

ガウス過程回帰を用いたラチスシェルの形状最適化に関する基礎的研究

Fundamental Study on Shape Optimization of Reticulated Shell Using Gaussian Process Regression

○松原 大悟*¹, 瀧内 雄二*², 中澤 祥二*³
Daigo MATSUBARA *¹, Yuji TAKIUCHI *² and Shoji NAKAZAWA *³

*1 豊橋技術科学大学 大学院生

Graduate Student, Toyohashi University of Technology

*2 豊橋技術科学大学 助教 博士(工学)

Assistant Professor, Toyohashi University of Technology, Dr.Eng.

*3 豊橋技術科学大学 教授 博士(工学)

Professor, Toyohashi University of Technology, Dr.Eng.

キーワード：ガウス過程回帰；構造最適化；ラチスシェル；ベイズ最適化；NURBS 曲線；機械学習

Keywords: Gaussian process regression; structural optimization; reticulated shell; bayesian optimization; NURBS curve; machine learning.

1. はじめに

近年、施工技術の発達により、意匠性に富んだ複雑な形状のラチスシェルが多く計画されている。ラチスシェルには、外力を主に面内力で支持部まで伝達する力学特性があり、構造的に合理的な形状の探索が重要となる。これまで、シェル構造の最適化に関する様々な研究¹⁾²⁾が行われており、力学的な合理性のみならず、意匠性や施工性を目的関数に取った最適化手法も提案されている。

力学的な合理性を測る指標に注目すると、ひずみエネルギーがよく利用されている。一方で、ラチスシェルは座屈荷重が設計上重要となるため、非線形座屈荷重の最大化や弾塑性座屈荷重の推定値の最大化も提案されている。大規模なラチスシェルの構造設計では弾塑性座屈解析や弾塑性地震応答解析を利用して安全性を確認する。このため、非線形解析の結果を目的関数に利用することができれば有用であると考えられる。しかし、非線形解析は線形解析に比べて解析時間がかかる場合が多い。最適化計算では目的関数の値を繰り返し計算するため、1回の目的関数の計算に時間がかかる場合は、最適な形態を獲得するまでに膨大な時間を要するという問題点がある。このため、非線形解析の結果を利用する最適化は、少ない解析回数で行うことが望まれる。

一方で、近年では機械学習の研究が建築分野でも進められ大量のデータを有した研究もある。例えば Zhu ら³⁾は大量の座屈解析の結果を集めて、機械学習により弾塑性座屈荷重の推定を行っている。また、瀧内ら⁴⁾はシェルの振動性状のデータベースを構築し分析している。このようなデータベースが社会的に整備されれば、最適化を実施する上で、データベースを利用した最適化手法も考えられる。

そこで本研究では、少ない解析回数で最適解を探索するベイズ最適化と、大量のデータから近似形状（応答曲面）を生成して最適解を探索する手法を構造最適化問題に適用し、その有用性を検討することを目的とする。本研究では、一例としてラチスシェルの形状を設計変数とし、固定荷重によるひずみエネルギーの最小化を目的関数とする。

2. ベイズ最適化の概要

2.1. ベイズ最適化の流れ

ベイズ最適化⁵⁾は少ないデータから目的関数 f を近似する関数 f^* をモデル化し効率的に最適値を求める手法である。ベイズ最適化では以下の手続きを行う。

step1: データを基に f をモデル化し近似関数 f^* を作成する。

step2: f^* を基に、次に探索する点 x^* を計算する。

step3: $f(x^*)$ を計算し、 f^* を更新する。

step4: step2, 3 を所定の回数繰り返し、終了する。

本研究では目的関数のモデル化には次節で説明するガウス過程回帰を用いる。ガウス過程回帰では任意の x に対する目的関数の期待値 f^* と標準偏差 σ^* が計算される。この性質を利用し、2.3 節に示す獲得関数が最大となる点を次に探索する候補点として決定する。

ここでは例として、図1の1変数関数 f をベイズ最適化により最小化する問題を考える。図1(a)の●印は f により求めた観測値である。 $x=0$ から0.5付近は σ^* が小さく、回帰関数の精度が良い。一方で $x < -1$ や $x > 1$ の範囲は σ^* が大きく、十分に回帰が行えていない。ベイズ最適化では f^* の不確実性を考慮して獲得関数を計算し、獲得関数が最大

となる図 1(a)の□の点を次のステップの観測点 x^* とする。 $f(x^*)$ が計算され、 f^*, σ^* が更新される。(a)と(b)を比較すると $x = 1$ 付近の σ^* が小さくなるのがわかる。同様のことを繰り返し、 f^* の精度を上昇させながら最良解を探索する。

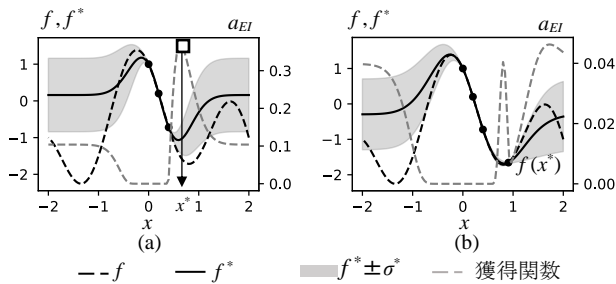


図 1 ベイズ最適化の流れ

2.2. ガウス過程回帰による目的関数のモデル化

ガウス過程回帰は M 個のデータ (x_i, y_i) , $(i = 1, 2, \dots, M)$ が与えられたとき、新しい $M+1$ 個目のデータ x_{M+1} に対して、事前分布から事後確率を求めるベイズ確率を利用して y_{M+1} を求める手法である。 $\mathbf{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_M\}^T$ に対し、 $\mathbf{y} = \{y_1, y_2, \dots, y_M\}^T$ の同時分布 $p(\mathbf{y}|\mathbf{X})$ が式(1)のように多変量ガウス分布に従うと仮定する。

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{K}) \quad (1)$$

ここで $N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{K})$ は平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$ 、共分散行列 \mathbf{K} の多変量ガウス分布を表す。 \mathbf{K} の i 行 j 列要素はカーネル関数 $k(x_i, x_j)$ を用いて計算する。任意の x_{M+1} に対する y_{M+1} の値は事後確率として式(2)、(3)により、その期待値 f^* と分散 σ^* を求めることができる。 \mathbf{k}^* は \mathbf{X} と x_{M+1} から計算される \mathbf{K} の i 行 $M+1$ 列要素であり、 M 次のベクトルである。

$$f^* = E[y_{M+1} | x_{M+1}, (\mathbf{X}, \mathbf{y})] = \mathbf{k}^{*T} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \sigma^{2*} &= \sigma^2(y_{M+1} | x_{M+1}, (\mathbf{X}, \mathbf{y})) \\ &= k(x_{M+1}, x_{M+1}) - \mathbf{k}^{*T} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}^* \end{aligned} \quad (3)$$

$$\mathbf{k}^* = \left\{ \begin{array}{c} k(x_1, x_{M+1}), k(x_2, x_{M+1}), \\ \dots, k(x_M, x_{M+1}) \end{array} \right\}^T$$

2.3. 獲得関数

本研究では式(4)~(6)に示すベイズ最適化でよく利用される、期待改善度 EI、改善確率 PI、信頼性下限関数 LCB の 3 種類の獲得関数を用いる。

$$\text{EI: } a_{EI} = (f^+ - f^*(\mathbf{x}))\Phi(Z) + \sigma^*(\mathbf{x})\phi(Z) \quad (4)$$

$$Z = \frac{f^+ - f^*(\mathbf{x})}{\sigma^*(\mathbf{x})}$$

$$\text{PI: } a_{PI} = P(f(\mathbf{x}) \leq f^+) = \Phi\left(\frac{f^+ - f^*(\mathbf{x})}{\sigma^*(\mathbf{x})}\right) \quad (5)$$

$$\text{LCB: } a_{LCB} = f^*(\mathbf{x}) - \alpha \sigma^*(\mathbf{x}), \alpha = \sqrt{\frac{\log R}{R}} \quad R: \text{データ数} \quad (6)$$

ここで Φ, ϕ は正規分布の累積分布関数と確率密度関数で

あり、 f^+ はその解析 step までの目的関数の最小値である。ベイズ最適化はガウス過程により f^* の事後確率の期待値と標準偏差を考慮し、次のステップで計算する点を探索する。

3. 解析条件

3.1. 解析モデル

解析モデルを図 2(a)に示す。解析モデルはスパン 50m x 50m の矩形平面を有するラチスシェルであり、支持条件は 4 隅の 3 節点をピン支持とする。部材は鋼管を想定し、接合部は剛接合とする。部材のヤング係数 E を 205,000N/mm²、降伏応力度 $\sigma_y = 235$ N/mm² とする。X 軸、Y 軸と平行の部材を格子材、その他の部材を斜材とし、断面諸元を表 1 にまとめる。

荷重条件は比較的扁平なシェルを想定し、水平投影面積当たり 1.0kN/m² の荷重を固定荷重として作用させる。

本研究ではより少ない変数で多様なシェル形状を表現するために、3x3 次の NURBS 曲面を利用する。NURBS 曲面上の任意の点 $\mathbf{C}(u, v)$ は二つの媒介変数 $u, v(0 \leq u, v \leq 1)$ により式(7)で表される。

$$\mathbf{C}(u, v) = \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m (N_{i,k}(u) M_{j,l}(v) w_{ij} \mathbf{P}_{ij})}{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m (N_{i,k}(u) M_{j,l}(v) w_{ij})} \quad (7)$$

式中の $N_{i,k}(u)$, $M_{j,l}(v)$ は NURBS 基底関数である。 $\mathbf{P}_{ij} = \{P_{Xij}, P_{Yij}, P_{Zij}\}^T$ は制御点座標、 w_{ij} は重み係数であり本研究ではすべての w_{ij} は 1.0 とする。

形状最適化解析では制御点 \mathbf{P}_{ij} の高さ方向成分 P_{Zij} を設計変数とする。なお、形状の対称性を考慮し、図 2(b)の●印の 9 個の P_{Zij} を設計変数として考慮する。形状最適化解析においてライズが極めて高くなることを避けるために、本研究では設計変数の範囲は $0 \leq P_{Zij} \leq 10$ m とした。

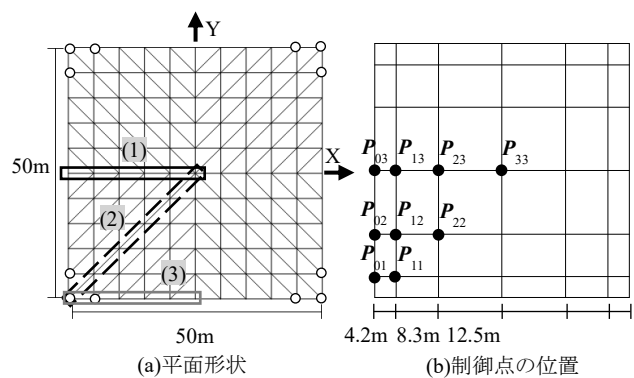


図 2 解析モデル

表 1 部材断面諸元

部材	λ	d	t	D	A	I_y
格子材	40	353.6	7.9	361.5	87.75	13710
斜材	70	285.7	9.0	294.7	80.78	8243

λ : 細長比 d : 管厚中心径[mm] t : 管厚[mm] D : 外径[mm]

A : 断面積[cm²] I_y : 断面 2 次モーメント[cm⁴]

3.2. 最適化解析の条件

本研究は、ベイズ最適化と応答曲面を用いた最適化によって式(8)に示すひずみエネルギーを最小化する。

$$\text{to minimize } f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{D}^T \mathbf{S} \mathbf{D} \quad (8)$$

ここで、 \mathbf{D} は変位ベクトル、 \mathbf{S} は剛性マトリクスである。ひずみエネルギーの最小化では勾配法を用いた研究事例が数多く報告されている。本研究は基礎的段階として、ベイズ最適化と応答曲面を用いた最適化の有効性を確認するために、勾配法の1種である L-BFGS-B 法と結果を比較する。なお、ベイズ最適化と応答曲面を用いた最適化は目的関数の勾配を必要としない。非線形解析の結果など高コストな目的関数を用いた最適化は今後の課題とする。

ガウス過程回帰は数値解析ライブラリの Scikit-learn を用いて行う。なお、ガウス過程回帰ではひずみエネルギーの対数を取って正規化したデータを利用する。また、カーネル関数は予備解析の結果より精度が最もよかった Matern5/2 カーネル⁹⁾を用いる。

手法 A (ベイズ最適化) : ベイズ最適化では、獲得関数として EI, PI, LCB の3種類を考慮しそれぞれ解析を行う。ベイズ最適化は与えられたデータによって回帰関数の形が変わるため、初期値を変えて各5回解析を行う。初期値は乱数により10個与え、解析 step 数は1000とする。

手法 B (応答曲面を用いた最適化) : 一様分布の乱数より生成した5000個の構造データから応答曲面を回帰し、回帰値の最小値を求める。この方法はベイズ最適化とは異なり回帰関数の更新を行わない。また、蓄積された構造物のデータを有効に利用できる手法である。

手法 C (L-BFGS-B 法) : 手法 A と手法 B の解析結果を評価するため、変数の上下限の制約条件を考慮できる準ニュートン法である L-BFGS-B 法を利用する。計算には数値解析ライブラリの Scipy を用いる。探索開始点はベイズ最適化の初期値と同様に乱数により与える。収束判定定数は $\epsilon = 1.0 \times 10^{-3}$ とする。

4. 解析結果

4.1. ひずみエネルギーの値

表2に各手法で得られたひずみエネルギーの最良解の結果と5回の解析結果の平均値 μ と標準偏差 σ を示す。ベイズ最適化(LCB)と応答曲面を用いた最適化によって得られたひずみエネルギーの値は、L-BFGS-B 法によって得られた値よりも平均値で1.3倍程度大きい。ベイズ最適化での獲得関数ごとの解析結果の違いに注目すると、どの初期値でも LCB が最小値を探索することがわかる。また、標準偏差も LCB の結果が最も小さい。ベイズ最適化(LCB)と応答曲面を用いた最適化の結果を比較すると、平均値では応答曲面を用いた最適化が優れているが、最良解はベイズ最適化(LCB)のほうが優れている。

図3にベイズ最適化(LCB)における目的関数の推移を示す。グラフの横軸は解析 step である。250step までに $\log_{10}(f)$ が7.0程度に収束していることがわかる。

表2 ひずみエネルギーの値[kNm]

手法	A			B	C
	EI	PI	LCB		
乱数 1	20.081	15.936	9.547	9.193	7.565
乱数 2	31.842	21.363	8.911		7.240
乱数 3	25.419	22.521	9.283		7.469
乱数 4	22.147	20.040	10.430		7.216
乱数 5	17.339	17.339	8.362		7.240
μ	23.365	19.44	9.307	-	7.346
σ	4.993	2.459	0.688	-	0.143

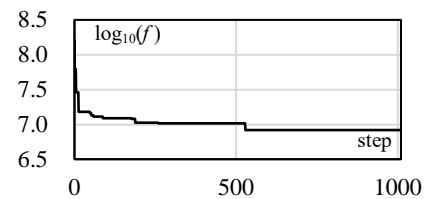


図3 目的関数の推移(LCB, 乱数 5)

4.2. 最良形状

各手法で得られた最良形状を図4に示す。どの手法でも、中心部が高く、外周部と斜材方向にアーチ構造が形成される形状が探索される。図2(a)に示す断面での、各手法の最良形状の節点の高さ分布を図5に示す。断面1ではシェル中央の $X = 0$ 付近で各形状の高さの違いは小さいが、外周部に向かうにつれて節点高さの差が大きくなる。断面2ではどの形状も同様の高さ分布である。断面3での最高高さは、L-BFGS-B 法によって求めた形状が最も高く、次にベイズ最適化(LCB)、応答曲面を用いた最適化によって求められた形状の順である。この順番はひずみエネルギーが小さい順番であり、外周部の高さの差がひずみエネルギーの差に影響していると考えられる。

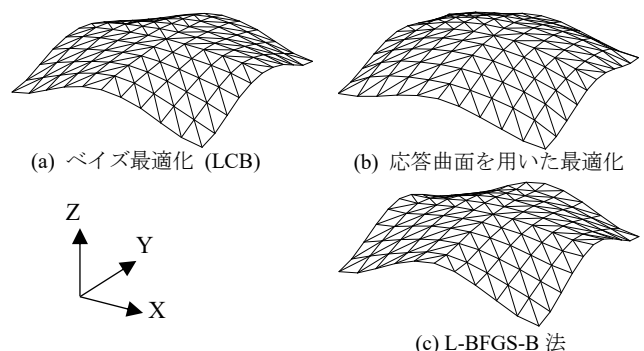


図4 各手法の最良形状

図6に最良形状の各断面での固定荷重作用時における軸応力分布を示す。3個の形状の軸応力分布は似た性状となっていることがわかる。また、どの形状も曲げモーメントの発生が小さいことを確認している。

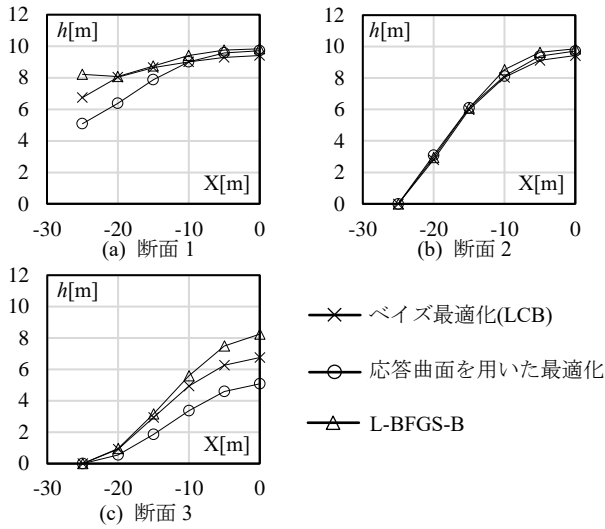


図5 各最良形状の節点高さ

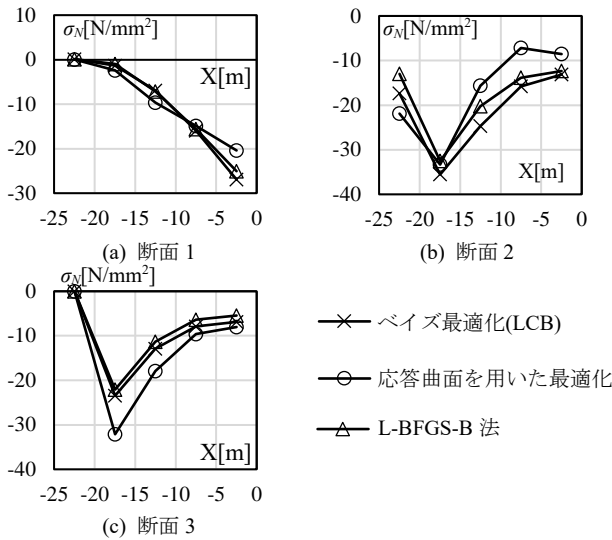


図6 各最良形状の軸応力

4.3. 最良解とデータの関係

ベイズ最適化による最良解を \mathbf{x}_{BO} , ベイズ最適化で探索されたデータを \mathbf{x}_{BO} , 応答曲面を用いた最適化による最良解を \mathbf{x}_{RS} , 構造データの j 番目のデータを \mathbf{x} とし式(9)のように書く。最良解とすべてのデータの距離 iD_{BO}, jD_{RS} を式(10), (11)のように計算する。

$$\mathbf{x}_{BO} = \{P_{BO1z}, P_{BO2z}, \dots, P_{BO9z}\}^T, \mathbf{x}_{BO} = \{iP_{1z}, iP_{2z}, \dots, iP_{9z}\}^T \quad (9)$$

$$\mathbf{x}_{RS} = \{P_{RS1z}, P_{RS2z}, \dots, P_{RS9z}\}^T, \mathbf{x} = \{jP_{1z}, jP_{2z}, \dots, jP_{9z}\}^T \quad (10)$$

$$iD_{BO}(\mathbf{x}_{BO}, \mathbf{x}_{BO}) = \sqrt{(P_{BO1z} - iP_{1z})^2 + (P_{BO2z} - iP_{2z})^2 + \dots + (P_{BO9z} - iP_{9z})^2} \quad (10)$$

$$jD_{RS}(\mathbf{x}_{RS}, \mathbf{x}) = \sqrt{(P_{1z} - jP_{1z})^2 + (P_{2z} - jP_{2z})^2 + \dots + (P_{9z} - jP_{9z})^2} \quad (11)$$

図7に D_{BO} , D_{RS} の分布のヒストグラムを示す。 D_{RS} は構造データを一様分布の乱数により生成しているため、正規分布になっている。 D_{BO} は最良解から 0.6m-0.8m の範囲が最も多く、 D_{RS} は最良解から 1.2m-1.4m の範囲が最も多い。

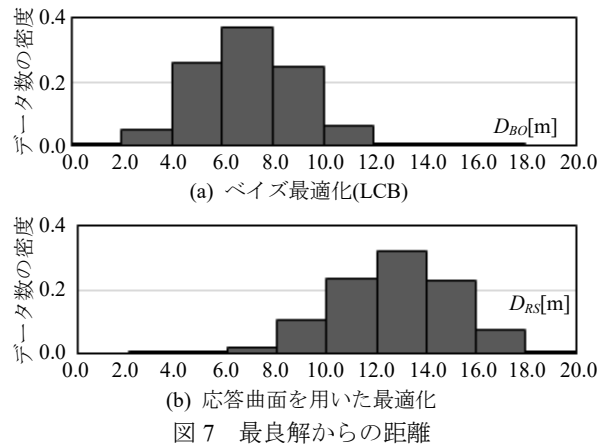


図7 最良解からの距離

これより、ベイズ最適化は応答曲面を用いた最適化よりも最良解に近い範囲のデータが多く、効率よく最良解を探索していることがわかる。

5. まとめ

本研究ではベイズ最適化と応答曲面を用いた最適化をラチスシェル形状最適化問題に適用した。以下に得られた結論を示す。

- (1) ベイズ最適化と応答曲面を用いた最適化によるひずみエネルギーの最小値は L-BFGS-B 法に比べて 1.2~1.4 倍程度となった。得られた形状は概ねすべて同じ形状となり、ベイズ最適化と応答曲面を用いた最適化の有効性が確認できる。
- (2) ベイズ最適化は獲得関数や初期値によってばらつきがあるが、応答曲面を直接最小化するより、少ない解析回数で、ひずみエネルギーが小さい結果が得られる。

今後は解析 step や初期データの個数と最適化の精度の関係性を分析することに加え、弾塑性地震応答解析など1回の計算コストが大きい問題に対しても検討を行う。

【参考文献】

- 1) 浜田英明, 大森博司: 設計者の選好と力学的合理性を勘案した自由曲面シェル構造の構造形態創生法の提案 その1 多目的遺伝的アルゴリズムによる発見的手法, 日本建築学会構造系論文集 Vol.71, No.609, pp.105-111, 2006.11
- 2) 山本憲司, 皆川洋一, 大森博司: 座屈荷重を目的関数とする空間構造の形状最適化に関する研究, 日本建築学会構造系論文集, No.564, pp.95-102, 2003.2
- 3) S. Zhu, M. Ohsaki, and X. Guo. Prediction of non-linear buckling load of imperfect reticulated shell using modified consistent imperfection and machine learning. Engineering Structures, Volume 226, 2021.1
- 4) 瀧内雄二, 中澤祥二, 東山佑生, 加藤史郎: 振動データベースの分析に基づいた単層ラチスシェルの静的地震荷重に関する基礎的研究 その1 振動データベースの構築, 日本建築学会大会学術講演梗概集, pp.653-654, 2021.9
- 5) J. Snoek, H. Larochelle, and R. Adams. Practical Bayesian optimization of machine learning algorithms. Advances in Neural Information Processing Systems 25, pp.2960-2968, 2012