

実験結果によるサロゲートモデルを活用した シミュレーションレスセットベース設計手法の研究

Research on simulation-less set-based design method using surrogate model based on experimental results.

角有司¹⁾, 飯山洋一¹⁾, 吉倉弘高²⁾, 佐藤甫³⁾, 小池晋太郎³⁾, 山下貴志³⁾, 松澤邦裕³⁾

Yuji Kado, Youichi Iiyama, Hirotaka Yoshikura, Hajime Sato, Shintaro Koike, Takashi Yamashita,
and Kunihiro Matsuzawa,

- 1) 宇宙航空研究開発機構 技術領域主幹(〒305-8505 茨城県つくば市千現 E-mail: kado.yuji[at]jaxa.jp)
- 2) 宇宙航空研究開発機構 主任研究開発員(〒305-8505 茨城県つくば市千現 E-mail: iiyama.youichi[at]jaxa.jp)
- 3) 株式会社エイ・エス・アイ総研(〒101-0047 東京都千代田区内神田, E-mail: yoshikura[at]jasiri.co.jp)
- 4) アドバンスソフト株式会社(〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台, E-mail: h-sato[at]advancesoft.jp)
- 5) アドバンスソフト株式会社(〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台, E-mail: koike.shintaro[at]advancesoft.jp)
- 6) アドバンスソフト株式会社(〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台, E-mail: Yamashita.takashi[at]advancesoft.jp)
- 7) アドバンスソフト株式会社(〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台, E-mail: kmatsu[at]advancesoft.jp)

In recent years, set-based design has been studied as a robust design method. In order to perform highly accurate set-based design, data assimilation work is required, which requires a great deal of effort. In this study, we report an overview of a method that can construct a surrogate model from experimental results and directly estimate a set-based design solution from it.

Key Words : *Quality Engineering, Set Based Design, Data Assimilation, Machine Learning*

1 はじめに

1.1 概要

宇宙機や自動車といった製品開発において、CAEは必要不可欠な存在となっており、CAEを使ったロバスト設計手法としてセットベース設計や、品質工学(パラメータ設計)等が注目されている。一方で、CAEは計算時間がかかる等の課題があるため、CAEの代替として機械学習を用いたモノ作りの方法論が検討されている^[1]。本研究では、機械学習のモノ作りへの適用として、実験結果をもとに実験計画法(直交表)によりサロゲートモデルを構築し、そこから直接的にロバスト設計のセットベース設計解を推定する方法を考案したので、その概要を報告する。

2 CAEの課題と機械学習への期待

2.1 CAEの課題

近年の設計対象の複雑化・大規模化に伴い、設計に利用されるCAEも大規模な計算が必要となっている。特に流体解析、機構解析などに代表される非線形CAEは、一般的に大量の計算機リソースがかかるものが多い傾向がある。

また、CAEを利用したロバスト設計は、その設計解を得るために網羅的な計算が必要となるものがあり、設計成立解の算出に多くの計算が必要となる。

さらに、CAEの精度を向上させるために、データ同化(実験結果とCAE結果の合わせ込み)が検討されているが、この合わせ込みにも大量の計算が必要となる^{[2][3]}。

2.2 機械学習への期待と課題

近年、CAEの代替としての機械学習への期待が高まっており、シミュレーションレスCAEという概念が提唱されている^[4]。CAEの代替として機械学習を用いる事により、以下の可能性が議論されている^{[4][5]}。

- ・ 高速化のための活用
- ・ モデル化が困難な複雑な現象への活用
- ・ 逆問題・最適化への活用
- ・ 偏微分方程式の解法への活用
- ・ データ構造の理解への活用

しかし、現実問題への解決に使用するのは難しいとされ、以下が課題として議論されている^[6]。

① ブラックボックス問題

機械学習が提示した学習結果は、得られた規則性・モデルは人間が直接理解できる形で示されない。つまり判別、分類、予測、異常検知の結果について理由を説明できない。

② 意思決定までのギャップ

機械学習による判別・分類、予測等の結果は、それだけでは必ずしも現実の問題の解決に至ら

ない事も多い。機械学習で得られた結果に基づいて、どの様に意思決定するかまで踏み込んだ解法が求められる。

③ 大量のデータが必要

過学習とは、学習用データに過剰に適合してしまい、汎化ができておらず、未知データでは高い精度が得られない状態をいう。過学習を抑えて高い精度を得るには大量の学習用データが必要だが、実際の応用において大量の学習用データを集めることは必ずしも容易なことではない。

④ 分析設計プロセスの難しさ

機械学習で高い精度を得るための構造設計や学習のさせ方等は、ノウハウや経験則の積み上げによっており、機械学習の使いこなしは依然として難しい。

3 工学設計への機械学習の導入

3.1 本研究における対策

前章2.2で述べた4つの課題に対する対策として、以下を整理した。

① ブラックボックス問題への対応

機械学習の結果がブラックボックスである課題については、機械学習とCAEとを併用して相互に補完させる事で対応可能と考えられる。CAEは入出力関係が明確で再現性も高く、ホワイトボックスであると解釈できる。機械学習の結果はブラックボックスであっても、その結果をCAEに読み込んで再評価する事で、ブラックボックス問題は回避できる可能性がある。その場合、機械学習とCAEとのデータ連携が課題となるが、既往研究^{[3][4]}で述べた通り、セットベース設計のパラメータ範囲を用いた統計的手法を利用する事で、連携にあたっての評価の定量化が可能になると考えられる^{[7][8]}。

② 意思決定のギャップへの対応

機械学習による判別・分類、予測等の結果だけでは必ずしも現実問題の解決に至らない事が多いという課題に対しては、予め現実世界において明確な目的と条件設定の上で集められた情報を扱う事で対応が可能であると考えられる。それは、工学設計分野を対象とした実験結果などが該当すると考えられる。

③ 学習に必要なデータ量・計算パワーの増大

学習に必要なデータ量の増大の問題に対しては、古典的統計学手法で、少ないデータ数で網羅的な探索が可能な実験計画法を用いる事で対応が可能であると考えられる。一般に、データ解析においては、従来の統計学では扱わなかった非構造化データを扱う場面が多いという特徴が挙げられるが、データサイエンスの一部である古典統計学は、フィッシャーの3原則に基づいて計測されたデータであり、統計誤

差がランダム誤差に転嫁されるとともに、その誤差の定量評価が可能であるとされる^[9]。品質工学は実験計画法をモノ作りに活用した例^[10]として広く知られており、実験計画法が現実問題に活用できた事例であると考えられる。

④ 分析プロセスの難しさ

機械学習で高い精度を得るための構造設計や学習のさせ方等が難しいという課題に対しては、既に多くのノウハウや経験則が存在する分野を対象とする事が考えられる。工学設計分野では、実際の製品開発やCAEのノウハウが蓄積されており、ノウハウを活用できる多くの設計者が存在している。工学設計分野の情報を機械学習に活用する事で、得られた結果の評価や改善策の立案が可能になると考えられる。

3.2 設計支援ツール (JIANT) の利用

JAXAでは、品質工学の特徴を踏襲しつつ、より発展させた設計支援ツール(JIANT: Jaxa Integrator for Analysis Tools, 以下JIANTという)を開発している。その特長を以下のa)~c)に示す^{[11][12]}。

a) 多水準直交表の利用

一般の品質工学では3水準直交表 (L18直交表, L36直交表, 等) の直交表の利用が推奨されているが、JIANTでは、5,7,9,11水準といった多水準直交表による評価を可能としている。これにより、非線形CAEにおいても設計解の高精度化が可能となり、また以下b)のセットベースデザインにおけるパラメータ範囲の絞り込みを容易としている。

b) パラメータ成立範囲の算出

品質工学におけるロバスト性の評価では、SN比という評価指標を使って、外乱に対して安定して動作できるパラメータ値を探す方法がとられる。一方でJIANTでは、セットベースデザインの考えを導入し、制約条件を満足できるパラメータの成立範囲の算出を行う方法としている。幅を持った数値で管理することから、機械設計における公差の考えに近い効果が期待でき、品質工学のSN比の様な予備知識が不要であることから、異なる分野の設計者との情報共有が進むと期待される。また、他の解析結果や実験結果もパラメータ成立範囲で算出しておくことで、統計的な手法による比較が可能となる。

c) 機械学習による予測機能

近年のCAEは複雑な問題を解くものが多くなり計算時間がかかるものが多く存在している。そこで上記a)の多水準直交表を用いCAE結果をもとに、機械学習のサロゲートモデルを作成し、それを利用した結果の予測機能を実装している。過去の例では、多水準直交表を用いた計算結果の算出に1日から1週間かかるものもあったが、機械学習機能を用いる事により短時間で算出できるため試行錯誤が容易となった。また機械学習モデルによる予測は保証されたものではないため、CAEによる再計算を簡便に実行し、再現性確認ができる機能を有している。これは機械

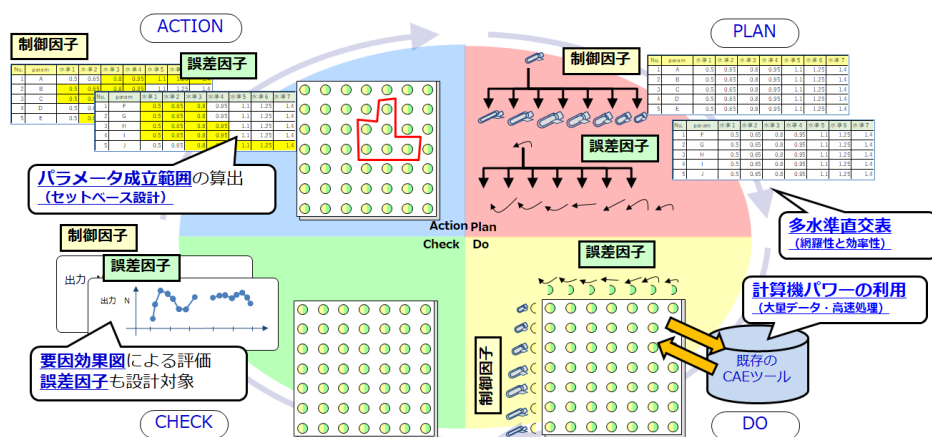


図 1 JIANT の PDCA サイクル

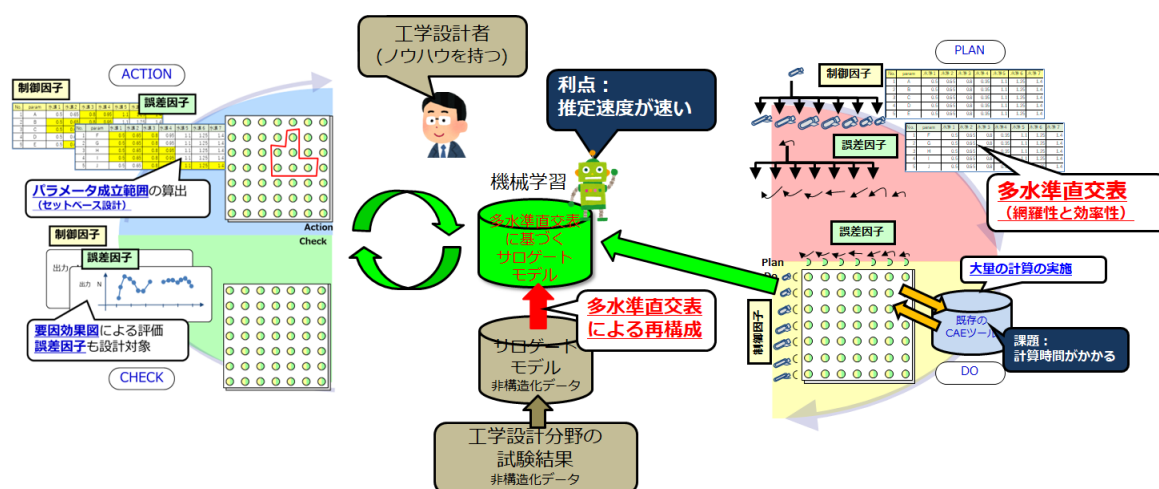


図 2 JIANT における機械学習の位置づけと実験結果の導入

学習で得られたパラメータ成立範囲の結果を、CAEを用いて再解析を行うものであり、これにより機械学習の誤差を含まない結果を得る事が可能である^[13]。

3.3 JIANTの利用フロー

CAEを利用した場合のJIANTの利用フローを以下に示す(図 1)

- ① 品質工学の考えに基づき、制御因子及び誤差因子に対して、多水準直交表を用いて入力パラメータの組み合わせを生成する (PLAN)
- ② 入力パラメータの組み合わせをCAEに入力し実行させ出力パラメータを抽出する (DO)
- ③ 抽出した出力パラメータの集合を整理し、品質工学の要因効果図を作成する (CHECK)
- ④ 要因効果図を参照し、制約条件を満足できる入力パラメータ範囲の絞り込みを行う (ACTION)

機械学習を利用する場合は、上記の②で得られた結果によるサロゲートモデルを構築し、そのモデルによる予測を③の要因効果図上に重ねて表示させる事で実現できる。なお機械学習アルゴリズムはGBDT法(Gradient Boosting Decision Tree法)を利用した。勾配ブースティング

決定木 (Gradient Boosting Decision Tree, GBDT) とは、勾配降下法 (Gradient), アンサンブル学習 (Boosting), および、決定木 (Decision Tree) の3つのアルゴリズムを組み合わせた機械学習アルゴリズムである。GBDTは、畳み込みニューラルネットワークなどを用いた深層学習 (Deep Learning) とは異なり、統計学などに基づいた浅層学習 (Shallow Learning) のひとつに分類される。GBDTの利点としては、(1) ディープラーニング等と比較して計算負荷が低い、(2) 非線形的な事象にも適用できる、(3) 決定木を基本としたアルゴリズムの特徴として各説明変数の目的変数への寄与度 (重要度) の評価が比較的容易である、といった利点がある。

GBDTは、ランダムフォレストなどと同様に、多数の学習器、すなわち、決定木で構成されたモデルである。決定木では、与えられた入力データの大小関係などに応じた分岐木が作成され、複数回の分岐を繰り返した結果、最終的に行き着いた枝の末端がその決定木の出力値となる。GBDTでは、弱く学習させた決定木 (弱学習器) を複数作成 (アンサンブル学習) することで、非線形事象を含む複雑な事象を記述する表現力を持つ。

3.4 JIANTへの実験データの読み込み機能の実装

実験データを読み込んで利用するために、以下の改良を実施した(図 2).

- ① 実験結果データの入力値の一部をJIANT Postで読み込み可能な水準設定に離散化し、サロゲートモデルを構築する機能を作成した.
- ② サロゲートモデルに対して、多水準直交表の組み合わせを与えて、それに対する実験結果を抽出する機能を追加した. これにより非構造化データの実験結果が直交表の構造化データに置き換えられ、予測精度の向上が期待できる.

4 適用事例

4.1 適用対象

本研究で考案したシステムの適用対象として、広島大学大学院 先進理工系科学研究科の森拓郎教授が行った、木材の腐朽による強度特性変化を計測した結果を採用した. データ数は286個あり、実験条件数(入力パラメータに該当)は7個、実験結果(出力パラメータに該当)は7個である(表1).

表 1 木質材料の実験結果

試験条件 (入力パラメータ)			評価指標(出力パラメータ)		
名称	パラメータ名	単位	名称	パラメータ名	単位
1 密度	Density	(g/cm3)	1 降伏耐力	YieldStrength	(N/mm2)
2 腐朽前ピロディン最大	PilodynBefor	(mm)	2 降伏変位	YieldDisplacement	(mm)
3 腐朽後ピロディン最大	PilodynAfter	(mm)	3 Pmax	Pmax	(N/mm2)
4 腐朽前後ピロディン値差	PilodynDiff	(mm)	4 D(Pmax)	D_Pmax	(mm)
5 腐朽後密度	DensityRotted	(g/cm3)	5 D(0.1Pmax)	D_0.2Pmax	(mm)
6 加力方向	BearingRod	-	6 D(0.4Pmax1)	D_0.4Pmax2	(mm)
7 支圧鋼棒方向	BearingRodDirection	-	7 初期剛性K	K	(N/mm)

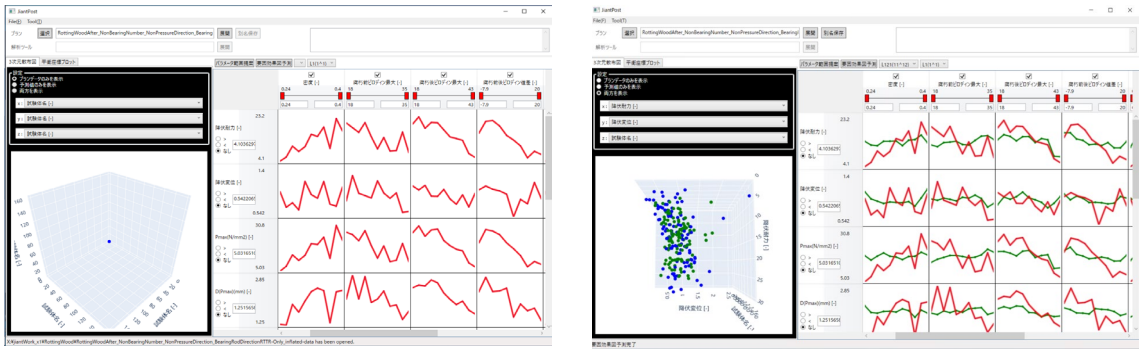


図 3 機械学習による要因効果図の作成
(左: 実験結果(赤線), 右: 多水準直交表による再構成結果(緑線))

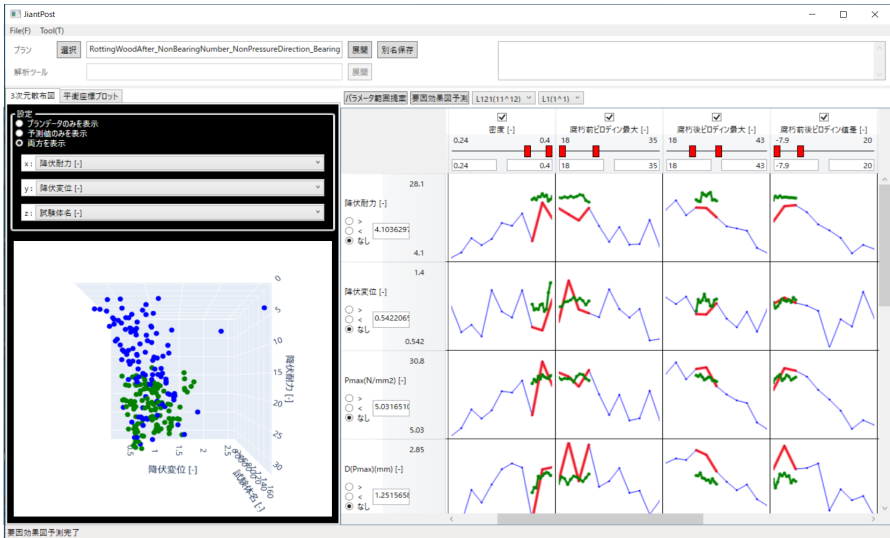


図 4 パラメータ範囲の絞り込み例

4.2 JIANTへの適用

その結果をJIANTの機械学習でサロゲートモデルを構築し、ある要求値を満足する様に設計した結果を示す。

- ① 286個の実験結果をもとに機械学習のサロゲートモデルを構築し、要因効果図のグラフを作成したもの（図 3の赤線）。
- ② 上記①の結果を多水準直交表で再構成した例（図 3の緑線）。今回は多水準直交表としてL121直交表(11水準)を活用した。
- ③ 試行錯誤の例として、目的関数を「降伏耐力が大きく」した場合の検討として、その対策として「密度を高く」「腐朽前と腐朽後のピロディン値を感度が高い所」「腐朽前後のピロディンの差を小さく」した結果を示す（図 4）。全体的に降伏耐力が向上した結果が得られた。

4.3 JIANTによる結果について

得られた成果の評価について以下に示す。なお、木材実験の観点からの評価は別の場で行うこととする。今回は

- ① 機械学習による推定時間は1秒程度であった。利用者にとって負担に成らない時間であり、様々な試行錯誤が問題なく行えると考えられる。
- ② 機械学習の推定結果はセットベース設計のパラメータ成立範囲として算出できている。実際の設計に使用する際には、この範囲内のものを選択すれば、期待された性能が得られると考えられる。
- ③ 感度のグラフを利用する事で、今回の実験の傾向が把握できる。降伏耐力を上昇させるためには、木材

の密度が高い方が有利である点は従来から知られており、その通りの結果が得られた。

- ④ 実験結果を直接読み込んだ結果(図 3の赤い線)と、多水準直交表により再学習させた結果（図 3の緑線）の比較では、試行錯誤で変化させた結果は緑の線上を動く事が理解できた。従って、多水準直交表を用いた結果の方が、再現性が高い可能性があると言える。なお、最終的な評価はCAEとの比較や、再実験などによって評価する必要がある。その場合も、セットベース設計の範囲を用いる事で、統計的な比較が可能になると考えられる。

5 まとめ

本研究では、機械学習のモノ作りへの適用として、実験結果をもとにサロゲートモデルを構築し、そこから直接的にロバスト設計のセットベース設計解を推定する方法について検討した。対象を設計工学問題とする事で、目的と評価が明確なデータの活用が可能であり、過去のノウハウの活用や設計者による判断が得やすい利点がある。また実験結果のサロゲートモデル構築に、品質工学の考えを参考として古典的統計学の実験計画法を用いる事で、再現性が高く実用的な方法について試行した。腐朽による木材強度のデータに利用した所、良好に活用できた。

本研究の位置づけを図 5に示す。機械学習の設計分野への適用に向けて、本研究では、統計学（実験計画法）に基づく設計工学である品質工学を導入する事により、機械学習を設計に活用する枠組みを検討したと言える。

またセットベース設計の機能を用いる事で、モデル流

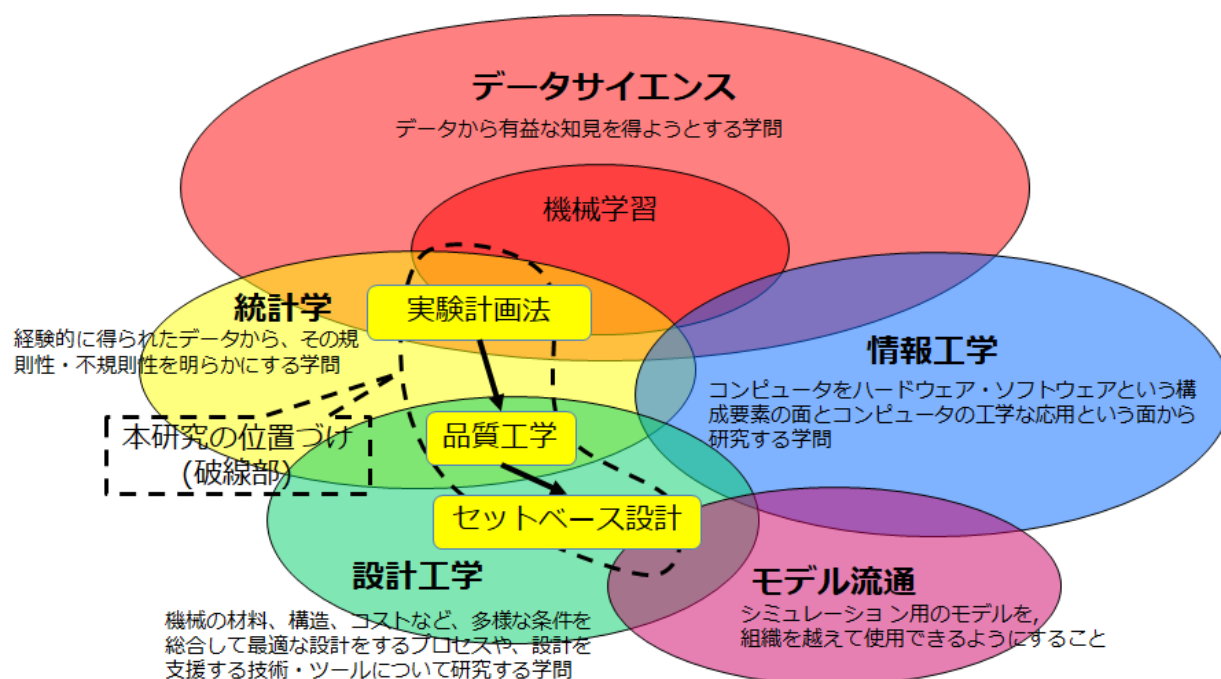


図 5 データサイエンスと設計工学・モデル流通への展開

通への活用への道筋が示唆されたと考える。自動車業界、造船業界等では、シミュレーション用のモデルを、組織間を超えて利用するためのモデル流通の検討が進められている。JAXAではJIAANTのパラメータ成立範囲を用いて、領域をまたがる情報共有を基にしたモデル流通への適用が期待され、議論を進めてきた^[14]。本研究の結果により、シミュレーションでなく実験結果を利用したサロゲートモデルによるモデル流通の可能性が示唆されたと考える。今後は、実際に自動車のデータへの適用を進め、自動車業界におけるモデル流通の取組を検討したい。

謝辞

本研究は京都大学・大阪工業大学・奈良女子大学・広島大学・大分大学・熊本大学・JAXAによる共同研究「木造住宅倒壊解析シミュレーションのロバストデータ同化手法の検討」の一環として実施した。木材データは、広島大学 森拓郎教授の「学研究費補助金（基盤研究(B)（一般）18H01589：代表者：森拓郎）のデータを活用した。

参考文献

- [1] 和田義孝，深層学習によるシミュレーションレスCAE~計算力学サロゲートモデルの構築~，第3回CMT分科会，2019.3.29
- [2] 角有司、飯山洋一、中川貴文、難波宗功、瀧野淳夫，製品情報と運用情報の組み合わせ探索による設計手法の研究（第6 報：ロバスト設計とデータ同化の統一的方法論の提案），第32回日本機械学会設計工学システム部門講演会、2022.11
- [3] 角有司，上松千陽，瀧野敦夫，難波宗功，中川貴文，複数の地震波を考慮した3階建て木造建築耐震シミュレーションのデータ同化手法の検討，第27回計算工学講演会、2022.6
- [4] 和田 義孝，深層学習によるき裂進展予測のためのサロゲートモデルの構築，日本原子力学会2018年秋の大会，計算科学技術部会セッション，人工知能技術の活用と将来展望，2018.9.7
- [5] 宮川尚紀，シミュレーション解析における機械学習の展開可能性，みずほリサーチ&テクノロジーズ技報，https://www.mizuho-rt.co.jp/publication/giho/pdf/009_12.pdf (Accessed 2023.4.1)
- [6] 福島俊一，他：ビックデータ x 機械学習の展望 最先端の技術チャレンジと広がる応用、情報管理(2017.11)
- [7] 石川晴雄著：多目的最適化設計セットベース設計手法による多目的満足化，コロナ社，(2010,11,5)
- [8] 石川晴雄，萱野良樹，他： セットベース設計 実践ガイド， 森北出版 (2019/12/17)
- [9] 朝倉暢彦：データ科学的手法によるヒト認知機能の統計モデリング，生産と技術，第 73 巻第 1 号(2021)，大阪大学生産技術研究会
- [10] 田口玄一：技術開発のため[10]の品質工学，日本規格協会,(1994)
- [11] 角有司、中川貴文： パラメータ成立範囲によるロバスト設計法と耐震設計への適用、品質工学会誌 投稿論文（査読済）、品質工学会誌2023年1月号
- [12] 角有司：双対性を利用した大規模システム開発手法の提案，設計工学会「設計工学」2021年12月号
- [13] 角有司，機械学習によるシミュレーションレスCAEを利用したロバスト設計手法の検討，計算工学講演会論文集 Vol.28 (2023年5月)
- [14] アドバンスソフト社，オンラインセミナー：モデルベース開発の実践的活用セミナー，2023.12.6，<https://www.advancesoft.jp/seminar/19352/> (accessed 2024.4.1)