古典コンピューティングによる構造解析と量子アニーリングによる断面変 化を組み合わせた平面トラスの位相最適化

Topology Optimization of Plane Trusses combining Structural Analysis by Classical Computing and Cross-section Change by Quantum Annealing

○林 和希*1, 大崎 純*2 Kazuki HAYASHI*1 and Makoto OHSAKI*2

*1 京都大学大学院工学研究科 助教 工博

Assistant Professor, Graduate School of Engineering, Kyoto University, Ph.D.

*2 京都大学大学院工学研究科 教授 工博

Professor, Graduate School of Engineering, Kyoto University, Ph.D.

キーワード: トラス; 構造最適化; 離散断面最適化; 量子コンピューティング; 量子アニーリング

Keywords: Truss; structural optimization; discrete cross-section optimization; quantum computing; quantum annealing.

1. 序

トラス構造の位相最適化では、与えられた節点や支持・荷重条件から、制約を満たしつつ目的関数を最小化(最大化)する部材の接続関係を探索する. その最適化手法としては、密な部材配置から不要な部材を除去するグランドストラクチャ(GS)法 いがよく知られているが、初期 GS の節点・部材数が膨大だと局所解から抜け出すことが困難となる.

近年,量子力学的な現象を用いて古典コンピュータよりも高速に最適化問題を解くための量子コンピュータの研究が盛んに行われている。古典コンピュータでは、あるビットは0または1の値をとり、他のビット値に影響を与えることはない。これに対し、量子コンピュータでは0と1の重ね合わせ状態を許容し、さらに量子もつれによって複数のビットが相互作用する状態を作り出せる.

量子コンピュータには主に量子ゲート式と量子アニーリング式の2種類が存在し、前者は計算理論や量子計算を駆使したアルゴリズムなどのソフトウェア、量子回路を実現するためのハードウェアの両側面から多くの研究がなされているものの、一つの量子計算を行うために利用できる量子ビットの数は、現状では非常に少ない、一方で、量子アニーリングは組合せ最適化問題を解くのに特化しており、その適用可能範囲は限定的であるものの、量子ゲート式と比べて遥かに多くの量子ビットを扱える²⁾、本田ら³は量子アニーリングのみを用いて釣合い計算と断面変化を交互に行う手法を提案した.

本研究では、平面トラスの位相最適化問題に対して、 古典コンピューティングによる構造解析と量子アニーリングによる断面変化を組み合わせたハイブリッド型の新 しい最適化手法を提案する.

2. 最適化問題

トラスの部材数をmとする。本研究では、部材総体積の制約下で単一荷重条件に対するトラス部材の総ひずみエネルギーの最小化を目的として部材断面積 $\mathbf{A} = \{A_i, \cdots, A_m\}$ を最適化する問題を考える。ヤング係数Eは部材によらず一定値とする。部材総体積・部材断面積の上限値をそれぞれ \bar{V} , \bar{A}_{\max} ,部材iの断面積、部材長、伸びをそれぞれ A_i , L_i , d_i とすると、最適化問題は次式で定式化できる。

minimize
$$F(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{m} \frac{EA_i}{2L_i} d_i^2$$
 (1a)

subject to
$$\sum_{i=1}^{m} A_i L_i \leq \overline{V}$$
 (1b)

$$0 \le A_i \le \overline{A}_{\max} \ (i = 1, \dots, m) \tag{1c}$$

3. QUBO 表現による最適化問題の再定式化

量子アニーリングで最適化を行うためには、対象とする問題を 0 または 1 の値をとるバイナリ変数の 2 次式で記述したハミルトニアンを最小化する制約なしの最適化 (QUBO: Quadratic Unconstrained Binary Optimization) 問題として定式化する必要がある. ハミルトニアンは変数間の相互作用を考慮したエネルギーを表しており、最小化すべき目的関数と捉えても良い. 以降では、最適化問題(1)を QUBO 表現で再定式化する.

3.1. バイナリ変数による離散断面積の数値表現

1 つの部材の断面積は n_a 個のバイナリ変数を用いて次式で表現できる 3 .

$$A_{i} = A_{\text{max}} \frac{\sum_{j=1}^{n_{a}} 2^{j-1} q_{j}}{\sum_{i=1}^{n_{a}} 2^{j-1}}$$
 (2)

例えば、 $n_a = 3$ 、 $A_{max} = 35$ のとき、断面積 A_i は表 1 のように 5 刻みの離散変数として表現できる。 n_a

表 1 3 つのバイナリ変数による断面積 A_i (\leq 35)の表現

q_{3i+1}	q_{3i+2}	q_{3i+3}	A_{i}
0	0	0	0
1	0	0	5
0	1	0	10
1	1	0	15
0	0	1	20
1	0	1	25
0	1	1	30
1	1	1	35

3.2. ひずみエネルギーに対応するハミルトニアン

ある断面積において外力と釣合う部材iの伸び d_i が既知であるとすると、ひずみエネルギーに相当するハミルトニアン H_1 は式(1a)より、次式で表せる.

$$H_1(\mathbf{q}) = -\sum_{i=1}^m \frac{Ed_i^2}{2L_i} A_i(\mathbf{q})$$
 (3)

ここで式(la)と正負が逆転しているのは、量子アニーリングにおける最適化過程では釣合い解析を行うことなく断面積を変化させるため、変位を既知としたひずみエネルギー最大化問題に置換する必要があるからである。釣合いを満足した上でひずみエネルギーを最小化するのも、変位のみを既知としてひずみエネルギーを最大化するのも、最小ポテンシャルエネルギーの最大化問題を解いているという意味では同義である。

3.3. 部材総体積制約に対応するハミルトニアン

トラスの部材総体積が指定値 \bar{V} に近いほど値が小さくなるようなペナルティ関数として、以下のハミルトニアンを定義する.

$$H_2(\mathbf{q}) = \left(\sum_{i=1}^m \left(L_i A_i(\mathbf{q})\right) - \overline{V}\right)^2 \tag{4}$$

3.4. 断面積の変化量制限に対応するハミルトニアン

量子アニーリングにおいて断面積を変化させる過程では釣合い解析を行わないため、断面積を大きく変化させることは変位と断面積の関係を無視することを意味する. したがって、変位と断面積の関係が可能な限り保存されるように断面積の変化量を制限するための以下のハミルトニアンを定義する.

$$H_3(\mathbf{q}) = \sum_{i=1}^{m} \left(A_i(\mathbf{q}) - \overline{A}_i \right)^2 \tag{5}$$

ここで \bar{A}_i は最適化前の部材iの断面積を表し、最適化途中では変化しない定数である.

3.5. ハミルトニアンの重み付き線形和

3.2-3.4 節で定義した 3 つのハミルトニアンを重み付け するパラメータ w_1, w_2, w_3 (>0)を用いて、量子アニーリングで最小化するハミルトニアンを次式で定式化する.

$$H = \frac{w_1}{F_{\text{init}}} H_1 + \frac{w_2}{\overline{V}^2} H_2 + \frac{w_3}{\sum_{i=1}^{m} \overline{A}_i^2} H_3$$
 (6)

 F_{init} は初期断面積におけるひずみエネルギーの総和である. $w_1 = w_2 = w_3 = 1$ かつ最適化前後の断面積がいずれも初期断面積と等しい場合,式(6)の右辺の各項の値はそれぞれ-1, 1,1 になるようにスケーリングしている. さらに w_1, w_2, w_3 の値を調整することで,各項の重要度を重み付けすることができる.

3.6. 量子アニーリングによる最適化手順

本研究では、古典コンピューティングによる構造解析 と量子アニーリングによる断面積の最適化を交互に行う 手法を提案する.以下に手順を説明する.

① 古典コンピューティングによる構造解析

断面積 A を割り当てたトラスについて与えられた荷重条件で剛性方程式を解いて各節点の変位を求め、節点変位から部材の伸び d_i を計算する. ただし、剛性方程式の解が不定となるのを防ぐため、 $A_i=0$ の断面積については便宜上 $A_i=0.001$ に置換して解析を行う. その後、得られた d_i を $d_i=0$ に置き換える.

② 量子アニーリングによる断面積の更新

続いて、ハミルトニアンH をA の関数、さらに 3.1 節の手順で \mathbf{q} の関数として次式で定義する.

$$H = \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{Q} \mathbf{A} + \mathbf{L}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} + c$$

$$= \mathbf{q}^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{Q}} \mathbf{q} + \tilde{\mathbf{L}}^{\mathrm{T}} \mathbf{q} + c$$
(7)

 $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\tilde{\mathbf{Q}} \in \mathbb{R}^{n_a m \times n_a m}$ は式(6)の 2 次の項に関する係数, $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^m$, $\tilde{\mathbf{L}} \in \mathbb{R}^{n_a m}$ は式(6)の 1 次の項に関する係数,c は式(6)の定数項である.このハミルトニアンを用いて量子アニーリング問題を解き,量子ビットの重ね合わせ状態を得る.

なお、手順①において消失部材に対して $d_i=0$ を割り当てずに②の手順に進むと、式(3)のハミルトニアン H_1 における $A_i=0$ の部材の寄与を過大に推定してしまい、最適化前は $A_i=0$ だった部材の断面積が A_{\max} に飛び移る不安定な挙動が見られた.

③ 古典コンピューティングによる優良解の再評価

②で得られた重ね合わせ状態について、具体的な \mathbf{q} の値を $\mathbf{n}_{\mathbf{r}}$ 回読み取り、 $\mathbf{n}_{\mathbf{r}}$ 個の解からハミルトニアンの最も小さな $\mathbf{n}_{\mathbf{r}}$ 個の解 \mathbf{q} を抽出する、それぞれを断面積 \mathbf{A} に変

報告 H02 - - 125 -

換して古典的なコンピューティングにより構造解析を行って総ひずみエネルギーFを計算し、以下の評価値が最も小さなAをn。種類の解の中で最も優良な解とする.

$$\frac{w_1}{F_{\text{init}}}F + \frac{w_2}{\overline{V}^2}H_2 \tag{8}$$

式(8)で計算する総ひずみエネルギーFは H_1 とは異なり 釣合いを考慮しているため、式(9)のように断面積の変化 量に対するペナルティ項 H_3 を考慮する必要はない.

①から③までの手順を 1 回行う過程を 1 ステップとする. 1 ステップだけ最適化を行っても 3.4 節で述べた理由により断面積の変化は小さいため,① \rightarrow ② \rightarrow ③ \rightarrow ① $\rightarrow\cdots$ のように上記の手順を n_1 ステップ繰り返すことで構造最適化を行う.

4. 数值例題

4.1. 解析条件

本研究では、 $A_{\max}=75\,[\mathrm{mm}^2]$ かつ $n_{\mathrm{a}}=4$ とし、合計 4m 個のバイナリ変数 $\mathbf{q}=\{q_1,\cdots q_{4m}\}$ を用いて $75\mathrm{mm}^2$ までの断面積 \mathbf{A} を 5 mm^2 刻みで表現する。初期断面積は 15 mm^2 とし、ヤング係数は 5 $\mathrm{N/mm}^2$ とする。部材断面積の上限値 \overline{V} は初期断面積におけるトラスの部材総体積とする。ひずみエネルギー、部材総体積制約、部材断面積の変化量制限に対応する重み付けパラメータはそれぞれ $w_1=1$ 、 $w_2=1$ 、 $w_3=5$ とする。重ね合わせ状態の読み取り回数 n_{r} は 1000、読み取った解のうち、再評価する優良解の個数 n_{e} は 5 とする。ステップの繰り返し回数 n_{l} は 30 とする。

節点変位と部材の伸びを求めるための線形構造解析には自作のプログラムを用いる. 量子アニーリングには D-Wave Systems Inc.が提供するクラウドサービス Leap⁴⁾を用いる.

4.2. 例題 1: 1×1 グリッドトラス

提案手法が正しく動作することを確認するため、まず 図1のような1×1グリッドをもつ4節点6部材トラスを 用いて最適化を行う. 左側の節点はピン支持とし、右下 の節点に鉛直下向き10Nの荷重を与える.

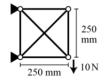
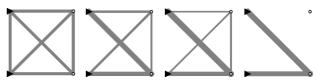


図1 1×1グリッドトラスの初期形状と支持・荷重条件

最適化途中における各部材断面積の分布を図2に示す。 ステップ数の増加につれて支点と荷重作用点を直接接続する2本の部材の断面が大きくなり、その他の部材断面が消失していくことが確認できる。最終ステップである30ステップ目においては、2本の部材以外の部材断面積 が全て0となり、2部材トラスが生成された.

1×1グリッドのトラスモデルに対する最適位相は2部材トラスであることは自明だが、量子アニーリングという新しい手法で自明な解に一致する結果が得られたことの意義は大きい.

最適化途中におけるひずみエネルギーと部材総体積の履歴を図3に示す。4.1 節で説明したように $w_1 = w_2 = 1$ と設定したため、部材総体積制約の超過に対するペナルティがひずみエネルギーと比べてそれほど大きく重み付けされていないことから、部材総体積が1ステップ目以降の全てのステップで初期部材総体積を超過している。最も大きな部材総体積を記録したのは20ステップ目であり、このときの部材総体積は初期部材総体積の118.2%であった。一方で、ひずみエネルギーはステップ数の増加に伴い大きく減少している。



(a) 初期断面 (b) ステップ 10 (c) ステップ 20 (d) ステップ 30 図 2 1×1 グリッドトラスの最適化過程における部材断 面積の分布

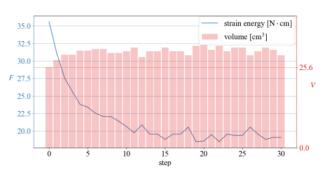


図3 1×1グリッドトラスの最適化過程におけるひずみ エネルギーと部材総体積の履歴

4.3 例題 2: 3×2 グリッドトラス

本節ではより複雑な 3×2 グリッドを有するトラスモデルを扱う.図 4 に初期形状と支持・荷重条件を示す. 左側の3つの節点がピン支持されており、右下の節点に鉛直下向き $10\,N$ の荷重が作用している.

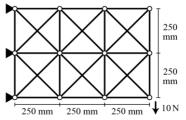


図4 3×2 グリッドトラスの初期形状と支持・荷重条件

報告 H02 - - 126 -

最適化途中における部材断面積の履歴を図5に示す. 部材数が増加した影響で収束性が悪化しており、消失した部材が再び現れる現象が各ステップで頻発した.しかし、消失部材が復活するということは、提案する最適化手法が悪い局所解から脱出し、より良い解を探索できる性能を有することを示している.

1×1グリッドトラスの例と比較すると最終ステップに おいても複雑な位相が得られているが、支点同士をつな ぐ明らかに不要な部材が除去され、荷重作用点から支持 点に向かって軸力を効率的に伝達する経路が見られるな ど、比較的合理的な位相が得られていることを確認でき た.

ひずみエネルギーと部材総体積の履歴を図6に示す. 1×1グリッドトラスの場合と同様、いずれのステップにおいても部材総体積制約の超過が見られるものの、ひずみエネルギーは初期断面と比べて大きく減少している.

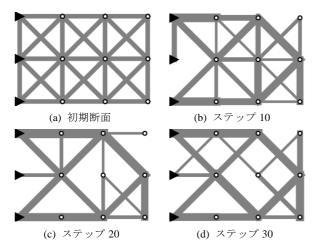


図 5 3×2 グリッドトラスの最適化過程における部材断 面積の分布

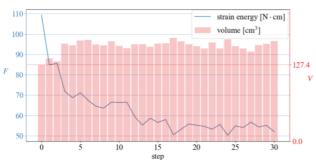


図 6 3×2 グリッドトラスの最適化過程におけるひずみ エネルギーと部材総体積の履歴

5. 結

本研究では、量子アニーリングを利用して平面トラスの断面を最適化する手法を提案した.トラスの断面積を 複数のバイナリ変数を組み合わせて離散値で表現し、さ らにトラスのひずみエネルギーや部材総体積制約、部材 断面積の変化量制限をバイナリ変数のハミルトニアンで 定式化することにより、部材総体積制約下でひずみエネ ルギーを最小化する問題を量子アニーリングで解くこと ができた.

最適化におけるステップの繰り返しにおいて、釣合い 形状を求めるための構造解析には古典的コンピューティ ングを用い、断面積の変化には量子アニーリングを用い ている. したがって、古典的コンピューティングと量子 コンピューティングの強みを組み合わせた新たな最適化 手法として本研究は位置づけられる.

古典コンピューティングにおける構造解析では、消失部材にも微小断面積を与え、構造解析の数値困難を防ぐことが多い。量子アニーリングにおけるハミルトニアンの定義において、上記の微小断面積を利用した構造解析で得られた伸びをそのまま用いると、消失部材の寄与を過大に考慮してしまい、量子アニーリングによる最適化の発散が確認された。発散を防ぐためには、ハミルトニアンを計算する際に、消失部材の伸びを厳密に0に補正する必要がある。

量子アニーリングにおける断面積の変化は釣合い状態を考慮していないため、断面積の変化が大きすぎると、釣合い状態の近傍であることを前提として設定したハミルトニアンが物理的な意味をなさなくなる.したがって、釣合い状態を満たす断面積からの変化量に応じて滑らかに変化するペナルティを導入した.提案するペナルティの定式化手法を用いれば、各ステップで断面積の変化が過大な値をとらないように制御できるだけでなく、本田ら30の手法と比べて断面積変化を制御するためのスラック変数が不要となるため、計算効率の改善が期待できる.

数値例題では二種類のトラスを取り扱い,密な位相から疎な位相の最適解が求められることを確認できた.ただし,現時点では古典コンピューティングのみを用いた既往の最適化手法に比べて得られる解は劣っている.ハミルトニアンの定式化の改良,ルールベースプログラミングによる不要部材の除去の利用など,量子アニーリングをトラスの位相最適化に応用するにあたって構造技術者の立場から取り組むべき課題は数多く存在する.

[参考文献]

- M. P. Bendsøe and O. Sigmond, Topology Optimization: Theory, Methods and Applications, Springer, 2003.
- 2) 西森秀稔, 大関真之: 量子アニーリングの基礎, 共立出版, 2018
- 3) 本田理央,遠藤克浩,鈴木雄大,村松眞由,田中宗:量子 アニーリングによるトラス構造最適化手法の開発,計算工 学講演会論文集,第27巻,2022.
- https://www.dwavesys.com/solutions-and-products/cloud-platf orm/ (accessed July 12, 2022)

報告 H02 - - 127 -