

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 5 日現在

機関番号：62603
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2015～2016
課題番号：15K11999
研究課題名（和文）次世代ものづくり技術の基盤たるエミュレータ・デザイン学創成に向けた数理戦略立案

研究課題名（英文）Mathematical platform for creating the emulator-based design science as the foundation of next-generation manufacturing technology

研究代表者
樋口 知之（HIGUCHI, Tomoyuki）

統計数理研究所・・・所長

研究者番号：70202273
交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,700,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、データ同化の考え方を研究推進の基本指針として、データ科学、シミュレーション科学、およびセンサー技術を三位一体化した、エミュレータ・デザイン学を創りだすための数理基盤の整備に取り組む。エミュレータを積極的に用いることにより、製品設計・開発スピードの高速化や新素材の効果的発見を促す次世代ものづくり技術、経済効率性と安全保障性の高い社会インフラ維持施策も実現可能になる。

研究成果の概要（英文）：In this research, we will establish the mathematical platform to create emulator-based design studies, which combine and integrate data science, simulation science, and sensor technology according to data assimilation concept as basic guideline for research promotion. By actively using the emulator, it is possible to realize next-generation manufacturing technology that accelerates product design and development speed and effective discovery of new materials, and social infrastructure maintenance measures with high economic efficiency and security guarantee.

研究分野：情報学

キーワード：統計的品質管理 シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

(1) 学術会議から12年前に提言された『設計科学』は、人間の全体性を現す人工物システムを研究対象とし、目的や価値を正面から取り込んだ新しい科学である。この思想は、工学分野においては自然に受け入れられるが、「あるものの探究」を主な目的として発展してきた「認識科学」の価値観とは対立するものである。人間の個別あるいは集団的活動が大きく影響する地球システムや生命体においては、「あるもの」自体の定義が困難であり、結果として認識科学のアプローチは筋が悪い。この認識は、ゆっくりではあるが学術全体に広く浸透しつつある。

(2) 設計科学において、分野横断的の学問であるデータ科学とシミュレーション科学の果たす役割は非常に大きい。残念ながらデータ科学とシミュレーション科学の両分野は、数値解析のような一部を除いてこれまで並進的に発展してきたと言わざるをえない。

同様の構図は製品開発現場でも見られる。新製品の開発においては、ソルバーと呼ばれる汎用のシミュレーション用アプリケーションソフトを利用する現場と、予備実験の結果や試作品の計測データの分析を行なう現場がほぼ独立していた。ところが、近年のセンシング技術の著しい発達(高精度化と小型化および廉価化)は、この分断されていた両分野が有機的につながる可能性を生み出している。

(3) データ同化とは、複雑な現象の高精度予測のために、時空間観測・計測データの解析と数値シミュレーション計算を統合することにより、シミュレーションの初期値や境界値、パラメータ等を実際の現象をなるべく再現するように定め、時にはシミュレーションモデル自体にも手を加える(リモデリング)一連の計算作業である。本研究では、データ同化の考え方を研究推進の基本指針として、データ科学、シミュレーション科学、およびセンサー技術を三位一体化した、新しいデザイン学を創りだすための数理基盤の整備に取り組む。

シミュレーションと観測データの融合は地球科学の領域のみ試行されてきたわけではなく、シミュレーションが高度に進化・成熟した領域、具体的には流体力学シミュレーション分野での取り組みがこの10数年熱心になされている。代表的なものとして計測融合シミュレーション(データ同化の特殊型として定義可能)があげられる。工学へのデータ同化の応用は流体力学分野ばかりでなく、有限要素法や境界要素法などの構造体計算シミュレーション分野においても始まりつつある。

データ同化研究において、統計数理研究所のデータ同化研究開発センターは、当該分野で国内初となる逐次データ同化の教科書の出版や、国際会議での特別セッションの継続的開催などの研究実績により、逐次データ同

化の分野を牽引していると国内外から認知されている。

ビッグデータ、大規模数値シミュレーション、および先端センシング技術のうち二つを融合する研究領域はこの数年非常に活発であるが、本研究で提案する3つを一体化した試みは国内外共にまだ非常に少ない。さらに、その計算システムを利用して情報循環させる形で製品開発や社会システム整備を行なう研究は皆無である。

(4) 欧米では、計算機シミュレーション結果の信頼性を具体的に確立するための方法論の研究が急速に熱を帯びてきており、ASME (The American Society of Mechanical Engineers)が Verification and Validation (通常V&Vと呼称される)の標準化に大きな力を注いでいる。例えば、2006年には固体力学に対して、2009年には流体力学および熱解析に関する計算機シミュレーションのV&Vが公表されている(V&V10, 20, 30, 40)。2013年からASMEは年に1回、V&Vシンポジウムを開催している。欧州においては流体力学の分野で同種の研究活動が2012年から活発化しており、Uncertainty Quantification (UQ) in Industrial Analysis and Design の名のプロジェクト研究が現在進行中である。米国NASAでは、NASA UQ challenge 2014と題して、スパースな限定されたパラメータセットに関するシミュレーションの結果データから、UQをモデル化するコンペを開始している。

品質管理の分野をリードしてきた米国統計コミュニティは、2011-12年に、NSFのサポートを受ける機関SAMSI(Statistical and Applied Mathematical Sciences Institute)にてUQを集中的に研究するプログラムを立ち上げた。さらには、米国統計学会はSIAM(Society for Industrial and Applied Mathematics)と共同でJournal on UQの刊行を2014年に開始した。その雑誌の取り扱う主たる分野として sensitivity analysis, model validation, model calibration, data assimilation の4つがあげられている。

本研究に関連しては、古くから品質管理の研究者を中心に産官を巻き込んで重層的に研究開発が行われ、「ものづくり」立国としての日本の産業を技術面から支えてきた。80年代にスーパーコンピュータの利用が広く普及すると、第三の科学とも言われる計算機科学が確立し、特にこの近年、流体解析や構造解析に利用されるソルバーの汎用化とともに、設計段階における計算機シミュレーションの相対的地位はかなり高まっている。

日本のシミュレーション側では、日本機械学会、日本計算工学会、日本原子力学会等でASME V&Vが紹介されたりする一方、統計側では主として日本品質管理学会を中心に、計算機シミュレーションを積極的に実験計画に取り込む方法論の確立が模索されてきた。この流れを受け、従来の実験計画法から、

コモディティ化したシミュレーション実験や高精度センサー情報を高度利用する、実験計画法のリノベーションが焦点の急となっている。

2. 研究の目的

(1) システムが示す複雑な現象を予測し、その多様な機能を模倣する計算モデルをエミュレータと呼ぶことにする。本研究では、学術および開発現場の大きな流れを受け、予測性能の向上を通じてエミュレータを設計・改良するための数理基盤、つまりエミュレータ・デザインに必要なとされる統計数理の整理と応用例のベストプラクティスの探索を行う。エミュレータを積極的に用いることにより、製品設計・開発スピードの高速化や新素材の効果的発見を促す次世代ものづくり技術、経済効率性と安全保障性の高い社会インフラ維持施策も実現可能になる。

(2) データ科学とシミュレーション科学に基づく従来のエミュレーション的な手法の多くが、データ同化を含め連続線形・連続非線形な系を対象としてきた。一方で、科学・技術や社会のあらゆる局面において対象やその収集されるビッグデータの構造が複雑化・大規模化し、不連続・離散構造を含む系や、膨大な変数を含む大規模高次元系、希少事象が全体を大きく変える系など、従来のエミュレーション的な手法が扱えない対象やデータが急激に増加している。本研究によりこれらエミュレータ・デザインの範疇に含めることは、エミュレータを用いた社会応用に必須である。

3. 研究の方法

(1) 二年計画の概略をまず示す。初年度は調査研究にあてる。2年目はシミュレーションモデルとデータを用いたエミュレータ設計の実験、具体的には航空機シミュレーションのデータ同化の実験結果を用いたエミュレータ・プロトタイプを構築する。シミュレーションのソルバーは既存のものを利用するが、それを逐次データスケルトンプログラムから呼ぶためのスクリプトプログラムを開発する。エミュレータを構築するため、このデータ同化の結果を用いて、ガウス過程回帰によるパラメータ相互間の依存性を考慮したスパース回帰を実施する。得られたエミュレータを用いてパラメータに対する目的変数の応答曲面を求める。その一方で、エミュレータを経由せず、少数のシミュレーション結果から、応答曲面を直接求める方法も試す。つまり、高次元パラメータ空間内の移動とサンプル(テストパラメータ)の配置を自律的に逐次学習するアルゴリズムを研究する。

(2) 各年度の計画を詳しく説明する。初年度は、エミュレータ・デザイン学の数理の基盤構築に必要な数理要素技術の洗い出しと、本課題と関連する国際的な先端研究所へ

の調査研究を行う。Journal on UQ に掲載された論文は、感度解析、ガウス過程回帰、モデル較正、ギブスサンプラーの解析のテーマを取り扱っており、それらは統計学の範疇である。従って米国においてもまだ、ASME と ASA/SIAM のコミュニティ間の認識ギャップはまだ大きいと思われる。このあたりを米国および国際学会に参加することで調査し、言葉と概念の整理を行う。あわせて、利用されている数理要素技術の洗い出しを行う。

数理基盤の構築をめざした数理的課題の整理とともに、先進的センシング技術が計算モデルと統合されることによって得られる価値についても調査と議論を行い、次年度のエミュレータ・プロトタイプ構築が具体的なイメージをもって着実に進められるようにする。具体的には、本研究所データ同化研究開発センターと交流実績のある、東北大学流体科学研究所の教員や JAXA (航空本部) の研究者と時折議論してきた、高性能風洞実験結果と数値シミュレーションとの同化実験を行うことで、10~20 個程度のパラメータセットに対する UQ のモデル化を行う準備をする。橋梁やトンネルのような構造物にセンサーを多数設置した場合のセンサー情報を構造体計算にどのように同化させるかについての方法論も研究する。これには、対象とするシステムは異なるが、埋め立てを効率よく適切に行うための地盤工学問題や、地殻構造推定のための物理探査へのデータ同化の応用に関する我々の既発表の方法論が役立つと期待している。

現況の動向を調査し、どのような統計技術が使われているのか、言葉と概念の整理を行う。また、エミュレータ・デザインに必要なとされる数理要素技術の調査もすすめる。Journal on UQ にも掲載されているガウス過程回帰や、その古典版とも言えるクリギング、また次元削減を目的としたスパース回帰などが想定している技術群である。研究の進め方については、我々が最近出した解説記事の将来展望に記した方向性を参考にする。

(3) 二年度は、初年度に準備した、航空機シミュレーションのデータ同化の実験を行う。シミュレーションのソルバーは既存のもの(あるいは、JAXA で開発された公開版)を利用するが、ソルバーを逐次データスケルトンプログラムから呼ぶためのスクリプトプログラムを開発する必要がある。また、同化させる目的変数もさまざまなものが考えられるため、その選択を含めた観測モデルの同定に時間がかかると予想している。

エミュレータを構築するために、このデータ同化の結果を用いて、ガウス過程回帰によるパラメータ相互間の依存性を考慮したスパース回帰を行う。得られたエミュレータを用いて、パラメータに対する目的変数の応答曲面を構成する。その一方で、エミュレータを経由せず、少数のシミュレーション結果から、応答曲面を直接求める方法の改良も行う。

そのため、高次元パラメータ空間内の移動とサンプル(テストパラメータ点)の配置を自律的に逐次学習するアルゴリズムを開発する。この開発には、説明変数に誤差を許容する回帰問題に対して提案された、カーネル法のアイデアをレプリカ交換モンテカルロ法に組みこんだ方法が指針を与えてくれると考えている。

これらの改善工夫を行うとともに、適切なセンサー情報の獲得および入力の方法について検討する。具体的問題を設定した性能評価デモンストレーションの実施、それを受けた最終的な性能評価を行う。成果を学会等で発表するとともに、統計的品質管理の分野の識者に評価してもらうため国内および海外出張を行う。

4. 研究成果

(1) 初年度は、エミュレータ・デザイン学の数理の基盤構築に必要な数理要素技術の洗い出しと、本課題と関連する先端的な研究所への訪問等を含めた調査研究を行った。具体的には、アメリカ統計連合大会やアジア・オセアニア地区の計算機統計学会等の統計関係の国際学会に参加し、シミュレーションと統計数理のコミュニティ間の認識ギャップ等について調査し、利用されている数理要素技術の洗い出しを行った。あわせて、参加者らとの議論を通じて言葉と概念の整理もすすめた。また、本研究所データ同化研究開発センターと交流実績のある、東北大学流体科学研究所の教員や JAXA(航空本部)の研究者と時折議論することで、先進的センシング技術が計算モデルと統合されることによって得られる価値についても調査し、次年度計画のエミュレータ・プロトタイプの構築が具体的なイメージをもって着実に進められるように準備作業をすすめた。

(2) 二年度は研究計画の2年目ということもあり、エミュレータ・プロトタイプの構築に注力した。テストベッドとして考えていたデータ同化実験において、同化させる目的変数の選択を含めた観測モデルの同定に時間がかかってしまい、構築作業のステップが双子実験による基礎的機能の確認にとどまった。一方、エミュレータの数理的基盤の展開においては、汎用的枠組みを確立するといった具体的な成果があげられた。枠組みのフローチャートは以下の通りである。

まず目的変数を定め、スパース回帰を適用しエミュレータを得る。次に、設計パラメータ相互間の依存性をモデル化したカーネル関数を定義しガウス過程回帰を用いることで、設計パラメータに対する目的変数の応答曲面を構成する。この応答局面の誤差の大きい領域からサンプリングした設計パラメータ(テストパラメータ)に対して、少数のシミュレーションをさらに実施する。この結果を取り入れて、改めてさきほどのガウス過程回帰を適用し応答曲面を改善する。この手続

きを、設計精度を満足するまで繰り返す。この繰り返し手続きの中で、高次元設計パラメータ空間内のテストパラメータの配置を自律的に逐次学習するアルゴリズムも考案した。これらの成果を学会等で発表するとともに、統計的品質管理の分野の専門家から意見をもらい改善を図った。

(3) 本研究成果の社会的インパクトについて大まかに考察する。まず、製品設計・開発スピードの高速化や新素材の効果的発見を促す次世代ものづくり技術が期待できる。また、患者の希望や満足度をも先取りした、受益者起点の高度医療サービスを生み出せる。また、さまざまな社会的課題の解決をめざす施策の立案が効果的に実行できる。このようにエミュレータは、国際的競争力のある“ものづくり”や、経済効果的な治療・投薬の実現、さらには安心・安全な社会インフラの維持に役立つのは明らかである。国全体の予算が限られ、また人口も自然減少する中、さらには地球環境への配慮も十分に求められる制約の多い今後、エミュレータ・デザインの数理基盤の構築をすぐにも開始するのは、社会問題解決上、極めて安い投資であると考えられる。

(4) 今後の展望を以下、いくつかの具体的事例に関して述べる。近年は、試作品製作をごくわずかにして、膨大なシミュレーション計算でもって製品開発を行なうことも普通になってきている。このシミュレーションに高性能センサー情報を取り込む「新製品エミュレータ」があれば、製品・サービス設計と検証(テスト)作業を一体化でき、結果としてプロセスの超高速化と開発予算の大幅な削減が実現できる。また、手術中に各種センサー情報をリアルタイムで生体計算モデルに取り込む「臓器エミュレータ」は、個人のその場の状況にカスタマイズした治療を可能にする。

エミュレータは社会インフラの維持にも役立つ。大規模な人工物の建築前には、構造体シミュレーションにより、さまざまな入力に対する応答(挙動)の検討が十分になされる。シミュレーションモデルはすでに手元にあるので、人工物(例えば、橋梁やトンネル)に多数配置されたセンサーの情報をリアルタイムでシミュレータに取り入れることにより「構造体エミュレータ」が実現できる。これにより、経済性の高い社会インフラ整備計画の立案が可能になる。

パンデミックのような多くの人間行動がマイクロにマクロに複雑にからみあう社会現象に対しても、「感染症エミュレータ」を手にしておけば、早い段階で効果的なワクチン投与策の検討ができる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計2件)

樋口知之, データ駆動科学技術を担う人材の育成: 確率的思考と逆推論, 情報管理, Vol.59, No.1, 53-56, 2016, 査読無, doi:http://doi.org/10.1241/johokanri.59.53

樋口知之, スモールデータ、ビッグデータ、そしてスマートデータ - 人工知能ブームの中での統計学 -, 統計, Vol.67, No.1, 9-14, 2016. 査読無

〔学会発表〕(計9件)

樋口知之, モノづくりのスマート化の基盤と駆動力: ビッグデータと機械学習, JOEM Workshop'16「ビッグデータ・人工知能時代の機能性材料開発とは?」, 2016年7月15日, 東京理科大学森戸記念館(東京都新宿区)

樋口知之, シミュレーションとデータ解析の融合計算の基礎, 第1回 MI²I チュートリアルセミナー, 2016年3月29日, 科学技術振興機構東京本部(東京都千代田区)

樋口知之, 物理モデルと実験モデルの統合, 第34回自動車制御とモデル研究専門委員会, 2016年2月26日, 研究社英語センター(東京都新宿区)

樋口知之, 簡便エミュレーションによる実験計画のスマート化, 数学協働プログラム-MI²(情報統合型物質・材料開発)と数学連携による新展開-, 2016年2月26日, 科学技術振興機構東京本部(東京都千代田区)

樋口知之, 簡便エミュレーションによる実験計画の高度化, 第1回設計に活かすデータ同化研究会, 2015年7月10日, 統計数理研究所(東京都立川市)

樋口知之, シミュレーションとエミュレーション: データ同化を超えて, ものづくり企業に役立つ応用数理手法の研究会第6回技術セミナー, 2015年6月18日, 統計数理研究所(東京都立川市)

樋口知之, エミュレーション技術によるパーソナライゼーションの実現, 応用統計学フロンティアセミナー - 社会科学型ビッグデータにおける応用統計学の活躍の場拡大を目指して -, 2015年5月23日, 統計数理研究所(東京都立川市)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

〔その他〕

<http://www.ism.ac.jp/>

<http://www.ism.ac.jp/~higuchi/>

<http://researchmap.jp/matrix>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

樋口 知之 (HIGUCHI, Tomoyuki)

統計数理研究所・所長

研究者番号: 70202273