

# 1. 構造最適化 (QUBO)

- 設計変数の乗算型更新
- トラスの形状最適化と弾性体のトポロジー最適化

# 2. 有限要素離散化方程式の求解(QUBO&FMQA)

## 1. 全ポテンシャルエネルギー最小化 (QUBO)

- エンコーディング (実数表現) 手法への依存性

## 2. 残差ベクトルの最小化 (FMQA)

# 3. 非線形材料構成方則のパラメータ同定(FMQA)

# 4. メタ (代理) モデル (FMQA)

## 1. メタモデル生成に際するハイパーパラメータ同定

## 2. メタモデルによるリスク指標の最適化

- リスク指標を最大化するパラメータの決定

# トラス構造の断面寸法最適化

問題の設定 ▶ QUBO形式への変換 ▶ QAの適用

ひずみエネルギーの最大化問題（剛性最大化）

$$\min_{A(q)} f(A(q)) = -\frac{1}{2} \mathbf{U}^T \mathbf{K} \mathbf{U} = -\mathbf{U}^T \boldsymbol{\sigma} A(q)$$

$$\text{subject to } \sum_{e=1}^{N_{bar}} \frac{A_e(q) L_e}{V_0} \leq \bar{V}_{contsr}$$

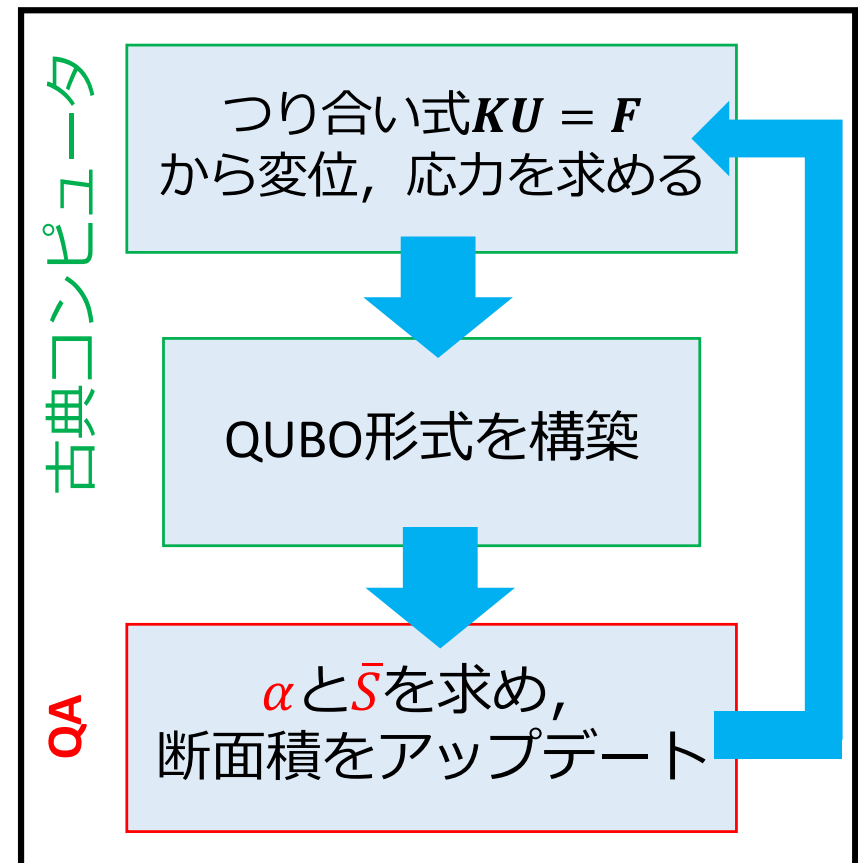
未知変数

- 乗数  $\alpha$

$$A_e(q)^{(i)} \approx \alpha \cdot A_e^{(i-1)}$$

- スラック変数  $\bar{S}$ [1]

$$\sum_{e=1}^{N_{bar}} \frac{A_e(q) L_e}{V_0} + \bar{S} = \bar{V}_{contsr}$$



# トラス構造の断面寸法最適化



問題の設定 ▶ QUBO形式への変換 ▶ QAの適用

- 制約条件に関するペナルティパラメータ $\lambda$ を導入し、式を統一

$$E(q) = -\mathbf{U}^T \boldsymbol{\sigma} \mathbf{A}(q) + \lambda \left( \sum_{e=1}^{N_{bar}} \frac{A_e(q) L_e}{V_0} - (\bar{V}_{contsr} - \bar{S}) \right)^2$$

## Encoding

- 未知変数を, (0,1)の二値変数で記述 (下記の例はBinary Encoding)

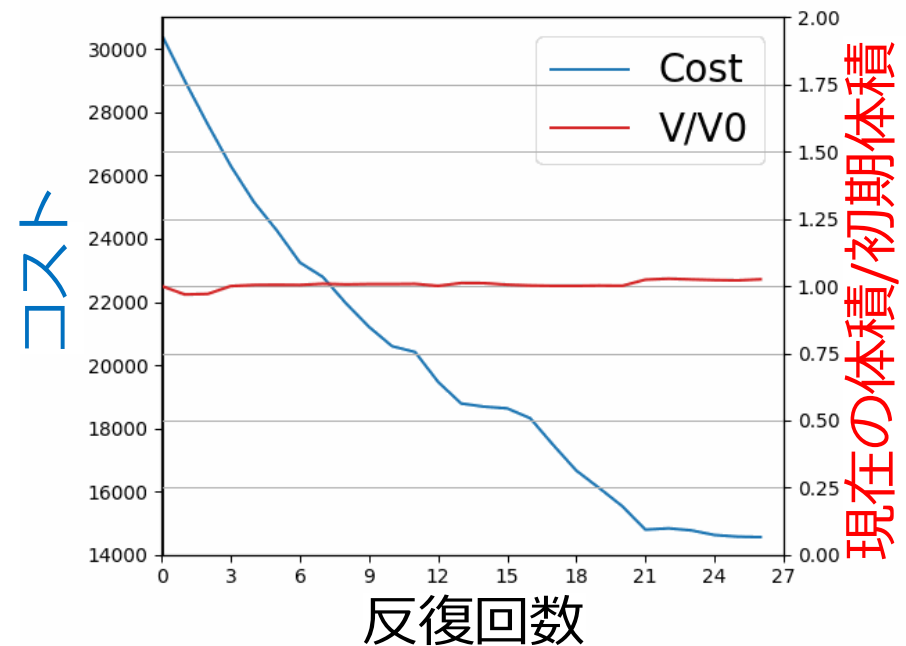
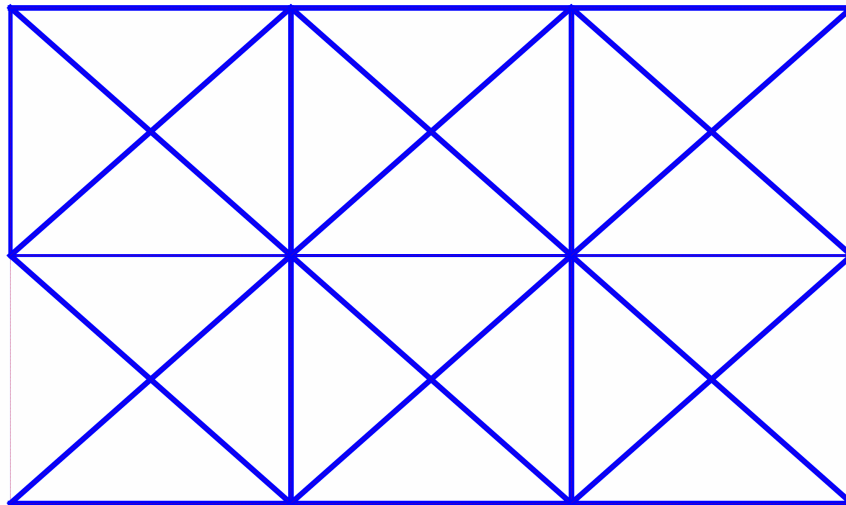
$$\alpha = N \cdot \left( \sum_{l=-m}^m 2^l \right)^{-1} \cdot \left( \sum_{l=-m}^m 2^l q_{e,l}^+ \right)$$

$$\bar{S} = \left( \sum_{l_s=-m}^m 2^{l_s} \right)^{-1} \cdot \left( \sum_{l_s=-m}^m 2^{l_s} q_{e,l_s}^+ \right)$$

- これらの未知変数を代入

# トラス構造の断面寸法最適化

問題の設定 ▶ QUBO形式への変換 ▶ **QAの適用**

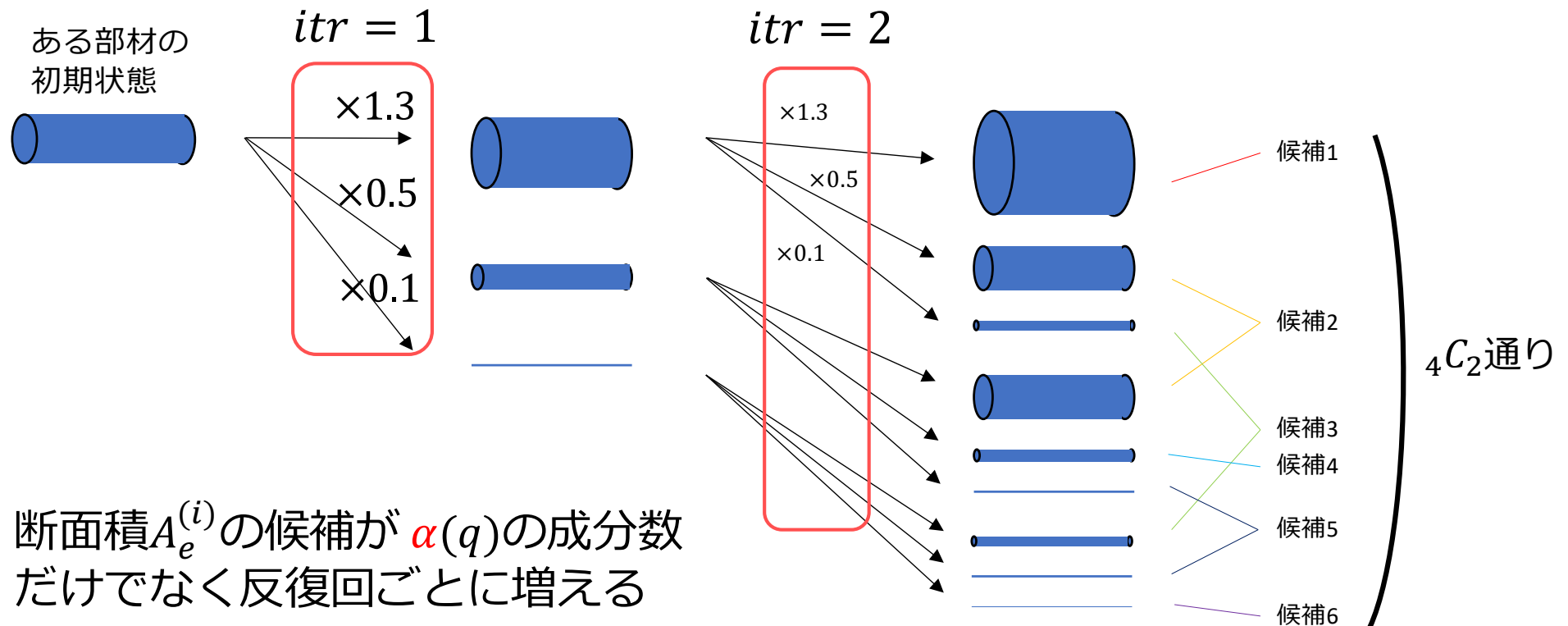


- 制約条件を満たしながらコストが収束
- 収束性はEncoding手法に非依存
- 未知変数が多くなると収束しない傾向

# 設計変数の乗算型更新

ex.

3種類の乗数  $\alpha(q) = \{0.1, 0.5, 1.3\}$ , 2回の反復で断面積を決定

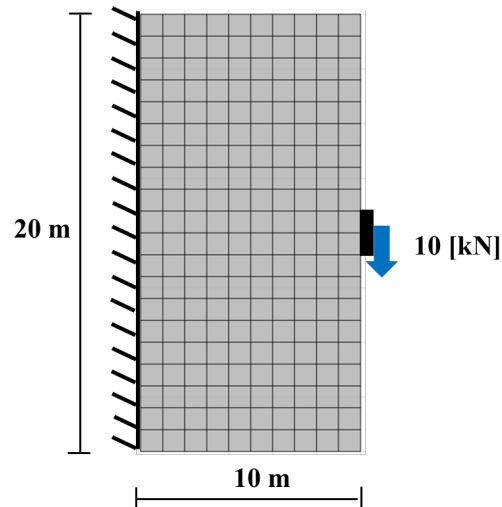


断面積 $A_e^{(i)}$ の候補が $\alpha(q)$ の成分数だけでなく反復回ごとに増える

▶ Encoding手法やqubit数による精度への影響が比較的少ない

# 弾性体のトポロジー最適化 (剛性最大化)

Ex. 2

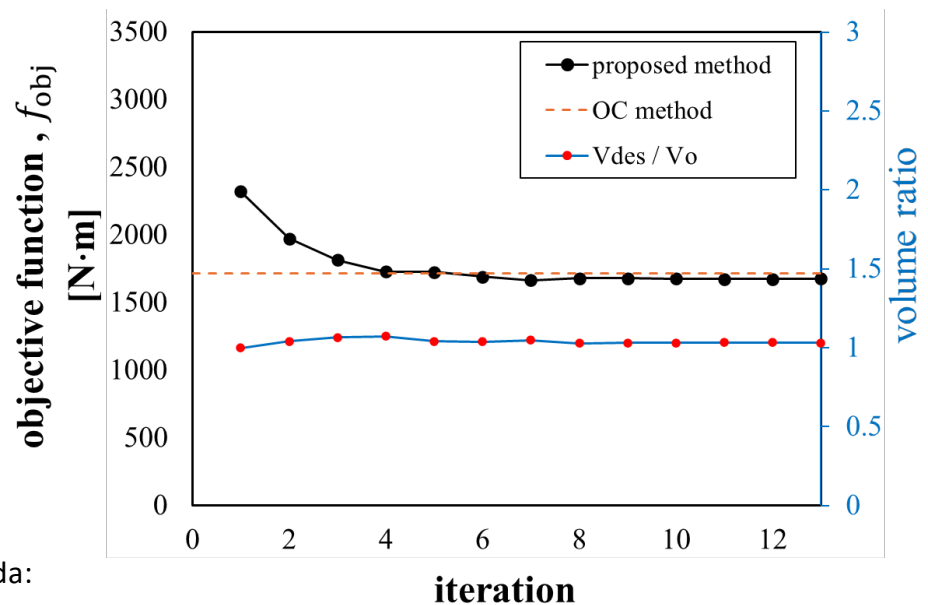
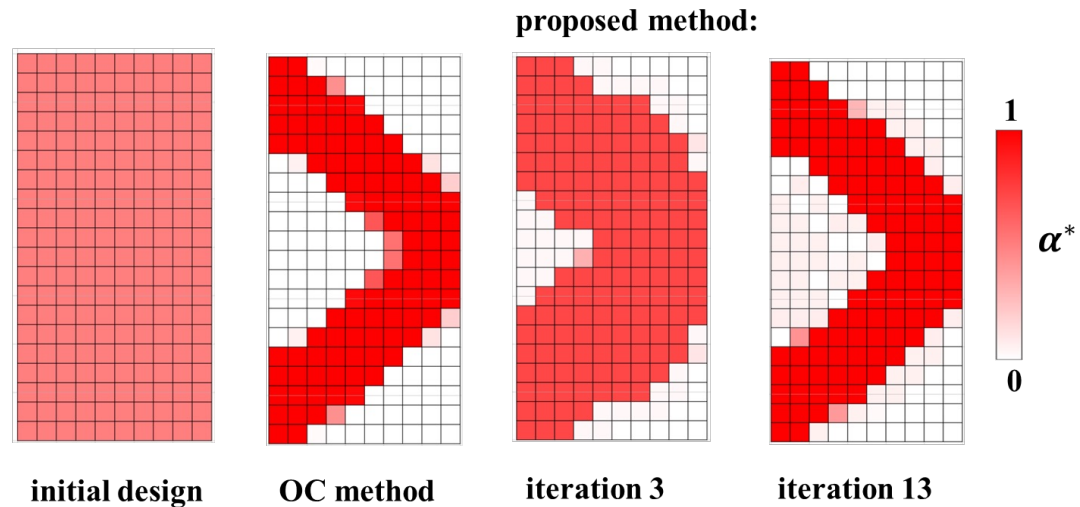


volume constraint of design structure: 50%

the penalty parameter  $\lambda$ :  $7 \times 10^3$

$E = 2 \times 10^6$  N/m  $\nu = 0.3$

First three iteration  $\theta_1$ : 1.2,  $\theta_2$ : 1.05



## 1. 構造最適化 (QUBO)

- 設計変数の乗算型更新
- トラスの形状最適化と弾性体のトポロジー最適化

## 2. 有限要素離散化方程式の求解(QUBO&FMQA)

### 1. 全ポテンシャルエネルギー最小化 (QUBO)

- エンコーディング (実数表現) 手法への依存性

### 2. 残差ベクトルの最小化 (FMQA)

## 3. 非線形材料構成方則のパラメータ同定(FMQA)

## 4. メタ (代理) モデル (FMQA)

### 1. メタモデル生成に際するハイパーパラメータ同定

### 2. メタモデルによるリスク指標の最適化

- リスク指標を最大化するパラメータの決定

# 有限要素離散化方程式の求解-I. QUBO

問題の設定 ▶ QUBO形式への変換 ▶ QAの適用

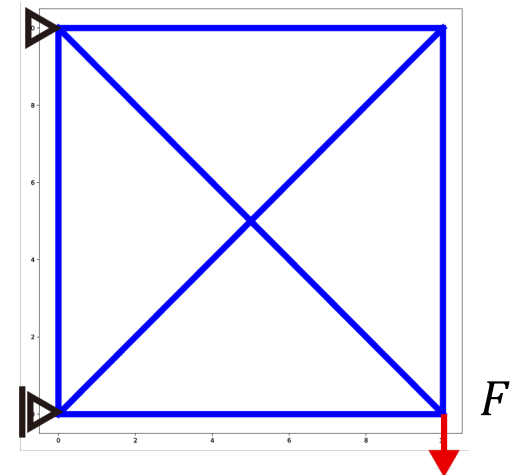
つり合い式

$$Kx - F = 0$$

等価

全ポテンシャルエネルギー

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Kx - x^T F$$

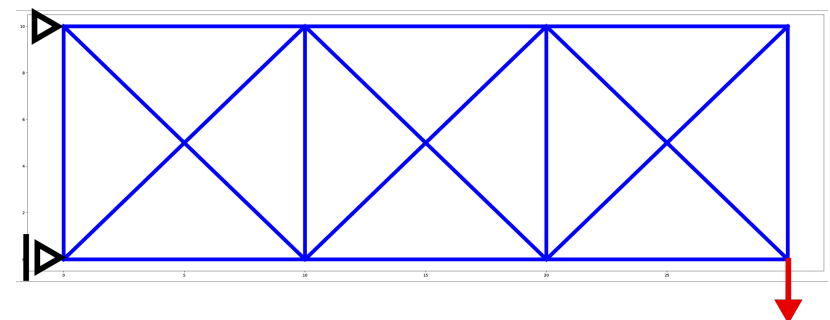


Encoding

- 未知変数を,  $(0,1)$ の二値変数で記述

$$x_i \approx \sum_{l=-m}^m 2^l q_{i,l}^+ - \sum_{l=-m}^m 2^l q_{i,l}^-$$

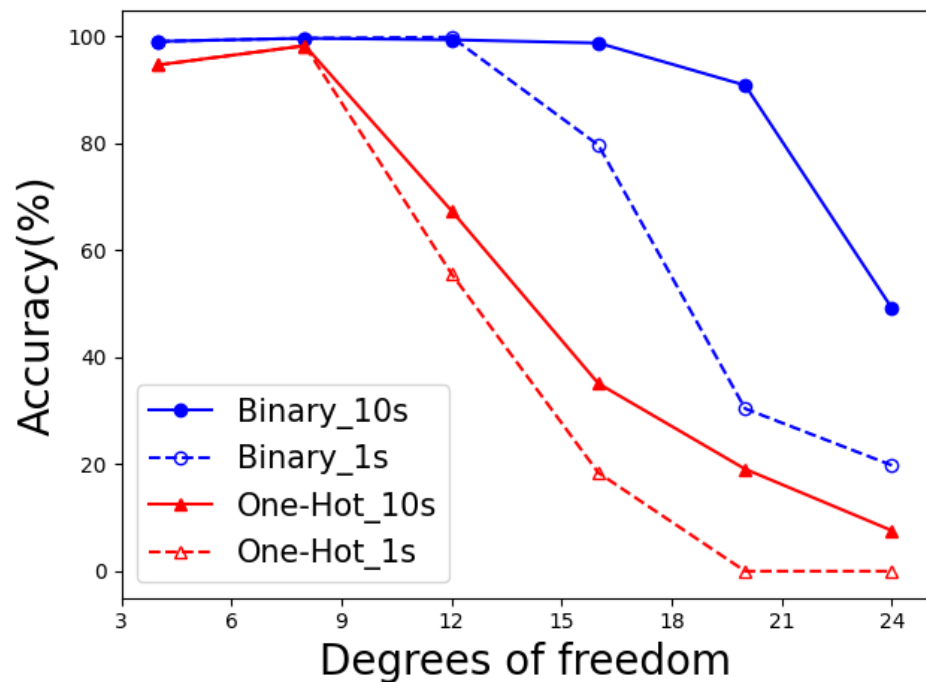
- これらの未知変数を代入





# 有限要素離散化方程式の求解-I. QUBO

問題の設定 ▶ QUBO形式への変換 ▶ QAの適用

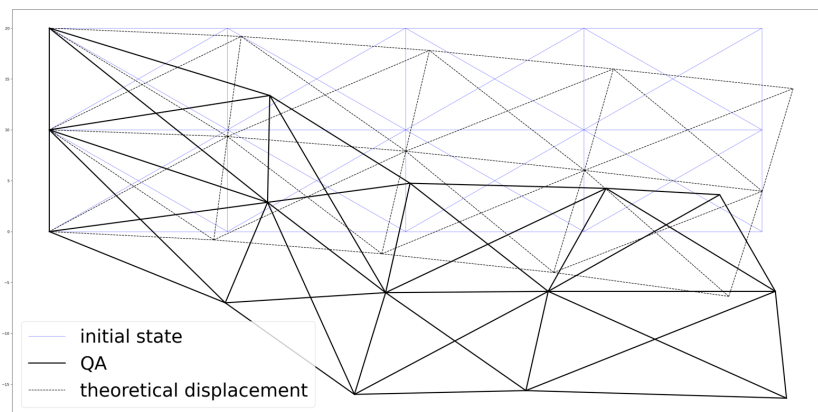
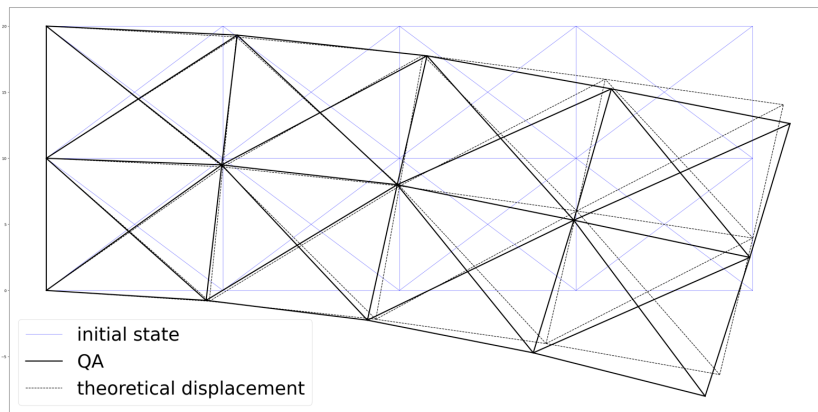
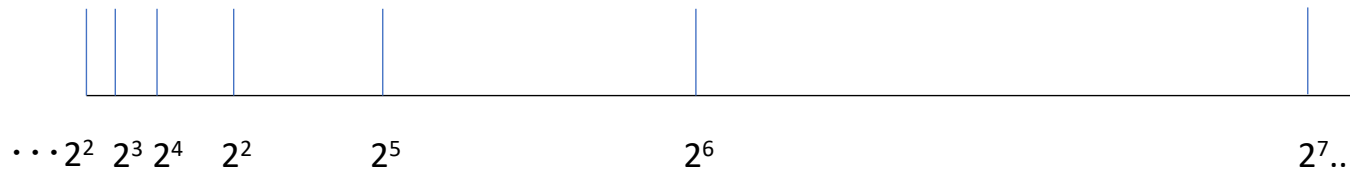


参照解に対する相対精度

- ✓ 自由度が少ない構造  
⇒高い精度
- ✓ 実行時間増  
⇒精度の改善
- ✓ Encoding手法による差異
- ✓ 自由度数増  
⇒精度が低下

# 有限要素離散化方程式の求解-I. QUBO

## ～qubit数の解の精度への影響(Binary)～



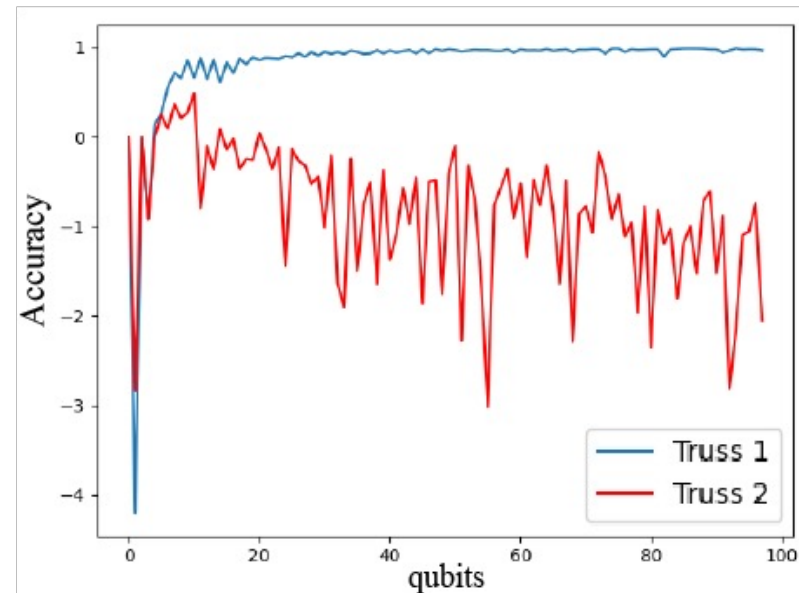
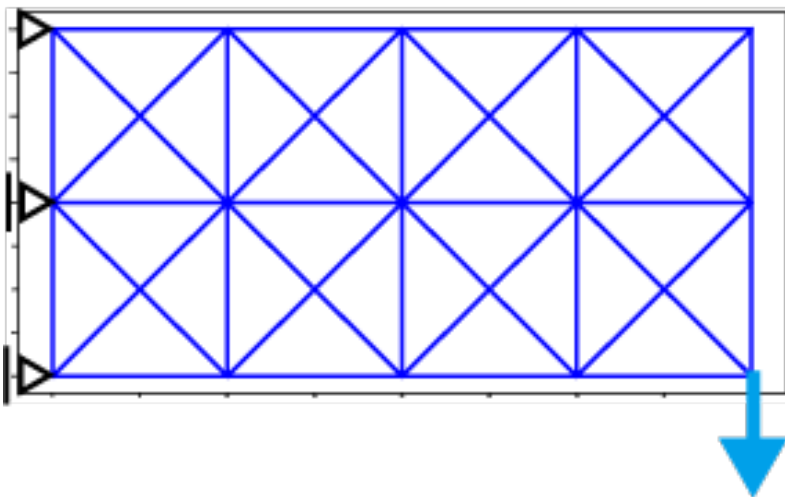
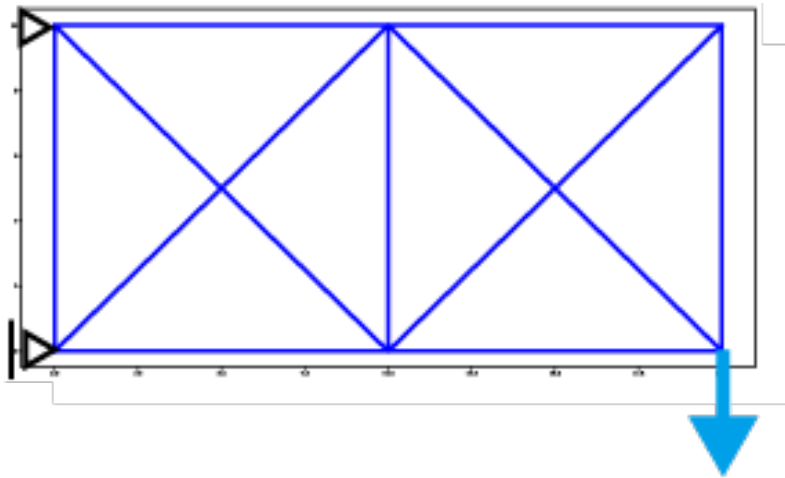
### 探索範囲と精度

2の累乗項の範囲	$(2^{-16}, 2^3)$	$(2^{-9}, 2^{10})$	$(2^{-3}, 2^{16})$
精度(%)	91.8	84.5	0

- ✓ 解に不適切な大きな範囲を探索すると、精度が低下
- ✓ 適切な範囲設定が必要

# 有限要素離散化方程式の求解-I. QUBO

～qubit数の解の精度への影響(One-hot)～



- ✓ 安定的に解ける問題のサイズでは, 表現能力を上げると精度も向上
- ✓ 自由度が大きくなると精度が低下

## 1. 構造最適化 (QUBO)

- 設計変数の乗算型更新
- トラスの形状最適化と弾性体のトポロジー最適化

## 2. 有限要素離散化方程式の求解(QUBO&FMQA)

### 1. 全ポテンシャルエネルギー最小化 (QUBO)

- エンコーディング手法 (実数表現) への依存性

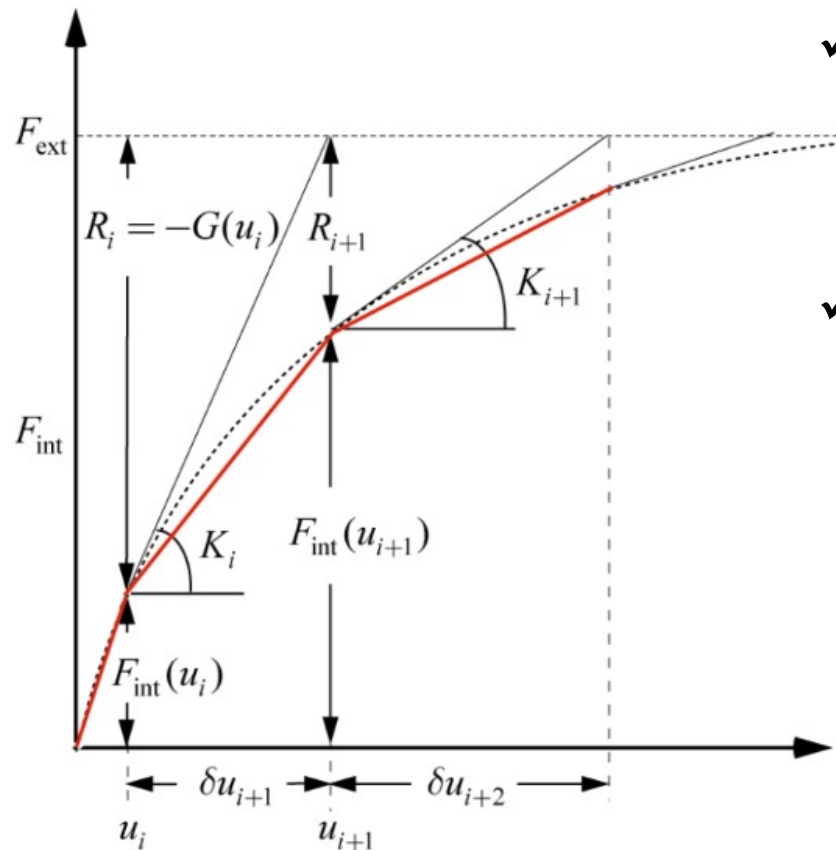
### 2. 残差ベクトルの最小化 (FMQA)

## 3. 非線形材料構成方則のパラメータ同定(FMQA)

## 4. メタ (代理) モデル (FMQA)

1. メタモデル生成に際するハイパーパラメータ同定
2. メタモデルによるリスク指標の最適化
  - リスク指標を最大化するパラメータの決定

# 有限要素離散化方程式の求解-II. FMQA



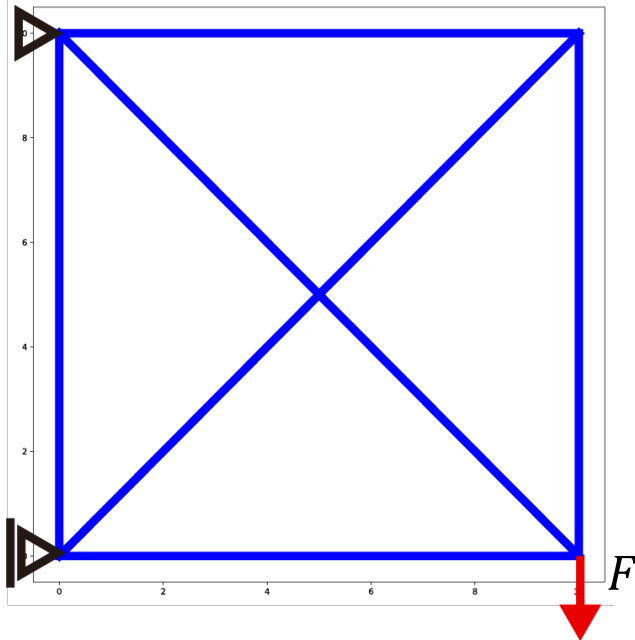
- ✓ 非線形有限要素法における釣り合い式

$$F_{int}(\mathbf{u}) = F_{ext}$$

- ✓ 代数的な求解が不可能  
⇒ Newton-Raphson 法による繰り返し計算

FMQAによる  
釣り合い点の探索

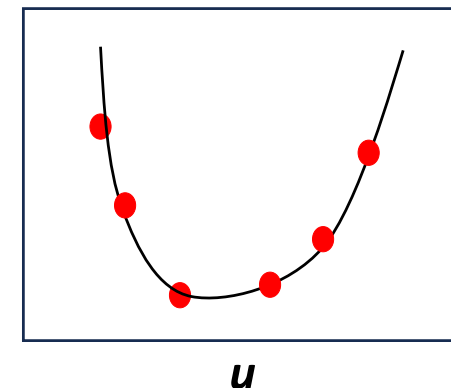
# 有限要素離散化方程式の求解-II. FMQA



- ✓ 簡単に，線形問題で検証
- ✓ 自由度数= 4 (=x,y × 2節点)  
FMにおける次元数は4×qubit数
- ✓  $\text{cost} = (F_{int} - F_{ext})^2$ の最小化
- ✓  $F_{int} = Ku$  ,  $F_{ext} = F$ とし，  
 $(F_{int} - F_{ext})^2$  をブラックボックスと仮定

$u$  (変位)

**Black Box**



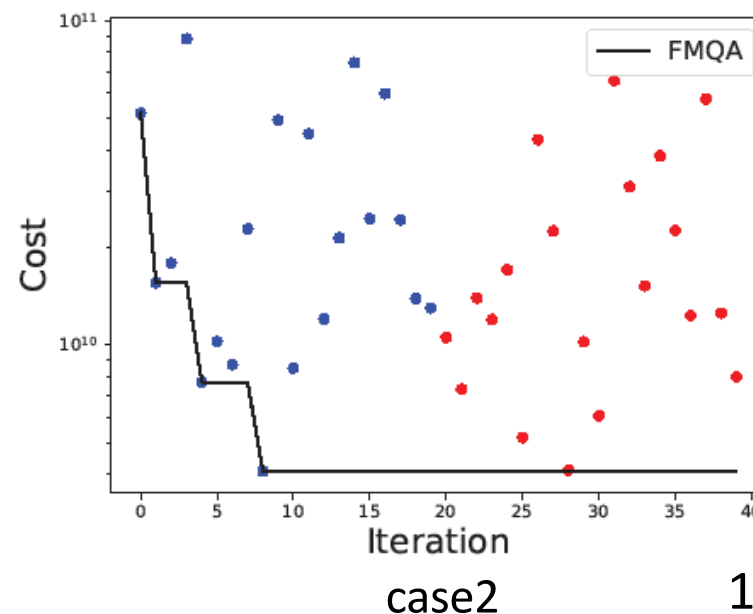
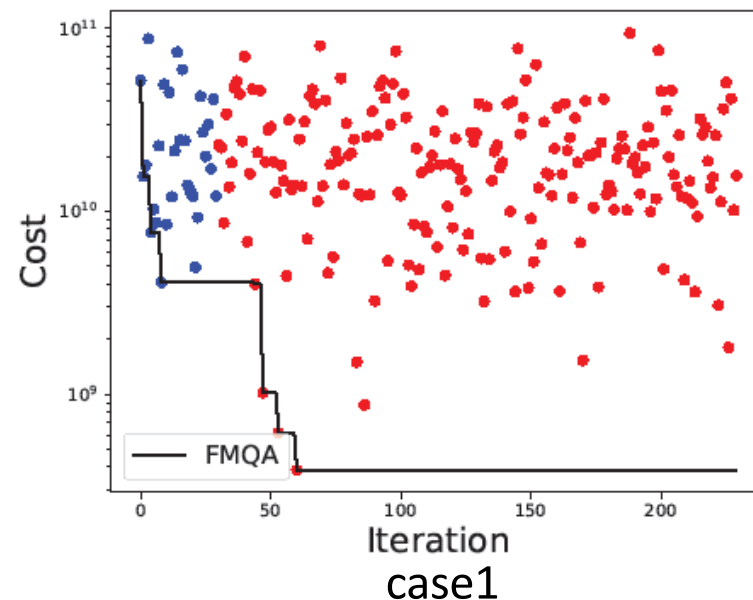
# 有限要素離散化方程式の求解-II. FMQA



## 結果 (One-Hot)

- ✓ 最適化傾向は見られるが、コストは0には収束しない

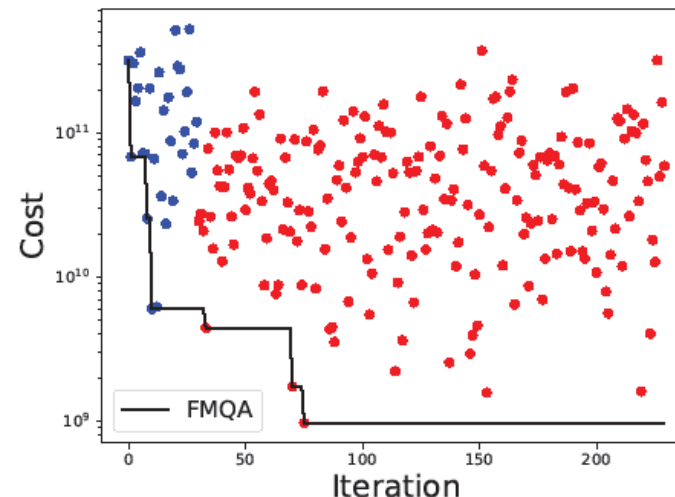
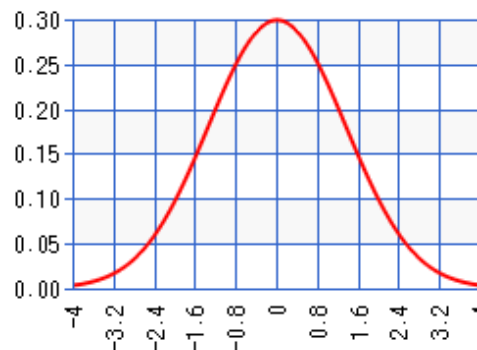
	case1	case2
qubits	40	
range	(-4,4)	
Training data	30	20
iteration	200	20
epoch	5000	50000
Optimal cost	$3.0 \times 10^9$	$4.0 \times 10^{10}$



# 有限要素離散化方程式の求解-II. FMQA

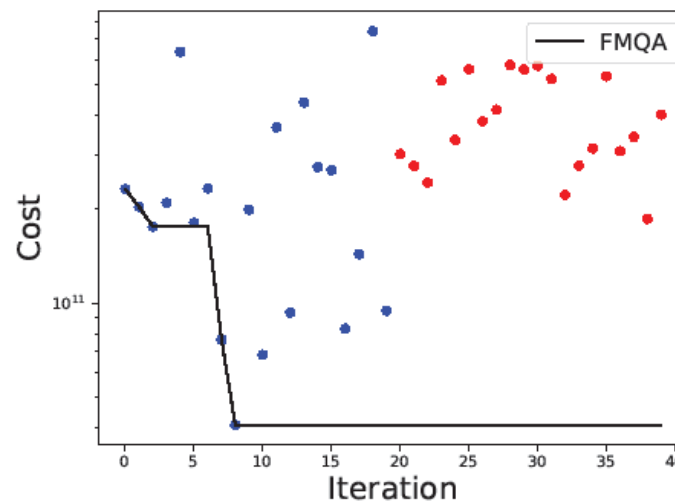
## 結果 (Gaussian)

- ✓ 最適化傾向は見られるが、コストは0には収束しない



case3

	case3	case4
qubits	100	
Mean value	0	
Standard deviation	4/3	
Training data	30	20
iteration	200	20
epoch	5000	50000
Optimal cost	$9.0 \times 10^9$	$4.0 \times 10^{11}$

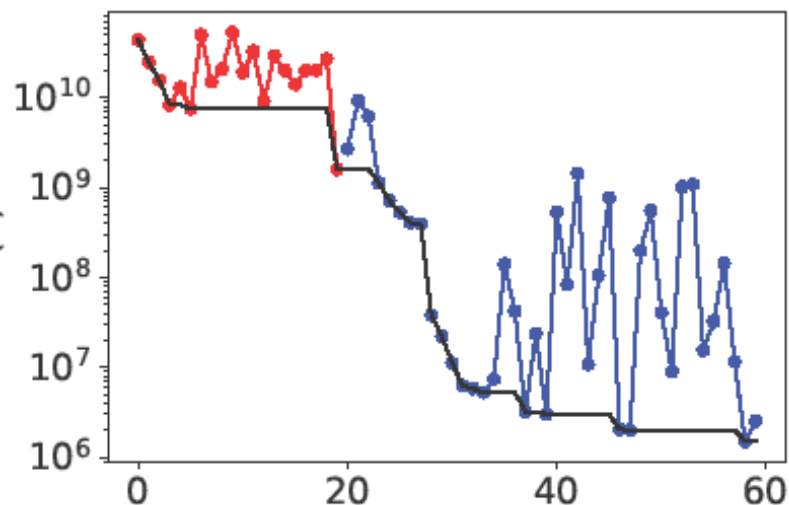


case4

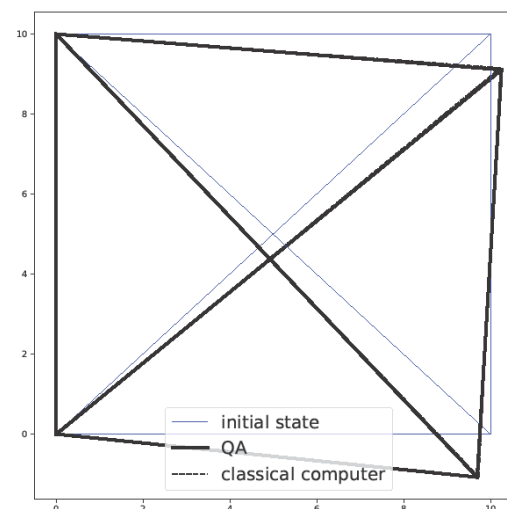


## 参考：ベイズ最適化

- ✓ 古典コンピュータによるブラックボックス最適化手法のひとつ
- ✓ 求解は可能であり，定式化・アルゴリズム自体は妥当

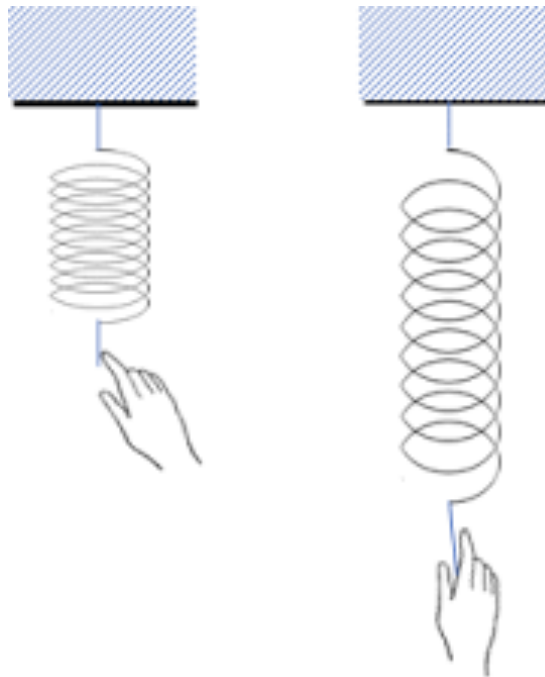


最適化履歴



変位図

# 有限要素離散化方程式の求解-II. FMQA



一次元バネ問題[5]

4自由度の問題では精度が得られない

$$50000 = 10000x$$

- ✓ 一次元バネ問題を検証
- ✓  $\text{cost} = (50000 - 10000x)^2$  の最小化
- ✓ FMにおける次元数=qubit数

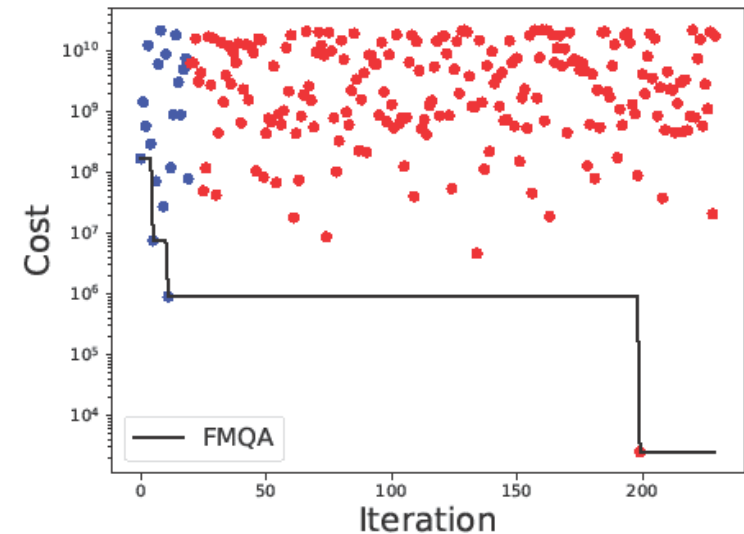
# 有限要素離散化方程式の求解-II. FMQA



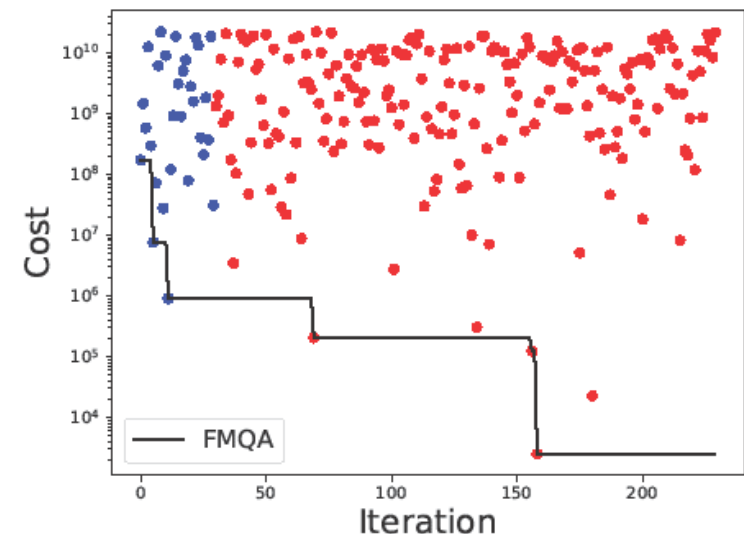
## 1次元問題 (One-Hot)

	Case A	Case B
qubits	1000	
range	(-10,10)	
Training data	20	30
iteration	210	200
Epoch	2000	5000
Optimal cost	$2.0 \times 10^3$	$2.0 \times 10^3$
x	4.994	4.994

- ✓ いずれのケースも解の候補の中で最も5に近い値をとり得る
- ✓ Epoch数を増やしたCase Bの方が最適値への収束が良好



Case A



Case B

## 1. 構造最適化 (QUBO)

- 設計変数の乗算型更新
- トラスの形状最適化と弾性体のトポロジー最適化

## 2. 有限要素離散化方程式の求解(QUBO&FMQA)

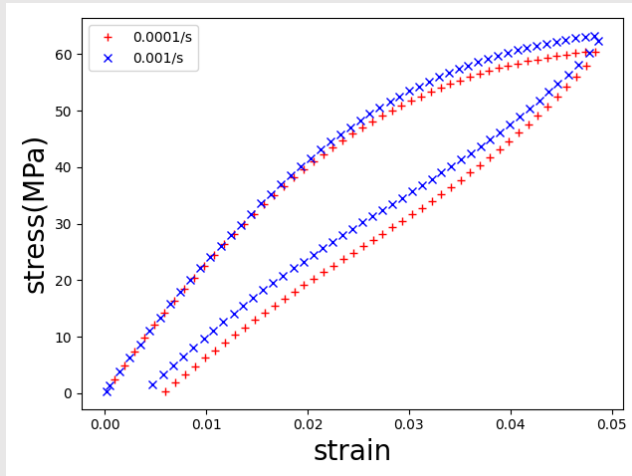
1. 全ポテンシャルエネルギー最小化 (QUBO)
  - エンコーディング (実数表現) 手法への依存性
2. 残差ベクトルの最小化 (FMQA)

## 3. 非線形材料構成方則のパラメータ同定(FMQA)

## 4. メタ (代理) モデル (FMQA)

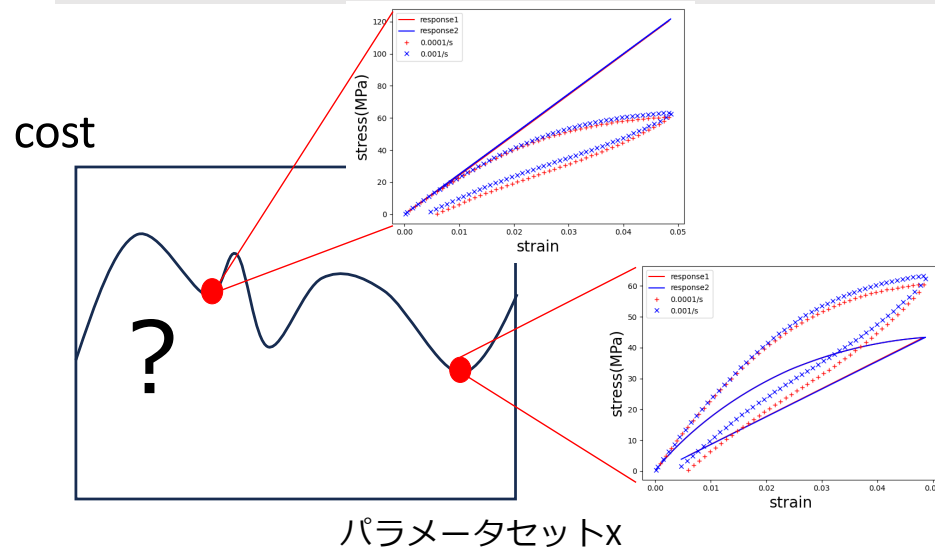
1. メタモデル生成に際するハイパーパラメータ同定
2. メタモデルによるリスク指標の最適化
  - リスク指標を最大化するパラメータの決定

# 非線形材料構成則のパラメータ同定問題



## 等方性弾塑性・クリープ・損傷複合モデル [2]

- 11個のパラメータセット $X$ を決めると、一つの応力-ひずみ曲線と、平均二乗和誤差 (cost) が取得可能



パラメータセット  
 $X$ に対する誤差の関数の具体  
形が不明

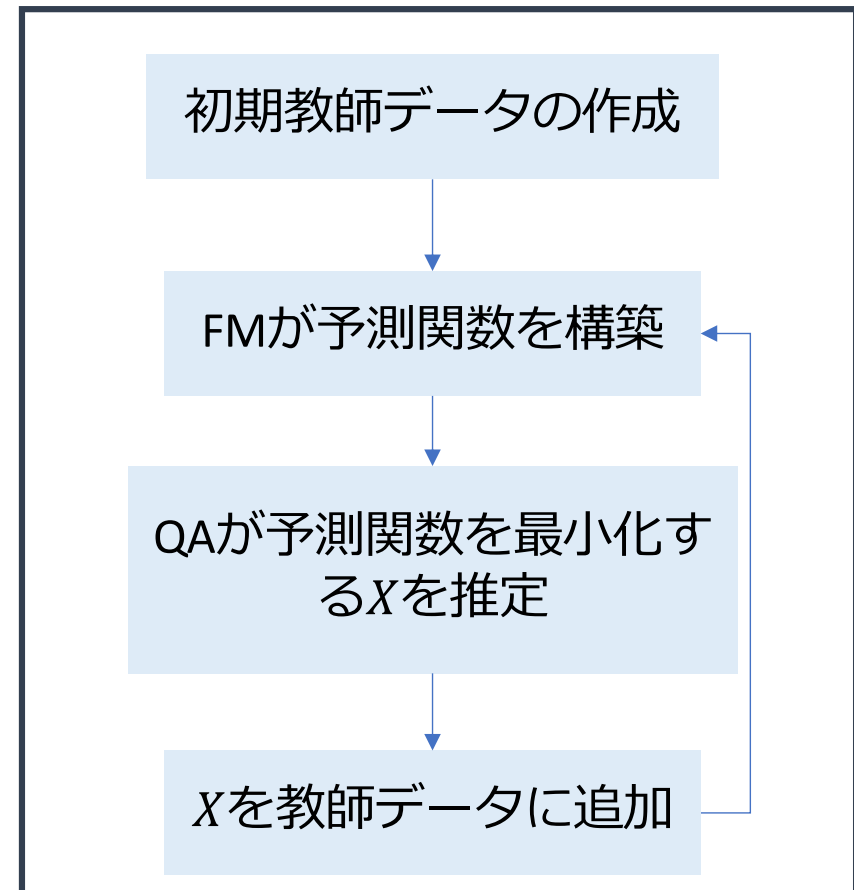
**ブラックボックス最適化**

## FMQA<sup>[3]</sup>

- ブラックボックス最適化手法の一つ
- 機械学習モデルのひとつ  
Factorization Machine<sup>[4]</sup> (FM) で  
予測関数を獲得

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^n w_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \langle v_i, v_j \rangle x_i x_j$$

- 予測関数の最小値をQAで求め、予測関数をアップデート



[3]Kitai, K., Guo, J., Ju, S., Tanaka, S., Tsuda, K., Shiomi, J. and Tamura, R. : Phys. Rev. Res. 2, 2020

[4] Rendle, S. : 2010 IEEE International Conference on Data Mining, 2010

# 非線形材料構成則のパラメータ同定問題



- ✓ 載荷時のみの結果から同定
- ✓ 弾性率 $E$ , クリープパラメータ $C_3$ ,  $C_4$ を除いた8個のパラメータを同定

非弾性ひずみの加算分解

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^p + \varepsilon^c$$

等方性弾塑性構成則

$$f(\sigma, \alpha_p) = \sigma - \sqrt{\frac{2}{3}}\sigma_y(\alpha_p) = 0$$
$$\sigma_y(\alpha_p) = \sigma_{y0} + H\alpha_p + R_0(1 - \exp(-\beta\alpha_p))$$

等方性クリープ構成則

$$\dot{\varepsilon}^c = \dot{\gamma}_c \text{sign}(\sigma)$$
$$\dot{\gamma}_c = C_1(\sigma)^{C_2} \exp\left(-\frac{C_3}{T}\right) t^{C_4}$$

等方性損傷力学モデル

$$E = (1 - D)E_0$$
$$D(\bar{\varepsilon}) = D_1(\bar{\varepsilon}_{\max})^{D_2} \quad 0 \leq D < 1$$

# パラメータ同定問題 (探索範囲)

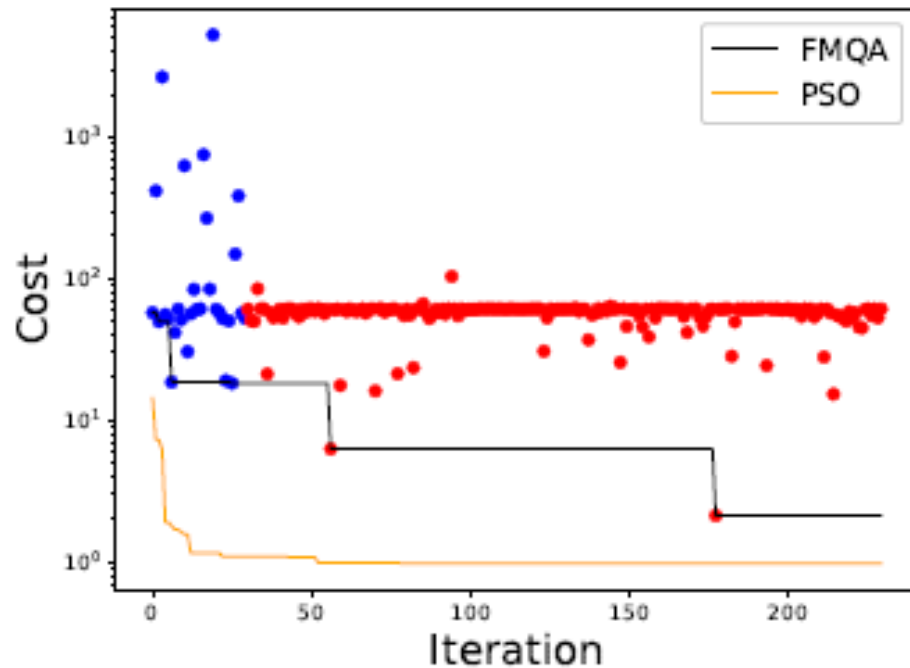


## 各手法における解の探索範囲

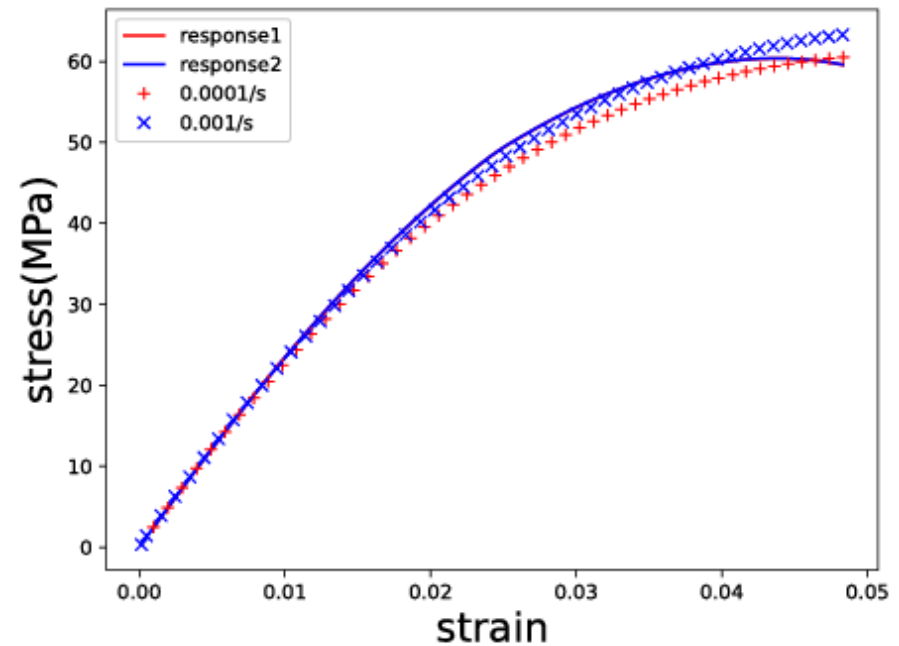
材料パラメータ	記号	PSO	FMQA Binary	FMQA One-Hot
初期弾性率 (MPa)	$E$	2500	2500	2500
初期降伏応力 (MPa)	$\sigma_{y0}$	(10, 30)	$(2^{-8}, 2^6)$	(10, 50)
硬化パラメータ (MPa)	$H$	(500, 700)	$(2^{-4}, 2^{10})$	(100, 1000)
	$R_0$	(20, 40)	$(2^{-8}, 2^6)$	(10, 100)
	$\beta$	(300, 400)	$(2^{-5}, 2^9)$	(100, 500)
クリープパラメータ	$C_1$	$(10^{-10}, 10^{-9})$	$(2^{-42}, 2^{27})$	$(10^{-10}, 10^{-8})$
	$C_2$	(3, 5)	$(2^{-11}, 2^3)$	(1, 10)
損傷パラメータ	$d_1$	(0, 10)	$(2^{-9}, 2^5)$	(0, 20)
	$d_2$	(-1, 1)	$(2^{-14}, 2^0)$	(0, 1)



# パラメータ同定問題 (Binary)



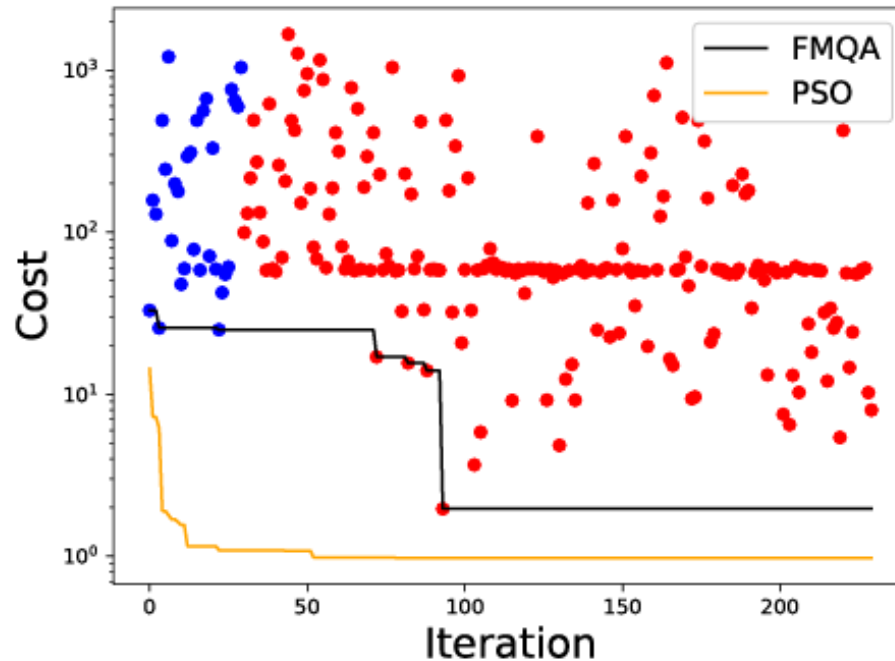
最適化履歴



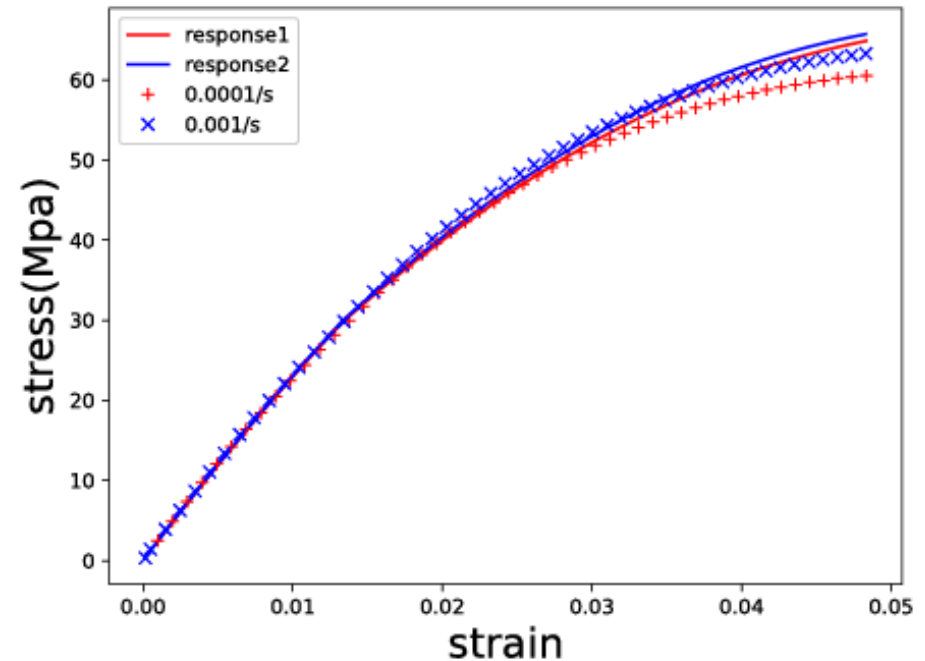
得られた応力-ひずみ曲線

- サイクル中は、初期データほど大きな値をとらないが、最適化傾向も見られない
- ひずみ速度依存の変化が見られない

# パラメータ同定問題 (One-Hot)



最適化履歴



得られた応力-ひずみ曲線

- サイクル中にコストが初期データより低いところに集まる傾向が見られる
- ひずみ速度依存の変化をある程度表現している

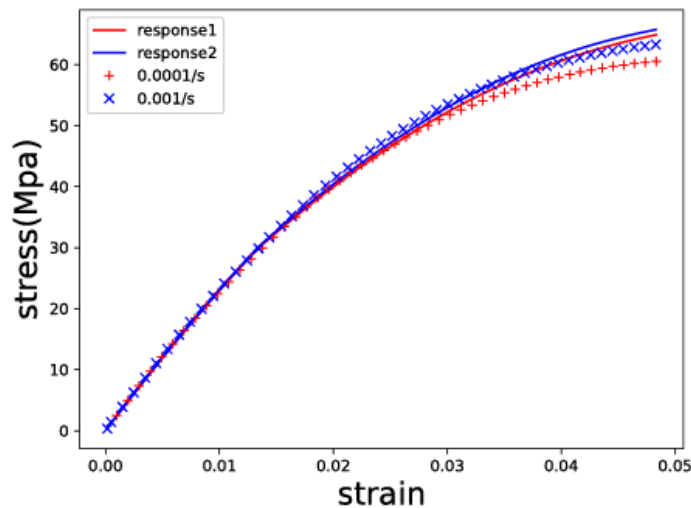
# パラメータ同定問題

## 同定されたパラメータ

材料パラメータ	記号	同定値 (PSO)	同定値 (FMQA Binary)	同定値 (FMQA One-Hot)
初期弾性率 (MPa)	$E$	2500	2500	2500
初期降伏応力 (MPa)	$\sigma_{y0}$	19.71	49.11	29.87
硬化パラメータ (MPa)	$H$	684.6	1908	238.9
	$R_0$	29.20	118.1	35.37
	$\beta$	389.8	97.50	314.8
クリープパラメータ	$C_1$	$1.413 \times 10^{-12}$	$1.151 \times 10^{-9}$	$9.269 \times 10^{-9}$
	$C_2$	3.855	1.089	1.544
損傷パラメータ	$d_1$	$6.581 \times 10^{-2}$	26.89	4.832
	$d_2$	$8.044 \times 10^{-2}$	1.317	0.899
コスト		0.9761	2.123	1.961

One-Hot encodingはBinary encodingよりも最適化傾向が見られたものの、両手法とも既存手法PSOには及ばない

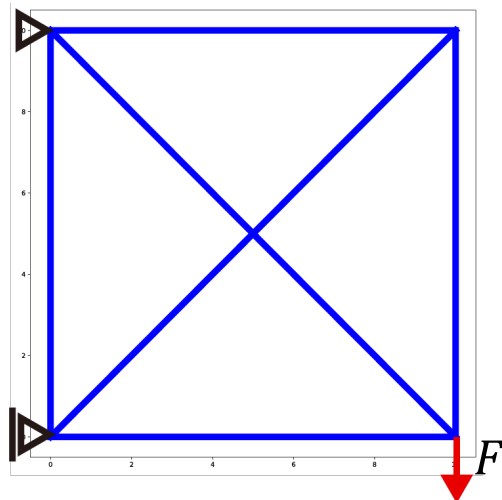
# FMQAまとめ



- ✓ パラメータ同定問題では、8変数でもある程度の最適化傾向
- ✓ 釣り合い式では、1変数で最適化傾向が出現



あらかじめそれぞれの設計変数ごとに適切な解の範囲を特定できる場合、また相互作用が弱い場合はFMQAによる最適化が可能



線形方程式の求解について（我妻の考察）：  
パラメータ同定に比べてトラス問題は探索範囲を絞っていないため精度が得られていないが、探索範囲を絞るのは力学的な主旨から外れてしまう