

データ駆動型の信頼性最適設計法の創始

Initiation of data-driven approach to reliability-based design optimization

東京大学 数理・情報教育研究センター 教授 寒野善博

(研究計画ないし研究手法の概略)

はじめに

構造物の最適設計（構造最適化）では、通常は、設計領域と荷重などの入力データが与えられ、応答に関するさまざまな制約の下で構造物の質量などの目的関数を最適化する（あるいは、構造物の質量の上限値の制約の下で、応答量の大きさなどを最小化する）。一方で、実世界の建築構造物には、最適設計で想定した荷重とは異なる荷重が作用し得る。また、構造物自体も、施工誤差や材料の強度のばらつき、経年劣化など、種々の不確実な要因を含んでいる。このため、入力データの不確かさを考慮しながら最適化を行うことが、現実には極めて重要である。

最適設計における不確実性の取り扱い方には、大別して、確率論的なモデルと非確率論的なモデルとの二つがある。確率論的なモデルでは、不確かなパラメータが従う確率分布を仮定する。そして、構造物が性能制約を満たす確率（これを、信頼性とよぶ）を指定して最適化を行うが、この方法論は信頼性最適設計とよばれる。一方、非確率論的なモデルでは、不確かなパラメータがとり得る値の範囲（これを、不確実性集合とよぶ）を仮定する。そして、不確実性集合の中の最悪値においても構造物が性能制約を満たすという条件の下で最適化を行うが、この方法論はロバスト最適設計とよばれる。ここで、信頼性最適設計では確率分布の仮定（設定）が、ロバスト最適設計では不確実性集合の仮定（設定）が、現実と合うという前提の下で構造物の安全性が保証されるということに、注意が必要である。

それでは、不確実性を表現している確率分布や不確実性集合は、どのように設定するのが適切なのであろうか。この研究課題は、「不確実性をデータから学習する」というアイデアから着想に至ったものである。

研究計画の概略

前述の目的を達成するために、次のアプローチで研究を実施する。

まず、計算力学や設計工学におけるデータ駆動型の手法を調査する。現在、さまざまな学問分野でデータ駆動型の方法論が急速に展開されている。たとえば、材料科学の分野では、アメリカのオバマ前大統領の重点施策の一つであった「マテリアルズ・ゲノム・イニシアティブ」を契機として、「マテリアルズ・インフォマティクス」とよばれるデータ駆動型の新材料開発の方法論が展開されている。このような潮流は、近年になって計算力学や設計工学にも広がりを見せているが、そのような最新の研究動向を調査する。

次に、確率密度関数の形や期待値、分散などが不確かな場合の信頼性最適設計法として、データ駆動型の手法を開発する。確率密度関数が不確かな場合には、構造物がもつ信頼性そのものも確率変数になる。通常の（つまり、確率密度関数が確定的であると仮定する）

信頼性最適設計法では構造物の信頼性のレベルを指定するが、信頼性そのものが確率変数である場合には指定されたレベルは確率的にしか満たされ得ない。つまり、指定されたレベルの信頼性が達成される「確信度」が、担保すべき構造性能となる。従来の研究では、期待値や分散の不確かさ（ばらつき）のモデルを仮定したり、確率分布として複数の型を仮定したりするなどの方法が考えられることが多かった。この研究課題では、不確かなパラメータのデータ（標本）が得られていることを仮定し、そのデータから確信度を達成するのに十分な不確実性集合を構成するという方法を採用する。これにより、信頼性最適設計法の形の定式化は、ロバスト最適設計法の形の定式化に変換される。ごく大雑把に言えば、ロバスト最適設計法では信頼性最適設計法よりもやや扱い易い（言い換えると、より多くの問題設定に対して現実的な計算コストで求解が可能である）という利点がある。

同時に、ロバスト最適設計法のさまざまな定式化について、調査および整理を行う。実は、構造物のロバスト最適設計法は、数理最適化の分野におけるロバスト最適化とはかなり独立して研究が行われてきたという経緯がある。このため、(数理最適化での意味での)ロバスト最適化とは異なる、さまざまな定式化がなされている。この研究課題で主に扱うのは数理最適化の意味でのロバスト最適化ではあるが、既往のさまざまな定式化を調査および整理することで提案手法の適用範囲に広がりをもたせることが期待できる。また、明確な整理を与えることは、最適設計の分野における学術的な貢献にもつながると期待される。

(実験調査によって得られた新しい知見)

計算力学や設計工学における、新しいデータ駆動型の手法の研究動向の調査結果は、「発表論文」の項の [K19] にまとめた。

計算力学においては、2016年に出版された Kirchdoerfer and Ortiz (2016) の論文が契機となって、多くの論文が発表されている。Kirchdoerfer and Ortiz (2016)では、固体力学の基礎となる「運動方程式（静的な問題では、力の釣合い条件）」、「運動学的条件（静的な問題では、ひずみと変位の適合条件）」、「材料構成則」の3つのうち、材料構成則のみが実験結果からの経験的なモデル化を要することを指摘した上で、この材料構成則のモデルの代わりに材料実験のデータを直接的に用いることを提案している。具体的には、「力の釣合い」と「適合条件」とを厳密に満たす「変位、ひずみ、応力」の3つ組のうち、材料実験のデータからの（ある意味での）距離が最小のものを解として出力することを提案している。ここで、データからの距離とは、ひずみと応力の空間において最も近くにあるデータ点までの距離と定義されている。このような文献 [KO16] の考え方以外にも、機械学習の分野で研究されてきた次元削減（多様体学習）の手法を材料実験のデータに適用する手法などが、この数年の間に提案されてきている。

設計工学においては、機械学習を応用することで最適設計の求解に要する時間を短縮する試みが、2018年頃から活発に行われるようになってきている。その多くに共通する考え方は、予めさまざまな設計条件に対して最適設計のアルゴリズムを適用して得られた結果をデータとしてもち、それらの最適解の特徴を機械学習により抽出することで、新たに与えられた設計条件に対して最適解に近いと考えられる設計解を（最適化の計算を経ることなく）出力する、というものである。たとえば、Lei, Liu, Du, Zhang, and Guo (2019) では、トポロジー最適化に既存の MMC (moving morphable components) とよばれるパラメータ

化を用いることで、最適解のメッシュをデータとする他の手法に比べて訓練データの次元を大幅に小さくできるとしている。その上で、訓練データに主成分分析を適用することでさらに次元を削減し、設計条件を説明変数とし最適解を目的変数とした回帰分析を適用することを提案している。

次に、データ駆動型の信頼性最適設計法に関する研究の成果は、「発表論文」の項の文献 [K20a] としてまとめた。

データ駆動型の信頼性最適設計法の一つに、順序統計量を用いるものがある。この方法では、まず、不確かなパラメータがある1つの確率分布に従うと仮定し、その確率分布から生じた標本が得られていると想定する。ただし、それがどのような確率分布であるかを推定することはしない。その代わりに、与えられた標本に対して順序統計量の理論を適用することで、指定された「信頼性の確信度」が達成される十分条件を満たすような不確実性集合を生成する。これにより、信頼性最適設計法の形の定式化を、ロバスト最適設計法の形の定式化に（保守的な近似という意味で）変換する。このようにして、確率分布に関する仮定（推定）を用いることなく、データ（標本）のみに基づいて構造物の信頼性の確信度を担保することができるというわけである。問題は、順序統計量に基づく十分条件は、しばしば保守的すぎるという点にあった。これに対して、この研究課題では、データ（標本）に対して主成分分析による次元削減を適用することで、この保守性を緩和する枠組みを提案した。また、トラスおよび連続体の剛性最大化（コンプライアンス最小化）問題において、外力の向きや大きさが不確かな場合を想定した具体的な設計問題に対して、この枠組みがどのように適用できるかを示した。さらに、計算機実験を行うことで、提案手法の有用性を実証した。

構造物のロバスト最適設計法のさまざまな定式化を調査および整理した結果は、「発表論文」の項の文献 [K20b] としてまとめた。

この研究では、さまざまな定式化は、大別して3つの基本的な考え方のいずれかに集約されることが明らかになった。すなわち、「最悪値の最適化」、「最悪値と公称値とのギャップの最小化」、「分散の最小化」の3つである。このうち、最悪値の最適化は、数理最適化の分野におけるロバスト最適化と同じ考え方である。文献 [K20a] の研究は、この考え方に基づくものである。一方、最悪値と公称値とのギャップの最小化については、ギャップと公称値の2目的の最適化を考えると、トレードオフにより、最悪値と公称値が同時に悪化し得ることを、数値例題を示すことで明らかにした。分散の最小化は、多くの文献では、構造物の応答量の（不確かなパラメータに関する）感度の2乗和の最小化という形で記述されている。この形に至るには、実は、応答量を（不確かなパラメータに関して）1次近似し、さらに不確かなパラメータが無相関の正規分布に従うという仮定をおく必要がある。実は、多くの文献では、この近似と仮定とが述べられることなく、感度の2乗和の定式化のみが天下りの提示されている。このため、この近似と仮定の妥当性についても、検討されてはいない。文献 [K20b] では、以上のことを明確に論じた。さらに、この他の定式化については、以上の3つの考え方のいずれかの亜種とみなすことができることを論じた。このような整理は、これまでさまざまな定式化が個々の文献で論じられてきたロバスト最適設計の分野において、特に新規に研究を始めようとする研究者のための指針となることが期待される。

以上のように、「研究計画の概略」で述べた3つの課題それぞれに対して、一定の研究

成果をあげた.

(発 表 論 文)

[K19] 寒野 善博: データ科学を支える最適化の動向. 2019年度日本建築学会大会(北陸)・構造部門(応用力学)パネルディスカッション資料『最適化・AI手法で構造設計は変わるのか?』, pp.10-16 (2019).

[K20a] Y. Kanno: Dimensionality reduction enhances data-driven reliability-based design optimizer. *Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing*, **14**, 19-00200 (2020). DOI: 10.1299/jamdsm.2020jamdsm0008

[K20b] Y. Kanno: On three concepts in robust design optimization: absolute robustness, relative robustness, and less variance. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, to appear. DOI:10.1007/s00158-020-02503-9