

計算科学技術部会セッション

人工知能技術の活用と将来展望

Application of Artificial Intelligence Technologies and its Future Prospects

(1) 深層学習によるき裂進展予測のためのサロゲートモデルの構築

(1) Construction of surrogate model for prediction of crack propagation using deep learning

*和田 義孝¹¹近畿大学 理工学部 機械工学科

1. はじめに

ILSVRC 2012 におけるディープラーニング（深層学習）⁽¹⁾の有効性が画像認識において示されその可能性に多くの人々が期待する状況になって久しい。しかし、計算力学や CAE といった分野こそ、ディープラーニングとの親和性が高いと期待するもののその応用方法・利用方法については先行研究事例が少ない。一方で、もともと多くのデータを必要とする分野（材料設計、流体工学等）においては特徴量を抽出する多次元非線形マッピングの技術としてディープラーニングの利用例が複数報告されている⁽²⁾。本研究では重合メッシュ法によるき裂進展データを大量に生成し、何をどのように学習するのがサロゲートモデルの構築に有効なのかを裂進展挙動を通して考察する。

2. ディープラーニングの現状

画像認識に代表される文字認識、人認識、顔認識等のピクセル単位で学習するディープラーニング（＝大規模入力、多階層のニューラルネットワーク）の成功例⁽¹⁾から大規模な研究開発および IT 企業および自動車企業による投資が始まった。これらの動きに呼応する形で、例えば NVIDIA による GPGPU 開発のディープラーニング向けの開発⁽³⁾、各研究機関および大学によるディープラーニング向けの API の開発など加速した。これらの動向に対して CAE に対する AI およびディープラーニングへの適用の期待も高まっている^(4,5)。しかし、画像解析による応用はその事例は多数見受けられるが、一方で物理現象、工学設計における応用方法が全く示されていない現状がある。USNCCM2017（米国計算力学学会）において E. Haber によりディープラーニングの新しい学習方法の提案が Semi-plenary lecture⁽⁶⁾があった。この講演における要旨は、計算力学の手法をディープニューラルネットワークの学習に適用することにより計算科学研究者の提案よりさらに効果的な学習が達成できるという点である。学習手法にたいするブレークスルーを示唆する画期的な発表があった。複雑な問題、多入力・他出力のディープニューラルネットワークの学習方法の進歩に大きく貢献することが現在進行している。一方で、トヨタ自動車は、自動運転実現のためにはあと 142 億万kmの走行距離が必要だという試算を示している⁽⁷⁾。この数値は、技術のある運転手が 10000 人・台が一人 1 万³メートル以上の走行距離が必要だと示唆している。学習は人間の経験と相対するところがある。例えば、事故、回避などのアクシデント事例は特に学習が必要であるが、そういったケースは全体のデータに対する学習ケース（時間）は少ない。詳細は後述（5章）するが、荷重方向に対して角度を有するき裂は進展の直後少ない時間で進展方向を変える。つまり、学習するためのデータ数が少なくなる。このことは、多くの工学応用に関して常に問題となる。また、多くの工学問題ではどの場所のどのような物理量を学習させればよいのかの知見が全くないことが大きな課題であると指摘できる。

3. ディープラーニングを実現する技術

現在、ディープラーニングという言葉には次のような意味が込められていると考える。

*Yoshitaka Wada¹

¹Department of Mechanical Engineering, Kindai University

「バックプロパゲーション(BP)法の改良および過学習の防止手法も含めた多入力多階層のニューラルネットワーク(NN)の学習手法およびそれらの学習で得た NN の重み係数」

つまり、ディープラーニングとはアルゴリズムを指し示すだけのテクニカルタームではない。このタームは自動運転や人工知能を実現するための重要な役割があることが同時に期待されていると昨今の報道⁽⁸⁾から理解できる。

ニューラルネットワークは、Fig.1 に示すノードとそれらを結ぶ結線によりモデル化される。すべての結線はノードから出力された値を変更する重み w_{ijk} とバイアス b_{ijk} が与えられる。各ノードは式 1 に表されるシグモイド関数（他の関数形式も存在する）により演算されることが一般的である。この関数の特徴は、Fig.2 に示すように、入力値が大きくなると 1 に漸近し、入力値が小さくなると 0 へ漸近する。入力値が 0 では 1/2（傾き 1/4）を出力する。

最も基本的な関数 $f(x)$ のフィッティングを行うには 1 入力 1 出力のニューラルネットワークの学習を行えばよい。一般的には入力、出力ともにベクトルないしマトリックスになる。画像の学習（文字認識、人や車の認識）は 1 ピクセル=1 入力となるためマトリックスがその入力になる。

ニューラルネットワークでは、大規模な重み w_{ijk} とバイアス b_{ijk} の逐次更新により学習を進める。学習が進んだニューラルネットワークはエンジニアが望んだ能力を獲得している状態を学習により達成する。具体的には、Fig.3 に示すような流れで学習を行う。これらの方法は、SOR 法などのような初歩的な反復法ソルバーと同じ程度のプログラミングが要求されているためニューラルネットワーク実現のための基本的な骨子の理解は極めて容易である。

本章の冒頭においても述べたように通常の誤差逆伝播学習では大規模なニューラルネットワークは学習ができなかった。それらの学習を可能にしたのがいくつかの学習方法の改善である。例えば、10 層以上の学習を確実に進めるためには、出力と入力に同じ値を用いて 1 層ずつ学習を進める方法がよくとられている。また、最新の研究結果では 2 階層のマルチグリッドであるコースグリッドコレクションを利用した学習方法も提案⁽⁹⁾されており、学習結果もより誤差が小さくなることも示されている。入力データに意図的に誤差を与えて学習をさせる方法も取られる。この方法の利点はデータセット数が簡単に数倍に増やせる点である。これらの学習を強化する方法を組み合わせるとディープラーニングが実装され様々な成果を生み出している。

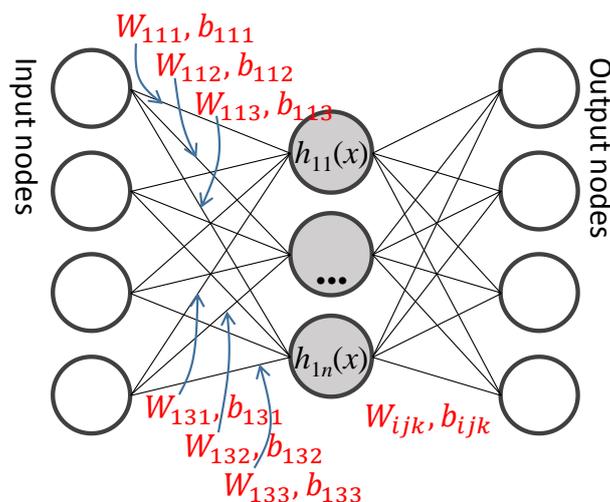


Fig.1 ニューラルネットワークの構成

$$h_{mn}(x) = \frac{1}{1 + e^{-\sum_{i=1}^k (W_{mni}x + b_{mni})}} \quad (1)$$

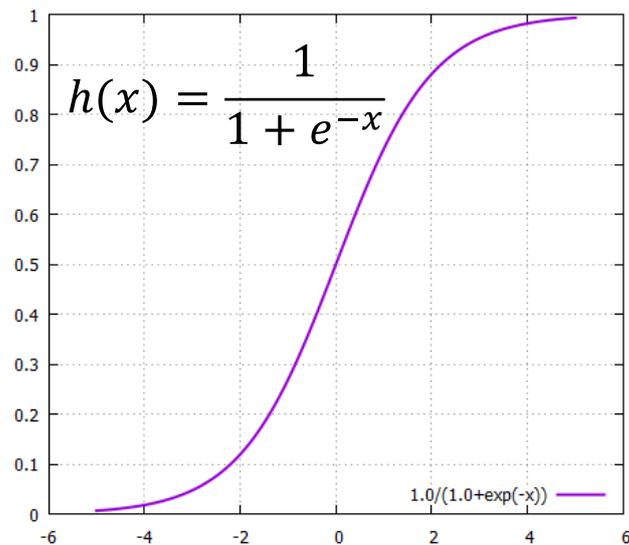


Fig.2 シグモイド関数

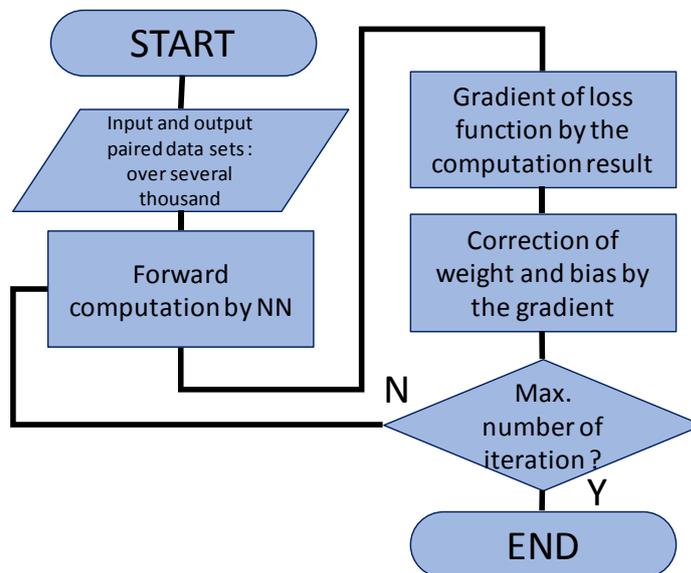


Fig.3 ニューラルネットワークの学習

4. CAEにおけるサロゲートモデル

工学応用への問題を考えると、何を入力と出力にするのか。学習データはどのように準備するのが最大の問題となる。物理現象は空間、物性、物理量（変位、速度、ひずみ、応力、温度等）が入力または出力されることになる。物理量を学習（測定）する位置の取扱いを一般化しなければ座標系依存の学習となる。そこから法則を見出すことは困難である。例えば、同じ目的の部品においてもそのサイズが10倍も異なる場合サイズの違いをどのように扱うのかを定める必要がある。形状が決まっているのであれば、ノーマライズを行うことが入力のパラメータを減じることになる。ただし、ノーマライズを行った係数は学習対象となる。また荷重に関しても同様で特に弾性問題であれば単位力を想定して学習させる。

サロゲートモデルは代替モデルとして物理現象を模擬するモデルである。したがって、微分方程式を完全に代替するものではない。これまでパラメトリックに問題を解いていた場合、変数を可能な限り限定することにより現象の傾向を把握していた。例えば、ニューラルネットワークを使ったサロゲートモデルであれば多数の変数を用いて学習し、より自由度の高いサロゲートモデルの構築が可能となる。しかし、例えば非線形問題においては解析結果の取得に時間が必要であることと解析精度の低さが問題である。繰返

しの応力ひずみ関係はヒステリシスループを示し1つのひずみ（変位）に対して複数の応力（荷重）状態を示す。確実に学習できるとすれば降伏局面や背応力自体を学習させることである。しかし、実際の降伏現象は等方硬化、移動硬化の混合で生じているうえに降伏局面が連続であるとは限らない。ディープラーニングによる学習はそういったモデル化が困難な現象に対して学習できる可能性がある。したがって、今後どのような物理量を学習させることが精度よく実質的な時間で学習が行えるのかを調べる必要がある。

5. き裂進展サロゲートモデル

本稿では、疲労き裂進展を具体事例としてディープラーニング技術を適用しき裂進展挙動が予測できるかどうかを検証した。3つのフェーズを想定し、フェーズ1は応力拡大係数から進展方向ベクトルおよび進展速度を学習、フェーズ2はき裂先端近傍応力、変位から進展方向ベクトルおよび進展速度を学習、フェーズ3は初期き裂中心位置を原点としき裂先端位置およびき裂が向いている方向ベクトルから進展方向ベクトルおよび進展速度を学習、という3つの場合に分けた。実用上はき裂先端の位置および進展方向のベクトルから学習できることが望ましい。その理由は、き裂を画像的に扱うことにより直接その余寿命やき裂形状の予測が可能になるためである。

疲労き裂進展解析は、弾性計算（ポアソン方程式）、応力拡大係数、等価応力拡大係数、き裂進展速度、き裂進展方向を微小ステップで解析を行いその履歴（積分）として最終的なき裂進展形状が計算される。Fig.4に等価応力拡大係数、き裂進展速度およびき裂進展方向を決定する経験則による式を示す⁽⁹⁻¹¹⁾。ディープラーニングによりこれら式を陰的に再構成されるかどうか工学分野における応用のための提示すべき具体例である。

Crack growth direction: Richard's criterion

$$\varphi_0 = \mp \left[A \frac{|K_{II}|}{K_I + |K_{II}| + |K_{III}|} + B \left(\frac{|K_{II}|}{K_I + |K_{II}| + |K_{III}|} \right)^2 \right]^{(*)1}$$

$\varphi_0 < 0^\circ$ for $K_{II} > 0$ and $\varphi_0 > 0^\circ$ for $K_{II} < 0$ and $K_I \geq 0$
 $A=140^\circ$, $B=-70^\circ$.

Crack growth rate: Paris's law

$$da/dN = C(\Delta K_{eq})^n \quad (**)2$$

$$K_{eq} = \frac{K_I}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{K_I^2 + 4(\alpha_1 K_{II})^2 + 4(\alpha_2 K_{III})^2} \quad (**)1$$

$\alpha_1 = K_{Ic}/K_{IIc}$ and $\alpha_2 = K_{Ic}/K_{IIIc}$
 $\alpha_1 = 1.155$, $\alpha_2 = 1.0$

Material
 A533B steel $E=206\text{GPa}$, $\nu=0.3$
 $C=1.67 \times 10^{-12}$, $n=3.23$

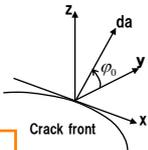


Fig.4 き裂進展則にかかわる多くの法則とパラメータ(8、9)

学習データは重合メッシュ法(以下 s-FEM)によるき裂進展解析⁽¹¹⁾を用い約 5,000 におよぶデータを生成した。データをもとに、ノイズ混入、ノード停止などのテクニックを用いて総学習数 12 万回を行った。実用的な観点からは 12 万回の学習数は極めて少ない。Fig.5 にき裂進展速度の学習結果を示す。またその具体的な予測された数値を表 1 に示す。S-FEM によるき裂進展解析と同様にシミュレーションによるき裂進展速度の予測は 1 サイクル当たりの進展量ではない。理由は、1 サイクル当たりの進展量は 10^{-12} のオーダーのためそのサイズではメッシュ生成ができない。したがって、最小メッシュサイズあたりに何サイクル必要か計算することで、き裂進展数値シミュレーションを連続的に行う。Fig.6 から、き裂進展開始直後では大きな差異が左右のき裂先端部位で見られる。しかし、き裂進展が進むにつれ S-FEM の結果と一致する。荷重方向に対して斜めに存在するき裂が繰返し荷重を受けると急激にその向きを変え、その後はほぼ水平に進展する。つまり、き裂の向きを変える学習が少ない。進展方向を変える学習データ数は全体の学習データ数のわずか 4% 程度にしか過ぎない。

本適用例は、CAE アプリケーション自体をデータ生成のための手法として利用することの提案である。

近年の配列計算機環境およびクラウドによる並列計算サービスの利用を考えればパラメトリックにバッチ処理を実行する技術的困難さはほとんどない。このような、状況を踏まえて CAE アプリケーションにデータを生成できれば、意図的に境界領域（考えている解空間の端）およびデータ数の取得が相対的に少なくなる箇所（本適用例ではき裂進展直後）を適切に理解しデータの密度を適正化（必要なデータの密度の均質化）が可能となる。

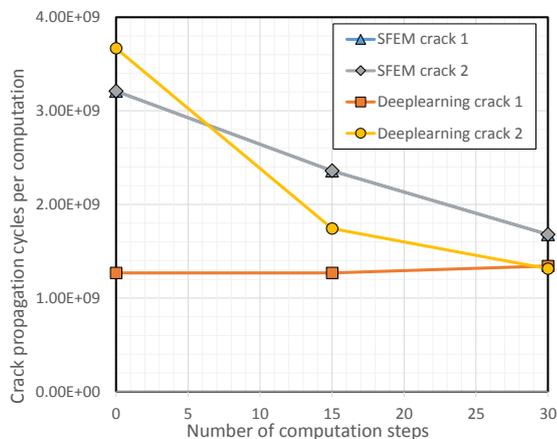


Fig.5 き裂進展速度の予測結果と進展ステップ数

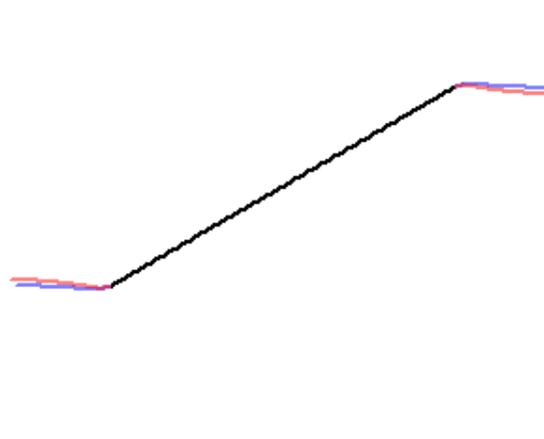


Fig.6 機械学習によるき裂進展予測と重合メッシュ法によるき裂進展
(正解)：黒・初期き裂、赤・重合メッシュ法、青・ニューラルネットワークによる予測

6. おわりに

ディープラーニングおよびそれらを実用化するための技術集積により実用化が進行している。また、学習方法も様々な分野の知見を適用することによりより効果的・効率的なサロゲートモデルの構築が可能となると考えられる。一方で現象の分析と効果的な学習パラメータ選定など知見の獲得が急務である。

参考文献

- (1) A. Krizhevsky, et al., ImageNet Classification with Deep Convolutional, Advances in Neural Information Processing Systems 25 (NIPS 2012), 2012
- (2) 日本機械学会第30回計算力学講演会講演論文集、大阪、2017
- (3) 井崎、NVIDIAのディープラーニング戦略と最新情報、GPU Technology Conference、Tokyo、2016
- (4) 和田、CAEにおけるディープラーニング活用の一考察（ディープラーニングによるき裂進展挙動予測）、第48回関西CAE懇話会、京都、2016
- (5) 和田、CAEにおけるディープラーニング活用～重合メッシュ法によるき裂進展挙動学習～、ADVENTUREClusterユーザー会2017、Tokyo、2017
- (6) E. Haber、Deep Learning Meets Differential Equations and Optimal Control、14th U.S. National Congress on Computational Mechanics、Semi-plenary lecture、Montreal、2017
- (7) トヨタ社長「142億キロの試験走行」で自動運転実現を宣言、<https://forbesjapan.com/articles/detail/13813>、2016
- (8) 例えば http://monoist.atmarkit.co.jp/mn/subtop/features/automated_vehicle/ などの特定情報をクリップする記事
- (9) H. A. Richard、M. Fulland、M. Sander S. N., Fatigue Fract. Eng. Mater Struct., Vol. 28, pp. 3-12, 2005
- (10) P. C. Paris and F. Erdogan, J. bas. Eng. Mater. Trans. ASME, Ser. D, 85, pp. 528-533, 1963
- (11) 菊池、和田ら、重合メッシュ法を用いた疲労き裂進展シミュレーション(第2報二つの段違いき裂の相互作用の検討)、機論A、74巻、745、2008