

主成分分析を用いたデータ駆動型トポロジー・デザインの基礎的検討

A Study of Data-driven Topology Design Using Principal Component Analysis

山崎慎太郎¹⁾ 矢地謙太郎²⁾ 野村勝也³⁾

Shintaro Yamasaki, Kentaro Yaji and Katsuya Nomura

¹⁾博(工)早稲田大学大学院 情報生産システム研究科 教授(〒808-0135 福岡県北九州市若松区ひびきの2-7,

E-mail: s_yamasaki@waseda.jp)

²⁾博(工)大阪大学大学院 工学研究科 助教(〒565-0871 大阪府吹田市山田丘2-1, E-mail: yaji@mech.eng.osaka-u.ac.jp)

³⁾博(工)関西学院大学 工学部 専任講師(〒669-1330 兵庫県三田市学園上ヶ原1番, E-mail: katsuya.nomura@kwansei.ac.jp)

Data-driven topology design is a sensitivity-free structural design methodology proposed by the authors. It is a type of topology optimization and its basic concept is to update the material distribution in a given design domain by using a deep generative model without the sensitivity information. Data-driven topology design is promising because of the sensitivity-free nature, however, the previous implementation proposed by the authors has a limitation to the scalability. This is because that it is impossible to learn the deep generative model for the case where the design degree of freedom exceeds about 20,000. In this paper, the authors propose to incorporate the principal component analysis into data-driven topology design to resolve this problem. The authors aim to reduce the design degree of freedom for representing the material distribution by using the principal component analysis. To confirm the usefulness of incorporating the principal component analysis, the authors also provide some numerical examples.

Key Words : Structural Design, Topology Optimization, Data-driven approach, Principal Component Analysis

1. 緒言

構造最適化は構造物の最適な形状や形態を導出するための設計方法論であり、設計変数の与え方により寸法最適化、形状最適化、トポロジー最適化[1,2]に大別される。部材の厚さや長さなどのパラメータを設計変数とする寸法最適化や、構造物の外形形状を明示的に表現する設計変数を導入する形状最適化に対して、トポロジー最適化では、構造設計問題をある与えられた設計領域内での材料分布問題に置き換えることで、構造物の形状のみならず形態までも考慮した最適化を実現している。

トポロジー最適化では、高い設計自由度を与えることで構造物の複雑な形状や形態を表現することが可能となり、その結果として設計者の勘や経験では発想が困難な斬新かつ高性能な構造案を得ることが期待できる。そのため、トポロジー最適化は近年盛んに研究されているが、その一方で高い設計自由度のため、最適解探索は基本的に勾配情報を頼らざるを得ない。すなわち、トポロジー最適化には、勾配情報に基づく最適解探索が困難な程に非線形性が高い構造設計問題には適用できないという、根本的な課題が存在する。

この課題を解決するため、Yamasakiら[3]は感度情報を必要としない新たなトポロジー最適化の枠組みとして、データ駆動型トポロジー・デザインを提案している。データ駆動型トポロジー・デザインでは、ある与えられた設計領域内での材料分布によって構造物の形状と形態を表現し、深層生成モデル[4,5]を用いて設計解

の更新を行う。深層生成モデルによる設計解の更新プロセスは感度情報を必要としないため、Yajiらによる乱流域を対象とした放熱構造の設計問題への展開[6]、Imamuraらによるタイヤトレッドパターン設計問題への展開[7]など、データ駆動型トポロジー・デザインは非線形性の強い様々な構造設計問題へ適用されつつある。

その一方で、これらの研究を通して、深層生成モデルを成功裏に学習するためには、材料分布を表現するための設計自由度を高々20,000程度までに抑える必要があることが分かってきた。この制約は特に、3次元構造設計問題への展開を考えた場合には大きな制約となる。

そこで本研究では、この問題に対するアプローチの1つとして、主成分分析を用いた次元圧縮をデータ駆動型トポロジー・デザインに組み込むことを提案する。すなわち、材料分布データを直接学習させるのではなく、材料分布データに対して主成分分析を実施し得られる主成分スコアのデータを深層生成モデルに学習させる。これにより深層生成モデルは、訓練データの特徴を継承しつつ異なる主成分スコアデータを生成するため、これを元に主成分係数から材料分布を復元することで新たな材料分布データを得る。主成分分析により、材料分布の設計自由度は元々の自由度から高々訓練データ数まで削減されるため、3次元構造設計問題に対しても本アプローチは有用であると期待できる。

以下、第2章では提案法の概要を説明し、第3章においてその有用性を数値例を用いて検証する。最後に、第4章にて結言を述べる。

2. 提案法の概要

深層生成モデルとは教師なし機械学習の一種であり、訓練データの特徴を継承しつつも訓練データとは異なる新たなデータを生成する。データ駆動型トポロジーデザインではこの深層生成モデルの性質を利用し、(1)多数の材料分布データを何らかの手段で用意し、その中から優れた材料分布データをエリートデータとして複数選択、(2)エリートデータを訓練データとして深層生成モデルを学習、(3)学習済み深層生成モデルを用いてエリートデータの特徴を継承しつつも異なる材料分布データを新たに複数生成、(4)生成されたデータと(1)におけるエリートデータを統合し(1)に戻る、という手順を繰り返す。エリートデータの特徴を継承しつつも異なる新たに生成された材料分布データのうち、幾つかは元々のエリートデータよりも優れていると考えられる。そのため、上述の手順を繰り返すことでエリートデータは徐々に性能が向上していき、最終的には初期の材料分布データよりも明確に高性能な材料分布データが得られると期待できる。

以上がデータ駆動型トポロジーデザインの概要となる。なお、非劣性という明確な基準で多様なエリートデータを選択することができるため、データ駆動型トポロジーデザインは特に多目的最適化問題に好適であり、本研究においても多目的最適化問題を対象として扱う。

さらに本研究で提案する方法では、深層生成モデルを学習する際に、材料分布データを直接学習するのではなく、材料分布データに対して主成分分析を実施し得られる主成分スコアのデータを学習する。ここで言う材料分布データとは、設計領域の各節点における正規化された密度で構成され、データ数を n 、節点数を p とおくと、 n 行 p 列の行列 \mathbf{X} として表されるものである。データ駆動型トポロジーデザインにおいては、データ数 n は数百のオーダーであるのに対し、節点数 p は数千あるいはそれ以上のオーダーとなる。

$n < p$ の場合、 \mathbf{X} に対して各列の平均を差し引いてセンタリングを行った行列 $\tilde{\mathbf{X}}$ に対して主成分分析を実行すると、 p 行 n 列の主成分係数行列 \mathbf{C} と n 行 n 列の主成分スコア行列 \mathbf{S} が得られ、以下の関係が成り立つ。

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{S}\mathbf{C}^\top \quad (1)$$

上式は主成分係数行列 \mathbf{C} を介して、本来自由度 p で表される材料分布が自由度 n の主成分スコアで表されることを示しており、次元圧縮がなされている。

提案法では、上述の主成分スコアデータ \mathbf{S} に対して深層生成モデルの学習を行い、 \mathbf{S} の特徴を継承しつつも異なるデータ $\tilde{\mathbf{S}}$ を生成する。そして、次式に基づいて復元を行い、元々の材料分布データの特徴を継承しつつも異なる材料分布データ $\tilde{\mathbf{X}}$ を得る。

$$\tilde{\mathbf{X}} = \tilde{\mathbf{S}}\mathbf{C}^\top \quad (2)$$

以上に述べた手続きにより、材料分布本来の自由度 p の増大に伴う問題の解決を目指す。

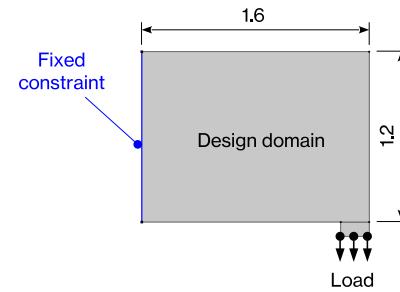


図-1 軽量高剛性構造設計問題の設定 (2次元)

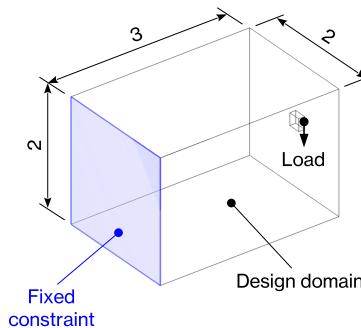


図-2 軽量高剛性構造設計問題の設定 (3次元)



図-3 2次元問題の初期材料分布

3. 数値例

本章では、図1(2次元問題)と図2(3次元問題)に示すように設計領域と境界条件が与えられている軽量高剛性構造設計問題を例題として、提案法の有用性を検証する。2次元問題における目的関数は平均コンプライアンスと材料使用量(面積)であり、3次元問題における目的関数は平均コンプライアンスと材料使用量(体積)である。

本章の数値例全てに共通する条件として、深層生成モデルの学習に用いるエリートデータ数の上限を 400、深層生成モデルの学習時のエポック数を 400、ミニバッチサイズを 20、学習率を 1.0×10^{-4} とする。また、潜在変数の数は 8 とし、データ生成にあたっての潜在変数の決定については、各潜在変数について -4 から 4 までの範囲内でランダムサンプリングを行う。また、最初に与えたデータに対して合計 50 回の反復を行う。

まず、2次元問題において設計領域の節点数 p を 12,513 とした場合について検討する。この程度の規模であれば材料分布データを直接深層生成モデルで学習することも可能であるため、材料分布データを直接学習した場合と提案法とで、最終的に得られる材料分布を比較する。

本数値例では簡単なパラメトリックモデルを用いて

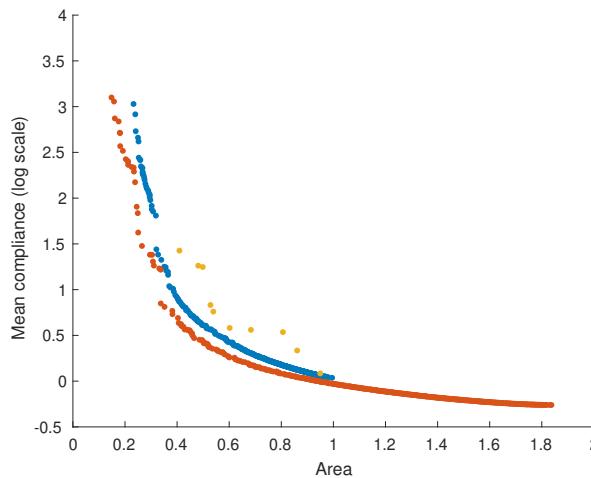


図-4 2次元問題における提案法と材料分布データを直接学習した場合との比較

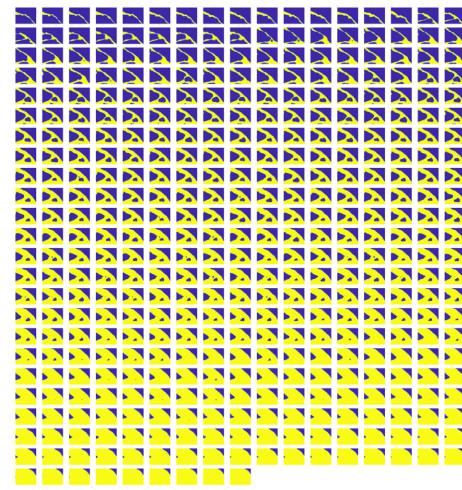


図-5 2次元問題において、提案法により最終的に得られた材料分布

図3に示す材料分布を用意した。これを初期データとしてデータ駆動型トポロジーデザインを実行した場合の結果を図4に示す。この図において、黄色の点は初期の材料分布データ、橙色の点は提案法により最終的に得られた材料分布データ、青色の点は材料分布データを直接学習した場合に最終的に得られた材料分布データ、のそれぞれの性能を示している。また、それぞれの場合において最終的に得られた材料分布を図5と図6に示す。

これらの図を見比べると、提案法と材料分布データを直接学習した場合とで、最終的に得られる材料分布の形態に違いがあり、それが原因となって性能に多少の差異が見られる。さらに、材料分布データを直接学習した場合には、材料使用量が1以上の材料分布が得られず、解探索の範囲が限定的である。一方で提案法を用いた場合には、材料使用量について広範囲に解探索が行われており、解探索性能に明らかな違いがあることが分かる。

次に、3次元問題において設計領域の節点数 p を13,671とした場合について検討する。先の数値例と同様、この程度の規模であれば材料分布データを直接深層生成モデルで学習することも可能であるため、材料分布データを直接学習した場合と提案法とで、最終的に得られる材料分布を比較する。

本数値例でも簡単なパラメトリックモデルを用いて図7に示す材料分布を用意した。これを初期データとしてデータ駆動型トポロジーデザインを実行した場合の結果を図8に示す。この図において、黄色の点は初期の材料分布データ、橙色の点は提案法により最終的に得られた材料分布データ、青色の点は材料分布データを直接学習した場合に最終的に得られた材料分布データ、のそれぞれの性能を示している。図8はやや見づらいため、材料使用量の範囲を0から3、対数スケールの平均コンプライアンスの範囲を-1.5から1.5に限定して拡大したものを図9に示す。また、それぞれの場合において最終的に得られた材料分布を図10と図11

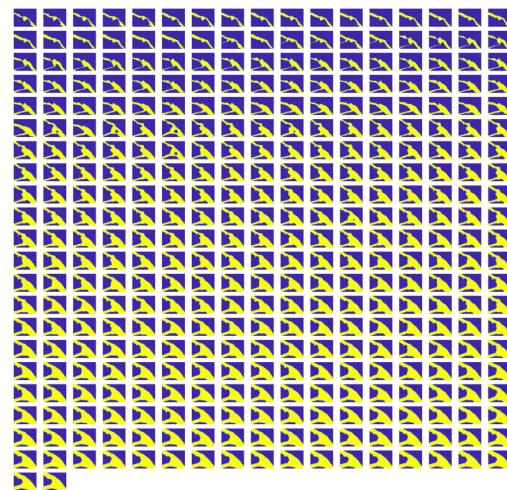


図-6 2次元問題において、材料分布データを直接学習した場合に最終的に得られた材料分布



図-7 3次元問題の初期材料分布

に示す。

これらの図を見比べると、最終的に得られる材料分布の性能自体は、提案法と材料分布データを直接学習した場合とで顕著な違いはないが、後者については材料使用量(体積)が2.4以上の材料分布は得られなかった。すなわち、先の数値例と同様、両者の解探索性能には大きな違いが見られる。

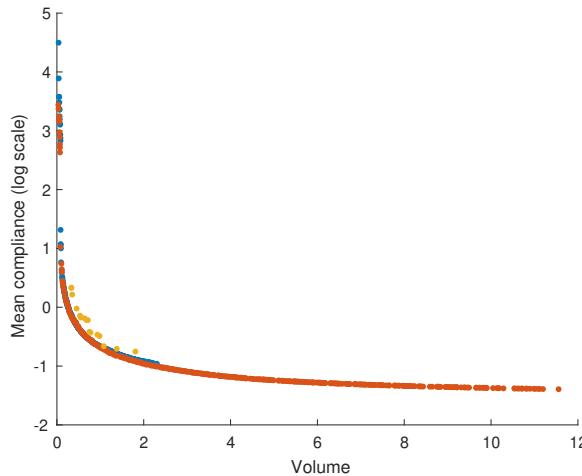


図-8 3次元問題における提案法と材料分布データを直接学習した場合との比較



図-10 3次元問題において、提案法により最終的に得られた材料分布

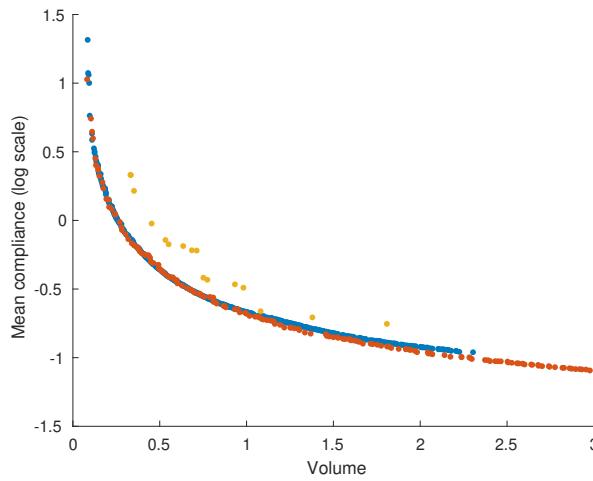


図-9 3次元問題における提案法と材料分布データを直接学習した場合との比較(拡大図)

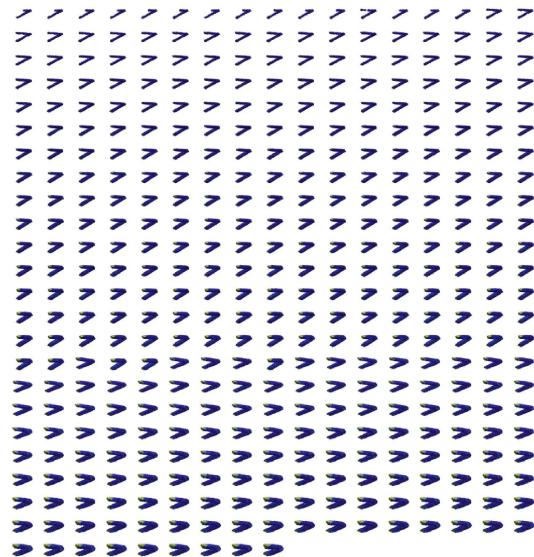


図-11 3次元問題において、材料分布データを直接学習した場合に最終的に得られた材料分布

次に、2次元問題において設計領域の節点数 p を 111,265 とした場合について検討する。この場合も $p = 12,513$ とした場合と同様、パラメトリックモデルで初期の材料分布データを用意する。従来の著者らの実装では、この規模の材料分布データを直接深層生成モデルで学習することは不可能であったが、提案法では主成分分析を用いた次元圧縮を行うため、問題なくデータ駆動型トポロジーデザインを実行できる。

2次元問題において $p = 12,513$ とした場合と $p = 111,265$ とした場合について、最終的に得られる材料分布の性能を比較したグラフを図 12 に示す。この図において、橙色の点は $p = 12,513$ とした場合に最終的に得られる材料分布の性能であり、図 4 における橙色の点と同一である。黄緑色の点は $p = 111,265$ とした場合に最終的に得られる材料分布の性能を示す。また図 13 に、 $p = 111,265$ とした場合に最終的に得られる材料分

布を示す。

これらの図から、10万以上の自由度で材料分布を表現する場合においても、提案法によって十分に高性能な材料分布が得られることが分かる。

最後に、3次元問題において設計領域の節点数 p を 102,541 とした場合について検討する。この場合も $p = 13,671$ とした場合と同様、パラメトリックモデルで初期の材料分布データを用意する。3次元問題において $p = 13,671$ とした場合と $p = 102,541$ とした場合に

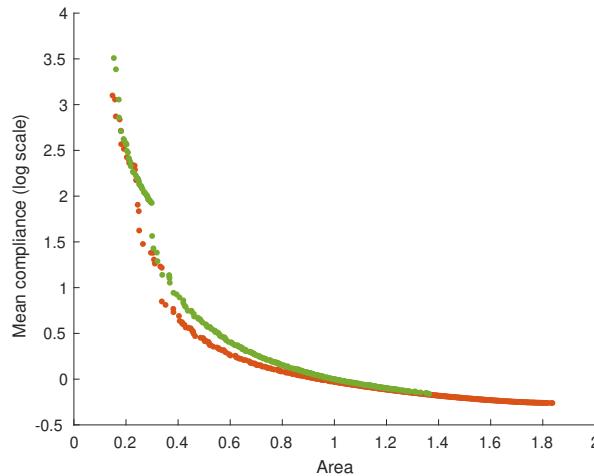


図-12 2次元問題において $p = 12,513$ とした場合と $p = 111,265$ とした場合の、最終的に得られる材料分布の性能比較

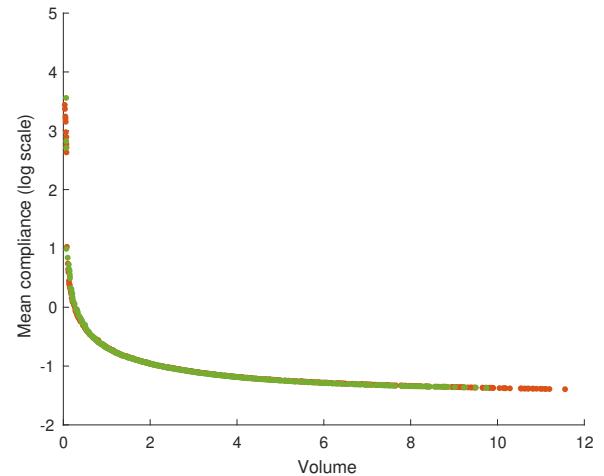


図-14 3次元問題において $p = 13,671$ とした場合と $p = 102,541$ とした場合の、最終的に得られる材料分布の性能比較

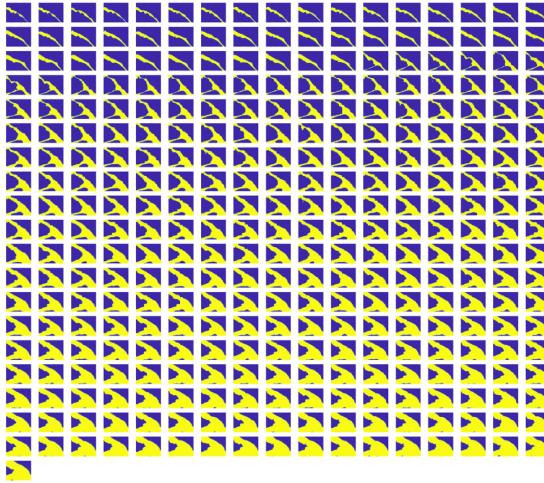


図-13 2次元問題において、提案法により最終的に得られた材料分布 ($p = 111,265$)

について、最終的に得られる材料分布の性能を比較したグラフを図 14 に示す。この図において、橙色の点は $p = 13,671$ とした場合に最終的に得られる材料分布の性能であり、図 8 における橙色の点と同一である。黄緑色の点は $p = 102,541$ とした場合に最終的に得られる材料分布の性能を示す。また図 15 に、 $p = 102,541$ とした場合に最終的に得られる材料分布を示す。

これらの図から、2次元問題と同様、10万以上の自由度で材料分布を表現する場合においても、提案法によって十分に高性能な材料分布が得られることが分かる。

以上の結果から、提案法は従来の実装よりも解探索性能の点で優れ、なおかつ材料分布を表現する自由度が10万以上の場合でも妥当かつ高性能な材料分布が得られることが分かった。



図-15 3次元問題において、提案法により最終的に得られた材料分布 ($p = 102,541$)

4. 結言

本論文において、著者らは、主成分分析を用いた新しいデータ駆動型トポロジーデザインの方法を提案した。データ駆動型トポロジーデザインは、設計領域内の材料分布という形式で構造物の形態や形状を柔軟に表現しつつ、勾配情報を用いずに高性能な構造案の導出が可能であるという点で画期的であったが、従来の実装では材料分布を表現する自由度に上限があり、特に3次元の構造設計問題への展開が困難であった。本論文では主成分分析を用いた次元圧縮により、この問題の解決を試みている。結果として、2次元および3次

元の軽量高剛性構造設計問題において、10万以上の節点数で材料分布を表現する場合においても、妥当な高性能構造が得られることを確認できた。一方で、今回の数値例は構造設計問題としては解きやすい部類に属するものであり、得られた高性能構造も比較的単純な形態をしている。そのため、今回提案した主成分分析を用いたデータ駆動型トポロジーデザインが真に有用であるかどうかを確認するためには、より非線形性が強く、複雑な形態を備えた構造が得られる様々な構造設計問題への展開が必要であろう。この点を踏まえて、今後の研究を進めて行きたい。

参考文献

- [1] Bendsøe, M. P. and Kikuchi, N., Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.71, 2, 1988, pp.197–224.
- [2] Bendsøe, M. P. and Sigmund, O., Topology optimization: Theory, methods and applications, 2nd edn., Springer, Berlin, 2003.
- [3] Yamasaki, S., Yaji, K., and Fujita, K., Data-driven topology design using a deep generative model, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol.64, 3, 2021, pp.1401–1420.
- [4] Kingma, D. P. and Welling, M., Auto-encoding variational bayes, arXiv: 1312.6114, 2013.
- [5] Goodfellow, I., Pouget-Abadie, J., Mirza, M., Xu, B., Warde-Farley, D., Ozair, S., Courville, A., and Bengio, Y., Generative adversarial nets, in *Advances in Neural Information Processing Systems* 27, eds. Ghahramani, Z., Welling, M., Cortes, C., Lawrence, N. D., and Weinberger, K. Q., Curran Associates, Inc., 2014, pp.2672–2680.
- [6] Yaji, K., Yamasaki, S., and Fujita, K., Data-driven multifidelity topology design using a deep generative model: Application to forced convection heat transfer problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.388, 2022, pp.114284.
- [7] Imamura, K., Nishimura, R., Yamasaki, S., Yaji, K., and Fujita, K., An innovative design method of tire tread patterns by deep generative model and elitist multi-objective search, in *14th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization*, Boulder (Online), June 2021.