

技術開発プロセスへのインフォマティクス適用検討

A Study on the Application of Informatics to Development Processes

鈴木 匠
Takumi SUZUKI

守安 藍海
Ami MORIYASU

菊池 類
Rui KIKUCHI

高村 瞭太
Ryota TAKAMURA

小林 公樹
Hiroki KOBAYASHI

箕輪 昌啓
Masahiro MINOWA

製造・材料開発の複雑化により経験則主導の限界が顕在化した背景を踏まえ、インフォマティクス導入の有効性と課題を明確化することを目的とした。ソフトウェアとして、mi-HubとMulti Sigmaを選定し、異形押出ダイス最適化、成型品用ゴムの多目的配合探索、銅銀合金の硬度・導電率予測モデルの構築、サロゲートによる平角線皮膜厚推定を実施した。非常に高速、高精度で高機能であるが、変数設計、データ整備、解釈性に課題があると考えられる。

Against the backdrop of increasing complexity in manufacturing and materials development, which has highlighted the limitations of rule-of-thumb approaches, this study aimed to clarify the effectiveness and challenges of introducing informatics. The software mi-Hub and Multi Sigma were selected to perform the following tasks: optimizing irregularly shaped extrusion dies, exploring multipurpose formulations for molded rubber products, constructing prediction models for the hardness and conductivity of copper-silver alloys, and estimating flat wire coating thickness using surrogate models. While these tools offer extremely high speed, precision, and functionality, challenges remain in variable design, data preparation, and interpretability.

1. はじめに

近年、製造および材料開発分野においては、社会的要求の多様化や品質向上、コスト競争力強化、開発サイクルの短縮化が急速に進展する中、従来型の経験則主導に基づく技術開発プロセスの限界が顕在化しつつある。特に、製品仕様や材料特性に関連する変数が複雑化・多様化する中で、膨大な検討パターンを短期間かつ高い精度で探索する手法へのニーズが高まっている。一方、これまで主流だったトライアンドエラーを中心としたアプローチは、必要な知見の網羅性や再現性・標準化、さらに技術伝承の観点においても多くの課題を抱えている。こうした状況に対応するため、あらゆる産業分野においてデジタル技術を活用した業務革新、いわゆるデジタルトランスフォーメーション(DX)の取り組みが不可欠となっている。特に、材料科学やプロセス開発の領域では、現場から得られる膨大な実験データや解析データ、生産データを有効活用して知識発見や工程改善につなげる「インフォマティクス」の重要性が急速に高まっている。インフォマティクスとは、多様な情報ソースから抽出されたデータを統計学、機械学習、情報科学の枠組みで解析し、新しい知見や規則性、因果関係の発見を

実現するための学際的手法を指す。近年の計算資源の向上やデータベース構築技術、アルゴリズムの発展により、マテリアルズ・インフォマティクス(Materials Informatics: MI)をはじめとする応用が加速度的に拡大しており、新材料設計の効率化や製造プロセス条件最適化、品質予測および不具合要因解明など、幅広い技術課題の解決が現実のものとなりつつある。

実際に、これまで膨大な工数を要していた配合設計、プロセスパラメータ最適化、物性予測モデルの構築など、従来法では困難だったタスクが、データ解析や機械学習モデルの活用によって飛躍的に効率化されているとの報告もなされている[1, 2]。また、インフォマティクス手法を導入することで、技術検討時の論理的根拠の明確化や意思決定プロセスの客観化、属人性からの脱却といった副次的効果も期待できる。これにより、専門人材依存の軽減や技術伝承の質的向上といった、中長期的な組織競争力強化にもつながる可能性が示唆される。

一方で、インフォマティクス技術の業務導入にはいくつかの障壁が存在する。たとえば、質・量ともに十分なデータの収集・整備、解析結果の現場応用性評価、ユーザーと

の協働による運用サイクル確立、導入に適した解析ソフトウェアやツール類の選定など、技術的・実務的課題が残存している。また、材料システムやプロセス領域ごとに要求されるモデル構築アプローチも多岐にわたり、現行業務プロセスとの親和性・適合性についても慎重な検討が必要である。

本研究は、このような背景を踏まえ、当社技術開発分野におけるインフォマティクスの実務適用を主眼に、具体的な事例分析を通じて導入効果および課題を抽出・整理することを目的とする。樹脂材料やゴム材料、異形押出ダイス設計、伸線加工特性予測、薄膜分布推定など、幅広い製品・技術領域に対し、データ駆動型手法によるアプローチとその実用上の知見を蓄積するとともに、多様な解析ツールの選定・適用過程を明らかにする。また、得られた知見を基に、今後の業務プロセス改革と技術開発に向けたインフォマティクス導入戦略の展望についても議論することとした。

本稿が、材料・プロセス技術開発分野におけるインフォマティクス手法の実装推進と、データ主体型ものづくりへの高度化に向けた実践的指針の一助となることを期待する。

2. ソフトウェアの選定

本研究においては、技術開発プロセスへのインフォマティクス適用に際し、国内外で普及している複数の機械学習系ツールを比較検討した。その中から、最終的に mi-Hub および Multi Sigma を主要ツールとして選定した。本節では、それぞれの機械学習ツールの特徴、および選定理由とあわせて、mi-Hub と Multi Sigma のメリット・デメリットを中心に比較する [3-5]。

mi-Hub は、マテリアルズ・インフォマティクス (MI) 用途に特化した国内発のプラットフォームである。日本語インターフェースや技術サポートの充実といった点から国内利用ユーザーによる導入が進んでおり、材料開発の実務課題への応用実績も豊富である。特に、材料配合や条件検討のような複数パラメータの最適化や、抽出した特徴量に基づいた解析など、一連のワークフローが直感的かつ効率的に実装できることが他製品と比較した際の優位点である。また、標準搭載されるベイズ最適化や可視化ツールなどは専門知識がなくとも扱えるため、現場エンジニアへの普及促進にも寄与している。

一方、カスタマイズ性や拡張性、高度なアルゴリズム実装といった側面では制約がある。外部ツールとの連携や独自の解析フロー構築といった先進ユーザー要件には十分応えられず、規模の大きなデータセットや分野横断的な開発では柔軟性に欠けることがある。

Multi Sigma は、マルチパラメータ最適化や多目的最適化に対応したエンジニアリング・インフォマティクスツールで、特に材料設計や生産プロセス設計領域での利用実績が多い。複数の目的関数や制約条件を扱えること、高度な

アルゴリズム (多目的ベイズ最適化、進化的最適化手法等) の選択肢が豊富なことから、複雑な開発テーマや高精度な条件探索に有利である。GUI インターフェースも比較的洗練されており、大規模なデータセットや連続的な業務利用にも耐えうる設計となっている点も評価できる。

一方で、操作性はやや専門的であり、初学者にとってはトレーニングや解説が不可欠となる。また、前処理やデータ整理といった部分の柔軟性は高いが、その分運用には一定の IT リテラシーが求められる。プロジェクトに合わせた活用展開には、経験豊富な担当者の関与が望まれる。また、連鎖解析という複数の AI モデルを組み合わせて最適化を行うユニークな手法で多目的最適化が可能である点も有用である。

総合的に検討した結果、現場での技術開発ニーズ、人的リソース、データ状況および導入コスト・教育体制を総合的に考慮し、mi-Hub と Multi Sigma を本研究の適用ツールとして選定した。mi-Hub は直感的なワークフローと現場への親和性を活かして一般材料開発プロジェクトへ、Multi Sigma は高度な条件最適化や多目的開発テーマへの展開に活用していく方針とした。

3. インフォマティクス適用事例

3.1 異形押出ダイス設計の最適化

本事例では、異形押出チューブダイス設計における MI の活用を検討した。本解析の対象は、異形 4 芯チューブ押出し機内の流路設計であり、特に多数の設計パラメータが及ぼす成形安定性への影響を包括的に最適化することを目的とした。

説明変数としては、流路およびダイスの寸法に関連する 23 項目、材料投入量 1 項目、温度設定 2 項目の計 26 項目を設定した。目的変数は、4 本ノズルの吐出量および流速の変動係数 (望小特性) とし、これらの変動を最小化することにより成形均一性の向上を目指した。

解析では、65 回の設計条件による実解析と、2,000 回を超えるシミュレーションを実施した。その結果、繰り返し回数を積み重ねることで、目的変数は段階的に目標値に収束する傾向を確認した。図 1 に目的変数の収束傾向の例を

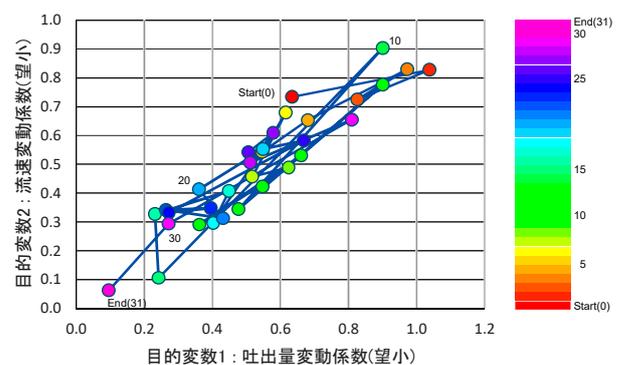


図 1 目的変数の収束傾向例

示す。この場合初めは大きい値の方にも振れていくが徐々に目的である小さい値に収束していく過程が分かる。ただし、収束速度は想定よりも緩やかで、従来法であるニュートン・ラプソン法（いわゆる山登り法）と比較して明確な優位性を示すには至らなかった。特に本テーマにおいては、MIによる最適化効果や効率向上といった定量的メリットは限定的であった。

残された課題として、山登り法が局所最適条件に陥りやすいという本質的な問題がある点が再認識された。MIにおいて適用した手法では、この課題の解決、すなわちグローバル最適解探索の有効性に関する検討までは踏み込めなかったことが今後の課題である。また、MI適用にあたっては、説明変数・目的変数の正確な定義や、初期に投入するデータの組み立て方が結果を大きく左右することが明らかとなった。これらの知見は、今後のMI活用設計における重要な指針となる。

3.2 成型品用ゴム材料の特性改善

本事例では、成型品用ゴム材料開発に対して、MIを導入し、低ヒステリシスロスかつ応力一ひずみ特性の線形性が高いゴム配合条件の探索を行った。解析の対象は、ゴム材料の配合設計において要求される複数の物性（応力一ひずみ線形性、低ヒステリシスロスなど）を同時に満たすこと、特に従来配合で困難であったカーボンブラック添加系で目標物性をクリアする新規配合案を明らかにすることを目的とした。

説明変数としては、ゴム材料の配合組成、材料配合に関わる特徴量を網羅的に設定した。目的変数としては、6項目を設定し、これら全ての目標数値を同時に満足する組合せを探索した。

MIによる配合案解析（6回）と、実験による条件検証（6回）を並行して実施した結果、全ての目標物性値を満たす説明変数の組み合わせをMIによる提案から得ることができ、実際の実験でも特性の再現性を確認した。図2に示すようにMI提案の配合では低ヒステリシスロスでありながら優れた応力一ひずみ線形性を持つ。特筆すべきは、これ

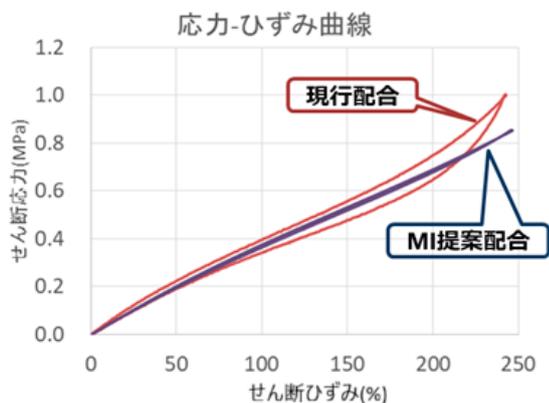


図2 せん断応力一せん断ひずみ特性における現行配合とMI提案配合の比較

まで低ヒステリシスロスの特性を得るためカーボンブラック添加配合は非現実的と考えられていたが、MIが提案した特定条件下でのカーボンブラック添加配合が目標特性を満足したことで、今後の配合設計の幅が飛躍的に広がる成果となったことである。

残された課題としては、配合剤の特徴量を説明変数へ記載・定量化する方法について、標準化や変数設計手法のさらなる検討が必要である。また、解析と実験の反復を通じ、全体としてモデル精度が向上したことを体感したものの、目的変数（試験項目）によっては改善傾向が認められるものとそうでないものが混在した。これらについては、材料固有の要因や実験誤差が影響している可能性と、偶発的な事象である可能性を今後の追加検証により明らかにする必要がある。

3.3 銅銀合金伸線加工特性予測モデル構築

本研究では、銅銀合金線の硬度（ビッカース硬さ）および導電率の予測モデルを、当社のAI解析基盤であるMulti-Sigma上に構築することを目的とした。

組成・加工条件最適化に資する高精度予測モデルの構築が必要となった。データセット（材料組成、加工条件、および物性：硬さ・導電率等、全61件）を用い、ニューラルネットワーク（NN）を中心とする複数モデルを構築し、8分割交差検証により精度検証を行った。

モデル条件は、検証データ抽出（RANDOM/BALANCE）、不均衡データ調整（ON/OFF）を切り替えたNNに加え、ガウス過程回帰、連鎖解析（工程分割・前工程出力を次工程説明変数化）を比較した。その結果、NNモデル_OFF_RANDOMが最も高精度で図3に示すように8分割交差検証では相対誤差評価の R^2 が硬度0.91、導電率0.89と「非常に高精度」（一般に $R^2 \geq 0.8$ ）を確認した。一方、硬度の外れ値（断線由来の極低硬度）を除外すると目的変数の分散が縮小することで R^2 は0.62に低下した。これは不均衡調整OFFが外れ値の過大影響を避けつつ分散拡大により R^2 が高くなる性質と整合する考察を得た。

特徴量重要度では、硬度に対して加工歪や中間焼鈍温度が主要因、導電率に対して加工歪、材料組成、焼鈍温度が主要因であった。総合して高精度の予測モデルをMulti-

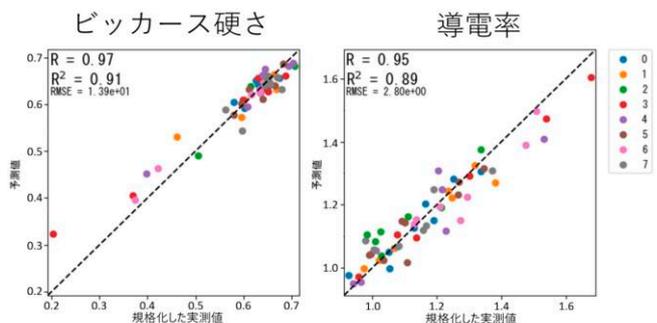


図3 ビッカース硬さと導電率の予測モデルの精度

Sigma上で動作確認を完了した。本成果により、銅銀合金伸線加工における硬度・導電率の高精度予測と条件最適化を社内で継続的に実施可能な体制を確立した。

3.4 サロゲートモデルを用いた平角線皮膜厚さ分布推定手法の開発

本研究は、エナメル平角線の塗布ダイス内ワニス流れをCFD (Computational Fluid Dynamic - 数値流体解析) で精密に扱う従来手法の高い計算・人的負荷を低減し、現場技術者が迅速に多段パスの皮膜厚分布を設計・推定できる実用ツールを構築することを目的とした。

平角線ではダイス内で長辺・短辺・角Rの幾何特性と非ニュートン性が影響し、丸線に比して入力変数 (12個以上) と出力 (少なくとも長辺・短辺・角Rの3点) が増え、CFDの前後処理とパス間再設定が属人的で非効率であった。そこで、CFDを教師データとするサロゲートモデル (機械学習) を採用し、Excel上のVBA関数からPython実装を呼び出すUI/UXを整備、各パスの出力を次パスの入力へ自動連結するワークシートを設計した。

CFD自動化では、パラメトリックに流路形状を生成し、メッシュ化して流動解析を行った。1000条件で約110時間、メッシュ品質問題により約1割の条件が失敗する事象を確認した。機械学習にはガウス過程回帰を最適カーネルで構築。8分割交差検証で $R^2 \geq 0.94$ 、RMSEは 10^3 mmと高精度を示した。Excel側でPythonを呼び出し、膜厚と補助出力を返す構成とした。

性能検証では、2種類の形状でモデル化を行った。1つは実測と推定が7%以下の誤差で一致し、既存ダイスで角Rが厚くばらつく傾向をツールで把握、パス設計最適化によりばらつき低減を示した。一方、もう一つの形状では予測が実測の約2倍となり、各パスに補正係数を導入すると整合が改善した。この乖離の原因として、表面濡れ性、非ニュートン性、メニスカス領域の物理、製造時寸法変動など、現CFDが未考慮の要因が示唆された。

成果として、図4に示すような推定値が皮膜厚実測値と高精度で一致し、CFD相当の皮膜厚分布推定を高速・簡便に行うサロゲートモデルとExcelツールを確立し、一般

技術者が多段パス設計を短時間で実施可能になった。課題は、評価点の拡張 (角R近傍)、教師データの妥当性と偏り低減、メニスカス・乾燥過程を含むモデル化、補正項推定法、ツールのメンテナンス性 (属人化防止) である。将来的には、社内の類似課題への横展開や、物理記述を重視したID CAE (Computer Aided Engineering) との併用により、因果関係の把握と生産的な教師データ設計を進める。

本研究におけるMIを中心としたインフォマティクス導入事例から、先端的なデジタル技術を材料・プロセス開発に応用することのメリットと、実際の業務適用で遭遇した課題について、事例ごとに考察を加える。

4. 考 察

4.1 インフォマティクス導入によるメリット

まず最も顕著なメリットは、従来の属人的かつ経験主導のアプローチから、データ標準化とアルゴリズム活用に基づく科学的な開発・意思決定への転換である。各事例で共通して見られたのは、多変数・多項目が絡む設計や配合条件検討の効率化である。例えば、成形品用ゴム材料開発では、従来の経験則では困難であったキー材料 (カーボンブラック添加系) が、MIによって合理的に組み合わせ可能となり、新たな特性領域の拡大という成果につながった。従来法で配合や条件設定を諦めていた領域においても、インフォマティクスによる網羅的な探索が実現したことは、材料開発分野におけるイノベーション推進の観点から非常に意義が大きい。

さらに、複雑な因果関係・設計パラメータが絡むシステムにおいても、機械学習ベースのモデル構造を構築することで、従来法よりも高精度な予測や最適化が可能になる点は、銅銀合金伸線加工モデルの事例からも確認された。今後の材料組成・プロセス条件最適化を持続的かつ効果的に推進できる体制が確立された。予測精度の観点でも、 R^2 が0.9を超える高精度モデルがMIの運用によって維持され、外れ値や不均衡データ対応など分析高度化が現場で実施可能となっている。

また、サロゲートモデルを活用した皮膜厚分布推定事例では、従来のCFD解析に比べて計算・人的負荷が劇的に低減され、汎用ツールが構築できた点が特筆される。このような設計支援ツールの開発は、現場技術者の負担軽減と迅速な設計サイクルの実現、ひいては製品の品質・歩留り向上に直結する。インフォマティクス導入による業務プロセスの合理化・スマート化は、現場レベルの生産性向上にも寄与すると考えられる。

加えて、導入・運用面ではmi-Hubのような直感的ワークフローによる現場への親和性と普及性、多目的最適化や高度な探索機能を持つMulti Sigmaによる高精度設計への貢献など、ツール選定に合わせた技術の最適活用が可能となった。データ駆動型アプローチの普及は、現場担当者の

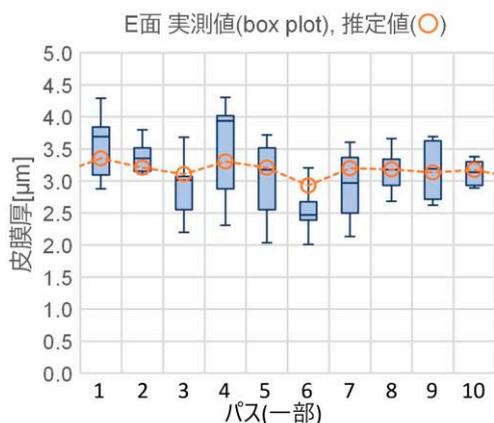


図4 皮膜厚実測値 vs 推定値

技術キャッチアップ促進、技術伝承の効率化、組織的なナレッジ蓄積の面でも大きな副次効果をもたらしている。

4.2 課題と今後の展望

一方で、インフォマティクス導入に伴い浮かび上がった課題も少なくない。樹脂チューブ押出ダイス設計事例では、MI活用によって従来手法の局所最適解への依存を回避できる可能性は示唆されたものの、実際の収束速度や最適化効率には必ずしも期待通りとはならなかった。ニュートン・ラプソン法（山登り法）との比較では目立った優位性が認められず、グローバル最適探索のためのベイズ最適化等の理論的手法の現場適用には今後さらなるモデル改良やアルゴリズムの実装・評価が不可欠である。

また、多変数・多目的が絡むシステム設計においては、説明変数・目的変数の設定と初期データ組成に強く依存する傾向が明らかとなった。特に、ゴム材料事例では、配合剤の特徴量を情報として定量的かつ一貫性ある形で説明変数化する手法の確立が重要な課題として残されている。これらは単なるデータ入力項目設計に留まらず、材料特性・プロセス要因の本質的なモデル化と解釈性担保にも直結する。

各事例で得られた知見として、機械学習モデルの精度向上・目的変数との良好な一致を得られたケースも多い一方、個々の目的変数によっては改善傾向が明確に現れるものとそうでないものが混在した。これは材料固有の要因（物理特性や化学反応機構）、実験誤差、不均衡・外れ値の影響など複数要因が交差している可能性があり、今後は、これら個々の変数ごとにモデル解釈性・汎化性能の更なる強化が求められる。

サロゲートモデル事例においては、教師データ設計や偏り低減、補正項推定法など、現象論的な物理モデルと機械学習モデルの融合が問われている。特に評価点拡張・実験計測誤差・物理未考慮要因の反映は、今後のモデル構築における検証指針として重要であり、機械学習モデルと物理モデルのハイブリッド化による因果推定の強化・業務横展開の可能性が期待される。

ツール選定・運用の側面では、mi-Hubの分かりやすい操作性とサポート、Multi Sigmaの高機能性・柔軟性など各種の特長が明らかとなったが、応用範囲やデータ規模・カスタマイズニーズによって最適なツールは変化する。導入コストや教育体制、ツールごとの運用・メンテナンス性も含め、現場ニーズに応じた選択・設計が持続的な運用に不可欠である。

4.3 組織への影響と今後の展望

導入事例を通じて、多様な技術・製品分野におけるインフォマティクスの有用性と限界、そして業務変革につながる新たな知見が整理された。データ駆動型開発体制の構築は、従来の経験に根ざした作業から脱却し、論理的根拠に基づいた迅速かつ精度の高い技術検討・仮説生成・検証サイクルを普及させる起点となり得る。難易度の高い領域で

は、モデル精度や説明変数設計、物理的解釈との融合が今後の技術課題となる一方、複雑な製品仕様や材料設計への対応力強化、人材育成や組織競争力向上にも資すると考えられる。

ただし、実運用においては現場へのデータ教育や解析リテラシーの向上、モデル運用体制の整備、属人性排除とナレッジ蓄積メカニズムの制度化など、組織的対応も欠かせない。現場技術者が継続的にツールを活用し、多目的最適化や条件探索を繰り返すサイクルの中で、更なる業務効率化・品質向上・知識伝承の促進が期待できる。そのためにも、社内外の最新技術動向を積極的に取り入れ、ツールの選定・運用体制の最適化、データ資産の拡充、物理モデルとの融合など、持続的なアップデートに努めることが肝要である。

総じて、インフォマティクスは材料・プロセス技術開発における変革の強力な手段であり、その導入と活用は将来に向けた組織競争力強化・イノベーション創出の基盤となる。今後も個別課題への細やかな対応、技術普及・教育活動の推進、AI・機械学習を含む新規技術の適切な統合により、データ主体型ものづくりの高度化を継続していく必要がある。

5. ま と め

本研究は、材料・プロセス技術開発分野におけるインフォマティクス導入の有効性と課題について、具体的な事例を基に検証したものである。従来の経験則や属人的な手法では、近年多様化・複雑化する要求や短開発サイクル、品質・コスト競争に十分対応できず、その限界が明らかになっている。こうした背景から、現場に蓄積される膨大なデータを統計学や機械学習を用いて解析するインフォマティクスの役割が大きくなっている。

mi-HubやMulti Sigmaなどの機械学習系ツールを比較・選定し、ゴム材料配合設計、銅合金の物性予測、CFDデータからの皮膜厚分布推定など複数テーマで実践的に活用した。その結果、従来法では困難だった複雑系の最適化や高精度予測が短期間で実現し、現場技術者の負担軽減や設計案の幅拡大、技術伝承・ナレッジ蓄積にも寄与することが確認された。一方で、データ整備や変数設計、モデル解釈性、教育体制整備など未解決課題も残る。特に、高機能なツール運用や物理モデルとの連携、現場リテラシー向上が今後の重要な要素となる。

総じて、インフォマティクスは材料および製造分野における科学的かつ効率的な業務変革の基盤となりうる。今後は、技術・運用体制の持続的なアップデートやAI・物理モデルの融合を進めることで、データ駆動型技術開発とイノベーション創出、組織競争力強化につながるものと期待される。

参考文献

- 1) 杓掛 健太郎, 他: 応用物理, Vol. 89, No.12, p.711 (2020)
- 2) T. Onishi, et al., Science and Technology of Advanced Materials, Vol. 19, No.1, p.649 (2018)
- 3) 南部洋志, 開発工学, Vol. 41, No. 2, p. 183 (2021)
- 4) mi-6 Ltd., <https://mihub.mi-6.co.jp/>
- 5) AIZOH Inc., <https://aizoth.com/en/service/multi-sigma/>

SWCC (株)

鈴木 匠 (すずき たくみ)

領域開発センター 基盤技術開発グループ

インフォマティクス・シミュレーションを用いた製品の研究・開発に従事

SWCC (株)

守安 藍海 (もりやす あみ)

新領域開発センター 基盤技術開発グループ

インフォマティクスを用いた製品の研究・開発に従事

SWCC (株)

菊池 類 (きくち るい)

新領域開発センター 基盤技術開発グループ

インフォマティクスを用いた製品の研究・開発に従事

SWCC (株)

高村 瞭太 (たかむら りょうた)

新領域開発センター 基盤技術開発グループ

シミュレーションを用いた製品の研究・開発に従事

SWCC (株)

小林 公樹 (こばやし ひろき)

新領域開発センター 基盤技術開発グループ

シミュレーションを用いた製品の研究・開発に従事

SWCC (株)

箕輪 昌啓 (みのわ まさひろ)

新領域開発センター センター長

製品の研究・開発に従事