

マテリアルズインフォマティクスを活用した 高効率開発のための材料データベース

Material Database for Efficient Development Using Materials Informatics

伊藤 剛¹
Tsuyoshi ITO
杉本 直¹
Nao SUGIMOTO

石井 達子¹
Satoko ISHII
豊岡 洋一¹
Yoichi TOYOOKA

本田 寛¹
Hiroshi HONDA
古沢 透流¹
Toru FURUSAWA

要 旨

情報科学を応用して特性予測をおこなうことで実験による試行錯誤を削減するなど、高効率な材料研究をおこなえるマテリアルズインフォマティクスの活用を促進するため、材料データと関連情報を統一された形式で格納、管理、出力できる包括的な材料データベースを構築した。

データベースのツール選定と内部構造の構築において、利用者のユーザビリティや専門性などの違いを考慮することにより、約1万件におよぶ各材料分野の試験データと標準物性の格納が完了した。

これによって、マテリアルズインフォマティクスの活用上の課題であるデータクレンジングにかかる工数を低減できることに加えて、設計やCAEなどで必要となるデータの入手が容易となり、業務効率向上と開発費の削減に貢献できることが確認できた。

ABSTRACT

A comprehensive material database that enables the storage, management and export of material data and related information in a standardized format has been constructed to promote the use of materials informatics to achieve highly efficient materials research, such as the application of information science to predict physical properties in order to reduce experimental trial and error.

Usability and user differences such as expertise were taken into account when selecting the database tools and creating the internal structure. As a result, storage of around 10,000 test data and standard properties in various material fields has been completed.

It was confirmed that this enables a reduction in the work time required for data cleansing, which is an issue for use of materials informatics. It also facilitates the acquisition of data needed for design and CAE, etc., and helps to increase operations efficiency and reduce development costs.

1. まえがき

経済のグローバル化や急激な地球温暖化の進行などにより、自動車各部品の軽量化、低コスト化、高機能化などへのニーズが高まっている。自動車部品を構成する材料についても、鉄鋼材料と比べて密度の低いアルミニウムや樹脂材料へ置換するための材料や製造プロセスの開発が進められてきた⁽¹⁾⁻⁽³⁾。一般的にこのような開発過程では、組成や製造条件の異なるさまざまな試作材を合成し、試験片で基礎物性を取得する経験則的手法がとられる。しかしながら、接着剤、触媒、磁石などの機能材料やアディティブマニュファクチャリング(AM)⁽⁴⁾のような新しい製造プロセス

では、材料特性に影響する要因が多岐にわたり、その要因解析のための基礎物性の取得にかかる費用と工数が膨大となる。そこで、近年では材料科学と機械学習を融合したマテリアルズインフォマティクス(MI)によって、試験結果から材料特性を予測する手法が注目されてきている⁽⁵⁾。

MIでは、材料特性を目的変数、組成や製造条件などを説明変数とし、統計処理によってそれらの関係性を導きそれをもとに材料組成や製造プロセスの最適化をおこなう。したがってMIを活用するためには、材料特性の測定データが一定量必要となるのみならず、必要な関連情報が揃っていることや、データ形式が揃っていることが前提条件となる。しかし実際には、データ所有者の専門性、役割、スキル

¹ 本田技研工業株式会社

Table 1 Comparison table of DB software

	Requirements	DB Software		
		Software [A]	Software [B]	GRANTA MI
Input	Material name, standard name and product name can be input together	+++	+++	+++
	Attributes can be added easily, and input template is created automatically	+	++	+++
	Unit can be converted automatically	+++	+++	+++
	Links between data can be created easily	+	++	+++
Display	Display items and layout can be changed according to the purpose	+	+++	+++
	Graphs can be superimposed easily	+	+++	+++
	Graphs can be created from the results of search and statistical processing	+	++	+++
Search	Complex search including process and test conditions can be performed	+	++	+++
Export	Data can be exported in Excel, PDF, CSV format, etc.	+	+++	+++
	Works with Abaqus, LS-Dyna, FEMFAT, Nastran, Enovia, CATIA, etc.	++	+++	++
Administration	Access can be controlled by data, folder or database	+	+++	+++
	Revision and release history remains	+	+++	+++
	Easy modifications for large amounts of data	+	+	+++
	Reliability rank of data can be displayed	+	+++	+++
Cost	Reasonable purchase price and maintenance cost	+++	+	+++

などには個人差があるため、データの分布や試験条件、単位などの情報が欠落したり、材料名として商標名や略称を使用するなどの表記のばらつきが存在したりする。そのため、データ所有者が複数に渡る場合などは、所有者を特定したうえでデータを集約し、必要な関連情報が揃っているものを選別し、データの配置、単位、用語の表記などの形式をそろえたデータリストを作成し、さらに目的に沿ったデータ変換などをおこなってはじめて解析に着手できることとなる。このようなデータを収集、変換、整理するデータクレンジングに要する作業は、MIを含む機械学習にかかる工数の7割を占めるともいわれ、MIを活用する上での大きな課題となっている^{(6), (7)}。

2. 開発のねらい

MIを活用した効率的な材料開発の実現には、材料データベース(DB)へ材料試験データとともに製造条件などの付帯情報を構造的に格納し、それらを定型的に出力することによりデータクレンジングを迅速化することが必要である。さらに、材料試験データとともに設計やCAEに用いる代表的な材料特性が材料DBに一元的に格納し共有されれば、データの標準化、問い合わせ工数抑制、ノウハウの共有、業務負荷の平準化などのさまざまな業務効率の向上や開発コストの削減が期待できる。

そこで、我々は下記の2項目をねらいとした新たな材料DBの構築をおこなうこととした。

- (1) 効率的なMI活用のためのデータクレンジングの迅速化
- (2) 業務効率向上と開発コスト削減のための材料データの一管理

3. MI活用に向けた材料DB

インターネットなどで一般に公開されている材料DB^{(8), (9)}では、社内の試験データを機密保持しながら柔軟に格納することは容易ではない。また、企業内で運用されている多くの材料DBは、ヤング率や密度などの特定の材料特性がリスト化されたものであり、その他の材料特性や詳細な試験データを格納するには多額のシステム改修費が必要となる。さらに、材料DBを構築し長期的に機能させるには、利用者が求める情報が格納されていることだけではなく、ニーズの変化に応じて容易にデータを登録、修正、検索、活用ができるという利便性を考慮する必要がある。

これらを踏まえ、DB構築にプログラミング言語などの専門スキルを必要とせず、柔軟に修正が可能な市販のDBソフトウェアを使用し、利便性の高いDB構造の設計とデータの蓄積をおこなった。

3.1. DBソフトウェア選定

DBソフトウェアの選定にあたり、社内外で実績のある複数のソフトウェアについて、入力機能、表示機能、検索機能、出力機能、管理機能、利用コストなどの事前評価をおこなった。Table 1にそれらをまとめたものを示す。この結果、ソフトウェアBとANSYS社製GRANTA MIがほぼ同等の評価となったが、入力テンプレートの自動生成、複雑な条件での検索と出力、データの一括修正などが可能という特長を重視し、最終的にGRANTA MIを選定した。

Fig. 1にGRANTA MIのシステムの概要を示す。一般のWebアプリケーション同様、各ユーザおよびDB管理者は、

クライアント PC よりイントラネット経由で Microsoft IIS にログインし、GRANTA MI の中核システムである MI Sever でアクセス権の判定やデータ処理がおこなわれ、Microsoft SQL Server 内の複数の DB にアクセスする。また、管理者は利用者の担当業務や専門性の違いによって、データを閲覧、入力、出力が可能な範囲を制限することができる。

3.2. DB 構造の設計

材料分類ごとに、自動車の適用部品とそれらに求められる特性を Fig. 2 に示す。このように、金属では強度や剛性、樹脂材では耐候性や粘性、磁性材では磁気特性など、材料分野ごとに取扱うべき材料物性が異なるため、それに伴い試験方法や登録項目が多様となる。また、製造方法についても、鋳造、圧延、焼結、射出成型、AM などさまざまなものが存在し、それぞれ異なるパラメータを使用するため、

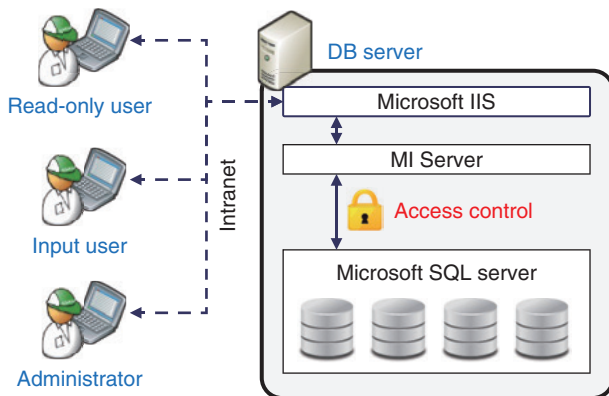


Fig. 1 System configuration of GRANTA MI

個別の DB で管理するほうが効率的である。

一方、設計業務や CAE 解析では広範囲の材料の代表特性値や判定基準値が用いられるが、それらについてもサプライヤや試験環境などが異なる大量の試験データが基になっている。例えば材料の疲労強度基準を設定する際は、想定される使用温度域の各温度で 10 本から 30 本ずつの試験がおこなわれ、さらに表面粗さ、硬さ、品質などによる強度ばらつきの影響が考慮される。そのため、代表値と実データは別に管理する必要がある。

そこで、DB 構造としては Fig. 3 に示すように、代表特性を管理する Design and simulation DB と、材料分野ごとの試験データを管理する Metal DB, Resin DB などの DB に分離する構造とした。さらに、Design and simulation DB では、代表値や保証値などの補足情報と共に物性値を管理する領域 (Design table)、CAE の目的別に特性値を管理する領域 (Simulation table)、部品別に適用材料を管理する領域 (Application table) に分け、相互にリンクする構造とした。一方、試験データを管理する各 DB では、同一の材種でも複数の製造条件で材料試験をおこなうことが想定されるため、材料名リストを管理する領域 (Material list table)、組成や製造条件などの関連情報を管理する領域 (Pedigree table)、各種試験条件とデータを管理する領域 (Test data table) を分け、相互にリンクする設計とした。

こうすることで、設計や CAE の担当者は材料の専門知識が乏しくても業務上必要な代表的な材料特性に迅速にアクセスできるほか、必要に応じてそれらの生データについてもさかのぼって確認することができる。また、材料分野ごとに異なる特殊な試験データや製造条件についても柔軟に入出力することが可能となるため、材料担当者がデータを蓄積し再利用することが容易となる。

	Metals	Polymers	Magnetics and catalysts	Chemical
Parts	 Body, cylinder block, gear, etc.	 Bumper, tire, oil, engine cover, etc.	 Rotor, stator, converter, etc.	 Door, color, seat, etc.
Material	Steel, aluminum, magnesium	Resin, rubber, oil, long life coolant	Ceramics, magnet, precious metal	Adhesive, paint, fabric
Demanded properties	Fatigue strength, elongation, rigidity, weldability, heat resistance, etc.	Environmental resistance, wear resistance, fluidity, etc.	Core loss, flux density, conversion efficiency, etc.	Adhesion strength, anti-corrosion performance, viscosity, etc.

Fig. 2 Material classification and required properties

3.3. データ入力支援機能の追加

前述した GRANTA MI は、入力項目の設定と同時に自動的に入力テンプレートが作成される特長を有するが、初期設定では入力内容への制約がない。そのため、不特定多数のユーザがデータを自由に入力した場合、材料の分類方法やデータの充実度に差が生じ、データクレンジングの負担軽減にはつながらない。例えば樹脂材料では、ベース樹脂、ISO 規格、社内規格、サプライヤのグレード名などさまざまな分類情報を正確に入力する必要がある。また、金属材料では、疲労試験の結果と共に軸方向や曲げ方向などの負荷条件を残す必要がある。しかし、これらの情報に欠落や誤記がある場合、データの修正が必要となるだけでなく、必要なデータが検索できないなどの不都合につながる。

そこで、必要なデータが正しく検索できるように、入力テンプレートへ以下に示すような入力支援機能を追加した。

- (1) 項目の説明: 項目名に対する解釈の違いを最小限とするため、項目の説明と実例を示した。
- (2) 選択リストの設定: 入力する単語表記をそろえるため、分類など記入内容が限定される項目はプルダウンメニューからの選択とした。
- (3) 画像ファイル名入力: 大量の画像の入力を効率化するため、テンプレート上の画像ファイルの名称が自動的に記入される機能を追加した。
- (4) 自動記入: ID などの管理上のルールに沿って記入されるべき項目は自動記入とした。
- (5) 内容チェック: テキスト、数値、日付などのデータ形式が正しいことや、必須項目が記入されていることをインポートの前に確認できるようにした。

Table 2 Number of records

Material categories	Databases	
	Design and simulation	Metal, resin, etc.
Metals	755	7104
Resins	304	363
Rubbers	87	495
Magnetics	121	785
Fluids	49	66
Catalysts	0	394

3.4. 材料データの一元管理

MI を活用するにはより多くの実験データが準備できることが望ましい。しかし、材料データは試作材の合成と試験片の作成を伴うため、数千、数万といった量のデータ取得は容易ではない。そこで、少ないデータ数においても特性予測が可能となるスマートマテリアルズインフォマティクス手法⁽⁵⁾を活用し、予測が可能となるデータの数を検討した。ここでは、人工データによるデータ数と予測誤差の把握および触媒、磁石、熱電材料の実データでの検証がおこなわれ、その結果、予測が有効に機能するには1件につき少なくとも数十から百データが必要と述べられている⁽⁵⁾。これを踏まえ、本DBでの蓄積データ数の目標値は自動車に用いられる主要500材種の合計として1万件と定め、体験型社内セミナーなどの入力促進活動をおこなった。その結果、Table 2に示すように2020年4月時点までの約3年間で目標数相当のレコードの登録が完了した。これは、航空機用材料DBのMMPDSの1130件、

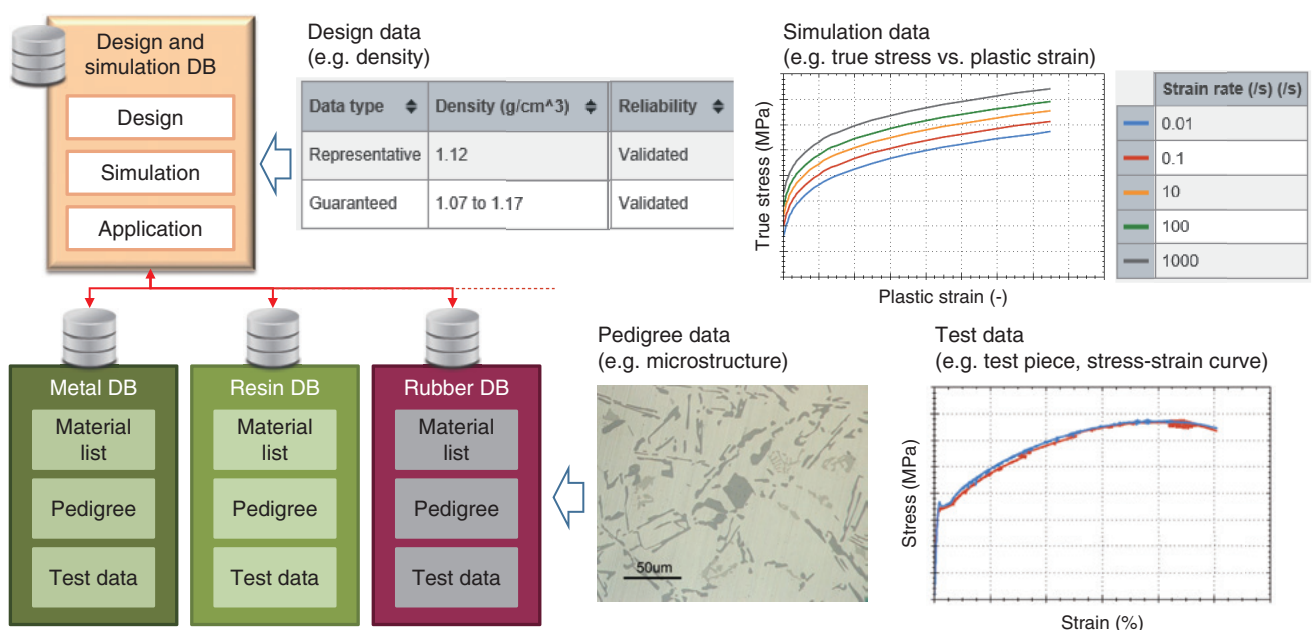


Fig. 3 Structure of database and example data

金属材料 DB の MI-21 の 6600 件に匹敵する量となっている。

4. 技術適用事例紹介

4.1. MI 活用による新規材料開発の促進

これまででは、MI を活用するためには、材料の製造条件や試験条件が明らかな試験データを収集、選別しデータ形式を揃えるといったデータクレンジングに多くの工数をかける必要があった。しかし、本 DB では蓄積された試験データを関連情報と共に統一された形式で格納および出力ができるため、データクレンジングを大幅に削減して MI を活用することが可能になる。一例として、Fig. 4 に化成材の試験データを格納および出力した結果を示す。ここでは、化成材を構成する化合物の組み合わせの情報とともに、接合強度と粘性の測定結果をリンク形式で格納し、さらに 25 通りの試験結果をリスト形式で出力している。このように、入力テンプレートに従ってデータを入力することにより、データ変換は従来同様に必要となるものの、データ収集、データ選別、形式統合にかかる時間が大幅に短縮されるため、Fig. 5 に示すようにデータクレンジングにかかる総時間を 80% 以上削減することができた。

続けて、この試験結果を MI に適用し材料特性を予測した結果を Fig. 6 に示す。ここでは、DB より出力した 25 個の試験結果より各構成要素と各材料特性の相関を求め、そ

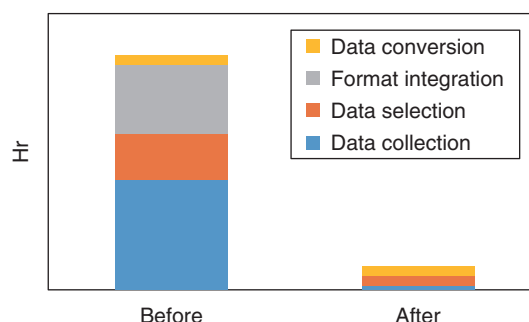


Fig. 5 Change in data cleansing time

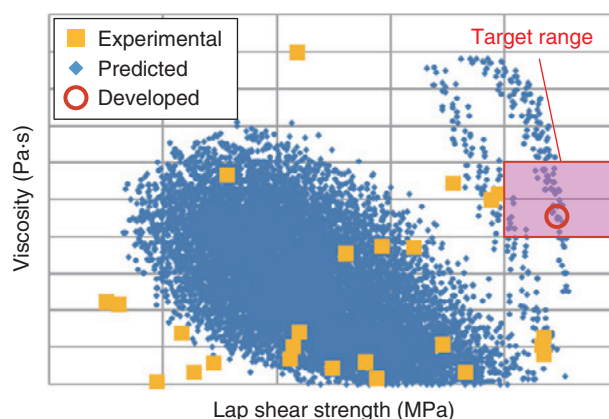


Fig. 6 Property predicted results of adhesive materials

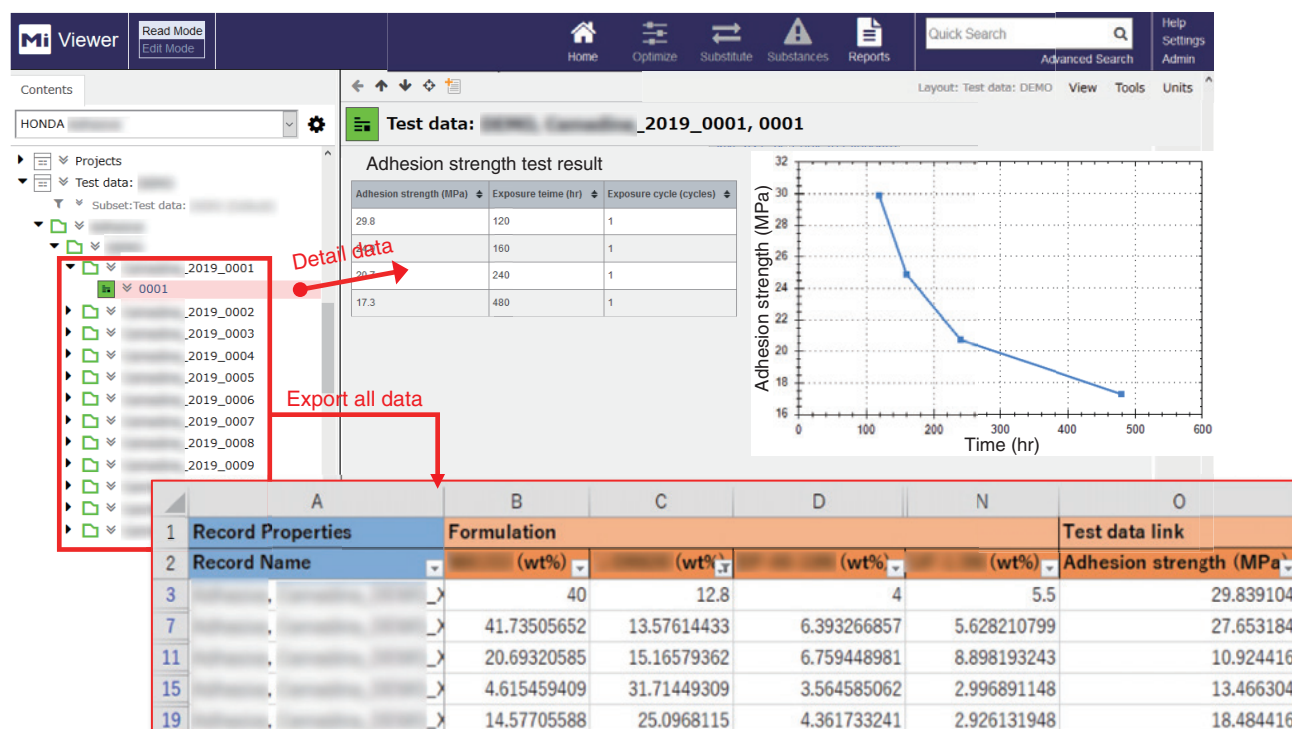


Fig. 4 List output of adhesive test data

れをもとに 40 万通りの構成要素の組み合わせにおける未知の接合強度と粘性を予測しプロットしている。この図より、自動車製造ラインで求められる粘性範囲で、高い接合強度が得られる構成要素の組み合わせを効率的に抽出することが可能となる。一例として、Fig. 6 に赤丸で示した開発材における材料特性の実測値と予測値を比較し Fig. 7 で示す。以上のように、本 DB へ蓄積したデータと MI を併用することにより、未知の材料特性を高い精度で予測でき、新規材料開発の方針が得られた。

4.2. 業務の効率化

材料担当者は、部品ごとの使用環境負荷を考慮して機能を検証することを業務の一端としておこなう。例えば、ゴム材料は使用温度と材種によって機能を維持できる寿命が変化するため、個別の部品ごとに寿命検証を実施し必要に応じて大量の材種から代替材料を検討する。この場合、従来では比較対象となる全材料の耐熱性データを収集し、Excel 上の作図によって比較をおこなう必要があったが、本 DB では Fig. 8 に示すように蓄積されたデータから各材料の耐熱特性を重ねて表示することが可能となるため、より短時間で広範囲の材料から使用環境に適した材料を検討することが可能となる。また材料特性が不明な材料であっても、過去データからおおよその特性を推定することも可能となる。一例として、Fig. 9 に電磁鋼板の 160 件の個別の磁気特性測定データから、低周波域と高周波域の鉄損の値を抽出し X-Y グラフで表現した例を示す。この図より、各特性の相関が板厚によって異なることを定量的に表現することが可能となるため、特性が測定されていない板厚の材料に関しても、より正確な推定が可能になる。

設計業務においては、材料特性から材種の選定をおこなう際に本 DB を利用することによる効率化が見込める。一例として Fig. 10 に 200 種以上登録されている鉄鋼材料データのうち、800℃ での代表特性として耐力が 80 MPa

以上かつ引張強度が 100 MPa 以上のものを抽出した結果を示す。本 DB では、このように要求特性値の範囲のほか、保証値や代表値などの付帯情報により材料を検索できるため、専門の材料担当者に問い合わせなくとも設計者自身が材料の候補を絞り込むことができる。これにより、設計者の作業効率が向上するほか、社内で標準化された物性値での設計検討が浸透し、設計品質の向上や開発の手戻り抑制につなげることが期待できる。

さらに、本 DB では CAE の目的別に材料モデルを保管しているため、例えば国内の自動車開発で使用している衝突解析向けの材料特性を海外の開発現場でも同じ用途で活用することが可能となる。これにより CAE 作業の効率化が見込める上、これまで材料モデル構築のために部門ごとに重複しておこなわれてきた材料試験の費用を削減することが可能となる。その結果、Fig. 11 に示すように材料 DB 導入にかかるライセンスやサーバー管理費用等を加算しても約 41% もの材料特性取得費用の削減になると試算することができる。

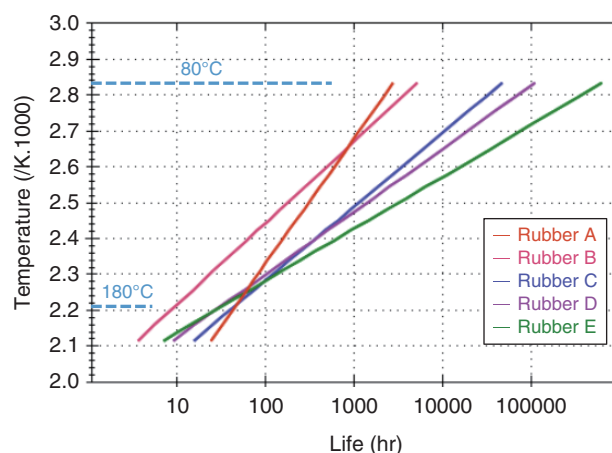


Fig. 8 Temperature and lifetime of rubber materials

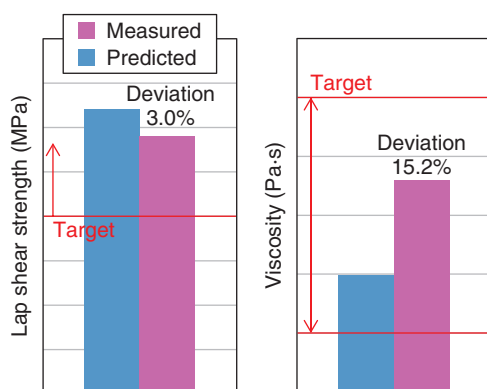


Fig. 7 Properties of developed material

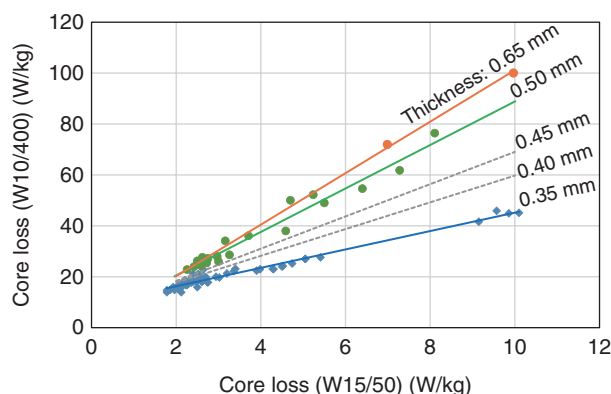


Fig. 9 Relationship of core losses by frequency of electrical steel sheet

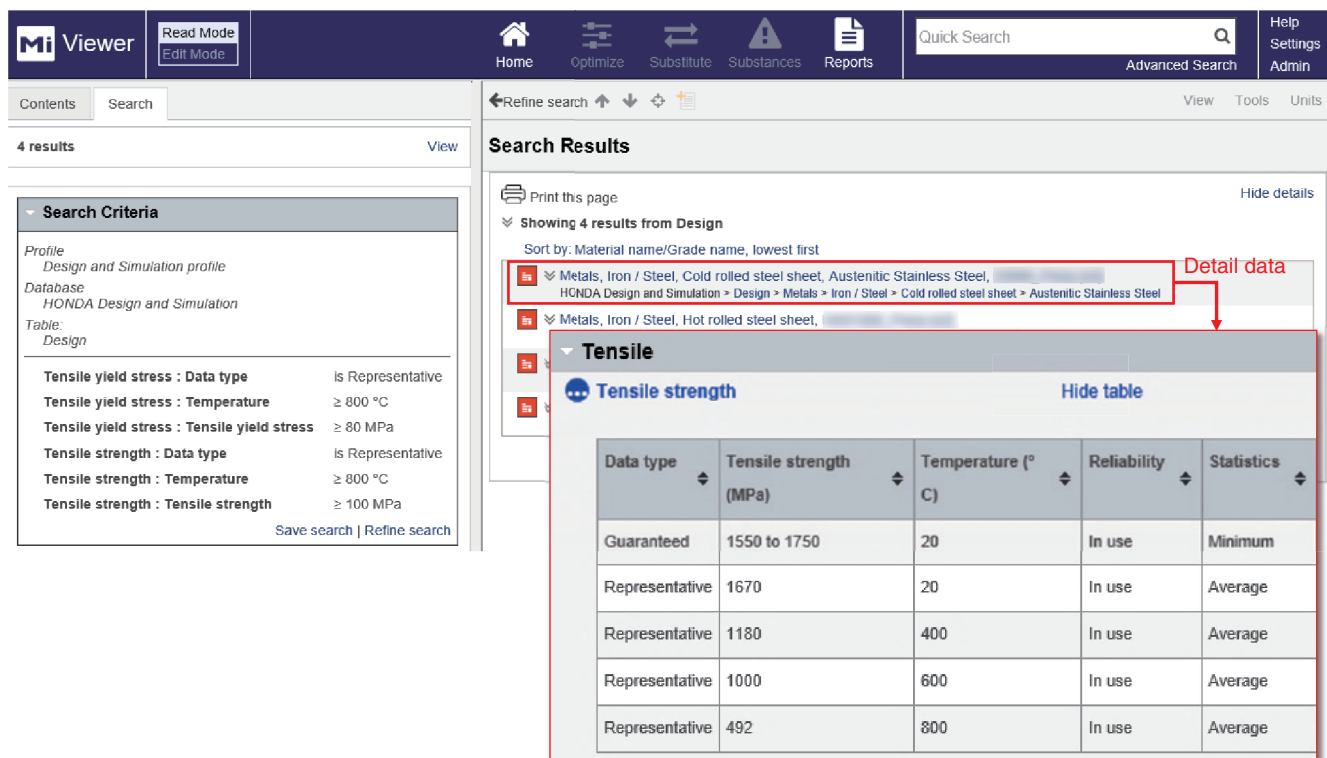


Fig. 10 Search results by material properties

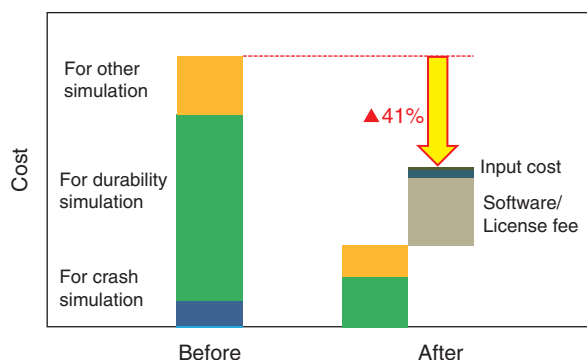


Fig. 11 Material property measurement cost for simulation model

5. まとめ

MI の活用による開発業務の効率化を目的として、社内の多様な材料データを付帯情報と共に構造的に格納、管理、出力できる材料 DB を設計構築した。これによって得られた以下のような効果について述べた。

- (1) 本 DB へ蓄積したデータと MI を併用することにより、未知の材料特性を高い精度で予測でき、新規材料開発の方針が得られた。
- (2) 材料分野ごとの試験データを関連情報と共に構造的に格納し出力することで、MI を利用する際の課題で

あったデータクレンジングにかかる工数を大幅に削減できた。

- (3) 設計や CAE に用いる標準的な材料特性を材料試験データと分けて管理する構造とすることで、各担当者自身が必要とする材料特性にアクセスできるほか、国内外の開発部門とデータを共有することで、材料モデルの構築にかかる材料特性取得費用を削減できることを示した。

参考文献

- (1) 今西智之, 朝見明彦, 実吉勇一郎: アルミニウム中空ダイカスト大型軽量サブフレーム, Honda R&D Technical Review, Vol. 29, No. 1, p. 43-48
- (2) 山根保夫, 桜庭智裕: CFRP による軽量フードおよびリアスポイラの開発, Honda R&D Technical Review, Vol. 15, No. 1, p. 209-214
- (3) 鷲頭和裕, 武石伊久雄, 佐藤直樹, 大岸秀高, 田畑勝宗: マグネシウム高圧ダイカスト製インテークマニホールドの開発, Honda R&D Technical Review, Vol. 17, No. 2, p. 32-37
- (4) 浅沼雅彦, 遠藤恒雄, 酒井仁史: アディティブマニファクチャリングを用いたスターリングエンジン熱交換器製作手法の紹介, Honda R&D Technical Review, Vol. 28, No. 1, p. 166-173

- (5) 古川敦史, 池田知廣, 岡山竜也: スマートマテリアル
ズインフォマティクスを用いた材料研究手法, Honda
R&D Technical Review, Vol. 29, No. 1, p. 84-90
- (6) <https://findy-code.io/engineer-lab/machine-learning-tough-work>
- (7) 則尾新一: トヨタ自動車九州(株)における「機械学習
の人財育成・教育」の取り組み, 品質, Vol. 49, No. 2,
p. 160-164, (2019)
- (8) Metallic Materials Properties Development and
Standardization (MMPDS), 14th Edition, Federal
Aviation Administration, p. 2535, (2019)
- (9) <https://www.totalmateria.com/>

■ 著 者 ■



伊藤 剛



石井 達子



本田 寛



杉本 直



豊岡 洋一



古沢 透流