

ランダム生成構造の訓練データに基づく Neural Operatorの逆問題への応用

Application of Neural Operator for Invers Problem
Based on Randomly Generated Training Data

鎌田浩基¹⁾, 山本真哉²⁾, 櫻井英行³⁾, 西尾真由子⁴⁾, 大竹雄⁵⁾

Hiroki Kamada, Shinya Yamamoto, Hideyuki Sakurai,
Mayuko Nishio and Yu Otake

- 1) 修(工) 清水建設 技術研究所 (〒135-8530 東京都江東区越中島3-4-17, E-mail: hiroki.kamada@shimz.co.jp)
- 2) 博(工) 清水建設 技術研究所 (〒135-8530 東京都江東区越中島3-4-17, E-mail: s-yama@shimz.co.jp)
- 3) 博(工) 清水建設 技術研究所 (〒135-8530 東京都江東区越中島3-4-17, E-mail: s-yama@shimz.co.jp)
- 4) 博(工) 筑波大学 システム情報系 准教授 (〒305-8573 茨城県つくば市天王台1-1-1, E-mail: nishio@kz.tsukuba.ac.jp)
- 5) 博(工) 東北大学 工学研究科 准教授 (〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉6-6-06, E-mail: yu.otake.b6@tohoku.ac.jp)

Improving computational efficiency is a challenge in inverse analysis of non-homogeneous spatial distributions involving complex physical phenomena. We used a neural operator, which is attracting attention as a surrogate modeling method that can handle non-homogeneous spatial distributions, and examined its applicability to inverse analysis problems. We constructed a model using spatially random physical property distributions as training data. We applied it to an inverse problem and evaluated its performance. As a result, we confirmed that the model outperformed conventional image-based methods under certain conditions, suggesting its applicability to real problems.

Key Words : *Fourier Neural Operator, Topology Optimization, Heterogeneous Field Estimation*

1. はじめに

数値シミュレーション技術は、非常に複雑な物理現象の解明、予測を可能するまでに発展してきた。これらの精緻なシミュレーション技術の展開が期待されている工学問題の一つとして、形状・配置の最適化、未知の物性推定などの逆問題が挙げられる。逆問題は通常の順解析では解析条件となるようなパラメータ（設計変数）を、最適化問題を解くことにより推定するため、通常多くの繰り返し計算を必要とするのが特徴ある。

逆問題では、設計変数が多く、現象の非線形性が強い場合、通常の勾配法に基づく最適化計算では有用な解を得られないことがある[1]。非線形現象に関連する構造性能を最大化する最適形状を創出可能なトポロジー最適化[2]や、非線形性の強い地盤内の、未知である非均質物性の空間分布推定などの逆問題では、この課題が顕著である。

上記の課題への対応として、勾配法よりも大域的最適解の探索が可能とされる最適化アルゴリズムを援用することが考えられる。しかし、そのような最適化アルゴリズムは勾配法の数十倍から数千倍の計算量となるため、計算コストの高い精緻なシミュレーションとの組み合わせる場合には、実務的な計算環境では現実的ではない。これらの実現のためには、シミュレーションの計算負荷を低減することが求められる。

シミュレーションの計算負荷を低減するため、近年多くの種類のサロゲートモデリング手法が提案されている。特に、任意の形状や、非均質な物性分布に対応するシミュレーション結果を学習するような場合には、それらを画像やメッシュ構造に変換し、ResNet [3]などのConvolutional Neural Network (CNN) やMeshGraphNet [4]などのGraph Neural Network (GNN) 手法で学習する方法が有望と考えられる。特に、近年ではNeural Operator [5]と呼ばれる手法が数値シミュレーションの学習に効果的であるとされており、これらの手法の逆問題への適用性の把握が必要とされている。

本研究では、逆解析により最適形状や非均質な物性分布を推定することを念頭に置き、任意の形状、物性分布に対する構造解析結果を予測可能なNeural Operatorによるサロゲートモデルの構築を目標とする。そのためには、適切な学習問題の設定と、Neural Operatorによるサロゲートモデルの適用性の調査を実施する必要がある。本論文では、空間的にランダムな物性分布により作成した訓練データを用いた学習に着目し、それらの適切な作成方法の検討と、Neural Operatorと他の代表的なサロゲートモデリング手法との性能比較をテストデータにより実施する。また、これらのサロゲートモデルを用いた2種類の逆解析を実施し、その結果の比較から学習手法の逆問題への適

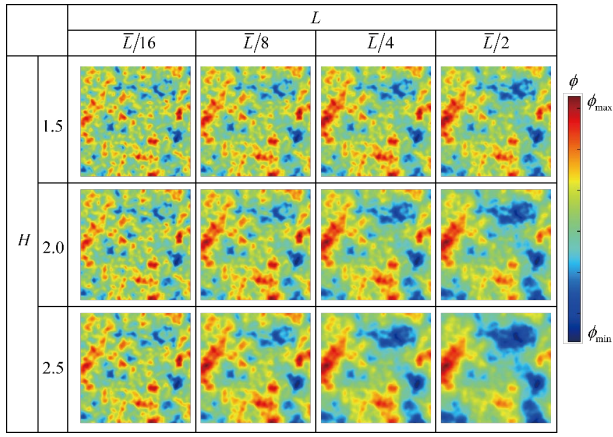


図-1 訓練データに用いるランダム場

用性の確認を行う。

2. Neural Operator

Neural Operatorは近年提案されたサロゲートモデル手法であり、CNNと同様に画像を入力し推論を行うことが可能である。任意の形状や非均質な空間分布の物性と、対応する物理応答との関係を学習し、新たな計算条件に対する物理応答を計算する用途で活用が期待されている。

Neural Operatorは、一般的なFeed-forward Neural Network (FNN) [6]やCNNなどと異なり、モデル構造内に学習可能なカーネルを有しているのが特徴であり、訓練データの離散点を細かくとるとモデル精度が向上する離散化不変性や、任意の演算子を近似可能な普遍性定理を満たすなど、優れた性質が知られている[5]。一般的なNeural Operatorの1層分の計算は以下の式で表現される。

$$u(x) = \sigma \left(Wv(x) + \int_D \kappa(x, y)v(y)dv(y) + b(x) \right) \quad \forall x \in D \quad (1)$$

ここで、 $D \subset \mathbb{R}^d$ は固定領域、 $v: D \rightarrow \mathbb{R}^n$ は入力関数、 $u: D \rightarrow \mathbb{R}^m$ は出力関数、 d は領域の次元数、 n は入力関数の次元数、 m は出力関数の次元数、 x, y は座標値、 v はルベグ測度を表す。また、 W, κ, b はそれぞれ、局所線形演算子、積分カーネル演算子、パイアス関数である。式(1)内の積分を数値的に扱う方法として、主に Graph Neural Network を用いる方法と Fourier 変換を用いる方法の2種類がある。後者は Fourier Neural Operator (FNO) [5] と呼ばれ、周波数空間での積分により計算コストの削減が可能であり、高い予測精度を有することが知られている。本研究では、FNO を用いた検討を行うこととした。

3. サロゲートモデルを用いた逆解析の手順

本研究では、固体力学問題を対象とし、物性の空間分布を推定する逆解析問題におけるNeural Operatorの適用性確認を行うために、以下のような手順で逆解析を行った。

(1) 訓練データセットの作成

本研究では、数値解析ソフトウェアを用い、訓練データ

とする数値解析結果のデータセットを作成する。数値解析の結果を学習したサロゲートモデルを構築する場合には、Erzmannら[7]やDengら[8]のように、逆解析における最適解の候補近傍となる物性の空間分布をあらかじめ用意し、それらに対応する解との関係を学習する方法がある。しかし、事前に最適解の候補を用意することは容易でない場合があり、さらに設定する訓練データによっては最適解を探索する範囲を大きく制限してしまうことが考えられる。一方、Zhouら[9]は最適解候補近傍の空間分布を訓練データとせず、Von Karmanパワースペクトル密度関数に従うランダムな空間分布を訓練データとし、Neural Operatorの学習を行っている。この方法は、完全にランダムに生成した物性の空間分布のみ用いるため、より訓練データの作成が容易というメリットがある。本研究では、以下のパワースペクトル密度関数を用いてランダムな空間分布 $\phi(x, y)$ を作成し、それを物性分布とした。

$$\Phi(\mathbf{f}) = \frac{1}{(1 + (\mathbf{f}L)^2)^H} \quad (2)$$

ここで、 \mathbf{f} は周波数、 L は相関長、 H は分母の指数を表す。 L と H は生成されるランダムな空間分布 ϕ の特徴を制御するパラメータである。本研究では、これらのパラメータを変更して学習したモデルを用いて学習を行い、テストデータに対する予測性能と、2種類の逆問題を対象とした最適解の変化を見ることで、式(2)のパラメータ設定による影響調査を行う。なお、既往文献[9]には選択方法の詳細の記載はない。

図-1に同じ乱数のシード値を設定し、式(2)のパラメータを変化させた際、生成されるランダムな空間分布 ϕ の変化の例を示す。 ϕ_{\min}, ϕ_{\max} はそれぞれ最小値、最大値である。これらのランダムな空間分布 ϕ のそれぞれのサンプルを $[0, 1]$ の範囲に正規化を行った後、以下の式によりヤング率の分布へと変換を行う。

$$E(x, y) = E^{\min} + \phi(x, y)E^{\max} \quad (3)$$

ここで、 $E(x, y)$ はヤング率のランダムな空間分布、 E^{\min}, E^{\max} はそれぞれ取り得るヤング率の最小値、最大値を表す。この分布を解析条件として目的の数値シミュレーションを行い、ヤング率 E と2次元平面ひずみ問題におけるひずみ ϵ の3成分（水平軸ひずみ、鉛直軸ひずみ、せん断ひずみ）、応力3成分（水平軸応力、鉛直軸応力、せん断応力）の組 $[E, \epsilon, \sigma]$ を訓練データとして用いる。

(2) Neural Operatorの学習

Neural Operator は CNN と同様に入力画像と出力画像のそれぞれで複数のチャンネルを持たせることが可能である。本研究ではNeural Operatorの入力として E を設定し、出力として異なるチャンネルに ϵ と σ の6成分を設定する。

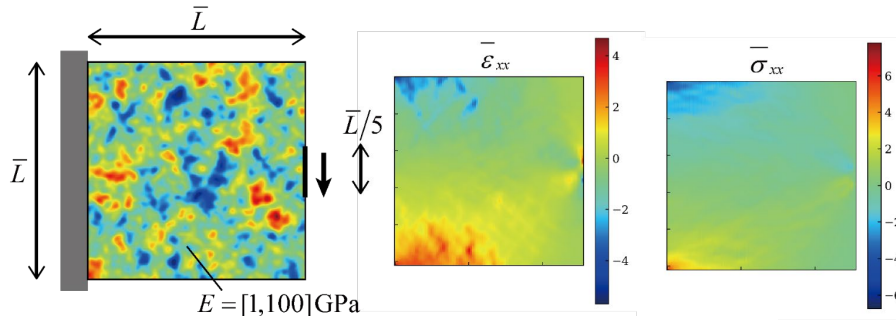


図-2 解析対象（左）と参照解の例（中央，右）

(3) 逆解析

上記の手順で学習し，構築したサロゲートモデルを用いて逆解析を実施した．本研究では基礎的な検討のため，最適化アルゴリズムとして実装の容易な勾配法ベースの Method of Moving Asymptotes [10]を用いた．

検討を行った逆解析は以下の2種類である．

a) トポロジー最適化における剛性最大化

以下の剛性最大化問題を解くことにより，最適構造の導出を行う．

$$\min_{\rho_A} f_0^A = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} dv \quad (4)$$

$$s.t. f_1^A = V - V_0 \leq 0 \quad (5)$$

ここで， ρ_A は形状を表現する設計変数，なお，本研究では $\boldsymbol{\sigma}$ および $\boldsymbol{\varepsilon}$ はサロゲートモデルの出力値とした．なお，設計変数とヤング率の関係には以下の関係を設定する．

$$E = E_{\min} + \rho_A^3 E_{\max} \quad (6)$$

b) 計測データを用いた非均質物性の同定

構造のひずみ分布の計測データが得られている状況において，計測データと解析結果の誤差二乗和を最小化することにより，構造の非均質な物性推定を行う．そのために以下のような最適化問題を設定した．

$$\min_{\rho_B} f_0^B = \int_{\Omega} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{obs}}) dv \quad (7)$$

ここで， ρ_B は物性の空間分布を表現する設計変数， $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{obs}}$ は構造のひずみ分布の計測データである．なお，式(7)の設計変数とヤング率の関係には以下を設定する．

$$E = E_{\min} + \rho_B E_{\max} \quad (8)$$

4. ランダム構造の逆解析への影響調査

本節では，逆問題に適切な訓練データの作成方法を得ることを目的として，訓練データのランダム構造が2種類の逆解析の結果へもたらす影響を調査した．

(1) 検討条件

式(2)のランダム構造の性質を決定する密度関数のパラメータのうち，相関長を $L = \bar{L}/16, \bar{L}/8, \bar{L}/4, \bar{L}/2$ ，指数

表-1 ハイパーパラメータの設定

Neural Operator		CNN	
Decoder layers	1	Num resnet blocks	6
Decoder layer size	64	Kernel size	11
Latent channels	64	Latent channels	16-64
Num fno layers	4	padding	8
Num fno modes	16	Activation function	ReLU
padding	8	-	-
Activation function	GELU	-	-

$H = 0.5, 1.0, 1.5$ と変化させ， $4 \times 3 = 12$ 通り，1000サンプルずつの訓練データを作成する．それぞれの訓練データから構築したモデルのテストデータに対する性能の比較および，さらにそれらのモデルを用いて逆解析を行い得られた結果を比較した．これにより，相関長 L と指数 H がモデル精度に及ぼす影響とNeural Operatorにより学習したサロゲートモデルの逆問題への適用性を確認する．なお，テストデータセットは密度関数のパラメータセットごとに1000サンプル設定し，単一のモデルに対し12通りのすべてのテストデータセットに対し平均二乗誤差(MSE)を計算することで汎化性能の確認を実施する．

解析対象は図-2に示す矩形領域の片持ち梁とする．本研究では基礎的な検討のため2次元平面ひずみ状態を仮定し，線形弾性解析を行う．領域内をグリッドで 100×100 分割し，解析ソルバーとして商用ソフトウェアCOMSOLを使用する．訓練データの解像度は 256×256 とした．Neural Operatorの学習にはNvidia ModulusのFourier Neural Operatorを用い，比較対象にはResNetのCNNを用いた．各ハイパーパラメータの設定値は表-1に示した通りであり，デフォルト値や事前の検討により決定した．

(2) モデル汎化性能の比較

図-3にパラメータを変化させて生成した訓練データを用いて構築した12通りのNeural Operatorモデルの，テストデータに対する予測のMSEを示した．グラフの縦軸は訓練データ生成時に設定した式(2)のパラメータ(モデル)，横軸はテストデータ生成時に設定したパラメータを表す．また，グラフ内の数値および色分けは，縦軸のモデルを用い，横軸のテストデータに対して $\boldsymbol{\varepsilon}$ と $\boldsymbol{\sigma}$ の6種類の物理量の推論を行った際の，正解とのMSEの合計を表す．図-4はNeural Operatorの性能評価の比較対象とするCNNによる

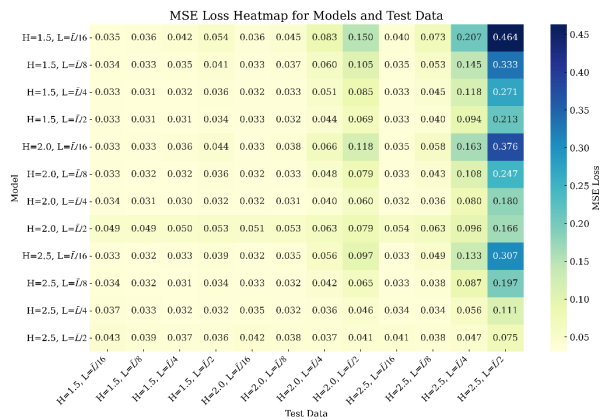


図-3 Neural Operator モデルの各テストデータに対する MSE

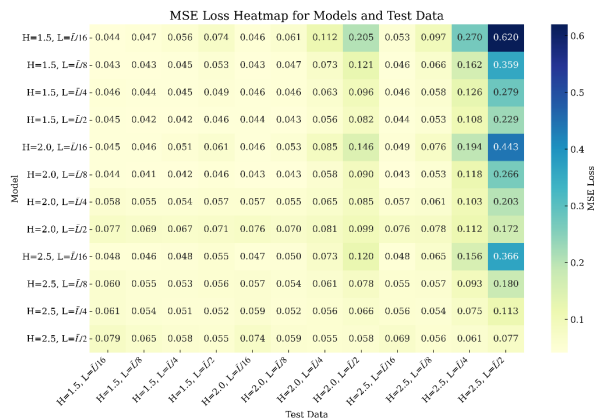


図-4 CNN モデルの各テストデータに対する MSE

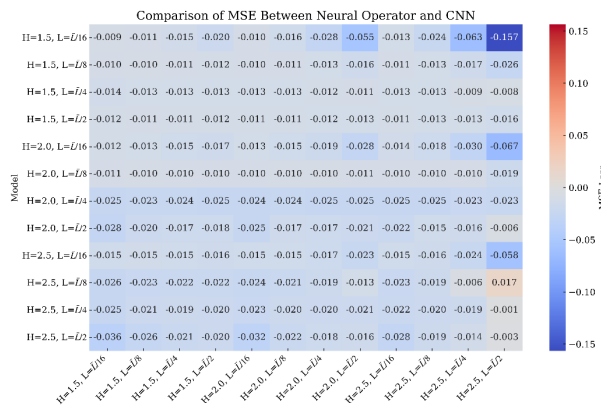
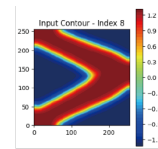


図-5 Neural Operator モデルと CNN モデルとの MSE 比較

同様の結果である。

図-3のNeural Operatorと図-4のCNNの結果において、概ね同様の傾向が見られ、訓練データ生成に用いる密度関数の相関長を $L = \bar{L}/16$, $\bar{L}/8$ と比較的小さいとしたモデルでは、それよりも大きな相関長 $L = \bar{L}/4$, $\bar{L}/2$ を設定したテストデータのMSEが最大で0.464と大きく増大した。反対に、比較的大きな相関長 $L = \bar{L}/4$, $\bar{L}/2$ のランダムデータで学習を行ったモデルでは、より相関長の小さいランダムデータからなるテストデータに対し、MSEは最大で0.06程度と比較的小さい結果となった。今回比較を行っ

FEM



Neural Operator

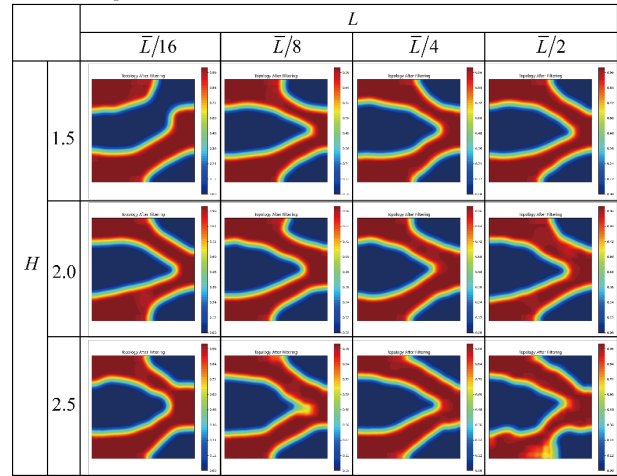


図-6 Neural Operator によるトポロジー最適化結果 CNN

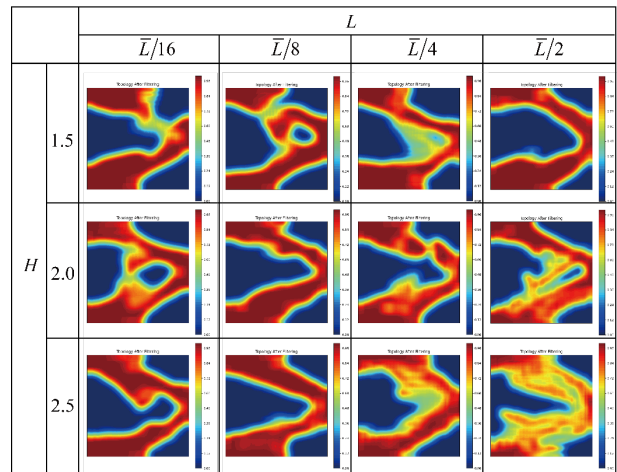


図-7 CNN による物性推定結果

た条件では、より相関長に大きい値を設定して学習した場合に、より汎化性能の高いモデルができる傾向が見られた。また、相関長 L が一定の場合には、指数 H が大きい場合、テストデータの種類を問わずMSEが概ね低減した。

図-5にNeural OperatorのMSEからCNNのMSEを引いた差分を示した。図中のMSEの差分値は概ね負の値となっており、Neural Operatorの方はより汎化性能が有することが示唆された。しかしながら、今回のそれぞれのモデルの学習に用いたハイパーパラメータの値やネットワークの重みの初期化など、最終的なモデル性能に影響を持つ因子を十分に分析した検討を行っていないため、バラツキを考慮した比較検討を行う必要がある。

(3) 逆解析への影響

前項で学習した12通りのサロゲートモデルを用いて2種類の逆解析を行った結果を比較し、適用性の調査を行った。

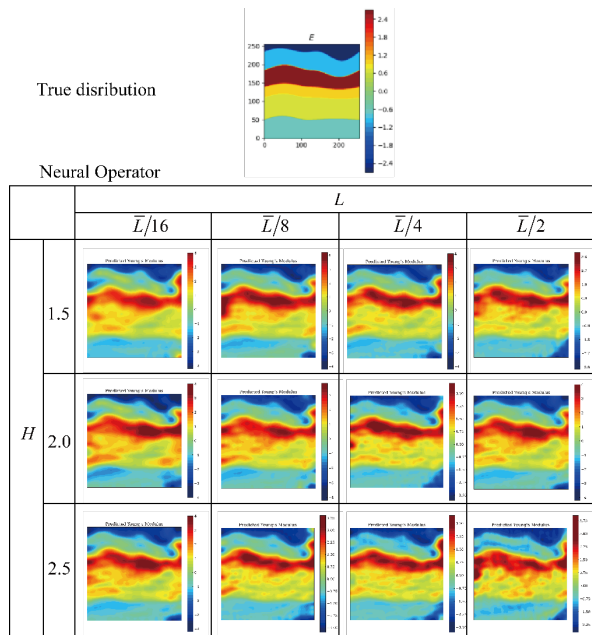


図-8 Neural Operator による非均質物性推定結果

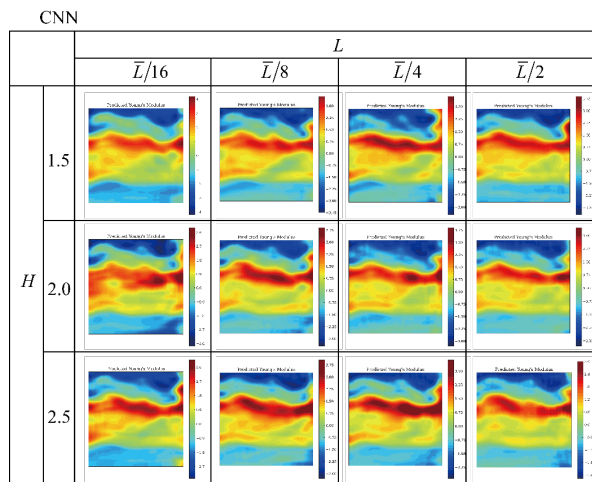


図-9 CNN による非均質物性推定結果

a) トポロジー最適化における剛性最大化

図-6, 図-7にそれぞれNeural Operator, CNNによるサロゲートモデルを用いて式(4), (5)のトポロジー最適化問題を解いた場合の ρ_A の空間分布(最適構造)を示した。図中の列方向と行方向には、それぞれ L と H を設定した。図-6には、通常のFEM解析を用いてトポロジー最適化を行った場合の最適構造を併せて示した。コンター内の青色は $E=1\text{GPa}$ の低ヤング率材料, 赤色は $E=100\text{GPa}$ の高ヤング率材料に対応する。以下では、得られた最適構造についての定性的な議論を行う。

図-6のNeural Operatorに基づく最適構造は、概ね滑らかな境界を有しており、材料の分布もFEMの結果と類似した分布となっているのが分かる。一方、図-7のCNNに基づく最適構造は、材料の境界部に、物理的に剛性に寄与しないと考えられるような波うちや、上下の非対称性が見られた。これよりNeural Operatorに基づく最適構造は、CNNのものに対し、より大域的な最適解に近づいたと考えられる。このような良い性能は、Neural

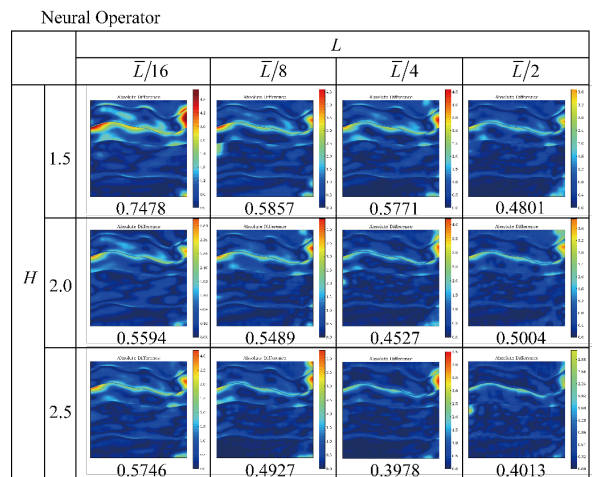


図-10 Neural Operator による非均質物性推定

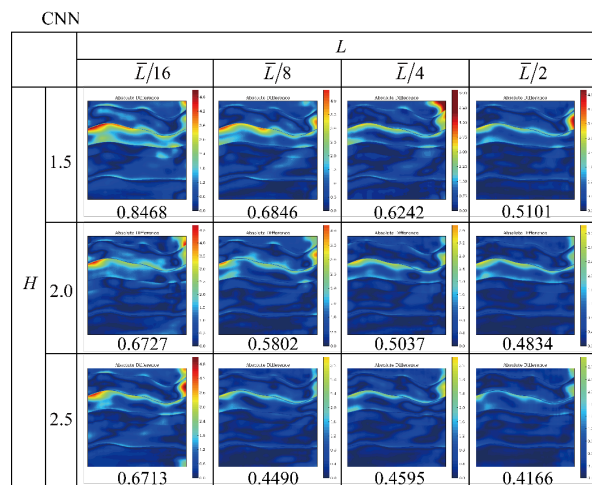


図-11 CNN による非均質物性推定誤差

Operator は空間全体を積分演算子により畳み込むような層を有しているのに対し、CNN ではより局所的なカーネルによる畳み込みを行うことに起因すると考えられる。

次に、 L , H が最適構造に与える影響を確認する。図-6のNeural Operator, 図-7のCNNのいずれの場合においても、 $(L, H) = (\bar{L}/16, 1.5)$ の場合に、高ヤング率の領域が途切れる非合理的な結果が得られた。これらのモデルは、図-3, 図-4より $(L, H) = (\bar{L}/2, 2.5)$ で生成したテストデータに対するMSEが特に高い。このテストデータは図-1に示すように、高ヤング率の材料が途切れた分布を含むため、そのようなデータを学習できていないため、非合理的な最適構造となったことが考えられる。

b) 計測データを用いた非均質物性の同定

図-8, 図-9にそれぞれNeural Operator, CNNによるサロゲートモデルを用いて式(7)の物性推定問題を解いた場合の、推定されたヤング率の空間分布を示した。図-8には、ひずみ分布の疑似的な計測データを作成した際の、解析条件とした正解のヤング率分布を併せて示した。図-8, 図-9のいずれの場合においても、正解とするヤング率の空間分布を概ねよく推定できていることが分かる。矩形領域の右上部, 右下部において、推定された物性値が、正解から外れているが、これは設定した解析条件では応力

やひずみがほとんど発生しない領域であり、ヤング率の感度が低いことが原因であると考えられる。

図-10、図-11に、正解のヤング率分布と、図-8、図-9のそれぞれの結果との絶対誤差の絶対値（推定誤差）を示した。また、それぞれのコンター図の下には、推定誤差の空間平均値を併せて示した。図-10、図-11のいずれの場合においても、前述したように矩形領域の右上、右下部の領域において比較的大きな誤差が確認された。そのほかに、矩形領域の上半分における茶色の層の、異なるヤング率との境界付近においても比較的大きな誤差が確認された。この箇所における誤差の大きさは、同じ L 、 H の場合を見ると、概ねNeural OperatorがCNNよりもわずかに小さな値となり、推定誤差の空間平均値も同様であった。一部の L 、 H では推定誤差の空間平均値がNeural OperatorがCNNを上回ったが、これは前述の矩形領域右上、右下部の影響と考えられるため、サロゲートモデルの本質的な性能差ではないと考える。次に、 L 、 H が推定誤差に与える影響を確認する。図-10のNeural Operator、図-11のCNNのいずれの場合においても、 L 、 H のそれぞれの値の増加に対して、推定誤差が低下する傾向が見られた。この結果は図-3、図-4に示した汎化性能と対応している。そのため、サロゲートモデルの汎化性能が逆解析の推定精度へと影響し、実際の工学問題における逆問題への応用時にもモデルの汎化性能の確認が重要であると考えられる。また、今回正解として用いたヤング率の分布は比較的相关長の大きなデータであるため、そのようなデータで学習したモデルが有利であったことが考えられる。

5. おわりに

逆解析により最適形状や非均質な物性分布を推定することを念頭に置いた、Neural Operatorの性能調査を実施した。特に、ランダムな空間分布を訓練データとして学習を行い、ランダム特性に関連するパラメータのモデル精度への影響、最終的な逆解析結果への影響を調査した。結果として、パラメータの設定はモデル精度や、逆解析結果にも影響を与え、問題に適した値を設定することが必要と分かった。また、Neural OperatorとCNNとの比較を実施し、テストデータを用いた検討により、概ねNeural Operatorが良い予測精度を示した。これらのサロゲートモデルを用いた逆解析結果については、両者の間に大きな違いが見られ、Neural Operatorではより大域的最適解へと近い結果が得られた。ただし、その程度は逆問題の種類や解析対象によって変化することが示唆された。そのため、従来手法のCNNと比較し、Neural Operatorは逆解析問題へより高い適用性があると考えられるものの、同時に問題に応じた適用性の違いがあり、さらなる知見の蓄積が必要である。

本研究で対象としたトポロジー最適化や非均質な物性推定などの逆問題では、最適化における反復計算などで計算コストが膨大し、最も単純な線形モデルを解析モデルに用いざるを得ない場面が多くある。目的関数の強い

非凸性から、計算環境が潤沢であったとしても最適解を通常の勾配法で求めることが困難な最適化問題を伴いうる。このような難しい課題に対し、Neural Operatorをはじめとした高性能なサロゲートモデルは非常に有望である。これまで大きくデジタル化が進んでいなかった工学領域の革新に必要な不可欠な技術の一つであり、例として建設分野では、材料や寸法などの不確実性を考慮したコンクリート3Dプリンティング構造のロバスト設計や、先進的な計測と合わせたリアルタイムの構造ヘルスマonitoringなどが考えられる。本研究で行った逆問題への適用性調査は、そのような革新へと貢献すると考える。

参考文献

- [1] K. Yaji, S. Yamasaki, K. Fujita, Data-driven multifidelity topology design using a deep generative model: Application to forced convection heat transfer problems, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 388 (2022) 114284.
- [2] M.P. Bendsøe, N. Kikuchi, Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 71 (2) (1988) 197–224.
- [3] K. He, X. Zhang, S. Ren, J. Sun, Deep residual learning for image recognition, *Proc. IEEE Comput. Soc. Conf. Comput. Vis. Pattern Recognit.* (2016) 770–778.
- [4] T. Pfaff, M. Fortunato, A. Sanchez-Gonzalez, P.W. Battaglia, Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks, *arXiv [Cs.LG]* (2020). <http://arxiv.org/abs/2010.03409>.
- [5] N. Kovachki, Z. Li, B. Liu, K. Azizzadenesheli, K. Bhattacharya, A. Stuart, A. Anandkumar, Neural Operator: Learning Maps Between Function Spaces With Applications to PDEs, *J. Mach. Learn. Res.* 24 (2023) 1–97.
- [6] K. Hornik, M. Stinchcombe, H. White, Multilayer feedforward networks are universal approximators, *Neural Netw.* 2 (1989) 359–366.
- [7] D. Erzmman, S. Dittmer, Equivariant neural operators for gradient-consistent topology optimization, *J. Comput. Des. Eng.* 11 (2024) 91–100.
- [8] C. Deng, S. Feng, H. Wang, X. Zhang, P. Jin, Y. Feng, Q. Zeng, Y. Chen, Y. Lin, OpenFWI: Large-scale multi-structural benchmark datasets for seismic full waveform inversion, *arXiv [Cs.LG]* (2021). <http://arxiv.org/abs/2111.02926>.
- [9] C. Zou, K. Azizzadenesheli, Z.E. Ross, R.W. Clayton, Deep neural Helmholtz operators for 3D elastic wave propagation and inversion, *arXiv [Physics.Geo-Ph]* (2023). <http://arxiv.org/abs/2311.09608>.
- [10] K. Svanvarg, The method of moving asymptotes—a new method for structural optimization. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 24(2), 359–373 (1987)