

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	多孔体材料の特性評価と構造設計のための情報および数理科学と数値流体解析連携手法の構築
Title(English)	
著者(和文)	保田知輝
Author(English)	Tomoki Yasuda
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第11798号, 授与年月日:2022年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:大川原 真一,吉川 史郎,山口 猛央,多湖 輝興,下山 裕介,松本 秀行
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11798号, Conferred date:2022/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	論文要旨
Type(English)	Summary

論文要旨

THESIS SUMMARY

系・コース： Department of, Graduate major in	応用化学 応用化学	系 コース	申請学位 (専攻分野)： 博士 (工学) Academic Degree Requested Doctor of	
学生氏名： Student's Name	保田 知輝		指導教員 (主)： Academic Supervisor(main)	大川原 真一
			指導教員 (副)： Academic Supervisor(sub)	吉川 史郎

要旨 (和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters)

本論文は、多孔体材料の特性評価ならびに構造設計を高度化するための、情報および数理学と数値流体解析を連携させた手法を構築したものである。

第 1 章『緒論』では、研究背景として、非侵襲三次元計測技術および数値的特性評価法の進展により、多孔体材料の局所微細構造と材料特性の関係をより容易に調べられるようになったこと、そして、このような解析を通じ得られる巨大情報群を利用し材料の特性評価および探索を高度化する新たな手法が望まれていることを述べた。次に、既往研究を概観し、情報科学的手法を用いた多孔体材料の特性評価に関する研究においては、多孔体の幾何学的特徴を定量的に表す膨大な数の記述子群から、着目特性の予測に寄与する最適な記述子群を同定する手法が確立されていない点を指摘した。また、好適構造をもつ材料を情報・数理学的手法により探索する研究では、単純な構造数値生成法しか検証されていない点、乱数を入力とした深層生成モデルしか用いられていない点から、探索結果の製造プロセスへの還元が考慮されていないことを指摘した。既往研究の課題を克服するため、製造プロセスへの還元を志向しつつ、情報および数理学と数値流体解析を連携させた多孔体材料の特性評価および好適構造探索手法を構築することを本研究の目的とした。提案手法の有用性を示すために、透過率および粒子捕集効率を目的特性として、エアロゾルフィルターの好適構造を探索することを述べた。

第 2 章『構造記述子選択に基づく材料の特性評価法の構築』では、機械学習モデル (サポートベクターマシン、SVM) で着目特性を精度良く予測する必要最小数の構造記述子を、多数の記述子から効率良く選択するための、四種の特徴選択法を逐次的に適用する手法を提案した。そして、新たに選択された非従来型の記述子と従来予測値に比して改善された予測精度の関係を数値流体解析で明らかにする特性評価手法を提案した。多孔体の透過率および粒子捕集効率の予測に提案手法を適用し、本手法がチャネリングや粒子漏れなどの多孔体材料の欠陥の検知に資する非従来型記述子を見出せることを示した。また、透過率に関する分析においては、従来型記述子が、非意図的にもれなく選択されることを示し、提案手法の健全性を確認した。

第 3 章『計算机上仮想実験に基づく材料探索法の構築』では、多孔体材料の製造条件、得られた多孔体の記述子、その着目特性の関係を、実用的な計算負荷で蓄積する数値的材料探索法を提案した。提案手法は、多孔体材料の製造条件を設計変数とし、これを入力に、粒子の堆積や焼結などの製造プロセスを模擬した多孔体材料の数値生成、生成された三次元画像からの記述子の抽出、SVM による記述子からの着目特性予測、を逐次的におこなうことで、設計変数空間における点 (ある製造条件) を着目特性へと写像する。この写像を目的関数とし、遺伝的アルゴリズムによる着目特性の多目的最適化をおこなう。透過率と粒子捕集効率を着目特性とし、本手法により多目的最適化をおこなった。得られた Pareto 解と進化過程で淘汰された解を合わせたデータをを用い、設計変数について主成分分析を行うことで、23 次元あった設計変数空間を 2 次元にまで縮約できることを示した。また、蓄積された進化履歴を調べることで、縮約設計空間における着目特性の改善方向が明らかとなり、製造プロセスに還元しやすい設計変数のみを人為的に調整して着目特性をさらに改善できることを示した。

第 4 章『空孔接続性の最適化に基づく材料探索法の構築』では、多孔体材料の空孔接続性のみを変化させ着目特性を改善する手法を提案した。提案手法においては、多孔体構造を空孔と空孔同士を結ぶスロートのみで近似した空孔スロートネットワークを利用し、空孔の位置と大きさを固定した上でスロートのみを繋ぎ変えた仮想ネットワークを種々生成し、それと等価な接続性をもつ多孔体の実構造を深層生成モデルによる画像変換で生成する。生成した多孔体画像からの記述子の抽出、SVM による記述子からの着目特性予測、と逐次的に空孔スロートネットワーク構造から着目特性へ写像する目的関数を構成することにより、設計変数をスロートの繋ぎ方、目的関数を着目特性とする遺伝的アルゴリズムによる多目的最適化手法を構築した。第 3 章の手法により得られた Pareto 解の 1 つに本手法を適用することで、空孔の位置と大きさが同じでも、より好ましい着目特性をもたらす三次元構造の多孔体材料を探索できることを実証した。

第 5 章『総括的結論』では、本研究で得られた成果を総括し、今後の課題について述べた。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

(博士課程)
Doctoral Program

論文要旨

THESIS SUMMARY

系・コース： Department of, Graduate major in	応用化学 応用化学	系 コース	申請学位 (専攻分野)： Academic Degree Requested	博士 Doctor of	(工学)
学生氏名： Student's Name	保田 知輝		指導教員 (主)： Academic Supervisor(main)	大川原 真一	
			指導教員 (副)： Academic Supervisor(sub)	吉川 史郎	

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words)

Recent advances in non-invasive imaging techniques such as X-ray Computed Tomography have made it possible to enhance material characterization and discovery methods by using big-data about porous materials, i.e., acquired images themselves and the characteristics evaluated from the images. In this study, one characterization method and two material discovery methods have been proposed by combining machine learning algorithms with Computational Fluid Dynamics (CFD) simulation techniques. To demonstrate the usefulness of the proposed methods, the permeability and filtration efficiency of porous material were considered.

Firstly, a method to select important geometrical features of porous material to predict material properties of interest has been proposed, which is a combination of four feature selection techniques. Moreover, CFD-based analysis with emphasis on the new geometrical indices determined by the proposed method has been conducted to elucidate the relevant transport phenomena induced by the new features. For both the permeability and filtration efficiency, the proposed method identified new structural features that can detect peculiar and undesirable transport phenomena.

Secondly, a material discovery framework has been proposed to explore the materials with intended performance and their manufacturing recipes, which aims to accumulate the data on manufacturing recipes, structural features, and material properties by employing a genetic algorithm. The framework was applied to aerosol filter discovery. By analyzing the accumulated data, it was found that preferable material structures could be designed based on the evolution history data.

Finally, another material discovery methodology based on pore connectivity optimization has been developed. For a pore-throat network that is an approximated representation of pore space, the location and diameter of pores are fixed, while connectivity of pores (i.e., existence of throats) is changed, enabling to adjust pore connectivity with the same porosity and pore diameter (i.e., macroscopically same structure). The usefulness of the method was demonstrated through a material discovery for aerosol filter.

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note: Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).