

インターンシップ報告書

工学系研究科物理工学専攻
博士課程2年 森本研究室
MERIT 11期生 池田侑哉

概要

インターンシップ先：日本ゼオン株式会社 総合開発センター 基盤技術研究所
期間：2024年10月15日～2024年12月13日
業務形態：オンラインと出社のハイブリッド形式。週に二日の頻度で総合開発センターへ出社。
受入担当者：基盤技術研究所 所長 小野裕己 / 指導担当 代田陸

テーマ

ゴム生産製造工程の物理モデリング

背景および課題

ゴムの生産過程におけるゴム温度は、ゴムの物性に大きく関わるため、重要な目的変数となっている。本インターンシップでは、新規ゴム製造装置のシミュレーション技術開発に関する、機械学習を援用したモデル開発業務を行った。新規ゴム製造設備による実験は非常に時間がかかるため、シミュレーションソフトを援用した Computer Aided Engineering (CAE) が検討されていた。しかしながら

- ・時間コスト（シミュレーションソフトが自動化不可能）
- ・新規ゴム製造設備のパーツの組み合わせ数が膨大

という課題があった。そこで、これらの課題を解決するために、本インターンシップでは以下の2つの業務に取り組んだ。

1. シミュレーションソフトの代理モデルの作成
2. 代理モデル精度向上のための効率的な獲得点取得の手法検討

これらを遂行できれば、パーツの組み合わせという定量的でなかった説明変数から、瞬時に新規ゴム製造設備による実験後のゴム温度を予測することができ、新規実験点の提案を可能にすることができる。

結果

・シミュレーションソフトの代理モデルの作成

当初組み合わせ爆発の問題に直面すると思われたが、シミュレーション結果の検討により、モデルの単純化に成功した。秘密保持の観点から詳細は省くが、順番が重要なデータに対して、組み合わせ爆発を回避するような、現実的な計算コストで高精度の代理モデルを作成することに成功した。

シミュレーション結果訓練データにおいては R^2 score 0.98, と高精度での予測が可能であることがわかった。

・代理モデル精度向上のための効率的な獲得点取得の手法検討

説明変数が非常に膨大なパターンを有しているため、新規な点を訓練データに追加したい場合、人間の頭で考えるのは難しい。このような場合、ベイズ最適化などの手法が主に扱われるが、制限の多さゆえ、既存のパッケージから実装するのが困難であった。そこで、詳細は省略するが、本インターンシップでは以下の獲得点手法を比較検討した。

1. ランダム生成した点をガウス過程回帰の分散で評価し、分散最大な点を取得
2. 山登り法という最適化手法によってガウス過程回帰の分散あるいは訓練データとの距離を最大化する点を取得

どちらの手法も、単にランダム生成点をモデルに追加するより、テスト検証の精度が上昇することが分かり、ガウス過程回帰の分散による獲得点の評価は妥当であった。また、本モデルでは、山登り法によるモデル向上効率が最も良かったものの、獲得点がある領域に偏るなどの課題もあったため、初期点や更新アルゴリズムの改良は今後の展望である。

所感

普段の研究において機械学習等は扱っていないため、これまで座学のみだった統計学などの知識を実務で扱うことができて良かった。実験を基にしたプロジェクトだからこそのうまくいった際の楽しさや、細かい条件の苦しさを肌で実感できて貴重な経験となった。また、本インターンシップにおける業務が、大きなプロジェクトの一部として与えられていることが、大学における研究との大きな差異であったと思う。多少の役割分担はあれ、大学の研究では主に個人が1つのプロジェクト全てを遂行するため、企業の研究開発ならではの規模感の大きさには驚いた。

謝辞

二か月間の長期インターンシップを受け入れてくださった日本ゼオン株式会社の皆様に、心から感謝申し上げます。テーマの提案や議論のみならず、さまざまな交流の場を用意していただくなど、多くの面でお世話になりました。その他にも、様々な方からご助言をいただく機会が多くあり、非常に有意義な時間を過ごすことができました。また、本インターンシップの実施を承認してくださった指導教員の森本高裕准教授、副指導教員の関真一郎教授に感謝いたします。最後に、このような素晴らしい機会をご提供下さった、MP-CoMS と MERIT プログラムに感謝申し上げます。