

論文 機械学習を用いたコンクリートの圧縮強度の予測に関する基礎的研究

小山 顕*1・小林 知大*1・高杉 文也*1・西脇 智哉*2

要旨: コンクリート材料の効率的な開発のため、機械学習を用いて圧縮強度を予測するモデルの構築を行った。1996年から2023年に掲載された日本コンクリート工学年次論文集から抽出した配(調)合や圧縮強度などのデータセットを作成して解析に用いた。その結果、学習範囲内では高い正解率で算出でき、パラメータであるニューロンの数などに依存することなく見かけ上は過学習を避けることのできるモデルを構築できた。学習範囲外の配(調)合で実際にコンクリート供試体を作製し、得られた圧縮強度とモデルによる予測強度を比較すると、予測強度と試験結果が一致する場合と差が生じる場合の2つの結果が得られた。

キーワード: コンクリート, 機械学習, ニューラルネットワーク, 圧縮強度, 混和材

1. はじめに

近年、自動運転技術や音声認識など様々な分野において機械学習が用いられている¹⁾。機械学習を用いることでビックデータから自動的にルールやパターンを見出し、その結果から分類や予測を行うことが可能であり、コンクリート分野においても、セメントペーストの水和反応に機械学習を用いてモデリングを行うなどの試みが行われている^{2), 3)}。一方で、日本国内のコンクリート分野において機械学習を用いた研究事例は少なく、活躍が期待されている手法である。

コンクリート分野における機械学習の適用先の一つに、配(調)合検討が挙げられる。最も基幹的な建設材料の一つであるコンクリートは、二酸化炭素(CO₂)排出量の多いセメントを主原料とするものであり、国内製造業のCO₂排出量全体の約10%を占めている⁴⁾。しかし、今日ではカーボンニュートラルの達成が目標とされ、コンクリート分野においては、いわゆる低炭素型コンクリートの取り組みが数多く行われている⁵⁾。これらの検討では、コンクリートの製造に当たって最もCO₂排出量原単位が大きいセメントに代わりフライアッシュや高炉スラグ微粉末などの産業副産物を混和材として用いるなどの取り組みが行われている。このような混和材を用いる配(調)

合を計画する場合には、たとえば調合設計指針で示されているような配(調)合設計の手法⁶⁾が十分に一般化されていない⁷⁾。そのため、所要の圧縮強度を得るためには、数多くの試し練りなどの実験的な手段を取る必要があり、より効率的な配(調)合設計の手法が求められている。

これらの背景から、本研究では多くの原材料からなるコンクリートについて、日本国内のデータを機械学習の解析に使用することで圧縮強度の予測が可能なモデル作成を行う。開発言語にはPython、アルゴリズムにはニューラルネットワーク(NN)を採用し、誤差逆伝播法を適用する。また、学習済みモデルに対して実験室で作製した試験体を用いて、作成したモデルの妥当性についても検討する。

2. 解析概要

機械学習におけるデータ解析は、アルゴリズムを含むソースコードを用いてデータセットを学習することで実行される。

2.1 解析アルゴリズム

本研究では、クラウド上で解析可能であるGoogle Colaboratory⁸⁾を用い、言語にはPythonを用いた。また、アルゴリズムとして、NNを用い、ライブラリーにはPyTorch、

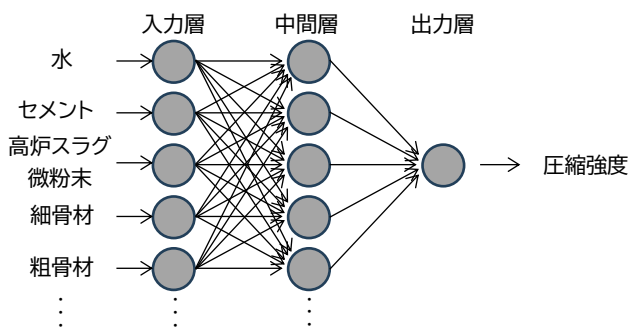


図-1 NNの構造

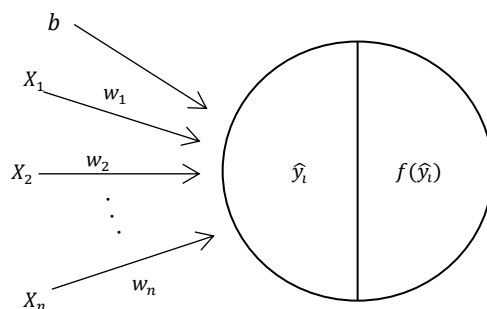


図-2 中間層((1)式参照)

*1 東北大学 大学院工学研究科 都市・建築学専攻 (学生会員)

*2 東北大学 大学院工学研究科 都市・建築学専攻 准教授 博士(工学) (正会員)

活性化関数にはReLU関数 (Rectified Linear Unit), 損失関数には交差エントロピー, 最適化手法には確率的勾配降下法を用い, 誤差逆伝播法によって予測結果と実際の正解との誤差が小さくなるようにミニバッチ学習を用いて学習をすすめた。

既往の研究において高い正解率を算出するアルゴリズムは主にランダムフォレストとNNである⁹⁾。本研究では, 国内の研究においてコンクリート分野で最も有効であるとされるNNを用いた¹⁰⁾。図-1にNNの構造について示す。NNは, 配 (調) 合表からなるデータを反映する入力層と, 予測結果を算出する出力層と2つの層をつなぐ中間層からなる。図-2に中間層の構造を示す。中間層においては, 重み w とバイアス b を含めて結合したのちに, 以下の式(1)で表される活性化関数であるReLU関数 $f(y_i)$ を用いて処理を行った。ReLU関数とは, \hat{y}_i が0以上の値をとる時には \hat{y}_i をそのまま導出し, 0未満の値をとる時には0の値を返す関数である。入力する \hat{y}_i の値に関わらず損失関数の傾きが1になるという性質を持つため, 後述する確率的勾配降下法における処理を扱いやすい関数である。

$$f(\hat{y}_i) = \begin{cases} 0, & \hat{y}_i < 0 \\ \hat{y}_i, & \hat{y}_i \geq 0 \end{cases} \quad (1)$$

ここで, \hat{y}_i : 予測圧縮強度の確率, $\hat{y}_i = \sum_{i=1}^n w_i X_i + b_i$

また, 機械学習によって算出された結果に基づいて, モデルを最適化していくためには損失関数を用いられる。損失とは, 予測圧縮強度の確率と実際の圧縮強度の確率の差を示し, 値が小さいほど予測精度が高いことを示す。本研究では以下の式(2)で表される交差エントロピー誤差を用いて誤差の処理を行った。

$$E = - \sum_{i=1}^n y_i \log \hat{y}_i \quad (2)$$

ここで, y_i : 実際の圧縮強度の確率

そして, 最適化には確率的勾配降下法を採用した。図-3に概略を示す。誤差関数内では一時的な最適解である局所最適解と関数全体の最小値である大域的最適解が存在する。機械学習における最適化とは, 後者を見つけ出すことであるため, 局所最適解とならないパラメータ

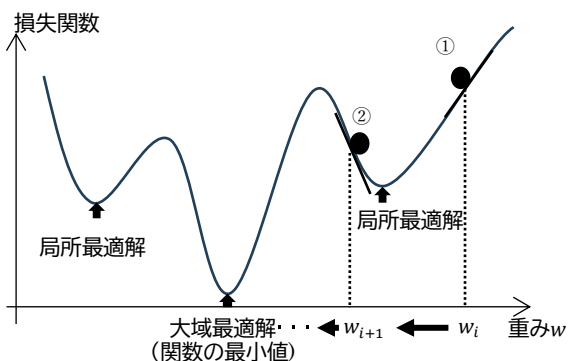


図-3 確率的勾配降下法の構造

を定める必要がある。確率的勾配降下法では, ある時点での学習における重み w_i に対する誤差での勾配 (傾き) を計算し, その時点での勾配に応じて重みが更新されることで, 次の学習における重み w_{i+1} を定める。以下の式(3)で重みが更新される。

$$w_{i+1} = \begin{cases} w_i + \Delta w & \left(\frac{df}{dw_i} > 0 \right) \\ w_i - \Delta w & \left(\frac{df}{dw_i} < 0 \right) \end{cases} \quad (3)$$

ここで, Δw : 重みの更新量, df/dw_i : w_i での損失関数の傾き

本研究においては, はじめに800個の全データを学習・検証用データ700個 (TrainVal) と試験用データ100個 (Test) に分割し, 学習・検証用データでモデルを作成したのちに試験用データで精度を確認するものとする。

ここで, ミニバッチ学習とは, 学習・検証用データの中から一定の数ごとにグループ分けを行うことで学習を進めていく方法である。この分割数が大きいほど大域的に学習し, 分割数が小さいほど1グループごとに対して忠実に学習を行うという性質を持つ。

学習に対する精度を検証するための指標には圧縮強度の予測値と実際の圧縮強度の当てはまりの良さを評価する決定係数 (R^2), 両者の関係性の強さを示す相関係数 (r), 両者の差を示す二乗平均平方根誤差 (RMSE) および平均絶対パーセント誤差 (MAPE) を用いた。本研究において R^2 および r は1に近いほど, RMSEおよびMAPEは0に近いほど予測強度が実際の圧縮強度に近いことを指す。

2.2 データセット

解析にはコンクリートの配 (調) 合データが必要となるが, 国内においてオープンソースで利用可能なコンクリートの配 (調) 合に関する解析に使用可能なデータセットは現状存在しない。海外の先行研究においては, 39件の査読付き論文から集められた1143個のデータを用いて, 高い精度でコンクリートの圧縮強度を予測する例がある⁹⁾。一方で, 海外のデータについて, たとえばEN 197-1では材齢28日における圧縮強さの上限值が定められている¹¹⁾ほか, ASTM C150ではJIS R 5210で定められる各材齢における圧縮強度よりも小さく定められている。加えて, 国内で流通しているセメントは海外で一般的な32.5クラスのセメントよりも強さが著しく高い傾向がある¹¹⁾。このように, 圧縮強度に影響が大きいと考えられるセメント強さなどに差異が存在することから, 国内のデータと同一のものとして解析に用いるのは適切でない可能性がある。そこで本研究では, 国内での配 (調) 合および試験結果が幅広く示されている, 日本コンクリート工学会年次論文集の1996年から2023年に掲載された16編の論

表-1 説明変数

説明変数		値		平均値	最小値	最大値	標準偏差
セメント	普通ポルトランドセメント	有無	0 or 1				
		単位セメント量	数値	256.63	0	666	154.71
	高炉セメント	有無	0 or 1				
		単位セメント量	数値	18.26	0	405	62.05
	早強ポルトランドセメント	有無	0 or 1				
		単位セメント量	数値	0.07	0	410	75.15
骨材	細骨材	単位細骨材量	数値	787.7	563.0	946	78.39
	粗骨材	単位粗骨材量	数値	978.77	804	1163	69.3
混和材	高炉スラグ微粉末	単位配合量	数値	47.54	0	372	87.73
	フライアッシュ	単位配合量	数値	45.03	0	360	62.11
化学混和材	水	単位水量	数値	168.89	121	204	12.59
	AE 剤	単位添加量	数値	0.71	0	17.79	2.34
	AE 減水剤	単位添加量	数値	1.28	0	7.5	1.51
	高性能 AE 減水剤	単位添加量	数値	1.24	0	15.6	2.1
養生	養生方法	気中, 水中, 恒湿恒温室	0 or 1 or 2				
	材齢	日数	数値	57.75	1	365	75.98

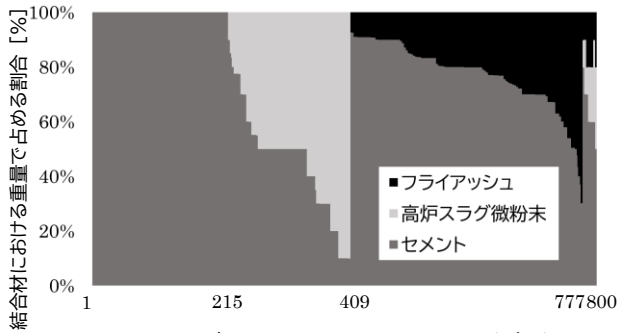


図-4 データセット内の配(調)合割合

文から769個のデータ、および、宮城県内のコンクリートプラントから得た31個のデータの計800個の配(調)合および圧縮強度試験結果から、利用可能な情報を選択してデータセットを作成した。データセットの詳細と解析に用いた説明変数を表-1に示す。表中の各種セメントの「有無」とは、当該の調査に用いられたセメントの種類を表す。セメント種類(普通ポルトランドセメント・高炉セメント・早強ポルトランドセメント)それぞれについて、この調査で使用されている場合には1とし、使用されていない場合には0となる。「単位セメント量」は、それぞれの調査における単位体積当たりの使用量(kg/m³)を数値として与えている。そのため、使用されていない種類のセメントは0となる。表中の平均値が、一般的な単位セメント量と比較して小さい値となっているのはこのためである。データセット内には混和材を含まないデータ数は215個、混和材にフライアッシュまたは高炉スラグ微粉末が含まれているデータ数は585個である。さらに、図-4にデータセットに格納されている配(調)合で使用されている結合材(セメントおよび混和材)の割合を示す。フライアッシュまたは高炉スラグ微粉末単体でセメント置換したデータは幅広い割合でデータが存在するのに対し、両者を含むデータは23個のみである。

2.3 スケーリング手法及び位置

NNでは、説明変数の絶対範囲の大きさに影響を受けないように、あらかじめ値の幅を一定に揃えるスケーリン

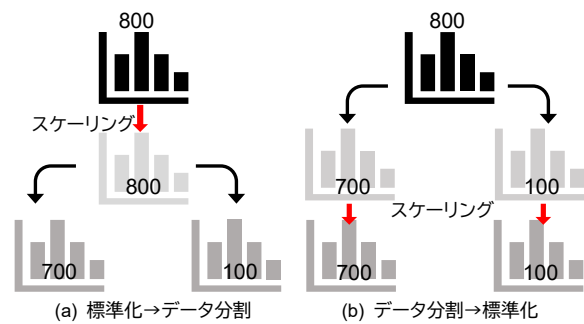


図-5 データ分割とスケーリング

グ処理が必要である。適切なスケーリング処理によりモデルの精度の向上させることができる¹²⁾。本研究では、正規化と標準化の2つのスケーリングの方法を採用し、両者の比較を行った。正規化とは説明変数の最大値が1、最小値が0となるように、標準化とは説明変数の平均値が0、標準偏差が1となるように処理を行う方法である。正規化されたデータ x_{nrl} と標準化されたデータ x_{std} をそれぞれ以下の式(4)、(5)で求めた。

$$x_{nrl} = \frac{x_i - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \quad (4)$$

$$x_{std} = \frac{x_i - \mu_x}{\sigma_x} \quad (5)$$

ここで、 x_i : 説明変数の元データ、 x_{min} : 説明変数の最小値、 x_{max} : 説明変数の最大値、 μ_x : 説明変数の平均値、 σ_x : 説明変数の標準偏差

さらに、モデル作成の段階でデータセットを分割する前後のいずれでスケーリングを行うのが適切かを判断するため、図-5のように2通りの検討を行った。

2.4. パラメータ

学習用データセットの範囲にのみ過剰に適応し、汎用性が低下する過学習を避けるために、最適なパラメータを求める必要がある。本研究で用いるパラメータを表-2に示す。NNの中間層及びニューロンの数、そしてミニバッチ分割の分割数の検討について行った。学習回数については、パラメータごとに必要に応じて変化させ、十

バッチ分割	3, 10, 20
ニューロンの数	16, 64, 256, 1024
中間層の数	1, 2, 3, 4

No.	W/B	単位質量(kg/m ³)						
		W	C	GGBS	FA	S	G	SP
1	0.4	143	358	0	0	895	1074	1.79
2	0.4	220	552	0	0	773	829	0
3	0.5	196	196	98	98	784	978	0.98
4	0.6	197	109	109	109	821	985	0.55
5	0.4	143	178	178	0	891	1069	1.8
6	0.4	140	175	0	175	873	1048	1.8

分な学習となるまで行った。また、ニューロンの数と中間層の数の表し方として、ニューロンの数が第1層目に10個、および、第2層目に100個のように中間層2層で構成される時、10-100(2)と表すものとする。

2.5 強度予測

学習を行ったモデルの精度を確かめるために、表-3に示す配(調)合で試験体を作製した。この試験体に対して圧縮強度試験を行うとともに、圧縮強度の予測を行った。これらの配(調)合は、データベースには存在しないよう計画した。また、作製した試験体の名称に関して、同じ配(調)合で材齢の異なるものは、No.2(7)とNo.2(28)のようにカッコ内の数字で区別する。

3. 解析結果と考察

以下に示す解析結果は、前章で述べた解析手順やパラメータを変更したことによるモデルの精度の変化である。

3.1 スケーリングの種類及び位置

スケーリングに正規化および標準化を用いた結果を、それぞれ図-6(a), (b)に示す。いずれの場合であっても、決定係数および相関係数に大きな差は見られない一方で、予測圧縮強度と実際の圧縮強度(図中の「実測強度」)の差である損失および正解率には差が確認された。学習回数を同一とした場合、正規化と比較して標準化を行った場合には学習速度が速く、1回の学習ごとの損失の振幅が減少し、モデルの精度も向上することが確認された。そのため、これ以降の解析にはスケーリングに標準化を用いる。

また、標準化を行う位置についての結果を図-6(b), (c)に示す。散布図、損失および正解率に大きな差異は見られない結果となり、標準化をデータセット分割の前後いずれで行ってもモデルの精度に影響がないことが確認された。これ以降の解析には、データセットに対して標準化を行ってから学習・検証用データと試験用データの分割を行う。

3.2 ニューロンの数

中間層を1層に固定しニューロンの数を変化させた結果を図-7に示す。ニューロンの数が多い場合に、損失が小さくなり学習もより速く進むことが確認された。ま

た、ニューロンの数を増加させた場合もモデルの精度に明確な差異は見られなかった。

3.3 中間層の数

各層のニューロンの数を固定し、中間層の数を変化させた結果を図-8に示す。ここで設定した範囲では、中間層の数が多いほど学習速度は速くなりRMSE, MAPEともに小さくなる。この一方で、5層に設定すると誤差が突発的に大きくなる現象が起きることが確認された。この地点では、一時的に過学習となる現象が起きていると考えられ、誤差が大きい状態で学習が終了することは好ましくない。この過学習は、中間層の数が過大に設定されたことによってモデルが複雑になりすぎてしまったことで発生したと考えることができる。よって、本検討の範囲では中間層の数を3層までにとどめることが適切であると考えられる。

3.4 バッチサイズ

ミニバッチ学習のバッチサイズについて、結果を図-9に示す。バッチサイズの大小ではモデルの精度に影響がない一方で、学習速度に関してはバッチサイズが大きいほど学習が速くなることが確認された。

4. 未知の強度予測によるモデルの評価

ここでは、前章で作成したモデルを用いて実際に作製した試験体の圧縮強度を予測し、実験結果と比較することによりモデルの精度を検証した。

作成したモデルによる予測圧縮強度と実際の圧縮強度の結果を表-4に、作成したモデルによる予測強度分布を図-10に示す。表-4には、得られた予測強度の中で最も近かった実験値と、その際に用いた機械学習のパラメータを併せて示す。また、パラメータは中間層を1層から3層まで、および、ニューロンの数を16個から1024個の間で変化させることで78回の予測を行った。その結果、表-4に示すように概ね予測強度は実際の強度よりも大きい値となった。予測結果が実際の強度に近い場合も見られたが、これを導出する機械学習のパラメータは一定ではなく、モデルを一意に特定することは困難であった。前章ではパラメータの変化をモデルの学習速度にのみ着目して考察を行ったが、実際には学習範囲外の配(調)合による予測強度は、中間層の数などのパラメータによって大きく変化する可能性が示唆される結果となった。

図-10より、No.1, No.2のOPCのみを用いたコンクリートの予測強度について、材齢を3日としたNo.1では実際の強度に対して約10 MPa過大に示した。この原因として、データセットに格納されている材齢3日のデータ数が55個と十分ではなかったためと考えられる。No.2(7)では、機械学習のパラメータを変化させる中で最も予測回数の多かった予測強度の最頻値が実際の強度とおおむね一致

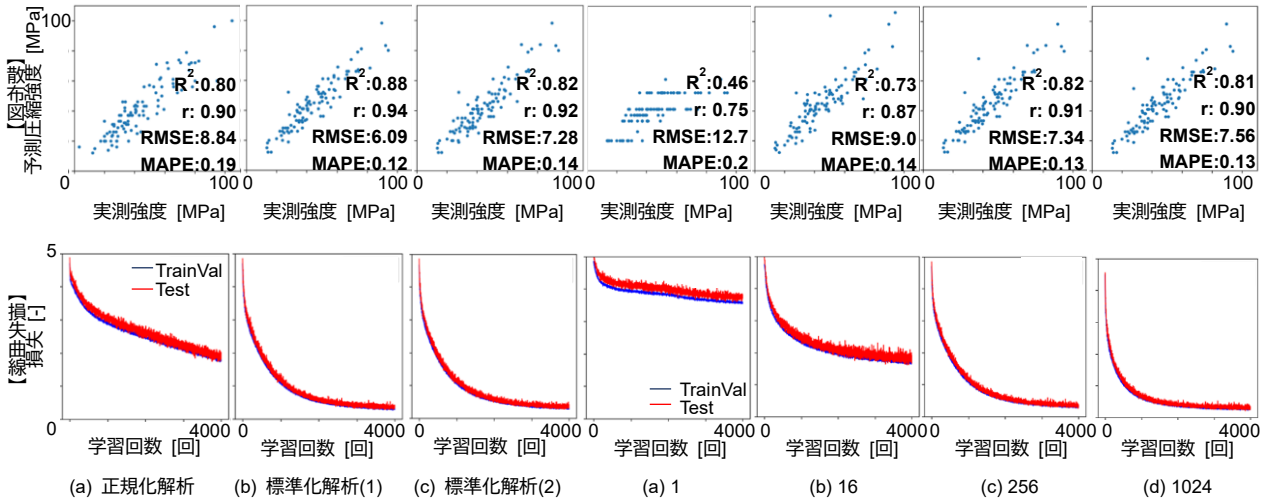


図-6 スケーリングの種類及び位置の変化による解析精度の違い

図-7 ニューロンの数の変化による解析精度の違い

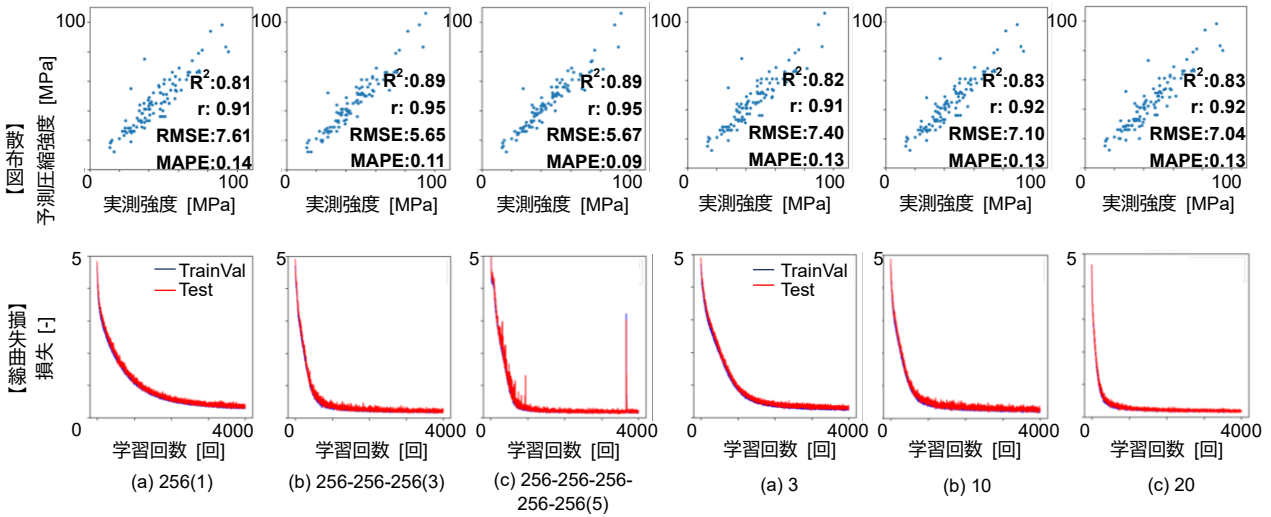


図-8 中間層の数による解析精度の違い

図-9 バッチ数の変化による解析精度の違い

表-4 実際の強度と予測強度

	No.1	No.2		No.3		No.4		No.5	No.6
材齢 [d]	3	7	28	7	28	7	28	7	7
実際の強度[MPa]	18.1	37.0	53.8	17.0	32.6	10.1	19.4	22.6	9.8
最も近い予測強度 [MPa]	32.0	40.0	54.0	17.0	33.0	9.0	20.0	24.0	13.0
(使用パラメータ)	(128(1))	(256-128-64(3))	(512-256(2))	(256-256-32(3))	(128(1))	(32-32(2))	(128-256(2))	(1024(1))	(64(1))

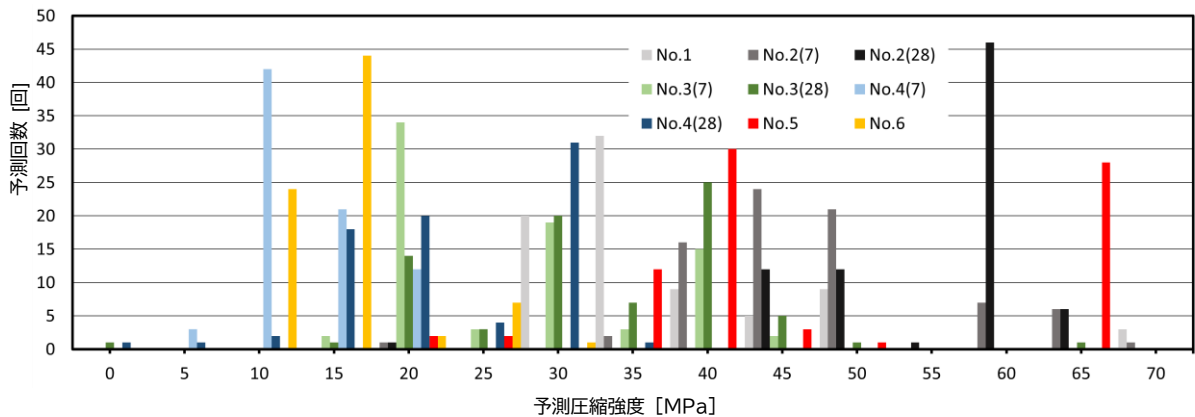


図-10 各試験体予測強度分布

する結果となった。一方でNo.2(28)では、予測強度の最頻値と実際の強度が一致せず示した。

図-10より、No.3からNo.6の混和材をセメントに置換して用いたコンクリート系について、No.3(7)ではNo.2(7)と同様に予測強度の最頻値が実際の強度と一致する結果となった。一方で、No.4及びNo.5ではNo.2(28)と同様に、実際の強度に対して予測強度の最頻値を約5 MPaから約10 MPa過大に示す結果となった。No.3(28)では、予測強度の最頻値は実際の強度に対して約25 MPa過大に示す結果となった。

以上の予測圧縮強度の算出傾向による結果から、作成したデータセットを用いて学習させたモデルには圧縮強度予測において十分ではない点が残し、以下の点についての学習が十分に行われていない可能性が考えられる。

- ・ 若材齢かつOPCを用いたコンクリートの圧縮強度
- ・ 材齢7日における高炉スラグ微粉末の効果
- ・ 材齢28日におけるフライアッシュおよび高炉スラグ微粉末の相互効果

これらを踏まえたデータセットの拡充などは今後の検討課題である。特に、高炉スラグ微粉末のみを用いて置換した場合についてはフライアッシュのみでの置換と比較してデータ数が少ない。そのため、フライアッシュ単体での置換のように様々な置換率でのデータ数を追加することが挙げられる。また、両者を用いて置換する場合は、置換率の範囲、データ数ともに限定的であるため、広い置換率でデータを追加することが挙げられる。

5. まとめ

効率的な材料開発のため、日本コンクリート工学会年次論文集から集められた配(調)合および圧縮強度試験結果を機械学習に用いることで、モデルを作成し、コンクリートの圧縮強度予測を行った。さらに、学習済みモデルに対して、実際に作製した試験体を用いてモデルの評価を行った。以下に、得られた知見を示す。

- 1) 作成したデータセット範囲内でのコンクリートの圧縮強度予測では、 $R^2 = 0.8$ 以上かつ $r = 0.9$ 以上となる結果が得られた。
- 2) パラメータの中間層やニューロンの数は、モデルの学習速度に影響を与えた。一方で、見かけ上はパラメータの変化のモデル精度への影響は限定的であった。
- 3) 実際に作製した試験体により得られた圧縮強度と作成モデルによる予測強度を比較したところ、最頻値が実際の強度と必ずしも一致する結果とはならなかった。具体的には、実際の強度に対して約5 MPaから約10 MPa過大に示す結果と約25 MPa過大に示す結果が確認された。

謝辞

本研究は、JSPS 科研費 JP21K18759 の助成を受けたものである。また、データセットの一部データは、株式会社タイハクから提供いただいた。ここに記し深謝する。

参考文献

- 1) The future of farming is one giant A/B test on all the crops in the world at once 参照: <https://www.protocol.com/the-future-of-farming-is-math> (閲覧日: 2023年12月25日)
- 2) K. B. Park, T. Noguchi, J. Plawsky: Modeling of hydration reactions using neural networks to predict the average properties of cement paste, *Cement and Concrete Research*, Vol. 35, No. 9, pp. 1676-1684, 2005
- 3) Z. Li, et al.: Machine learning in concrete science: applications, challenges, and best practices. *npj Computational Materials*, Vol. 8, 127, 2022
- 4) 脱炭素は素材から参照: <https://equity.jiji.com/commentaries/2022060600700g> (閲覧日: 2023年12月25日)
- 5) 鈴木南都, 小林紀行, 小林知大, 西脇智哉: CO₂ 排出量削減を実現するセメントコンクリートの開発と評価, *コンクリート工学年次論文集*, Vol. 45, No. 1, pp. 1054-1059, 2023
- 6) 日本建築学会: コンクリートの調合設計指針・同解説, 2015
- 7) 舟橋政司, 白根勇二, 荻野正貴, 中村英佑: 低炭素型のコンクリートの配合手法および硬化特性の検討, *コンクリート工学年次論文集*, Vol. 36, No. 1, pp. 232-237, 2014
- 8) Google Colaboratory 参照: <https://colab.google/> (閲覧日: 2023年12月25日)
- 9) M.F. Maherian, et al.: Machine learning-based compressive strength estimation in nano silica-modified concrete. *Construction and Building Materials*, Vol. 408, 133684, 2023
- 10) 江本 久雄, 場 那仰, 浅野 寛元, 長瀬 大和: AI 手法による打音検査の浮き判定の検定, *AI・データサイエンス集*, Vol. 1, No. J1, pp. 514-521, 2020
- 11) 山田一夫: 欧州のセメント・コンクリート事情, *コンクリート工学*, Vol. 49, No. 9, pp. 72-77, 2011. 9
- 12) M. Hosseinzadeh, M. Dehestani, A. Hosseinzadeh.: Prediction of mechanical properties of recycled aggregate fly ash concrete employing machine learning algorithms, *Journal of Building Engineering*, Vol. 76, 107006, 2023