

【研究論文】

【令和5～7年度 県単独試験研究】

適応的実験計画法による開発加速化

内海 宏和

材料開発・分析技術部

製品やプロセス開発の効率化は、ものづくり企業にとって重要な課題である。従来の開発においては、知識や経験に基づく仮説を構築し、実験等により検証する手法であった。これに対して、近年、データから仮説を生成・検証し、その結果に基づいて新たなデータを取得する、というデータ駆動型アプローチが注目されている¹⁾。このようなアプローチを実験計画に適用する手法は、適応的実験計画法と呼ばれ、材料開発や創薬、プロセス開発に適用されている²⁾。本手法を用いれば、効率良く目標に到達することが期待されるが、規模の小さな企業が取り組むにはハードルがやや高い。そこで、本研究では、当センターのような公的機関が先んじて取り組み、事例集積を図ることで、地域企業が喫緊に取り組むべき課題の効率的な解決に貢献することを目的とする。本手法を実施するためのコードは、公開されているもの³⁾をカスタマイズした。構築したコードを様々な最適化課題に適用した。本報告では、焼結条件、平面研削加工条件、自然空冷ヒートシンク形状の最適化課題に組み込み、効率的に最適解を導いた結果を報告する。

キーワード：適応的実験計画法、ガウス過程回帰、ベイズ最適化、焼結、平面研削、ヒートシンク

1 緒言

県内ものづくり企業を取り巻く環境は、近年大きく変化している。顧客ニーズの多様化に加え、脱炭素化、資源循環、サプライチェーン強靱化への対応が求められる一方、生産年齢人口の急速な減少により、経営資源には制約が生じている。そのため、製品開発や生産プロセスの変革を、効率的かつ継続的に進めることが重要となっている。

従来、製品やプロセスの開発では、過去の経験や知識に基づく仮説を検証するため、実験計画を設計することが一般的であった。一方、近年では、データを活用して仮説の生成・検証を行い、その結果に基づいて次に取得すべきデータを選択するデータ駆動型アプローチが注目されている¹⁾。

このようなアプローチを実験計画に適用する手法は、適応的実験計画法と呼ばれ、材料開発や創薬、プロセス開発などに適用されている。図1に、適応的実験計画法の流れを示す²⁾。得られた実験データからモデルを構築し、そのモデルに基づいて次に実施すべき実験条件を提案する過程を繰り返す。これにより、限られた実験回数の中で効率的に目標性能に近づくことを目指す。さらに、ベイズ最適化を用いることで、有望な条件に加え、不確実性が大きく新たな発見につながる可能性のある条件も選択できる。

このような手法は、開発プロセスを加速化させる有力な手段であるが、規模の小さい企業が取り組むにはハードルがやや高い。そこで当センターのような公的機関が先んじて取り組み、事例を集積することで、地域企業が喫緊に取り組むべき課題の効率的な解決に貢献する。

本研究では、適応的実験計画法を実行するコードをpythonで構築し、様々な最適化課題に適用した。その中から、焼結条件、研削加工条件、自然空冷ヒートシンク形状の最適化課題に取り組んだ結果を報告する。

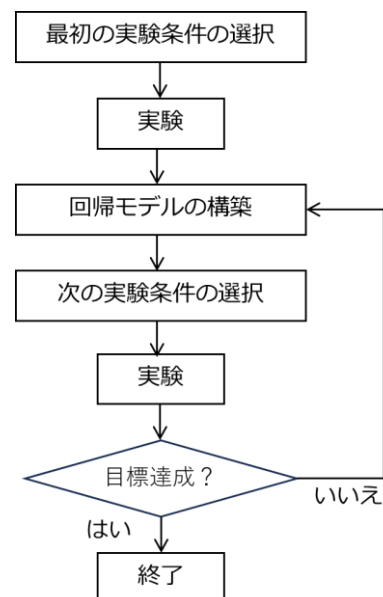


図1 適応的実験計画法の流れ²⁾

2 構築したコード

回帰モデルを1種類のみとしたS-Adaptiveと、複数の回帰モデルを適用するM-Adaptiveを構築した。いずれも無償で配布されているもの³⁾をカスタマイズした。図2に、構築したコードの概略を示す。

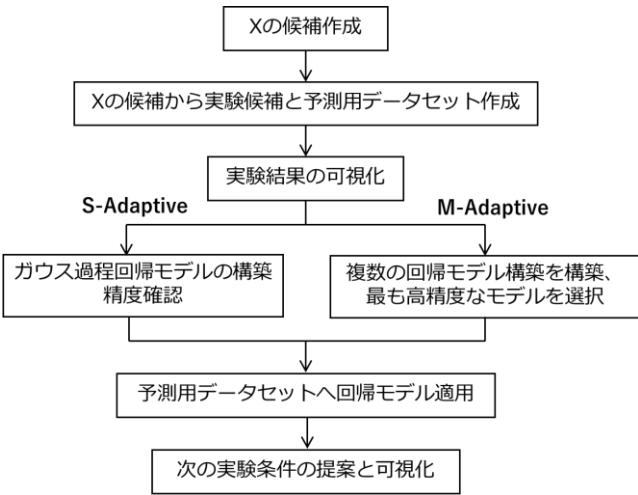


図2 構築したコードの概略

S-Adaptiveは、ガウス過程回帰モデルのみを適用する。11種類のカーネル関数から、クロスバリデーションにおける推定結果の相関係数の二乗が最大となるものを選択する。M-Adaptiveは、7つの回帰モデルを適用し最も精度が高いものを選択する。いずれのコードも予測用データセットに回帰モデルを適用し、目的とする特性値が最大となるよう次の実験条件を提案する。ガウス過程回帰モデルを用いた場合は、バイズ最適化により次の実験条件を提案することもできる。また、いずれのコードも目的とする特性値が複数ある場合にも対応する。

3 適用事例

3.1 焼結条件最適化

原料粉末は、株式会社フジミインコーポレーテッド製の高純度イットリア(Y_2O_3 、純度99.99%)を用いた。粒度は、 $63 \pm 10 \mu m$ である。カーボン型(内径20 mm、外径50 mm)を使用し、放電プラズマ焼結機(住友石炭鉱業、Dr.Sinter SPS-7.40)により焼結を実施した。最適化する焼結条件は図3に示す温度プロフィールと荷重、原料粉末量とした。目標は密度の最大化とした。密度は、上下面を研削した後、大気炉でカーボンシートを除去してアルキメデス法により測定した。

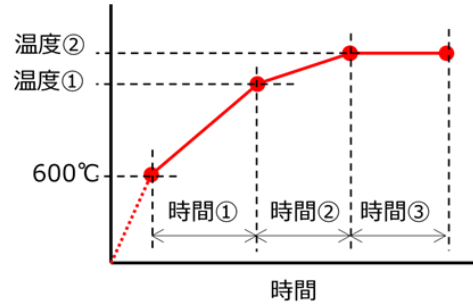


図3 最適化する温度プロフィール

表1に最適化する実験条件の探索範囲を示す。この範囲内で、乱数に基づき多数の実験候補を作成し、その中からD最適化基準に基づき実験候補を選択した。なお、温度プロフィールには温度① < 温度② かつ 時間① + 時間② + 時間③ = 50分の制約を設けた。得られた候補から実験候補として10条件を選択した。

表1 実験条件の探索範囲

実験条件	上限値	下限値
時間① (分)	40	10
時間② (分)	40	10
時間③ (分)	30	5
温度① (°C)	1550	1000
温度② (°C)	1600	1200
荷重 (kN)	30	15
充填量 (g)	12.5	4.7

図4に、温度②および荷重と、実験の結果得られた密度の関係を示す。温度②は、他のパラメータに関わらず密度と比例関係であるのに対し、荷重は相関が弱い結果となった。

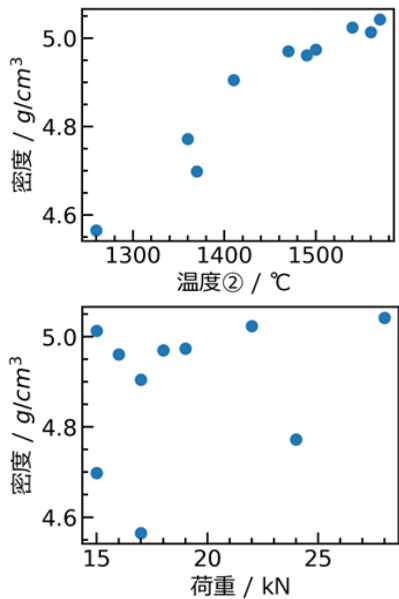


図4 選択された実験条件における結果

回帰モデルは、目的関数の推定値だけでなく、推定値の分散も計算できるガウス過程回帰モデルを適用した。カーネル関数をクロスバリデーションにより選択し、非線形に拡張した。作成したモデルを用いて実験条件から計算された推定密度と実測値を比較した結果を図5に示す。これより、今回構築したモデルの精度は良好と考えられる。

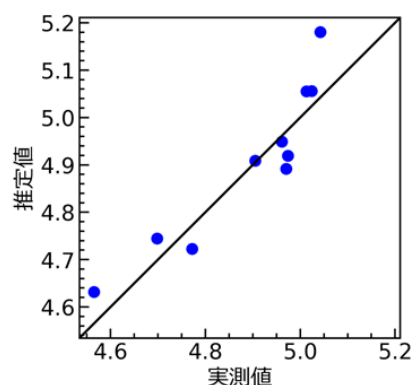


図5 ガウス過程回帰を行った際の、密度の実測値と推定値の関係

得られたモデルを実験条件の探索範囲内の候補に適用し、EI (Expected Improvement) 値を算出した。EI値はこれまでに観測された最良値をどれだけ上回る期待があるかを示すものである。EI値が最大となる条件で焼結実験を実施した。表2に、結果を示す。得られた焼結体の密度は理論値にほぼ近い値となった。

表2 酸化イットリウムの加圧加熱焼結の最適条件

実験条件	値	密度の 予測値	密度の 実測値
時間① (分)	11	4.95	5.02
時間② (分)	26		
時間③ (分)	12		
温度① (°C)	1230		
温度② (°C)	1440		
荷重 (kN)	27		
充填量 (g)	12		

3.2 平面研削加工条件の最適化

薄板を平面研削加工すると、研削面に生ずる残留応力の影響で反りが発生する。本事例では、反り量が最も小さくなる加工条件を探索することとした。被削材はSUS420J2焼き入れ材で、直径45 mm、厚さ1 mmとした。加工前の反り量は概ね5 μ m程度であった。使用した加

工機は(株)ナガセインテグレックス製 サドル型高精度成形平面研削盤(型式SGE-520SLD2-E2)である。研削量は0.3 mmとした。砥石は直径180 mmのCBNレジンボンドホイール、粒度#170で、砥石回転数、テーブル速度、切り込み量と前加工に対する研削方向をパラメータとして選定した。表3に加工条件の探索範囲を示す。

表3 平面研削加工条件の探索範囲

実験条件	上限値	下限値
砥石回転数(rpm)	1500	1000
テーブル左右速度 (目盛位置)	4	1
粗研削時のテーブル 前後速度 (mm/min)	200	50
精研削時のテーブル 前後速度 (mm/min)	200	50
粗研削切込み量 (μ m)	10	5
粗研削切込み回数	59	1
精研削切込み量 (μ m)	5	1
精研削切込み回数	200	1
ゼロカット回数	5	1
加工角度(°)	90	0

研削量の合計が0.3 mmとなるよう切込み量と回数に制約を設けて、ランダムに実験条件の候補を作成した。この中から、D最適化基準に基づき実際に実験する条件を10個選択し、研削実験を実施した。反り量はワシヨット測定顕微鏡(VR-3200/3000)を用いて全体の三次元形状を取得した後、最も反り量が大きい方向の断面プロファイルから求めた。

7つの回帰モデルから最も精度が高いモデルを選択するM-Adaptiveを適用したところ、非線形重回帰(2次)モデルが選択された。このモデルから予測される反り量が最も小さくなる条件を3個選択し、実験を追加した。新たに追加されたデータセットを用いて、再度モデルを作成し、新たなモデルから予測される条件を2個選択し、さらに実験を追加した。

図6に、実験の進行に伴う反り量の変化を示す。本手法により選択される条件が、効率よく最適値に向かっていくことが示された。

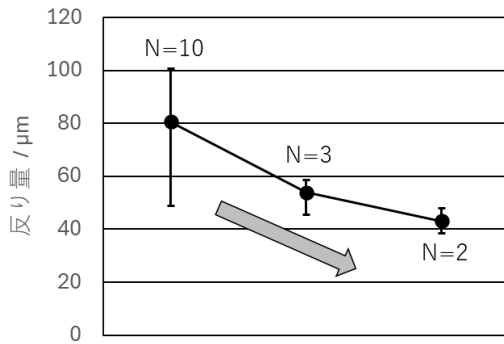


図6 実験の進行に伴う目標量(反り量)の変化

図7に、15条件のデータセットから求めた、各実験条件と反り量の相関係数を示す。加工角度(theta)の相関係数が高く、角度が大きいくほど、反り量が小さくなる可能性があることがわかった。

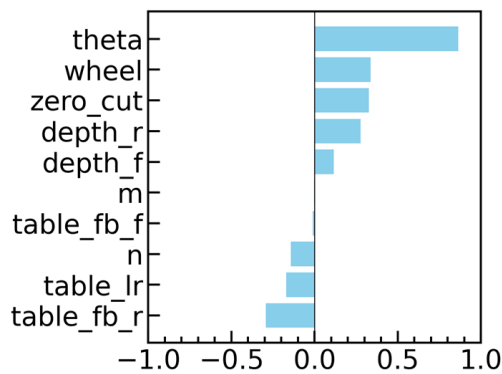


図7 研削条件と反り量の相関係数

図8に、加工角度と切込み量(粗、精)を変化させ、その他の変数を固定した条件における反り量の予測値の分布を示す。加工角度と切込み量以外のパラメータは、ランダムに作成した実験候補のうち、最も反り量が小さくなると予測される値で固定した。図中のプロットは、実際の実験結果である。プロット内の色は、暖色系ほど良好な値であることを示す。

本事例で作成された予測モデルは、加工角度と切込み量が実験範囲の最大側に寄るほど、反り量が小さくなる傾向となった。切込み量が多いと、加工回数が少なくなる。これは、加工回数が増えるに従い、残留応力が蓄積されて反り量が大きくなることを示唆している。加工角度は、前加工と同じ方向であることが望ましいとの結果であるが、この理由は今後の検討が必要である。

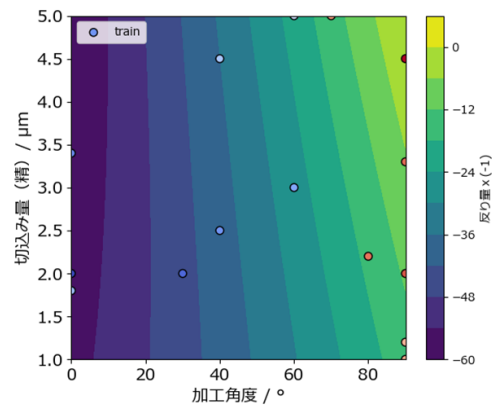
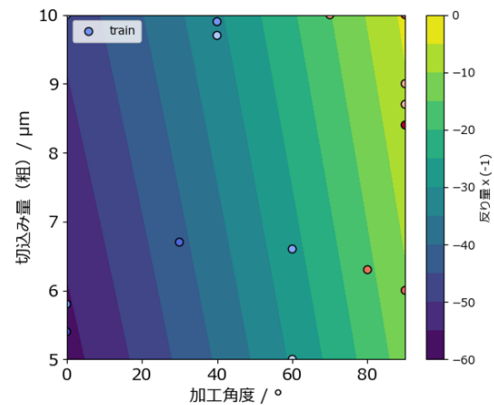


図8 加工角度と切込み量に対する反り量(予測値)の等高線図

3.3 自然空冷ヒートシンク形状の最適化

CAE(Computer Aided Engineering)を用いて、自然空冷ヒートシンクの形状最適化を試みた。図9に、定常伝熱解析モデルを示す。幅100 mm×奥行100 mm×高さ50 mmのケース上部にヒートシンクが設置されているとした。ケース内部のヒートシンク側壁に30 Wの熱源を配置した。ケース、ヒートシンクの材質はアルミニウムとし、熱源の材質は二酸化ケイ素とした。フィンの熱伝達係数(フィン面 h_F 、フィン底面 h_B)は、自然空冷フィンの理論式⁴⁾を適用した。熱伝達係数の算出に必要なヒートシンク代表温度と雰囲気温度の差は50 Kとした。なお、今回の計算に用いた解析ソフトはAnsys Mechanical 18.2(Ansys, Inc.)である。

解析により最小化したい特徴量は熱源表面温度とした。最適化する形状パラメータは、フィン枚数 N 、フィン高さ a 、フィン間隔 s 、フィン厚さ t とした。表4に、各パラメータの探索範囲を示す。

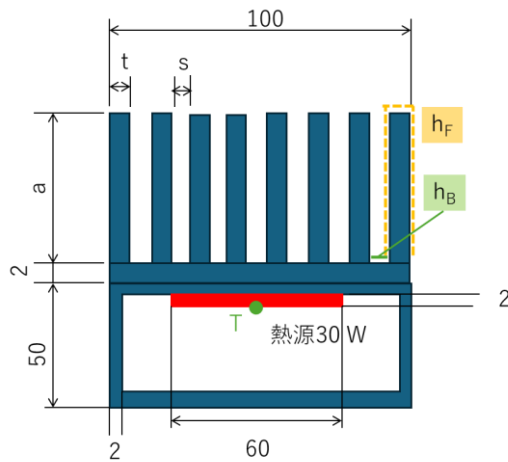


図9 定常伝熱解析モデル(断面)

表4 ヒートシンク形状パラメータの探索範囲

形状パラメータ	上限値	下限値
フィン枚数N	25	5
フィン高さa(mm)	150	20
フィン厚さt(mm)	8	2
フィン間隔s(mm)	20	2

フィンの形状パラメータ候補は、幅100mm×奥行100mmとなるよう制約を設けてランダムに作成した。この中から、D最適化基準に基づき実際に計算する条件を10個選択した。ガウス過程回帰モデルを使用するS-Adaptiveを適用した。得られたモデルをフィン形状パラメータ候補に適用して、熱源表面の温度を予測した。この予測値が最も小さくなる条件を選択し、実際に計算した。これを3回繰り返した。

図10に、計算の進行に伴う熱源表面温度の変化を示す。本手法により選択される条件が、効率よく最適値に向かっていることが示された。

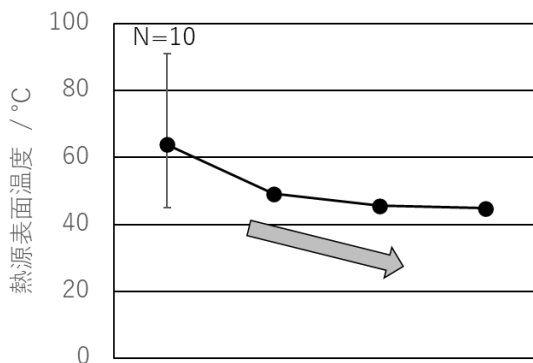


図10 計算の進行に伴う目標量(熱源表面温度)の変化

得られた13条件の結果から、熱源表面温度を予測するガウス過程回帰モデルを作成した。図11に、フィン枚数Nとフィン間隔sを変化させ、フィン高さaを150mmに固定した条件における熱源表面温度の予測値の変化を示す。青で示したプロットが予測値を示す。赤で示したプロットは、各フィン枚数のうち、もっとも予測値が低い条件で実際に計算した結果を示す。ガウス過程回帰モデルによる予測値と実際の計算結果には差があるものの、傾向は一致した。

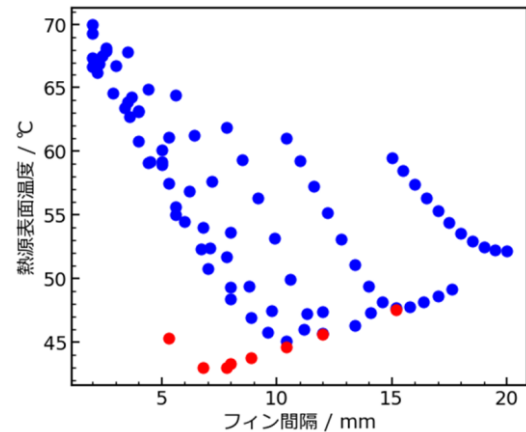


図11 ガウス過程回帰モデルによる予測値と各フィン枚数のうち最も予測値が低い条件における実際の計算値

これらより、導出された自然空冷ヒートシンク形状の最適値は表5のとおりであった。限られた計算回数から全体の傾向を把握して最適な条件を絞り込み、実際に計算して最適値を得た。

表5 導出された最適値

形状パラメータ	最適値	熱源表面温度
フィン枚数N	11	43.0 °C
フィン高さa(mm)	150	
フィン厚さt(mm)	2	
フィン間隔s(mm)	7.8	

4 結言

データ駆動型アプローチである適応的実験計画法を実行するためのコードをpythonで作成した。具体的には、ガウス過程回帰のみを使うS-Adaptive、7つの回帰モデルから、自動的にモデルが選択されるM-Adaptiveの2種類を構築した。これらを用いて、焼結条件、平面研削加工条件、自然空冷ヒートシンク形状の最適化課題に取り組んだ。いずれの課題でも、作成したコードは効率的に最適解を導いた。最適化構造が単純と考えられる焼結やヒートシンク形状では、15条件程度の学習デー

タで、最適値を導くことが可能であった。一方、パラメータ数が多い研削においては、実験データを追加する必要があると考えられる。しかしながら本事例のように限られた実験回数でも、パラメータの変化による傾向を可視化することで、最適構造を把握することができた。これにより、パラメータの物理的意味を考察しながら、最適な条件を検討することが可能である。

本研究で示したアプローチで最適課題に取り組む場合、最初に実施する多数の実験候補の作成が重要である。これらから、予測モデルを作成する基となる実験条件が選択される。これにはD最適化基準という手法が用意されているが、最初の候補作成については、制約条件の組み込み方や、生成した候補に偏りがないかなど、検討すべき点は多い。より簡便に作成、確認できる手法の確立が望まれる。この点も含め、地域企業への展開を念頭に、より使いやすく改善していく。

参考文献

- 1) 今村英明, 松井孝太. ベイズ最適化-適応的実験計画の基礎と実践-, 近代科学社, 2023, 316p.
- 2) 金子弘昌.Pythonで学ぶ実験計画法入門 ベイズ最適化によるデータ解析, 講談社, 175p.
- 3) https://github.com/hkaneko1985/python_doe_kspub (accessed 2022-04-14)
- 4) 日本機械学会, 伝熱工学資料改定第5版, 丸善株式会社, 246p-247p.