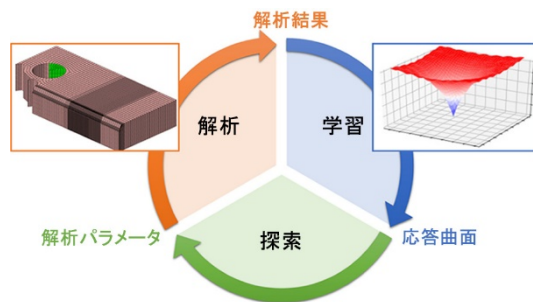


数値解析技術へのベイズ最適化適用による設計高度化

Design Advancement by Applying Bayesian Optimization to Numerical Analysis Techniques



立石 浩毅*¹
Koki Tateishi

筈井 祐介*¹
Yusuke Hazui

竹内 瑞穂*¹
Mizuho Takeuchi

熊谷 理*²
Osamu Kumagai

当社では、有限要素解析等の数値解析技術を用いた事象予測・製品設計において、最適化技術を応用している。しかし、最適化計算には相当数の解析実行が必要となるため、1回の解析に数時間を要する高コストな解析モデルでは最適解を得るのに時間がかかるとの課題があった。この課題解消の取組みとして、最適化技術の一つであるベイズ最適化を適用することで、解析モデルの試験データ合わせ込みを短時間で実現したので、その概要を紹介する。

1. はじめに

当社では、試作・実験コスト低減の観点から FEM(有限要素法)等の数値解析技術を用いた事象予測・製品設計に取り組んでおり、試験データを用いた解析モデルの実機合わせ込みや、合わせ込んだ解析モデルを用いた設計パラメータの調整を行っている。これらは試行錯誤によるモデルやパラメータの調整が必要となるが、人間の手による調整では限界があるため、最適化技術を用いた合理的な合わせ込みや設計に取り組んでいる⁽¹⁾。

しかしながら、粒子群最適化に代表される進化的アルゴリズムに基づく最適化では、最適解を得るのに数百～数千回の解析実行が必要となり、1回の解析に数時間を要する高コストな解析モデルには適用困難との課題があった。例えば、き裂を有するプラント配管の延性き裂進展予測では、[図1](#)に示すような小型試験片による材料試験結果に対し有限要素解析モデルの合わせ込みを行うが、1回の解析に数時間を要するため、現実的な時間で最適解を得ることができなかった。そのため、従来は設計者が試行錯誤でモデルパラメータを調整する必要があり、合わせ込みに約2か月を要していた。一方、機械学習の分野では、モデルのハイパーパラメータを調整する手法として、ベイズ最適化の有効性が確認されている。このベイズ最適化を拡張したマルチタスクベイズ最適化を解析モデル合わせ込みに適用した結果、調整時間の大幅な短縮を実現したので、その概要を以下に紹介する。

*1 ICTソリューション本部 CIS 部

*2 総合研究所強度・構造研究部



図1 材料試験の例

2. 最適化技術

本報で用いた最適化技術について概略を述べる。

2.1 ベイズ最適化⁽²⁾

ベイズ最適化は、応答曲面に基づく最適化手法であり、図2に示すように、数値解析、応答曲面の作成、応答曲面を用いた最適点候補の探索の3つのプロセスを繰り返し実行する。この応答曲面は数値解析結果を学習したモデルであり、解析データの少ない最適化計算初期は応答曲面の予測精度が低く、応答曲面が正しい解空間を表現しないため、応答曲面上で最適解を探索した際に局所解などの誤った解に陥る可能性がある。この問題を解消するため、ベイズ最適化では、ガウス過程回帰と呼ばれる予測不確かさを表現可能な、機械学習モデルを応答曲面として用いる。この予測不確かさに基づき最適解を取り得る確率を計算することで、探索できていない未知の領域を適度にサンプリングしつつ、最適解を探索することが可能となる。

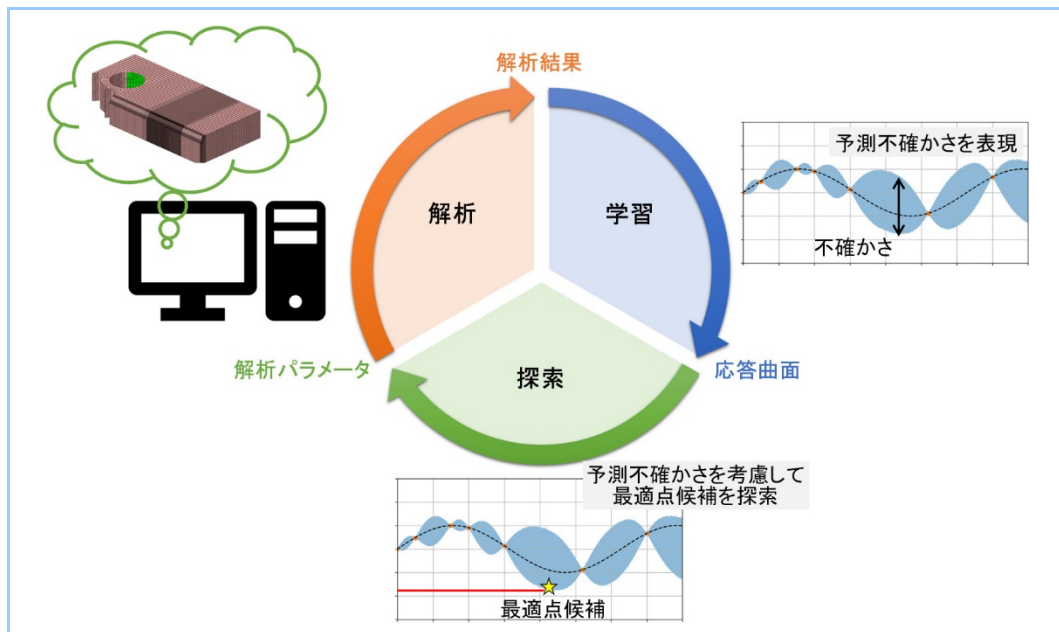


図2 ベイズ最適化

2.2 マルチタスクベイズ最適化⁽³⁾

マルチタスクベイズ最適化(Multi-Task Bayesian Optimization, 以下 MTBO と略)は、複数の最適化問題を並列に解くことを目的としたベイズ最適化である。MTBO では、ある最適化問題の特徴を、他の最適化問題の特徴に転移させることで、少ないデータ点で精度高い応答曲面を獲得し、効率よく最適解を探索することができる。

本報では、数値解析モデルを用いた最適化計算に MTBO を応用し、効率的な最適化計算の

実現に取り組んだ。最適化計算のフローを図3に示す。ここでは最適化対象である計算時間を要する高コストの数値解析モデルに加え、解析条件が異なる計算時間の短い低コストの数値解析モデルを用意する。最初に低コストの数値解析モデルに対し、応答曲面モデルの予測不確かさを最小化するよう繰り返し解析を実行し、応答曲面を学習する。次に、最適化したい数値解析モデルに相当する応答曲面モデルに対し、MTBO を用いて学習結果を転移させ、最適化計算を行う。これにより、高コストな解析回数を減らしつつ、精度の高い応答曲面を生成することを可能とし、最適化計算時間の短縮を図った。

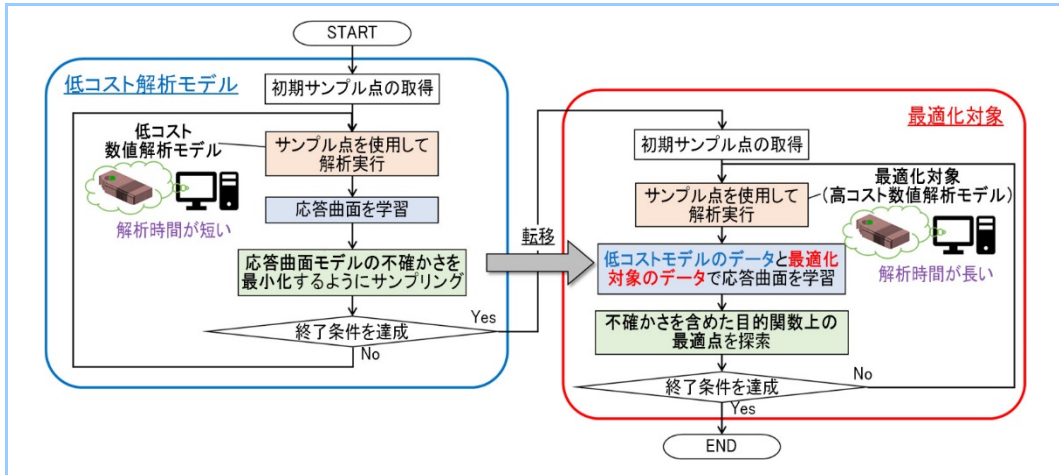


図3 マルチタスクベイズ最適化を用いた最適化処理フロー

3. き裂進展解析への適用事例

3.1 延性き裂進展解析

プラント配管の延性き裂進展を予測するため、Gurson-Tvergaard-Needleman (GTN) モデルと呼ばれる材料構成式に基づいた、図4に示す CT (Compact Tension) 試験片の有限要素解析モデルを用いる⁽⁴⁾。GTN モデルは材料内部におけるボイドの発生と成長、結合、破断の過程を数値解析で再現するモデルであり、材料試験結果を再現するよう、有限要素解析を通して構成式のパラメータを調整する必要があるが、非線形特性が強く合わせ込みが難しい。

本報では、材料試験で取得した図5に示す①荷重-開口変位線図と②板厚方向延性き裂進展量分布に対し、解析モデルの合わせ込みを行った。具体的には、有限要素解析結果と材料試験結果の誤差率平均値を最小化するよう、6つの GTN モデルパラメータを最適化することで、試験結果の再現性が高い数値解析モデルの獲得を図った。ここで誤差率平均値とは、解析値と試験結果との誤差率を複数評価点について求め、これを平均した値である。

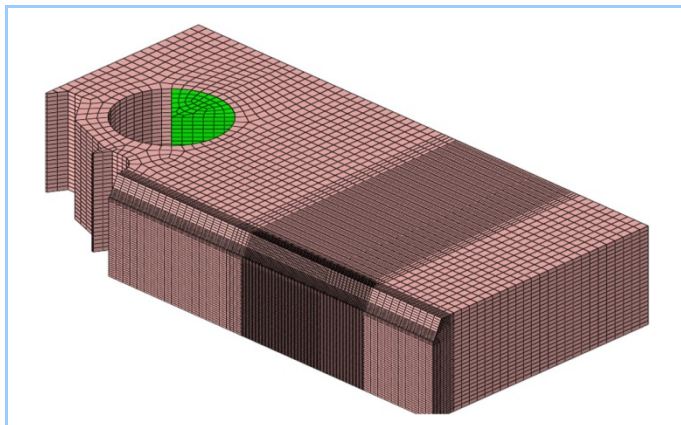


図4 CT 試験片の有限要素解析モデル

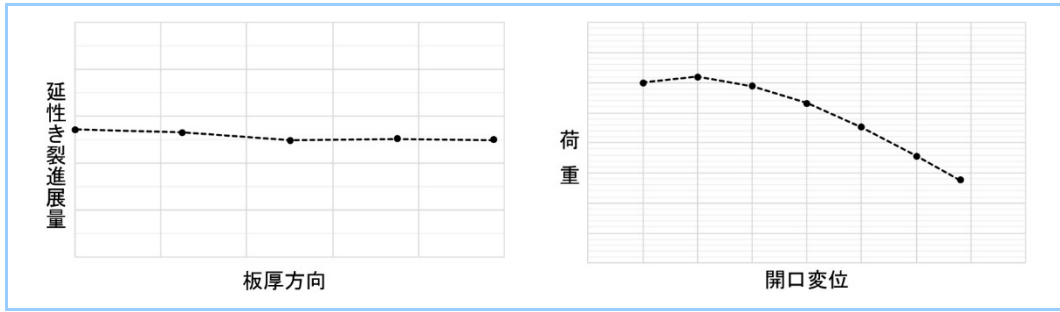


図5 合わせ込み対象とする材料試験結果

3.2 適用結果

延性き裂進展解析モデル合わせ込みへの最適化技術の適用結果について述べる。通常の有限要素解析モデルに加え、強制変位の加速度を大きくすることで解析時間を約 1/3 に短縮した低コストの解析モデルを用意し、MTBO を用いて解析結果と試験結果の誤差率平均値を最小化した。ここで、荷重-開口変位線図、延性き裂進展量分布は異なる非線形特性を有することから、GTN モデルパラメータと評価関数である誤差率平均値の間には強い非線形性が生じるため、誤差率平均値を応答曲面モデルで直接表現した場合、最適化計算に時間を要することが分かった。そこで、本報では応答曲面モデルの非線形性を低減するため、評価点ごとに誤差率を表現した個別の応答曲面モデルを作成し、それぞれの応答曲面モデル推定値に対し平均値処理を行うことで、評価関数値を推定することとした。

MTBO による最適化計算の結果を図6に示す。低コスト解析を 81 回(約2日間)実行し、その後、高コスト解析を9回実行した時点で目標誤差を満足する結果を得ることができ、従来2か月要していた解析モデルの合わせ込みをわずか3日で実現できることを確認した。

更に参考文献(4)で示されている他手法での GTN モデルパラメータ合わせ込み結果との比較を図7に示す。荷重-開口変位線図は同等の精度であるが、非線形性の強い延性き裂進展量は本手法が試験結果に最も近く、精度の面でも有効な手法であることを確認できた。

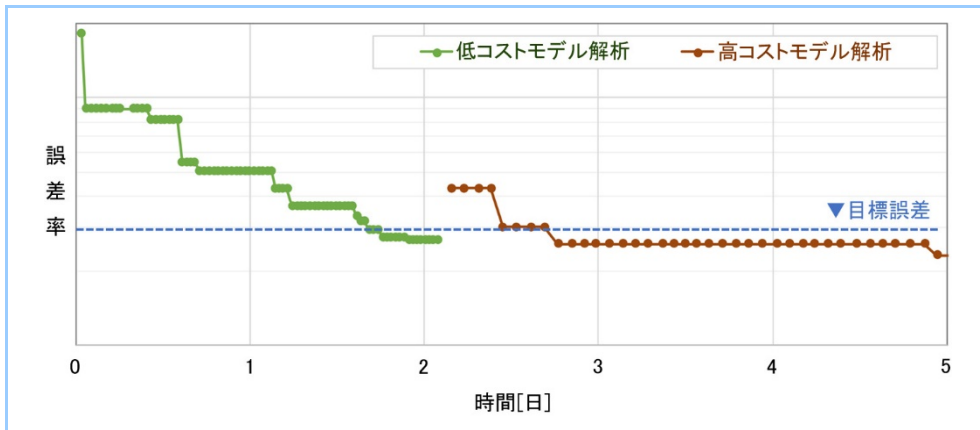


図6 MTBO による最適化計算結果

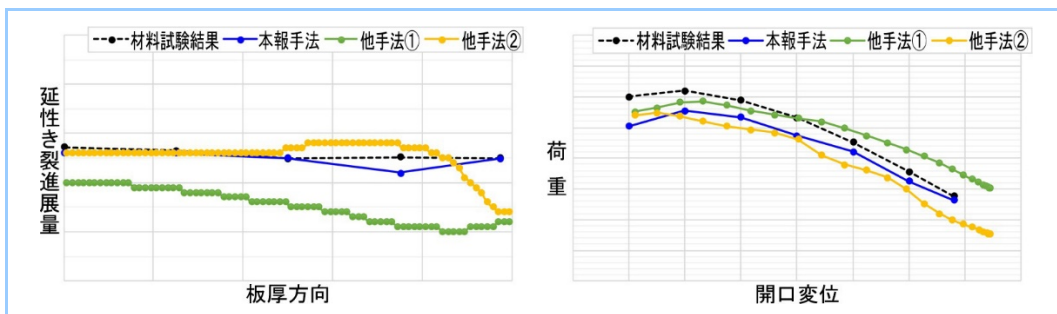


図7 他手法との比較結果

4. まとめ

当社では、数値解析技術に最適化技術を適用することで設計業務の高度化に取り組んでいる。本報では、延性き裂進展解析モデルの試験データ合わせ込みに、マルチタスクベイズ最適化技術を応用することで、従来2か月要していた解析モデルのパラメータ調整時間を3日に大幅短縮できることを確認した。今後、本技術について当社他製品への展開を進めていく。また、最適化により得られた GTN パラメータについては、他試験片に対する適用性について今後検証する計画である。

参考文献

- (1) 加藤基規ほか, 耐震性と経済性を両立するプラント支持鉄骨の合理的設計技術の開発, 三菱重工技報 Vol.52 No.1 (2015) P9
- (2) Donald R.J. et al, Efficient global optimization of expensive black-box functions, Journal of Global Optimization (1998) 13:455-492
- (3) Kevin S. et al, Multi-task Bayesian optimization, Advances in Neural Information Processing Systems 26 (2013) 2004-2012
- (4) Hojo K. et al, Ductile tearing prediction of ferritic pipe material by GTN model for atlas+ European project, Pressure Vessels & Piping Conference (2020)