

研究終了報告書

「データ駆動型構造最適化による高機能放熱部材の創製」

研究期間：2021年10月～2024年3月

研究者：鈴木 飛鳥

1. 研究のねらい

近年、金属3Dプリント技術の発達により、従来では製造困難だった複雑形状の金属部材が製造可能となった。その応用例の一つとして、放熱面積を拡大して冷却を促すヒートシンクが挙げられる。金属3Dプリント技術によって、高比表面積を有する複雑ヒートシンクを製造すれば、限られたスペースで効率的な放熱を可能とする。そのためには、ヒートシンクとして最適な複雑形状を導出する必要がある。

従来の構造最適化には、寸法最適化、形状最適化、トポロジー最適化がある。この中で最も探索空間の広い構造最適化法がトポロジー最適化である。トポロジー最適化では、空間を離散化し、その各座標における材料の有無を最適化する。しかしながら、設計変数の次元が膨大になることから、非線形な方程式を解く構造最適化への適用は困難である。ヒートシンクの特性的においても、流体力学の支配方程式である Navier-Stokes 方程式を求解する数値流体力学計算(CFD)を必要とするため、構造最適化が困難であり、トポロジー最適化の適用は限定的なものである。

また、機械学習を活用した構造最適化についても研究がなされている。そうした研究例では、機械学習によるサロゲートモデルを構築し、特性を高速に予測することを可能するとともに、遺伝的アルゴリズムなどの最適化アルゴリズムを用いて最適構造を推定する。しかしながら、構造を数値化することが難しいという観点から、その適用は寸法最適化にとどまっている。

本研究では、広探索空間においてヒートシンクとしての複雑形状の構造最適化を機械学習・AIを活用して行うことを目的とした。そのために、(i)多様な複雑形状からヒートシンク特性を高速に予測するサロゲートモデルの構築、(ii)サロゲートモデルを活用した複雑形状の構造最適化、(iii)最適化構造の実験的評価を行うこととした。

2. 研究成果

(1) 概要

研究項目(i)の多様な複雑形状からヒートシンク特性を高速に予測するサロゲートモデルの構築では、様々な複雑形状からヒートシンク特性に重要と予想される構造的特徴量を11種類抽出し、構造的特徴量から CFD で得られたヒートシンク特性(圧力損失、基板温度増分)を予測するニューラルネットワークモデルを構築した。これにより、CFD(計算時間: 10^4 s オーダー)に比べて非常に高速(NNの予測時間: 10^{-2} s オーダー)にかつ精度よく特性を予測するモデルを構築することに成功した。加えて、ランダムフォレストの Feature Importance を活用して構造的特徴量の重要度解析を実施し、ヒートシンク特性向上に重要な構造的特徴量を解明した。

研究項目(ii)のサロゲートモデルを活用した複雑形状の構造最適化では、構造と一意に対応するパラメータを見出して活用した。構造と一意に対応するパラメータ、部材の太さ、研究項目(i)で明らかにした重要度の高い構造的特徴量などを入力とするニューラルネットワークサロゲ

ートモデルを再構築し、そのモデルに対してベイズ最適化によるパレート解(圧力損失と基板温度増分の最適なバランス)探索を実施した。その結果、パレート解の候補と考えられる構造を導出することに成功した。

研究項目(iii)の最適化構造の実験的評価については、金属 3D プリントした複雑形状部材のヒートシンク特性評価に適した風洞実験装置を作製した。研究項目(ii)の最適構造の検証が終了した後、実際に最適構造を金属 3D プリントにより作製し、実験的評価を実施することを予定している。

(2)詳細

(i)多様な複雑形状からヒートシンク特性を高速に予測するサロゲートモデルの構築

当初の計画では、複雑形状の設計データから畳み込みニューラルネットワーク(CNN)を活用して特性を予測するサロゲートモデルを構築する予定であった。しかしながら、本研究では計算コストの高い CFD によって教師データを収集するため、CNN の適用に十分な教師データを得ることが困難であった。そこで、複雑形状を数値化し、その数値化した情報から特性を予測するモデルを構築することとした。

まず、CFD を用いて各構造のヒートシンク特性を解析した。本研究では、流路内に置かれた基板の付属する複雑形状に 1 m/s の流速の空気が供給される。また、基板の下部から 2 W の熱量が入力される状況を解析した。特性としては、1 m/s の流速を得るのに必要な圧力損失と、2 W の熱量に対して平衡する基板の定常温度とした。次に、多様な複雑形状に共通する構造的特徴量として、面積、水力直径、有効流路径などの 11 個の構造的特徴量を抽出した。11 個の構造的特徴量から圧力損失/基板温度を予測するニューラルネットワークモデルを構築した。このとき、ランダムフォレストの Feature Importance を活用して、重要度の高い構造的特徴量を選択しつつ、次元を削減した。それにより、4 個の構造的特徴量からでも精度の高い予測が可能となった。また、 10^4 s 程度の計算時間を要する CFD に対して、ニューラルネットワークによって、 10^{-2} s 程度の計算時間で特性を予測することが可能となった。4 個の重要な構造的特徴量を活用して、最も単純な複雑形状に対して圧力損失/基板温度がともに減少する複雑形状を見出すことに成功した。

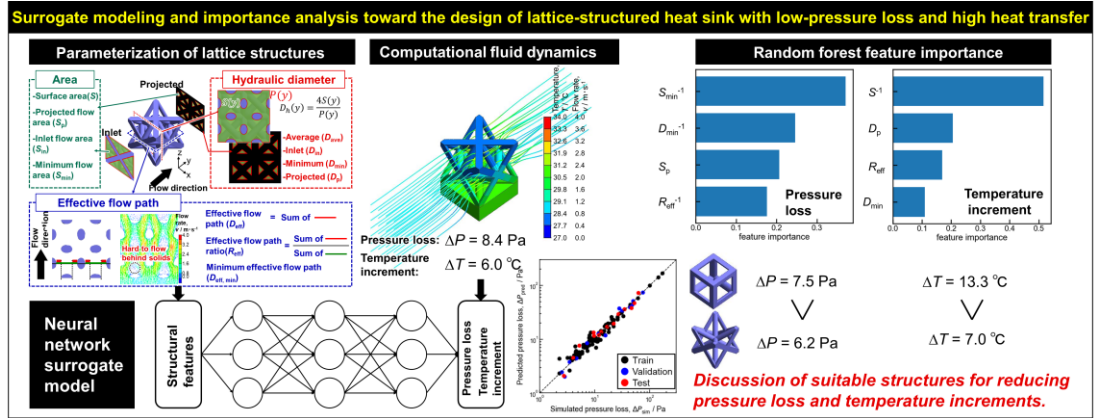


図 1 研究項目(i)に対して得られた研究成果

(ii) サロゲートモデルを活用した複雑形状の構造最適化

(i)により構築した代理モデルのベイズ最適化による逆解析を実施し、最適な特性をもつ構造的特徴量の組み合わせを探索した。これにより、最適な構造的特徴量の組み合わせを探索すること自体は可能であったが、最適な構造的特徴量の組み合わせをもつ構造を現実的に設計できないという問題が生じた。個々の構造的特徴量は実現可能な範囲に制限して探索を行っているものの、その組み合わせとしては実現が困難な範囲に探索が行われたためである。領域会議での議論を経て、この問題は構造と構造的特徴量との間に一意の関係がないことが原因であるという理解に至った。つまり、構造から構造的特徴量を求めることはできるが、逆に構造的特徴量から構造を決定することができない。

そこで、最適化するパラメータとしては、構造と一意の関係を有するものを選択した。そうしたパラメータをランダムに変更・設計した約 800 の構造から特性を予測するサロゲートモデル構築およびその逆解析を行った。サロゲートモデル構築では、構造と一意の関係をもつパラメータ、部材の太さおよび(i)で明らかにした重要度の高い構造的特徴量を入力として、伝熱特性と圧力損失を高精度に予測するモデルが構築した。そのサロゲートモデルに対して、ベイズ最適化による逆解析を実施し、圧力損失および基板温度増分に対するパレート解探索を行った。その結果として、パレート解を導出することに成功し、パレート解上に属する最適な構造の候補を得ることができた。また、得られた最適構造について、CFD による検証を行った。その結果、一部の構造で CFD との誤差が生じたものの、概ね妥当なパレート解を得ることができた。加えて、代表的な構造に関して、最適構造が非最適構造よりも優れた特性を示す要因を考察することができた。

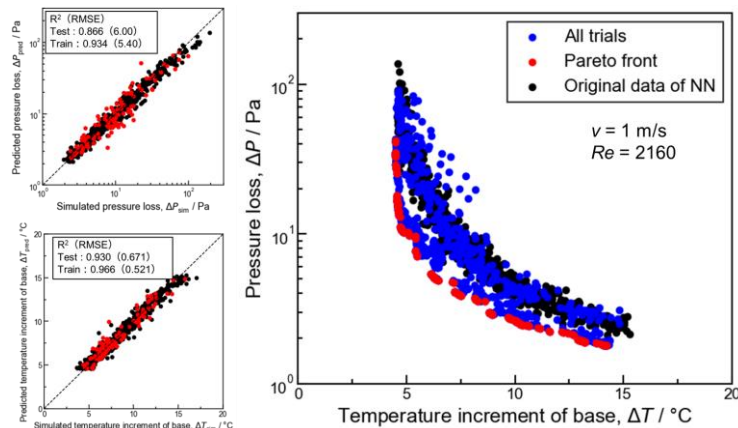


図 2 研究項目(ii)に対して得られた研究成果

(iii) 最適化構造の実験的評価

実験的評価を可能とする風洞装置を名古屋大学の辻義之教授と共同で準備した。風洞装置は右端にファンが取り付けられており、ファンに供給する電圧を変えることで風洞内の流速を制御する。流速は複雑形状部材の手前に流速計を差し込むことで測定した。圧力損失は、複雑形状部材前後の圧力を計測し、その差分として求めた。また、複雑形状部材には基板が取

り付けられており、その基板にヒーターで熱量を供給した。そして、基板に挿入した熱電対によって温度を計測した。代表的な複雑形状部材(BCC, Octet, Kelvin, Cube)で実験的評価を行った。また、数値流体力学計算(CFD)も行い、実験とCFDの整合性を確認した。その結果、絶対値にはやや誤差が生じるものの、CFDによって特性の流速依存性や構造に対する特性の大小関係は概ね再現されることを確認した。よって、これら実験およびCFDによって最適化された構造の特性を評価可能であると考えられる。(ii)によって最適構造が見出されたため、それを金属3Dプリントにより作製した。その評価を今後行う予定である。

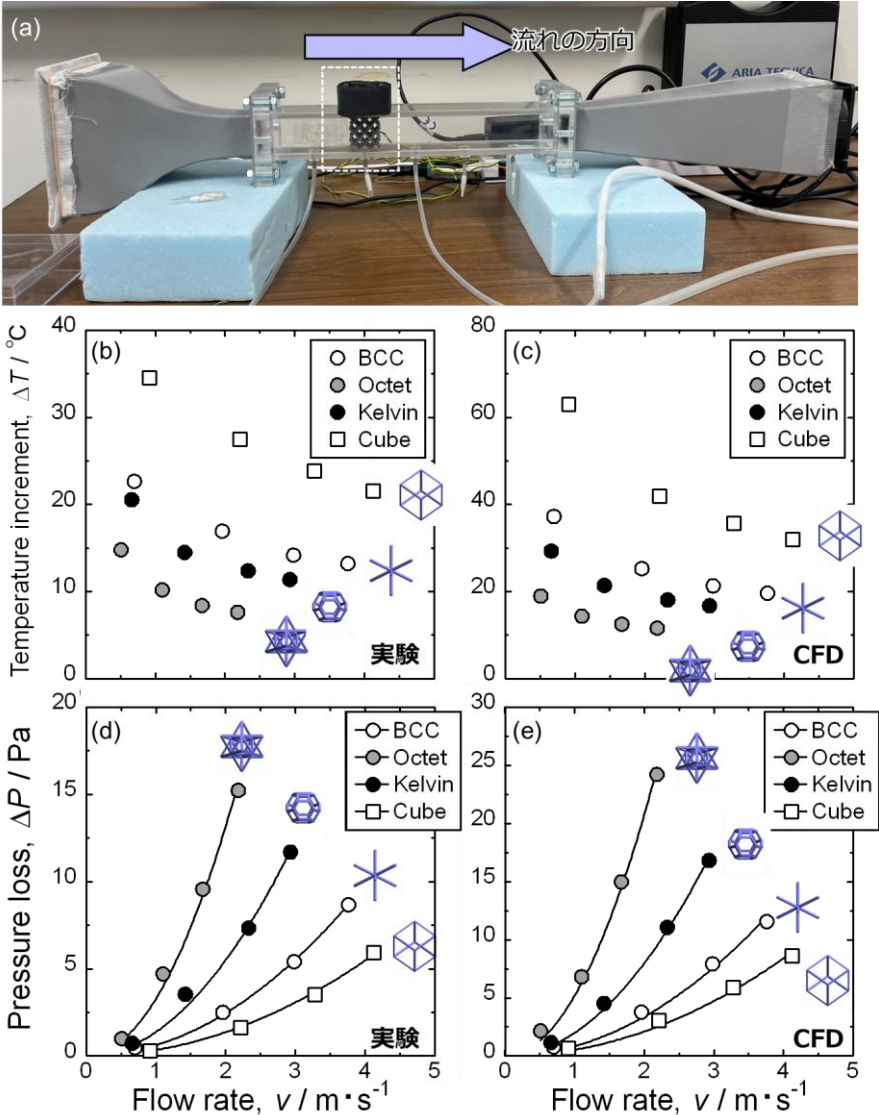


図 3 研究項目(iii)に対して得られた研究成果:(a)本研究で整備した風洞実験装置, (b, d)実験および(c, e)CFD 解析で得られた(b, c)温度増分および(d, e)圧力損失

3. 今後の展開

現在の最適化では、構造と一意の関係にあるパラメータの数を限定している。そこで、その数の固定を解除し、パラメータ、部材の太さに加えてパラメータの数も同時に最適化できる方

法論の開発を目指す。この開発を3年程度の研究期間を経て実現させる。

もう一つの必要な展開として、適用事例の拡大である。現在はヒートシンクに対象を限定しているが、原理的にはあらゆる部材の3次元形状の最適化に応用が可能である。例えば、軽量部材、衝撃吸収部材、化学反応促進部材などの応用例が考えられる。こうした多様な部材の構造最適化を通して、高機能な部材を多数生み出すことができれば、本研究で構築した方法論の社会実装につながると考えられる。こうした研究を多様な分野との共同研究を実施しながら、10年程度の研究期間を通して実現させる。

4. 自己評価

(1) 研究目的の達成状況

研究項目(i)については、多様な構造の特性を予測するサロゲートモデルが構築できたため、達成度は100%である。

研究項目(ii)については、最適な構造を導出する基盤を確立でき、最適構造の妥当性を検証した。よって達成度は100%である。

研究項目(iii)については、実験装置の作製が終了した一方、最適構造の造形に時間を要したため、実験的評価に至っておらず、達成度は50%である。

(2) 研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

研究は、研究代表者である鈴木と研究補助員である中谷(修士課程2年)によって実施した。特に、研究全体のマネジメントや進め方については鈴木が主導し、中谷はその指示に基づいてCFD計算や機械学習による解析を実施した。

(3) 研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果

本研究で構築しつつあるAIを活用したデータ駆動構造最適化は、従来の寸法最適化、形状最適化、トポロジー最適化のいずれとも異なる新たな構造最適化として位置づけられる。例えば、寸法最適化は基本となる構造を固定したうえで、その基本構造の寸法を最適化する。しかしながら、本研究では基本構造も含めた最適化が可能である。一方、そういった方法として最も探索空間が広いとされる方法がトポロジー最適化である。トポロジー最適化は、空間内の各座標(実際には離散化した座標)における材料の有無(0か1、ただし実際には界面で中間的な値も許容する)を最適化する。それにより、原理的にはあらゆる構造から最適解を探索している。しかしながら、この方法は設計変数の次元が膨大であるという欠点を抱えている。例えば、平面を 16×16 に離散化しただけで、設計変数次元は256次元になる。こうした設計変数次元ゆえに本研究の熱流体問題のような計算コストの高い方法には使用することが困難である。一方、本研究で構築しつつある方法は、構造を表現するのに最低限なパラメータを用いているため、設計変数の次元は非常に少ない。一方、従来の物理的なモデルでは、本研究で着目した構造と一意に結びつくパラメータから特性を予測することは困難である。そこで、AIを介して特性と結びつけることでトポロジー最適化でも困難とされる熱流体問題の最適化計算を可能としている。以上の視点から、本研究で構築しつつあるデータ駆動型構造最適化を高度化することで、**金属3Dプリント技術などの複雑形状を生み出すプロセスとシナジーを発揮する**、

第四の構造最適化法になると期待される。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数: 3件

1. A. Suzuki, H. Nakatani, M. Kobashi, Machine learning surrogate modeling toward the design of lattice-structured heat sinks fabricated by additive manufacturing, *Materials & Design*, 230 (2023) 111969.
2. 鈴木 飛鳥, 機械学習を活用した金属積層造形のプロセスパラメータ設計, までりあ, *新進気鋭*, 62(7) (2023) 464-469.
3. H. Shen, A. Suzuki, N. Takata, M. Kobashi, Elucidating dominant flow channel size for capillary performance of open-cell porous wicks, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 223 (2024) 125217.

(2) 特許出願

研究期間全出願件数: 0 件(特許公開前のもも含む)

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

主要な学会発表

1. 鈴木飛鳥, 積層造形への AI の適用事例, 積層造形による素形材イノベーション研究会, 招待講演
2. 中谷英人, 鈴木飛鳥, 高田尚記, 小橋眞, 機械学習を用いたアルミニウム合金ラティス構造体の熱伝達特性と圧力損失の予測, 軽金属学会第 142 回春期大会, ポスター発表
3. 鈴木飛鳥, 中谷英人, 高田尚記, 小橋眞, 機械学習を活用したアルミニウム合金ラティス構造体の強制対流下での伝熱特性予測, 軽金属学会第 143 回春期大会
4. 中谷英人, 鈴木飛鳥, 高田尚記, 小橋眞, 強制対流下でのラティス構造と伝熱特性の相関解析と機械学習, 粉体粉末冶金協会 2022 年度秋季大会
5. Hideto Nakatani, Asuka Suzuki, Naoki Takata, Makoto Kobashi, Importance analysis of lattice structural features for heat transfer properties under forced convection and its application to constructing a machine-learning surrogate model, *Thermec2023*, Poster
6. 中谷英人, 鈴木飛鳥, 高田尚記, 小橋眞, ラティス構造型ヒートシンクの伝熱特性・圧力損失の機械学習代理モデル構築と構造最適化, 機械学会 2023 年度年次大会, ポスター発表
7. 鈴木飛鳥, 中川颯也, 中谷英人, 小橋眞, 辻義之, ラティス構造型ヒートシンクの伝熱特性および圧力損失の実験的評価と数値流体力学, 機械学会 2023 年度年次大会
8. Asuka Suzuki, Machine-learning approaches to control the microstructure and properties of laser powder bed fused metallic components, *JIMM Young Leader International Scholar Award Lecture*, TMS 2024 annual meeting & Exhibition, Invited.

主要な受賞

1. Asuka Suzuki, 第 18 回 JIM/TMS Young Leader International Scholar award, 2024 年 3 月 6 日
2. 鈴木 飛鳥, 第 40 回永井財団賞, 3D プリントのプロセスインフォマティクスが拓く素形材製造の革新, 2023 年 3 月
3. 鈴木 飛鳥, 第 32 回日本金属学会奨励賞, 非定常な温度場を利用したマルチスケールにわたる金属材料の高機能化に関する研究, 2022 年 9 月
4. 鈴木 飛鳥, 第 39 回軽金属奨励賞, 計算・データ科学を活用した高機能アルミニウム基材料の設計と創製, 2021 年 11 月