

AIを用いた革新的実験計画法の提案： AI時代における実験計画法の在り方とは？

AIZOTH/ 産業技術総合研究所 河尻耕太郎*
東京理科大学 濱川 滉大
東京理科大学 早瀬 仁則
産業技術総合研究所 小阪 亮
産業技術総合研究所 西田 正浩

1. はじめに

本研究では、従来の実験計画法の枠組みに、近年発展しつつある人工知能（Artificial Intelligence: AI）の手法の一つであるニューラルネットワーク（Neural Network: NN）と、同じくAIの手法の一つである多目的遺伝的アルゴリズム（Multi Objective Genetic Algorithm: MOGA）を組合せ、多数の説明変数と多数の目的変数を有する複雑なシステムを、実験を通じて簡易に最適化する革新的実験計画法（Multi-Sigma）を提案する。本研究では、人工心臓のデザイン最適化を事例として、本手法の有効性を検証する。

実験計画法は、1920年代にR. A. Fisherによって体系化されてから現在にいたるまで、統計的な解析手法を用いることを前提に、体系が深化されてきた。例えば、田口は、統計における回帰分析を前提に、少ない実験回数で偏りなく実験結果を取得するため、直交表を用いた実験計画を提案し[1]、現在も品質管理を中心に様々な分野において広く活用されている。それらの過去の研究成果に

Proposal for advanced design of experiment using artificial intelligence: What is the design of experiment in the era of artificial intelligence?

Kotaro Kawajiri, Kodai Hamakawa, Masanori Hayase, Ryo Kosaka, Masahiro Nishida

よる社会への貢献は大きい。しかしながら近年では、NNを中心として、AIを用いた解析手法が急速に発展しつつあり、それらを実験計画法の枠組みに取り入れる価値は大きいように思われる。

例えば、従来の実験計画法では、重回帰分析を用いて目的変数を近似することが多いが、重回帰分析にはいくつかの課題が存在する。第1に、重回帰分析では、説明変数間で相関が大きいと、重回帰式の係数が正しく得られないことが知られている（Multi-collinearity）。そのため、事前に説明変数間の相関をチェックし、相関が大きい場合はどちらかの説明変数を削除する必要があるが、説明変数の数が増えると、その手間が飛躍的に増加する。その一方で、NNでは、説明変数間の相関が大きくても、モデルの作成が可能であり、事前に説明変数間の相関をチェックする必要がない。第2に、説明変数と目的変数の関係が複雑になると、単純な回帰式で近似することが困難になる。NNの場合、隠れ層の増加やニューロン数の増減で複雑なシステムを表現でき、モデルの表現能力が高く、柔軟である。第3に、従来の実験計画法では、直交表のように、回帰式と実験計画の作成方法が密接に結びついている。そのため、後から回帰式の修正が必要になった場合、実験計画の作成から実験、解析までの一連の作業を全てやり直さなければならない。NNの場合、モデルの作成は後から自由に行うことが出来るため、実験データさえ適切に取得できていれば、作業のやり直しは必要ない。以

上の通り、従来の重回帰分析をNNに代替することで、様々なメリットが得られる。

また、従来の実験計画法では、目的変数を最適化するための方法論については、検討の余地が大きい。単純な線形の重回帰式であれば、線形計画法が適用できるが、非線形の式には線形計画法は適用できない。また、目的変数が複数で、かつ目的変数同士がトレードオフの関係にある場合、線形計画法は適用できない。Kawajiri and Nishiyama (2006)は、従来の実験計画法とAIの手法の一つであるMOGAを組合せ、多入力多目的最適化法 (Multi-input and multi-objective optimization) の枠組みを提案した[2]。MOGAは、ヒューリスティックな手法であり、回帰式の代わりにNNを用いる場合にも適用可能である。

本研究では、過去に開発された多入力多目的最適化法の枠組みに、新たにNNを組み込み、多数の説明変数と多数の目的変数を有するシステムを、実験を通じて簡易に最適化することが出来る革新的実験計画法 (Multi-Sigma) の枠組みを開発した (図1) [3]。本手法により、多数の説明変数と多数の目的変数を有するあらゆるシステムを簡易に最適化することが可能である。特に、コストや品質など、トレードオフの関係にある多数の目的変数に対して、多数の説明変数を最適化することは、人間の手作業では困難であるため、本手法の有効性は高い。本手法の適用範囲は極めて広く、製品のデザインパラメータの最適化や製造プロセスの製造条件最適化など、あらゆる分野において、実験を通じた研究開発の効率を飛躍的に向上させるこ

とが可能である。本研究では、人工心臓のデザインパラメータの最適化にMulti-Sigmaの手法を適用した。

2. 手法

2.1 人工心臓

本研究で対象とした体外型補助ポンプは、産業技術総合研究所で開発中の動圧軸受遠心血液ポンプである (図2) [4]。本ポンプは、上面ケーシングと下面ケーシング、ケーシング内で回転して血液を送り出すインペラより構成されている。本血液ポンプは、中長期の心機能の補助循環を目的に血液適合性と耐久性の向上のため、非接触軸受である動圧軸受をインペラの上下面に採用している。しかし、動圧軸受を血液ポンプに採用する場合、インペラを浮上させる高い軸受剛性と赤血球破壊などが発生にくい血液適合性を同時に満たす形状は確立されておらず、試行錯誤で開発されている。

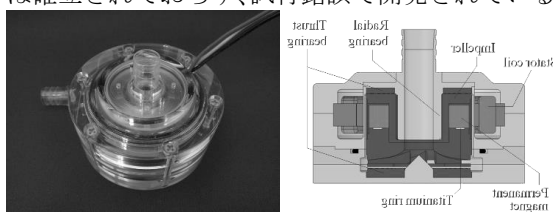


図2. 動圧軸受け遠心血液ポンプ [4]

そこで、上記の遠心血液ポンプの動圧軸受の形状を最適化するための説明変数として、下記4つのデザインパラメータと制御範囲を採用した。

- ・ 動圧溝本数 [本] : 3~18
- ・ 溝角度 [度] : 10~180

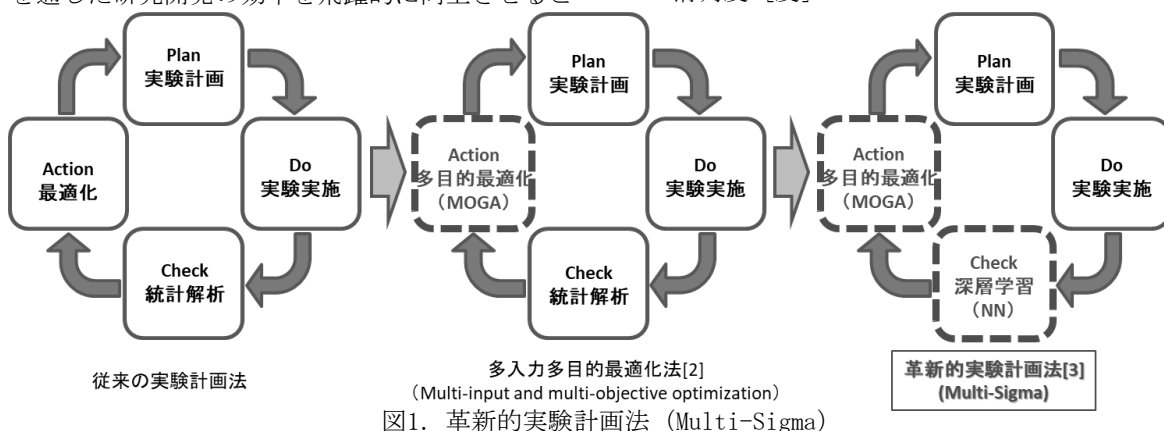


図1. 革新的実験計画法 (Multi-Sigma)

- ・ 溝入口深さ [mm] : 0.05~0.25
- ・ 溝出口深さ [mm] : 0.05~0.25

また、上記の動圧軸受を最適化するための目的変数として、下記2つのパラメータを採用した。軸スラスト力を最大化し、DI値を最小化するよう、前述の目的変数を最適化した。

- ・ 軸スラスト力 [N] : 遠心血液ポンプ中のインペラの浮上力。
- ・ 溶血指数 (DI値) [%] : 血液中の赤血球のダメージの大きさを示す (Giersipenの経験式)。

2.2 Plan (実験計画)

2.1で示されたの4つの説明変数の制御範囲において、乱数を用いて各説明変数の数値を決定し、58回の実験条件を作成した。

2.3 Do (実験実施)

本研究では、2.2で得られた得られた58回の実験条件に対して、CFDを用いて前述の2つの目的変数を算出した。CFDにおいては、最初に説明変数の数値を基に3次元CADソフト (SolidWorks2015、Dassault S. A.) を用いて動圧溝部の3次元モデルを作成し、熱流体解析ソフトウェア (STAR-CCM+12.02、Siemens PLM Software) を用いて計算格子を生成した後、得られた計算格子と所定の境界条件を基に数値解析を行った [4]。

2.4 Check (NN)

NNのハイパーパラメータの設定は下記の通りであり、2つの目的変数に対して最も誤差の小さいモデルを採用した。なお、モデルの誤差は、2.1で得られた58回の実験データを、学習データ50、テストデータ8に分けて検証した。

- ・ Epoch数 : 5000
- ・ 層数 : 3層 (入力、隠れ層1層、出力)
- ・ 隠れ層ニューロン数 : 4
- ・ Dropout : 0.1

- ・ Batch数 : 10
- ・ 活性化関数 : relu
- ・ 誤差関数 : MSE
- ・ 最適化関数 : Adam

2.5 Action (MOGA)

MOGAにおいては、スラスト力を最大化し、DI値を最小化するように、最適な4つの説明変数を探索した。なお、MOGAにおけるパラメータ設定は下記の通りである。

- ・ 世代数 : 10
- ・ 個体数 : 100
- ・ 交差率 : 0.6
- ・ 変異率 : 0.1
- ・ エリート率 : 0.2

3. 結果

NNにおけるテストデータに対する推計誤差は、スラスト力は±5%以内 (平均絶対誤差3%)、DI値は±15%以内 (平均絶対誤差6%) であった。前述のNNモデルを用いて、MOGAの解析を行った結果を図3に示す。図中の四角で示されたプロットは58回の実測値、丸がMOGAで探索された推計値、三角がMOGAで探索された最適解、バツがその検証値である。図の右下の方に行くほど、スラスト力が増加し、DI値が減少する。図より、スラスト力の最大化とDI値の最小化はトレードオフの関係にはなく、同時最適化が可能であることが示唆されている。

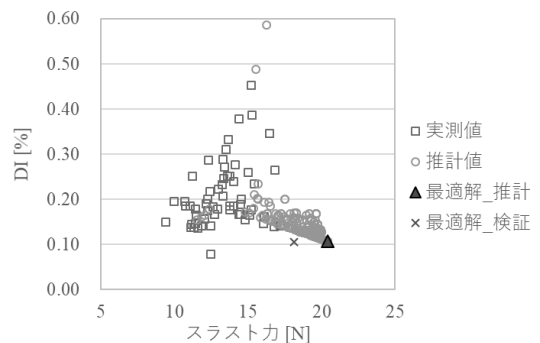


図3. MOGAの解析結果

MOGAによって探索された最適解の説明変数と目的変数の数値はそれぞれ下記の通りであり、括弧

中の数値はその検証値である。

説明変数：

- ・ 溝本数： 5本
- ・ 溝角度： 180度
- ・ 溝入口深さ：0.25mm
- ・ 溝出口深さ：0.06mm

目的変数：

- ・ スラスト力：20.4N (18.15N)
- ・ DI値： 0.1075% (0.105%)

前述の通り、今回の分析では、MOGAによって探索された最適なデザインと実測値では、DI値に対しての誤差は無いが、スラスト力では10%程度の誤差が生じている。

なお、学習データの中で、スラスト力が最大、DI値が最小となったときの組合せを表1に示す。今回探索された最適解と比較すると、DI値は学習データの最小値の方が若干小さいものの、スラスト力の最大化とDI値の最小化を同時に達成する解としては良好な数値が得られている。したがって、CFDを用いた検証ではあるものの、革新的実験計画法によって効率良く人工心臓の軸受性能を向上させることができた結論付けられる。

表1. 学習データにおける最適解

実験番号	スラスト力 [N]	DI値 [%]
48	17.18	0.141
30	12.46	0.079

なお、今回のような動圧軸受の場合は、溝本数は8~12本程度が一般的である。そのため、今回探索された最適解における溝本数が5本という数値は、従来の設計よりも小さい数値となっており、興味深い。今後は実際の装置を用いて実験を行い、今回の結果の妥当性を検証することが必要である。

4. まとめ

本研究では、従来の実験計画法の枠組みに、NN

とMOGAの二つの人工知能の手法を組合せた、革新的実験計画法を提案した。革新的実験計画法とCFDを用いて人工心臓のデザイン最適化を行い、その結果について再度実験を行って検証した。検証の結果、学習データと比べ、スラスト力とDI値を同時最適化するデザインが探索され、人工心臓の軸受性能が向上される可能性が示唆された。しかしながら、今回の結果はあくまでCFDを用いた実験の結果であるため、今後は、実際の人工心臓を用いて、今回得られた結果の検証を行うことが必要である。

なお、今回、実験計画は、乱数を用いて作成したが、その理由は二つある。第一の理由は、直交表は1次式、2次式程度の低次の近似式を前提としており、NNの表現力を活かすためには各説明変数に対して出来るだけ疎にならないデータを確保することが望ましい。第二の理由は、NNの精度が低い場合に、新たに学習データを追加する必要がある、直交表やその他の手法で実験条件を厳密に規定してしまうと、当初の実験条件の割り付け方法と整合性を保ちながらデータを逐次追加していくことが難しいためである。以上のとおり、従来の実験計画法は、統計的な手法を前提に体系が形作られている部分が大きく、今後AIを実験計画法に取り入れるためには、抜本的な部分から新たな枠組みを再構築する必要性を感じている。

参考文献：

- [1] 田口玄一、「第3版 実験計画法（上、下）」、2010、丸善出版社.
- [2] K. Kawajiri and H. Nishiyama, Thin Solid Films, vol.506-507, 2006, pp. 660-664.
- [3] AIZOTH Inc., <http://aizoth.com>
- [4] 濱川滉大他, 「動圧浮上遠心血液ポンプの軸受性能を推定可能なニューラルネットワークの構築」, 平成30年11月, 第57回日本人工臓器学会大会ポスター.