

非線形材料構成則計算に対する 深層学習の適用可能性の検討

賀須井直規ⁱ, 今井隆太ⁱⁱ

Application of Deep Learning to Non-Linear Constitutive Equation Calculation

Naoki KASUI, Ryuta IMAI

構造解析の高速化に向け、近年、機械学習関連手法の活用が注目されている。本稿では、構造解析の構成要素のうち特に材料構成則計算に注目し、従来手法であるリターンマッピングの機能を代替するような深層学習モデルを具体的に構築・評価した。その結果、深層学習モデルは概ね高精度に従来手法の結果を再現した。今後、実務レベルの構造解析におけるさらなる精度検証や高速化効果の定量化を経て、構造解析への深層学習の適用に関する研究・取組が発展していくことが期待される。

(キーワード): 構造解析, 材料構成則, 機械学習, 深層学習, 代理モデル

1 はじめに

構造解析は、あらゆる構造物の設計において重要なツールとなっている。

特に昨今では、持続可能な開発目標（SDGs, Sustainable Development Goals）にも謳われるエネルギー・防災分野での課題解決に向け、その重要性はますます増加している。例えば、二酸化炭素の回収・有効利用・貯留（CCUS, Carbon dioxide Capture, Utilization or Storage）や使用済み核燃料を含む放射性物質の地層処分の際に際して、岩盤を含むバリアの安全性や、水の移動や土の変形およびそれらの相互作用を定量的に予測・評価する必要がある。また、災害に対し強靱（resilient）なまちづくりに向け重視される施設の健全性の維持・管理においても、材料の定量的な健全性評価が求められる。

しかしながら、このような構造解析、中でも非線形な材料構成則（力と材料変形の対応付け）の計算は、従来手法（リターンマッピング）では計算負荷が大きく、本来必要な精度・条件数の解析を実施することが困難となる場合がある。

材料構成則計算ひいては構造解析の高速化に向け、近年、機械学習関連手法の活用が注目されている。リターンマッピングで必要となる反復計算や計算負荷の高い数値微分に対し、機械学習手法を用いることでその過程を省略・簡素化することできる見込みがあり、これを通じて計算負荷の低減を実現できる可能性がある」と指摘されている。

現状、国内においては単軸応力状態を仮定した基礎的検討^{1,2)}等がなされている段階だが、今後知見の蓄積につれ、さらに実用的な問題において精度との両立に関する検討が行われることが期待される。

以上を踏まえ、本稿では、非線形材料構成則計算に関してリターンマッピングの機能を代替するような深層学習モデルをごく簡単ではあるが具体的に構築・評価し、それを通じて、非線形材料構成則計算に対する深層学習の適用の可能性について考察する。

2 手法

2.1 構築するモデル

非線形材料構成則計算におけるリターンマッピン

ⁱ サイエンスソリューション部 社会インフラチーム コンサルタント 修士（工学）

ⁱⁱ サイエンスソリューション部 社会インフラチーム 上席主任コンサルタント 博士（数理学）

グでは、材料構成則（弾性率や単軸引張における降伏応力といった材料固有の挙動特性）が既知であるとの前提の下で、表 1 に示す通り、現時刻における応力 σ_0 と相当塑性歪み $\bar{\varepsilon}_{p0}$ 、およびごくわずかに進んだ次時刻への歪み増分 $\Delta\varepsilon$ を入力として、次時刻における応力 σ_1 、塑性歪み（実際には現時刻からの増分 $\Delta\bar{\varepsilon}_p$ ）、相当塑性歪み（実際には現時刻からの増分 $\Delta\varepsilon_p$ ）を特定する。本検討では、3 軸応力状態におけるリターンマッピングの機能を代替する深層学習モデルを構築・評価する。

具体的には、表 2 に示す 2 通りの代替モデル A, B を作成する。代替モデル A では、リターンマッピングにおいて既知としている材料構成則を参照せずに、

入力と出力の関係を直接に予測する。一方、代替モデル B では、材料構成則を部分的に参照して予め次時刻が弾性範囲内にあるか塑性範囲内にあるかを判定することとし、弾性・塑性それぞれに対応するよう別々に構築された 2 つの深層学習モデルの一方を使用して次時刻の状態を予測する。すなわち、2 つの代替モデルは、材料構成則の一部を用いて弾性・塑性を事前に判定する (B) か否 (A) かに違いがあり、したがって適用容易性においては A、精度においては B が優れるものと期待することができる。

2.2 材料構成則

本検討では、単純な材料構成則として、von Mises

表 1 リターンマッピングおよび代替モデルの入出力データ項目

入出力	分類	記号	意味	形式
入力 (計 13 次元)	現在の状態	σ_0	現時刻における応力	6 次元ベクトル
		$\bar{\varepsilon}_{p0}$	現時刻における相当塑性歪み	スカラー
	状態の変化	$\Delta\varepsilon$	現時刻から次時刻への歪み増分	6 次元ベクトル
出力 (計 13 次元)	次の状態	σ_1	次時刻における応力	6 次元ベクトル
		$\Delta\bar{\varepsilon}_p$	現時刻から次時刻への相当塑性歪み増分	スカラー
		$\Delta\varepsilon_p$	現時刻から次時刻への塑性歪み増分	6 次元ベクトル

表 2 構築対象とする 2 つのモデル

	入出力	学習の方法	想定する利点
代替モデル A	材料構成則を使用しない。	弾性範囲・塑性範囲の標本を区別せずに学習した、全範囲対応モデルを構築する。	材料構成則を使用しない分、B に比較して汎用性や適用容易性が高い。
代替モデル B	材料構成則を参照して、次の状態が弾性範囲内か塑性範囲内かを事前判定し、対応するモデルで推定する。	弾性範囲の標本のみの学習したモデルと、塑性範囲の標本のみの学習したモデルの 2 つを別々に構築する。	従来手法同様、材料構成則を使用する分、A に比較して精度が高くなることが期待される。

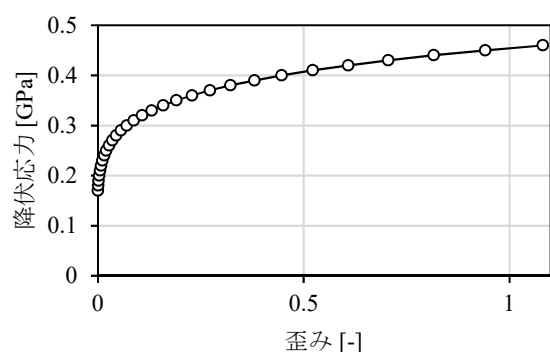


図 1 採用した単軸引張における降伏応力テーブル

モデル，等方硬化則， n 乗硬化則を検討対象とした。ヤング率は 106.3 GPa，ポアソン比は 0.34，単軸引張における降伏応力は図 1 のように設定した。これらのデータは，金属を想定して仮想的に設定したものである。

2.3 データセット

データセットは，各標本の形式を表 1 に示す 26 次元実数値ベクトルとして，標本数 100,000（弾性範囲内標本数 36,625，塑性範囲内標本数 63,375）となるように作成した。入力となる各データは一樣乱数で独立に生成（生成範囲は， σ_0 の各次元：-0.4–0.4 GPa， ε_{p0} ：0–1， $\Delta\varepsilon$ の各次元：-0.01–0.01）し，出力となる各データは従来手法であるリターンマッピングアルゴリズムにより算出した（今回は単純な材料構成則を扱っているため，リターンマッピングで大量に標本を生成できる）。

100,000 本の標本のうち，無作為に抽出された

64,000 本を学習用，16,000 本を検証用（学習の終了判定に使用），20,000 本をテスト用に使用した。

2.4 学習の条件

本検討での学習条件を，試行的に表 3 のように設定した。記載を省略したパラメータは，いずれもライブラリ TensorFlow.Keras 2.6.0^{3,4)}のデフォルト値とした。

なお，ごく基礎的なものである本検討ではハイパーパラメータのチューニングを取り扱うことができなかった。この点については，検討の余地が残されている。

3 結果

図 2，図 3 に，各標本に関する出力となる 13 項目について，真値（リターンマッピングによる計算値）と各代替モデルによる予測値との比較結果を示す。

読み取れる第一の結果として，両モデルとも，いずれのデータ項目も従来手法による結果をよく再現した（全項目に関する決定係数 R^2 平均値が，モデル A で 0.966，モデル B 弾性範囲用で 0.999 以上，モデル B 塑性範囲用で 0.969）。このことから，非線形材料構成則計算を深層学習モデルで代替することは，精度の面で実用的である見込みがあると推察できる。

読み取れる第二の結果として，モデル A では，モデル B と比較して，歪み増分 $\Delta\varepsilon_p$ の各成分や相当塑性歪み増分 $\Delta\varepsilon_p$ が 0 に近い場合（図 2 中の□に含まれる標本）において精度が低くなった。このことから，弾性・塑性の事前情報なしに共通した深層学習モデ

表 3 学習に関する条件設定

項目	設定内容
モデル構造	全結合ニューラルネットワーク - 層数・ユニット数：層数 6，いずれもユニット数 13 - 活性化関数：出力層以外は <i>selu</i> ，出力層は <i>linear</i>
前後処理	- 前処理：学習用データセットの平均値・標準偏差で標準化 - 後処理：学習用データセットの平均値・標準偏差での標準化の逆変換
学習方法	ミニバッチ学習 - バッチサイズ：16,000（学習用データセットの 20%） - 最適化手法：Adam - 最適化指標：平均 2 乗誤差（MSE） - 終了条件：検証用データの MSE が最小となった時点（結果的に約 20,000 エポック）

* 記載を省略したパラメータは，いずれもライブラリ TensorFlow.Keras 2.6.0^{3,4)}のデフォルト値とした。

ルで従来手法を代替することは難しい場面があり、判定を行っておくことが精度の向上において重要でしたがって、材料構成則を用いて事前に弾性・塑性のあることが示唆される。

代替モデルA 従来手法を良好に再現（平均 $R^2 = 0.966$ ）、ただし歪み増分0付近の精度には課題あり

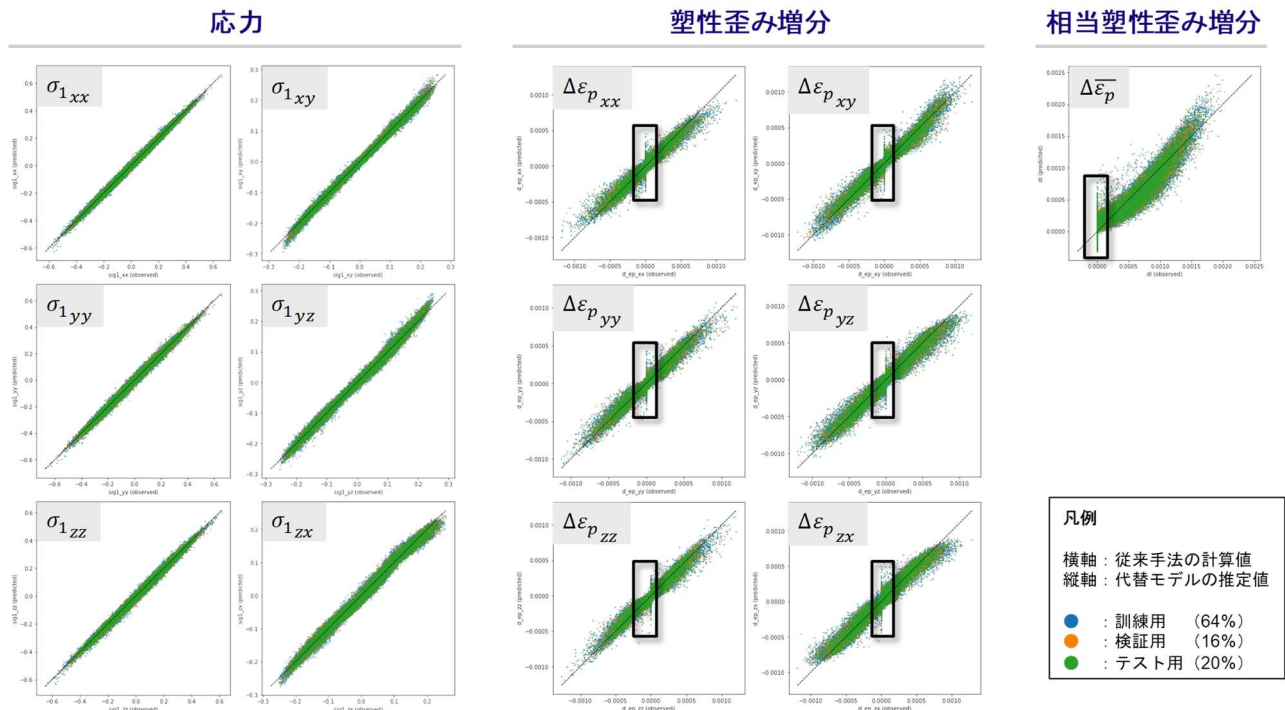


図 2 代替モデル A に関する真値と予測値との比較

代替モデルB 従来手法を良好に再現（弾性範囲用：平均 $R^2 > 0.999$ 、塑性範囲用：平均 $R^2 = 0.969$ ）

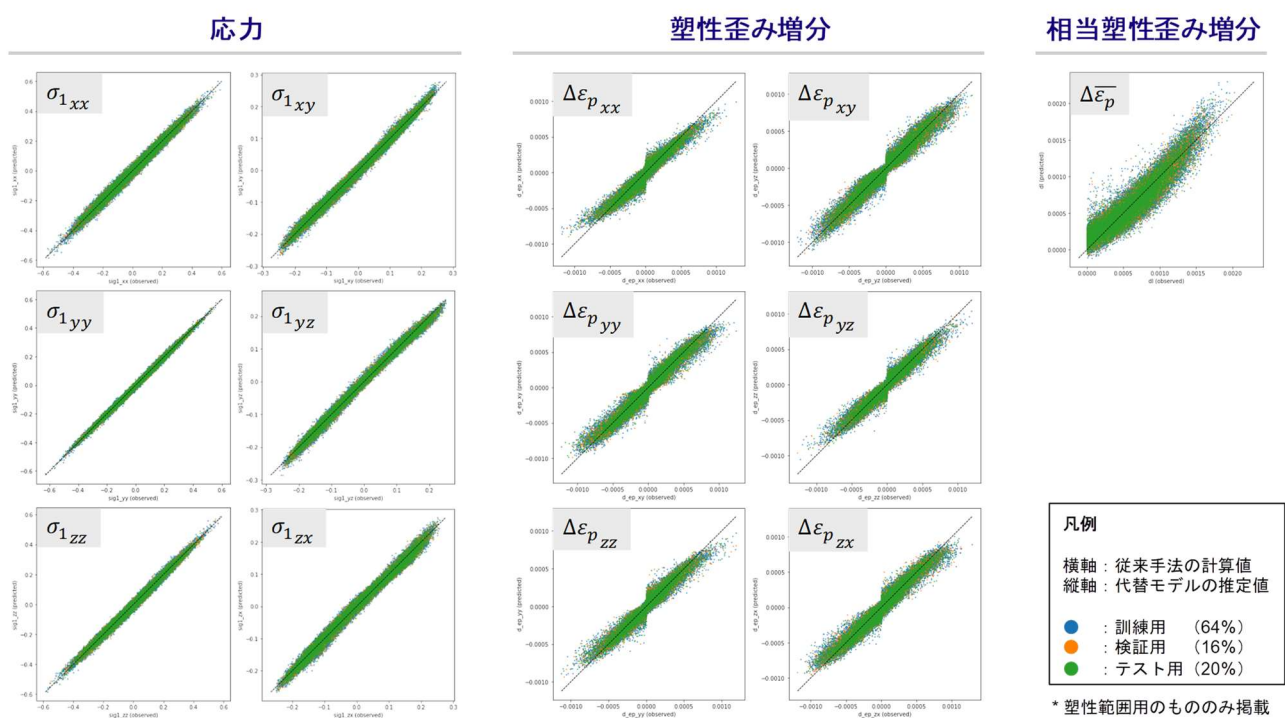


図 3 代替モデル B に関する真値と予測値との比較

4 結論

本稿では、非線形材料構成則の計算について、従来手法リターンマッピングを代替する深層学習モデルを試行的に構築し、その精度を評価した。

その結果、以下の結論が導かれた。

- 非線形材料構成則計算を深層学習モデルで代替することは、精度の面で実用的である見込みがある。
- 弾性範囲用・塑性範囲用の深層学習モデルを別々に構築しておき、推定に際しては事前に弾性・塑性を判定した上で対応するモデルを使用することで、精度がさらに向上する。

今後、更なる発展に向けた課題としては、以下の点に関する検討が挙げられる。

- 精度について、材料構成則計算単体としてではなく、実際の構造解析に適用した際に実用的なレベルにあるか否かを評価する。
- 代替モデルでは、反復計算が不要となる点や、微分を数値的なものから解析的なものに置き換えることができる点において、計算負荷の削減が期待できる。これによる従来手法に対する高速化の可能性について、定量的な分析を行う。

本稿での検討はごく簡単なものであったが、構造解析への深層学習の適用の有望性を示唆するものとなった。今後、実務レベルの構造解析におけるさらなる精度検証や高速化効果の定量化を経て、構造解析

への深層学習の適用に関する研究・取組が発展していくことが期待される。

引用文献

- 1) 鈴木 琢也, 松岡 康友: リカレントニューラルネットワークによる材料構成則の構築に関する基礎的研究, 日本建築学会構造系論文集, 82 巻 (2017) 543-553 頁
- 2) 寺西 正輝: ニューラルネットワークを援用したリターンマッピングアルゴリズムによる材料構成則の応力計算法, 日本建築学会構造系論文集, 85 巻 (2020) 1565-1573 頁
- 3) Martín Abadi, Ashish Agarwal, Paul Barham, Eugene Brevdo, Zhifeng Chen, Craig Citro, Greg S. Corrado, Andy Davis, Jeffrey Dean, Matthieu Devin, Sanjay Ghemawat, Ian Goodfellow, Andrew Harp, Geoffrey Irving, Michael Isard, Rafal Jozefowicz, Yangqing Jia, Lukasz Kaiser, Manjunath Kudlur, Josh Levenberg, Dan Mané, Mike Schuster, Rajat Monga, Sherry Moore, Derek Murray, Chris Olah, Jonathon Shlens, Benoit Steiner, Ilya Sutskever, Kunal Talwar, Paul Tucker, Vincent Vanhoucke, Vijay Vasudevan, Fernanda Viégas, Oriol Vinyals, Pete Warden, Martin Wattenberg, Martin Wicke, Yuan Yu, and Xiaoqiang Zheng : TensorFlow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems, 2015, <https://www.tensorflow.org/>
- 4) Chollet, François and others : Keras , 2015 , <https://keras.io/>