ノイズを含むデータから作成した応答曲面の予測精度*

竹 田 憲 生^{*1}, 坂 田 誠 一 郎^{*2}

Prediction Accuracy for Response Surfaces Generated Using Noisy Data

Norio TAKEDA^{*3} and Sei-ichiro SAKATA^{*3} Mechanical Engineering Research Laboratory, Hitachi, Ltd.,
832-2 Horiguchi, Hitachinaka-shi, Ibaraki, 312-0034 Japan

Response surfaces generated by using an artificial neural network or a Kriging model can approximate multimodal responses and the responses of multi-variable functions, even if the prior information used in creating the surfaces contains noises. To prevent the response surfaces from fitting to the noises in the prior information, regularization methods are applied. The Bayesian regularization method works well with an artificial neural network, and the improved nugget effect method can be effectively applied to the regularization of an ordinary Kriging model. Which response surface model to select depends on the amount of prior information and the number of variables in the response function. The Kriging model generates a more accurate response surface with a smaller amount of prior information than the artificial neural network does. On the other hand, the artificial neural network is more effective for approximating the response of a multi-variable function than the Kriging model. As a result, we can apply the response surface method to find the variables that ensure the optimum response of a function. This may increase the opportunities for using optimization techniques in the practical design process.

Key Words: Neural Network, Kriging, Response Surface, Regularization, Optimization

1. 結 言

Box⁽¹⁾が実験計画法を設計に利用して以来, 既知のデータを使ってある現象の振る舞いを近似するモデルを作成し, それを使って最適化を行う方法が盛んに研究されてきた. その近似モデルは応答曲面と呼ばれ, 一般的には多項式が使われるが, 近年では応答曲面にニューラルネットワーク (Neural Network: 以降, NN と略記する)⁽²⁾, RBF (Radial Basis Function)⁽³⁾, クリギング⁽⁴⁾⁽⁵⁾も積極的に使われている. その中でも特に, RBF やクリギングは多項式と比べて柔軟な近似性能を有することが指摘され⁽⁶⁾⁽⁷⁾, 任意の写像関係を近似可能な NN⁽⁸⁾と同様に様々な適用例が報告されている.

ただし, これらの手法は複雑な写像関係を近似できるがゆえに, 実験データなどノイズを含むデータを利用して応答曲面を作成すると, 真の応答のみならず, ノイズまでも忠実に再現する応答曲面が作成される恐

れがあることが指摘されている⁽⁹⁾.

このような応答曲面のノイズへの過剰適合を避け, 適切な応答曲面を作成するための方法が各近似モデルに対して提案されている. クリギングの場合, Sasena らは適当なフィルタリングを行うことでサンプルデータ (既知のデータ) を通らない応答曲面を生成する方法について議論している⁽¹⁰⁾. また, Sakata らはセミバリオグラムに関する仮定を緩和する等の方法により, ノイズを含むデータに適用可能な通常 (Ordinary) クリギングとそれを用いた最適化方法を提案している⁽¹¹⁾. 一方, NN に関しても, MacKay がベイズ推論に基づく適切化によって, ノイズを含むデータへの NN の適用可能性について議論している⁽¹²⁾⁽¹³⁾. これらはいずれも独自の観点からノイズを含むデータに適用可能な手法を構築しているため, 各方法がどのような応答曲面の生成に適しており, 有効であるかを検討した例は無い.

そこで本論文では, ベイズ推論に基づくニューラルネットワークおよびノイズを含むデータに適用可能なクリギングを使って応答曲面を作成し, その応答曲面による真の応答の予測精度を比較検討する. さらに,

* 原稿受付 2008 年 1 月 21 日.

^{*1} 正員, (株)日立製作所機械研究所(〒312-0034 ひたちなか市堀口 832-2).^{*2} 正員, 島根大学総合理工学部(〒690-8504 松江市西川津町 1060).

E-mail: norio.takeda.uf@hitachi.com

それらを工学的最適化問題に適用し、各々の手法の有効性について検証する。

2 ノイズに適合しない応答曲面の作成

2・1 ニューラルネットワークによる方法 ニューラルネットワーク（以降、NNと記す）は一般的に、NNの応答と既知データの応答の2乗誤差が最小となるように学習される。NNの分野では、このような目的で使われる既知データを教師データと呼ぶ。以降ではNNに限らず同様の目的で使われるデータを教師データと記述する。この教師データがノイズを含む場合、2乗誤差を最小化する学習方法では、NNの構造や学習回数を適切に定めないと、学習後のNNによる応答曲面はノイズに過剰適合する。これを避けるために、MacKayはNNの学習にベイズ推論を適用する方法を提案した⁽¹²⁾⁽¹³⁾。この方法では、2乗誤差に適切化項を加えた次式を最小化することによって学習を行う。

$$M = \beta E_D + \alpha E_W \quad (1)$$

ここで、 E_D はNNによる応答と教師データ応答の2乗誤差である。また、 E_W は「応答曲面は滑らかである」という事前知識を表す適切化項であり、例えば次の関数が用いられる。

$$E_W = \sum_i \frac{1}{2} w_i^2 \quad (2)$$

式中の w はNNの各素子間の重み係数である。また、 α 、 β は超パラメータ⁽¹²⁾と呼ばれており、ベイズ推論に従うと次式で求められる。

$$\alpha = \frac{\gamma}{2E_W}, \quad \beta = \frac{N-\gamma}{2E_D} \quad (3)$$

N は教師データの数に出力の数に乗じたものである。また、 γ は全ての重み係数のうち、教師データによってうまく推定される係数の数である。この γ の計算方法は数通りあるが、次式の計算方法が有効に作用することが報告されている⁽¹⁴⁾。

$$\gamma = \sum_{a=1}^k \frac{\lambda_a}{\lambda_a + \alpha} \quad (4)$$

k は重み係数の数、 λ_a は行列 βB ($B = \nabla \nabla E_D$)の固有値である。 α 、 β の推定を安定して行うため、 λ_a が負のときは λ_a を0とする。

具体的には次のアルゴリズムでNNを学習する。

- (I) 超パラメータの初期値 $\alpha^{(0)}$ 、 $\beta^{(0)}$ を設定する。
- (II) 超パラメータ $\alpha^{(0)}$ 、 $\beta^{(0)}$ を式(1)に代入してNNを学習し、重み係数の推定値 $w^{(1)}$ を求める。
- (III) $w^{(1)}$ と超パラメータの算出式(式(3))を使い、超パラメータの推定値 $\alpha^{(1)}$ 、 $\beta^{(1)}$ を求める。
- (IV) 以降、 $\alpha^{(i-1)}$ 、 $\beta^{(i-1)}$ を使ったNNの学習による $w^{(i)}$ の推定と、 $w^{(i)}$ と超パラメータの算出式による $\alpha^{(i)}$ 、 $\beta^{(i)}$ の推定を収束するまで繰り返す。
($i \geq 2$)

2・2 クリギングによる方法 一般的なクリギングで作成した応答曲面では、サンプル点（設計空間上の教師データの位置）において、応答曲面による応答の予測値と教師データの応答値は完全に一致する。そのため、教師データがノイズを含む場合、応答曲面による応答の予測値はノイズを含んだものとなり、結果として真の応答を予測することができない。このようなノイズへの適合を防ぐ方法として、ナゲット効果を導入したセミバリオグラム関数を使用する方法があるが、サンプル点で予測値が教師データの応答値と一致するという特徴は保持されるため、予測曲面が不連続となる⁽¹⁵⁾。これに対しSakataらは、応答曲面に関するセミバリオグラム関数を修正するとともに、セミバリオグラムパラメータの決定に利用する経験セミバリオグラムにおいてデータのばらつきを考慮することで、ノイズを含むデータにも適用可能な方法（Noise-resistant Smoothed Kriging、以降ns-Krigingと略記する）を提案した⁽¹¹⁾。

ns-Krigingによる応答の予測式は一般的な通常クリギングと同様に次式で与えられる。

$$f(x_0) = \sum_i f_i w_i = \sum_i f(x_i) w(x_i, x_0) \quad (5)$$

ただし、

$$w = \Gamma^{-1} \gamma^* + \frac{1 - \Gamma^{-1} \gamma^*}{\Gamma^{-1} \mathbf{1}} \Gamma^{-1} \mathbf{1} \quad (6)$$

である。ここで、 $\mathbf{1}$ は全ての要素が1のベクトル、 Γ および γ^* はセミバリオグラム関数からなるマトリックスおよびベクトルである。 Γ の要素 $\gamma(x_i - x_j)$ はサンプル点データに関するセミバリオグラム関数⁽¹⁶⁾であり、Gauss型を仮定した場合、次式で与えられる。

$$\gamma = \begin{cases} \beta_0 + \beta_1 \left[1 - \exp \left(- \left\{ \frac{|h_{ij}|}{\beta_2} \right\}^2 \right) \right] & : h_{ij} \neq 0 \\ 0 & : h_{ij} = 0 \end{cases} \quad (7)$$

ここで $h_{ij} = x_i - x_j$, β_i はセミバリオグラムパラメータである。一方, γ^* は予測曲面に関する次式のセミバリオグラム関数である。

$$\gamma^*(h_i; \beta) = \beta_0 + \beta_1 \left[1 - \exp \left(- \left\{ \frac{|h_i|}{\beta_2} \right\}^2 \right) \right] \quad (8)$$

ns-Kriging では, 式(7), (8)の β_i の決定のために Cressie 基準⁽¹⁷⁾を修正した次式⁽¹¹⁾を用いる。

$$WLS(\beta) = \sum_{k=1}^K \frac{|N_k|}{\gamma(h_k, \beta)} \left(\hat{\gamma}(h_k) - 8\beta_0^2 - \gamma(h_k, \beta) \right)^2 \quad (9)$$

ここで, K は セミバリオグラムの同定に用いる集合の数である。

2・3 多項式による方法 多項式を使った応答曲面は, 応答曲面法による最適化では最も一般的に使用されている⁽¹⁸⁾。この方法では, 使用する多項式の形式(考慮する次数や項)を設定した後, 多項式による応答と教師データ応答の2乗誤差が最小となるように多項式中の未知係数を決定し, それを応答曲面とする。例えば, 1変数の場合, n 次多項式を用いた次式が使われることが多い。

$$f(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i \quad (10)$$

ここで, x は変数, a_i は i 次の項に関する係数である。多項式による方法は, 変数の数が多くなると決定すべき係数が多くなるという問題点がある。一方で, 近似応答曲面が直観的に把握しやすいという利点を有し, 設計空間のスクリーニング⁽¹⁹⁾や大域的近似モデルの併用による局所二次近似⁽²⁰⁾などに用いられることもある。

3. 予測精度の評価指標

本研究では, ノイズを含む教師データから作成した応答曲面によって, ノイズを含まない真の応答がどの程度の精度で予測できるかを調査する。したがって,

予測精度の評価指標として, 応答曲面による応答の予測値 $f(x)$ と真の応答 $f^*(x)$ の誤差を表すものを採用する。本報では, 次式の誤差の最大値 (MAX) と誤差の平均値 (RMS) で予測精度を評価した。

$$\text{MAX} = \max_i |f(x_i) - f^*(x_i)| \quad (11)$$

$$\text{RMS} = \sqrt{\frac{\sum_i (f(x_i) - f^*(x_i))^2}{n}} \quad (12)$$

ここで, x_i は誤差を評価する位置であり, n はその評価位置の数である。

4. 1変数関数の応答曲面近似

4・1 1変数関数の例題 1変数関数の出力にノイズを加えたデータを用意し, それを教師データとして応答曲面を作成した。ここで, 教師データの源である関数は, NN およびクリギングによる近似が適すると考えられる次式の多峰性の関数とした。

$$f^*(x) = -x \sin(2x) + 0.2x + 1, \quad 0 \leq x \leq 5 \quad (13)$$

次節の予測精度の調査に一般性を持たせるため, 振幅の変化する正弦関数 $x \sin(2x)$ と線形関数 $0.2x$ を組み合わせた規則性の無い関数を採用した。

4・2 1変数関数に対する予測精度 式(13)の関数の出力に, 一様分布に従うノイズを加えたデータを作成した。一様分布に従うノイズは次式を使って発生させた。

$$U = (-1)^P \cdot \varepsilon \cdot p \cdot \max |f(x)| \quad (14)$$

ここで, U は一様分布ノイズ, P は0を平均としてランダムに発生させた整数, p は $0 < p < 1$ の範囲でランダムに発生させた実数であり, ε は0.05とした。このようなデータを教師データとし, 応答曲面を作成した。図1に式(13)の多峰性関数とともに, 応答曲面の作成に使用した教師データを示す。図1(a), (b)の両教師データはデータの存在する x 座標は同じである。ただし, 図1(b)の教師データでは, x 座標の同じ位置にそれぞれ3個のデータが重複して存在し, データ数が図1(a)の26個から3倍の78個となっている。以降, 同じ x 座標に重複してデータが存在する教師データを重複有り教師データ, 存在しない教師データを重複無し教師

データと呼ぶ。データ数 26 個の場合と同様に、データ数 11 個、51 個の重複無し教師データと、データ数 33 個 (=11 個 $\times$ 3) および 153 個 (=51 個 $\times$ 3) の重複有り教師データを用意した。一般的な通常クリギングはサンプル点間の補間を行うため、重複有り教師データでは応答曲面を作成できない。

ベイズ推論を適用した NN (以降、B-NN と略記する)、ns-Kriging および多項式を使用し、各教師データから応答曲面を作成した。図 1(a)の教師データで応答曲面を作成した結果を図 2 に示す。使用した NN は、入力層と出力層に加えて素子数 10 の中間層を含む 3 層構造である。B-NN、ns-Kriging による応答曲面は教師データが含むノイズに適合していないことが理解できる。また、図 2(b)は式(10)の多項式による応答曲面であり、“Poly-5”と“Poly-8”はそれぞれ次数 n が 5 と 8 の場合の結果を表している。図 1 の多峰性関数は 4 点でその傾きがほぼ 0 となるので、5 次の多項式を検討した。また、回帰分析で回帰式の適合度合いの評価に用いられる自由度調整済み決定係数によると、10 次までの多項式の中で、8 次の多項式の適合度が最も高かったので、8 次多項式についても調査した。

用意した各教師データで作成した応答曲面による

(a) Teacher data without overlap (26 data)

(b) Teacher data with overlap (78=(26 $\times$ 3) data)

Fig.1 Response of one-variable function and teacher data

予測精度を 3 章の評価指標 (式(11), (12)) で整理した結果を表 1, 2 に示す。表中の各値は式(11), (12)の MAX, RMS を式(13)の応答の全変動 (=最大値-最小値) 6.88 と比較して求めた百分率である。また、表 1 の重複無し教師データに関する RMS の変化傾向を図 3 に示す。

4・3 考察 教師データの数、データ重複の有無に関わらず、ns-Kriging による応答曲面の予測誤差は B-NN によるものと比較して常に小さい。この傾向は特に教師データ数が小さいときに顕著である。クリギングはある点の応答を予測する際、全ての教師データの情報を利用するため、教師データが少ない場合でも有効な予測が可能であると考えられる。少数データに対するクリギングのこのような優位性は、本例題のように予測が内挿領域で行われる場合に現れる。応答曲面による予測が外挿領域に及ぶ場合については次節で考察する。一方、NN はある点の応答を精度良く予測するためには、その点近傍にある程度の数の教師データが存在しなければならない。教師データ数が少ない場合は高精度の予測が困難になると考えられる。

NN の構造は、全ての教師データに対して、中間層に 20 個の素子を持つ 3 層構造として学習を開始した。しかし、教師データ数が少ない場合、2.1 節の手順に従

(a) B-NN and ns-Kriging

(b) Polynomial functions

Fig.2 Response surfaces of a one-variable function by using teacher data without overlap (26 data)

Table 1 Average prediction error of response surfaces

The number of teacher data	Response surface			
	B-NN	ns-Krig	Poly-5	Poly-8
11	7.17	3.18	9.28	1.73
26	1.89	1.25	8.55	0.89
51	1.06	0.81	8.14	0.73
33 (11×3)	3.30	1.98	9.09	1.53
78 (26×3)	1.59	0.87	8.42	0.80
153 (51×3)	1.41	0.84	8.19	0.63

(Unit: %)

Table 2 Maximum prediction error of response surfaces

The number of teacher data	Response surface			
	B-NN	ns-Krig	Poly-5	Poly-8
11	12.91	9.50	17.55	4.51
26	5.39	7.27	15.38	2.53
51	3.42	2.55	22.94	2.41
33 (11×3)	13.58	7.33	17.45	5.54
78 (26×3)	3.93	1.79	14.90	1.91
153 (51×3)	5.48	3.81	20.34	2.05

(Unit: %)

Fig.3 Average prediction error of response surfaces using teacher data without overlap

って超パラメータが更新できないことがあり、その場合は中間層の素子数を減少させて応答曲面を作成した。具体的には重複無し教師データにおいて、データ数11個では中間層の素子数を4個、データ数26個では中間層の素子数を10個として応答曲面を作成した。中間層の素子数が多くなると、NNは教師データが含むノイズに過剰適合しやすくなるが、ベイズ推論に従った学習方法によってこのような過剰適合は防ぐことができる。しかし、教師データ数に比べてNNが含む未知係数（素子間の重み係数）の数が極めて多い場合、ベイズ推論に従った学習方法も有効に作用しなくなる。

ベイズ推論に基づくNNの学習では式(1)を最小化するが、式(1)はNNによる予測値と観測値（教師データ）の誤差が正規分布に従うという仮定の下で導出される。したがって、ノイズが一様分布に従う場合は、ベイズ

推論に基づく学習は厳密には適用できないので、NNによる応答曲面には高い予測精度を期待できない。これがNNによる応答の予測精度がクリギングより劣る原因の一つと考えられたので、ノイズが正規分布に従う場合についても検討した。しかし、正規分布ノイズの場合も、NNよりクリギングによる応答の予測精度が高かった。したがって、本例題の場合、ノイズが従う分布形は予測精度の優劣と無関係である。

本例題では、8次の多項式で最も予測精度が良い結果となった。これは適切に多項式の次数を選ぶことができれば、多項式によって非常に予測精度の良い応答曲面が作成できることを意味する。ただし、変数の数が多くなると、選択可能な多項式の形式が増えるため、適切な多項式の選択が難しくなる。

5. 2変数関数の応答曲面近似

5・1 2変数関数の例題 2変数関数の出力にノイズを加えたデータを用意し、それを教師データとして応答曲面を作成した。ここでは応答曲面近似の対象として、Jinら⁽²¹⁾が種々の近似モデルのベンチマークに使用した関数のうち、次式の関数を採用した。

$$f^*(x, y) = 0.5x^2 + y^2 - xy - 7x - 7y \quad (15)$$

図4に式(15)の応答を示す。

5・2 2変数関数に対する予測精度 実験計画法の一つであるラテン超格子法で変数 (x, y) の組み合わせを100個選択し、各組み合わせに対して応答を計算した。選択した100個のサンプル点を図5に示す。この応答に式(14)による一様分布ノイズを加算してノイズを含む教師データとし、それを使ってB-NNとns-Krigingで2変数の応答曲面を作成した。式(11)、(12)の予測精度の評価指標を2変数に拡張し、予測誤差を計算した結果を表3に示す。“LH”の行が図5のサンプル点で応答曲面を作成した場合の結果であり、表中の各値は式(11)、(12)のMAX, RMSを式(15)の応答の全変動（＝最大値－最小値）4122.5と比較して求めた百分率である。ここで、 x, y 方向ともに間隔1で誤差の評価位置を定めて予測誤差を計算した。また、B-NNとns-Krigingによる応答の予測値 $f(x, y)$ と真の応答値 $f^*(x, y)$ の誤差の分布を次式の $Er(x, y)$ で計算し、それを百分率で表した結果を図6に示す。

$$Er(x, y) = \frac{|f(x, y) - f^*(x, y)|}{\max f^* - \min f^*} \quad (16)$$

Fig.4 Response of two-variable function

Fig.5 Sample points for two-variable function by using Latin hypercube method

5・3 考察 表3より、本例題ではB-NNによる応答曲面の予測誤差はns-Krigingによるものと比較して小さい。特に、ns-Krigingによる最大予測誤差はB-NNと比べてかなり大きい。図6より、ns-Krigingで予測誤差が大きいのは $(x,y)=(40,40)$ 、 $(-40,40)$ の近傍であることがわかる。これらの領域は応答の勾配が急であり、教師データ（サンプル点）の密度が低く、かつ応答予測が外挿となる領域である。通常クリギングは一般的に外挿領域の応答予測が得意でない。そのため、通常クリギングを用いたns-KrigingもB-NNに比べて外挿能力が劣る結果になったと推定できる。一方、設計空間の大半を占める内挿領域ではB-NN、ns-Krigingともに応答曲面による予測値と真の応答の差は3%より小さい。このことは、ns-Krigingを使用する場合、予測したい領域が全て内挿となるように教師データを選択すれば良いことを示唆している。

そこで、設計空間の境界にサンプル点を配置して応答曲面を作成し、予測誤差がどのように変化するかを調査した。新たなサンプル点の配置を図7、予測誤差のMAXとRMSを表3（“LH+Boundary”）、ns-Kriging

Table 3 Prediction error of two-variable response surfaces

	Average error		Maximum error	
	NN	Kriging	NN	Kriging
LH	0.77	1.95	12.73	28.47
LH + Boundary	0.54	1.18	3.14	7.94

(Unit : %)

(a) B-NN

(b) ns-Kriging

Fig.6 Prediction error distribution for two-variable function

Fig.7 Sample points for two-variable function by using Latin hypercube method and point placement on boundary

Fig. 8 Prediction error distribution of ns-Kriging response surface for two-variable function

による応答と真の応答の誤差分布を図8に示す。サンプル点を境界上に配置したことにより、ns-Krigingによる応答曲面の最大予測誤差は28.74%から7.94%へと大幅に改善された。図8より、設計空間の境界近傍で誤差の減少が明確に認められる。

このように、サンプル点の境界上への配置により、ns-Krigingでも精度の良い応答曲面の作成が可能である。このような配慮が無い場合、変数の数が増えると、必然的に応答曲面に占める外挿領域（設計空間の境界など）が増えるため、ns-KrigingよりもB-NNによる応答曲面近似が有利になると推測できる。

6. 工学的設計問題への適用例

6・1 工学的設計問題 図9のように、板から2本のはりが立て付けられ、そのはりが互いに接続された構造を考える。このはりの中心軸は鋼製であり、中心軸の周りにはGFRP (Glass fiber reinforced plastics) で覆われている。このような構造で、取り付け部を一定の加速度 (9.8 m/s^2) でスイープ加振したとき、はりの最低次の固有振動数がある周波数以上であり、かつ共振点ではり先端の変位が最大となる、はりの径と板の厚さを求める。設計変数は具体的に、①はりの中心軸径、②GFRPの厚さ、③はり締結部の板厚、④取り付け部の板厚、の4箇所の寸法とし、各変数は4水準の値をとり得るとする。

- ①はり中心軸径 = {6 mm, 8 mm, 10 mm, 12 mm}
- ②GFRP厚さ = {2 mm, 3 mm, 4 mm, 5 mm}
- ③はり締結部の板厚 = {6 mm, 9 mm, 12 mm, 15 mm}
- ④取り付け部の板厚 = {6 mm, 9 mm, 12 mm, 15 mm}

このような設計問題の解を得るの一つの手段として、次の方法が考えられる。すなわち、まず実験計画法で実験計画を策定し、各実験に対応した構造を製作してスイープ加振を行い、着目する応答を測定する。続いて、その応答の測定結果をもとに応答曲面を作成し、その応答曲面で未測定の実験を予測しながら最も目的に合った構造寸法を明らかにする。以降、この方法に従って解を求める。

ここでは、実験計画としてL16直交表⁽²²⁾を採用した。そして、実験の代わりに数値解析で応答（はりの最低次の固有振動数、はり先端変位）を求め、それにノイズを加えて測定データとみなした。同一分布に従う3個のノイズを用意し、それぞれを数値解析による応答に加算することで、L16の各実験に対して3個ずつの仮想測定データを作成し、合計48個の測定データを用意した。ここで、固有振動数に対しては平均0 Hz、標準偏差10 Hzの正規ノイズ、はり先端変位に対しては平均0 mm、標準偏差0.005 mmの正規ノイズを加算した。10 Hzは固有振動数の3.5%（教師データ平均）、0.005 mmははり先端変位の15.2%（教師データ平均）に相当する値である。

6・2 応答曲面と最適解 準備した測定データを教師データとし、B-NNとns-Krigingで応答曲面を作成した。図10は、3変数を固定し(① = 6 mm, ② = 3 mm, ④ = 9 mm)、1変数(③)を変化させて、B-NNおよびns-Krigingによる応答曲面と真の応答（ノイズを含まない数値解析による応答）を比較したものである。図中の“Orig. response”は真の応答を意味する。B-NNによる応答の予測値はns-Krigingによるものよりも真の応答と良く一致している。

B-NNおよびns-Krigingによる応答曲面を使用し、固有振動数が250 Hz以上、かつ③ > ④という制約条件の下、共振点での変位が大きい順に選択した5組の構造寸法とその応答値を表4, 5に示す。表中の“Orig.”は真の応答を意味する。B-NN, ns-Krigingに関わらず、応答曲面の予測誤差が原因で、固有振動数が250 Hz未満の組み合わせも選ばれているが、250 Hz以上(表中、灰色で網掛け)を満足し、かつ共振点変位の大きな構造寸法(表4, 5のNo.3)が明らかとなった。

6・3 考察 本設計問題の教師データの数は48個、変数の数は4個であり、前章の2変数関数の例題に比べてさらに応答曲面が外挿しなければならない領域が増加している。これがns-Krigingによる応答曲面近似を難しくした原因と推測できる。実際Sakataらは、サンプル点の数が少ない場合、ns-Krigingでは応答の予測精度が悪化する恐れがあるため、応答曲面で制約条

件を近似する最適化問題には、ns-Kriging を慎重に適用すべきという見解を示している⁽²³⁾。

外挿となる領域を減らすため、設計空間の隅にサンプル点（ここでは仮想測定データ）を追加し、ns-Kriging で応答曲面を作成した。4 変数の場合、設計空間の隅は 16 ヶ所あるが、L16 直行表による実験計画で設計空間の隅 2 ヶ所に既にサンプル点を配置していたため、その 2 ヶ所を除く 14 ヶ所に新たにサンプル点を配置した。各ヶ所にノイズの大きさの異なる 3 個のサンプル点を追加したので、追加したサンプル点は合計 42 個である。このサンプル点で作成した ns-Kriging による応答曲面を図 11 に示す。図 11 では、図 10 と同様に、

Fig. 9 Structure including two rods connected to each other

(a) Natural frequency

(b) Displacement at resonance frequency

Fig. 10 Response surface of NN, Kriging, original response, and teacher data (① = 6 mm, ② = 3 mm, ④ = 9 mm)

3 変数を固定し (① = 6 mm, ② = 3 mm, ④ = 9 mm), 1 変数 (③) を変化させた。図中の “ns-Kriging(BS)” が設計空間の隅にサンプル点を配置した場合の応答曲面である。設計空間の隅へのサンプル点配置により、応答曲面の精度が大きく向上することがわかる。この ns-Kriging による応答曲面を使用し、固有振動数 250 Hz 以上、かつ ③ > ④ という制約条件の下、共振点での変位が大きい順に選択した 5 組の構造寸法とその応答値を表 6 に示す。4 組 (表中、灰色で網掛け) が制約条件 250 Hz 以上を満足し、共振点での変位が 0.105 mm となる解 (表 6 の No.4) が選ばれており、サンプル点を設計空間の隅に追加する前に比べて優れた解が見つかったことがわかる。

以上から、ノイズを含む測定データをもとにした設計問題に対し、サンプル点の配置に配慮すれば、B-NN および ns-Kriging による応答曲面によって、目的に応じた構造を得ることができると思われる。

7. 結 言

教師データがノイズを含む場合でも有効な NN およびクリギングによる応答曲面の作成方法を利用して、1 変数関数および 2 変数関数の応答曲面を作成した。また、測定データから応答曲面を使って目的に応じた解を見つける設計問題に両手法を適用し、手法の有効性を検証した。得られた知見を以下にまとめる。

Table 4 Geometry obtained by using B-NN

No.	Geometry ①,②,③,④	Natural frequency		Displacement	
		B-NN	Orig.	B-NN	Orig.
1	6, 2, 12, 9	257	222	0.098	0.155
2	6, 5, 9, 6	253	275	0.087	0.059
3	6, 4, 15, 6	259	275	0.087	0.074
4	8, 2, 12, 6	262	273	0.084	0.070
5	6, 2, 15, 9	256	224	0.083	0.153

(Unit: Geometry, Displacement (mm), Natural frequency (Hz))

Table 5 Geometry obtained by using ns-Kriging

No.	Geometry ①,②,③,④	Natural frequency		Displacement	
		ns-Krig	Orig.	ns-Krig	Orig.
1	6, 5, 9, 6	256	275	0.110	0.059
2	6, 3, 12, 6	259	244	0.107	0.112
3	8, 3, 9, 6	258	273	0.098	0.061
4	6, 2, 15, 6	266	220	0.096	0.161
5	6, 2, 12, 9	255	222	0.096	0.155

(Unit: Geometry, Displacement (mm), Natural frequency (Hz))

(a) Natural frequency

(b) Displacement at resonance frequency

Fig.11 Response surface of Kriging with boundary sampling points, original response, and teacher data (① = 6 mm, ② = 3 mm, ④ = 9 mm)

Table 6 Geometry obtained by using ns-Kriging with boundary sampling points

No.	Geometry ①,②,③,④	Natural frequency		Displacement	
		ns-Krig	Orig.	ns-Krig	Orig.
1	6, 3, 12, 6	257	244	0.127	0.112
2	6, 3, 15, 9	261	254	0.116	0.103
3	8, 2, 12, 6	274	273	0.109	0.070
4	6, 3, 12, 9	262	250	0.109	0.105
5	6, 3, 15, 12	259	256	0.108	0.102

(Unit: Geometry, Displacement (mm), Natural frequency (Hz))

- (1) 多峰性1変数関数の応答曲面を、ノイズを含む教師データから作成する場合、B-NNよりもns-Krigingの方が応答の予測精度は良い。この傾向は特に教師データ数が少ない場合に顕著であり、ns-Krigingの内挿能力の高さに起因するものである。
- (2) 変数が多くなると、B-NNに比べてns-Krigingによる応答の予測精度は悪くなる。ただし、この予測精度の悪化は予測が外挿となる領域に限られるため、外挿領域が小さくなるように教師データを配置すれば、

多変数の場合でもns-Krigingを用いて精度の良い応答曲面が作成できる。

- (3) 測定データをもとに目的に応じた解を求める工学的設計問題にB-NNとns-Krigingを適用したところ、制約条件を満たす解が探索できた。したがって、両手法はノイズを含むデータをもとに目的に応じた解を求める際に有効な方法である。

文 献

- (1) Box, G. E. P. and Wilson, K. B., *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 13(1951), pp. 1-45
- (2) Hagiwara, I. et al., *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol. 63, No. 616 (1997), pp. 46-53.
- (3) Sakamoto, R. et al., *Quarterly Journal of the Japan Welding Society*, Vol.24, No.1 (2006), pp. 93-99.
- (4) Sacks, J. et al., *Statistical Science*, Vol. 4, No. 4(1989), pp. 409-435.
- (5) Simpson, T. W. et al., AIAA-98-4755(1998), pp.381-391.
- (6) Mullar, A. A. and Messac A., *AIAA Journal*, Vol. 43, Issue 6(2005), pp. 1306-1315.
- (7) Sakata, S. et al., *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 193 (2004), pp. 385-404.
- (8) Funahashi, K., *The institute of Electronics, Information and Communication Engineers, Technical Report*, MBE 88-9(1988), pp.59-65.
- (9) Hertz, J. et al., *Introduction to the Theory of Neural Computation* (1991), p.147, Addison-Wesley.
- (10) Sasena, M. et al., *DETC '02 ASME, DET2002 / DAC-34091*.
- (11) Sakata, S. et al., *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 196, Issues 13-16(2007), pp. 2055-2069.
- (12) MacKay, D.J.C., *Neural Computation*, Vol. 4 (1992), pp. 413-447.
- (13) MacKay, D.J.C., *Neural Computation*, Vol. 4 (1992), pp. 448-472.
- (14) Takeda, N., *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.73, No.733 (2007), pp. 1079-1086.
- (15) Wackernagel H., *Multivariate Geostatistics*(2003), Springer.
- (16) Mase S. and Takeda J., *Spatial Data Modeling* (2001), Kyoritsu Shuppan Co. LTD (in Japanese)
- (17) Cressie, N., *Mathematical geology, Series A*, Vol.17, No.5 (1985), pp. 563-586.
- (18) Myers, R. H. and Montgomery, D. C., *Response Surface Methodology* (1995), John Wiley & Sons.
- (19) Wang, G. G. and Simpson, T. W., *Engineering Optimization*, Vol.36, 3(2004), pp.313-335.
- (20) Sakata, S. et al., *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.70(2007), pp.631-654.
- (21) Jin, R., Chen, W. and Simpson, T. W., *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 23, No. 1-3(2001), pp.1-13.
- (22) Peace, G. S., *Taguchi Methods: A Hands-on Approach*, (1993), p.117, Addison-Wesley.
- (23) Sakata, S. et al., *Computational Mechanics*, Vol.31(2003), pp.409-418.