジスティック回帰解析とCNNによって所望の材料特性に寄与する微細構造部分の抽出方法を開発した。ロジスティック回帰解析では、Persistent Homologyを用いて微細構造を特徴ベクトル化し、学習されたロジスティック回帰解析の重みに基づき材料特性に寄与する凝集構造を特定した。CNNではカーネルによって畳み込まれた画像に基づき材料特性に寄与する部分構造を特定した。両手法で抽出した微細構造部分を比較・解析し、材料特性に寄与する微細構造部分の特徴を明らかにした。さらに、得られた知見の妥当性をCGMDによって確認した。

第5章では、本研究で得られた成果をまとめた。

様式 7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　小島　隆嗣　）		
論文審査担当者	（職）	氏　名
	主査　教授	鷲尾　隆
	副査　教授	駒谷　和範
	副査　教授	井上　恭
	副査　教授	三瓶　政一
	副査　教授	滝根　哲哉
	副査　教授	馬場口　登
	副査　教授	丸田　章博
	副査　教授	宮地　充子
	副査　准教授	原　聡

論文審査の結果の要旨

実験は実在する材料試験片が材料特性の解析対象となり，数値計算でも材料特性を向上させる微細構造の特徴を実験結果から試行錯誤的に予測してシミュレーションしなければならず，著しく優れた特性を示す材料を効率的に発見することは難しい．したがって，材料特性を効率的に向上させるには、これまでにない方法論の確立が必要である．

本研究では，フィラー充填ゴムの微細構造を例として，数値計算と機械学習を用いて所望の材料特性を実現する材料構造の自動探索及び解析を行う，新しい材料構造と材料特性の関係解明方法を提案している．主たる研究成果を要約すると以下のようになる．

（1）粗視化分子動力学シミュレーション(CGMD)を代替し，桁違いの高速シミュレーションを可能とするサロゲートモデルを深層学習によって開発している。少数の CGMD 結果の部分領域を学習データとするデータ増強で多様な学習データを作成し，高精度なサロゲートモデルの学習し，同時に外挿予測性能に優れたサロゲートモデルを構築することに成功している．

（2）所望特性を実現する材料構造の自動探索方法を開発している．具体的には，レプリカ交換 MMCMC 法と勾配法に上述の高速計算可能なサロゲートモデルシミュレーションを組み込み，優れた特性を示す材料構造を高速探索し，最後に CGMD を実施して得られた材料構造の物性値を確認する手法を提案している．数値実験によって提案手法の探索効率を実証している．

（3）上記で得られた優れた物性値を示す材料構造の定量的解析手法を開発している．具体的には，ロジスティック回帰と Persistent Homology を用いて材料特性に寄与する凝集構造を特定する方法と，CNN 深層学習で学習された畳み込み画像フィルタを用いて材料特性に寄与する部分構造を特定する方法を確立している．そして，両手法で抽出した材料構造部分を比較・解析し，材料特性に寄与する微細構造部分の特徴を明らかにし，さらに得られた知見の妥当性を CGMD によって確認している．

以上のように，本論文は従来の実験科学や計算科学の方法によっては成し得ない，所望の材料特性を実現する微細構造の自動探索及び解析を体系的に行う手段を提供している．このような方法論は斬新かつ有用であると考えられ，材料科学分野において新材料開発研究などの今後の発展に寄与するところ大きい．よって，本論文は博士論文として価値あるものと認める．