

正則化を伴う形状流の局所適切性

カヴァッリーナ ロレンツォ
東北大学 大学院理学研究科
e-mail : cavallina.lorenzo.e6@tohoku.ac.jp

1 導入

形状最適化は多くの応用分野で重要な役割を果たしている。実際、様々な現実世界の問題は、偏微分方程式を用いて記述された形状最適化問題として定式化できる。本稿では、「形状最適化問題」とは、以下のように表現される最小化問題のことを指す。

$$\text{Find } \Omega^* \in \mathcal{O} \text{ such that } \mathcal{F}(\Omega^*) = \min\{\mathcal{F}(\Omega) \mid \Omega \in \mathcal{O}\}. \quad (1)$$

ここで、「形状空間」 \mathcal{O} は、特定の条件や制約の下で考え得る全ての形状の許容集合であり、形状汎関数 $\mathcal{F} : \mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}$ は与えられた目的関数である。ここで重要なのは、取り組んでいる特定の形状最適化問題によって適切な形状のクラスが異なるため、「形状空間」(英: shape space) について普遍的に合意された定義は未だに存在しないということである。実際、Micheletti [1] の画期的な研究の影響を受けて、多くの数学者が「形状空間」の定義を微分同相写像の空間として提案してきた [2]。しかし、本研究では “*The “real objects” are the domains, not the diffeomorphism*” という Zolésio [3] の哲学に従うこととし、形状空間 \mathcal{O} を \mathbb{R}^N における $C^{m,\alpha}$ 級 ($m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, $\alpha \in [0, 1]$) の有界領域全体の集合とする。この定義を採用するメリットの一つとして、与えられた形状 $\Omega \in \mathcal{O}$ における摂動の空間が Banach 空間である $C^{m,\alpha}(\partial\Omega, \mathbb{R}^N)$ の開集合として同一視できることが挙げられる。実際、十分小さい $\xi \in C^{m,\alpha}(\partial\Omega, \mathbb{R}^N)$ に対して、摂動領域 Ω_ξ を次の集合を境界に持つ形状として定義する。

$$\partial\Omega_\xi := \{x + \xi(x) \mid x \in \partial\Omega\}.$$

さらに、摂動領域 Ω_ξ を用いて、形状汎関数 \mathcal{F} における微分の概念が考えられる。このとき、摂動 $\xi \in C^{m,\alpha}$ に対して、形状 Ω における形状汎関数 \mathcal{F} の「形状微分」 $\mathcal{F}'(\Omega)[\xi]$ は次のように定める。

$$\mathcal{F}'(\Omega)[\xi] := \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{F}(\Omega_{t\xi}) - \mathcal{F}(\Omega)}{t}.$$

形状微分を用いて、形状最適化問題 (1) を解くための次の反復アルゴリズム (最急降下法) が考えられる。与えられた初期形状 Ω^0 とステップサイズ $\varepsilon > 0$ に対して、収束まで以下の過程を繰り返す。ステップ $k = 0, 1, 2, \dots$ に対して、 $\mathcal{F}'(\Omega^k)[\xi_k] < 0$ を満たす摂動 $\xi_k \in C^{m,\alpha}(\partial\Omega^k, \mathbb{R}^N)$ (ただし、 $\|\xi_k\|_{C^{m,\alpha}} = 1$ とする) を用いて、 $\Omega^{k+1} := (\Omega^k)_{\varepsilon\xi_k}$ として形状を更新していく。ここで、ステップ k においては、摂動と領域は両方とも $C^{m,\alpha}$ 級である (言い換えると、微分の損失が生じない) ため、十分小さいステップサイズ $\varepsilon > 0$ を選べば、次のステップ $k+1$ で生成される領域 Ω^{k+1} も $C^{m,\alpha}$ 級である。

本研究では、以上の最急降下法において、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の形式的極限 (連続極限) である「形状流」(英: shape flow) を考える。形式的には、形状流は以下のように表せる。

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\Omega_t = V(\Omega_t) & \text{in } [0, T), \\ \Omega_0 = \Omega^0. \end{cases} \quad (2)$$

ここで、 $V(\Omega_t) : \partial\Omega_t \rightarrow \mathbb{R}^N$ は $\mathcal{F}'(\Omega_t)[V(\Omega_t)] < 0$ を満たす境界速度とする。

2 主結果

本研究の目的は、幅広いクラスの境界速度について問題 (2) の可解性を示すことである。特に、本稿で扱う問題 (2) は、必ずしも勾配流の構造を持つ必要がないことに注意しておく。このとき、問題 (2) の境界速度が形状のクラスと同じ、もしくはより高い正則性を持つ場合には、「正則化」が伴うという。以下では、本稿で用いる問題 (2) の解の厳密な定義を述べる。 $\{\Omega_t\}_{t \in [0, T]}$ を $C^{m, \alpha}$ 級の形状族とする。このとき、 $\{\Omega_t\}_{t \in [0, T]}$ が $C^{m, \alpha}$ において問題 (2) の $[0, T]$ 上の解であるとは、任意の時刻 $t_0 \in [0, T]$ に対して、ある $\delta > 0$ が存在して、 $t \in (t_0 - \delta, t_0 + \delta) \cap [0, T]$ に対して次を満たす連続写像 $F_{t_0}(t) \in C^{m, \alpha}(\partial\Omega_{t_0}, \mathbb{R}^N)$ が存在することをいう。

- $F_{t_0}(t)$ は $\partial\Omega_{t_0}$ と $\partial\Omega_t$ の間の同相写像である。
- 写像 $t \mapsto F_{t_0}(t) \in C^{m, \alpha}(\partial\Omega_{t_0}, \mathbb{R}^N)$ は時刻 $t = t_0$ において Fréchet 微分可能であり、 $\frac{d}{dt} F_{t_0}(t) \Big|_{t=t_0} = V(\Omega_{t_0})$ である。

本研究では、問題 (2) に対して以下の局所可解性に関する結果を得た。

定理 1 (時間局所適切性) 写像 $\xi \mapsto V(\Omega_\xi) \circ (\text{Id} + \xi) \in C^{m, \alpha}(\partial\Omega^0, \mathbb{R}^N)$ が $0 \in C^{m, \alpha}(\partial\Omega^0, \mathbb{R}^N)$ の近傍で Lipschitz 連続であるとする。このとき、ある $T > 0$ が存在して、問題 (2) は $C^{m, \alpha}$ において $[0, T]$ 上で解を持つ。また、次の半群の性質を満たす写像 $F(\cdot)$ が一意に存在する。

$$F_{t_0}(t_2) = F_{t_1}(t_2) \circ F_{t_0}(t_1) \quad \forall t_0, t_1, t_2 \in [0, T].$$

Zolésio [3] は類似した形状流の存在証明を行ったが、用いた手法が異なる。実際、定理 1 の証明では Banach の不動点定理を用いたのに対し、Zolésio の証明は Leray-Schauder の不動点定理に依存している。その結果、Zolésio の証明では、コンパクト性を保証するために、境界速度に対してより高い正則性を課す必要がある。

以下では、 $m \geq 1$ とし、 $C^{m, \alpha}$ 級の形状 Ω に対して、外向き単位法線ベクトル $\nu_\Omega \in C^{m-1, \alpha}(\partial\Omega, \mathbb{R}^N)$ を考える。このとき、形状微分の構造定理 [4] を用いて、以下の結果を得た。

定理 2 (接線方向速度は形状流に寄与しない) $\{\Omega_t\}_{t \in [0, T]}$ を $C^{m, \alpha}$ 級の形状族とし、 $C^{m, \alpha}$ において問題 (2) を $[0, T]$ 上で満たすとする。このとき、 $\{\Omega_t\}_{t \in [0, T]}$ は $C^{m-1, \alpha}$ において次の問題を $[0, T]$ 上で満たす。

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \Omega_t = \{V(\Omega_t) \cdot \nu_{\Omega_t}\} \nu_{\Omega_t} & \text{in } [0, T), \\ \Omega_0 = \Omega^0. \end{cases}$$

参考文献

- [1] A.M. Micheletti, *Metrica per famiglie di domini limitati e proprietà generiche degli autovalori*, Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa, Classe di Scienze 3e série, 26 (1972) 3, 683–694.
- [2] S. Arguillere, *The general setting for Shape Analysis*, (2022). hal-01137547
- [3] J.-P. Zolésio, *Set Weak Evolution and Transverse Field, Variational Applications and Shape Differential Equation*, RR-4649, INRIA (2002). inria-00071936f
- [4] A. Novruzi, M. Pierre, *Structure of shape derivatives*, Journal of Evolution Equations 2 (2002), 365–382.

結び目のエネルギーとその形状導関数の数値計算について

松島 慶¹, 山田 崇恭¹¹ 東京大学大学院工学系研究科

e-mail: matsushima@mid.t.u-tokyo.ac.jp

1 緒言

結び目は 3 次元空間中の閉曲線であり、その幾何学的性質に関する理論的研究は古くから行われている。特に、結び目に対して定義されたエネルギー (knot energy, 結び目のエネルギー) を最小化する勾配流に関する結果は化学、コンピュータグラフィックス、あるいは形状最適化などの様々な分野に応用されている [1]。

本研究は、結び目のエネルギーの一種である O'Hara knot energy [2] を対象として、その最小化を数値的に実行するための手法、特に形状導関数について議論する。特に、O'Hara knot energy の L^2 勾配に基づく素朴な最急降下法が数値不安定となることを示し、正則化法に基づく改善案を提案する。

2 結び目のエネルギー

関数 γ を \mathbb{R}/\mathbb{Z} から \mathbb{R}^3 への C^2 級の埋め込みとする。この埋め込みにより定められる 3 次元空間上の閉曲線 (結び目) のエネルギー $E(\gamma)$ を次式で定める。

$$E(\gamma) := \frac{1}{2} \int_0^1 \int_0^1 \left(\frac{1}{|\gamma(t) - \gamma(\tau)|^2} - \frac{\pi^2}{L_\gamma^2 \sin^2 \frac{\pi(s_\gamma(t) - s_\gamma(\tau))}{L_\gamma}} \right) |\gamma'(t)| |\gamma'(\tau)| dt d\tau \quad (1)$$

ここに s_γ と L_γ は以下で定義される。

$$s_\gamma(t) := \int_0^t |\gamma'(\tau)| d\tau, \quad L_\gamma := s_\gamma(1) \quad (2)$$

本研究は、 $\alpha > 0$ を定数として、汎関数

$$J(\gamma) := E(\gamma) + \alpha \int_0^1 |\gamma'(t)|^2 dt \quad (3)$$

に対する最急降下法を実行するための形状導関数の数値計算法を構築する。

提案法に基づいて O'Hara エネルギーの最小化を実行した結果を図 1 に示す。この結果から、複雑に絡み合う曲線 (図 1 (a)) がエネルギーが最小化されることで円形の曲線に遷移することが確認できる。

参考文献

- [1] S.W. Walker, Shape optimization of self-avoiding curves, Journal of Computational Physics, 311 (2016), 275–298.
- [2] J. O'Hara, Energy of a knot, Topology, 30 (2) (1991), 241–247.

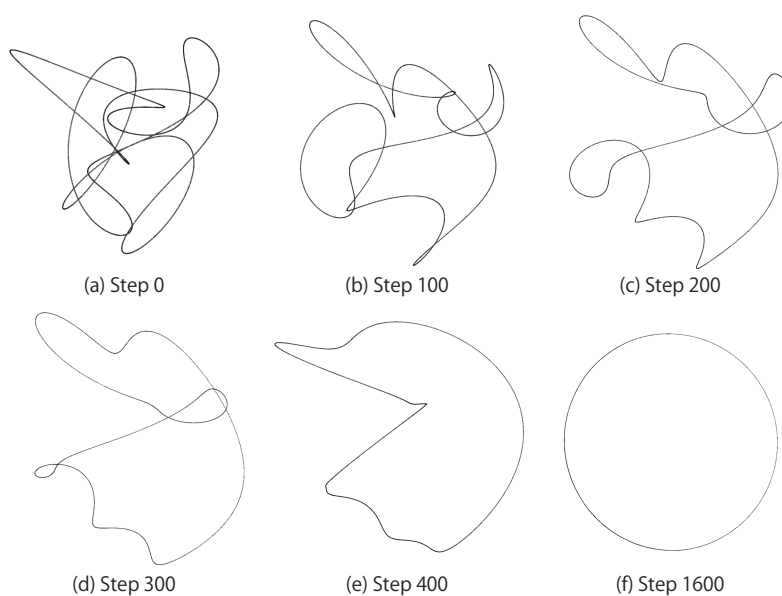


図 1. Untangling a trivial knot using a numerical optimization method. Each subfigure (a)–(f) shows a snapshot during the optimization steps.

一般化二重層ポテンシャルの高速算法とその応用

飯盛 浩司¹

¹ 慶應義塾大学理工学部

e-mail : isakari@sd.keio.ac.jp

Ω を \mathbb{R}^2 の有界領域とし、 $x \notin \partial\Omega$ に対して定義される以下の積分

$$\phi_p(x) := \int_{y \in \partial\Omega} \frac{(y-x) \cdot n(y)}{|x-y|^{2+p}}, ds(y) \quad (1)$$

を一般化二重層ポテンシャルと呼ぶ [1]。ここに、 p は非負の整数でパラメータ、 $n(y)$ は $y \in \partial\Omega$ における Ω の外向き単位法線である。一般化二重層ポテンシャルという用語は (1) において $p = 0$ としたものが、2 次元 Laplace 方程式の二重層核に対する密度 1 の二重層ポテンシャルであることに由来する。さて、簡単な計算 [1, 2] により、(1) と数列

$$c_0 = \pi, c_1 = 2, c_{p+2} = \frac{p+1}{p+2} c_p \quad (p = 0, 1, \dots) \quad (2)$$

を用いて定義される以下の関数

$$\Psi_p(x) := \left(\frac{c_p}{\phi_p(x)} \right)^{\frac{1}{p}} \quad (3)$$

は $p \rightarrow \infty$ において、漸近的に以下のように振る舞うことが分かる。

$$\Psi_p(x) = d(x, \partial\Omega) + O\left(\frac{1}{p}\right) \quad (4)$$

ここに、 $d(x, \partial\Omega) := \min_{y \in \Omega} |x-y|$ は点 x と境界 $\partial\Omega$ の距離である。

以上より、(点 x が領域 Ω に含まれるか否かは $\phi_0(x)$ を用いて判別できる [2] ことから) 一般化二重層ポテンシャル (1) を用いて符号付距離関数を計算できることが分かる。符号付距離関数を求める方法としてはアイコンアル方程式 [3] や熱方程式 [4] を利用する方法が知られているが、与えられた形状の境界の情報のみを用いるという点において本手法は魅力的である。というのも、物体の形状は境界の情報のみで (例えば STL として) 与えられるのが一般的であるためである。一方で、例えば N 角形領域に対して、 M 点における ϕ_p を計算することは $\mathbb{R}^{M \times N}$ の密行列と \mathbb{R}^N のベクトルの乗算に他ならないから、この計算を加速することは必須である。

さて、(1) は遠方で減衰する積分核に対する層ポテンシャルであるから、その評価には高速多重極法 [5] や階層型行列法 [6] を利用できると考えられる。本研究では、後者を利用した高速算法を提案する。

提案法の定式化の詳細については講演当日に紹介することとし、以下では数値解析の結果を示す。ここでは、原点に重心を持つ 1.5×0.3 の長方形を Ω と設定した。 Ω の境界を N 個の等しい長さの線分に分割し、原点を中心とする 1.0×1.0 に等間隔の格子状に配置した 40,000 点における (3) とその勾配を計算した。図 1 に一般化二重層ポテンシャル (1) を素朴に評価した場合、階層型行列法を用いた場合の N に対する計算時間の比較を示す。計算した範囲の N については階層型行列法を用いた場合に計算時間が大幅に短縮されている一方で、 N の増大とともに階層型行列法の plot の傾きが大きくなっている様子が確認できる。この原因としては、大規模問題における階層型行列法の並列化効

率の悪化が考えられ、これを改善する方法を検討することが今後の課題として挙げられる。また、並列化効率の高さの観点からは高速多重極法の利用も検討する価値があると考えられる。

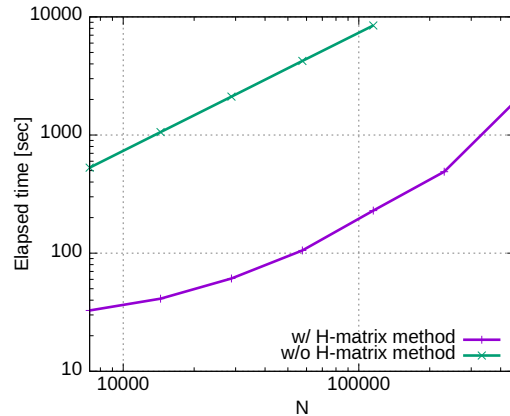


図 1. ϕ_p を素朴に評価した場合 (w/o H-matrix method) と階層型行列法を計算した場合 (w/ H-matrix method) の計算時間と境界分割数 N の関係

参考文献

- [1] A. Belyaev, P-A Fayolle, and A. Pasko. Signed L_p -distance fields, Computer-Aided Design, Vol. 45, No. 2 (2013), 523–528.
- [2] H. Isakari. A fast skeletonisation of 2D objects using a generalised double-layer potential and the \mathcal{H} -matrix method, Transactions of JASCOME, Vol. 23 (2023), 115–121.
- [3] J-A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. Proceedings of the National Academy of Sciences, Vol. 93, No. 4, (1996), 1591–1595.
- [4] K. Crane, C. Weischedel, and M. Wardetzky. Geodesics in heat: A new approach to computing distance based on heat flow. ACM Trans. Graph., Vol. 32, No. 5 (2013).
- [5] V Rokhlin. Rapid solution of integral equations of classical potential theory. Journal of Computational Physics, Vol. 60, No. 2, (1985) 187–207.
- [6] J. Ostrowski, Z. Andjelic, M. Bebendorf, B. Cranganu-Cretu, and J. Smajic. Fast BEM-solution of Laplace problems with \mathcal{H} -matrices and ACA. IEEE Transactions on Magnetics, Vol. 42, No. 4, (2006) 627–630.

かたちの交叉に着目した進化的トポロジー最適化

矢地 謙太郎¹

¹ 大阪大学 大学院工学研究科 機械工学専攻

e-mail : yaji@mech.eng.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

構造物や機械部品の最適なかたちを求める最適化手法としてトポロジー最適化がある。トポロジー最適化は、設計領域 $D \subset \mathbb{R}^d (d \in \{2, 3\})$ において、特性関数 $\chi_\Omega : D \rightarrow \{0, 1\}$ を用いて表現される材料分布を操作することにより、対象の構造物 $\Omega \subseteq D$ の最適な形状を数値計算により決定する。特性関数を直接的に扱う場合はいわゆる整数計画問題に帰着されるため、一般に何らかの正則化や緩和法を用いなければならない。代表的な方法としては、特性関数を連続関数 $\gamma : D \rightarrow [0, 1]$ に置き換える密度法であったり、スカラー関数 $\phi : D \rightarrow \mathbb{R}$ の零等値面によって Ω の境界を決定するレベルセット法に基づく手法が提案されている。これら従来法の特徴は、評価関数の設計変数場 (γ や ϕ) に関する勾配を利用することにより、随伴法を利用することで効率的に勾配を算出し、勾配法をベースとする各種最適化手法 (最急降下法, 最適性基準法, 逐次線形計画法など) によって Ω の最適な形状を決定する [1]。

勾配を利用しない組合せ最適化問題と比較すると、勾配法は計算効率で優れている反面、設計変数場の中間的な状態 (グレースケール) の処理や、多峰性の影響により劣悪な局所解に陥ってしまう問題を有する。トポロジー最適化では何らかの物理場も考えることになることから、その物理場に強い非線形性が見られたり、評価関数として一般に勾配の取れないもの (例えば最小値/最大値) を用いると、何らかの近似処理を施す必要があるため、これが最適化計算を困難あるいは不可能にしてしまうことが知られている。これは、トポロジー最適化の設計自由度が高すぎることに起因しており、実問題への展開を妨げてしまう諸刃の剣とも言える。

本講演では、勾配を用いない最適化手法として知られる進化的アルゴリズムと機械学習の技術を活用した「かたちの交叉」なるものに着目する。その上で、「勾配情報を一切利用することなく、順問題さえ解くことができれば有望な最適解を高い自由度の下で導出することが可能なトポロジー最適化」について、その考え方と今後の展望について論じる [2, 3, 4]。

2 かたちの交叉

提案する枠組みを説明するにあたり、その核となる進化的アルゴリズムの基本的な考え方に触れておく。進化的アルゴリズムは、予め用意した初期解で構成される個体群をもとに以下三つの操作を繰り返すことで最適解の獲得を目指す。

選択 各解候補における評価関数値を算出した上で、その結果をもとに優れた解候補を選抜し、残りの解候補を淘汰する。

交叉 選択で生き残った優秀な解候補を親個体としてかけ合わせ、それぞれの特徴を継承した子個体を生成し、親と子を含めた個体群に更新する。

突然変異 個体群の多様性を維持することで局所解への到達を回避するため、交叉だけでは生み出せない新たな個体を追加する。

これら手続きでは一般に評価関数の勾配情報を一切利用しないことから、順問題さえ解ければ不連続の評価関数を扱おうとも大域的に解探索を行うことができる。しかし、従来の進化的アルゴリズムでは交叉や突然変異の仕組み上、高次元の設計変数を扱う場合に評価関数の計算回数が指数的に増加するため、いわゆる次元の呪いの影響を強く受けてしまう。

以上を踏まえ、本研究ではトポロジー最適化においても採用可能な交叉として、機械学習モデルの一つとして知られる変分オートエンコーダ (VAE: Variational Autoencoder) を利用する。図 1 に VAE を利用した進化的アルゴリズムの概念図を示す。本枠組みでは、VAE の入力データとして何らかの材料分布を与え、それらを復元するためのニューラルネットワークを構成する。ここで、VAE の低次元の特徴空間として構成される潜在変数空間からのサンプリングにより、入力データに似ているものの、少し異なる材料分布を生成する。入力データが進化的アルゴリズムの文脈におけるエリート解であれば、生成される個体群はそれらの特徴を有する子個体に対応することを踏まえると、これは高次元の材料分布を起点とする交叉に相当する。これがかたちの交叉の基本的な考え方である。

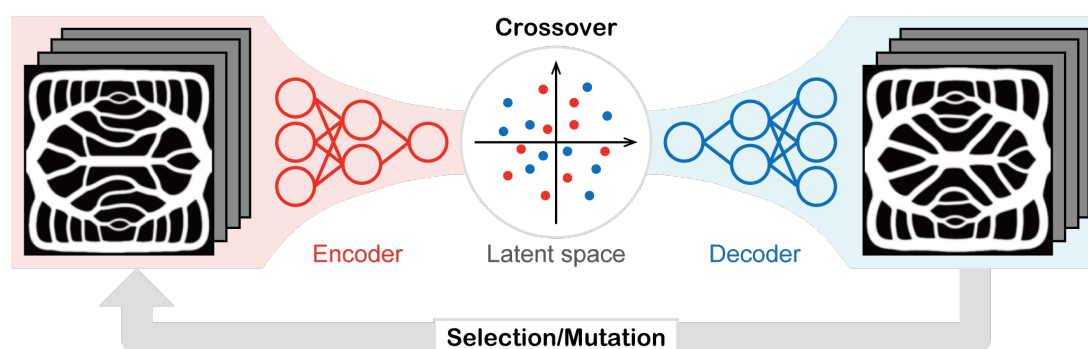


図 1. 変分オートエンコーダを利用した進化的アルゴリズム

3 おわりに

本講演では、かたちの交叉を利用した進化的トポロジー最適化について解説し、様々な物理現象を考慮した工学設計問題に展開した事例を示す。また、かたちの交叉を実現する他の方法や、進化的トポロジー最適化に適した選択操作についても触れながら、当該分野の展望について議論したい。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 23H03799 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] Sigmund, O. and Maute, K., Topology optimization approaches: A comparative review, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 48(6) (2013), 1031–1055.
- [2] Yamasaki, S., Yaji, K. and Fujita, K., Data-driven topology design using a deep generative model, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 64 (2021), 1401–1420.
- [3] 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*, 388 (2022), 114284.
- [4] Kii, T., Yaji, K., Fujita, K., Sha, Z. and Seepersad, C. C., Latent crossover for data-driven multifidelity topology design, *Journal of Mechanical Design*, 146 (2024), 051713.