

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)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

(博士課程)

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第	号	学位申請者氏名	保田 知輝	
		氏名	職名	氏名	職名
論文審査 審査員	主査	大川原 真一	特任教授	下山 裕介	教授
	審査員	吉川 史郎	准教授	松本 秀行	准教授
		山口 猛央	教授		
		多湖 輝興	教授		

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「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学と数値流体解析連携手法の構築」と題し、5章から構成されている。

第1章「緒論」では、情報科学的手法を用いた多孔体材料の特性評価や好適構造探索に関する最近の研究を概観し、多孔体の幾何学的特徴を定量的に表す無数の記述子から着目特性を相関するのに有用な記述子を選択する方法が確立されていないことを指摘している。また、好適構造探索結果の製造プロセスへの還元が考慮されていないなどの既往研究における問題点を明らかにしている。そのうえで、多孔体材料の特性評価および好適構造探索に資する手法を、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て構築することを本研究の目的とすることを述べている。また、本論文では、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により、提案手法の有用性を示すことが述べられている。

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相関する必要最小数の記述子を、多数の記述子から効率良く選択するために、四種の特徴選択法を逐次的に適用する手法が提案されている。さらに、新たに選択された非従来型の記述子と従来相関式に比して改善された相関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ている。多孔体の透過率および粒子捕集効率の相関に本手法を適用し、本手法がチャネリングや粒子漏れなど多孔体材料の欠陥を検知するのに有用な非従来型記述子を見出せることを示している。また、透過率の相関において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ている。

第3章「計算機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が提案されている。提案手法は、多孔体材料の製造条件を設計変数とし、それを、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、と逐次的に着目特性へ写像する目的関数を構成することで、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ものである。透過率と粒子捕集効率を目的関数として本手法を適用し、得られた Pareto 解と進化過程で淘汰された解を合わせて主成分分析を行うことで、23次元あった設計変数空間が2次元にまで縮約されることを示している。さらに、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が示されている。

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、多孔体構造を空孔と空孔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、多孔体材料の空孔接続性のみを変化させて着目特性を改善させようとする材料探索手法が提案されている。本手法では、空孔の位置と大きさを固定してスロートのみを繋ぎ変えた仮想ネットワークを無作為に生成し、それと等価な接続性をもつ多孔体の実構造を深層学習モデルによる画像変換で生成している。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、と逐次的に空孔スロートネットワークから着目特性へ写像する目的関数を構成することで、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が構築されている。第3章で得られた Pareto 解の1つに本手法を適用し、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が実証されている。

第5章「総括的結論」では、本研究で得られた成果を総括するとともに、今後の課題について言及している。

以上要するに、本論文は、多孔体材料の特性評価および好適構造の数値探索を、情報および数理学的手法と数値流体解析を連携しておこなう手法を提案している。着目特性を SVM で相関するための記述子選択法と、製造条件もしくは空孔接続性を説明変数とする多目的最適化手法を構築し、その有用性を透過率と粒子捕集効率を目的特性とする多孔体材料の数値探索において実証しており、工学上、工業上貢献するところが大きい。よって本論文は博士（工学）の学位論文として十分に価値あるものと認められる。

注意：「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチポジトリ (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。