数理科学実践研究レター 2020–7 September 01, 2020 ランダムフォレストモデルによる岩石の破壊時刻予測 by 山口 優太



UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES KOMABA, TOKYO, JAPAN

ランダムフォレストモデルによる岩石の破壊時刻予測

山口優太1(東京大学大学院理学系研究科)

Yuta Yamaguchi (Graduate School of Sciences, The University of Tokyo)

概 要

準静的に変形する物質の破壊予測に関して、ランダムフォレストモデルの適用を試みた. ランダ ムフォレストモデルはアンサンブル学習法の一種で、予測を行う上で複数のサンプルが必要になる. そこで、岩石の破壊実験を模擬した数値シミュレーションによって多数のサンプルを用意した. 結果 として、アンサンブル内でサンプル間の変動が小さい状況下では、破壊時刻を正確に予測すること に成功した. そして、破壊時刻を予測する上で、降伏応力のみならず、破壊過程で観測される音響信 号の累積量、つまり系内部のダメージの蓄積量が重要な特徴量として抽出された.

1 はじめに

多孔質物質の破壊現象は, 地震, 雪崩, 建築物質の破壊など多岐にわたり観測される. 多孔質物質が準 静的に荷重の下で弾性変形を経て降伏し, やがて破壊に至る過程は, 岩石のみならず, 産業機械が経年 劣化し壊れる上でも観測される. 従って, 破壊の発生する時刻を予測することは非常に重要である. 今日, 機械学習の重要性が高まっているが, その一手法であるランダムフォレストモデルを用いて, 室 内の岩石実験の結果から破壊現象を予測することが試みられている [1]. 先行研究の実験では, 砂の中 で圧縮された剛体棒を引っ張る実験において, 剛体棒が砂に対して固着・滑りを繰り返す単純な周期 運動をする場合に, 滑りの時刻を正確に予測している. しかしながら, 多孔質物質の破壊のような複雑 性を持った破壊過程に対しては, 機械学習の適用は未だなされていない.

本レターでは, 我々が既に行った岩石の破壊を模擬した数値シミュレーション [2] の結果にランダム フォレストモデルを適用し, 破壊時刻を予測した結果を報告する. 更に, 破壊を予測する上で重要とな る特徴量の抽出を行う.

2 多孔質物質のモデリング

本章では破壊の予測を行う対象となる粉体シミュレーションによるモデリングについて説明する.

2.1 モデリング



図 1: 多孔質物質の模式図. 系は多数のガラスビーズを表す粒子から構成され, 各近接粒子間はポリ マーボンドで結合される.

多孔質物質の一例として,多数のガラスビーズをポリマーの液体架橋で接着することで形成される円 柱状の物質を考える.この物質に対して一軸圧縮を行った際の弾性応答が実験によって調べられてい

¹yamaguchi@eps.s.u-tokyo.ac.jp

る [3]. 我々はこの物質の変形過程を粉体シミュレーション (Discrete element method) を用いて再現 した [2]. このシステムの模式図を図1に示す. 図中の青色の粒子がバルク粒子, 赤色の粒子は上端と 下端の壁に相当する. 上端の壁を構成する粒子の位置を固定し, 下端の壁の粒子を上方に動かすこと で系に対して一軸圧縮をかける.

2.2 多孔質物質の破壊過程



図 2: 系の初期密度 $\phi_i \ge 0.450$ から 0.580 まで変化させた際の応力-歪み $(\sigma - \epsilon)$ 曲線.

系に対して一軸圧縮を行った際の応力-歪み曲線を図2に示す.系に加わる歪みが小さい際には,応力 と歪みは線形であり,弾性的に振る舞う.更に歪みを増加すると,応力が最大値をとるのと同時に系は 降伏し,破壊に至る.図2では系の初期密度 ϕ_i を変えたときの応力-歪み曲線が示されている.初期密 度が大きい場合は大きな応力の降下を伴って系は破壊されるのに対して,初期密度が小さくなるにつ れて応力の降下量は小さくなる.初期密度の違いによる応力降下量の違いは変形過程の違いを反映し ており,この異なる変形過程を示したのが図3である.初期密度の高い図3(a)では系の内部に斜めの 剪断面が卓越し系が変形(脆性破壊)するのに対して,初期密度の低い図3(b)では系全体が一様に変 形(塑性変形)する.これらの結果は,初期密度に着目した岩石の変形実験の結果と整合的である[4].



図 3: 初期密度 (a) $\phi_i = 0.580$, (b) $\phi_i = 0.500$ における系の変形様式. 図中の色は初期時刻からの粒子の z 方向の変位量を表す.

2.3 岩石の破壊過程における岩石内部の微小亀裂

岩石の破壊過程において,系内部では微小な亀裂が多数発生する.室内実験ではこれらの亀裂が音響 信号 (AE: acoustic emission) として観測される. 微小亀裂の空間発展を追った先行研究 [5] では,岩 石が脆性破壊に至るまでの過程で,初期には微小亀裂が空間でランダムに発生するのに対して,歪み が蓄積するにつれて徐々に面上に集中し,やがてその面上で剪断破壊が発生することを報告している. 従って, 微小亀裂の空間発展を追うことは破壊時刻の予測につながる可能性がある. 我々の系では, ガラスビーズ間を接続するポリマーボンドの破断が岩石実験における微小亀裂に対応 する. そこで, 系内部のダメージの蓄積量として, ボンド破断の累積個数の時間発展を追跡した.

3 ランダムフォレストモデル

本章では破壊予測を行う上で用いたランダムフォレストモデルを説明する.

3.1 モデルの説明

ランダムフォレストモデルとは,決定木に基づいた機械学習手法の一つである [6]. 各決定木の上で特 徴量ごとに条件分岐を行い,分類モデルを作成する. 尚,特徴量ごとの条件分岐は,条件分岐後のそれ ぞれのノードの純度が増すように分割される. 重複を許してランダムサンプリングし,多数の決定木 を作成する. そして,各決定木の多数決をとることで最終的な予測結果を決定する. ランダムフォレス トモデルにおけるパラメータは主に二つで,各決定木の深さ(条件分岐の深さ)と決定木の個数であ る. 本レターでは決定木の深さ 20,決定木の個数 1,000 を用いて予測を行った.

3.2 特徴量の重要度

決定木を作成する上で,重複を許したランダムサンプリングの中には,決定木の作成に選ばれないデー タが存在する.これらのデータを使って目的変数の予測を行う.これを基準にして,ある特定の特徴量 をランダムにシャッフルして再度予測を行い,予測精度の変化を見る.このとき,性能が大きく減少す れば,その特徴量は予測に重要なものと特定される.

3.3 モデルの適用

本レターでは、以下の手順で破壊時刻の予測を行った.まず、破壊時刻とは応力-歪み曲線において応 力の極大値を与える歪みの値とする.同じ条件下で粒子の初期配置を変えたサンプルを五つ用意し、 そのうちの四つを教師データ、一つをテストデータとした.教師データは全ての特徴量を用いて、ラン ダムフォレストモデルに学習させる.テストデータは破壊までの時刻の情報のみを除いて、各時刻に おけるその他の特徴量を教師データで学習させたモデルに代入し、破壊までの時刻の予測を行う(図 4).尚、用いた特徴量は以下の六つである.

- stress: 応力
- Dstress: 応力の時間微分
- DDstress: 応力の時間二階微分
- average_stress: 応力の平均値
- variance_stress: 応力の分散値
- AE: 各時刻までの微小亀裂の積算値(系内部のダメージの蓄積量)

更に、系の初期密度を $\phi_i = 0.450$ から 0.575 まで変化させた際の予測精度の変化を調べた.



図 4: テストデータにおける破壊時刻予測の概念図. 破壊に達する前の任意の時刻において, 破壊までの時間以外の情報から破壊時刻を予測する.

4 予測結果,考察

4.1 応力-歪み曲線



図 5: 初期密度を変化させた際の教師データの平均値(赤),テストデータ(青),破壊までの時刻の 予測結果(緑)の応力-歪み曲線.

破壊時刻の予測結果を図5に示す.ここでは,複数ある特徴量の中で応力に着目して破壊までの時間の可視化を行った.初期密度が大きい条件下では,テストデータ(青)と予測結果(緑)が非常によく

一致している.その一方で,初期密度の減少とともに予測結果の揺らぎが増大する.これは,教師データの平均値(赤)の揺らぎに起因する.系の初期密度が高い場合はアンサンブル内におけるサンプル間の揺らぎは小さい.その一方で,初期密度の減少に伴い,各サンプルによる初期配置の依存性が強くなる.従って,データのばらつきの大きい初期密度が低い条件下では,予測精度が下がったと考察される.サンプルの数を増やして初期配置による揺らぎを小さくすると,予測精度が向上することが期待される.



4.2 破壊予測において重要な特徴量

図 6: 初期密度を変化させた際の予測において重要な特徴量.

次に,破壊時刻を予測する上で重要だと見積もられた特徴量を図6に示す.初期密度が高い場合は,応 力が重要な特徴量として見積もられた.これは,系は降伏応力に達すると破壊することに対応する.そ の一方で,初期密度が低くなると,重要な特徴量は応力の平均値・応力の分散・ボンドの破断個数の 積算値に遷移する.これは,上述の初期配置による依存性が大きくなり,降伏応力にサンプルによる揺 らぎが生じるためであると考察される.そのような状況下では,応力の平均値や分散のみならず,系内 部のダメージの蓄積量としての微小亀裂の個数の積算値が重要な特徴量として抽出されている.これ は,初期密度が低く塑性変形するような物質では,降伏応力よりもむしろ,系内部のダメージの蓄積量 が系の破壊を予測する上で重要な特徴量であることを示唆しており,本研究から得られた新しい知見 である.しかしながら,現時点では密度変化に対する一貫した結果が得られていない.これは教師デー タの数が不十分なことに由来すると考えられる.

5 結論

岩石の準静的な変形過程を数値シミュレーションで再現した.系の初期配置を変えることで,サンプ ルを五つ用意し,ランダムフォレストモデルに適用し岩石の破壊時刻の予測を行った.系の初期密度 に対する破壊時刻の予測精度について調べたところ,系の初期密度が高く,岩石が脆性破壊するよう なパラメータ領域では,四つの教師データから非常に良い精度で破壊時刻予測に成功した.その一方 で,系の初期密度が低く,岩石が塑性変形するようなパラメータ領域では,各サンプルによる初期配置 依存性が強く,破壊時刻の予測精度は非常に低かった.

更に,破壊時刻予測における重要な特徴量の抽出を行ったところ,系の初期密度の減少に伴って,重要 な特徴量は応力から応力の平均値・分散・系内部のダメージの蓄積量へと変化した.

最後に、本研究の産業界への意義について言及する. 産業界ではデータの欠損などにより、十分な時系 列データが取得できないことが数多くある. そのような状況下でも、数値シミュレーションで適切に モデリングを行い、アンサンブル学習で時系列データの予測を行う過程は有効である. 更に、予測を行 う上で重要な特徴量を適切に抽出できれば、実際に観測する必要があるデータを特定することが可能 である.

6 謝辞

本研究において,課題を提供してくださった株式会社ニコン研究開発本部数理技術研究所の皆様,特に 機械学習について貴重なコメントをくださった中村ちからさんに心から感謝申し上げます.また,Dr. Soumyajyoti Biswas, Dr. Lucas Goehring には,機械学習について議論して頂き感謝いたします.そ して,会合の日程調整や全般に関わるコメントを頂いた京都大学数理解析研究所准教授の石本健太さ ん,東京大学数理科学研究科助教の鮑園園さんに心から御礼申し上げます.

参考文献

- Bertrand Rouet-Leduc, Claudia Hulbert, Nicholas Lubbers, Kipton Barros, Colin J Humphreys, and Paul A Johnson. Machine learning predicts laboratory earthquakes. *Geophysical Research Letters*, Vol. 44, No. 18, pp. 9276–9282, 2017.
- [2] Yuta Yamaguchi, Soumya Biswas, Takahiro Hatano, and Lucas Goehring. Failure processes of cemented granular materials. arXiv:2007.08367.
- [3] Arnaud Hemmerle, Matthias Schröter, and Lucas Goehring. A cohesive granular material with tunable elasticity. *Scientific Reports*, Vol. 6, p. 35650, 2016.
- [4] Teng-fong Wong and Patrick Baud. The brittle-ductile transition in porous rock: A review. Journal of Structural Geology, Vol. 44, pp. 25–53, 2012.
- [5] David A Lockner. The role of acoustic emission in the study of rock fracture. In International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts, Vol. 30, pp. 883– 899, 1993.
- [6] Leo Breiman. Random forests. Machine learning, Vol. 45, No. 1, pp. 5–32, 2001.