

データ点からの確信度付き範囲の生成とその釣合い解析への応用

Confidence Bound Generation from Data Points and Its Application to Equilibrium Analysis

○ 寒野 善博 *1

Yoshihiro Kanno

*1 東京大学 数理・情報教育研究センター 教授 博士 (工学)

Professor, Mathematics and Informatics Center, The University of Tokyo, Dr. Eng.

キーワード：確信度付きの数値計算；順序統計量；線形計画

Keywords: Confidence-based computing; order statistics; linear programming.

1. はじめに

データ駆動型の方法論は、近年、理工学の多くの分野で展開されてきている²¹⁾。計算力学の分野においても、Kirchdoerfer and Ortiz¹⁷⁾を一つのきっかけとして、データ駆動型の方法論が注目を集めている。弾性構造物の静的な釣合い解析は、(a) ひずみと変位の適合条件、(b) 応力と外力の釣合い条件、(c) 材料に固有の構成則（応力とひずみの関係）、の三つの関係（方程式）を連立して解く。このうち、(a)は構造物の幾何学的な形状から決まる関係式であり、(b)はNewtonの運動の法則から導かれる物理的な関係式である。これに対して(c)は、通常、材料実験の結果から経験的にモデルを仮定し、そのモデルのパラメータを同定することで得られる。Kirchdoerfer and Ortiz¹⁷⁾の提案は、この経験的な構成則(c)に代えて、材料実験の結果（応力とひずみの観測値の組からなるデータ）を直接的に用いるというものである。具体的には、(a)と(b)を満たす節点変位、要素応力、要素ひずみの組のうちで、実験データからの距離の2乗和が最小であるものを釣合い解とみなすことを提案している。ここで、ある点の実験データからの距離とは、応力とひずみの対の空間においてその点から最も近いデータ点までの（計量付きの）ユークリッド距離と定義している。

Kirchdoerfer and Ortiz¹⁷⁾の提案手法は、その後、距離最小化法（distance-minimizing method）ともよばれ、動的問題¹⁸⁾や弾塑性問題^{3,20)}、拡散方程式²³⁾、破壊力学¹⁾など、計算力学のさまざまな問題へと適用されている。し

かし、この手法は、構造物の各積分点においてデータ集合の中の1点の情報しか用いない。このため、データに含まれるノイズや外れ値の影響を直接的に受けてしまう手法であると言える⁵⁾。また、Kirchdoerfer and Ortiz¹⁷⁾の示したアルゴリズムでは、目的関数が最小の点が得られる保証がなく、実際に最小解とは異なる点に収束する場合がある、という問題点もある⁹⁾。一方、Ibañez *et al.*^{6,7)}は、応力とひずみの組の空間の中でデータ点が載る多様体が構成則を表していると考え、多様体学習の手法に基づく釣合い解析法を提案した。著者は、カーネル法に基づいてこの構成則多様体を求める手法を提案し^{12,13)}、またその手法を材料実験ではなく構造実験のデータを用いる問題設定^{2,19)}へと拡張している^{14,15)}。

以上でとりあげたデータ駆動型的手法は、境界条件が与えられたときに構造物の釣合い解を1つ出力するものである。これに対してGuo *et al.*⁴⁾は、データが不可避的にもつ不確かさに着目し、材料実験のデータから構造物の応答の範囲（上下界値）を求める手法を提案した。具体的には、材料実験のデータ点を含む楕円体を構成し、応力とひずみとその楕円体に含まれるという条件と(a)および(b)を制約として応答量の最大値と最小値を求める、という手法である。

材料則がもつ偶然的な不確実性（aleatory uncertainty）を考慮すれば、構造物の応答量を単一の値として予測する手法と比べて、Guo *et al.*⁴⁾のように応答量の範囲を予測することには一定の妥当性があると考えられる。しかし、

Guo *et al.*⁴⁾ の手法では、得られる範囲の物理的な意味が不明確である。本稿では、順序統計量を用いた信頼性最適設計法^{10,11)} の考え方を応用して、確信度の保証付きで構造物の応答量の範囲（上下界値）を求める最適化手法を提案する。

2. 応答量の上下界値を求める最適化問題

提案手法は通常有限要素法で離散化した連続体にも適用できるが、ここでは簡単のためにトラス構造に対して説明する。

トラスの節点変位の自由度を d とおき、節点変位および外力を $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^d$ および $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^d$ で表す。また、トラスの部材数を m とおき、部材に生じるひずみおよび応力を並べたベクトルを $\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^m$ および $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbb{R}^m$ で表す。このとき、適合条件および釣合い条件は

$$\boldsymbol{\varepsilon} = L\mathbf{u}, \quad (1)$$

$$N\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f} \quad (2)$$

の形で書ける。ただし、 $L \in \mathbb{R}^{m \times d}$ および $N \in \mathbb{R}^{d \times m}$ は定行列である。

応力とひずみの組のデータとして、点 $(\check{\varepsilon}_1, \check{\sigma}_1), \dots, (\check{\varepsilon}_r, \check{\sigma}_r)$ が与えられているとする。提案手法では、これらのデータ点を含むような 2 本の直線で囲まれた集合

$$C(\tau) = \{(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} \mid |\alpha\boldsymbol{\varepsilon} + \beta\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\gamma}| \leq \tau\}$$

を考える。ここで、 $\alpha, \beta, \boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}$ および $\tau > 0$ はパラメータである。ただし、 $C(\tau)$ は、 r 個すべてのデータ点を含むのではなく、以下の意味での確信度を保証するのに十分な数だけのデータ点を含むように定めるものとする。

関数 $t: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ を

$$t(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}) = |\alpha\boldsymbol{\varepsilon} + \beta\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\gamma}|$$

で定める。構成則が確率論的な不確かさをもつと考えると、 $t(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma})$ も確率変数とみなせる。その累積分布関数を F_T で表し、 F_T は未知であるとする。いま、構造物の応答量 $q(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$ に着目してその範囲 $[q, \bar{q}]$ を求めたいとすると、 $q(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$ も確率変数であるから条件

$$P\{q(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}) \in [q, \bar{q}]\} \geq 1 - \epsilon \quad (3)$$

を考える。ここで、 $1 - \epsilon \in (0, 1)$ は信頼性最適設計における信頼性の目標値（指定値）にあたる。さらに、 F_T も

未知（不確か）であることを考慮すると (3) の左辺も確率変数とみなせるため、次の条件を満たす \underline{q} および \bar{q} を求めることが目標となる：

$$P_{F_T}\{P\{q(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}) \in [q, \bar{q}]\} \geq 1 - \epsilon\} \geq 1 - \delta. \quad (4)$$

ここで、 $1 - \delta \in (0, 1)$ は信頼性最適設計における確信度の目標値（指定値）に相当する^{8,10,11,22)}。

ここで、データ点を条件 $t(\check{\varepsilon}_{(1)}, \check{\sigma}_{(1)}) < \dots < t(\check{\varepsilon}_{(r)}, \check{\sigma}_{(r)})$ が成り立つように並べ替えると、これは $t(\check{\varepsilon}_1, \check{\sigma}_1), \dots, t(\check{\varepsilon}_r, \check{\sigma}_r)$ の順序統計量にあたる。いま、条件

$$\sum_{k=p}^r \binom{r}{k} (1 - \epsilon)^k \epsilon^{r-k} \leq \delta$$

を満たす最小の自然数 p を \bar{p} とおき $C(\bar{\tau})$ が \bar{p} 個のデータ点 $(\check{\varepsilon}_{(1)}, \check{\sigma}_{(1)}), \dots, (\check{\varepsilon}_{(\bar{p})}, \check{\sigma}_{(\bar{p})})$ を含むように $\bar{\tau}$ の値を定めれば、順序統計量の基本的な性質から条件

$$P_{F_T}\{P\{(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}) \in C(\bar{\tau})\} \geq 1 - \epsilon\} \geq 1 - \delta$$

が成り立つ¹⁶⁾。したがって、条件 (4) を（十分条件として）満たす \underline{q} は、次の線形計画問題の最適値として得られる：

Minimize $q(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$

subject to (1), (2),

$$(\boldsymbol{\varepsilon}_e, \boldsymbol{\sigma}_e) \in C(\bar{\tau}), \quad e = 1, \dots, m.$$

また、 \bar{q} を求めるには、同じ目的関数を最大化する線形計画問題を解けばよい。

3. 例題

提案手法を、図 1 に示す片持ち梁の静的な釣合い解析に適用する。弾性体の大きさは 180 mm × 60 mm で厚さは 5 mm とし、平面応力状態を仮定して 60 × 20 個の均一な 4 節点の 4 辺形有限要素に分割した。

応力・ひずみ関係のデータ集合は、次のように作成した。まず、図 2a のように 150 点のひずみをランダムに生

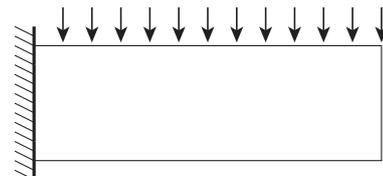


図 1. 例題で扱う弾性構造物（平面応力問題）

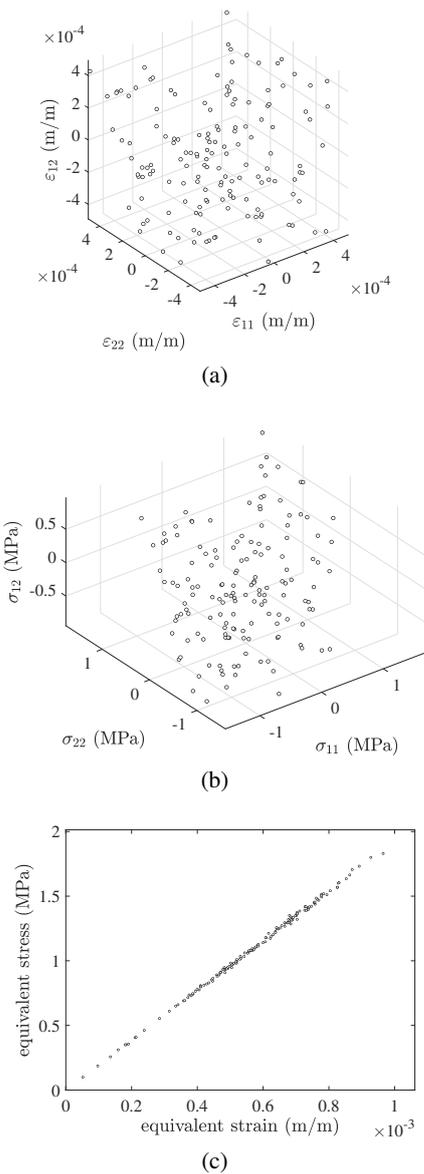


図 2. データ集合. (a) ひずみのデータ, (b) 応力のデータ, (c) 等価ひずみと等価応力の関係

成する. 次に, Young 率を 2.5 GPa, Poisson 比を 0.3 とし てこれらの値に適当なノイズをのせて, それぞれのひずみ に対応する応力を求める (図 2b). このとき, 等価応力 と等価ひずみの関係として図 2c が得られる.

応答値として, (1) の右下の節点の鉛直方向の変位に着 目する. $\epsilon = 0.1, \delta = 0.1$ とおいたとき, 提案手法で得ら れる応答値の上下界値を図 3 に示す. ただし, 参照解は, データの Young 率と Poisson 比の平均値である 2.5011 GPa および 0.29979 を用いた通常の有限要素解析の結果であ る. 図 4 は, 信頼性 $1 - \epsilon$ および確信度 $1 - \delta$ をそれぞれ 変化させたときの上下界値の変化のようすを示している.

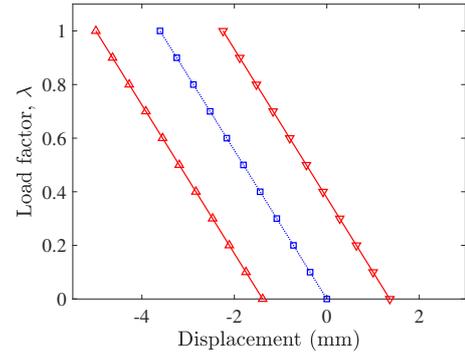


図 3. 節点変位の上界値, 参照解, 下界値

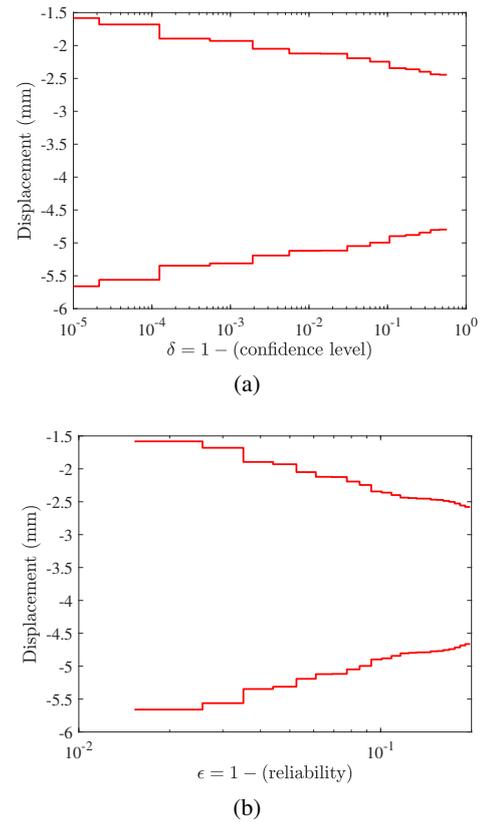


図 4. 節点変位の上下界値の変化. (a) $\epsilon = 0.1$ を固定して δ を変化させたとき, (b) $\delta = 0.1$ を固定して ϵ を変化させたとき

4. おわりに

弾性構造物の静的な釣合い解析において, 材料の応力 とひずみの組のデータから, 構造物の応答量の上下界値 を求める最適化手法を提案した. 順序統計量の基本的な 性質を利用することで, 応答量が得られた範囲におさま る信頼性に対する確信度を保証することができる.

提案手法は, 材料の構成則が線形弾性に近いことを前 提としている. 非線形弾性のデータに提案手法を適用す ると, 上下界値として保守的すぎる値が得られる. 非線

形弾性のデータに対して提案手法を拡張することは、今後の課題である。

謝辞 この研究の一部は、JST CREST Grant No. JP-MJCR1911, 鹿島学術振興財団, および科研費 (21K04351) の助成を受けたものである。

[参考文献]

- 1) P. Carrara, M. Ortiz, L. De Lorenzis: Data-driven rate-dependent fracture mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **155**, 104559 (2021).
- 2) M. Dalémat, M. Coret, A. Leygue, E. Verron: Measuring stress field without constitutive equation. *Mechanics of Materials*, **136**, Article No. 103087 (2019).
- 3) R. Eggersmann, T. Kirchdoerfer, S. Reese, L. Stainier, M. Ortiz: Model-free data-driven inelasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **350**, 81–99 (2019).
- 4) X. Guo, Z. Du, C. Liu, S. Tang: A new uncertainty analysis-based framework for data-driven computational mechanics. *Journal of Applied Mechanics*, **88**, 111003 (2021).
- 5) Q. He, J.-S. Chen: A physics-constrained data-driven approach based on locally convex reconstruction for noisy database. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **363**, 112791 (2020).
- 6) R. Ibañez, E. Abisset-Chavanne, J. V. Aguado, D. Gonzalez, E. Cueto, F. Chinesta: A manifold learning approach to data-driven computational elasticity and inelasticity. *Archives of Computational Methods in Engineering*, **25**, 47–57 (2018).
- 7) R. Ibañez, D. Borzacchiello, J. V. Aguado, E. Abisset-Chavanne, E. Cueto, P. Ladeveze, F. Chinesta: Data-driven non-linear elasticity: constitutive manifold construction and problem discretization. *Computational Mechanics*, **60**, 813–826 (2017).
- 8) Y. Jung, H. Cho, I. Lee: Reliability measure approach for confidence-based design optimization under insufficient input data. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **60**, 1967–1982 (2019).
- 9) Y. Kanno: Mixed-integer programming formulation of a data-driven solver in computational elasticity. *Optimization Letters*, **13**, 1505–1514 (2019).
- 10) Y. Kanno: A data-driven approach to non-parametric reliability-based design optimization of structures with uncertain load. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **60**, 83–97 (2019).
- 11) Y. Kanno: Dimensionality reduction enhances data-driven reliability-based design optimizer. *Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing*, **14**, 19-00200 (2020).
- 12) 寒野 善博: カーネル法に基づくデータ点からの曲面の生成法. 第 43 回情報・システム・利用・技術シンポジウム, 日本建築学会, 2020 年 12 月, オンライン開催.
- 13) Y. Kanno: A kernel method for learning constitutive relation in data-driven computational elasticity. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, **38**, 39–77 (2021).
- 14) 寒野 善博: 不定な線形方程式に従うデータ点からの曲面の生成法. 第 44 回情報・システム・利用・技術シンポジウム, 日本建築学会, 2021 年 12 月, 京都.
- 15) Y. Kanno: Alternating minimization for data-driven computational elasticity from experimental data: kernel method for learning constitutive manifold. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, **11**, 100289 (2021).
- 16) Y. Kanno: Computation-with-confidence for static elasticity: data-driven approach with order statistics. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, e202100482 (to appear).
- 17) T. Kirchdoerfer, M. Ortiz: Data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **304**, 81–101 (2016).
- 18) T. Kirchdoerfer, M. Ortiz: Data-driven computing in dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **113**, 1697–1710 (2018).
- 19) A. Leygue, M. Coret, J. Réthoré, L. Stainier, E. Verron: Data-based derivation of material response. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **331**, 184–196 (2018).
- 20) A. Leygue, R. Seghir, J. Réthoré, M. Coret, E. Verron, L. Stainier: Non-parametric material state field extraction from full field measurements. *Computational Mechanics*, **64**, 501–509 (2019).
- 21) F. J. Montáns, F. Chinesta, R. Gómez-Bombarelli, J. N. Kutz: Data-driven modeling and learning in science and engineering. *Comptes Rendus Mécanique*, **347**, 845–855 (2019).
- 22) M.-Y. Moon, H. Cho, K. K. Choi, N. Gaul, D. Lamb, D. Gorsich: Confidence-based reliability assessment considering limited numbers of both input and output test data. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **57**, 2027–2043 (2018).
- 23) L. T. K. Nguyen, M. Rambausek, M.-A. Keip: Variational framework for distance-minimizing method in data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **365**, 112898 (2020).