

令和 5 年 5 月 26 日現在

機関番号：14401

研究種目：国際共同研究加速基金（国際共同研究強化(A））

研究期間：2020～2022

課題番号：20KK0329

研究課題名（和文）深層生成モデルを組み込んだデータ駆動型最適設計法の体系化

研究課題名（英文）Systematization of data-driven optimum design incorporating a deep generative model

研究代表者

矢地 謙太郎（Yaji, Kentaro）

大阪大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号：90779373

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 10,800,000円

渡航期間： 11ヶ月

研究成果の概要（和文）：基課題（研究課題：20H02054）では、次世代の蓄電システムとして注目を集めるフロー電池を対象として、トポロジー最適化を利用した新たな最適設計のフレームワークの構築を目指している。また、本フレームワークはフロー電池に限らず直接解くことが困難な設計問題への展開も可能であり、汎用的なフレームワークとして体系化できる見込みがある。その鍵となるのは、本フレームワークへの深層生成モデルの導入と確固たる数理基盤の構築にある。そこで、データ科学分野を専門とするテキサス大学オースティン校の研究者との連携により、基課題の飛躍的発展を目指し、設計工学とデータ科学の両分野を跨ぐ国際共同研究を実施した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

一部の研究者によってトポロジー最適化に深層学習を組み込むことで最適構造を推定する取り組みが報告されているものの、いずれの先行研究も計算時間の短縮に主眼が置かれており、「深層学習を用いたからこそ解ける」という例は未だ数少ないのが現状である。また、深層学習は瞬時に最適構造を推定する可能性を秘めているものの、学習にある程度の時間を要するため、一概に高速化を実現できるわけではない。このような背景を踏まえ、「従来のトポロジー最適化では解くことができない問題を解く」ことを目的とし、汎用的なデータ駆動型最適設計法の構築を目指すところに本研究の学術的新規性があることを強調しておきたい。

研究成果の概要（英文）：In the fundamental research project (Research Project: 20H02054), we are aiming to develop a new framework for optimal designs using topology optimization for flow batteries, which have gained attention as next-generation energy storage systems. Furthermore, this framework has the potential to be applied to design problems that are difficult to solve directly, not limited to flow batteries, and can be systematized as a general-purpose framework. The key lies in the introduction of deep generative models into this framework and the establishment of a solid mathematical foundation. Therefore, we conducted an international collaborative research project that spans the fields of design engineering and data science, in collaboration with researchers from the University of Texas at Austin, specializing in the field of data science. This collaboration aims to achieve a significant advancement in the fundamental research project.

研究分野：最適設計

キーワード：トポロジー最適化 深層学習 深層生成モデル

1. 研究開始当初の背景

設計工学の分野では、人間が必要とする機能を一つのシステムや製品として具体化するための方法論に関する研究が行われてきた。中でもコンピュータを活用した設計支援は中核を成す研究分野であり、システムの包括的な設計を目的としたモデルベース開発や、個別の製品や構造物の性能向上を目的とした最適設計が代表的な研究として挙げられる。

このような動向の中、極めて設計自由度の高い最適設計の方法論として、トポロジー最適化がある。この方法論の最大の特徴は、構造物の形状と形態を数値計算により自動生成する点であり、言わば無の状態から最適構造を生み出すことができる。研究代表者の矢地はこれまでトポロジー最適化に関する研究に従事してきた。図1はこれまでの研究成果の一例であり、フロー電池と呼ばれる次世代の蓄電池のセル構造を対象としたトポロジー最適化の結果である[1]。

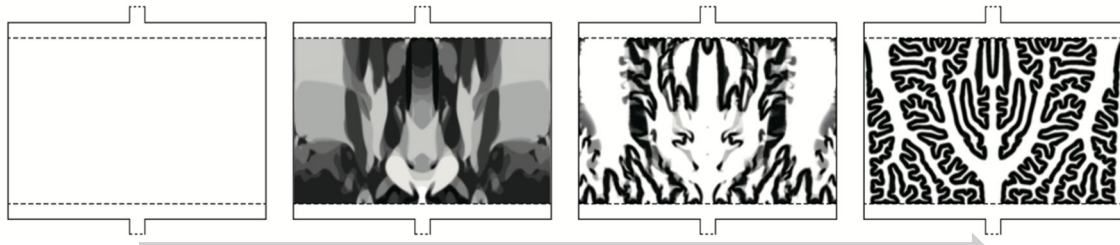


図1 RFBのトポロジー最適化の様子(白:電解液、黒:多孔質電極)

図からわかるように、トポロジー最適化は何もない状態から人知を超えた最適構造を導き出せることから、これまでにない革新的な設計解を創成する可能性を秘めていることが窺える。事実、図1の最適化結果により従来のモデルと比較しておよそ1.5~2倍程度電極内における化学反応が促進され、充放電性能の向上が可能となることが明らかになった。

その一方で、図1の研究では簡略化した解析モデルを用いており、実現象を定性的に再現するに留まっている。さらに、その後の研究[2]によって高精度の解析モデルを用いて最適解を得るためには、様々な近似処理を介させなければならないことが明らかになった。これは、トポロジー最適化の設計自由度が高すぎるが故に生じる強い多峰性に起因する。それに加えて、複雑な解析モデルを要する実際の設計問題において抜本的な高性能化を図る場合、一つの局所最適解を見つけるだけでも膨大なパラメータスタディを要する。このような事情により、トポロジー最適化は他の設計自由度が比較的低い方法論と比較して現状その適用範囲は限定的と言える。

2. 研究の目的

矢地が代表を務める科研費20H02054(以下、基課題)では、次世代の大規模蓄電システムとして注目を集めるフロー電池を対象として、トポロジー最適化を利用した新たな最適設計のフレームワークの構築を目指した研究を推進している。また、本フレームワークはフロー電池に限らず直接解くことが困難な設計問題への展開も可能であり、汎用的なフレームワークとして体系化できる見込みがある。その鍵となるのは、本フレームワークへの深層生成モデルの導入と確固たる数理基盤の構築にある。そこで、データ科学分野における最適化や機械学習を専門とするテキサス大学オースティン校Oden研究所の研究者との連携により、基課題の飛躍的發展を目指し、設計工学とデータ科学の両分野を跨ぐ先駆的な国際共同研究を実施する。

3. 研究の方法

前述の通り、基課題では個別の設計問題としてフロー電池の抜本的な高性能化を主な目的としているが、本フレームワークはフロー電池以外の工学設計問題への展開も期待できる。汎用的なフレームワークとして確立することができれば、最適設計の方法論として様々な工学設計問題への応用が可能となり、当該研究分野において新たな潮流を生み出すことができる。そこで本研究では、基課題の発展として、本フレームワークを最適設計の一方法論として体系化することを図る。

基課題で提案するフレームワークは、低フィデリティ最適化の段階において有望な解候補が存在すれば、理論上はいかなる最適化問題であっても系統的に最適解を導き出すことができる。しかしこれを実現するには、「如何にして多種多様な解候補を生成するか」という課題を克服する必要がある。これは一筋縄にはいかない厄介な課題であるが、近年目覚ましい発展を遂げているデータ科学の分野における深層生成モデルに解決の糸口があると研究代表者は睨んでいる。深層生成モデルは画像認識分野で盛んに研究が進められており、その主な特徴は画像データなどの高次元の実データ群を深層ニューラルネットワークによって学習することで、任意の疑似データを生成することにある。深層生成モデルをフレームワークに取り込む際は、トポロジー最適化の結果を画像データに見立てそれらのデータ群を学習させれば良い。学習がうまくいけば、その潜在変数空間から疑似的な最適構造を迅速かつ網羅的に生成することが可能となる。さらに、提案するフレームワークの弱点として計算コストが挙げられることから、これを克服するための深層ニューラルネットワークによるサロゲートモデルを導入し、その有効性を検証する。

4. 研究成果

本研究で得られた主な成果を以下にまとめる。

(1) フロー電池以外の問題への展開を実施した。具体的な例題として、構造力学問題を対象に最大応力最小化を実施した。得られた結果を図2に示す。

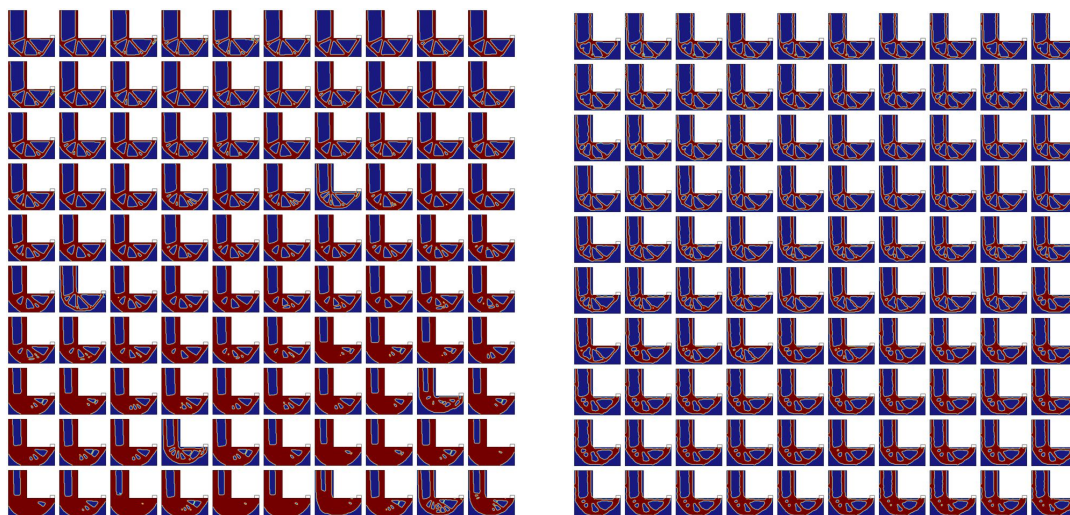


図2 構造問題における数値計算例：(左)初期解、(右)最適解

図2では、剛性最大化問題によって定式化した低フィデリティポロジー最適化問題を予め解くことにより初期解を生成し、それらを提案する枠組みによって最大応力最小化問題として有望な最適解の導出に成功している。ここで最大応力最小化問題は、従来法では何らかの緩和手法を用いない限り解くことが出来ないことに対し、本フレームワークでは緩和手法を一切用いることなく直接的に最大値の最小化、いわゆるミニマックス問題を解いており、学術的にも前例の無いインパクトのある成果と言える。

(2) 提案するフレームワークのアルゴリズムの改良として、深層生成モデルで構成する潜在空間でのサンプリング方法に着目し、実数値型の遺伝的アルゴリズムの考え方を取り入れることで、効率かつ安定的な解探索を実現する方法として“潜在交叉”を提案した。図3は従来のランダムサンプリングとの比較結果であり、潜在交叉によって多目的最適化問題の評価指標であるハイパーボリュームが改善されていることを確認できる。今後は交叉だけでなく突然変異操作についても新たな手法を開発していく。

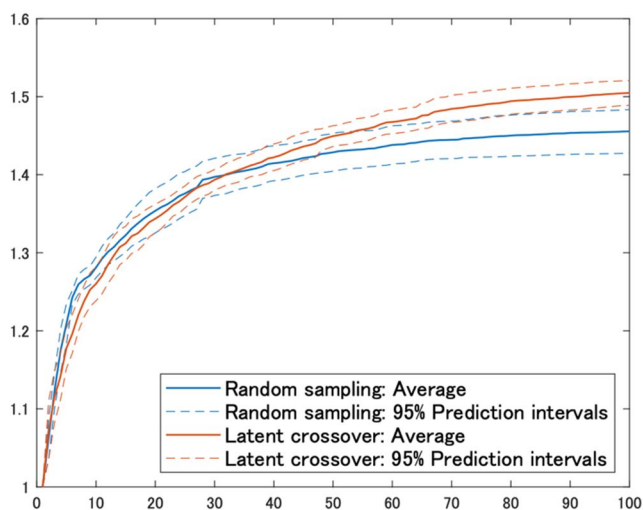


図3 従来法と提案法の比較：(横軸)最適化イタレーション数、(縦軸)ハイパーボリューム

<参考文献>

- [1] K. Yaji et al., Struct. Multidiscip. Optim., 57, 535-546 (2018)
- [2] C. H. Chen et al., J Energy Storage, 26, 100990 (2019)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Misato Kato, Taisei Kii, Kentaro Yaji, Kikuo Fujita	4. 巻 未定
2. 論文標題 Tackling an exact maximum stress minimization problem with gradient-free topology optimization incorporating a deep generative model	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of the ASME 2023 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference	6. 最初と最後の頁 10
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 -

1. 著者名 Taisei Kii, Kentaro Yaji, Kikuo Fujita1, Zhenghui Sha, Carolyn C. Seepersad	4. 巻 未定
2. 論文標題 Data-driven multifidelity topology design with a latent crossover operation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of the ASME 2023 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference	6. 最初と最後の頁 11
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 該当する

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 Kentaro Yaji, Tan Bui
2. 発表標題 Accelerating Multifidelity Topology Design Using Neural Networks
3. 学会等名 Asian Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization 2022（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kentaro Yaji, Tan Bui
2. 発表標題 Multifidelity Topology Design on the Probabilistic Principal Component Analysis
3. 学会等名 The 15th World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization（国際学会）
4. 発表年 2023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
主たる渡航先の主たる海外共同研究者	タン ブイ (Tan Bui-Thanh)	テキサス大学オースティン校・Oden Institute・Associate Professor	

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		
米国	テキサス大学オースティン校		