

解の類似性に着目した選択アルゴリズムによる データ駆動型トポロジーデザイン

Data-driven topology design
with a selection algorithm focused on solution similarity

関佳吾¹⁾ 矢地謙太郎²⁾ 藤田喜久雄³⁾
Keigo Seki, Kentaro Yaji and Kikuo Fujita

¹⁾大阪大学 大学院工学研究科 博士前期課程 学生 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail:
seki@syd.mech.eng.osaka-u.ac.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⁾工博 大阪大学 大学院工学研究科 教授 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail: fujita@mech.eng.osaka-u.ac.jp)

Data-driven topology design does not require gradient information and is effective for highly nonlinear multi-objective problems. However, shape diversity is often lost in the solution search process, resulting in only similar final solutions. In this study, we propose a method to perform solution search while suppressing the degradation of solution diversity by introducing a measure of solution shape similarity. The proposed method increases the shape diversity while maintaining the performance of the optimal shape.

Key Words : Data-driven topology design, Shape diversity, Shape similarity

1. 緒言

トポロジー最適化は構造最適化の中で最も自由度の高い最適化手法であり、その応用に対する産業界での期待は高まりつつある。しかしながら、勾配情報を用いた最適化手法では非線形性の強い設計問題を直接的に扱うことが困難であり、適用可能な設計問題は限定されている。そこで、勾配情報を用いないトポロジー最適化手法として、Yamasaki ら [1] によって提案されたデータ駆動型トポロジーデザインがある。

データ駆動型トポロジーデザインは、勾配情報を用いない解探索手法である進化的アルゴリズム (Evolutionary Algorithm, EA) に着想を得た手法である。何らかの方法により準備した初期解をもとに深層生成モデルを用いて似ているが存在しない解を生成し、性能を評価する。これを繰り返すことにより解の更新を行う。

非線形性の強い設計問題では目的関数は多峰性となる。多峰性のある設計問題において大域的な解の探索を行うには、親の解の形状多様性が保たれている必要がある。しかしながら、最適形状の更新過程において解の形状多様性が失われ、最終的に似たような形状ばかりしか得られない場合がある。これは、解の選択過程において選択の基準として目的関数のみに着目していることが原因であると考えられる。

多目的最適化問題においては、設計変数と目的関数値が一対一に対応せず、目的関数値が同じであっても設計変数が異なる、マルチモーダル多目的最適化問題 [2] と呼ばれる問題が存在する。多目的トポロジー最適化においても、目的関数値が同じだが形状が異なる解が存在すると考えられる。目的関数のみに着目した解の選択を行った場合、同等に優れた二つの解のうち一方が見逃されてしまう可能性がある。材料分布を更新

していくトポロジー最適化において、目的関数空間のみに着目した EA の選択方法をそのまま適用することは適切でない。最適化過程において形状多様性が失われないよう、形状類似性を考慮しながら解の選択を行うべきである。

本研究では、材料分布の形状類似性を定量的に評価するための指標を導入し、解の選択根拠として用いることにより形状多様性を保ったまま解の更新が行われる最適化の枠組みを提案する。

2. データ駆動型トポロジーデザインによる多様な設計案の獲得

(1) データ駆動型トポロジーデザイン

本研究では、解を更新するために深層生成モデルを用いた解の生成を行う。ネットワークの構造が比較的単純であり、本研究で対象とするデータ駆動型の方法に適したロバスト性を持つ深層生成モデルとして、Variational Autoencoder (VAE) [3] がある。本研究では、深層生成モデルとして VAE を用いることとする。

a) Variational Autoencoder (VAE)

VAE は、入力データと出力データが一致するように学習を行う教師なし学習の一つであり、生成モデルであるため学習に用いた入力データには存在しないがそれらの特徴を継承した新たなデータを生成することができる。そのため、複数の材料分布を学習させることで複数の形状を継承した新たな材料分布を生成でき、生成された材料分布は学習させた材料分布よりも目的関数値が優れていることが期待される。

b) 最適化アルゴリズム

VAE を用いることで、材料分布をもとに形状の特徴を継承した新たな材料分布を生成することができる。こ

れを、親のデータをもとに子のデータを生成する交叉に対応付けることで、勾配情報を用いないEAの考え方をトポロジー最適化に応用したのがデータ駆動型トポロジーデザインである。EAの評価、選択、交叉、突然変異のステップを参考にし、材料分布を対象としてこれを模したステップを踏むことにより材料分布を更新する。具体的には、初期解として多様かつ目的関数値の優れた複数の材料分布を用意し、これらをVAEに学習させる。VAEは学習データの形状的特徴を抽出し、生成データにその特徴を継承させることができる。生成データには優れた目的関数値を実現する因子となる複数の形状的特徴が含まれ、学習データよりも優れたものが存在することが期待できる。生成データのうち、優れたデータは次世代の解に選択される。そして、データの多様性を維持するため、突然変異を導入する[4]。このプロセスを繰り返すことで、勾配情報を用いることなく多様で目的関数値の優れた材料分布を獲得することを図る。

データ駆動型トポロジーデザインの手順を示す。図-1にフローチャートを示す。

1. 初期データとして用いる複数の材料分布を用意する。
2. 初期データの性能を複数の目的関数値を計算することにより評価する。評価を行ったデータを評価データと呼ぶ。
3. EAの一つである NSGA-II [5] の考え方を用い、評価データから設定した個数だけデータを選択する。選択されたデータをエリート解と呼ぶ。
4. 設定された回数にイタレーションが到達した場合、エリートデータを最適化結果として計算を終了する。未到達の場合は次に進む。
5. DDM (Design domain mapping) [6] を用いて、エリートデータの材料分布を画像ベースの学習に適した正方領域に適合するように変換する。
6. 変換された材料分布を入力して VAE を学習し、VAE を用いて材料分布を新たに獲得する。獲得したデータを生成データと呼ぶ。
7. 生成データを DDM を用いて設計領域に適合するように逆変換する。

(2) 解の選択と生成における課題

既存のデータ駆動型トポロジーデザインは、解の選択方法と生成方法の両者に形状多様性に関わる問題があり、これが多様かつ優れた解の探索を妨げていると考える。まず、解の選択方法の抱える問題に関して述べる。

データ駆動型トポロジーデザインにおいては、多目的EAの一つである NSGA-II の考え方を解の選択に取り入れている。エリート解は目的関数空間に着目した非優越ソートと、目的関数空間での混雑距離の算出によって選択される。非優越ソートでは目的関数値の優劣関係がランキングの基準となり、混雑距離による選択では図-2に示すように同ランクの隣接する二解が構成する四角形の二辺の長さの和を算出し、和が大きい解ほど目的関数空間上で特異であり残すべき解と判断し、優先的に選択する。したがって、解の選択において

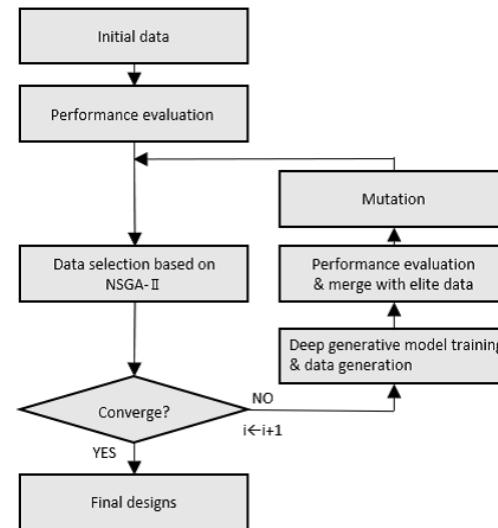


図-1 フローチャート

は目的関数値のみに着目し、目的関数空間上でエリート解が広範囲に分布することを目的として選択の優先順位を決定しているとわかる。これは、目的関数空間上で広範囲にエリート解を選択すれば形状の多様性が確保されるという、「目的関数空間上での多様性=設計変数空間上での多様性」が成り立つことを前提としたエリート解の選択を行っていることを意味している。

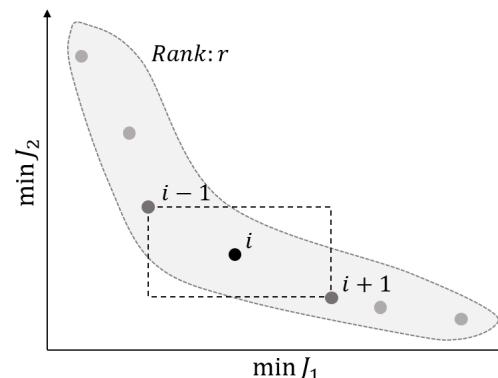


図-2 混雑距離の考え方

しかしながら、トポロジー最適化は目的関数値が同じでも形状が異なる解が存在するマルチモーダル多目的最適化問題の一種であり、目的関数空間上での多様性のみを考慮した選択アルゴリズムを適用することは不適切である。最適化過程において形状多様性を確保するため、形状の類似性を評価し、解の選択に直接反映させる必要がある。

次に、解の生成方法の抱える問題に関して述べる。VAEはエンコーダによって次元が削減されたデータをデコーダで再構成し、元データとの誤差が小さくなるように学習を行う。また、最適化過程で導入される突然変異は、学習したエリート解が有さない特徴を持った解（ユニークな解）を加えることで局所解に陥ることを防ぐ役割を持つ。しかしながら、突然変異によって

ユニークな解が生成され、これが目的関数値の優れた解としてエリート解に選ばれた場合においても、そのデータの数が少ないためにVAEに入力した際に再構成誤差の悪化にほとんど寄与しない可能性がある。この場合、たとえ突然変異で優れた形状的特徴のある解が生成されてもVAEによりその特徴を学習できず、優れた特徴を持つ新たな解が生成されない。VAEにユニークなデータを学習させる際にはその特徴を正常に学習できるように手法を改善する必要がある。

(3) 本研究のアプローチ

既存のデータ駆動型トポロジーデザインは、目的関数空間のみを判断の基準としてエリート解を選択しており、目的関数値がほぼ同じだが構造が異なる解を見落としてしまう可能性や、突然変異によって導入されたユニークな解をVAEで適切に学習できない可能性がある。これらが解探索における解の多様性の確保を妨げ、最適化結果の多様性が失われる一因であると考えられる。

本研究では、形状同士の類似性を定量的に評価するための指標を考案し、多様性の評価指標をエリート解の選択時および形状の生成時へ導入する枠組みを示す。各種枠組みを適用することにより最適化結果の形状多様性がどのように変化するかについて検証し、考案を行うことを目的とする。

3. 形状類似性の評価

(1) 評価指標に求められる性質

材料分布はベクトルで表現されるため、二つのベクトルの距離を測ることにより形状の類似性を評価する方法をとる。

データ駆動型トポロジーデザインにおいて求められる形状類似性の評価指標の性質としては次の三つが挙げられる。

1. 同じ材料分布同士の類似度は0である（同一性）。
2. 二つの材料分布A, Bについて、「AとBの類似度」と「BとAの類似度」は一致する（対称性）。
3. 最適化1ステップに要する時間に対する類似度計算の時間が小さい（計算コスト小）。

データ駆動型トポロジーデザインは最適化のステップごとに画像を生成するため、都度類似性を評価する必要がある。そのため、類似度計算のコストは最適化全体の計算時間に大きく影響し、類似性評価指標の選択基準として重要な観点である。

(2) L^2 距離による類似性評価

前節で述べた三つの性質を満たす距離の指標として、本研究では L^2 距離を用いる。 L^2 距離を用いた画像の類似性評価は平均二乗誤差としてVAEの学習においても用いられている[4]。

ベクトル表現されたn次元の画像 x, y に対し、 x と y の類似度を式(1)で定義する。

$$\text{Similarity}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2} \quad (1)$$

ただし、 x_i, y_i はそれぞれ \mathbf{x}, \mathbf{y} の*i*番目の要素である。

\mathbf{x}, \mathbf{y} の*i*番目の要素を比較し、どちらか一方にのみ材料が存在した場合に $x_i - y_i$ は大きな値をとる。これをすべての要素に対して足し合わせるため、二つの材料分布を重ね合わせ、重なり合う部分が少なかった場合に式(1)は大きな値をとる。したがって、式(1)の値が大きくなる二つの材料分布は類似度が小さいと判断できる。

式(1)を用いることにより、材料分布の集合

$X = \{\mathbf{x}_i \mid i = 1, 2, \dots, N\}$ において、他の形状と比較した、対象とする形状 \mathbf{x}_i のユニーク度を式(2)で定義する。

$$\text{Uniqueness}(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^N \text{Similarity}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \quad (2)$$

本研究の目的は、最適化により得られる材料分布の集合に対して多様性を確保することである。そのため、生成された材料分布の集合に対しても多様性を論じる必要がある。

材料分布の集合 $X = \{\mathbf{x}_i \mid i = 1, 2, \dots, N\}$ に対して、 X の形状多様性を式(3)で定義する。

$$\text{Diversity}(X) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \text{Uniqueness}(\mathbf{x}_i) \quad (3)$$

式(3)において2で除しているのは、 $\text{Similarity}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ と $\text{Similarity}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i)$ の重複分を除くためである。

式(3)より、集合 X に多様な形状が含まれているほど形状多様性の値は大きくなる。

4. 形状類似性評価を取り入れた選択アルゴリズムの枠組み

(1) エリート解の選択方法への導入 (L^2 距離)

NSGA-IIに基づくエリート解の選択手法は目的関数空間における広範囲からの探索を実現することを目的としており、設計変数空間は考慮していない。そのため形状多様性が失われる可能性がある。しかしながら、目的関数空間上で優劣関係に基づいた非優越ソートによる解の選択は、目的関数値が優れた解を探索するという最適化の根本的考え方から不可欠な方法である。そこで、目的関数空間上の優劣を選択基準とする基本的な枠組みは変化させずに、混雑距離による解の選択から L^2 距離を用いた設計変数空間における多様性の向上を念頭に置いた解の選択に変更することとした。

検討した手法の手順を示す。

1. 非優越ソートによる解のランキングを行い、設定した個数に達するまでエリート解を選択する。
2. エリート解の個数が設定した個数に達した場合、最下位ランクのすべての解に対して式(2)を用いてユニーク度を算出する。
3. ユニーク度が大きなものから順に解を選択する。

(2) VAEに学習させる構造への導入 (複製)

最適化過程においてユニークな解が出現した場合においても、その数が少ない場合はVAEによる特徴抽出がうまく行えず、ユニークな解の特徴が生成データに

継承されない可能性がある。正常に特徴抽出を行う平易な方法として、ユニークな解を複製し、それらを学習させる方法が考えられる。ユニークな解を複製することで再構成誤差の増大に与える影響を大きくし、学習に反映させることができる。

検討した手法の手順を示す。本手法は、2章に示した最適化アルゴリズムの4と5の間に挿入される。

1. エリート解を構成するすべての解に対して式(2)によりユニーク度を算出する。
2. ユニーク度の降順にエリート解を並び替える。
3. ユニーク度が最大である解を最もユニークな解とし、ユニーク度が最小の解から順に設定した個数だけ最もユニークな解に置き換える。

(3) 検討した枠組み

4章(1),(2)節では、多様性評価指標の2つの導入箇所とその適用方法を示した。指標導入の有無に関して3つの枠組み案を構築することができる。

- 混雑距離+複製あり (Proposed 1)
- L^2 距離+複製なし (Proposed 2)
- L^2 距離+複製あり (Proposed 3)

5. 数値例

(1) 問題設定

3章で示した形状類似性評価指標を導入し、実際にデータ駆動型トポロジーデザインを行うための題材として、L字梁の設計問題を扱う。最大応力と体積を目的関数とする二目的最適化問題であり、設計領域は図-3のようになる。設計問題は式(4)で定義される。

$$\begin{aligned} \text{minimize}_{\gamma} \quad & J_1 = \max(\sigma_M) \\ & J_2 = \int_D \gamma d\Gamma \\ \text{subject to} \quad & \int_L f \cdot u d\Lambda - C_{\max} \leq 0 \\ & 0 \leq \gamma \leq 1 \end{aligned} \quad (4)$$

σ_M はミーゼス応力、 D は設計領域、 γ は材料の密度、 L は荷重の負荷領域、 f は負荷領域の各区間に負荷される荷重、 u は負荷領域の各区間の変位、 C_{\max} は平均コンプライアンスの上限値である。平均コンプライアンスを制約条件に設けることで、設計領域内で材料が不連続である、実現が不可能な設計案を棄却することができる。

本問題を選定した理由としては、最適化の過程でエリート解が似たような形状ばかりに限定され、局所解に陥っている可能性が濃厚である事例が確認されていること、データ駆動型トポロジー最適化以外の手法による最適化も行うことができ、将来的に他手法により生成された最適形状とも比較することにより提案手法の探索性能を考察することが可能であることが挙げられる。

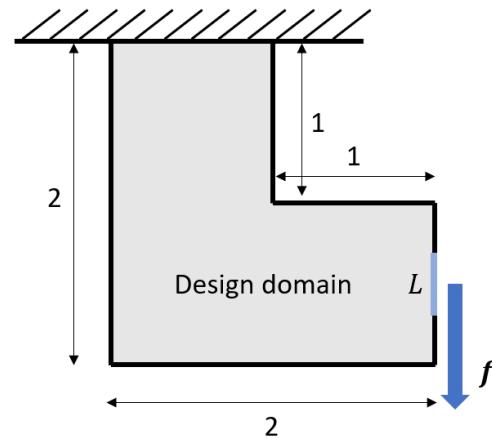


図-3 L字梁の計算領域

(2) 初期解

初期解には、図-4に示す体積を制約条件とした平均コンプライアンス最小化問題に対して、体積の値を変化させることによって得た37種類の最適形状を用いた。

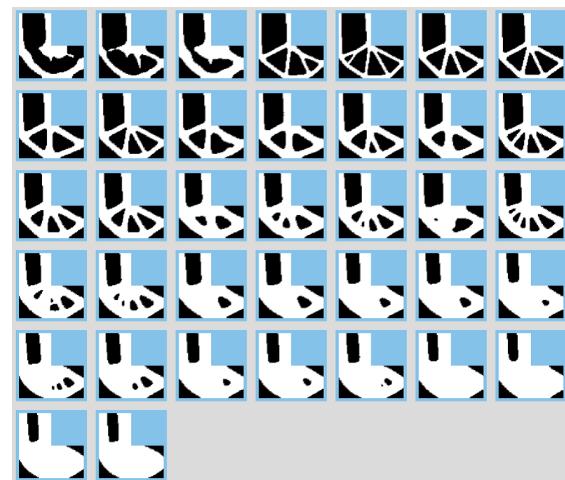


図-4 初期解とした形状

(3) 最適化結果

VAEによる新たな材料分布の生成は、潜在空間から乱数に基づくサンプリングを行っている。そのため、最適化アルゴリズム、初期解、イタレーション数がすべて同じであっても得られる材料分布は異なる。したがって、各手法それぞれ同じ初期解をもとに300イタレーションの最適化を5回ずつ実施し、それらの比較を行う。

VAEに学習させるデータはDDMにより正方領域に変換された材料分布である。そのため、4章(1),(2)節で示した評価指標の導入方法を用いる際、扱う材料分布は正方領域に変換されたデータとする。

解の選択にNSGA-IIに基づく方法を用い、 L^2 距離によるユニークな解の複製は行わない既存手法(Original)、および4章(3)節で示したProposed 1,2,3による最適化

結果を示す。

選択するエリート解の個数は 256 個とし、解の複製が行われる場合、複製される解の個数は 16 個とした。

また、VAE に関する諸条件として、バッチサイズを 20、学習率を 0.001、エポック数を 400 とし、生成される解の個数は 256 個とした。潜在変数は 4 次元であり、潜在変数上でのサンプリング範囲は [-4,4] の一様分布の乱数で構成される。

a) パレートフロントの比較

各手法 5 回ずつ実施した最適化のうち 300 イタレーション時点で最も Hypervolume [7] が大きい値を示したもの代表値として、初期解とともにパレートフロントを比較したものを図-5 に示す。ここで、Hypervolume とは目的関数空間でパレートフロントと参照点で囲まれた領域の面積に対応する値であり、値が大きいほど目的関数値が改善されていると判断できる。

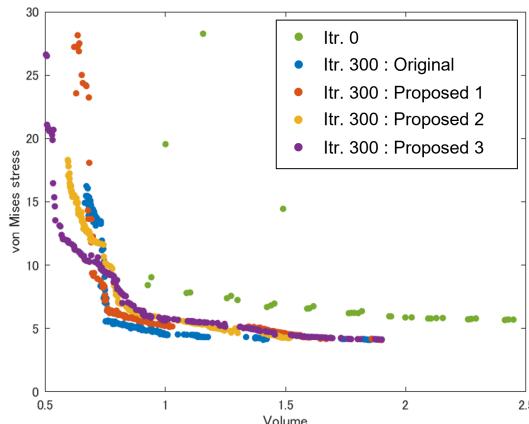


図-5 パレートフロントの比較

b) 形状の比較

各手法 5 回の最適化結果のクラスタ数とその平均値を表-1 に示す。そのうち、クラスタ数が最大となった Proposed1-1st について、得られた画像を図-6 に示す。ただし、図-6 には目視による形状に基づくクラスタリングを施した。同じ色で囲まれた画像は同じクラスターに属すると判断したことを表す。

表-1 各試行におけるクラスタ数

Method	1st	2nd	3rd	4th	5th	Ave.
Original	5	6	6	9	5	6.2
Proposed 1	14	13	9	7	7	10
Proposed 2	4	8	6	11	8	7.4
Proposed 3	12	6	13	13	9	11

c) 形状的多様性の比較

式(3)を用いて、各手法 5 回の最適化結果の形状多様性を導出した。各手法における形状多様性の平均値を図-7 に示す。



図-6 最適化の結果 (Proposed 1, 1st)

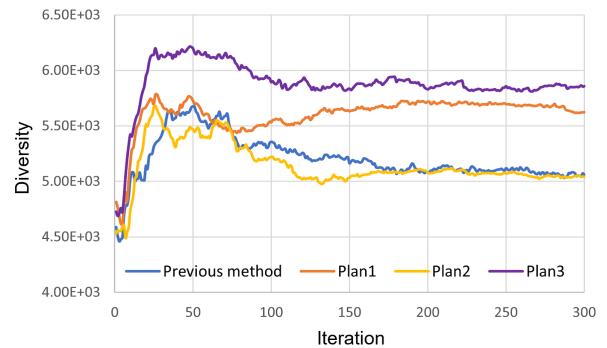


図-7 形状的多様性の推移

d) Hypervolume の比較

各手法 5 回の最適化結果の Hypervolume の遷移を平均したものを図-8 に示す。

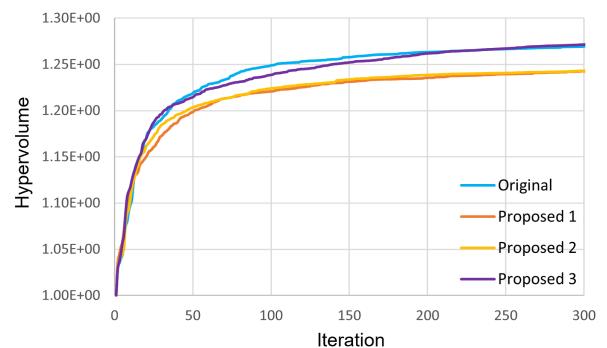


図-8 Hypervolume の推移

(4) 考察

図-5より、初期解と比較すると、すべての手法でパレートフロントが進展している。VAEによる解の生成によって初期解の特徴を抽出し、より優れた解を生成できていることがわかる。

また、解の分布に関しては、 L^2 距離に基づく類似度を選択の基準とし、混雑距離による解の選択を行わなかったProposed 2,3においても、混雑距離による解の選択を行ったOriginal, Proposed 1と比較して、解の分布が偏ることなく広範囲から解の選択ができることがわかる。図-5の場合には、混雑距離を用いていないProposed 3において最も広範囲に、かつ連続的に解が分布していると判断できる。混雑距離を用い、目的関数空間上で広範囲から解を選択することによるパレートフロントの分布への影響は、少なくとも300イタレーション時点では現れていない。非優越ソートと解の類似性を選択基準とすることにより、混雑距離により目的関数空間上での解の分布を直接的に制御せずとも、十分に広範囲の解の分布を実現できている。

また、Hypervolumeに関して、VAEによる解の生成は確率モデルを用いているため、最適化の実行ごとに値に差が生じることを考慮すると、図-8より、手法によるHypervolumeに有意な差はない判断できる。検討した各枠組みは既存手法による解探索の性能の水準を維持できている。

生成された形状の多様性に関しては、表-1より、Proposed 2,4の場合、すなわち、ユニークな形状の複製を行った場合は、複製を行っていない場合と比較してクラスタ数が多い傾向があることがわかる。図-6からも、多様なL字梁の設計案が獲得できていることがわかる。ただし、Proposed 2においてクラスタ数の最大値が11であるように、複製を採用しない場合であっても複製を採用した場合と同等のクラスタ数をとることもある。これは、VAEを用いた潜在空間からのサンプリングが確率に基づくものであることに由来すると考えられる。サンプリングにより、既存の材料分布には見られないユニークな構造で、かつ目的関数値が良好な形状を生成できた場合には、ユニークな形状の複製を行うことなく、目的関数値上での優劣関係に基づく解の選択のみで形状多様性が大きくなることが起こりうるためである。ユニークな解の複製を行うことによる効果は、平均して形状多様性をより大きくすることにあるといえる。

6. 結言

本研究では、データ駆動型トポロジーデザインに形状類似性を評価する指標を導入し、形状多様性の劣化を抑えながら解の探索を行う枠組みを提案した。また、L字梁の設計問題を例題として最適化を行うことで、提案手法の有効性を検証した。

既存のデータ駆動型トポロジーデザインの枠組みでは、解の選択基準として解の形状類似性を考慮せず、目的関数値のみを用いているため、得られる解の多様性が小さくなる問題を抱えていた。そこで、 L^2 距離に基づく形状類似性の評価指標を選択アルゴリズムに取り入れ、ユニークな形状を選択、複製し、VAEに入力する数を増やすことで、得られる解の形状多様性指標が

向上し、クラスタ数も増加することが確認できた。また、既存手法と比較して、提案手法は解の目的関数値が劣らないことが確認された。したがって本研究では、データ駆動型トポロジーデザインにおいて、解の形状類似性を評価する指標を選択アルゴリズムに取り入れることにより得られる解の形状多様性を大きくすることができた。

しかしながら、得られた形状に対して形状多様性を評価する際に用いた指標は、選択アルゴリズムに取り入れた形状類似性評価指標に基づくものを用いている。 L^2 距離に基づく指標を導入したことによる形状多様性増大の効果についてより客観的な評価を行うには、得られた形状に対して L^2 距離に基づく指標とは別の指標をもとに形状多様性を評価する必要があり、そのような指標を構築することが今後の課題であると考える。

謝辞: 本研究の一部はJSPS科研費20KK0329の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] S. Yamasaki, K. Yaji, and K. Fujita: Data-driven topology design using a deep generative model, Structural and Multidisciplinary Optimization, Vol 64, pp. 1401–1420, 2021.
- [2] 金美和, 廣安知之, 三木光範: 目的関数空間と設計変数空間におけるパレート最適解の多様性を維持するアーカイブメカニズム, 情報処理学会論文誌, Vol 46, No. 17, pp. 102–113, 2005.
- [3] D. P. Kingma, and M. Welling: Auto-encoding variational bayes, arXiv:1312.6114, 2004.
- [4] K. Yaji, S. Yamasaki, and K. Fujita: 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, 114284, 2022.
- [5] K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal, and T. Meyarivan: A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II, IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol 6, No. 2, pp. 182–197, 2002.
- [6] S. Yamasaki, K. Yaji, and K. Fujita: Knowledge discovery in databases formulation in topology optimization, Structural and Multidisciplinary Optimization, Vol 59, pp. 595–611, 2019.
- [7] K. Shang, H. Ishibuchi, L. He, and L. M. Pang: A Survey on the Hypervolume Indicator in Evolutionary Multiobjective Optimization, IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol 25, No. 1, pp. 1–20, 2020.