機械学習を用いた設計変数の更新に基づく 3 次元連続体のトポロジー最適化

Topology Optimization of 3D Continuum Structures Based on Updating Design Variables using Machine Learning

○土田　理央[*1]，大崎　純[*2]
Rio TSUCHIDA[*1], Makoto OHSAKI[*2]

*1 京都大学大学院工学研究科　大学院生
Graduate Student, Graduate School of Eng., Kyoto Univ.
*2 京都大学大学院工学研究科　教授　工博
Professor, Graduate School of Eng., Kyoto Univ., Dr. Eng.

キーワード：機械学習; サポートベクター回帰; 3 次元連続体; 有限要素解析; トポロジー最適化
Keywords: Machine learning; support vector regression; 3D continuum structure; FEM; topology optimization.

1. はじめに

最近になって，連続体構造のトポロジーを機械学習（とくに深層学習）を用いて最適化する方法，あるいは最適化を加速するための多くの方法が提案されている（例えば文献 1）。Qiu *et al.* [2]は，不要な要素を削除してトポロジーを最適化する過程を学習する手法を提案している。

材料の体積制約の下で静的荷重に対するコンプライアンス（あるいはひずみエネルギー）を最小化する問題は，最適性規準（OC）法，Evolutionary Structural Optimization（ESO）法，セルオートマトン（CA）法[3]などを用いて解くことができる。その際，特定の要素だけでなく，多くの近傍要素の多様な特徴量を用いると，より効率的に最適解が得られるものと考えられる。

著者らは，2 次元連続体のトポロジー最適化において，近傍要素の特徴量を用いて削除すべき要素を学習する方法を提案して，コンプライアンス最小化問題に適用した[4]。また，文献[5]では，その手法を応力最小化問題に拡張した。本稿では，文献[4]の手法を 3 次元連続体のトポロジー最適化に拡張する。

2. 最適化問題の定式化

文献[6]にしたがい，図 1 に示すような 3 次元連続体を対象とし，体積制約の下でコンプライアンスを最小化する要素密度分布を求める。荷重は，図のように一辺に均等に分布させて与える。

梁を 8 節点線形ソリッド要素で分割し，設計変数は m 個の要素の密度ベクトル$\mathbf{x}=\{x_1,x_2,\dots,x_m\}$である。要素 i の密度x_iは，0, 1 の 2 値をとるものとする。材料の総体積を$V(\mathbf{x})$，設計領域全体の体積をV_0，体積率$V(\mathbf{x})/V_0$の上限値を f とし，コンプライアンス$c(\mathbf{x})$を最小化する問題を次のように定式化する。

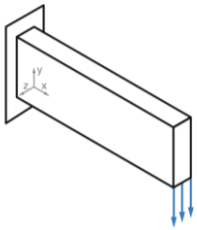


図 1：設計領域と境界・荷重条件

$$\min_{\mathbf{x}} \quad c(\mathbf{x})=\sum_{i=1}^{m} E_i(x_i)\mathbf{u}_i^{\mathrm{T}}(\mathbf{x})\mathbf{k}_0\mathbf{u}_i(\mathbf{x}) \tag{1a}$$

$$\text{subject to} \quad V(\mathbf{x})/V_0 \le f \tag{1b}$$

$$x_i \in \{0,1\} \tag{1c}$$

ここで，$E_i(x_i)$はヤング係数であり，$x_i=1$のとき材料のヤング係数E_0に一致し，$x_i=0$のとき 0 である。$\mathbf{k}_0$はヤング係数が 1 のときの要素剛性行列である。また，$\mathbf{u}_i(\mathbf{x})$は要素 i の変位ベクトルであり，系剛性方程式を解いて得られる節点変位ベクトルから求められ，$\mathbf{x}$の関数である。

チェッカーボード現象の発生を防ぐため，解析時には密度フィルターを用いる。フィルタリング後の密度$\tilde{x}_i$を次式で表し，0-1 変数ベクトル$\mathbf{x}$からグレースケールの要素密度ベクトル$\tilde{\mathbf{x}}=\{\tilde{x}_1,\tilde{x}_2,\dots,\tilde{x}_m\}$を生成する。

$$\tilde{x}_i=\frac{1}{\sum_{k\in N_i}H_{ik}}\sum_{k\in N_i}H_{ik}x_i \tag{2}$$

ここで，N_iは要素 i と要素 k の中心間距離$\Delta(i,k)$がフィルター半径$r_{\min}$より小さい要素 k の集合であり，H_{ik}は次式で定められる重み係数である。

$$H_{ik} = \max(0, r_{\min} - \Delta(i,k)) \tag{3}$$

2 次元連続体の場合のフィルタリング前後の要素密度分布の例を図 2 に示す。

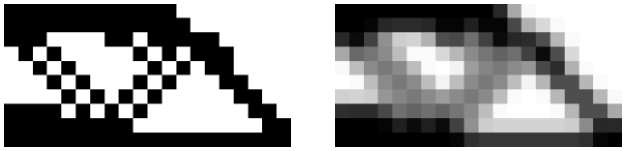


図 2：フィルタリング前（左）と後（右）

また，グレースケールの解が得られることを防ぐため，Solid Isotropic Material with Penalization（SIMP）法に基づき，ヤング係数を次式で定められる係数$\tilde{E}_i(x_i)$に変更する。

$$\tilde{E}_i(\tilde{x}_i) = E_{\min} + \tilde{x}_i^p (E_0 - E_{\min}) \tag{2}$$

ここで，$E_{\min}$は剛性行列が特異とならないように，密度が 0 の要素に与える微小値である。$p\ (>1)$は中間的な密度の要素の剛性を低減するためのペナルティである。

3. SVR を用いた学習と最適化方法

要素 i の特徴量ベクトルを$\boldsymbol{\mu}_i$，要素 i を削除した時のコンプライアンスの増加量をΔc_iとし，要素 i に対して SVR の入力$\mathbf{z}_i$と出力y_iを次式で定める。

$$\mathbf{z}_i = \boldsymbol{\mu}_i, \qquad y_i = \log(\Delta c_i) \tag{5}$$

ここで，コンプライアンスの増加量が 0 に近い場合の解像度を高めるため，出力には対数関数を用いている。$\boldsymbol{\mu}_i$は有限要素解析により得られる物理量を並べた特徴量ベクトルであり，本稿では，図 3 に示すように，削除対象要素とその近傍の要素を含めた$3\times3\times3=27$要素のひずみエネルギー$\{SE_{i1}, SE_{i2}, \ldots, SE_{i27}\}$を$\boldsymbol{\mu}_i$とする。ここで，要素ひずみエネルギーは以下の式で求められる。

$$SE_i = E_i(x_i) \cdot \frac{1}{2} \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{k}_0 \mathbf{u}_i \tag{6}$$

ただし，存在しない要素のひずみエネルギーは 0 とする。

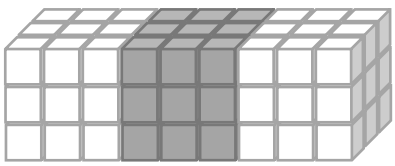


図 3：近傍の 27 要素

教師データは次の手順で作成する。

【教師データの作成手順】

Step 1. 全ての要素の密度が 1 である初期解を与える。

Step 2. 密度フィルターを用いてグレースケールの解を生成し，SIMP 法を用いて要素剛性行列を修正する。剛性方程式を解き，各要素のひずみエネルギーを求めて特徴量ベクトル$\boldsymbol{\mu}_i$を作成し，コンプライアンスの増加量Δc_iを計算する。

Step 3. 存在する要素を順次取り除き，Step 2 と同様にしてΔc_iを計算する。

Step 4. 得られた$\boldsymbol{\mu}_i$とΔc_iの組を学習データセットに追加する。

Step 5. Δc_iが最も小さい要素を削除する。

Step 6. 体積率が指定値 f 以下になるまで，Step 2~5 を繰り返す。

教師データを用いて学習を行い SVR のパラメータを決定し，未学習のモデルの最適化に適用する。すなわち，最適化の過程で要素の特徴量を SVR に入力し，削除する要素を選択する。SVR を用いた最適化の手順の概要は以下のとおりである。

【SVR を用いた最適化手順】

Step 1. 全ての要素の密度が 1 である初期解を与える。

Step 2. 教師データの作成と同様にして，密度フィルターと SIMP 法を用いて全ての要素のひずみエネルギーを計算し，各要素の特徴量ベクトル$\boldsymbol{\mu}_i$を作成する。

Step 3. 存在する全要素について，$\boldsymbol{\mu}_i$を SVR に入力し，Δc_iを予測する。

Step 4. Δc_iが最も小さい要素（あるいはΔc_iが小さい複数個の要素）を削除する。

Step 5. 体積率が指定値 f 以下になるまで，Step 2~4 を繰り返し，体積率が f 以下になったときの解を最適解とする。

学習データ作成時には，20×10×10 のモデルを用い，初期状態から要素を 1 個ずつ削除し，体積率が 20%に達した時点で解析を終了する。

密度ペナルティを$p=3$，フィルター半径を$r_{\min}=2.0$とし，有限要素解析には一辺の長さ 1 の 8 節点 6 面体要素を用いる。また，ヤング係数は$E_{\min}=1.0\times10^{-9}$, $E_0=1.0$とし，単位は重要でないため省略する。

学習には MATLAB の Statistics and Machine Learning Toolbox の関数 fitrsvm を用いる。カーネル関数はガウシアンとし，カーネルスケール s は，MATLAB のアプリケーション Regression Learner にある Fine ($s=1.3$), Medium ($s=5.2$), Coarse ($s=21$)の 3 種類で学習精度の比較を行った結果，最も精度良く予測できると考えられる 5.2 を選択する。また，機械学習の入力と出力は，それぞれ平均 0，分散 1 の分布に標準化する。

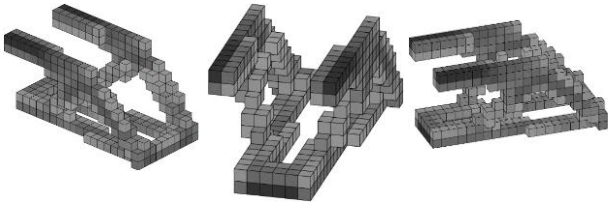


図 4：最適性規準法による解（体積 20%）

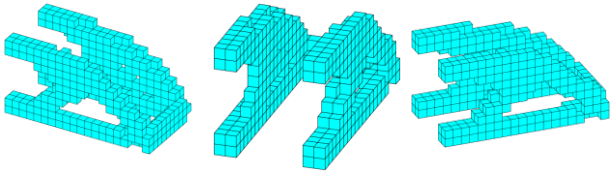


図 5：学習データ作成時の削除結果（体積 20%）

最適性規準法による解と学習データ作成時の要素削除結果をそれぞれ図 4 と図 5 に示す。ここで，最適性規準法には文献 7 のプログラムを用いた。コンプライアンスの増加量が小さくなるように要素を 1 つずつ削除することにより，最適性規準法の解に近い形態の解が得られていることを確認できる。

データセットのうち 90%を学習用，残り 10%を検証用とし，検証用データの実際のΔc_iの値と SVR による予測値の散布図を図 6 に示す。

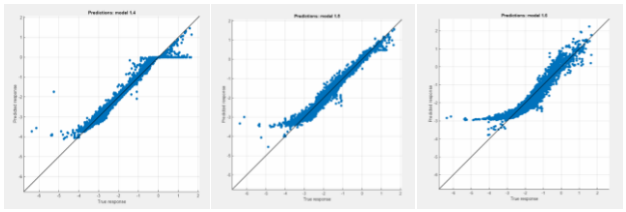


図 6：カーネルスケール値 s による学習精度比較
（横軸：実際の値，縦軸：SVR による予測値）
$s = 1.3$（左），$s = 5.2$（中央），$s = 21$（右）

4. 最適化例

メッシュ分割$20 \times 10 \times 10$のモデルでの学習結果を用い，$30 \times 15 \times 15$と$40 \times 20 \times 20$それぞれのモデルで近似最適解が得られることを確認する。【SVR を用いた最適化手順】の Step 4 において，Δc_iの値が小さい方から，設計領域全体の 1%の要素を削除する。すなわち，1 回の解析で，例えば$40 \times 20 \times 20$のモデルでは 160 個の要素を削除することができる。

体積率の上限値を 20%とし，全ての要素で要素密度 1 の初期解から，SVR によってコンプライアンスの増加量が小さいと予想される 1%の要素の削除を繰り返した結果得られた$30 \times 15 \times 15$モデルの解を図 7 に，さらに細かいメッシュに適用した$40 \times 20 \times 20$モデルの結果を図 8 に示す。

SVR を用いて削除を行った$30 \times 15 \times 15$と$40 \times 20 \times 20$の両方のモデルで最適性規準法での解に近い形状が得られている。

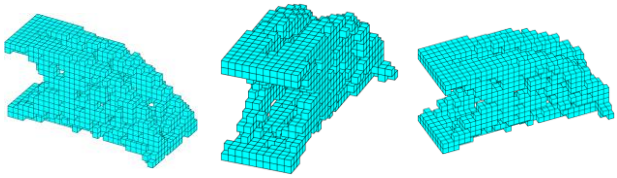


図 7：SVR による最適化結果（$30 \times 15 \times 15$）

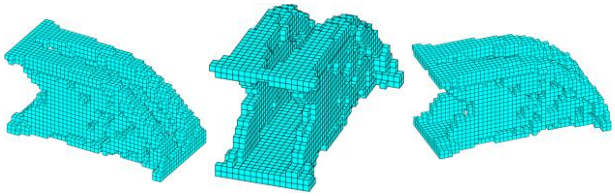
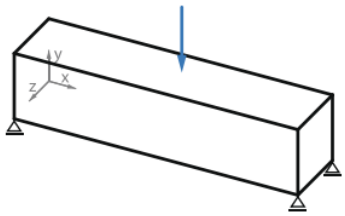


図 8：細かいメッシュの結果（$40 \times 20 \times 20$）

次に，メッシュ分割$20 \times 10 \times 10$の単一の境界条件での学習結果を用いて，異なる 3 種類の境界条件の問題に適用することを考える。メッシュ数と境界条件のみを変更し，【SVR を用いた最適化手順】を実行することで近似最適解を得る。境界条件を設定し，最適性規準法による解と本手法による解の形状を図 9-17 示す。なお，すべてのモデルで各要素は 1 辺の長さが 1 の立方体であり，体積制約は 20%とする。



$6L \times L \times L$
図 9：境界条件①

図 10：最適性規準法による解（$96 \times 16 \times 16$）

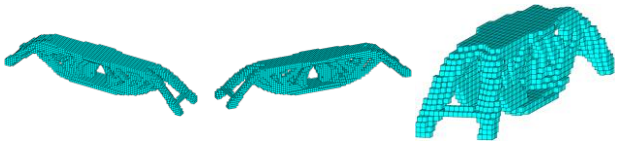


図 11：SVR を用いた最適化結果（$96 \times 16 \times 16$）

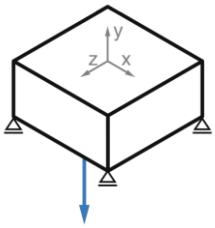


図 12：境界条件②

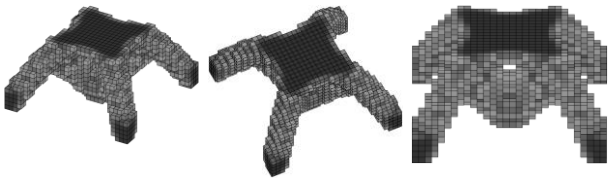
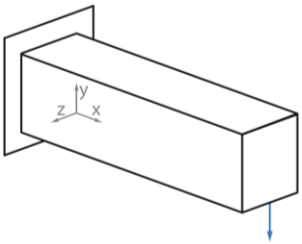


図 13：最適性規準法による解（$30 \times 15 \times 30$）

図 14：SVR を用いた最適化結果（$30 \times 15 \times 30$）



$12L \times 4L \times 3L$

図 15：境界条件③

図 16：最適性規準法による解（$48 \times 16 \times 12$）

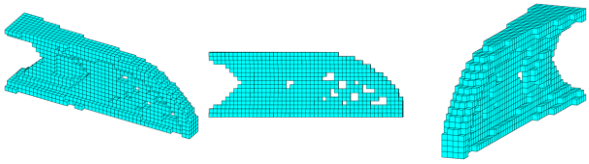


図 17：SVR を用いた最適化結果（$48 \times 16 \times 12$）

境界条件①，②については，概ね最適性規準法の解に近い解が得られている。境界条件③では，最適性規準法の解と比較すると，全体的により面的な構造で抵抗する形状が現れている。これは，SVR を用いた方法では設計領域の外側部分から順に削除していく傾向があるためである。その結果，最適性規準法の解のように上部では 2 つに分かれることなく，中央に要素が残る形状が得られ，中央部にも概ね均等に要素が残っている。

5. 結論

3 次元連続体のトポロジー最適化問題（要素密度分布を最適化する問題）を対象として，SVR を用いて多くの近傍要素の特徴量から削除すべき要素を選択する方法を提案した。

本手法を用いると，粗いメッシュのモデルで学習した結果を用いて，細かいメッシュのモデルの近似最適解を最適化手法を用いずに得ることができることを，数値例題を通して示した。また，単一の境界条件で学習を行うことで，他の境界条件へ容易に適用できることを示した。

今後の展望としては，最適化の精度向上のため，機械学習の予測精度をより高めるような特徴量を選択することや，要素削除だけでなく要素の付加を考慮し，局所最適解が得られることを避けるような最適化手法の提案が考えられる。また，文献[5]の拡張として，3 次元連続体の応力最小化を目的としたトポロジー最適化への適用も重要である。

6. 謝辞

本研究は，JSPS 科研費（JP20H04467）の助成を得た。

[参考文献]

1） N. A. Kallioras, G. Kazakis and N. D. Lagaros, Accelerated topology optimization by means of deep learning, Structural and Multidisciplinary Optimization, Vol. 62, pp. 1185–1212, 2020.
2） Qiu C., et al. A deep learning approach for efficient topology optimization based on the element removal strategy, Material & Design, Vol. 212, Paper 110179, 2021.
3） 藤井大地，真鍋匡利：CA-ESO 法による構造物の位相最適化，日本建築学会構造系論文集，Vol. 78, No. 691, pp. 1569–1574, 2013.
4） 土田理央，大崎 純：機械学習を用いた設計変数の更新に基づく連続体のトポロジー最適化，2021 年度日本建築学会大会（東海），B1, pp. 167–168, 2021.
5） 土田理央，大崎 純，機械学習を用いた設計変数の更新に基づく連続体の応力最小化，日本建築学会大会学術講演梗概集(北海道), B1, pp. 217–218, 2022.
6） K. Liu and A. Tovar, An efficient 3D topology optimization code written in Matlab, Structural and Multi- disciplinary Optimization, Vol. 50(1), pp. 1175–1196, 2014.
7） E. Andreassen, A. Clausen, M. Schevenels, B. S. Lazarov and O. Sigmund, Efficient topology optimization in MATLAB using 88 lines of code, Structural and Multi-disciplinary Optimization, Vol. 43(1), pp. 1–16, 2011.