

令和 5 年 6 月 2 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究

研究期間：2021～2022

課題番号：21K14064

研究課題名（和文）機械学習に基づいたデータ駆動型設計の構築

研究課題名（英文）Data driven design utilizing machine learning techniques

研究代表者

米倉 一男（Yonekura, Kazuo）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・講師

研究者番号：40890025

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,600,000円

研究成果の概要（和文）：機械学習により機械部品の設計を自動化するデータ駆動型設計について、基本的な体系の構築と基礎的な検討を行なった。深層生成モデルを用いて機械部品の様々な形状を生成できることがわかり、また所望の形状を生成できるように、生成される形状の制御ができることを明らかにした。また深層強化学習を用いて効率的に設計最適化が行なえる手法を構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

機械設計は人間の設計者が多数の試行錯誤を繰り返して行っている。より性能の良い製品を設計するためには高度なスキルとノウハウを持った設計者が多くの時間を割く必要があった。これに対して本研究は、人工知能（AI）を用いて様々な設計検討を機械が自動で気に行える可能性を示した。これにより、今までより性能の良い製品が設計できる可能性が示された。また少子高齢社会ではベテランエンジニアは貴重な存在であり、彼らを単純作業から解放して、より創造性に富む業務に従事していただけるようになる可能性も秘めている。

研究成果の概要（英文）：We developed a basic system and conducted fundamental studies on data-driven design, which automates the design of machine parts through machine learning. It was found that various shapes of machine parts can be generated using deep generative models, and that the generated shapes can be controlled so that desired shapes can be generated. We also developed a method for efficient design optimization using deep reinforcement learning.

研究分野：数理工学

キーワード：データ駆動型設計 機械設計 機械学習 深層生成モデル 深層強化学習

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

機械設計は数値シミュレーションを利用して人が設計を行なうことが主であった。しかし生産人口の減少に伴って、優秀なエンジニアが減っており、設計工程をなるべく機械で代替して人手を削減したいという潜在的なニーズがあった。これに対して、深層学習をはじめとした機械学習手法が大きく進歩し、画像処理を中心に様々なタスクに対応できるようになってきていた。機械学習は人の単純作業を代替できるのではないかという期待が持たれていた一方で、適用先は画像処理や web データの処理などが中心であった。

機械学習を機械設計に適用することで、それまで人間しかできない作業であった設計作業を機械学習で代替できる可能性がある。しかし機械学習を用いたデータ駆動型の設計は、当時は研究の数が少なく、何が可能でどのような課題があるか、という点が不明確で学術的理解が不足していた。

2. 研究の目的

人間の行う設計という行為を、機械学習を用いて計算機で代替できるか、という点を明らかにすることを目的とする。

3. 研究の方法

設計プロセスを 性能予測、形状創出、形状修正の三つのプロセスに分け、それぞれを機械学習で代替する方法を検討する。

性能予測は回帰モデルを使用して性能値などの数値等を予測する。

形状生成では生成モデルを使用して、所望の形状を創り出す手法を構築する。

形状修正では、強化学習を用いて形状の最適化を行なう。

4. 研究成果

(1) 性能予測

(1-1) 解析結果の推測

FEM や CFD の解析結果を機械学習を用いて推測する手法の研究を行なった。まず、解析結果そのものを境界条件などを入力したうえで、解析結果全体を推測する手法の研究を行なった。これを予測する際に出力される結果を物理方程式に入れた場合の残差を目的関数に付け加えることで、物理的に矛盾の少ない結果を得ることができると分かった。一方で境界条件を学習することが難しく、誤差の大きな要因になっていることが分かった。

そこで次に、粗いメッシュでの解析結果を入力として細かいメッシュでの解析結果を推測する手法を構築した。これにより境界条件を満たしやすくなることが分かった。

いずれの場合も、データの数をさらに増やすことで予測精度を向上させ、汎化性能を向上させることができると期待されている。

(1-2) 地下水位予測

泥炭地の水路設計において、深層学習を用いて地下水位を予測することに成功した。さらに SHAP 値を使って予測モデルの解釈性を向上させ、また予測のばらつきを BNN を用いて評価した。とくに SHAP 値での分析から、降雨量がすぐに地下水位に影響を及ぼすことが示唆され、これは推理モデル解析の結果と整合的であることが確認でき、機械学習モデルの解釈性を確認することができた。

既存手法では地下水位を予測するためには表層水と地下水を含んだ水理モデルを数値的に解く必要があり、計算コストが大きかった。前述のように降雨がすぐに地下水位に影響する状況では、水門を制御して地下水位を調節するためには、短時間で地下水位を予測する必要がある。そのため既存手法では水門制御が困難であったが、本手法によりリアルタイムでの水門制御の可能性が開けた。

(2) 形状生成

(2-1) VAE モデル

深層生成モデルである VAE, GAN, VAEGAN を用いて形状を生成数手法を構築した。VAE を用いる場合は、潜在空間の事前分布を工夫することで得られる結果が異なることが分かった。また全く性質の異なる二組のデータを学習させた場合、事前分布を適切に選べばその二組のデータの両方の性質を持つ中間的なデータを生成させられることが分かった。これは、潜在空間を積極的に制御することで所望の形状を生成できることを示唆しており、新しい知見であった。

(2-2) GAN モデル

既存研究では GAN で生成される形状には凹凸があり、そのままでは性能計算ができないため形状の平滑化が必要であることが知られていた。本研究では WGAN-gp を用いて適切に学習を行なうことで、平滑化が不要なほど滑らかな形状を得られることを示した。また

(2 - 4) 不確実性の評価

Bayesian NN を用いて、生成モデルが生成する形状の不確実性を定量的に評価する手法を構築した。生成モデル自体は多少の誤差を含むため、必ずしも所望の者ができているとは限らない。これに対してその不確実性を示すことで、設計解の候補のうちどれを選択すべきかという指標が得られることになる。

(2 - 3) Physics-Guided GAN

既存の研究では、生成される形状の性能値と所望の性能値との誤差が大きいことが知られていた。これに対して物理モデルを考慮した学習手法 (PINN) も提案されていたが、物理方程式をプログラム内に実装する必要があった。流体計算ソフトウェアを物理モデルとして使用できなかった。しかし本研究では、物理モデルを実装せず、例えば商用ソフトウェアをそのまま使用できる Physics guided GAN を提案し、これが通常の PINN と同程度の精度をもち、形状生成においては既存手法よりも格段に精度が向上することを示した。

(3) 強化学習

(3 - 1) 解釈性の向上

SHAP 値を用いることで強化学習の解釈性を向上させる方法を構築した。SHAP 値は回帰モデルの解釈においてよく使用されるが、これを強化学習のエージェントに対して適用し、どのような状況を学習してきたかを解釈できるようにした。これにより、学習済みの強化学習モデルが、人間よりも良い解を得た場合に、どのような学習を経てそのような形状変更を行なうようになったかを定量的に示せる。つまり強化学習で長時間学習させ、その学習した内容を人間の設計者にフィードバックすることができる可能性が示唆された。

(3 - 2) 複数目的関数の検討

強化学習を用いた多目的形状最適化手法の枠組みを検討した。これまで複数目的関数を扱い場合には目的関数値の重み付き和を取ってそれを最大化 / 最小化することが一般的であった。しかしこれでは多目的最適化において原則として 1 つの設計解しか得られず、パレート解集合を得ることができない。そこで新しいパレート解を得た場合に報酬が得られるような手法を構築した。これにより、幅広いパレート解を得ることができるようになると期待される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 YONEKURA Kazuo	4. 巻 87
2. 論文標題 Quantitative analysis of latent space in airfoil shape generation using variational autoencoders	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Transactions of the JSME (in Japanese)	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) 10.1299/transjsme.21-00212	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Yonekura Kazuo, Wada Kazunari, Suzuki Katsuyuki	4. 巻 108
2. 論文標題 Generating various airfoils with required lift coefficients by combining NACA and Joukowski airfoils using conditional variational autoencoders	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Engineering Applications of Artificial Intelligence	6. 最初と最後の頁 104560 ~ 104560
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.engappai.2021.104560	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 YONEKURA Kazuo, MIYAMOTO Nozomu, SUZUKI Katsuyuki	4. 巻 -
2. 論文標題 Inverse airfoil design method for generating varieties of smooth airfoils using conditional WGAN-gp	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Structural and Multidisciplinary Optimization	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) 10.1007/s00158-022-03253-6	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 Yonekura Kazuo, Maruoka Kento, Tyou Kyoku, Suzuki Katsuyuki	4. 巻 213
2. 論文標題 Super-resolving 2D stress tensor field conserving equilibrium constraints using physics-informed U-Net	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Finite Elements in Analysis and Design	6. 最初と最後の頁 103852 ~ 103852
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.finel.2022.103852	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 Kazuo Yonekura	4. 巻 2304
2. 論文標題 Physics-guided generative adversarial network to learn physical models	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 arXiv	6. 最初と最後の頁 11488
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.48550/arXiv.2304.11488	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計15件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 TOMORI Yuki, YONEKURA Kazuo, SUZUKI Katsuyuki
2. 発表標題 Airfoil generation using conditional Wasserstein VAE with gradient penalty
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 YONEKURA Kazuo, MIYAMOTO Nozomu, SUZUKI Katsuyuki
2. 発表標題 Generating airfoil with specific lift coefficients using conditional GAN and conditional VAE
3. 学会等名 The 14th World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 米倉一男
2. 発表標題 変分オートエンコーダを用いた形状のデータマイニングと形状創出
3. 学会等名 日本機械学会 設計工学システム部門講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 SAITO Hiroki, YONEKURA Kazuo
2. 発表標題 Physics Guided Deep Learning Method to Surrogat Flow Simulation
3. 学会等名 The 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) & the 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM-VIII) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 和田一成、鈴木克幸、米倉一男
2. 発表標題 Physics Guided cWGAN-gpによる翼型生成の高精度化
3. 学会等名 OPTIS2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 米倉一男
2. 発表標題 形状設計タスクにおける深層生成モデルとPhysics Guided GAN
3. 学会等名 OPTIS2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮崎荘太, 愛知正温, 西津 卓史, 長谷川 正雄, 加藤剛, 鈴木克幸, 米倉一男
2. 発表標題 機械学習を用いたインドネシアの泥炭地における地下水位予測
3. 学会等名 2022年度 第36回人工知能学会全国大会 (JSAI2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大森晃太郎, 米倉一男, 鈴木克幸
2. 発表標題 要求仕様を満たす船型プロトタイプ生成のための深層学習モデル
3. 学会等名 第27回計算工学会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 米倉一男
2. 発表標題 構造設計における機械学習利用
3. 学会等名 船舶海洋工学会, 東部支部構造研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 米倉一男
2. 発表標題 変分オートエンコーダを用いた多種の翼生成
3. 学会等名 応用数理学会年会, 埼玉 (オンライン開催). September 7--9, 2021. 米倉一男: "変分オートエンコーダを用いた形状のデータマイニングと形状創
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 YONEKURA Kazuo, WADA Kazunari, SUZUKI Katsuyuki
2. 発表標題 Physics informed GAN for generating 2D airfoil shapes with required lift coefficients
3. 学会等名 World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 米倉一男
2. 発表標題 流体機械におけるデータ駆動型設計
3. 学会等名 日本機械学会計算力学部門第4回「解析・設計の代替モデリング研究会」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 米倉一男
2. 発表標題 データ駆動型設計を用いた機械設計
3. 学会等名 大阪大学MMDS AI・データ利活用研究会(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 米倉一男
2. 発表標題 産業機械のデータ駆動型設計
3. 学会等名 接着・接合技術コンソーシアム第2回データ駆動ワーキンググループ(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 米倉一男, 大森晃太郎, 鈴木克幸
2. 発表標題 深層生成モデルを用いた船型形状の生成
3. 学会等名 日本船舶海洋工学会 令和5年 春季講演会
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 学習方法、情報処理システム、プログラム及び学習モデル	発明者 米倉一男、和田一成	権利者 東京大学
産業財産権の種類、番号 特許、特願2022-180816	出願年 2022年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔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		
スイス	International Telecommunication Union		