

平成24年度火薬類の包装等に係る調査研究事業報告書

補足資料1

包装材の材料・力学特性と損傷との関係

平成26年4月10日

独立行政法人 産業技術総合研究所

〔目次〕

1. 概要
 2. 包装材の材料特性と実験結果
 3. 検討 1（KONEL 実雷管実験で開いた穴の大きさ）
 4. 検討 2（模擬雷管実験での穴開きの有無）
 - 4.1. 材料・形状・コーティング
 - 4.2. 力学特性
 5. 総括, 参考資料
-

1. 概要

この文書は、小規模の攪拌実験について記した報告書 5.1.節（模擬雷管の攪拌実験）および 5.2.節（実雷管の攪拌実験）を補足するものである。包装材の材料および力学特性の情報をもとに、実験で得た結果を検討した。

2. 包装材の材料特性と実験結果

表 2.1 は室内実験の結果を整理したもので、報告書表 5.1.2.2-3 より作成したものである。各々の実験について、(A)～(D)の記号を付した。

表 2.1 室内攪拌実験後の雷管の状態

番号	包装材	模擬雷管		実雷管	
		6 号雷管模擬品 実験(A)	KONEL 雷管模擬品 実験(B)	6 号実雷管 実験(C)	KONEL 実雷管 実験(D)
#01	4746	変化なし	擦り傷	変化なし	穴 [10×14]
#02	TR56	コーティングが剥げた	コーティングが剥げた	コーティングが剥げた	穴 [12×15]
#03	AS35	コーティングが剥げた	コーティングが剥げた	—	—
#04	HALN	変化なし	変化なし	—	—
#05	DP47	変化なし	穴 [10×6]	—	—
#06	RSSL	変化なし	穴 [13×12]	—	—
#07	B781	変化なし	変化なし	変化なし	穴 [2×3]
#08	5238	変化なし	変化なし	—	—
#09	VC01	穴 [25×6]	—	—	—
#10	#100	裂けた	—	—	—
#11	UK33	コーティングが剥げた	コーティングが剥げた	コーティングが剥げた	穴 [3×5]
#12	Ts08	布がぼろぼろになった	—	—	—
#13	Ts10	布がぼろぼろになった	—	—	—
#14	Ts15	穴 [17×11]	—	穴 [40×14]	穴 [130×65]
#15	PPLN	穴 [18×9]	—	—	—
#16	CV11	変化なし	穴 [15×20]	変化なし	穴 [20×33]

※"—"は実験を実施していないことを示す。"穴"は穴が開いたことを示し □ にその最大寸法を記す。単位 mm。

実験(A), (B)の結果をもとに、包装材を穴の有無に応じて00群, 01群, 11群の3つに分類した。表2.2, 表2.3は用いた包装材の材料および力学特性の一覧である。力学特性を示すパラメータには、表2.3に示したように、 $x_1 \sim x_8$ の変数を割り当てた。 x_1 : 厚さ[mm], x_2 : 質量[g/m²], x_3, x_4 : 引張強さ[N/cm], x_5, x_6 : 伸び率[%], x_7, x_8 : 引裂強さ[N]である。引張強さ, 伸び率, 引裂強さは、織りの方向によって異なる値を持つ。ここでは、試料とした包装材のロール方向と、それに対して垂直な方向の2つの値を調査し、大きい方の値を x_3, x_5, x_7 に、小さい方の値を x_4, x_6, x_8 に割り当てた。対して平行ななお、サンプル#12(Ts08), #13(Ts10), #14(Ts15)の3種は力学特性の資料が十分に得られなかったため、検討から除外した。

表 2.2 包装材の材料・形状・コーティングと穴の面積

データ 番号	種別	包装材	材料	形状	表面コーティング	穴の面積[mm ²]		
						実験(A)	実験(B)	実験(D)
#01	00 群	4746	高強力ナイロン 66	布帛	シリコーン樹脂	0	0	140
#02		TR56	高強力 PET	布帛	ポリウレタン樹脂	0	0	180
#03		AS35	高強力ナイロン 66	布帛	ポリウレタン樹脂	0	0	—
#04		HALN	難燃 PET	メッシュ	なし	0	0	—
#07		B781	高強度ナイロン 6	布帛	なし	0	0	6
#08		5238	高強力ナイロン 66	布帛	なし	0	0	—
#11		UK33	ポリエステル	メッシュ	塩ビ樹脂	0	0	15
#05	01 群	DP47	高強力 PET	メッシュ	なし	0	60	—
#06		RSSL	高強力 PET	メッシュ	なし	0	156	—
#16		CV11	綿 100%	布帛	なし	0	300	660
#09	11 群	VC01	難燃ビニロン 70%, 綿 30%	布帛	なし	150	—	—
#15		PPLN	綿 100%	布帛	なし	162	—	—
#10		#100	ポリエステル	メッシュ	塩ビ樹脂	4900	—	—

※ "—"は実験を実施していないことを示す。

表 2.3 包装材の力学特性

データ 番号	種別	包装材	厚さ	質量	引張強さ[N/cm]		伸び率[%]		引裂強さ[N]	
			[mm]	[g/m ²]	(小)	(大)	(小)	(大)	(小)	(大)
			x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8
#01	00 群	4746	0.28	194	650	653	23	26	437	439
#02		TR56	0.35	230	560	820	27	30	133	187
#03		AS35	0.3	193	600	660	30	37	113	116
#04		HALN	0.8	405	1000	1000	75	130	—	—
#07		B781	0.55	290	1945	2805	35	43	306	371
#08		5238	0.56	392	3400	3750	41	41	460	520
#11		UK33	0.6	450	653.3	653.3	28	30	425	425
#05	01 群	DP47	0.72	266	258.3	273.3	91	98	690	720
#06		RSSL	1.4	397	526	741	83	115	64	64
#16		CV11	0.44	298.6	516.1	1062.2	20.7	22.4	15.7	28.4
#09	11 群	VC01	0.9	245	291	729	69	156	980	980
#15		PPLN	0.25	161.8	305.9	679.5	13.1	15.7	9.2	13.2
#10		#100	0.23	130	213.3	213.3	20	21	100	100

※ "—"はデータがないことを示す。

3. 検討 1（KONEL 実雷管実験で開いた穴の大きさ）

KONEL 実雷管実験(D)では、使用した包装材 6 種類全てで雷管ホルダーの角に当たる部分に穴が開いた。力学特性の資料のない Ts15 を除く 5 種の包装材について、包装材の力学特性と穴の大きさとの相関について図 3.1～図 3.5 に示す。検討の結果、次の結果を得た。

引張強さ、伸び率、引裂強さが大きいほど、開いた穴は小さい

ただし伸び率では TR56 と 4746 が、引裂強さでは B781 と UK33 がわずかに逆転しており、穴の大きさと力学特性との関係は明瞭ではない。データ数も少なく、定量的な関係式を作るのは困難である。

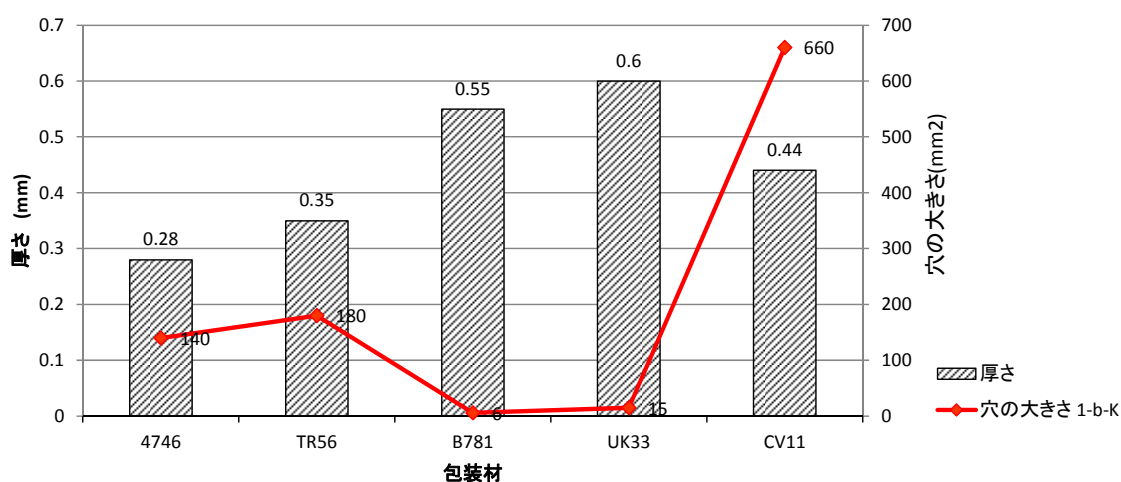


図 3.1 実験(D)で開いた穴の大きさと包装材の厚さ

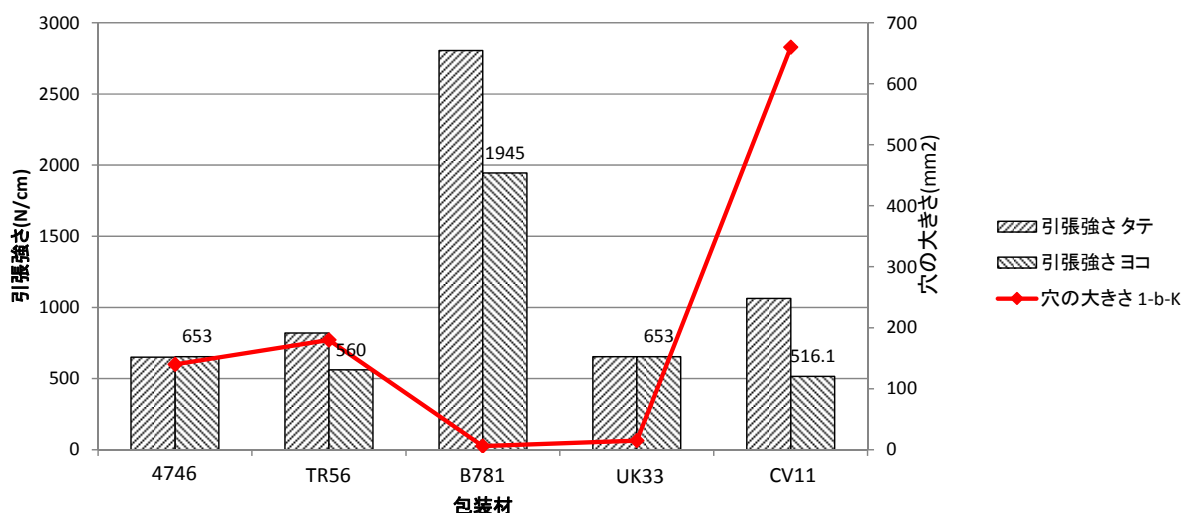


図 3.2 実験(D)で開いた穴の大きさと包装材の引張強さ

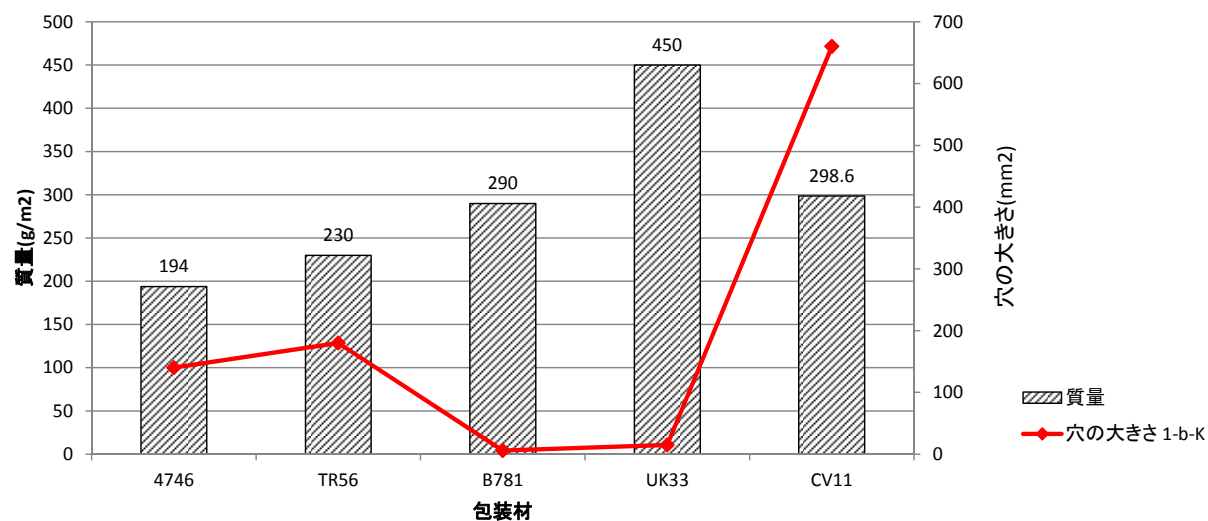


図 3.3 実験(D)で開いた穴の大きさと包装材の質量

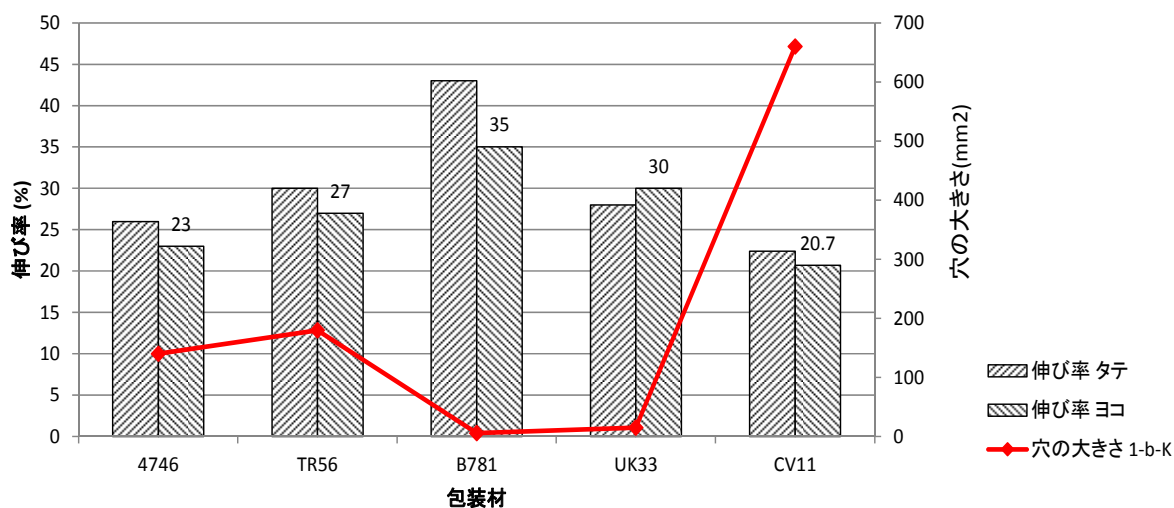


図 3.4 実験(D)で開いた穴の大きさと包装材の伸び率

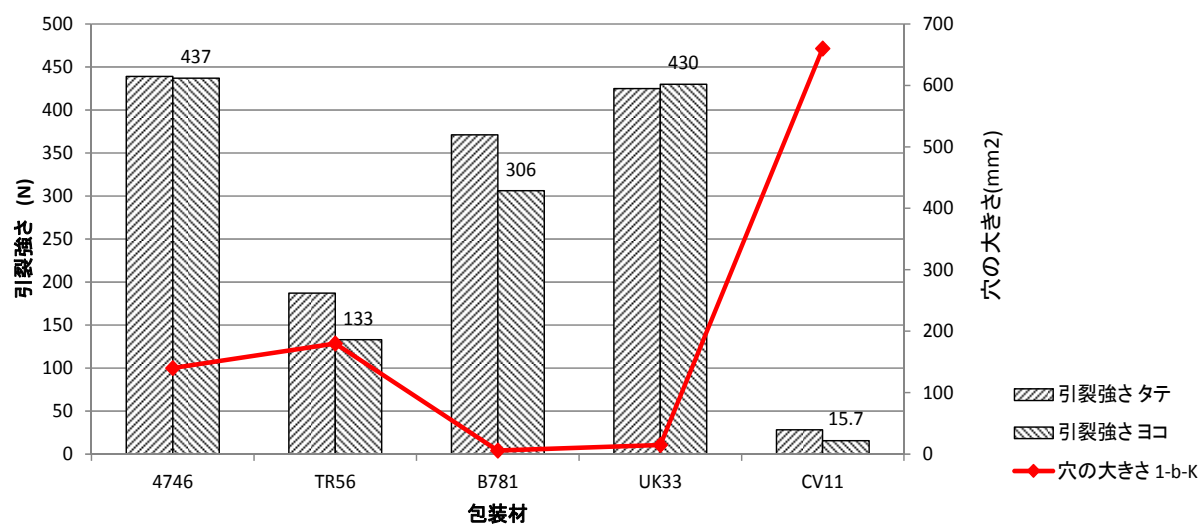


図 3.5 実験(D)で開いた穴の大きさと包装材の引裂強さ

4. 検討2（模擬雷管実験での穴開きの有無）

4.1. 材料・形状・コーティング

次に模擬雷管を用いた実験(A)，(B)に対し，穴が開くか開かないかの観点からの検討を行った。表 2.2 より，穴が開いた包装材，開かなかった包装材について特徴をまとめると以下のようになる。

実験(A)，(B)で穴が開いた包装材の特徴：

- ・材料に綿を含む (CV11, VC01, PPLN) もしくはメッシュ形状である (DP47, RSSL, #100)

実験(A)，(B)で穴が開かなかった包装材の特徴：

- ・材料が，高強力ナイロン 66 または高強度ナイロン 6 である

実験(D)からは，伸び率が大きいほど穴が小さい傾向が確認されたが，伸び率が大きい DP47, RSSL は実験(B)で穴が開いている。これはメッシュ形状であるためとみられる。

4.2. 力学特性

4.2.1 境界条件

各種の力学特性について調べると，穴の有無と最も相関があったのは引張強さであった。なお，引張強さや引裂強さ等の値は織りの向きによって異なるが，ここでは小さいほう（主にヨコ方向）の値 x_3 を用いた。引張強さと，実験(A)，(B)で開いた穴の関係について図 4.1，図 4.2 に整理した。

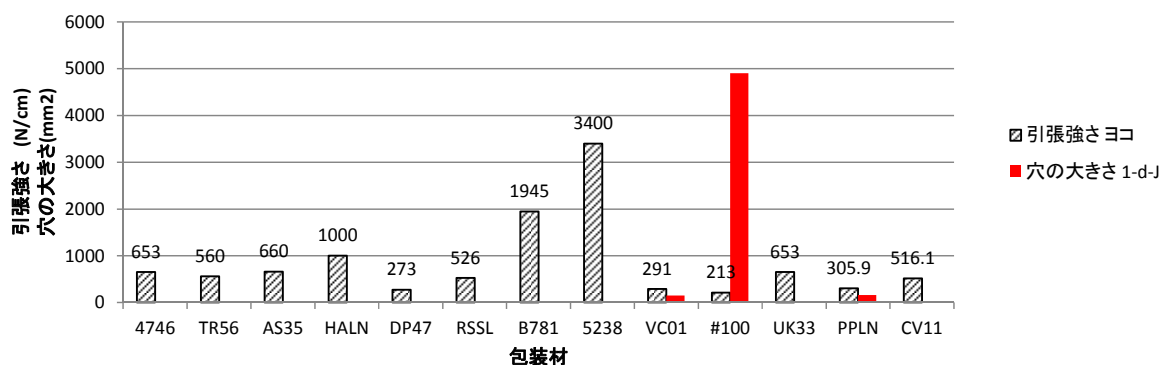


図 4.1 実験(A)で開いた穴の大きさと包装材の引張強さ

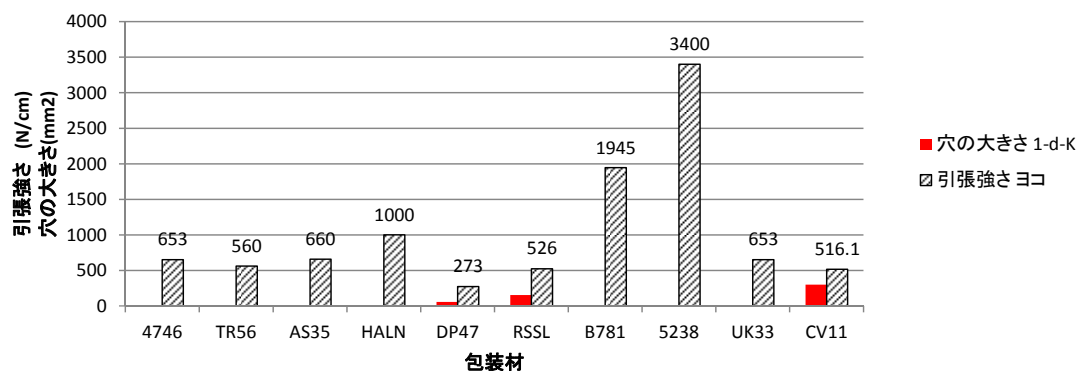


図 4.2 実験(B)で開いた穴の大きさと包装材の引張強さ

これらの図から、DP47 など一部の例外はあるが、以下のことが明らかになった。

実験(A)で穴が開いた包装材の特徴：

- ・包装材の引張強さが 305.9N/cm 以下である

実験(B)で穴が開いた包装材の特徴：

- ・包装材の引張強さが 526N/cm 以下である

実験(A)、(B)それぞれについて、穴開きの有無の境界条件についてさらに検討を進める。

ここでは判別分析を用いて、穴開きの有無が判別される閾値を定式化することを目指す。これまでの検討から、表 2.3 に示す力学特性をあらわす変数 x_1, \dots, x_8 のうち、引張強さ x_3 を用いると、境界を設定できそうである。ここでは、 x_3 のみを考慮した一変数モデル M_1 に加えて、他の変数も考慮した二変数モデル M_2 、三変数モデル M_3, \dots を考える。最後にどのモデルが最も適切であるかを検討し、最も適切な式を選び出した。

4.2.2 ロジスティック判別分析

複数のデータを異なるグループに分類する際に用いられる手法として判別分析がある。この手法を用いて、力学特性をあらわす変数 x_1, \dots, x_8 から、実験(A)、(B)のそれぞれについて穴が開くか開かないかを判別する式を作ることを考える。「穴の空きやすさ」の目安を与える量として X を考える。 X は、力学特性をあらわす変数 x_1, \dots, x_8 で表せる関数とする。実験の結果、包装材に穴が開く場合に 1、開かない場合に 0 とする二値を返す応答変数 y を当てはめれば、入出力が $X \rightarrow y$ となる関数 f を用いて対応がつけられるようになる。

穴開きという実験結果に各変数が及ぼす影響を考える際、上記のような離散的な状態では取り扱いにくい。そのため、二値を返す y の代わりに、入力 X に対し 0 から 1 までの値を返すような単調な連続関数 $f(X)$ を考える。このとき、関数 $f(X)$ は、実験で穴が開いた場合は「穴が開く可能性が高かった」すなわち「1 に近い」値を返し、実験で穴が開かなかった場合は「穴が開かない可能性が高かった」すなわち「0 に近い」値を返すようなものとする。ここで $f(X) = 0.5$ のように閾値を定義することで、 $f(X)$ は、力学特性は既知であるが実験未実施の包装材に対し穴開きの有無を判別する式とみなすことができる。さらに $f(X)$ が連続関数であれば判別の誤りの可能性を考慮できるので、判別の結果を信頼性とともを示すことができる。すなわち、ある包装材に対し、関数 f が 0.99 を返したならば「穴が開くと予測され、その可能性はきわめて大きい」といえ、0.55 を返したならば「穴が開くと予想されるが、この予測が外れる可能性も程々にある」というように判別の妥当性の目安を得られる。

上の条件を満たす関数 $f(X)$ としては様々なものがあるが、今回は以下の式で表される関数を用いてロジスティック判別分析を行った。 X はロジットと呼ばれる。閾値は $f(X) = 0.5$ と定義する。

$$f(X) = \frac{1}{1 + \exp(-X)} \quad (\text{eq.1})$$

なお、穴開きの閾値の誤差が正規分布関数になることを想定する場合、関数 $f(X)$ としてロジスティック型の分布関数よりも累積正規分布関数を用いる方が適切である。ただし、いずれの分布関数でも $f = 0.5$ のま

わりに対称であり推定に影響しないこと、各実験に対するデータ数が 13 と少なく分布関数の形状の詳細が問題にならないこと、ロジスティック型の分布関数は数式に積分記号を含まず簡潔に式を記述できること等の理由から、今回はロジスティック判別分析を行った。

実験(A)、(B)にそれぞれ対応する 2 つの判別関数 P_A, P_B を考え、これらはいずれも $f(X)$ の形で表されるものとする。変数 x_1, x_2, \dots, x_8 について各々が平均値のまわりに対称形に近い分布をもつよう、それぞれ自然対数 x'_1, x'_2, \dots, x'_8 をとり、ロジット X は変数 x'_1, x'_2, \dots, x'_8 の線形結合 $a_0 + a_1x'_1 + a_2x'_2 + \dots + a_8x'_8$ で表されるところとする。実験ごとにロジット X を定め (X_A, X_B と表記)、判別関数 P_A, P_B を以下のように書き表す。

$$P_A = f(X_A) = \frac{1}{1 + \exp(-X_A)} = \frac{1}{1 + \exp(a_{0A} + a_1x'_1 + a_2x'_2 + \dots + a_8x'_8)} \quad (\text{eq.2a})$$

$$P_B = f(X_B) = \frac{1}{1 + \exp(-X_B)} = \frac{1}{1 + \exp(a_{0B} + a_1x'_1 + a_2x'_2 + \dots + a_8x'_8)} \quad (\text{eq.2b})$$

ここで実験(A)、(B)の差異は、定数項 a_0 のみに反映させ、特定の力学的特性が穴開きにもたらす寄与分には変化を与えないという仮定を置く。実験(A)、(B)に対応する定数項を a_{0A}, a_{0B} とし、一次の係数 a_1, \dots, a_8 は共通であるとした。この仮定のもとでは、2 つの判別関数の形状は同じであり、それらの違いは切片のみになる。

4.2.3 係数の最適化

上記の仮定のもと、実験(A)について 13、実験(B)について 13、合計 26 のデータ* を用い、パラメータ $\theta = \{a_{0A}, a_{0B}, a_1, a_2, \dots, a_8\}$ を最尤法により推定した。パラメータの推定にあたり、判別関数を「包装材に穴が開く確率」を与えるとみなし、このたび実験で得られた穴開きの判定データが再現される確率を各パラメータの組み合わせについて考える。最尤法は、「データを再現する確率（尤度）が最大となるようなパラメータが最も適している」という考え方に基づいて推定量を算出する方法である。

*註 11 群の 3 つのデータでは実験(B)を実施していないが、実験(B)は実験(A)よりも厳しい条件であり、仮に実施した場合は穴が開くことが想定されるため、これらは「実験(B)で穴が開いた包装材」とみなした。また、データ#04 は x_7 および x_8 が不明のため、これらを用いる解析ではデータ#04 全体を存在しないものとして取り扱っている。その場合、データ数の合計は 24 となる。

実験は包装材ごとに実施したため個々の実験結果は独立であり、穴開きの有無はベルヌーイ試行と考えてよい。表 2.2 のように、00 群、01 群、11 群の順にデータを並べると、その内訳は以下のようになる。

実験(A)で穴が開いた包装材が 3 個 (k_1, \dots, k_3 とする)

実験(A)で穴が開かなかった包装材が 10 個 (k_4, \dots, k_{13} とする)

実験(B)で穴が開いた包装材が 6 個 (k_{14}, \dots, k_{19} とする)

実験(B)で穴が開かなかった包装材が 7 個 (k_{20}, \dots, k_{26} とする)

上から順に、26 のデータから成るデータ列 $\mathbf{K} = \{k_1, k_2, \dots, k_{26}\}$ に対して、実験(A)、(B)を合わせた尤度 $lik(\theta; \mathbf{K})$ および対数尤度 $L(\theta; \mathbf{K})$ は以下の式で書き表せる。包装材 k_n に対するロジットをそれぞれ $X_A(k_n), X_B(k_n)$ と表記した。

〔尤度〕

$$lik(\theta; \mathbf{K}) = \prod_{n=1}^3 f(X_A(k_n)) \prod_{n=4}^{13} (1 - f(X_A(k_n))) \prod_{n=14}^{19} f(X_B(k_n)) \prod_{n=20}^{26} (1 - f(X_B(k_n))) \quad (\text{eq.3})$$

〔対数尤度〕

$$\begin{aligned} L(\theta; \mathbf{K}) &= \ln(lik(\theta; \mathbf{K})) \\ &= \sum_{n=1}^3 \ln f(X_A(k_n)) + \sum_{n=4}^{13} \ln(1 - f(X_A(k_n))) + \sum_{n=14}^{19} \ln f(X_B(k_n)) + \sum_{n=20}^{26} \ln(1 - f(X_B(k_n))) \quad (\text{eq.4}) \\ &= \ln f(X_A(k_1)) + \ln f(X_A(k_2)) + \ln f(X_A(k_3)) \\ &\quad + \ln(1 - f(X_A(k_4))) + \ln(1 - f(X_A(k_5))) + \cdots + \ln(1 - f(X_A(k_{13}))) \\ &\quad + \ln f(X_A(k_{14})) + \ln f(X_A(k_{15})) + \cdots + \ln f(X_A(k_{19})) \\ &\quad + \ln(1 - f(X_A(k_{20}))) + \ln(1 - f(X_A(k_{21}))) + \cdots + \ln(1 - f(X_A(k_{26}))) \quad (\text{eq.5}) \end{aligned}$$

対数尤度が最大となる時のパラメータが最尤推定量 $\hat{\theta}$ であり、これは微分方程式 $\frac{\partial L}{\partial \theta} = 0$ を解くことで得られる。

なお、この推定の手続きでは、事前確率に相当する情報を含めて係数を最適化したことに注意が必要である。すなわち判別関数 P_A , P_B を「包装材に穴が開く確率」とみなしたが、現実的な意味を持つ確率ではない。「 $P_A = 0.7$ である」というのは、「同じ素材に対し実験(A)を10回行くと7回程度穴が開くことが期待される」ということではない。 P_A , P_B は判別のため便宜的に設定したもので、判定の信頼性を与える以上の意味を持たない。

4.2.4 一変数モデル M_1

最も簡単な判別関数は一変数のものである。引張強さ x_3 を使った一変数モデル M_1 は以下のようになり、図示すると図 4.3 のようになる。

$$P_A(x_3) = \frac{1}{1 + \exp(a_{0A} + a_3 x'_3)} \quad P_B(x_3) = \frac{1}{1 + \exp(a_{0B} + a_3 x'_3)}$$

最尤法により求めた推定値は $a_{0A} = -60.84$, $a_{0B} = -66.77$, $a_3 = 24.46$ となり、そのときの対数尤度 L は -2.276 であった。

$$P_A(x_3) = \frac{1}{1 + \exp(-60.84 + 24.46 x'_3)} = \frac{1}{1 + (3.78 \times 10^{-27}) x_3^{10.6}} \quad (\text{eq.6a})$$

$$P_B(x_3) = \frac{1}{1 + \exp(-66.77 + 24.46 x'_3)} = \frac{1}{1 + (1.00 \times 10^{-29}) x_3^{10.6}} \quad (\text{eq.6b})$$

$P_A(x_3) = 0.5$ となるのは $x_3^{24.46} = 10^{60.84}$ 、すなわち $x_3 = 307 \text{ N/cm}$ のとき、
 $P_B(x_3) = 0.5$ となるのは $x_3^{24.46} = 10^{66.77}$ 、すなわち $x_3 = 537 \text{ N/cm}$ のときである。

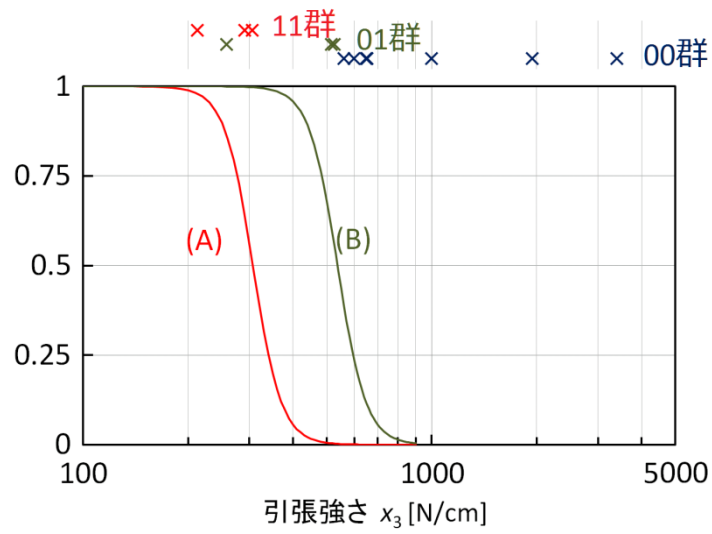


図 4.3 穴が開く引張強さ x_3 の閾値 (モデル M_1)

表 4.4 に同様のやり方で x_3 以外の変数を選択して係数を最適化した場合の結果を示す。いずれも x_3 を用いた場合に比べ対数尤度は小さくなり、モデルへの当てはまりが悪くなった。

表 4.4 一変数モデルにおける対数尤度

変数	最尤推定値	対数尤度 L
x_1	$a_{0A} = 1.373, a_{0B} = 0.3194, a_1 = 0.5351$	-6.929
x_2	$a_{0A} = -15.50, a_{0B} = -16.83, a_2 = 7.028$	-5.745
x_3	$a_{0A} = -60.84, a_{0B} = -66.77, a_3 = 24.46$	-2.276
x_4	$a_{0A} = -11.38, a_{0B} = -12.74, a_4 = 4.480$	-5.553
x_5	$a_{0A} = 0.1394, a_{0B} = -0.9176, a_5 = 0.6898$	-6.909
x_6	$a_{0A} = 1.129, a_{0B} = 0.07874, a_6 = 0.04584$	-6.946
x_7	$a_{0A} = -1.176, a_{0B} = -2.389, a_7 = 1.079$	-6.076
x_8	$a_{0A} = -1.676, a_{0B} = -2.908, a_8 = 1.279$	-6.003

4.2.5 二変数モデル M_2

複数の変数を選ぶ場合、相関の大きいものどうしを選ぶと最適化の精度が落ち、モデルとしても悪くなるので、同種のパラメータである「 x_3 と x_4 」「 x_5 と x_6 」「 x_7 と x_8 」といった変数の組は、同じモデルには含めないものとする。2変数間の相関係数の値を表4.5に示す。

表 4.5 2 変数間の相関係数

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8
x_1	1				(Symm.)			
x_2	0.784	1						
x_3	0.185	0.572	1					
x_4	0.225	0.521	0.91	1				
x_5	0.871	0.554	0.084	0.017	1			
x_6	0.867	0.503	0.034	0.039	0.965	1		
x_7	0.331	0.241	0.215	0.058	0.518	0.469	1	
x_8	0.315	0.249	0.238	0.105	0.485	0.435	0.994	1

表 4.6 に x_3 の他にもう 1 変数を選ぶ場合の対数尤度の結果を示す。引裂強度である x_7 や x_8 以外では対数尤度は小さくなり、関数への当てはまりが悪くなった。

対数尤度は x_7 よりも x_8 の方が小さくなるが、両者にあまり差がないこと、さらに「双方の力学特性値で小さい方の値を用いる」という物理的な意味合いをふまえた統一性を考慮に入れて x_7 のほうを採択し、モデル M_2 を作成した。

表 4.6 二変数モデルにおける対数尤度

変数	最尤推定値	対数尤度 L
x_3, x_1	$a_{0A} = -57.70, a_{0B} = -63.21, a_3 = 23.05, a_1 = -1.037$	-2.251
x_3, x_2	$a_{0A} = -58.37, a_{0B} = -64.11, a_3 = 24.16, a_2 = -0.743$	-2.273
x_3, x_5	$a_{0A} = -83.28, a_{0B} = -91.21, a_3 = 31.94, a_5 = 2.535$	-2.119
x_3, x_6	$a_{0A} = -65.65, a_{0B} = -71.92, a_3 = 25.94, a_6 = 0.672$	-2.257
x_3, x_7	$a_{0A} = -77.42, a_{0B} = -83.00, a_3 = 28.38, a_7 = 2.854$	-1.581
x_3, x_8	$a_{0A} = -80.52, a_{0B} = -85.94, a_3 = 28.96, a_8 = 3.433$	-1.528

引張強さ x_3 と引裂強さ x_7 を考慮した二変数モデル M_2 は次のようになる。

$$P_A(x_3, x_7) = \frac{1}{1 + \exp(a_{0A} + a_3 x_3 + a_7 x_7)} \quad P_B(x_3, x_7) = \frac{1}{1 + \exp(a_{0B} + a_3 x_3 + a_7 x_7)}$$

最尤法により求めた推定値は、表 4.6 に $a_{0A} = -77.42, a_{0B} = -83.00, a_3 = 28.38, a_7 = 2.854$ となり、そのときの対数尤度 L は -1.581 であった。

$$P_A(x_3, x_7) = \frac{1}{1 + \exp(-77.42 + 28.38x'_3 + 2.854x'_7)} = \frac{1}{1 + (2.378 \times 10^{-34})x_3^{12.33}x_7^{1.240}} \quad (\text{eq.7a})$$

$$P_B(x_3, x_7) = \frac{1}{1 + \exp(-83.00 + 28.38x'_3 + 2.854x'_7)} = \frac{1}{1 + (9.028 \times 10^{-37})x_3^{12.33}x_7^{1.240}} \quad (\text{eq.7b})$$

$P_A(x_3, x_7)=0.5$ となるのは $x_3^{28.38}x_7^{2.854}=10^{77.42}$, すなわち $x_3x_7^{0.1006}=534$ を満たすとき,
 $P_B(x_3, x_7)=0.5$ となるのは $x_3^{28.38}x_7^{2.854}=10^{83.00}$, すなわち $x_3x_7^{0.1006}=840$ を満たすときである。

これらの結果を図示したものが図 4.7, 図 4.8 である。このモデルは x'_3 - x'_7 平面上にて, 群を判別する直線を引くことに相当する。図 4.8 で, 赤の破線が $P_A=0.5$ の境界, 緑の一点鎖線が $P_B=0.5$ の境界を示す。これら 2 つの境界は, 00 群・01 群・11 群を判別する目安を与える。

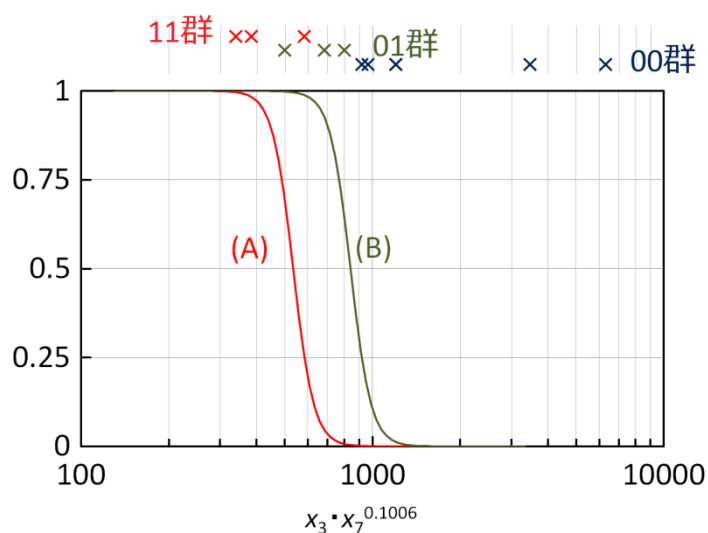


図 4.7 穴が開く引張強さ x_3 , 引裂強さ x_7 の閾値 (モデル M_2)

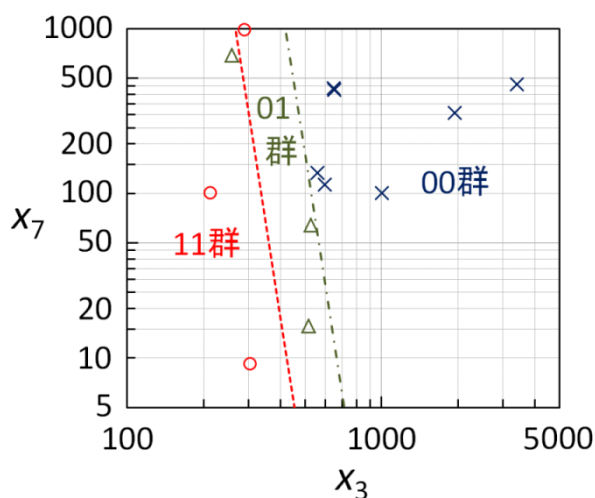


図 4.8 モデル M_2 によるデータの判別

4.2.6 三変数以上のモデル

三変数以上でも同様のやり方でモデルを作成できるが、不必要に式が複雑になる。表 4.9 に三変数のモデルの対数尤度の結果を示す。 x_3, x_7 に加え x_6 を組み入れるとき、対数尤度が最も大きくなった。これをモデル M_3 とする。

表 4.9 三変数モデルにおける対数尤度

変数	最尤推定値	対数尤度 L
x_3, x_7, x_1	$a_{0A} = -94.06, a_{0B} = -100.9, a_3 = 33.02, a_7 = 4.353, a_1 = -8.667$	-1.155
x_3, x_7, x_2	$a_{0A} = -64.82, a_{0B} = -70.22, a_3 = 28.76, a_7 = 2.802, a_2 = -5.591$	-1.501
x_3, x_7, x_5	$a_{0A} = -69.55, a_{0B} = -74.76, a_3 = 26.35, a_7 = 3.232, a_5 = -2.134$	-1.539
x_3, x_7, x_6	$a_{0A} = -160.2, a_{0B} = -177.1, a_3 = 68.86, a_7 = 15.57, a_6 = -25.47$	-0.894

4.2.7 AIC によるモデルの選別

モデル M_1, M_2, M_3 を赤池の情報量規準 AIC^[1]から評価する。これはモデル選択の指標となる値で(eq.8)で定義され、AIC が小さなモデルが望ましいとされる。なお、 \mathbf{K} はデータ列 $\{k_1, k_2, \dots, k_n\}$ 、 $\hat{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{K})$ は確率モデルのパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の推定量、 s はモデルが持つパラメータの数、 $L(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{K})$ は対数尤度である。

$$\text{AIC}(\mathbf{K}) = -2L(\hat{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{K}); \mathbf{K}) + 2s \quad (\text{eq.8})$$

今回は、パラメータ $\boldsymbol{\theta} = \{a_{0A}, a_{0B}, a_1, a_2, \dots, a_8\}$ の推定量として最尤推定量を用いた。各モデルについて AIC を算出すると、

$$\text{モデル } M_1 \text{ の場合 } \text{AIC}_{M_1} = -2 \times (-2.276) + 2 \times 3 = 10.552$$

$$\text{モデル } M_2 \text{ の場合 } \text{AIC}_{M_2} = -2 \times (-1.581) + 2 \times 4 = 11.162$$

$$\text{モデル } M_3 \text{ の場合 } \text{AIC}_{M_3} = -2 \times (-0.894) + 2 \times 5 = 11.788$$

となりモデル M_1 のものが最も小さい。したがってモデルとしては M_2, M_3 よりも M_1 の方がふさわしい。

4.2.8 まとめ

・包装材の穴の有無は、引張強さ x_3 [N/cm] を考慮することで概ね説明でき、穴が開くであろう度合いは、モデル M_1 で表される。モデル M_1 の詳細は(eq.6a)、(eq.6b)および図 4.3 を参照。

・判別関数 P_A, P_B が 0.5 となる条件を閾値と定義すれば、穴が開く引張強さの閾値は、6 号雷管の場合の実験(A)について 307 N/cm、KONEK 雷管の場合の実験(B)について 537 N/cm となる。

5. 総括

検討の結果，明らかになったことを整理する。

1. 包装材の引張強さ，伸び率，引裂強さが大きいほど，攪拌実験で包装材に開く穴は小さくなる。
2. 実験により穴が開いた包装材には，材料に綿を含む，もしくはメッシュ形状であるという特徴が見られた。穴が開かなかった包装材には，材料が高強力ナイロン 66 または高強度ナイロン 6 であるという特徴があった。
3. 模擬雷管を用いた攪拌実験により，包装材に穴が開くかどうかは，引張強さ（小さい方）の値から概ね判断できることがわかった。6 号雷管模擬品を用いた場合は 307 N/cm 以下，KONEL 雷管模擬品を用いた場合は 537 N/cm 以下で穴が開くと推定された。

参考資料

- [1] 赤池弘次，甘利俊一，北川源四郎，樺島祥介，下平英寿；「赤池情報量規準 AIC - モデリング・予測・知識発見」，共立出版（2007）