

機械学習を用いたトラクションフルードの性能予測

Predicting traction fluid performance using machine learning

兵庫大・情報（院）*深谷 剛 兵庫大（正）清水 陽平

兵庫大 RIST（正）富山 栄治 兵庫大（正）鷲津 仁志

Tsuyoshi Fukaya*, Yohei Shimizu*, Eiji Tomiyama*, **, Hitoshi Washizu*

*University of Hyogo, **Research Organization for Information Science and Technology

1. はじめに

デジタルトランスフォーメーションが求められる中で、材料研究における情報科学からのアプローチはコンピューターの発展に伴いますます重要になりつつある。情報科学の手法を応用し、材料開発の効率を高める取り組みはマテリアルズ・インフォマティックス (MI) と呼ばれる。MI は膨大な物質の組み合わせから所望の機能や特性を持つ最適な材料を探索するために用いられる。具体的には、機械学習を活用して、実験データ、シミュレーションデータを解析し、素材の分子構造や組み合わせ、製造方法などを推測する。MI の活用により従来よりも効率的に目標となる材料を発見することができる。我々はパーシステントホモロジーを使用した高分子の高次構造と誘電特性との関係¹⁾や、せん断場下におけるトラクションフルードに関する研究²⁾を行っている。

本研究ではトラクションフルードの物性に注目する。トラクションフルードは、無段変速機などに代表されるトラクションドライブにおいて、摺動部の焼付きを防止しつつ高摩擦で動力伝達する潤滑油である。トラクションフルードには金属表面で油膜を形成し、低温でも流動性を保持することや、高圧・高せん断場下でトラクション係数が高いことが求められる。これまで実験や分子シミュレーションによる分子構造の探索が行われているが³⁾、MI の対象となつた事例は見当たらない。しかし、過去においては、線形回帰による物性予測が試みられたことがあり⁴⁾、特徴的なデータが掲載されているため、MI の素材として再検討することを試みる。

2. 解析手法

解析に使用した言語は Python を用い、ライブラリは、pandas, scikit-learn, NumPy, matplotlib, seaborn を使用した。

まず、過去の論文データから n-ヘキサデカンなどの潤滑油のベースオイルとなる 37 個の化合物を教師データとし、トラクション係数を目的係数、その他の論文データである重心を中心とした最大剛体回転半径 (R_{mr})、融点 (MP)、アルキル基およびアルキレン基主鎖の結合数 (AC) の 3 つを説明変数として教師あり学習を実施した。目的変数、説明変数を 7:3 となるように訓練用データとテスト用データに分け、線形回帰を行い、説明変数から目的変数の予測を出し、実際の目的変数との精度を調べた。

次に、説明変数となる分子構造の物性データを加え、トラクション係数との相関をヒートマッピングで確認した。また、教師なし学習でクラスタリングを行い、説明変数の傾向を確認した。

新しく変更した説明変数で教師あり学習を実施し、回帰精度を調べた。

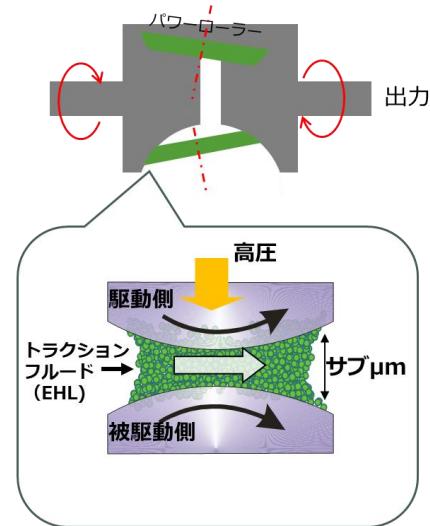


Fig. 1 Conceptual figure of half toroidal continuous variable transmission

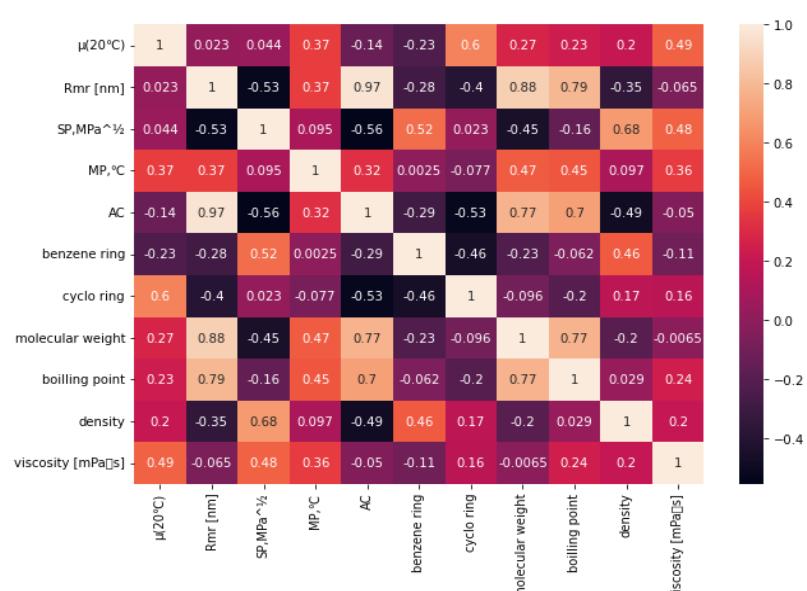


Fig. 2 Heat mapping diagram with physical properties data added

3. 結果と考察

はじめに、トラクション係数を目的変数とし、その他の論文データである重心を中心とした最大剛体回転半径 (R_{mr})、融点 (MP)、アルキル基およびアルキレン基主鎖の結合数 (AC) の 3 つを説明変数として、教師あり学習を実施した。線形回帰を行ったが、精度が低く回帰できたとは言えなかった。

そこで、新しく物性データを加えてヒートマッピングで相関図を作成し、トラクション係数とその他の物性データの相関を確認した (Fig. 2)。融点や、論文データではなく分子構造より追加したシクロ環の数 (cyclo ring)などとは正の相関が高いことが分かった。粘度である viscosity [mPa · s] と密度である density はともに正の相関を確認することができたが、データに欠損があるため今回はその後の説明変数としては使用できなかった。ヒートマッピングで正の相関の見られた融点、シクロ環の数、分子量、沸点を新たに説明変数とし、k-means でクラスタリングを実施した (Fig. 3)。新しい説明変数から 2 つのクラスターに分類することができた。Fig. 3 を調べると、融点や沸点の寄与度が高いように見える。この教師なし学習で

は、トラクション係数を教師あり学習で回帰予測するための変数の傾向を確認することができた。

そこで、説明変数を改善したデータで教師あり学習を行った。線形回帰、およびサポートベクター回帰 (SVR) などの非線形回帰を行った。データを標準化、正規化をし、データに処理を加えていないものと 3 個をそれぞれの方法で回帰を行い、精度を調べた。線形回帰は、データに処理を加えると精度が高まることが分かった。リッジ回帰が線形回帰と同様の傾向を示したが、その他の非線形回帰は、データに処理を加えても効果がない、寧ろ良くない場合があることも分かった。

元の論文における線形回帰式はシンプルであるが、線形性に起因する外挿が可能であるため、一定の有用性を有するとはいえる。一方、近年進化してきた SVR などの非線形回帰により、より詳細に物性予測することが期待される。本稿で示す範囲においては、教師あり学習において十分な予測精度を示していないが、トラクション係数に寄与する因子を抽出することには成功している。さらに精度を高めるには、実験データ点数あるいはシミュレーションなどによるデータの増加が必要であると思われる。

4. まとめと今後の展望

本研究では、まず教師なし学習によってクラスタリングおよびヒートマッピングを実施したところ、トラクション係数に寄与する因子を抽出することができた。さらに、線形回帰および非線形回帰によって、様々な物性値を説明変数、トラクション係数を目的変数とし機械学習を実施したところ、非線形回帰は線形回帰を上回る予測精度を示した。もっとも、未知の分子構造に耐えうるためには、さらにデータの点数の追加および説明変数の工夫が必要であると考えられる。今後は、シミュレーションなども含めた総合的かつ大規模解析によって、フルード分子構造の最適化を実施できればと考える。

文献

- 1) Y. Shimizu, T. Kurokawa, H. Arai, H. Washizu: Sci. Rep. 11, 2274 (2021).
- 2) 富山・岩崎・清水・鷲津: トライボロジー会議 2022 春 東京 予稿集.
- 3) H. Washizu, T. Ohmori: Lubr Sci, 22, 323 (2010).
- 4) 坪内・畠: トライボロジスト, 41: 5, 395 (1996).

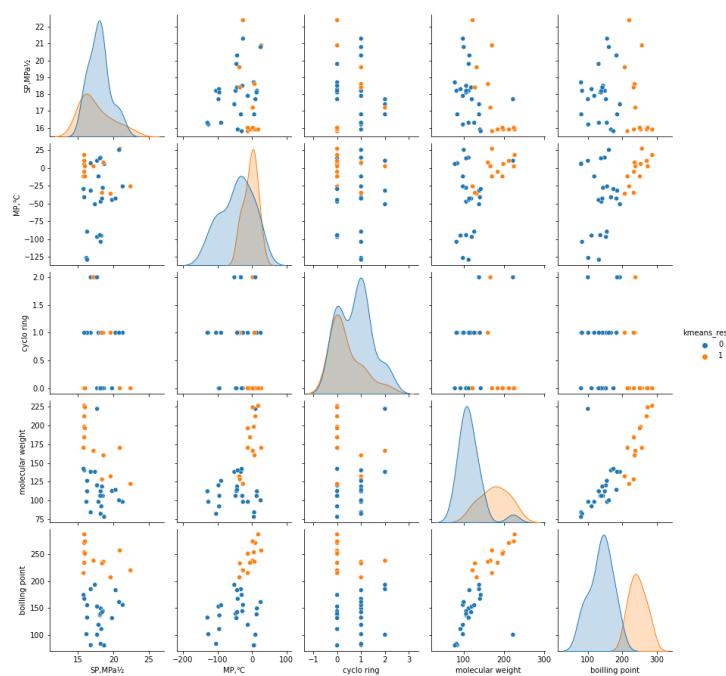


Fig. 3 k-means clustering of traction fluids

Table. 1 Accuracy for each regression method

	LR	Lasso	ElasticNew モデル	リッジ	SVR(linear)	SVR(rbf)
なし	-0.005713	-0.189011	-0.194697	-0.040662	-0.10967	-0.670371
標準化	0.0235019	-0.157632	-0.157632	0.2010729	-0.665333	-0.665333
正規化	0.0566756	-0.195999	-0.195999	0.2997967	-0.70717	-0.70717