

令和 6 年 5 月 17 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K18759

研究課題名（和文）マテリアルズ・インフォマティクスを活用し新機能を付与したコンクリート材料開発

研究課題名（英文）Development of novel functional concrete materials using materials informatics

研究代表者

西脇 智哉（Nishiwaki, Tomoya）

東北大学・工学研究科・准教授

研究者番号：60400529

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題は、新しい機能を付与したコンクリート材料について、近年発展が目覚ましいマテリアルズ・インフォマティクス（MI）を活用することを提案し、材料開発に生かすための手法について検討を行った。特にセメントの使用量を削減した低炭素型コンクリートを対象に、圧縮強度と調合設計の相互関係を対象とした検討に取り組んだ。その結果、約800のデータセットを構築したことで、調合と圧縮強度の関係を機械学習を通じて予測できる可能性が示された。特に、複数種類の混和材を併用した場合にも、網羅的な実験のみによらない調合候補の選定と強度予測が行えることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

世界中で広く用いられるコンクリート材料は地産地消材料の側面も持ち、幅広い原材料を組み合わせることで適切な性能を得るためには、経験則による判断が行われる場合も多くある。この一方で、近年は経験則の範囲を大きく逸脱する機能性コンクリートも数多く開発されており、従来通りの実験による試行錯誤を繰り返す開発方法には効率化が求められている。本研究課題では、機械学習などを活用して新たな機能を持つコンクリートの調合設計を行う可能性を示したものである。

研究成果の概要（英文）：This research project proposed using Materials Informatics (MI), which has been remarkably developed in recent years for concrete materials, especially with new functions. The applicability of MI to material development was investigated. In particular, we focused on low-carbon concrete materials with reduced cement use. We investigated mix proportion design using compressive strength as the objective function or compressive strength prediction from mix proportions. As a result, data sets with approximately 800 data were constructed to show the possibility of predicting the relationship between mix proportion and compressive strength through machine learning. In particular, it was shown that even when multiple types of admixtures are combined, candidate mix proportions and strength prediction can be selected without the need for exhaustive experiments.

研究分野：建築材料学

キーワード：コンクリート マテリアルズ・インフォマティクス 機械学習 機能性コンクリート 低炭素型コンクリート

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

近年、コンクリート分野では、セメントの使用量を削減してCO2排出量を抑制させる低炭素型コンクリートや積層方式によるコンクリート3Dプリンタ、各種の混和材料・補強繊維・各種デバイスなどを用いた自己修復コンクリート、また、引張応力下でもひずみ硬化を示す繊維補強コンクリート、300 MPa以上の圧縮強度を持つ超々高強度コンクリートなど、従来のコンクリートの枠組みから大きく外れた材料開発が盛んに行われている。この一方で、これらの材料開発に当たっては、膨大な材料と調合のパラメータを組み合わせることで検討を繰り返す必要があり、従来の数多くの実験を伴うパラメトリックスタディとトライアンドエラーに頼らざるを得ない側面が大きい。ここで必要となる新たな性能項目は、必ずしも直接的な実験結果の蓄積を持つとは限らず、実験方法自体の開発から取り組まざるを得ない場合も多い。そのため、開発には膨大な時間・労力・資材などのコストが要求されることとなる。

コンクリート以外の分野では、近年機械学習を活用したマテリアル・インフォマティクス (Material Informatics, 以下MI) が、蓄電池材料や金属・セラミックス材料などで成果を挙げて注目を集めつつある。MIとは、データマイニングや機械学習などの情報科学を通じて新材料や代替材料を効率的に探索する取り組みである。これは、帰納的な実験科学の枠組みをコンピュータによる機械学習に置き換えて、これまでの膨大な実験結果によるデータセットから望む材料を得るものである。必ずしも直接的なパラメータ・実験データでないものであっても、機械学習によって目的とする性能との関連性を見出して材料開発に活かす手法と位置付けられる。このMIについて、コンクリート材料分野への適用が可能となれば、上述のような膨大な実験に頼る材料開発方法から脱却できる可能性がある。

2. 研究の目的

上述の背景を踏まえて、本研究課題の具体的な検討項目として、近年盛んに開発が行われている新たな機能を付与されたコンクリート材料を対象に、調合設計と目標とする性能の関係を、機械学習により得る。このような機能性コンクリート材料には、超高強度高靱性繊維補強セメント系複合材料 (Ultra-High-performance Fiber Reinforced Cementitious Composite, UHP-FRCC)、自己修復コンクリート、コンクリート3Dプリンタなど多岐に亘るが、近年の注目度が極めて高く、発表文献の数も潤沢であるためデータ構築が行い易いと考えられる、セメントを産業副産物などで置換した低炭素型コンクリートに焦点を当て、特に圧縮強度と調合の関係について確認を行う。

3. 研究の方法

本研究課題では、多くの原材料からなるコンクリートについて、日本国内のデータを機械学習の解析に使用することで圧縮強度の予測が可能なモデル作成を行う。ここでの開発言語にはPythonを用い、アルゴリズムにはニューラルネットワーク (NN) およびランダムフォレスト (RF) を採用する。また、NNについては誤差逆伝播法を適用する。

(1) 解析の概要

既往の研究において高い正解率を算出するアルゴリズムは主にRFとNNである[1]。

はじめに、NNの解析概要について記述する。機械学習におけるデータ解析は、アルゴリズムを含むソースコードを用いてデータセットを学習することで実行される。ここでは、解析アルゴリズムとしてクラウド上で解析可能であるGoogle Colaboratory [2]を用い、言語にはPythonを用いた。ライブラリーにはPyTorch、活性化関数にはReLU関数 (Rectified Linear Unit)、損失関数には交差エントロピー、最適化手法には確率的勾配降下法を用い、誤差逆伝播法によって予測結果と実際の正解との誤差が小さくなるようにミニバッチ学習を用いて学習をすすめた。

NNは、調合表からなるデータを反映する入力層と、予測結果を算出する出力層と2つの層をつなぐ中間層からなる。中間層においては、重み w とバイアス b を含めて結合したのちに、以下の式(1)で表される活性化関数であるReLU関数 $f(y_i)$ を用いて処理を行った。ReLU関数とは、 \hat{y}_i が0以上の値をとる時には \hat{y}_i をそのまま導出し、0未満の値をとる時には0の値を返す関数である。入力する \hat{y}_i の値に関わらず損失関数の傾きが1になるという性質を持つため、後述する確率的勾配降下法における処理を扱いやすい関数である。

$$f(\hat{y}_i) = \begin{cases} 0, & \hat{y}_i < 0 \\ \hat{y}_i, & \hat{y}_i \geq 0 \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 \hat{y}_i : 予測圧縮強度の確率、 $\hat{y}_i = \sum_{i=1}^n w_i X_i + b_i$

また、機械学習によって算出された結果に基づいて、モデルを最適化していくためには損失関数が用いられる。損失とは、予測圧縮強度の確率と実際の圧縮強度の確率の差を示し、値が小さいほど予測精度が高いことを示す。本研究では以下の式(2)で表される交差エントロピー誤差を

用いて誤差の処理を行った。

$$E = - \sum_{i=1}^n y_i \log \hat{y}_i \quad (2)$$

ここで、 y_i ：実際の圧縮強度の確率

そして、最適化には確率的勾配降下法を採用した。誤差関数内では一時的な最適解である局所最適解と関数全体の最小値である大域的最適解が存在する。機械学習における最適化とは、後者を見つけ出すことであるため、局所最適解とならないパラメータを定める必要がある。確率的勾配降下法では、ある時点での学習における重み w_i に対する誤差での勾配（傾き）を計算し、その時点での勾配に応じて重みが更新されることで、次の学習における重み w_{i+1} を定める。以下の式(3)で重みが更新される。

$$w_{i+1} = \begin{cases} w_i + \Delta w & \left(\frac{df}{dw_i} > 0 \right) \\ w_i - \Delta w & \left(\frac{df}{dw_i} < 0 \right) \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 Δw ：重みの更新量、 df/dw_i ： w_i での損失関数の傾き

本研究においては、NNの学習には、800個のデータを学習用データに700個と試験用データ100個に分割し、学習用データと試験用データの分割をランダムに5回行った。RFの学習には、全データ800個に対してk分割交差検証を分割数5個で行った。

ここで、ミニバッチ学習とは、学習・検証用データの中から一定の数ごとにグループ分けを行うことで学習を進めていく方法である。この分割数が大きいほど大域的に学習し、分割数が小さいほど1グループごとに対して忠実に学習を行うという性質を持つ。

次に、RFの解析概要について記述する。RFに用いられる決定木とは、分割関数によって判別すべき情報が与えられ、木の葉に最終的な出力結果が対応付けられたものである。決定木単体では高い識別性能を持つわけではないが、決定木を統合することで強固な識別機を形成している[3]。

また、学習に対する精度を検証するための指標には圧縮強度の予測値と実際の圧縮強度の当てはまりの良さを評価する決定係数 (R^2)、両者の関係性の強さを示す相関係数 (r)、両者の差を示す二乗平均平方根誤差 (RMSE) および平均絶対パーセント誤差 (MAPE) を用いた。本研究において R^2 および r は 1 に近いほど、RMSE および MAPE は 0 に近いほど予測強度が実際の圧縮強度に近いことを指す。

(2) データセット

解析にはコンクリートの調合データが必要となるが、国内においてオープンソースで利用可能なコンクリートの調合に関する解析に使用可能なデータセットは現状存在しない。そこで本研究では、低炭素型コンクリートを含めた調合および試験結果が幅広く示されている、日本コンクリート工学会年次論文集の1996年から2023年に掲載された16編の論文から769個のデータ、および、宮城県内のコンクリートプラントから得た31個のデータの計800個の調合および圧縮強度試験結果から、利用可能な情報を選択してデータセットを作成した。データセットの詳細と解析に用いた説明変数を表1に示す。表中の各種セメントの「有無」とは、当該の調合に用いられたセメントの種類を表す。セメント種類（普通ポルトランドセメント・高炉セメント・早強ポルトランドセメント）それぞれについて、この調合で使用されている場合には1とし、使用されていない場合には0となる。「単位セメント量」は、それぞれの調合における単位体積当たりの使用量 (kg/m^3) を数値として与えている。そのため、使用されていない種類のセメントは0となる。表中の平均値が、一般的な単位セメント量と比較して小さい値となっているのはこのためである。データセット内には混和材を含まないデータ数は215個、混和材にフライアッシュまたは高炉スラグ微粉末が含まれているデータ数は585個である。ここには、フライアッシュおよび高炉スラグ微粉末の両者を用いたデータも含まれている。

表1 説明変数

説明変数		値	平均値	最小値	最大値	標準偏差	
セメント	普通ポルトランドセメント	有無	0 or 1				
		単位セメント量	数値	256.63	0	666	154.71
	高炉セメント	有無	0 or 1				
		単位セメント量	数値	18.26	0	405	62.05
早強ポルトランドセメント	有無	0 or 1					
	単位セメント量	数値	0.07	0	410	75.15	
骨材	細骨材	単位細骨材量	数値	787.7	563.0	946	78.39
	粗骨材	単位粗骨材量	数値	978.77	804	1163	69.3
混和材	高炉スラグ微粉末	単位配合量	数値	47.54	0	372	87.73
	フライアッシュ	単位配合量	数値	45.03	0	360	62.11
化学混和材	水	単位水量	数値	168.89	121	204	12.59
		AE 剤	単位添加量	数値	0.71	0	17.79
	AE 減水剤	単位添加量	数値	1.28	0	7.5	1.51
	高性能 AE 減水剤	単位添加量	数値	1.24	0	15.6	2.1
養生	養生方法	気中, 水中, 恒湿恒温室	0 or 1 or 2				
	材齢	日数	数値	57.75	1	365	75.98

(3) パラメータ

学習用データセットの範囲にのみ過剰に適応し、汎用性が低下する過学習を避けるために、最適なパラメータを求める必要がある。本研究で用いるパラメータを表2,表3に示す。NNでは、中間層の数を2層に固定したうえでニューロンの数を変化させた。RFでは、決定木の数は無制限に固定したうえで決定木の数について検討を行った。学習回数については、パラメータごとに必要に応じて変化させ、十分な学習となるまで行った。

表2 NNのパラメータ

ニューロンの数	128, 256
中間層の数	2

表3 RFのパラメータ

決定木の数	100, 200
決定木の深さ	無制限

4. 研究成果

(1) 作成したモデル

NNおよびRFを用いた場合の、試験用データに対するそれぞれのモデルの精度を表4に示す。また、図1にはNNを用いた場合の、図2にはRFを用いた場合の、予測圧縮強度と実際の圧縮強度の散布図の一つを示す。それぞれの図には、NNでは損失曲線、RFでは特徴重要量の結果の一つを代表値として示している。いずれのアルゴリズムにおいても過学習が起きることなく、 R^2 が0.8、 r が0.9以上かつRMSE、MAPEが8.00以下で予測可能なモデルを構築することが可能であった。これは、既往の研究[4]と比較して、同等もしくはより優れた精度を実現している。また、データセット内においては、RFによるモデルのほうがNNに対して精度が高い結果となった。ここで、図3(b)に示す特徴重要量について、材齢および単位セメント量が高い値を示す結果となった。これらのパラメータは、コンクリートの圧縮強度に大きく影響を与えることが一般に知られており、モデルの妥当性を示しているものと考えられる。

表4 学習結果

分割パターン	NN				RF			
	R^2	r	RMSE	MAE	R^2	r	RMSE	MAE
1	学習用データ	0.99	1.00	1.47	0.42	0.99	2.04	1.47
	試験用データ	0.82	0.91	7.41	5.23	0.88	0.94	5.99
2	学習用データ	0.99	1.00	1.57	0.35	0.99	2.11	1.48
	試験用データ	0.83	0.93	7.52	6.08	0.9	0.95	5.53
3	学習用データ	0.99	1.00	1.68	0.42	0.99	2.06	1.49
	試験用データ	0.80	0.90	7.91	5.63	0.92	0.96	5.25
4	学習用データ	0.99	1.00	1.6	0.39	0.99	2.14	1.53
	試験用データ	0.85	0.92	7.79	5.69	0.93	0.96	5.33
5	学習用データ	0.99	1.00	2.17	0.81	0.99	2.09	1.49
	試験用データ	0.87	0.94	7.57	6.23	0.91	0.95	5.89

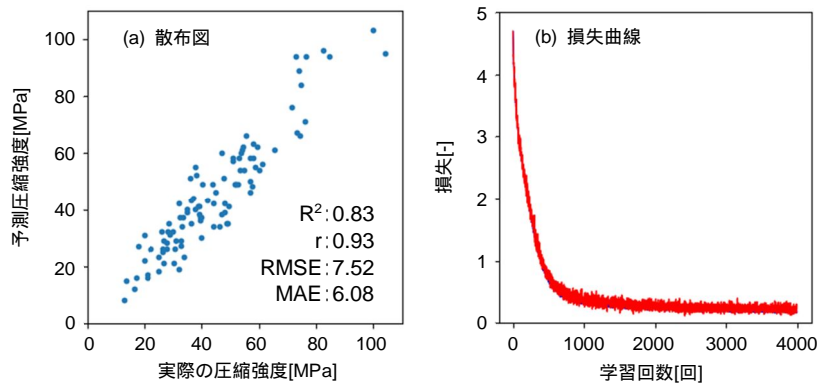


図1 NNにおけるモデル

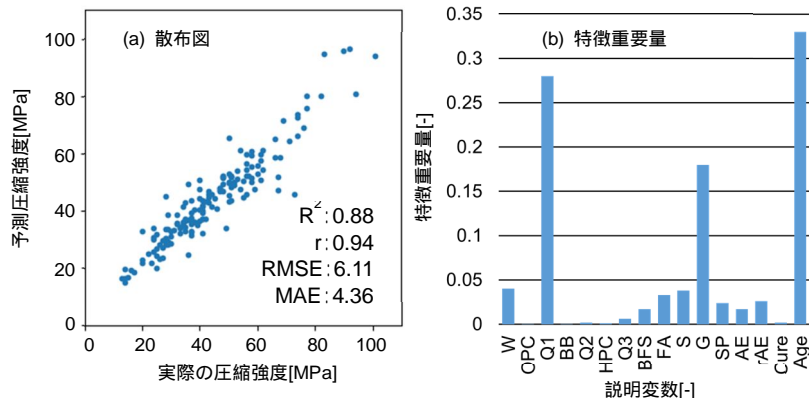


図2 RFにおけるモデル

(2) パラメータの変化による解析精度の変化

NN におけるニューロンの数の変化によるモデルの精度を図 4 に示す。ニューロンの数の増加に対してモデルの精度の著しい向上は確認されなかった。

また、RF における決定木の数の変化によるモデルの精度の変化を図 5 に示す。決定木の数によってモデルの予測精度に差異はない結果が確認された。

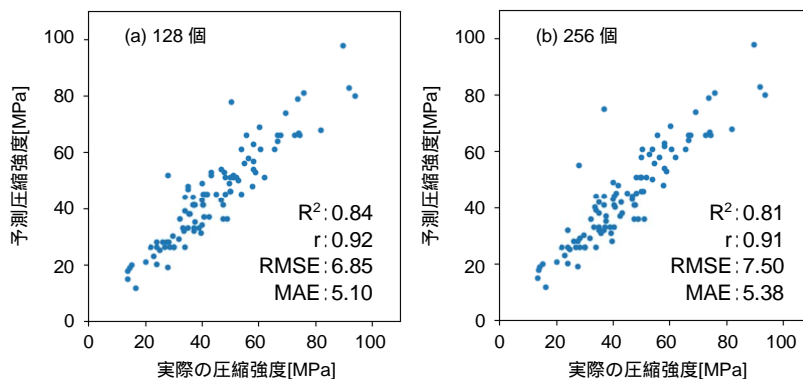


図 4 ニューロンの数の変化によるモデルの精度の変化

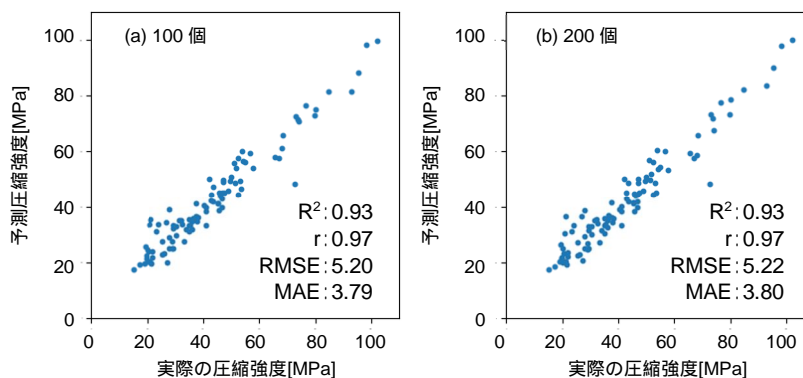


図 5 決定木の数の変化によるモデルの精度の変化

(3) 学習用データセット外の圧縮強度予測

データセットの範囲外となる調合で実際にコンクリート試験体を作製して圧縮強度を求め、このモデルの精度の検証を行った。また、得られた圧縮強度をデータセットに追加して予測精度への影響を確認した。この結果、圧縮強度を適切に予測できた結果が得られた一方で、十分な精度での予測が行えない場合が存在した。より適切なモデルとなるよう、さらなる検討が必要と考えられる。また、データセットにこれらの実験結果を挿入したうえで再度学習を行った場合には、データの挿入前よりも予測精度が向上する結果が得られた。

(4) まとめ

ここでは、主に産業副産物を混和材として用いる低炭素型コンクリートを含むコンクリートの調合と圧縮強度についてデータセットを作成し、マテリアルズ・インフォマティクス (MI) を適用することを目標として NN および RF を用いたモデルによる機械学習を行い、圧縮強度と調合設計の相互関係を得るための検討を行った。その結果、特に構築した学習用データセットの範囲内の調合においては、いずれのモデルにおいても過学習などなく調合と圧縮強度の関係を高い正解率で得ることができた。セメントに加えて高炉スラグ微粉末・フライアッシュ・シリカフュームの複数種類の混和材を併せて用いた場合であっても、網羅的な実験のみによらない調合候補の選定と強度予測が行えることを示したと考えられる。

この一方で、たとえば極めてセメント使用量が小さい調合など、学習範囲外の調合では予測精度が十分ではない場合が見られた。このような場合にも、実際にコンクリート供試体を作製してデータを追加することにより予測強度と試験結果が一致する結果が確認された。

<参考文献>

- [1] M.F. Maherian, et al.: Machine learning-based compressive strength estimation in nano silica-modified concrete. Construction and Building Materials, Vol. 408, 133684, 2023
- [2] Google Colaboratory 参照: <https://colab.google/> (閲覧日: 2023年12月25日)
- [3] 波部 育: ランダムフォレストの基礎と最近の動向, 映像情報メディア学会誌, Vol.70, No.9, pp. 788-791, 2016
- [4] 柴山 淳, 関優樹, 西山峰広: 機械学習による普通および環境配慮型コンクリートの圧縮強度モデルの開発 (その 2: ジオポリマーコンクリートの圧縮強度モデルの開発), 日本建築学会大会学術講演梗概集 (近畿), 日本建築学会, 2023

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 小山顕・小林知大・高杉文也・西脇智哉	4. 巻 46
2. 論文標題 機械学習を用いたコンクリートの圧縮強度の予測に関する基礎的研究	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 コンクリート工学年次論文集	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 小山顕・西脇智哉
2. 発表標題 ランダムフォレストを用いたコンクリートの圧縮強度予測における予測モデルの学習状況の把握
3. 学会等名 日本建築学会大会学術講演会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 小山顕・西脇智哉
2. 発表標題 機械学習を用いたコンクリートの圧縮強度の予測に関する基礎的研究
3. 学会等名 2024年度人工知能学会全国大会（第38回）
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------