

乱流場の流路設計のためのデータ駆動型トポロジー デザインによる初期形態創成と遺伝的アルゴリズム による形状最適化のハイブリッド手法

Hybrid method of generating initial guess by data-driven topology design and shape optimization based on genetic algorithm for designing turbulence channel

浦田一矢¹⁾ 矢地謙太郎²⁾ 藤田喜久雄³⁾
Kazuya Urata, Kentaro Yaji, Kikuo Fujita

¹⁾大阪大学 大学院工学研究科 機械工学専攻 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail: urata@syd.mech.eng.osaka-u.ac.jp)

²⁾博(工) 大阪大学 大学院工学研究科 准教授 (〒 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)

Turbulent flow fields typically cause cumbersome multimodality in their solution space of an optimization problem due to its strong nonlinearity. Therefore, shape optimization based on evolutional algorithms can be effective for designing fluid devices under turbulent flow fields. However, the solution space of a shape optimization is limited since only boundary moving is possible during the optimization process and optimized shape derived by shape optimization strongly depends on the initial shape. In this study, we discuss a method for rationally designing superior flow shapes considering turbulence flow using shape optimization based evolutional algorithms on initial guess derived by data-driven topology design.

Key Words : Data-driven topology design, Shape optimization, Turbulent flow

1. 緒言

流体デバイスを設計する際には、その物理場として乱流場を考慮する必要があることが多い。その一方で乱流場は最適化問題の目的関数空間に強い多峰性をもたらすため、問題の複雑さに応じて、従来の勾配法に基づく構造最適化手法では最適構造を求めることが難しい場合がある。特に分岐を伴う流路では、流路の分岐本数や回数の組合せが非常に膨大となり、その設計問題はさらに複雑となる。

乱流場の流路設計には進化的アルゴリズムなどの非勾配型アルゴリズムに基づく形状最適化が有効な手段となりうる。一方で、形状最適化では一般に、一連の過程の中で、境界の移動のみが可能であるため、もたらされる最適解が初期解の選び方に強く依存するという根本的課題を有する。膨大な分岐パターンから網羅的に初期解を選定し、形状最適化によって最適形状を求ることは現実的でない。

トポロジー最適化は形状最適化と比較して、より高い設計自由度を扱う手法であり、形状のみならず形態をも考慮することが可能であることから、初期解へ依存しない最適解を獲得することができる。一方で、トポロジー最適化の多くは設計変数の更新に勾配情報を必要とする手法であり、乱流場などの複雑な物理場に対する最適化問題では、その高い設計自由度から、最適解が性能の悪い局所解に収束してしまうという課題を有する。

本研究では各手法の特徴を踏まえ、Yamasaki らが提案したデータ駆動型トポロジーデザイン [1] と、進化的

アルゴリズムに基づく形状最適化によるハイブリッド手法を提案し、乱流場を考慮した分岐を伴う流路の例題へ適用することでその有効性を検証する。

2. 提案手法の概要

乱流場は最適化問題の目的関数空間に強い多峰性を引き起こすことにより、問題の複雑さに応じて、勾配法に基づく構造最適化法では、最適構造の導出が困難となる場合がある。また、分岐を伴う流路に対しては、分岐の組合せが非常に膨大となり、さらに問題が複雑化する。従来の形状最適化やトポロジー最適化など、単一の最適化手法のみによって、乱流場における分岐を伴う流路の設計を行うことは一般には現実的でない。

そこで本研究では、乱流場における分岐を伴う流路設計のためのハイブリッド最適化手法を提案する。本手法の主旨を以下に示す。まず、一般的なトポロジー最適化とは異なり、多様な構造を持つ材料分布を入力データとして用意する。多様な分岐パターンをあらかじめ想定することで膨大なパターンを含む包括的な解空間の探索を行うことが期待できる。続いて、それらの材料分布を用いて、データ駆動型トポロジーデザインの枠組み [1] により有望な分岐パターンを探索する。データ駆動型トポロジーデザイン [1] とは深層生成モデルによる解の生成と進化的アルゴリズムの概念に基づく解の選択を組合せたトポロジー最適化の新たな方法論である。本手法は目的関数の感度情報を用いる必要のない非勾配型手法であり、また、多様な構造を持つ初期データを入力することで、最適化問題の広い解空間を包括的に探索することができるため、目

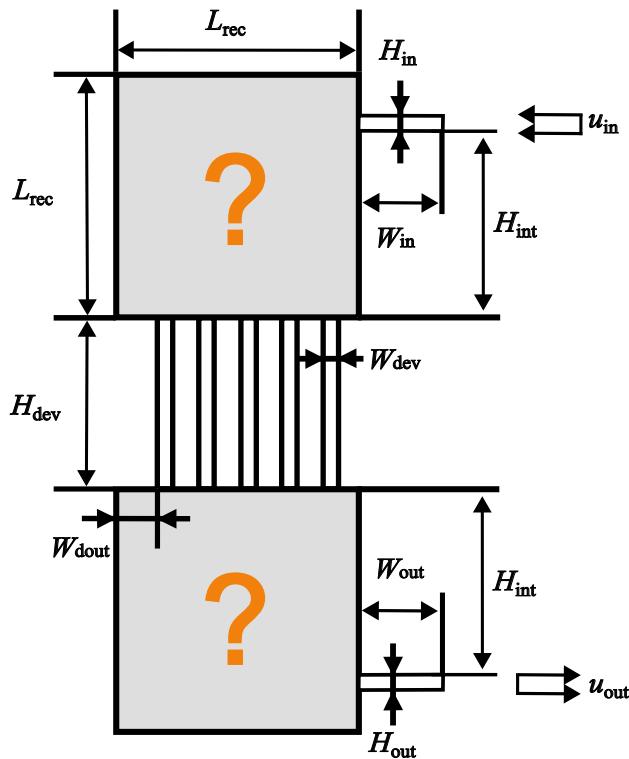


図-1 2次元流路モデル

的関数空間が強い多峰性を持つ問題に対しても有効な手段となりうる。多様な分岐パターンを含む材料分布を入力データとして用いることで、膨大な分岐パターンに対応する広い解空間に潜む有望なパターンを選定することが期待できる。最後に、獲得した最適なパターンをベジェ曲線により近似し、進化的アルゴリズムに基づく形状最適化を適用することで、最適形状を獲得する。

以上に示す手法では、まず、多様な構造の想定からはじまり、段階的に有望なパターンと形状を特定し、適切な最適化手法を選択、適用することで、合理的に最適設計を行うことが期待できる。

3. 問題設定

本研究では、乱流場における、分岐、合流を伴う2次元流路の設計問題を取り上げる(図-1)。上流部と下流部の正方形領域に設計領域を設定する。

(1) 支配方程式

本節では支配方程式と境界条件について述べる。流れ場は非圧縮かつ定常であるとする。解析領域における位置を x として、時間平均流速ベクトル、時間平均圧力をそれぞれ $\mathbf{u}(x), p(x)$ とする。本研究では乱流モデルとして $k-\varepsilon$ モデルを使用するため、連続の式、レイノルズ平均ナヴィエ-ストークスの式に加え、乱流運動エネルギー k と消散率 ε の輸送方程式を導入する。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + (\mu + \mu_T)(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)] \quad (2)$$

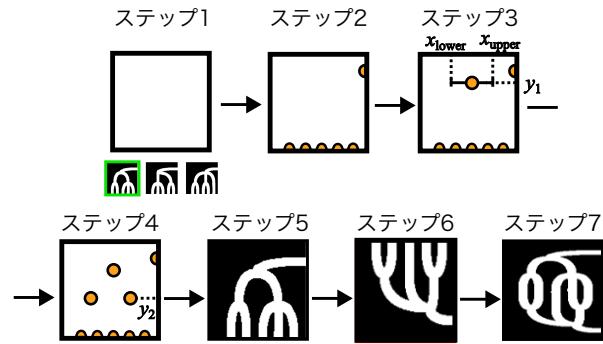


図-2 分岐パターン生成方法

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho\varepsilon \quad (3)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4)$$

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5)$$

$$P_k = \mu_T [\nabla \mathbf{u} : (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] \quad (6)$$

ここで ρ, μ, μ_T, P_k はそれぞれ密度、粘性係数、渦粘性係数、乱流運動エネルギーの生成割合である。また、 $\sigma_k, \sigma_\varepsilon, C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_\mu$ はモデル定数である。また、境界条件として流入口で一様流速 u_{in} 、流出口で圧力 p_{out} を与え、それ以外の境界すべてで壁関数を定義する。

(2) 最適化問題の定式化

本研究では2次元流路の性能を表す指標として、圧力損失と流量のばらつきを導入し、以下のように定式化する。

$$J_1 = p_{in} = \int_{\Gamma_{in}} p ds \quad (7)$$

$$J_2 = \max \int_{\Gamma_e^n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} ds - \min \int_{\Gamma_e^n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} ds \quad (8)$$

ここで、 Γ_{in} は流入口の境界、 Γ_e^n は各分岐流路における境界、 \mathbf{n} は Γ_e^n の単位法線ベクトルである。

4. 最適化プロセス

(1) 初期材料分布の生成

本節では、データ駆動型トポジーデザインを用いて広い解空間を包括的に探索するために、多様な構造を持つ初期材料分布を生成する方法について記述する。

材料分布を生成する手順を以下に示す(図-2)。各材料分布はビットマップ形式の画像によって表現され、白色領域が流体領域、黒色領域が固体領域を表現している。

ステップ1 設計領域に対応する分岐パターンを決定する。本例では、まず2本に分岐し、それらがそれぞれ2本と3本に分岐する例を示している。

ステップ2 流入口、分岐流路の位置に点をプロットする。

ステップ3 1回目の分岐位置に点をプロットする。分岐位置の x 座標は x_{lower} から x_{upper} までの間でランダムに決定する。 y 座標は y_1 とする。

ステップ4 2回目の分岐位置に点をプロットする。分岐位置の x 座標は分岐流路の中心になるよう決定する。 y 座標は y_2 とする。

ステップ5 プロットした点をベジェ曲線で繋ぐ。曲線の幅は w_{path} とする。

ステップ6 同様の手順により上下反転したデータを用意する。

ステップ7 以上により生成した2つのデータを垂直に結合する。

分岐パターンの画像は流入部、流出部、設計領域間の流路を省いている。

(2) データ駆動型トポロジーデザインによる最適化手順

本研究でのデータ駆動型トポロジーデザインによる最適化手順を以下に示す。

ステップ1 各入力データについて、設計領域にデータを当てはめ、流れ場の解析を行うことで、性能評価を行う。

ステップ2 目的関数値から NSGA-II [2] で用いられている選択法を用いて優れたデータを選択し、暫定的エリートデータとする。

ステップ3 収束条件を満たしていれば、暫定的エリートデータを最適解として手順を終える。収束していなければ、次のステップへ進む。

ステップ4 暫定的エリートデータの材料分布を訓練データとして深層生成モデルを学習させ、潜在空間をデコーディングすることで訓練データの特徴を継承した新たな材料分布を生成する。

ステップ5 生成された材料分布について流れ場の解析を行い、性能を評価する。

ステップ6 現在の暫定的エリートデータと新たに評価されたデータを結合し、ステップ2へ戻る。

なお、ステップ1および5で行う性能評価のための流体解析は COMSOL Ver. 6.0 の CFD モジュールを用いて行う。また、ステップ4では深層生成モデルとして Variational autoencoder (VAE) を用いる。VAE は TensorFlow によって実装する。

(3) 進化的アルゴリズムに基づく形状最適化による最適化手順

本節では進化的アルゴリズムに基づく形状最適化による最適化手順について示す。本研究では進化的アルゴリズムの一種である、実数値遺伝的アルゴリズムを採用する。データ駆動型トポロジーデザインと同様に多目的最適化問題を扱うことが可能であり、かつ、設計変数の更新に勾配情報を必要としない手法である。最適化手順を以下に示す。

ステップ1 データ駆動型トポロジーデザインにより獲得したパレート解からいくつかの解を選択し、それらをベジェ曲線により近似する。

ステップ2 獲得したベジェ曲線の分岐パターンを保持しつつ多様な形状を生成し、流れ場の解析を行うことで、性能評価を行う。

ステップ3 評価データから NSGA-II [2] で用いられている選択法を用いて優れたデータを選択し、暫定的エリートデータとする。

ステップ4 収束条件を満たしていれば、暫定的エリートデータを最適解として手順を終える。収束していなければ、次のステップへ進む。

ステップ5 ステップ3にて評価されたランク、混雑度から混雑度トーナメント選択を実施し親個体を選択する。

ステップ6 ベジェ曲線の制御点を設計変数とし、選択された親個体を BLX- α [3] によって交叉し新たな形状を獲得する。

ステップ7 生成された形状について流れ場の解析を行い、性能を評価する。

ステップ8 暫定的エリートデータと新たに評価されたデータを結合し、ステップ3へ戻る。

なお、ステップ2における多様な形状は以下のように生成する。

$$x_{\text{ori},k} - c_{\text{seed}} \leq x_{\text{gen},k} \leq x_{\text{ori},k} + c_{\text{seed}}, \quad (9)$$

ここで、 $x_{\text{gen},k}$ 、 $x_{\text{ori},k}$ 、 c_{seed} は、それぞれ生成されるベジェ曲線の k 番目に対応する設計変数、ステップ1によって獲得したベジェ曲線の k 番目に対応する設計変数、定数である。ステップ2および7で行う性能評価のための流体解析は COMSOL Ver. 6.0 の CFD モジュールを用いて行う。

5. 数値例

本章では、前章までの内容を踏まえて行った計算結果を示し、考察を行うことで本手法の有効性を検証する。

(1) 問題設定

表1、2にシミュレーションを行う上で定義するパラメータを示す。表1に示すパラメータはすべて無次元数で定義されている。支配方程式に含まれる多数の定数モデルは Launder と Spalding が提案した標準 k - ε モデル [4] に従って決定した。

表-1 設計領域および流体に関するパラメータ

記号	数値
W_{in}	4
H_{in}	1
L_{rec}	12
H_{int}	9
W_{dev}	1
W_{dout}	2
H_{dev}	8
W_{out}	4
H_{out}	1
u_{in}	1
p_{out}	0
Re	5×10^3

表-2 乱流モデルのパラメータ

記号	数値
C_μ	0.09
σ_k	1
σ_ε	1.3
$C_{\varepsilon 1}$	1.44
$C_{\varepsilon 2}$	1.92

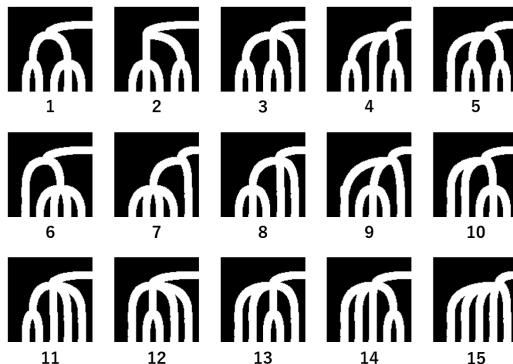


図-3 15種類の分岐パターン

(2) 初期材料分布の生成結果

本節では、データ駆動型トポロジーデザインへ入力するための初期材料分布を生成した結果を示し、考察を行う。

生成過程で用いる分岐パターンは、2回の分岐が存在するもののみを考慮し、15種類用意している(図-3)。また、本研究で扱うデータはすべて14400(120×120)要素であり、また、 x_{lower} , x_{upper} , y_1 , y_2 , w_{path} はそれぞれ45, 105, 80, 40, 10と定める。生成する材料分布は399個とする。

生成された初期材料分布を図-4に示す。得られた初期材料分布の多様性を確認するために、本研究では、分岐パターンの種類に着目する。上流部、下流部のそれぞれに対し、図-3に示す15種類の分岐パターンが存在する。つまり、設計領域全体で、 $15^2 = 225$ 種類の分岐パターンが想定される。図-4から、178種類の分岐パ

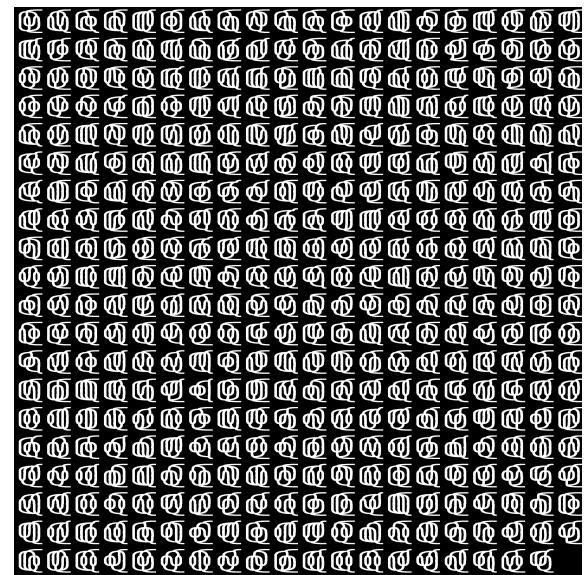


図-4 初期材料分布

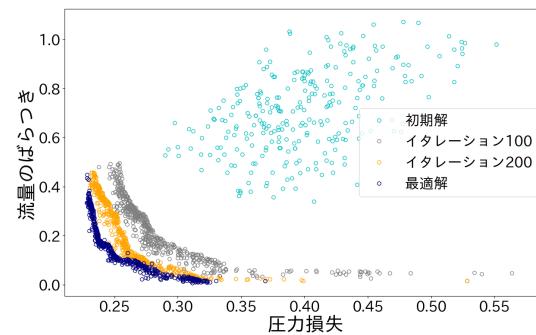


図-5 最適化結果の目的関数値

ターンが確認できた。つまり、生成される分岐パターン全体の約80%のパターンを生成することができたことがわかる。以上より、生成しうる分岐パターンの中から多様な材料分布を獲得できたといえる。

(3) データ駆動型トポロジーデザインによる結果と考察

本節では前節にて獲得した初期材料分布を入力データとし、データ駆動型トポロジーデザインを適用した結果を示し、考察を行う。

各反復にて選択するデータ数および新たに生成するデータ数は512個とし、反復数の上限を300回とする。

初期、イタレーション100、200、最終結果におけるエリート解の目的関数値を図-5に示す。流路に対する性能指標である、圧力損失、流量の均一性とともに最適化の過程で改善しており、データ駆動型トポロジーデザインが乱流場の設計問題に有効であることがわかる。

次に、得られた材料分布を図-6に示す。データ駆動型トポロジーデザインによる最適解が持つ分岐パターンは、目視により、大きく2種類に分類することができる。それらの分岐パターンと同様のパターンが初期解の中にみられることから、データ駆動型トポロジーデザインによる最適解は初期解の構造に対する多様性

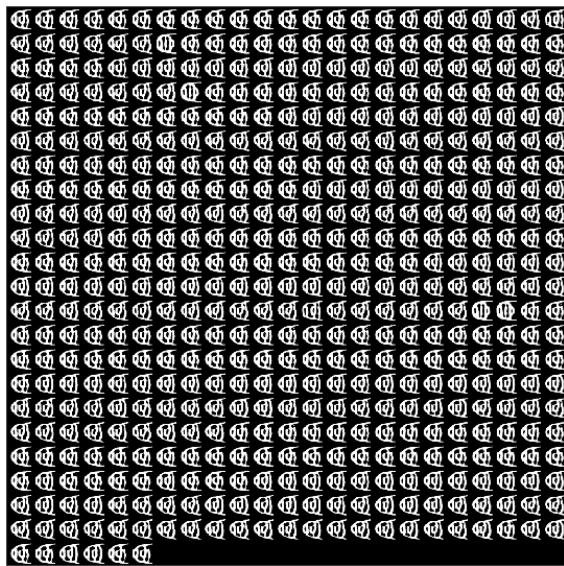


図-6 最適化結果の材料分布

に強く依存することがわかる。前節に示す初期材料分布の多様性と以上の結果は、本例題について、多様な初期材料分布を入力データとして利用することで、広い解空間の包括的な探索に成功し、優れた最適解を得たことを示唆している。

2種類の各分岐パターンを持つ解に対応する物理場の特徴を検証するため、例として、獲得した最適解から各パターンを持つ解をそれぞれ1つ選択し、その速度場、圧力場を図-7,8に示す。ここで、図-7,8に示す分岐パターンをそれぞれパターン1、パターン2とする。パターン1を持つ解は流量をより均一に分配することができている一方、圧力損失が比較的大きい傾向があり、パターン2を持つ解は圧力損失が比較的小さい一方で、流量の偏りが大きい傾向があることがわかる。

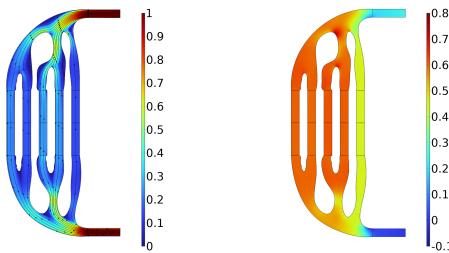


図-7-a 速度場

図-7-b 圧力場

図-7 パターン1の解析例

(4) 進化的アルゴリズムに基づく形状最適化による結果と考察

本節ではデータ駆動型トポロジーデザインによって獲得した解に対し進化的アルゴリズムに基づく形状最適化を適用した結果を示す。

各反復にて選択するデータ数および新たに生成するデータ数は256個とし、反復数の上限を200回とする。また、個体選択に係るトーナメントサイズは5、BLX- α

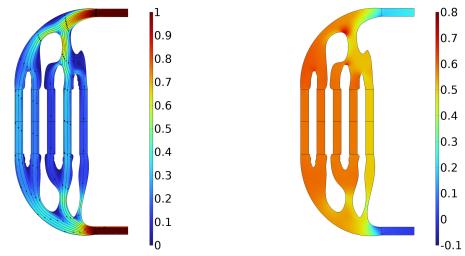


図-8-a 速度場

図-8-b 圧力場

図-8 パターン2の解析例

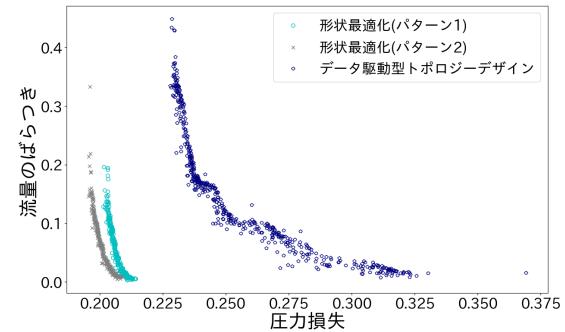


図-9 形状最適化、データ駆動型トポロジーデザインによる最適解の比較

におけるパラメータとして、 $\alpha = 0.2$ と定め、式(9)における定数 c_{seed} は2とする。

ベジェ曲線に近似する解として、データ駆動型トポロジーデザインによって獲得した最適解で、NSGA-II [2]による選択方法にてランク1と分類されたもののうち、パターン1を持つ解からは流量のばらつき $J_2 \leq 0.1$ を満たし、かつ、圧力損失が最も小さい解、パターン2を持つ解からは流量の均一性が最も大きい解を選択した。

形状最適化による最適解とデータ駆動型トポロジーデザインによる最適解の目的関数値を比較した図を示す(図-9)。形状最適化による最適解はいずれの目的関数についてもデータ駆動型トポロジーデザインによる最適解を上回っていることがわかる。

続いて、各形状に対する形状最適化結果より、最も圧力損失が小さい解と最も流量が均一である解、それらの中間的な値をとる解を選択し、それらの速度場、圧力場を示す(図-10)。圧力損失には、流路の単純さが大きく関係していると考える。圧力損失が最も小さい解は、最も右の流路や、右から2本目の流路への流入が十分でなく、左に位置する流路への流量が大きい。左から1、2本目の流路はその他の流路に比べ、流線が小さな曲率を持たない、つまり流線がシンプルであり、それに伴い圧力損失が小さくなっていると考える。続いて、流量の均一性に関わる大きな要因は右側2本の流路間の壁面形状であると考える。パターン1を持つ解のうち、最も流量が均一な解は、他の解と比べ、最も右の流路への流量を確保するような、また、パターン2については、右に位置する2本の流路への流量を確保

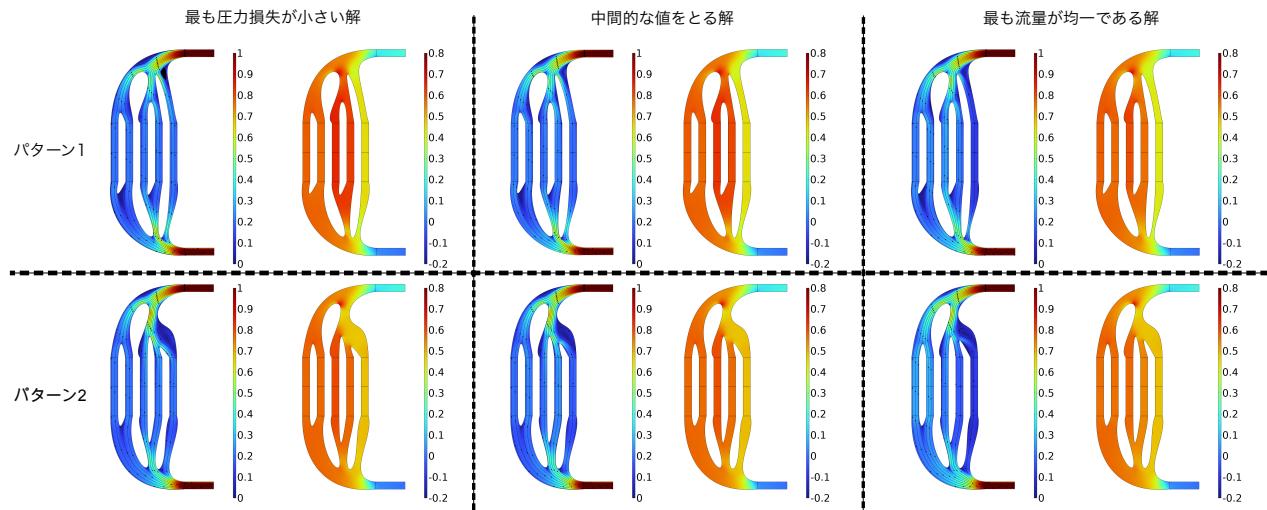


図-10 形状最適化によって獲得した形状

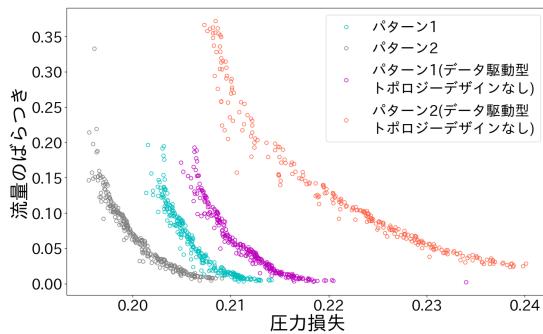


図-11 データ駆動型トポロジーデザインの初期解、最適解に対する形状最適化の結果

するような壁面形状を持っている。

(5) データ駆動型トポロジーデザインによる初期形態創成の有効性に対する考察

最後に、データ駆動型トポロジーデザインによる初期形態創成の有効性を検証するために、図-4に示した初期材料分布に対し、データ駆動型トポロジーデザインによる最適化を経ずに、直接形状最適化を適用し、図-9に示した形状最適化の結果と比較する。ここで、形状最適化を適用するための初期材料分布として、パターン1、パターン2と同様の分岐パターンを持つものを1つずつ選択した。各形状最適化結果を図-11に示す。図-11より、データ駆動型トポロジーデザインによって獲得した最適解に対し形状最適化を適用した結果の方が初期材料分布へ適用した結果に比べ優れており、データ駆動型トポロジーデザインによる初期形態創成が形状最適化による優れた最適形状の獲得のために有効な手段であることがわかる。

これらの結果より、データ駆動型トポロジーデザインによる初期形態創成と遺伝的アルゴリズムによる形状最適化のハイブリッド手法によって合理的に分岐、合流を伴う乱流場の形状設計を行うことができる。

わかった。

6. 結言

分流を伴う乱流場の流路の設計問題は、乱流場によつてもたらされる目的関数空間の多峰性や、分岐パターンの組合せから非常に複雑な問題であり、単一の構造最適化手法では最適設計を求めるることは難しい。そこで本研究では、データ駆動型トポロジーデザインによる初期形態創成と、進化的アルゴリズムに基づく形状最適化のハイブリッド手法を提案した。本手法によって分岐、合流を伴う乱流場の流路の最適設計を合理的に行うことができた。

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, No. 3, pp. 1401–1420, 2021.
- [2] 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.
- [3] Eshelman, L. J. and Schaffer, J. D. Real-Coded Genetic Algorithms and Interval-Schemata. Vol. 2 of Foundations of Genetic Algorithms, pp. 187-202, 1993.
- [4] B. Launder and D. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 3, No. 2, pp. 269–289, 1974.