

Fri. Jun 2, 2023

Room A

OS09 深層学習、機械学習と計算工学

[A-10] OS09 深層学習、機械学習と計算工学 (1)

座長:荻野 正雄(大同大学)

9:00 AM - 10:15 AM Room A (1F Conference Room 101)

[A-10-01] 機械学習によるサブボクセル構造を用いた温度場予測

*和田 義孝¹、築地 巧実¹ (1. 近畿大学)

9:00 AM - 9:15 AM

[A-10-02] 機械学習による都市内の風速推定精度の検討

*難波 拓人¹、道岡 武信¹ (1. 近畿大学)

9:15 AM - 9:30 AM

[A-10-03] CNNによるサロゲートモデルと重ね合わせの原理を用いた温度予測手法の基礎検討

*入来院 美代子¹、岩田 進裕¹ (1. パナソニック コネク
ト株式会社)

9:30 AM - 9:45 AM

[A-10-04] CNNを用いたマルチグリッド対応ネットワークのCFDへの適用検討

*岩田 進裕¹、稲垣 善久¹、入来院 美代子¹ (1. パナソ
ニックコネクト株式会社)

9:45 AM - 10:00 AM

[A-10-05] 支配方程式による制約を加えた機械学習

PINNに対する動的重み付け法

*出口 翔太¹、浅井 光輝¹ (1. 九州大学)

10:00 AM - 10:15 AM

OS09 深層学習、機械学習と計算工学

[A-11] OS09 深層学習、機械学習と計算工学 (2)

座長:三好 昭生(株式会社インサイト)

10:30 AM - 11:45 AM Room A (1F Conference Room 101)

[A-11-01] 有限要素解析および赤外線測定による応力分布に基づく転移学習を用いたCFRP単純形状内の欠陥3次元情報の予測

*児嶋 佑太¹、平山 健太¹、遠藤 克浩²、原田 祥久²、村松
真由¹ (1. 慶應義塾大学、2. 産業技術総合研究所)

10:30 AM - 10:45 AM

[A-11-02] Generating the human body structure of the corresponding anime character based on DiscoGAN

*劉 思涵¹、塩谷 隆二¹、中林 靖¹ (1. 東洋大学)

10:45 AM - 11:00 AM

[A-11-03] DPDシミュレーション用パラメータの非経験的算定の機械学習による効率化

*土居 英男¹、松岡 壮太¹、奥脇 弘次¹、畑田 峻¹、南
聡次朗¹、栖原 涼輔¹、望月 祐志^{1,2} (1. 立教大学、2.
東京大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[A-11-04] 物理現象の性質を導入した機械学習モデルによる輸送現象の学習

*堀江 正信^{1,2}、三目 直登³ (1. 株式会社R I C O S、2.
JSTさきがけ、3. 筑波大学)

11:15 AM - 11:30 AM

[A-11-05] 深層学習を用いた応力場予測に関するデータ拡張手法

*豊吉 巧也¹ (1. 愛知工科大学)

11:30 AM - 11:45 AM

OS09 深層学習、機械学習と計算工学

[A-12] OS09 深層学習、機械学習と計算工学 (3)

座長:和田 義孝(近畿大学)

1:15 PM - 2:45 PM Room A (1F Conference Room 101)

[A-12-01] (キーノート講演)熱力学法則に基づく深層学習による材料構成則の検討

*山下 拓三¹ (1. 防災科学技術研究所)

1:15 PM - 1:45 PM

[A-12-02] PINNsによる2次元静磁場問題解析の基礎的検討

*荻野 正雄¹ (1. 大同大学)

1:45 PM - 2:00 PM

[A-12-03] ナイーブベイズフィルタによるコンクリート表面画像のひび割れ抽出法

*芦田 拓海¹、車谷 麻緒¹ (1. 茨城大学)

2:00 PM - 2:15 PM

[A-12-04] 決定木ベースのマルチタスクラーニングを用いた複合材料の衝突損傷と残留圧縮強度予測

*長谷部 早紀¹、樋口 諒¹、横関 智弘¹、武田 真一² (1.
東京大学、2. 宇宙航空研究開発機構)

2:15 PM - 2:30 PM

[A-12-05] 機械学習による高強度・高延性を示す最適なDual Phase鋼材料組織の探索

*鈴木 美智¹、志澤 一之¹、村松 真由¹ (1. 慶應義塾大
学)

2:30 PM - 2:45 PM

OS09 深層学習、機械学習と計算工学

[A-13] OS09 深層学習、機械学習と計算工学 (4)

座長:中林 靖(東洋大学)

3:00 PM - 4:30 PM Room A (1F Conference Room 101)

[A-13-01] (キーノート講演)ニューラルネットワークによるフィレット部応力予測手法のトランスミッションケースへの適用検討

*久野 一城¹、山口 太一²、奥田 洋司² (1. 株式会社アイシン・デジタルエンジニアリング、2. 東京大学)

3:00 PM - 3:30 PM

[A-13-02] 2次元ブロック後流を対象とした PINNsによる内挿手法の検討

*辻 将吉¹、道岡 武信¹ (1. 近畿大学)

3:30 PM - 3:45 PM

[A-13-03] サブグリッドスケール項の機械学習モデリング

*朝比 祐一¹、前山 伸也²、藤井 恵介³ (1. 日本原子力研究開発機構、2. 名古屋大学、3. Oak Ridge National Laboratory)

3:45 PM - 4:00 PM

[A-13-04] 航空写真を用いたセマンティックセグメンテーションによる土地利用分類モデルの構築

*羽物 裕人¹、大川 博史²、櫻山 和男¹ (1. 中央大学、2. 株式会社エイト日本技術開発)

4:00 PM - 4:15 PM

[A-13-05] 機械学習によるシミュレーションレス CAEを利用したロバスト設計手法の検討

*角 有司¹、飯山 洋一¹、佐藤 甫²、小池 晋太郎²、山下 貴志²、松澤 邦裕²、中川 貴文³ (1. 宇宙航空研究開発機構、2. アドバンスソフト株式会社、3. 京都大学)

4:15 PM - 4:30 PM

OS09 深層学習、機械学習と計算工学

[A-10] OS09 深層学習、機械学習と計算工学 (1)

座長:荻野 正雄(大同大学)

Fri. Jun 2, 2023 9:00 AM - 10:15 AM Room A (1F Conference Room 101)

[A-10-01] 機械学習によるサブボクセル構造を用いた温度場予測

*和田 義孝¹、築地 巧実¹ (1. 近畿大学)

9:00 AM - 9:15 AM

[A-10-02] 機械学習による都市内の風速推定精度の検討

*難波 拓人¹、道岡 武信¹ (1. 近畿大学)

9:15 AM - 9:30 AM

[A-10-03] CNNによるサロゲートモデルと重ね合わせの原理を用いた温度予測手法の基礎検討

*入来院 美代子¹、岩田 進裕¹ (1. パナソニック コネクト株式会社)

9:30 AM - 9:45 AM

[A-10-04] CNNを用いたマルチグリッド対応ネットワークのCFDへの適用検討

*岩田 進裕¹、稲垣 善久¹、入来院 美代子¹ (1. パナソニックコネクト株式会社)

9:45 AM - 10:00 AM

[A-10-05] 支配方程式による制約を加えた機械学習 PINN に対する動的重み付け法

*出口 翔大¹、浅井 光輝¹ (1. 九州大学)

10:00 AM - 10:15 AM

機械学習によるサブボクセル構造を用いた温度場予測

Prediction of thermal field using sub-voxel data structure by machine learning

和田義孝¹⁾, 築地巧実²⁾

Yoshitaka Wada and Takumi Tsukiji

1) 博(工) 近畿大学理工学部機械工学科 教授 (〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1, E-mail: wada@mech.kindai.ac.jp)

2) 近畿大学 総合理工学研究科 メカニックス系工学専攻 (〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1)

This study presents how to apply convolutional neural network to regression for engineering prediction using local sub-voxel data structure by input parameter design. Predictor to be constructed in this paper can predict temperature at a point using near field physical parameters and properties. The full field temperature distribution can be predicted through prediction at a point by the predictor. Results by 2D-CNN and 3D-CNN are compared and evaluated. 3D-CNN presents better results than 2D-CNN. The effectiveness of the proposed data structure and 3D-CNN is discussed.

Key Words : Convolutional neural network, input parameter design and local sub-voxel data structure

1. 緒言

機械学習を援用して評価困難であった現象に対して適用し成果を上げている[1]. 一方で, 設計目的でCAEの代替モデルとして解析時間を削減する試みが進められている. しかし, 物理現象を表すパラメータが分かっているにも関わらず, どのようなデータを準備してどのように学習させればよいか依然不明なままである. CAEで扱う対象は必ず偏微分方程式により表現される物理現象である. このことから, 予測対象となる場(温度, 変位など)はこの方程式に従っている. このことから, 1つの解析結果を直交格子で表現しこの微分方程式を代替するモデルを生成することで, 予測を成立させることも可能である[2]. 本研究では空間(物理量空間と材料物性などを表す材料物性空間)をボクセル化し, そのボクセルを直接量み込みニューラルネットワーク(Convolutional Neural Network, 以下CNN)により学習する手法を検討する.

本研究の対象は, ICチップを有する基板(基板の物性値を含む)として, 基板上の温度分布を予測対象とする.

2. 量み込みニューラルネットワーク

CNNは, ネオコグニトロンを原型とした機械学習手法の1つである. ネオコグニトロン[3]は, D. HubelとT. Wieselによる視野覚に関するHubelとWieselの階層仮説[4]に着想を得たネットワーク構成を持つ. 重要な点は, パターンを認識するためのモデルとして, 単純型細胞と複雑型細胞の組み合わせにより特定の位置にあるパターンと位置に依存しないパターンの両方を検知できる手法となっている. これらはネットワーク構造そのものにより特徴づけられていると考えられている. HubelとWieselの階層仮説では, 局所的なパターンをまず単純型細胞で検知し, その情報を統合することで位置に依存しないパターンの抽出が可能となっていると考える.

本研究ではこのパターンの認識に全結合ネットワーク

を組み合わせることによりCNNを回帰問題に適用する. 1つの解析結果に含まれる多数のパターンにより, 学習に必要な解析ケース数の激減が期待できる. また, 予測に特に必要と思われる温度勾配が高くなる高温部分近傍の学習データ数を増やすことや, サブボクセル自体は空間に依存しているため回転操作を受け付けるためデータ拡張手法も画像認識で培われた手法も適用可能である.

3. CNNのための入力データ設計

CNNではフィルタリングをおこない特徴量を学習する. 図-1に示すように, 基板平面を格子状に(M_{max}, N_{max})に分割し, その分割点で物理量の取得および評価を行う. 本研究では, 基板を(35,35)のサイズに分割した. サブボクセル3次元で構成されており, サイズは(N, M, O)である. 一般的に N, M は3~10程度を想定しており, 大きくなると学習に必要な時間が増加し, 1つの解析結果から抜き出せる学習データは減少する. O は物理空間ではなく, パラメータ数を表す. 図-2に本研究で設計した, 入力サブボクセルを示す. ($M=5, N=5$)の層は物理空間に分布する物理量を表すが, 3次元化する際の $O=7$ は, 温度分布, 中心温度との x 方向の差分量, 中心温度と y 方向の差分量, ICチップの発熱量等の諸量, 二階の x および y 方向の差分量, 最後の層は, 再び発熱量とそれらの基板内位置等の情報を含む. これらから, 階層仮説に従いCNNでパターンを認識させる.

既報[5]ではCNNのための入力データ拡張の考え方を示した. このように, 学習が適切に行われる入力配置を決定することをInput Parameter Design[6] (IPD)と呼ぶ. このIPDは任意性が高いが, 関連するパラメータが隣接するように配置するほうが特徴量との関係を見出しやすくなると期待できる. 本報では, これまで二次元的に配置していた入力パラメータを三次元的に配置し特徴量との関係性をより検出しやすくすることを促す. これら以外の組み合わせも当然期待できるが詳細についてはすでに報告[6]した.

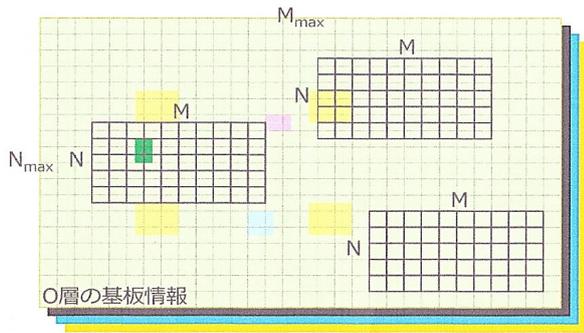


図-1 空間の分割とサブボクセル(MxN)の配置

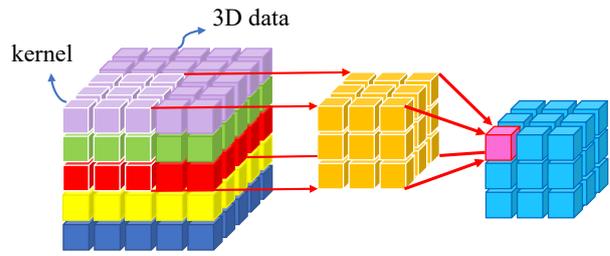


図-4 畳み込み処理とフィルタの関係: 3x3x3フィルタによる入力サブボクセルの畳み込みの様子

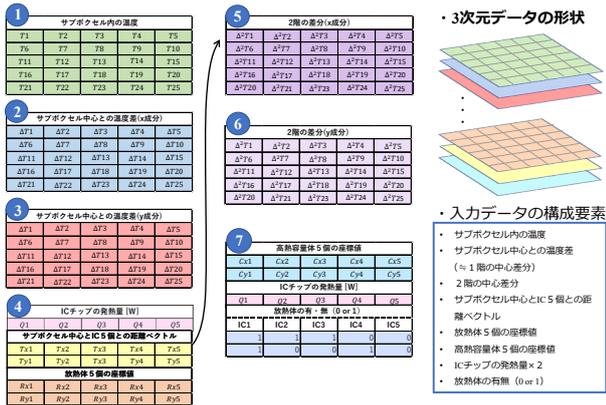
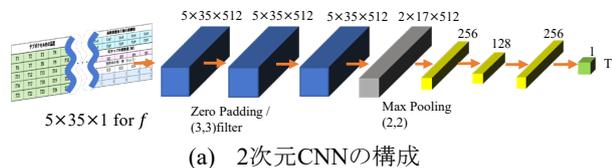


図-2 Input Parameter Design(IPD)による入力サブボクセル設計

4. ネットワーク構成

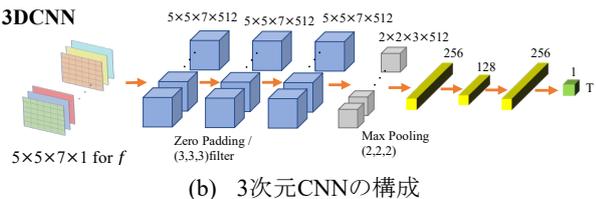
図-3には2次元CNNと3次元CNNの構成を示す。2次元CNNでは畳み込み層は3次元配列を構成するが、3次元CNNではフィルタ操作により生成される畳み込み層は4次元配列となる。4次元目の総数はカーネル数(フィルタの数)と一致する。3次元CNNの有利な点はテンソル量などを取り扱うことが可能で、近傍の要素が互いに関連する量であれば、それらの関係性を認識の性能を高める。3次元CNNでは図-4に示すような3次元フィルタによる畳み込み操作が必須と言える。

2DCNN



(a) 2次元CNNの構成

3DCNN



(b) 3次元CNNの構成

図-3 2次元CNNと3次元CNNのネットワーク構成: 3次元CNNでは畳み込み層が複数存在し次元としては4次元の畳み込み層を形成

5. 学習結果

図-5に2次元CNNと3次元CNNの損失の推移と図-6に双方の予測結果を示す。3次元CNNのほうがより早く収束傾向にあることがわかる。このため、確実に精度を求める場合は3次元CNNの利用を検討するに値する。図-6には、均等に抜き出した140か所の温度の予測結果を示す。温度を昇順にならべており横軸そのものはデータの個数を示す。この比較だけ見ると2次元CNNの予測結果も良好であるといえる。一方で、3次元CNNの予測結果は高温部でよりよい一致を見せており、設計上必要な高温部の評価には適切な予測結果を示している。

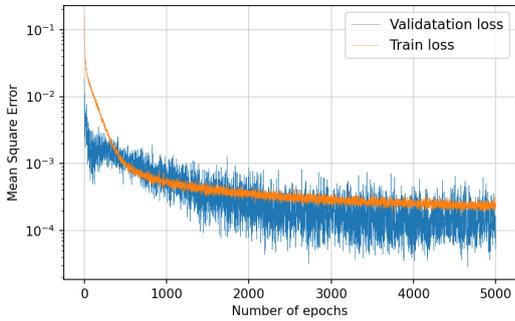
図-7は、予測対象全体の温度分布図を示す。双方ともに大きな誤差を含むような不自然さは見られず、要求精度によっては2次元CNNでも実用上適用できる可能性がある。一方で、高温部部分では、一部低めの予測値を示している。2つの結果をより明確にするために予測温度の絶対誤差の分布図を図-8に示す。3次元CNNによる予測は、明らかに誤差が少ないことが分かる。一方で、高温部を示すICチップの四隅に誤差が高くなる傾向がある。これまでの知見に従いデータ拡張などを施し対処する必要がある。

相対誤差の度数分布を図-9に示す。3次元CNNとサブボクセルを入力とするパターン認識と回帰予測は十分成立している。今回は未学習データを使ってはいるが、ICチップの配置は1ケースの固定である。今後は、ICチップの位置およびICチップの個数の変更なども通じてさらなる高精度化および汎用化の可能性について示す必要がある。

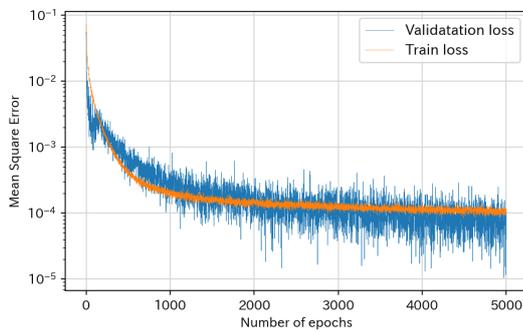
6. 結言

温度分布の予測を行うために、空間と物理パラメータを組み合わせたサブボクセル構造を入力とした3次元CNNによる温度場予測を試みた。2次元および3次元CNNでもサブボクセル構造は温度場の予測が可能であることを示した。さらに、3次元CNNがよりよい精度の予測を示しており、より多くのデータで学習することで汎化性能の向上が期待できる。今後、ICチップの位置およびICチップの個数の変更なども通じてより汎化性を高めた学習が必要である。一方で、サブボクセルの要素を決めるためのIPDの評価手法はいまだ決定的な手法がない。xAIなどの

よる因子の寄与度の精査、精密なサンプリングとデータ拡張を組み合わせるにより達成されることが期待できる。今後は、多くの事例により本手法の一般化を進める。

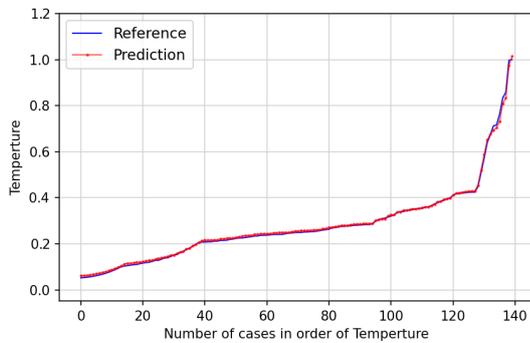


(a) 2次元CNNの損失の推移

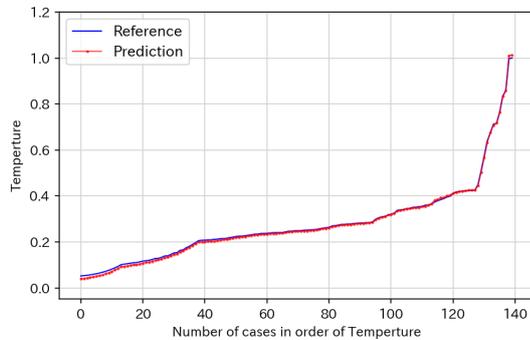


(b) 3次元CNNの損失の推移

図-5 学習と検証損失の推移

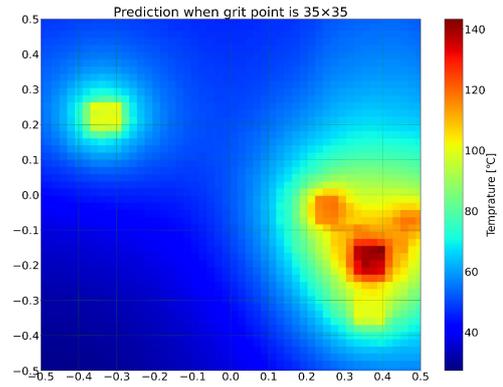


(a) 2次元CNNの温度予測

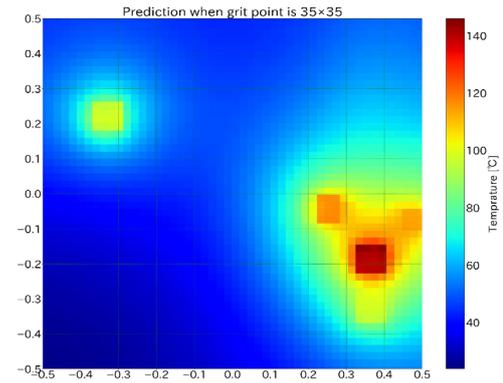


(b) 3次元CNNの温度予測

図-6 温度予測: 低温度部分で3次元CNNの予測値が過少評価しているが、全体的により予測を示す

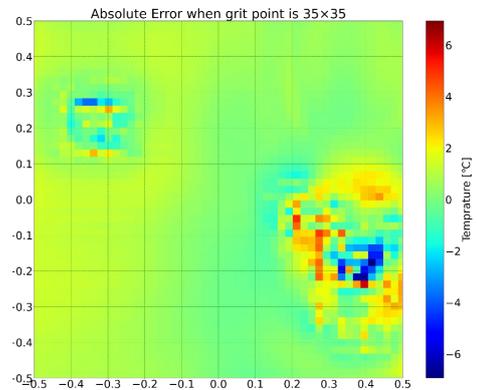


(a) 2次元CNNの温度場予測

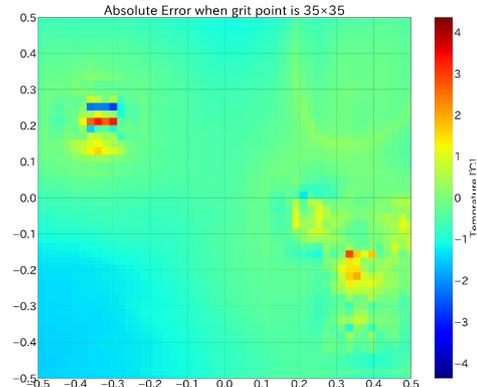


(b) 3次元CNNの温度場予測

図-7 ヒートマップによる予測結果の比較: 高温領域部での差が顕著にみられる



(a) 2次元CNNの正解と予測の差



(b) 3次元CNNの正解と予測の差

図-8 正解と予測の絶対誤差: 3次元CNNのほうがより誤差の絶対値が小さく誤差の大きな領域の分布も小さい

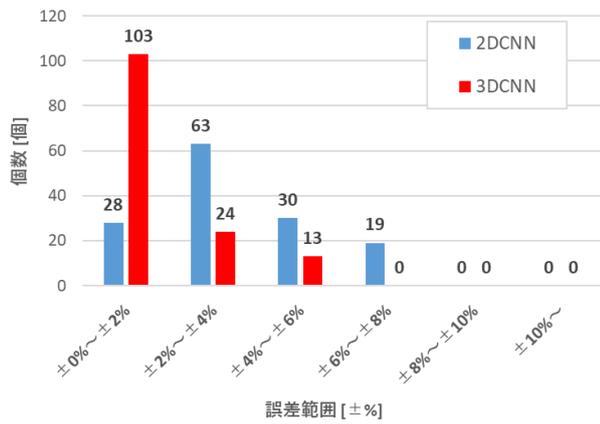


図-8 相対誤差の度数分布による評価:3次元CNNの予測精度が高く、2次元CNNにおいて大きな予測誤差を生じることはない

参考文献

- [1] 和田義孝, 深層学習によるき裂進展評価〜計算力学サロゲートモデルの構築〜, 保全学, Vol.18-2, 2019, 11-15.
- [2] E. Kaiser, et al, Sparse identification of nonlinear dynamics for model predictive control in the low-data limit, Vol.474, Issue 2219, Proc. of the Royal Society A, 2018.
- [3] 福島邦彦, ネオコグニトロン: Deep Convolutional Neural Network, 知能と情報/27 巻 (2015) 4 号, 115-125
- [4] D. H. Hubel, T. N. Wiesel, Receptive fields, binocular interaction and functional architecture in the cat's visual cortex, J. Physiology, Vol. 106, No.1, 1962, 106-154
- [5] 和田義孝, 設計問題適用を考慮した回帰モデル生成のためのデータ拡張, 第25回計算工学会講演予稿集, 4 pages, 2020
- [6] 和田, 山本, 畳み込みニューラルネットワークの物理現象回帰問題への適用, 第26回計算工学会講演予稿集, 4 pages, 2021

機械学習による 都市内の風速推定精度の検討

Accuracy of wind speed prediction in urban areas using machine learning

難波拓人¹⁾, 道岡武信²⁾

Takuto Namba and Takenobu Michioka

- 1) 近畿大学大学院 総合理工学研究科 (〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1, E-mail: 2333330336u@kindai.ac.jp)
2) 博(工) 近畿大学理工学部 教授 (〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1, E-mail: michioka@mech.kindai.ac.jp)

Wind estimation around buildings is required for building design in urban areas, but the prediction by wind tunnel experiments or numerical simulation requires a lot of time and effort. In this study, a machine learning is applied to investigate the reproducibility of wind speed distributions in urban areas from two input values: building planar shape and height. The machine learning model for the same wind direction as in the training successfully estimated strong wind areas and wind speeds, but the prediction accuracy of the model decreased for wind directions which is different from those in the training.

Key Words : Machine learning , Wind prediction, Urban area

1. はじめに

現在、多くの都市内では大規模な建物の建設が進んでいる。建物周辺では吹き降ろしや谷間風などの、いわゆる「ビル風」が発生しやすく、建物建設における大きな課題となっている。周辺の歩行者や自転車の安全性や快適性を守るためにはその事前予測による対策が必要不可欠であり、現在は風洞実験や数値シミュレーションによりその予測が行われている。しかし、これらの方法では多くの時間や労力を要することが問題である。風洞実験は、実際の風を模した気流中に縮小した建物模型を置き、建物模型周辺の風速を各種センサーで直接計測する方法である。したがって、この計測を行うためには建物模型の製作が必要であり、通常は数か月もの期間を要することになる。数値シミュレーションは、実際の建物をモデル化し、コンピュータを使用して周辺の風の流れを数値的に解く手法である。そのため、計算モデルの作成やメッシュ生成など一連の操作には高度なスキルが必要である。数値シミュレーションは大規模な模型などの製作は必要なく、一般的には風洞実験より短時間での実施が可能であるものの、汎用の計算機を用いた場合は数週間もの計算時間を要することもある。したがって、上記のような従来の方法では建物形状や配置の変更に合わせた風速の逐次評価は容易ではない¹⁾。

中村ら¹⁾はAI技術を用いて市街地の平面形状、建物高さ、風向の2成分の計4画像を入力値として、全層畳み込みニューラルネットワークにより、都市内の風速3成分を予測する手法を提案した。市街地を対象とした検討では、数値シミュレーションから得られる風速分布を概ね再現できていることがわかったものの、特定の風向に

おいては風速誤差が大きい場合もあり、学習方法や機械学習モデルを改良することにより更なる精度向上が期待できる。

そこで、本研究では中村ら¹⁾の機械学習モデルとは違う畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network, CNN) をベースとしたモデルを適用し、都市内の平面形状と建物高さのみの2つの入力値から建物周りの風速分布の再現性を検討する。

2. 風速分布推定手法

中村ら¹⁾は全層畳み込みニューラルネットワークが適用されているが、本研究では、CNNを用いて風速分布予測を行う。図-1にその概要を示す。CNNモデルへの入力として3D建物形状から生成した平面形状と建物高さのデータを使用し、建物周りの風速を出力する。入力データから建物周りの風速分布を推定するためには、CNNモデルの学習が必要である。そこで、入力データとその正解値であるCFDデータをペアにして学習させることで、CNNモデルがその間に含まれている規則性を学習する。した

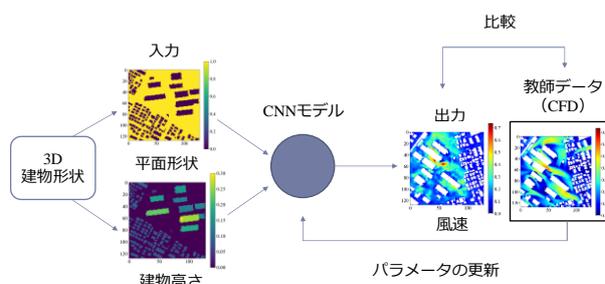


図-1 風速分布予測の概要

がって、新たな都市内の風速予測を行う場合、ユーザーが入力すべきデータは平面形状と建物高さのみとなる。

3. 機械学習モデル

本研究では、Fukami et al.⁽²⁾が低解像度の渦度データを超高解像度化する手法として提案した CNN ベースの hybrid downsampled skip-connection/multi-scale (DSC/MS) model の一部、Downsampled skip connection を機械学習モデルとして使用する。CNN モデルは一般に畳み込み層により生成された多くの特徴量、すなわち「チャンネル」を処理する必要があるが、これらのチャンネルの重要性はそれぞれ異なり、重要なチャンネルの情報のみを利用して推定を行うことが望ましい。そこで、Hu et al.⁽³⁾が提案した Squeeze-and-Excitation(SE) block と呼ばれるアテンション機構をさらに導入する。モデルの概略図は図-2 のようになる。

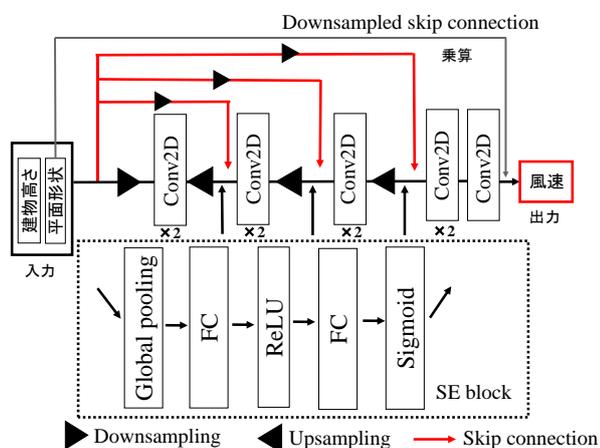


図-2 機械学習モデルの概略図

風速分布予測においては、出力結果は入力データの建物平面形状を必ず再現する必要がある。そこで、図-2中に示す通りモデルの最終出力データに平面形状の入力データをピクセルごとに乗算する層を付加する⁽¹⁾。先述のように平面形状のデータは建物部分を0、非建物部分を1としているため、この層の付加により出力結果においても入力と同じ建物部分のピクセルが0として必ず再現される。

4. データ作成

学習および評価には実在都市（狛江地区：都市 A）を対象とした Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) のデータを使用する。各データは対象とする都市内の平面上の 128 m × 128 m の領域に相当する 128 × 128 の 2 次元データである。平面形状のデータは、建物部分を 0、非建物部分を 1 で表した 2 値データである。建物高さのデータは、非建物部分を 0、各建物部分を 0 より大きな値で建物

高さを表したデータであり 100 m で正規化して使用する。風速データは地上高さ 1.5 m における平面上でピクセルごとにスカラ風速を主流方向速度 u と主流直角方向 v を用いて

$$V = \sqrt{u^2 + v^2} \quad (1)$$

と定義したデータであり、機械学習用に 3 m/s で正規化して使用する。実在都市の 8 風向(ENE/ESE/NNE/NNW/SSE/SSW/WSW/WNW)の合計 5000 セットのデータを取得し、そのうちの 3500 セットを学習に使用する。

5. 結果と考察

実在都市のデータを使用し、図-3に学習とテストに同じ8風向、図-4に異なる8風向のデータを入力した場合の RANS の正解画像と CNN モデルによる推定画像の一例を示す。テストデータはそれぞれ 1500 セットであり、入力から風速分布の出力までの時間は両ケースとも十数秒であった。

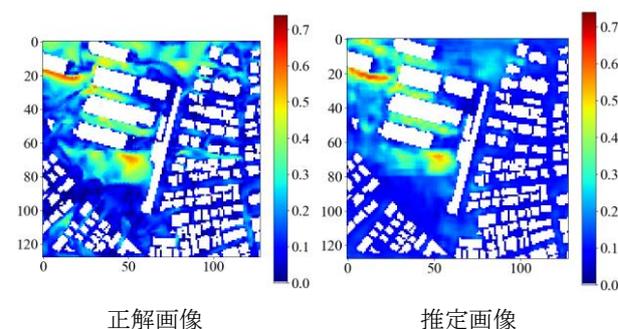


図-3 同一の8風向での予測結果例

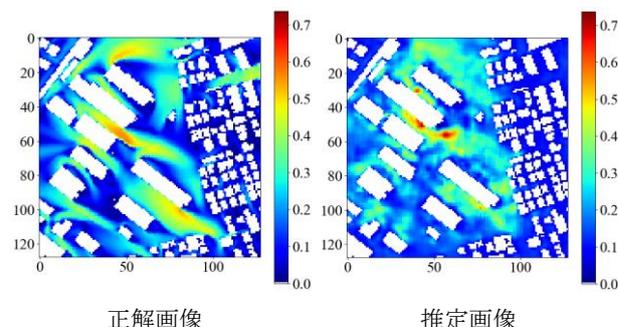


図-4 異なる8風向での予測結果例

推定値と RANS の正解値のそれぞれ建物部分を除いたピクセル値に対する二乗平均平方根誤差は 0.069, 0.103 であった。図-3 を見ると、推定画像が強風域や分布の強弱をうまく再現できているが、図-4 では高層の建物周辺の強風域の分布の仕方が異なっていたり、風速が過大評価されたりしている。したがって、このモデルは学習済みの建物配置や風速分布には適合できているが、未知の建物配置に対する推定に関してはやや精度が低下する。汎化性能のさらなる向上のためにモデルの改良や学習データのバリエーションを増加させるなどの対策が必要であると考えられる。それでも、大局的には風速の分布を捉えら

れており、短時間で都市内の風速が予測できる可能性がある。

6. 結言

機械学習を用いて実在都市内の建物高さと平面形状の2つの入力値から風速分布の予測を行った。その結果、都市内の風速分布を短時間で予測できる可能性があることが明らかになった。学習と同じ風向のデータを入力すると強風域や分布の強弱がうまく推定されるが、学習と異なる風向のデータを入力すると予測精度が低下するため、新たなモデルや入力データの検討によりさらなる予測精度の向上が期待される。

謝辞: 本研究の一部は科研費(22K04440)の助成を受けたものである。ここに謝意を表す。

参考文献

- [1] 中村良平, 吉川優: 人工知能(AI)を用いた市街地風環境予測技術の開発, 大成建設技術センター報, Vol.52, pp.42-1 - 42-8, 2019
- [2] Fukami et al, Super-resolution reconstruction of turbulent flows with machine learning, Journal of Fluid Mechanics, Volume 870, pp. 106 - 120, 2019
- [3] Hu J. et al, Squeeze-and-excitation networks, 2018 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, pp. 7132-7141, 2018
- [4] Yasuda Y. et al, Super-resolution of near-surface temperature utilizing physical quantities for real-time prediction of urban micrometeorology, building and Environment, Vol.209, 108597, 2022
- [5] 道岡武信 ほか: 機械学習による複雑地形上の地上風予測, 計算工学講演会論文集, 計算工学会, Vol.27, 2022

CNNによるサロゲートモデルと重ね合わせの原理を用いた温度予測手法の基礎検討

Basic study of temperature prediction method using CNN-based surrogate model and superposition principle.

入来院美代子, 岩田進裕
Miyoko Irikiin, Yukihiko Iwata

パナソニック コネクト株式会社 技術研究開発本部 先進技術研究所

(〒570-8501 大阪府守口市八雲中町3丁目1番1号, E-mail: irikiin.miyoko@jp.panasonic.com)

CNN-based surrogate model (deep learning) is under development to speed up CFD calculations. In order to use the surrogate model for design development, it is necessary to improve the generalizability of the surrogate model. We have exploited the principle of superposition as one of the solutions to this problem. For the multiple heating elements that make up the model, their temperature distributions are predicted individually. We have devised a method to predict the temperature of the entire model by merging the temperature distributions of multiple heating elements in the model. Radiation and convection phenomena, for which the superposition principle does not hold, are also considered.

Key Words: CFD, Deep Learning, CNN, superposition principle

1. 背景および目的

製品開発の熱設計において、CFDによる実機開発前の事前検討は不可欠な開発設計プロセスとなっている。また、シミュレーターおよびハードウェアの進化によって詳細な構造を再現する大規模モデルの評価も可能となっているため、益々広く活用されている。

しかしながら、筆者らが対象としているモデルでは、数時間から十数時間の計算時間を要し、設計変更に対応するため、計算の高速化が求められている。

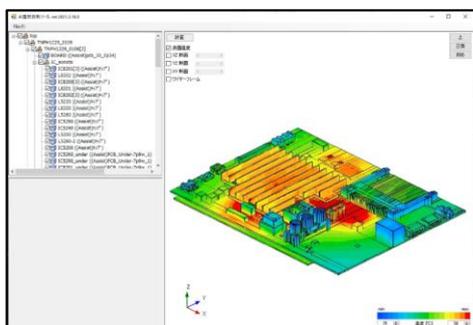


図-1 AI 熱設計ツール

この課題に対して、数年前からディープラーニング (CNN) による計算高速化に取り組んでいる。CFDの入力情報 (構造、物性値、発熱量など) の空間分布を画像情報として表現し、CNNベースで学習したネットワークを用いて、温度分布を予測するサロゲートモデルを開発し、

独自開発のAI熱設計ツールに実装することで製品開発への適用が進みつつある。

図-1は、開発したAI熱設計ツールである。従来、基板の熱設計を対象としたCFDで、十数分かかっていた計算が本ツールを利用することで1秒以内に計算ができるため、開発設計における大幅な効率向上が期待できる。

しかしながら、ツールに組み込むサロゲートモデルを開発していく上で汎化性に課題があることが分かった。ある商品のA基板の温度予測をターゲットとして、サロゲートモデルを開発した。このサロゲートモデルの学習データはA基板をベースとして、放熱板の形状や発熱体の位置、発熱量等可能な限りランダムで作成した。ただし、全てを網羅することは不可能であるため、設計上位置が固定されている部品や発熱量が小さく熱設計に大きな影響を与えないと考えられる部品は位置を固定にしている。このサロゲートモデルはA基板の設計に利用するには十分な精度であるが、同じ商品のB基板を予測したところ予測精度は良くなかった。B基板についてもA基板と同様に学習データを作成し学習することで、A基板と同精度のサロゲートモデルを開発できると考えられるが、そのように一品一様でサロゲートモデルを開発するやり方では、予測したい基板や機種が変わるごとにサロゲートモデルを開発しなければならない、工数がかかるため商品開発への適用は困難である。

画像認識の分野では、既存の学習済みサロゲートモデルのデータはそのまま新たに追加したサロゲートモデルのみを学習する転移学習や学習済みサロゲートモデルの一部と追加したサロゲートモデルの一部を活用し微調整を行うファインチューニングの手法を活用して、高品質なデータが大量にある領域の知識を転移し、少ないデ

ータ数で精度の高いサロゲートモデルを作成することができる。これらの方法を参考にしたが、汎化性の高いサロゲートモデルを作成することは困難であった。

そこで筆者らは、重ね合わせの原理を利用して、モデルを構成する複数の発熱体について、その温度分布を個別に予測し、これらを融合してモデル全体の温度を予測する手法を考案したので報告する。

なお、CNN ベースのネットワークによって計算を高速化する試みとしては、西田らによる CNN と領域分割手法を融合したマルチ解析手法[1]、鈴木らによる CNN を前処理として利用したボアソソルバーの高速化手法[2]、中村らによるオートエンコーダ型 CNN のチャンネル乱流現象への適用[3]が報告されているが、本研究が対象としている温度予測への CNN ベースのネットワークの適用とは異なる。

2. 理論

2.1 CFD モデル

本報告における計算対象を図-2 に示す。回路基板を単純化したモデルで基材と発熱体から構成されている。

発熱体は1個以上(図-2は発熱体10個)であり、回路基板は2種類の基材からなる。

サイズは、回路基板は縦160mm・横160mm・高さ1mm、発熱体は縦10mm・横10mm・高さ1mmである。物性値は、回路基板は基材A(熱伝導率36W/m・K)、基材B(4W/m・K)の2種類、発熱体は熱伝導率36W/m・Kである。発熱量は、発熱体1個当たり0.5~3.0Wである。また、グリッド数は、面内は64×64、回路基板厚み方向は1である。

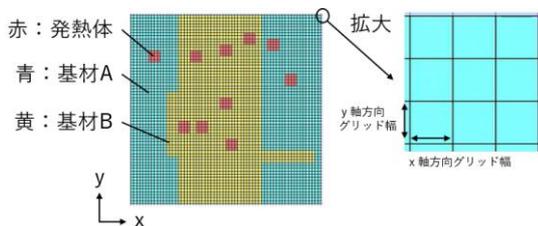


図-2 CFD モデル

2.2 CNN 概要

今回開発したサロゲートモデルは CNN ネットワークのひとつである U-Net をベースとしている。

U-Net は、Olaf らによって生物医学のために開発された Semantic Segmentation 手法で、MICCAI (Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention) 2015 で発表されている。

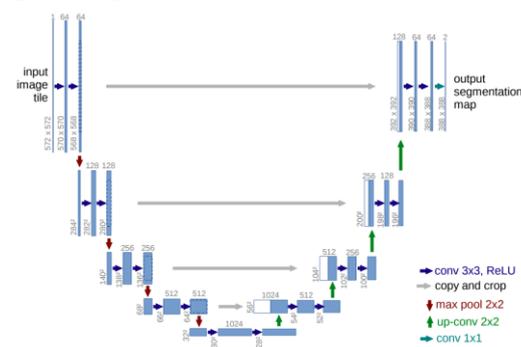


図-3 U-Net (参考文献[5]引用)

図-3は、U-Netのネットワーク図で、エンコーダとデコ

ーダからなるモデルである。エンコーダは入力された画像を何度か畳み込み、画像の特徴を抽出し、デコーダはエンコーダによって抽出された特徴から、逆畳み込みという畳み込みと逆の処理をおこなうことで、入力画像と同じサイズの画像を出力する。逆畳み込みで特徴量マップを拡大するためのアップサンプリングでは、物体の位置情報をとらえることが難しいため、U-Netでは、各層において、エンコーダの特徴量マップをデコーダの特徴量マップと結合することでこの問題を解決している。

U-Netの最大のポイントは、このエンコーダの特徴量マップとデコーダの特徴量マップを結合するところで、これはスキップ接続といわれ、このオペレーションによってピクセル単位での高精度な分類が可能となっている。

このU-Netをベースとして、構造情報(発熱量、面内および厚み方向の熱伝導率、輻射率、XYZ各軸方向のグリッド幅)を入力として、温度分布を予測するサロゲートモデルを開発している。

2.3 提案手法

本報告では、重ね合わせの原理を用いて、発熱体1個ずつの温度の予測を足し合わせる方法を提案する。理由としては、重ね合わせの原理によって汎化性向上が期待できることと、商品開発においては、高密度設計・防塵設計のため熱伝導現象が支配的であることである。

熱移動は熱伝導、輻射、対流の3形態に分けられる。熱伝導については重ね合わせの原理を用い、輻射と対流については温度補正のサロゲートモデルを用いて温度予測する。

重ね合わせの原理は、線形的な系一般に成り立つ特徴的な原理であり、式(1)のように二つ以上の入力と同時に与えられたときに系が返す応答がそれぞれの入力単独に加えられた場合に返される応答の総和となることをいう。この原理は線形微分方程式に適用できる。

$$F(x_1+x_2) = F(x_1) + F(x_2) \quad (1)$$

熱伝導は、熱伝導方程式(式(2))で示される。熱伝導に関する熱伝導方程式は温度に対する線形微分方程式であるため、重ね合わせの原理が成立し、温度の重ね合わせが可能である。

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{\dot{q}}{\rho c} \quad (2)$$

T: 温度, τ : 時間, α , 熱伝導率, xyz: 座標

ρ : 密度, c : 比熱, \dot{q} : 単位体積当たりの発熱量

一方、対流と輻射に対しては重ね合わせの原理が成り立たない。理由は以下に述べる。

対流はナビエ=ストークスの方程式(式(3))で示される。この式は、流れに対する2階非線形偏微分方程式であるため、流れに対する重ね合わせはできない。したがって、流れによって移動する熱(温度)も重ね合わせはできない。

$$\rho \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right\} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{f} \quad (3)$$

ρ : 流体の密度, μ : 粘性係数

$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$: 流速, $p(\mathbf{r}, t)$: 流体にかかる圧力

\mathbf{f} : 単位体積当たりに流体にかかる外力

輻射はシュテファン=ボルツマンの法則(式(4))で示さ

れる. この式から, 輻射エネルギーは絶対温度の 4 乗に比例するため, 温度に対する重ね合わせはできない.

$$E = \epsilon \sigma T^4 \quad (4)$$

E: 輻射エネルギー ϵ : 輻射率 (0~1)
 σ : 5.67×10^{-8} (ステファン・ボルツマン定数)
 T: 絶対温度 (物体表面の温度)

学習データは全て CFD で作成し, 正解温度は CFD の計算結果とする.

提案手法については, 学習フェーズと推論フェーズに分けて説明する. 最初に学習フェーズについて図-4 のフローに沿って詳しく説明する.

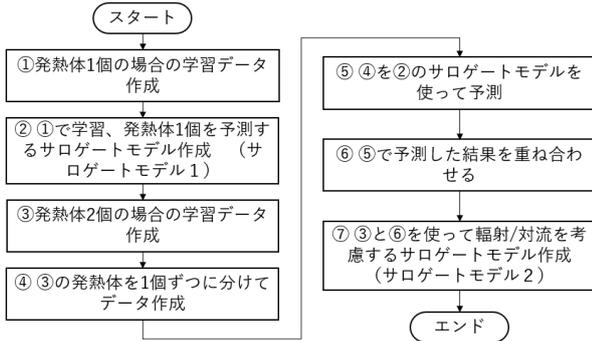


図-4 学習フェーズのフロー

① 回路基板に発熱体 1 個だけが搭載された学習データを作成する. 学習データの一例を図-5 に示す. サイズ等は図-2 と同じである. 発熱体の位置, 発熱量, 基板の基材の異なる部分のサイズや位置はランダムで振る.

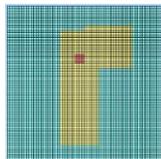


図-5 学習データの一例

② ①の学習データを使って学習をする. 入力情報は発熱量, 熱伝導率 (面内方向/厚み方向), 輻射率, xyz 各軸方向のグリッド幅の 7 レイヤーであり, 出力情報は温度分布である. この学習済みのネットワークをサロゲートモデル 1 とする. (図-6)

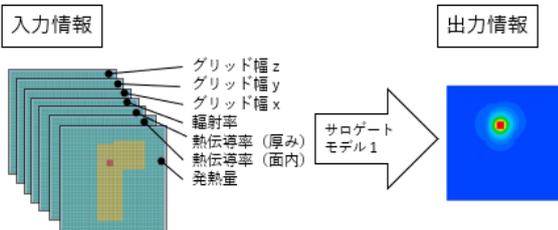


図-6 データ構造

図-7 に今回検討したネットワークの構造を示す 3DConvolution, MaxPooling, 3DconvolutionTranspose をベースにしたモデルで, 2 箇所 SkipConnection を使って情報を伝達している. また, ネットワークへの入力データは標準化を適用している.

3DConvolution, MaxPooling, 3DconvolutionTranspose をベースにしたモデルで, 2 箇所 SkipConnection を使って情報を伝達している. また, ネットワークへの入力データは標準化を適用している.

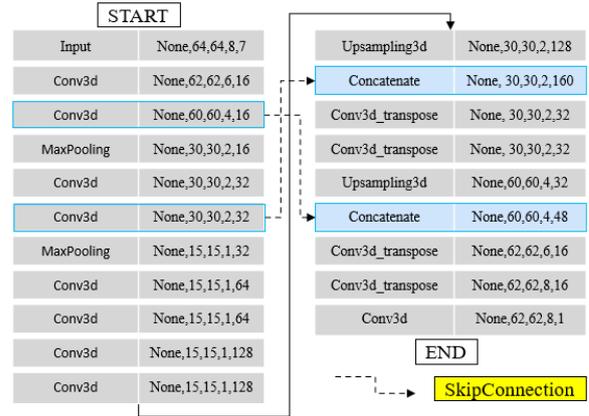


図 7 ネットワーク構造

③ 輻射と対流を考慮するためのサロゲートモデルを作るために, 学習データを作成する.

輻射と対流は, 任意の位置において, 発熱体 A だけが発熱したときの温度上昇と発熱体 B だけが発熱したときの温度上昇, 発熱体 C, 発熱体 D... を足し合わせることで温度を予測することはできない. つまり, 温度を予測するにあたって個々の発熱体を独立して考えることができず, 複数個の発熱体が同時に発熱した時の温度上昇による影響を考えなければならない. この影響を考慮するために最も少ない個数である発熱体 2 個で学習することとする. 発熱体サイズ等は図-2 と同じである. 発熱体の位置, 発熱量, 基板の基材の異なる部分のサイズや位置はランダムで振る.

④ ③の発熱体を 1 個ずつに分けたデータを作成する. (図-8)

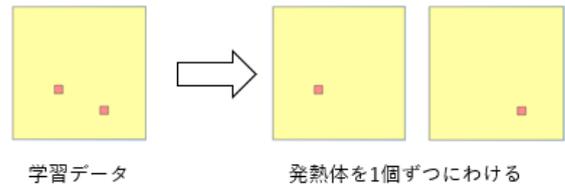


図-8 発熱体を 1 個ずつに分けたデータ

⑤ ④の発熱体を 1 個ずつに分けたデータをサロゲートモデル 1 で予測する. (図-9)

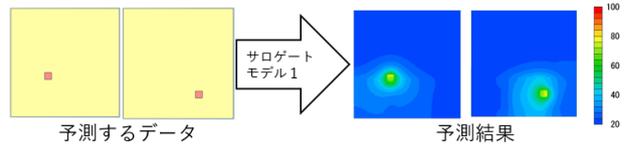


図-9 発熱体 1 個の予測結果

⑥ ⑤で予測した結果を同じ位置のグリッド毎に足し合わせる. この結果を重ね合わせ後の温度予測とする. (図-10)

⑦ 入力情報を⑥の重ね合わせで予測した温度の結果 (熱伝導 \circ , 輻射/対流 \times), 出力情報を③の CFD の計算結果 (熱伝導/輻射/対流 \circ) として学習する. これによって, 重ね合わせと CFD 結果の差分 (輻射/対流の差分) を学習

し、このネットワークをサロゲートモデル2とする。
(図-11)

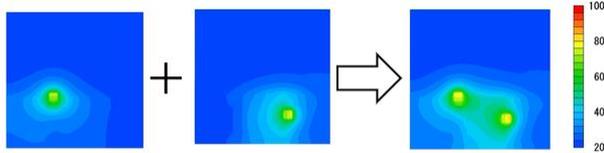


図-10 予測を重ね合わせた結果

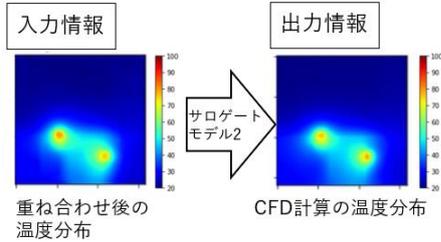


図-11 対流・輻射補正のサロゲートモデル

次に推論フェーズについて、図-12 のフローに沿って詳しく説明する。

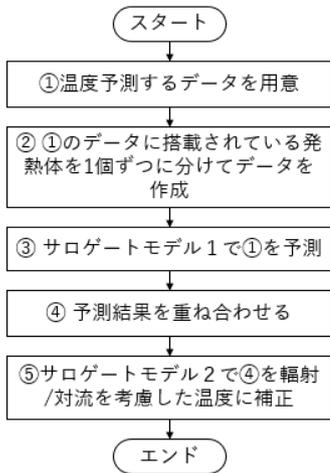


図-12 推論フェーズのフロー

- ① 温度予測するデータを用意する。
- ② ①の発熱体を1個ずつに分けたデータを作成する。
(図-13)

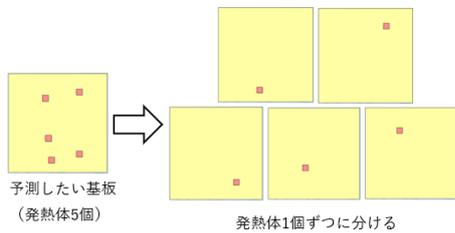


図-13 発熱体を1個ずつに分けたデータ

- ③ ①の発熱体1個ずつに分けたデータをサロゲートモデル1で予測する。(図-14)
- ④ ③の予測結果を同じグリッド毎に足し合わせる。
(図-15)
- ⑤ ④の重ね合わせの温度分布を入力にして、サロゲートモデル2を使って、輻射/対流を考慮した温度を予測する。
(図-16)

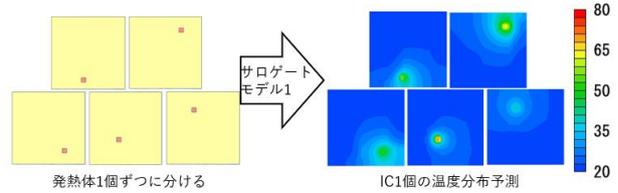


図-14 IC1個の予測結果

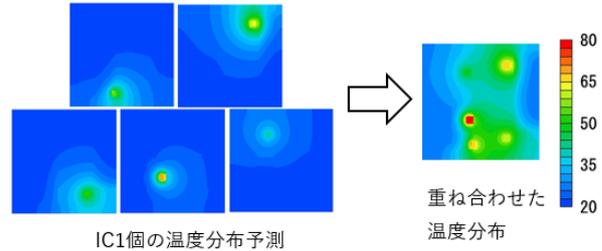


図-15 重ね合わせの結果

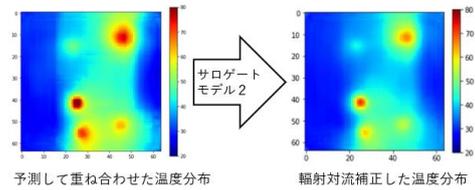


図-16 輻射/対流補正前後の温度分布

3. 結果および考察

発熱体10個搭載した基板を100データ(以下、データセットA)用意し、このデータの温度予測し、本手法の有効性を検討する。

まず、2.3 提案手法の学習フェーズで示すようにデータを300個作成し学習する。このネットワークをサロゲートモデル1とする。

サロゲートモデル1で回路基板に発熱体1個を搭載したデータ100個を予測した結果を図-17、図-18に示す。図-17は100データ全てにおいて、グリッド毎に正解温度と予測温度の誤差を算出し、温度帯域毎に平均誤差を示したグラフであり、図-18は任意のデータの基板面の温度分布を比較している。この結果からサロゲートモデル1は全温度帯域に置いて4%以内の予測誤差であり非常に精度が高いことが分かる。

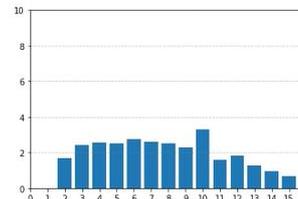


図-17 温度帯域毎の予測誤差(横:温度帯域/縦:誤差(%))

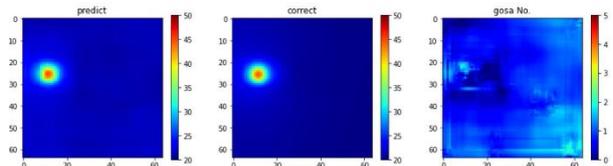


図-18 温度分布

データセット A をサロゲートモデル 1 で温度予測をした結果を図-19, 図-20 に示す. 図-19 は温度帯域毎に温度誤差平均を示したグラフ, 図-20 は任意のデータの基板面の温度分布を比較している. 発熱体 1 個のデータで学習させたサロゲートモデル 1 でデータセット A を予測すると誤差 10%以上となる. また温度分布の結果から発熱体の位置はとらえているものの温度の絶対値は全く合っていない. この結果から発熱体 1 個で作成したサロゲートモデル 1 は発熱体同士の影響を学習することが難しいと考えらえる.

次にサロゲートモデル 1 で予測した温度を重ね合わせた結果を示す. 図-21 は温度帯域毎の温度予測誤差, 図-22 は任意のデータの基板面の温度分布である. このように重ね合わせた温度の結果はサロゲートモデル 1 でダイレクトに予測した結果より良くなっている. 最後に輻射/対流補正用のサロゲートモデル 2 を使って, 図-21, 22 で示した重ね合わせの温度を補正する. 補正用のサロゲートモデル 2 は発熱体 2 個を搭載したデータを 100 個用意し学習した. 図-23 は補正後の温度帯域毎の予測誤差, 図-24 は補正後の任意のデータの基板面の温度分布を示す.

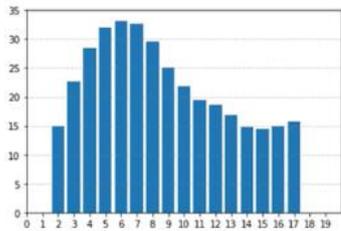


図-19 温度帯域毎の予測誤差(横:温度帯域/縦:誤差(%))

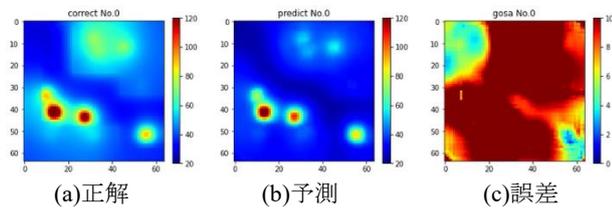


図-20 温度分布

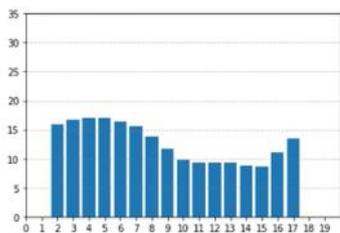


図-21 温度帯域毎の予測誤差(横:温度帯域/縦:誤差(%))

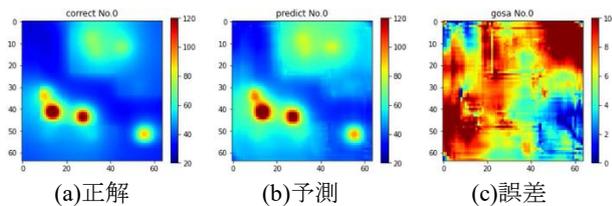


図-22 温度分布

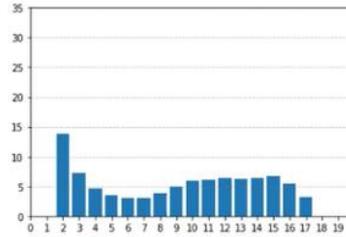


図-23 温度帯域毎の予測誤差(横:温度帯域/縦:誤差(%))

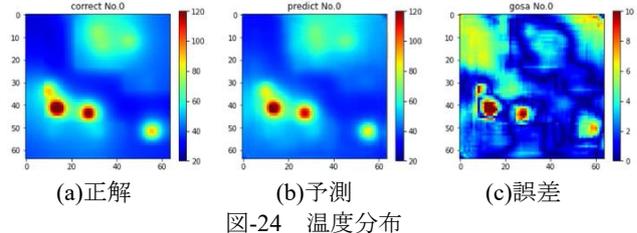


図-24 温度分布

輻射/対流を考慮して補正するとほぼ全温度帯域で精度 10%以内を達成できている. 本手法は, 発熱体の個数が増えたり減ったりしても対応することができ, 汎化性の高い手法と言える.

4. 結論

重ね合わせの原理を利用して, 回路基板を構成する複数の発熱体について, その温度分布を個別に予測し, これらを融合してモデル全体の温度を予測する方法を提案し, 簡易モデルにおいて, その有効性を示すことができた.

また, 重ね合わせの原理が成立しない輻射および対流現象に関しても少ないデータ数でサロゲートモデルを作成し, 単純に重ね合わせた結果に補正をすることで温度予測の精度を向上させた.

従来, 予測したい基板の学習データは, それらをベースとして部品配置や発熱量をランダムに決めていたため, その学習データに含まれていないパターンは精度よく予測できない課題があった. しかしながら, 提案手法である発熱体 1 個を搭載した場合のサロゲートモデルによる重ね合わせによる温度予測は, 様々な基板毎にサロゲートモデルを作る必要がなくなり, 汎化性の高い手法である可能性を示せた.

今後は発熱体以外の部品の搭載(放熱部品等)等複雑な構造へ対応可能な技術の開発を進める予定である.

謝辞

近畿大学 教授 和田義孝先生には, 共同研究を通して, 本研究の取組について有益な助言をいただき, 感謝の意を表す.

参考文献

- [1]西田猛哲, 大鈴木良郎, 轟章, 水谷義弘: ディープラーニングを用いたマルチスケール定常熱伝導解析, 数値力学講演会論文集, 2018
- [2]鈴木隆洸, 大道勇哉, 他: 畳み込みニューラルネットワークを用いた非圧縮CFDにおけるポアソンソルバーの高速化, 数値流体力学シンポジウム講演論文集, B05-1, 2018
- [3]中村太一, 深淵康二, 他: オートエンコーダを用いた

チャンネル乱流の機械学習, 数値流体力学シンポジウム
講演論文集, B10-1, 2019

[4] 鈴深見開, 深湯康二, 平 邦彦: チャンネル乱流における
機械学習3次元超解像解析, 日本機械学会流体工学部門
ニューズレター「流れ」, 2020年2月号, Art. 4 (2020).

[5] O.Ronneberger, P.Fischer, and T.Brox: U-net: Convolutional
networks for biomedical image segmentation, in International
Conference on Medical image computing and computer-
assisted intervention, Springer, pp. 234–241 (2015).

CNNを用いたマルチグリッド対応ネットワークのCFDへの適用検討

Fundamental Study of CNN-based Multi-grid Networks for CFD.

岩田進裕, 稲垣善久, 入来院美代子

Yukihiro Iwata, Yoshihisa Inagaki, and Miyoko Irikiin

パナソニックコネクト株式会社 技術研究開発本部 先進技術研究所 (〒570-8501 大阪府守口市八雲中町3丁目1番1号, E-mail: iwata.yukihiro@jp.panasonic.com)

In CFD for thermal design of electronic devices, a surrogate model using a CNN has been developed to speed up the calculation process. However, CNNs have difficulty in supporting multigrid because the input structure is fixed-length.

As a means to solve this problem, we propose a method to create a surrogate model for coarse grid regions (coarse network) and a surrogate model for fine grid regions (dense network) separately, and fuse them to predict the temperature of the entire model. The key point of this method is the method of information transfer between the coarse and dense networks. In this study, high accuracy is achieved by utilizing temperature information pre-calculated in the coarse network for prediction in the dense network.

Key Words : CFD, Multi-Grid, Deep Learning, CNN

1. 背景および目的

製品開発の熱設計において、CFDによる実機開発前の事前検討は不可欠な開発設計プロセスとなっている。また、シミュレーターおよびハードウェアの進化によって詳細な構造を再現する大規模モデルの評価も可能となっているため、益々広く活用されている。

しかしながら、筆者らが対象としているモデルでは、数時間から十数時間の計算時間を要し、設計変更に対応するため、計算の高速化が求められている。

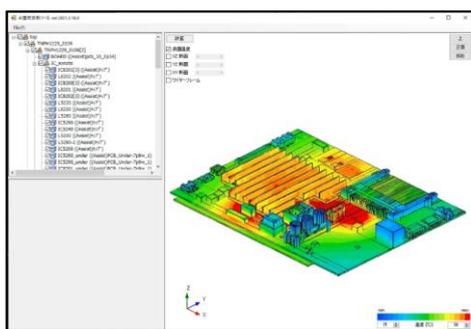


図-1 AI 熱設計ツール

この課題に対して、数年前からディープラーニング (CNN) による計算高速化に取り組んでいる。CFDの入力情報 (構造、物性値、発熱量など) の空間分布を画像情報として表現し、CNNベースの学習されたネットワークを使って温度分布を予測する技術で、独自開発のAI熱設計ツールに実装するなど商品適用が進みつつある。

図-1は、開発したAI熱設計ツールである。従来CFDで

十数分かかっていた回路基板の温度分布の計算が本ツールを利用することで1秒以内に計算ができるため、温度分布を確認しながら設計変更するというインタラクティブな開発設計プロセスが実現可能となる。

ところが、開発部門からは大規模モデルへの対応が要望されており、ネットワークの入力情報が固定長 (固定グリッド数) となるCNNベースのネットワークでは、大規模化に伴って、学習工数の増大、GPUメモリー不足などが課題となるため、最大数百万要素程度までは検討をしたが、これ以上の大規模化は難しいと判断している。

CFDにおいては、大規模モデルを扱うため、マルチグリッド手法を用いて要素数を低減する方法が使われている。この手法は多くのCFDソルバーに搭載されている機能であるが、筆者らが取り組んでいるCNNベースのサロゲートモデルでは入力情報が固定グリッド長となるため適用が困難であった。

筆者らは、CNNをマルチグリッドに対応させる方法として、粗い分割領域のネットワーク (以下、粗ネットワーク) と細かい分割領域のネットワーク (以下、密ネットワーク) を個別に作成し、これらを融合してモデル全体の温度を予測可能とする手法を考案した。本手法では粗ネットワークと密ネットワークの間での情報連携が開発のポイントとなるが、取組みの結果、粗ネットワークでの計算結果から抽出した細かい分割領域の温度情報を密ネットワークの入力情報に加えることで高精度な予測が可能になる結果が得られたので報告する。

なお、CNNベースのネットワークによって計算を高速化する試みとしては、西田らによるCNNと領域分割手法を融合したマルチ解析手法[1]、鈴木らによるCNNを前処理として利用したポアソンソルバーの高速化手法[2]、中村らによるオートエンコーダ型CNNのチャネル乱流現象への適用[3]が報告されているが、本研究が対象として

いる CNN の粗密の分割領域を含むマルチグリッドへの適用とは異なる。

2. 理論

2.1 CFD モデル

本研究における計算対象を図-2 に示す。左図が回路基板を単純化したモデルで基材と発熱体から構成されている。右図は、左図のモデルを CFD で計算するための計算グリッドで、粗いグリッド (以下、粗グリッド) 領域の中に細かいグリッド (以下、密グリッド) 領域を含む構成 (マルチグリッド) となっている。

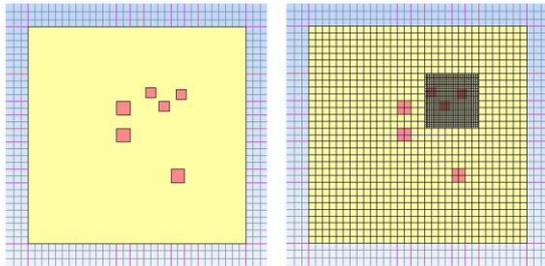


図-2 CFD モデル

発熱体は大きいサイズ 3 個、小さいサイズ 3 個の 2 種類で、大きいサイズの発熱体 (以下、発熱体大) は粗グリッド領域内、小さいサイズの発熱体 (以下、発熱体小) は密グリッド領域に配置される。

サイズは、回路基板は縦 160mm・横 160mm・高さ 1mm、発熱体大は縦 10mm・横 10mm・高さ 1mm、発熱体小は縦 7.5mm・横 7.5mm・高さ 1mm である。物性値は、回路基板は熱伝導率 36W/m・K、発熱体大および発熱体小は熱伝導率 36W/m・K である。発熱量は、発熱体大は 3W、発熱体小は 1W である。また、グリッド数は、粗グリッド、密グリッドともに面内は 32×32、面外 (回路基板厚み方向) は 1 である。

2.2 CNN 概要

今回の開発では CNN ネットワークのひとつである U-Net をベースとしたネットワークを開発している。

U-Net は、Olaf らによって生物医学のために開発された Semantic Segmentation 手法で、MICCAI (Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention) 2015 で発表されている。

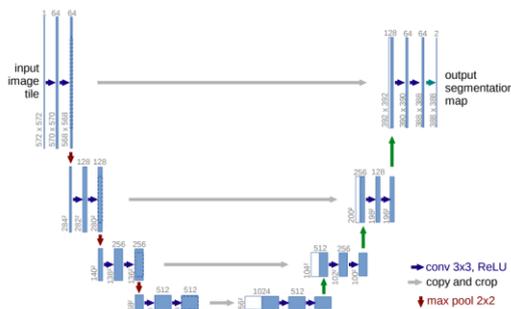


図-3 U-Net (参考文献[5]引用)

図-3 は、U-Net のネットワーク図で、エンコーダとデコーダからなるモデルである。エンコーダは入力された画像を何度か畳み込み、画像の特徴を抽出し、デコーダはエンコーダによって抽出された特徴から、逆畳み込みとい

う畳み込みと逆の処理をおこなうことで、入力画像と同じサイズの画像を出力する。逆畳み込みで特徴量マップを拡大するためのアップサンプリングでは、物体の位置情報をとらえることが難しいため、U-Net では、各層において、エンコーダの特徴量マップをデコーダの特徴量マップと結合することでこの問題を解決している。

U-Net の最大のポイントは、このエンコーダの特徴量マップとデコーダの特徴量マップを結合するところで、これはスキップ接続といわれ、このオペレーションによってピクセル単位での高精度な分類が可能となっている。

この U-Net をベースとして、構造情報 (発熱量、面内および面外の熱伝導率、輻射率、XYZ 各軸方向のグリッド幅など) を入力として、温度分布を予測するネットワークを開発している。

2.3 提案ネットワーク概要

図-4 はネットワーク概要 (一例) である。図中、マルチグリッド構造は、温度予測の対象モデルで粗グリッド領域内に密グリッド領域を含む構成となっている。

粗ネットワークについて説明する。粗グリッド構造はネットワークへの入力情報で、熱伝導率、発熱量、輻射率、グリッド幅などの情報を粗グリッドで離散化したものである。粗グリッド予測温度は、粗ネットワークを使って、粗グリッド構造から予測する温度である。

密ネットワークについて説明する。密グリッド構造はネットワークへの入力情報で、熱伝導率、発熱量、輻射率、グリッド幅などの情報を密グリッドで離散化したものである。密グリッド予測温度は、密ネットワークを使って、密グリッド構造と粗グリッド構造を密グリッド構造と同じグリッド数に整形したものから予測した温度である。

粗グリッド予測温度の密グリッド領域に密グリッド予測温度を組込むことで、マルチグリッド構造に対応したマルチグリッド予測温度が得られる。

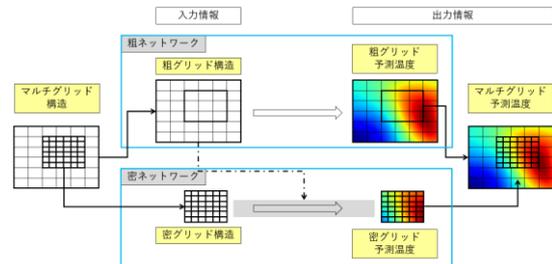


図-4 マルチグリッド CNN ネットワーク (一例)

2.4 提案ネットワーク詳細

図-5 に、今回検討したネットワークの構造を示す。

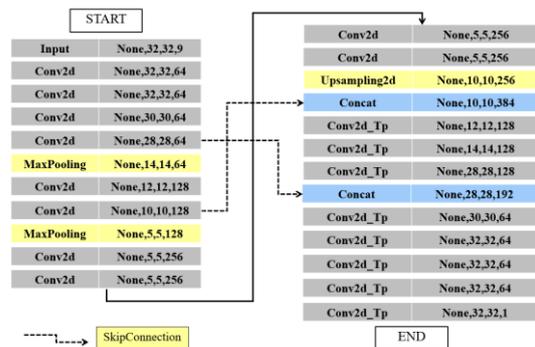


図-5 ネットワーク構造

2DConvolution, MaxPooling, 2DConvolutionTranspose を

ベースにしたモデルで、2カ所で SkipConnection を使って情報を伝達している。活性化関数は ReLU を使用している。また、ネットワークへの入力データは標準化を適用している。

2. 5 入力データ

図-6 に、今回検討した粗ネットワークの入力データ構造を示す。発熱量、面内および面外の熱伝導率、面外熱伝導率、輻射率、XYZ 各軸方向のグリッド幅に関する7レイヤーから構成される。また、各レイヤーは32×32グリッドとしている。

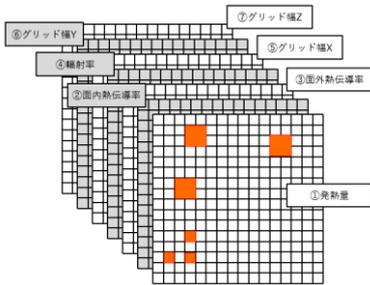


図-6 粗ネットワークの入力データ構造

図-7 に、今回検討した密ネットワークの入力データ構造を示す。粗ネットワークと同じ7レイヤーと相対位置レイヤー（粗グリッド領域における密グリッド領域の位置情報）の8レイヤーが基本データで、密ネットワークの構造（後述）に合わせて追加データ（粗グリッド構造、粗グリッド予測温度、密グリッド温度予測）を選択する。また、各レイヤーは32×32グリッドとしている。

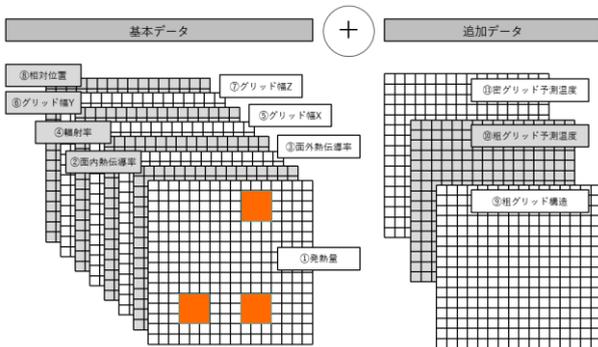


図-7 密ネットワークの入力データ構造

2. 6 学習データ

CFD では三次元で計算しているが、学習データは回路基板上面の温度分布を対象として二次元データとしている（回路基板の厚み方向に関するパラメータは変更しないため）。

発熱体大は粗グリッド領域内で他の発熱体大と干渉しないようにランダムに配置される。同じく発熱体小は密グリッド領域内で他の発熱体小と干渉しないようにランダムに配置される。密グリッド領域は回路基板上で発熱体大と干渉しないようにランダムに配置される。

3. 結果および考察

3. 1 粗ネットワーク

図-8 は、ネットワーク概要で、“2. 3 提案ネットワーク概要”で説明しているネットワークである。粗グリッド予測温度は、粗ネットワークを使って、粗グリッド構造から予測する温度である。



図-8 粗ネットワーク

学習データとしては、入力情報である粗グリッド構造および出力情報（正解）である粗グリッド温度予測をそれぞれ1,200個作成し、960個を学習用、240個を検証用として使っている。

3. 2 密ネットワーク

図-9～図-13 は、今回検討した密ネットワーク 1～5 である。

全ての密ネットワークで共通して利用する学習データについて説明する。

入力情報である密グリッド構造、出力情報（正解）である密グリッド温度予測をそれぞれ1,200個作成し、960個を学習用、240個を検証用として使っている。

ネットワークによって異なる入力情報について説明する。

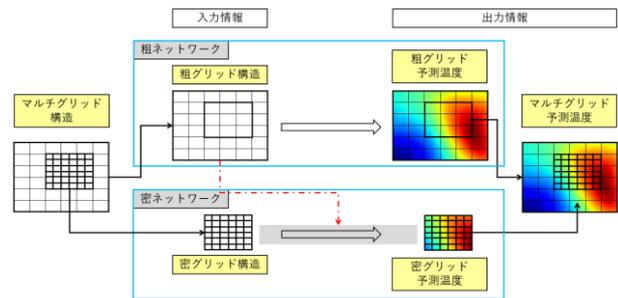


図-9 密ネットワーク 1

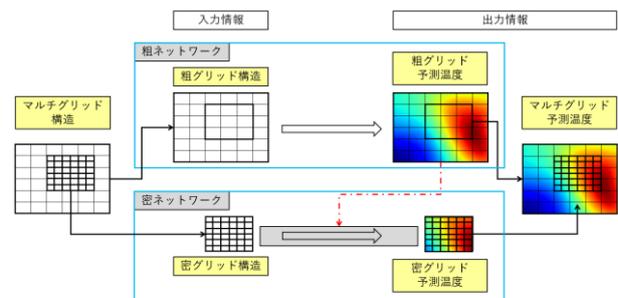


図-10 密ネットワーク 2

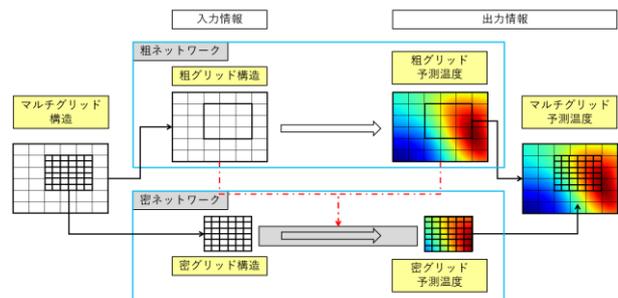


図-11 密ネットワーク 3

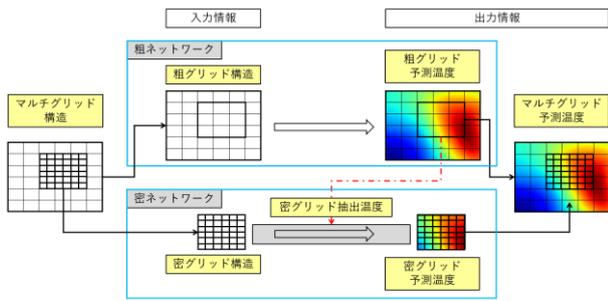


図-12 密ネットワーク 4

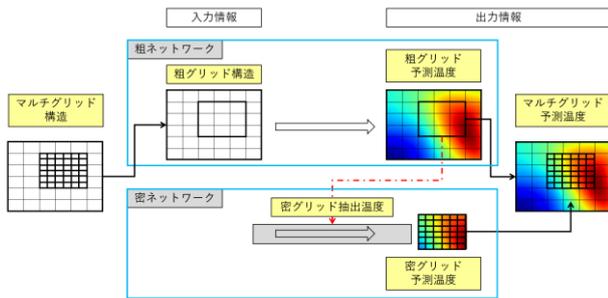


図-13 密ネットワーク 5

図-9の密ネットワーク1は、“2.3提案ネットワーク概要”で説明しているネットワークであるが、密グリッド予測温度は、密ネットワークを使って、密グリッド構造と粗グリッド構造を密グリッド構造と同じグリッド数に（Convolutionなどで）整形したものから予測した温度である。

図-10の密ネットワーク2は、密グリッド予測温度は、密ネットワークを使って、密グリッド構造と粗グリッド予測温度（粗ネットワークで事前に計算されたもの）を密グリッド構造と同じグリッド数に整形したものから予測する温度である。

図-11の密ネットワーク3は、密グリッド予測温度は、密ネットワークを使って、密グリッド構造と粗グリッド構造および粗グリッド予測温度（粗ネットワークで事前に計算されたもの）を密グリッド構造と同じグリッド数に整形したものから予測する温度である。

図-12の密ネットワーク4は、密グリッド予測温度は、密ネットワークを使って、密グリッド構造と粗グリッド予測温度（粗ネットワークで事前に計算されたもの）から密グリッド領域部分を抽出して密グリッド構造と同じグリッド数に整形したものから予測する温度である。

図-13の密ネットワーク5は、密グリッド予測温度は、密ネットワークを使って、粗グリッド予測温度（粗ネットワークで事前に計算されたもの）から密グリッド領域部分を抽出して密グリッド構造と同じグリッド数に整形したものから予測する温度である。

3.3 評価項目

評価項目内容について説明する。図-14～図-17は、学習曲線、温度誤差、温度分布、温度相関である。

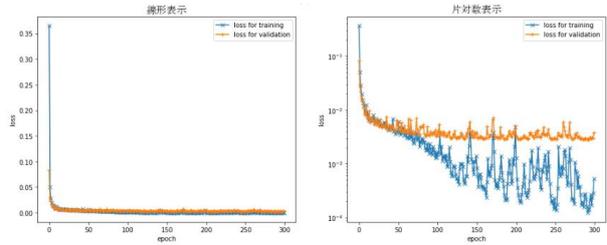


図-14 学習曲線

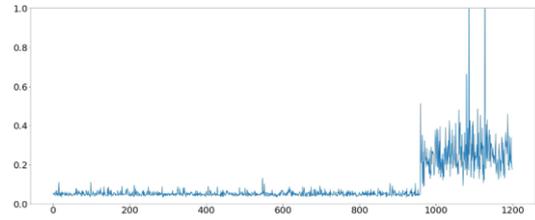
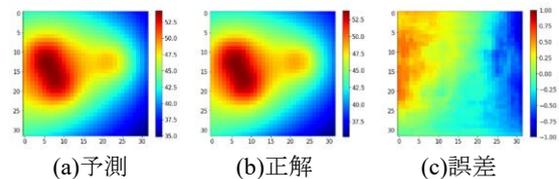


図-15 温度誤差（横:ケース/縦:平均誤差）



(a)予測 (b)正解 (c)誤差

図-16 温度分布

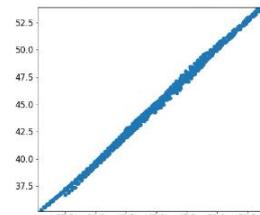


図-17 温度相関（横:正解/縦:予測）

3.4 予測精度

図18～図-20は、密ネットワーク1～5について、温度誤差（分布）、温度相関性、温度誤差（MAE）を比較したものである。

密ネットワーク1と2の比較では、粗グリッド構造を使うよりも、粗グリッド予測温度を使った方がMAEが半分程度となって高精度な結果が得られた。

密ネットワーク2と3の比較では、粗グリッド予測温度だけでなく、粗構造を加えてもMAEは同等で、情報追加による高精度化の効果は見られなかった。

密ネットワーク2,4の比較では、粗グリッド予測温度を使うよりも、密グリッド抽出温度（粗グリッド温度から密グリッド領域の温度を抽出したもの）を使った方が、MAEが75%程度低減され高精度な結果が得られた。

密ネットワーク5は、粗グリッド予測温度から密グリッド予測温度を予測するもので、直接的には構造情報を使わずに温度から温度を予測するのが特徴である。粗グリッド予測温度の計算段階で構造情報（粗グリッド構造）が含まれているが、詳細な構造情報（密グリッド構造）を含まないため、高精度な結果は得られなかった。

これらを総合すると、密グリッド1,2について、密グリッド予測温度により直接的な温度情報の方が構造情報よりも有効な情報であると理解している。

密グリッド2,4について、密グリッド予測温度の精度向上には、粗ネットワークで計算する粗グリッド予測温度が有効で、密グリッド領域の温度情報だけを抽出して

利用することでさらなる精度向上が可能となる。これは密グリッド領域に影響する近傍情報がより重要で、密グリッドから遠方の影響の少ない情報を与えることが精度向上の妨げになっている可能性がある。

上記の考察から、粗グリッド予測温度の密グリッド領域の温度情報の確からしさが重要であって、粗グリッドサイズによっては密グリッド領域の温度情報が大きな誤差を含む(発熱体が要素分割によってなくなるなど)可能性があるため、適切なグリッドサイズの選定もしくは密ネットワークで利用する温度情報は、粗グリッド予測温度における密グリッド領域外の発熱情報に起因するものだけを利用するなどの検討が必要と考えている。

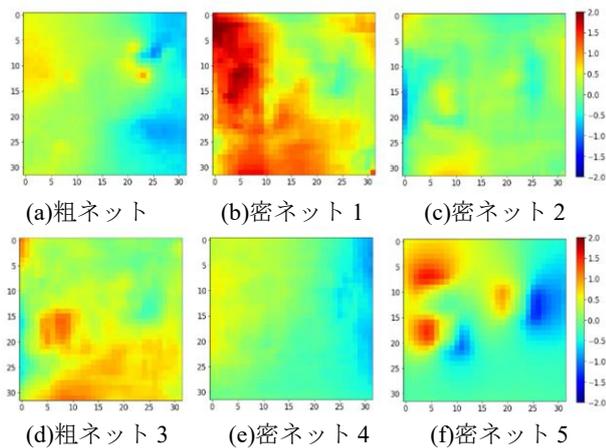


図-18 温度誤差 (分布)

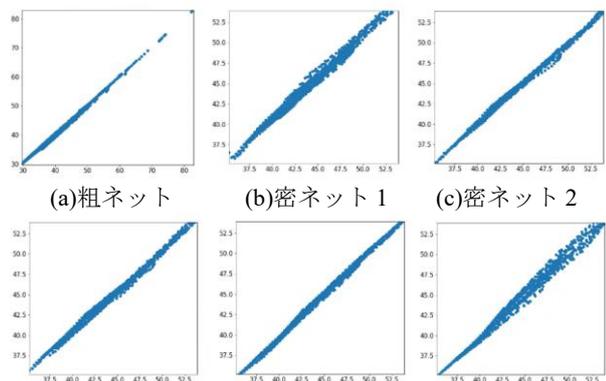


図-19 温度相関 (横:正解, 縦:予測)

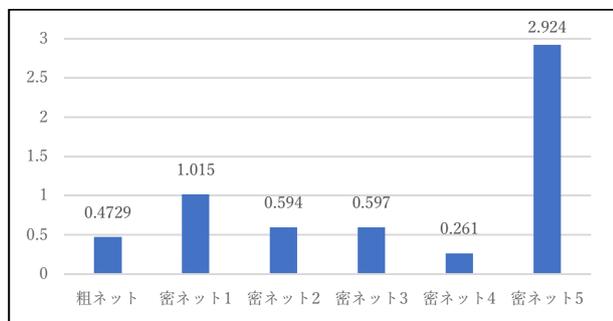


図-20 温度誤差 (MAE)

3. 5 学習データ数

粗ネットワークと最も予測精度が高かったネットワーク4を使って、学習データ数と Validation Loss の関係を検討した。図-21 は、データ数 (学習データ数 80%, 検証デー

タ数 20%) と Validation Loss の関係を示している。

学習データ数の減少に伴って Validation Loss は悪化するが、学習データ数が 100 個となっても、密ネットワーク 1 (Validation Loss=0.0382) よりも高精度な予測ができていたため、学習工数の削減が期待できる。

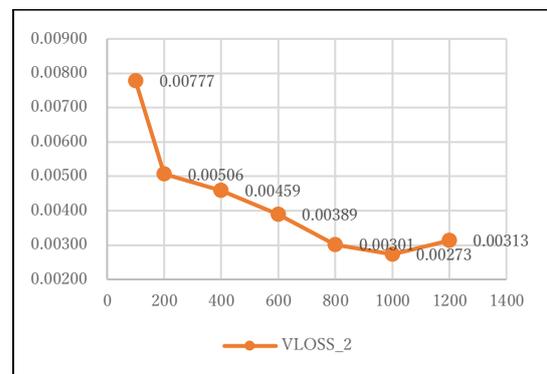


図-21 学習データ数 .vs. Validation Loss

4. 結論

CNN をマルチグリッドに対応させる方法として、粗いグリッド領域の温度を予測する粗ネットワークと、細かい領域の温度を予測する密ネットワークを個別に作成し、これらを融合してマルチグリッド領域の温度を予測する方法を提案し、簡易モデルにおいて、その有効性を示すことができた。

特に、粗ネットワークで予測した温度情報から細かい領域内の温度情報を抽出し、密ネットワークの入力情報に加えることで高精度な予測が可能となった。

今後は、複数段の再帰的な構造(密グリッド構造内にさらに細かい細密グリッドを含むなど)への適用、複雑な構造パターン(熱伝導率分布など)および様々なサイズとアスペクトのグリッド領域への対応、三次元構造への対応などについて技術開発を進める予定である。

また、学習データ生成の効率化の面からも有効な情報を見極める技術開発に取り組む予定である。

謝辞

近畿大学の和田教授には、共同研究を通して、本研究の進め方や枠組みについて有益な助言をいただきました。

参考文献

- [1]西田猛哲, 大鈴木良郎, 轟章, 水谷義弘: ディープラーニングを用いたマルチスケール定常熱伝導解析, 数値流体力学講演会論文集, 2018
- [2]鈴木隆洸, 大道勇哉, 他: 畳み込みニューラルネットワークを用いた非圧縮CFDにおけるポアソンソルバーの高速化, 数値流体力学シンポジウム講演論文集, B05-1, 2018
- [3]中村太一, 深瀬康二, 他: オートエンコーダを用いたチャンネル乱流の機械学習, 数値流体力学シンポジウム講演論文集, B10-1, 2019
- [4]鈴深見開, 深瀬康二, 平 邦彦: チャンネル乱流における機械学習3次元超解像解析, 日本機械学会流体工学部門ニューズレター「流れ」, 2020年2月号, Art. 4 (2020).

[5] O.Ronneberger, P.Fischer, and T.Brox:U-net:Convolutional networks for biomedical image segmentation, in International Conference on Medical image computing and computer-assisted intervention, Springer, pp. 234–241 (2015).

支配方程式による制約を加えた 機械学習PINNに対する動的重み付け法

Balancing Multiple Back-Propagated Gradients with Dynamic Weight Tuning
for Accurate Training and Inference of Physics-Informed Neural Network

出口翔大¹⁾, 浅井光輝²⁾
Shota Deguchi and Mitsuteru Asai

- 1) 九州大学大学院 工学府土木工学専攻 (〒819-0023 福岡県福岡市西区元岡744, E-mail: deguchi@doc.kyushu-u.ac.jp)
2) 九州大学 工学研究院社会基盤部門 (〒819-0023 福岡県福岡市西区元岡744, E-mail: asai@doc.kyushu-u.ac.jp)

Data-driven technology has been widely applied to various problems in science and engineering. In recent years, the community has focused on developing machine learning models that can integrate data and prior knowledge rather than purely data-driven approaches, and in particular, PINN (Physics-Informed Neural Network) has attracted much attention due to its applicability to both forward and inverse analysis. Since PINN trains based on both physical laws and data, the weights need to be chosen appropriately. In this study, we present a dynamic weight tuning method for PINN training. Numerical experiments show that the presented method enables accurate inverse analysis while keeping the additional computational cost within a reasonable range.

Key Words: Machine Learning, Physics-Informed Neural Network, Dynamic Weight Tuning

1. 緒言

データ駆動型科学の技術は、幅広い分野で活用・応用が展開されており、画像認識などの分野では機械学習技術が成熟しつつある。同技術は工学分野にも拡張されつつあり、物理現象を評価するための新たな方法論としての研究が盛んである。近年では、既知の物理的支配原理とデータとの融合に基づく機械学習モデルの開発が展開されており[1,2], 中でもPINN (Physics-Informed Neural Network) [3]は、要素離散化を必要としない点や、順解析・逆解析の両者に柔軟に適用可能であるという特性から、幅広い応用がなされている[1,4,5,6].

PINNは支配方程式とデータの情報を組み合わせた学習を行うため、それぞれにどの程度の重みを与えるべきかは慎重に検討する必要がある。この重みは、多くの問題でハイパーパラメータとして取り扱われているものの[4,6], PINNの学習は重みの定め方により大きく影響されるため、適切にチューニングすることが重要である[7,8,9].

そこで著者らは、PINNの学習過程にネットワーク中を逆伝播する損失関数のパラメータ勾配を用いた動的重み付け法 (DN: Dynamic Normalization) を提案している[10]. DNは、新たなハイパーパラメータを必要とするものの、上記の重みを試行錯誤的に定める必要性を取り除きつつPINNによる近似解の高精度化を可能にする手法であり、導入による計算コストの増分も数10%以内に抑えることができる。本研究では、先行研究[10]で順解析への応用に留められていたDNを、PINNを用いた逆解析へと適用し、その有用性を確認した。

2. 機械学習手法

(1) PINN: Physics-Informed Neural Network

以下のように記述される初期値境界値問題を考える。

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t, \mathbf{x}) = \mathcal{F}[u(t, \mathbf{x}); \boldsymbol{\mu}] \quad (1)$$

$$u(0, \mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \quad (2)$$

$$u(t, \mathbf{x}) = h(t, \mathbf{x}) \quad (3)$$

ここで、式(1)は支配原理である偏微分方程式、式(2), (3)はそれぞれ初期条件、境界条件である。また、式(1)の $\mathcal{F}[\cdot; \boldsymbol{\mu}]$ は $\boldsymbol{\mu}$ をパラメータに持つ偏微分作用素である。PINNは、まず解 u をニューラルネットワーク \hat{u} により近似する。入力 $\mathbf{x} = \{t, \mathbf{x}\} (\in \mathbb{R}^{f_{in}})$, 出力 $\hat{\mathbf{y}} = \{\hat{u}\} (\in \mathbb{R}^{f_{out}})$ を持つ L 層のニューラルネットワークにおいて、第 l ($= 1, 2, \dots, L$)層における順伝播 $\mathbf{z}^{(l)}$ ($\in \mathbb{R}^{f_{hidden}^{(l)}}$)は、以下の通りである。

$$\mathbf{z}^{(l)} = \sigma^{(l)}(\mathbf{W}^{(l)}\mathbf{z}^{(l-1)} + \mathbf{b}^{(l)}) \quad (4)$$

ここで、 $\mathbf{z}^{(0)} = \mathbf{x}$, $\mathbf{z}^{(L)} = \hat{\mathbf{y}}$ であり、 $\sigma^{(l)}(\cdot)$ は活性化関数と呼ばれる、要素ごとに作用する非線形写像 (出力層でのみ恒等写像) である。また、 $\mathbf{W}^{(l)}$, $\mathbf{b}^{(l)}$ は第 l 層における重み、バイアスであり、これらは、以下の損失関数を最小化することで学習する。

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \lambda_{\text{PDE}} \mathcal{L}_{\text{PDE}} + \lambda_{\text{IC}} \mathcal{L}_{\text{IC}} + \lambda_{\text{BC}} \mathcal{L}_{\text{BC}} + \lambda_{\text{Data}} \mathcal{L}_{\text{Data}} \\ &= \sum_j \lambda_j \mathcal{L}_j \end{aligned} \quad (5)$$

$$\mathcal{L}_{\text{PDE}} = \sum_i \left| \frac{\partial}{\partial t} \hat{u}_i - \mathcal{F}[\hat{u}_i; \boldsymbol{\mu}] \right|^2 \quad (6)$$

$$\mathcal{L}_{\text{IC}} = \sum_i |\hat{u}_i - g(\mathbf{x}_i)|^2 \quad (7)$$

$$\mathcal{L}_{\text{BC}} = \sum_i |\hat{u}_i - h(t_i, \mathbf{x}_i)|^2 \quad (8)$$

$$\mathcal{L}_{\text{Data}} = \sum_i |\hat{u}_i - u(t_i, \mathbf{x}_i)|^2 \quad (9)$$

ここで、 $\hat{u}_i = \hat{u}(t_i, \mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})$ 、 $\boldsymbol{\theta}$ はパラメータベクトルである ($\boldsymbol{\theta} = \{\mathbf{w}^{(l)}, \mathbf{b}^{(l)}\}_{l=1}^L$)。また、 λ_j は各損失項に与える重みであり、それぞれの相対的な重要度を示す。

学習には、勾配降下法を用いることとする。勾配降下法による学習は、以下の通りである。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta}^{(n+1)} &= \boldsymbol{\theta}^{(n)} - \eta^{(n)} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}^{(n)}) \\ &= \boldsymbol{\theta}^{(n)} - \eta^{(n)} \sum_j \lambda_j \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}_j(\boldsymbol{\theta}^{(n)}) \end{aligned} \quad (10)$$

ここで、 $\boldsymbol{\theta}^{(n)}$ 、 $\eta^{(n)}$ はそれぞれ n エポック目でのパラメータ、学習率である。

(2) 動的重み付け法 (DN: Dynamic Normalization)

損失関数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ の、 $\boldsymbol{\theta}^{(n)}$ まわりでの2次までのTaylor展開を考える。

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{(n+1)} &= \mathcal{L}^{(n)} + \Delta \boldsymbol{\theta}^{(n)\top} \mathbf{G}^{(n)} \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta \boldsymbol{\theta}^{(n)\top} \mathbf{H}^{(n)} \Delta \boldsymbol{\theta}^{(n)} \end{aligned} \quad (11)$$

表記の簡略化のため、 $\mathcal{L}^{(n)} = \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}^{(n+1)})$ 、 $\mathbf{G}^{(n)} = \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}^{(n)})$ 、 $\mathbf{H}^{(n)} = \nabla_{\boldsymbol{\theta}}^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}^{(n)}) + \alpha \Delta \boldsymbol{\theta}^{(n)}$ とした。なお、 $\alpha \in (0, 1)$ である。式(10)、および式(11)から、以下を得る。

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{(n+1)} - \mathcal{L}^{(n)} &= -\eta^{(n)} \|\mathbf{G}^{(n)}\|_2^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} (\eta^{(n)})^2 \mathbf{G}^{(n)\top} \mathbf{H}^{(n)} \mathbf{G}^{(n)} \end{aligned} \quad (12)$$

ここで、右辺第2項はPINNの学習過程を洞察する上で有用であるものの[8]、 $\mathbf{H}^{(n)}$ の計算が高負荷であるため、実用上、これを利用して重みを定めることは非現実的である。したがって、動的重み付け法 (DN: Dynamic Normalization) [10]では第2項を無視し、第1項の勾配に関する項に基づき重みを定める。まず、式(12)を以下のように変形する。

$$\sum_j \Delta \mathcal{L}_j^{(n)} = -\eta^{(n)} \left\| \sum_j \lambda_j^{(n)} \mathbf{G}_j^{(n)} \right\|_2^2 \quad (13)$$

ここで、 j 番目の損失項 $\mathcal{L}_j^{(n)}$ が、対応する勾配 $\mathbf{G}_j^{(n)}$ によってのみ減少されると仮定すれば、 $\Delta \mathcal{L}_j^{(n)} = -\eta^{(n)} \|\lambda_j^{(n)} \mathbf{G}_j^{(n)}\|_2^2$ である。なお、PINNの学習過程においては、各損失項に応じて勾配の分布に散付きが現れやすいことが知られて

おり[8,11]。特に他の損失項と比較して、支配方程式からの残差を評価する項 \mathcal{L}_{PDE} を急速に減少させる傾向が存在する (すなわち、 $\|\mathbf{G}_{\text{PDE}}\|_2 \gg \|\mathbf{G}_{\text{BC}}\|_2$ など) [9]。物理的な問題を評価する上では支配方程式だけでなく、初期条件・境界条件も考慮する必要があることから、複数の損失項を同等の速度で減少させることが重要である。以上より、複数の損失項を同等の速度で減少するには、以下の関係が満足されるべきである。

$$\|\lambda_j^{(n)} \mathbf{G}_j^{(n)}\|_2^2 = -\eta^{(n)} \|\lambda_k^{(n)} \mathbf{G}_k^{(n)}\|_2^2 \quad (14)$$

ここで、相対的な重み (重要度) を考えるため、 $\lambda_k^{(n)} = 1.0$ とすると、以下の重みを得る。

$$\lambda_j^{(n)} = \frac{\|\mathbf{G}_k^{(n)}\|_2}{\|\mathbf{G}_j^{(n)}\|_2} \quad (15)$$

ここで、 $\lambda_j^{(n)}$ は学習過程で計算される勾配に基づいて計算されるため、学習中に動的に変化する。また、計算負荷を抑えるため、 $\tau (\geq 1)$ エポックごとに更新することとする (例えば、 $\tau = 5, 10$ など[8,10,11])。ただし、式(15)の定義を直接適用すると、 $\lambda_j^{(n)}$ が大きく振動することから、指数減衰率 $\beta (\in [0, 1])$ を用いて以下の平滑化を施す。

$$\hat{\lambda}_j^{(n)} = \frac{\|\mathbf{G}_k^{(n)}\|_2}{\|\mathbf{G}_j^{(n)}\|_2} \quad (16)$$

$$\lambda_j^{(n)} = \beta \lambda_j^{(n-1)} + (1 - \beta) \hat{\lambda}_j^{(n)} \quad (17)$$

ここで、 $\beta = 0$ とすると、式(15)に一致する。 β はハイパーパラメータであり、経験的に $\beta \rightarrow 1$ で $\lambda_j^{(n)}$ が安定することが知られている ($\beta = 0.9, 0.99$ など[10])。

3. 数値実験

本章では、上述の動的重み付け法 (DN: Dynamic Normalization) を適用し、PINNによる逆解析を行った数値実験を示す。本研究で用いたネットワーク構造は、 $\{f_{\text{hidden}}^{(l)}\}_{l=1}^{L-1} = f_{\text{hidden}} = 50$ 、 $L = 5$ とし[9,12]、活性化関数には $\{\sigma^{(l)}(\cdot)\}_{l=1}^{L-1} = \sigma(\cdot) = \tanh(\cdot)$ を選択した[13]。活性化関数の選択に伴い、重みの初期値にはGlorotの初期値[14]を採用した。最適化手法にはAdam[15]を採用し、学習率 η は $\eta = 0.001$ 、1次・2次モーメント推定の指数減衰率 β_1 、 β_2 はそれぞれ $\beta_1 = 0.9$ 、 $\beta_2 = 0.999$ とした。なお、本論文におけるPINNの開発にはTensorFlow[16]を、学習にはNVIDIA RTX A6000を用いた。

(1) ハイパーパラメータの検討

まず、動的重み付け法 (DN: Dynamic Normalization) で導入されるハイパーパラメータに関して、先行研究[10]、および類似の研究[8,11]から、一定の指針は示されているものの、未だ議論の余地が残される。本節では、動的重みの指数減衰率 β 、および更新間隔 τ に関する検討を行う。

検証問題として、先行研究[9]に倣い熱拡散方程式を取り上げる。支配方程式、および初期条件、境界条件は以下のように与えられる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (18)$$

$$u(0, x) = \sin(\pi x) \quad (19)$$

$$u(t, 0) = u(t, 1) = 0 \quad (20)$$

ここで、 $t \in [0, 0.5]$ 、 $x \in [0, 1]$ 、 v は拡散係数であり、 $v = 1.0$ とした。上記には以下の厳密解が存在する(図-1参照)。

$$u = \sin(\pi x) \exp(-v\pi^2 t) \quad (21)$$

図-1には、マゼンタ色の四角形で示す点が観測点であり、式(9)の $u(t_i, x_i)$ に相当する。ここでは、 $x = \{0.25, 0.5, 0.75\}$ の3点において $t = \{0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5\}$ に観測される温度の情報から拡散係数 v を逆解析する。10,000エポックだけ学習を行うこととし、テストエラーの推移、学習コストの増加に基づき β 、 τ の設定を検討する。それぞれに対して $\beta = \{0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 0.99, 0.999\}$ 、 $\tau = \{1, 10\}$ の範囲でグリッドサーチを行った結果、いずれの τ に対しても $\beta < 0.9$ ではテストエラーがほとんど減少しなかったため、 $\beta = \{0.9, 0.99, 0.999\}$ の結果のみを示す。

10,000エポック間のテストエラーの推移を図-2に示す。また、 τ と学習コストとの関係を表-1に示す。表-1には、比較のため、動的重みを適用しない場合(w/o DN)のコストを記し、括弧内には増分を示している。図-2より、 $\tau = 1$ の場合、 $\beta = 0.9, 0.99$ ではテストエラーが減少せず、 $\beta = 0.999$ のみその減少が確認できる。 $\tau = 10$ では、 $\beta = 0.9$ ではテストエラーが減少しないものの、 $\beta = 0.99, 0.999$ で適切な学習が実行できている。以上より、 β を1.0に近い値に定めておき、式(16)、(17)で定める動的重みを緩やかに変化させることで安定した学習が可能になると考える。なお、表-1より、 τ の選択によって学習コストに隔りがある。上記の β に関する議論より、安定した学習のためには、動的重みは緩やかに変化させることが好ましい。また、主に式(16)の計算に起因する学習コストの増分は小さく抑えるべきである。以上から、本研究では $\beta = 0.99, 0.999$ 、 $\tau = 10$ を選択する。

(2) 1次元熱拡散方程式

前節と同じ問題において、動的重みを適用しない場合(w/o DN)と適用する場合(w/DN)での結果を比較する。なお、ニューラルネットワークの重みの初期値[14]は確率分布から抽出されるため、学習・推論には一定のランダム性が含まれる[17]。したがって、ここでは異なる乱数シードを用いて10回の独立な試行を行った結果を示す。

30,000エポックのフルバッチ学習を行い、拡散係数 v の逆解析を行った。学習過程での推定値の推移を図-3に示す。図-3では、10試行の平均値を実線で、標準偏差の2倍の区間を網掛け線で示している。また、学習終了時点での

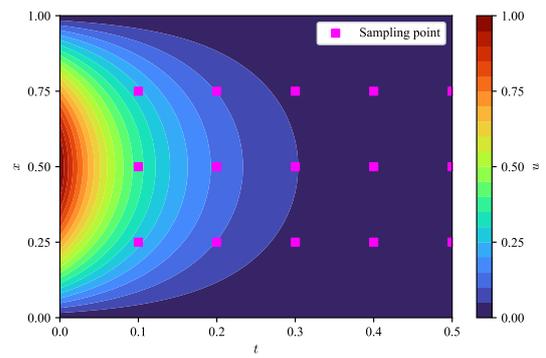


図-1 熱拡散方程式の参照解

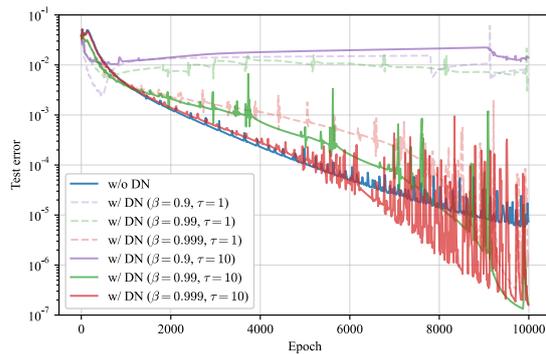


図-2 熱拡散方程式：テストエラーの推移

表-1 熱拡散方程式：更新間隔 τ と学習コスト

Method	τ	Training time (sec / 10,000 epochs)
w/o DN	-	182.69 (× 1.00)
w/ DN	1	231.80 (× 1.27)
w/ DN	10	189.96 (× 1.04)

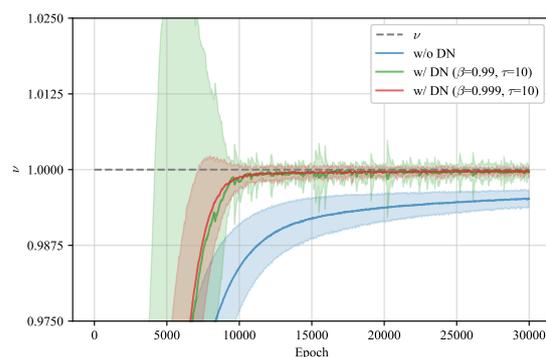


図-3 熱拡散方程式：拡散係数の推定値の推移

表-2 熱拡散方程式：拡散係数の推定結果

Method	β	τ	Identified v (\pm std)
w/o DN	-	-	0.9952 ($\pm 7.5 \times 10^{-4}$)
w/ DN	0.99	10	0.9998 ($\pm 4.9 \times 10^{-4}$)
w/ DN	0.999	10	0.9996 ($\pm 4.8 \times 10^{-4}$)

拡散係数 ν の推定値を表-2に示す. 表-2でも図-3と同様に10試行の平均値と標準偏差を示している. 図-3より, 動的重みを適用しない場合のPINNは, 30,000エポックの学習では未だ真値へ収束しきれておらず, 高精度な逆解析のためには, より長時間の学習が必要であると予想される.

一方, 動的重みを適用した場合には10,000エポックの学習を終えた時点で比較的良好な推定値を得ており, その後, 徐々に真値へと漸近している. 上記より, 本問題においては, 式(16), (17)で定める動的重みはPINNを用いた逆解析において高速化・高精度化に寄与していると考えられる.

(3) 1次元移流拡散方程式

続いて先行研究[18]に倣い, 移流拡散方程式を取り上げる. 支配方程式, 初期条件, 境界条件は以下の通りである.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mu \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (22)$$

$$u(0, x) = -\sin(\pi x) \quad (23)$$

$$u(t, -1) = u(t, 1) = 0 \quad (24)$$

ここで, $t \in [0, 1]$, $x \in [-1, 1]$ である. μ は移流速度, ν は拡散係数であり, $\mu = 1.0$, $\nu = 0.1/\pi \cong 0.0318$ とした[18]. 上記の問題にはFourier無限級数による厳密解が知られているが[19], ここでは800項までの有限級数を参照解とする[18] (図-4参照). ただし, 級数展開が煩雑であるため, 参照解の式の記述は省略する ([19]参照). 本問題では, $x = \{-0.5, 0.0, 0.5\}$ の3点において $t = \{0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0\}$ に観測される濃度の情報 (図-4内のマゼンタ色の四角形) から移流速度 μ と拡散係数 ν を逆解析する. また, 初期化による結果の散付きを考慮するため, 異なる乱数シードを用いて10回の独立な試行を行った結果を報告する.

60,000エポックのフルバッチ学習を行った結果を示す. 学習過程での移流速度 μ の推定値, 拡散係数 ν の推定値の推移を図-5, 図-6にそれぞれ示す. 前節と同様に10試行の平均値を実線で, 標準偏差の2倍の区間を網掛け線で示す. また, 学習終了時点でのそれぞれの推定値 (平均値・標準偏差)を表-2, 表-3に示す. 図-5, および表-2より, 60,000エポックの学習では, 動的重みを適用しない場合と適用する場合の両方で, 高精度に移流速度の推定が実行できている. 一方, 図-5, 表-3より, 動的重みを適用しない場合と $(\beta, \tau) = (0.99, 10)$ として適用した場合とでは, 両者に明確な差がほとんど見られないが, $(\beta, \tau) = (0.999, 10)$ として動的重みを適用した場合には, 拡散係数の逆解析が僅かに高精度化している. 以上より, 本問題においては, 動的重みを適用することで僅かな高精度化が期待できるものの, 結果には顕著な影響を与えるものではなかった. 著者らが提案するDN以外の動的重み付け手法に関する研究でも, 重みが結果に大きく影響する問題と影響し辛い問題があることが報告されており[8,11], 今後どのような問題に対して重みを考慮すべきか整理する必要がある.

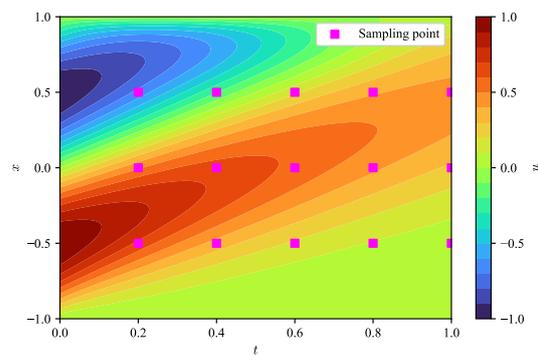


図-4 移流拡散方程式の参照解

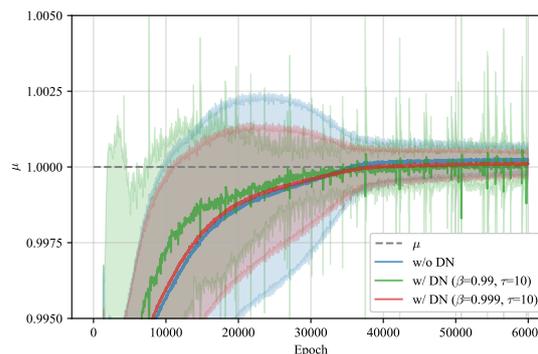


図-5 移流拡散方程式: 移流速度の推定値の推移

表-2 移流拡散方程式: 移流速度の推定結果

Method	β	τ	Identified μ (\pm std)
w/o DN	-	-	1.0002 ($\pm 2.1 \times 10^{-4}$)
w/ DN	0.99	10	1.0001 ($\pm 2.5 \times 10^{-4}$)
w/ DN	0.999	10	1.0001 ($\pm 2.2 \times 10^{-4}$)

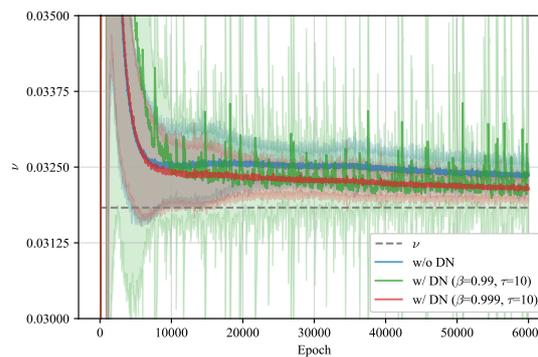


図-6 移流拡散方程式: 拡散係数の推定値の推移

表-3 移流拡散方程式: 拡散係数の推定結果

Method	β	τ	Identified ν (\pm std)
w/o DN	-	-	0.0324 ($\pm 9.3 \times 10^{-5}$)
w/ DN	0.99	10	0.0324 ($\pm 9.1 \times 10^{-4}$)
w/ DN	0.999	10	0.0321 ($\pm 9.2 \times 10^{-5}$)

4. 結言

本研究では、PINNの学習においてハイパーパラメータとして設定されてきた各損失項に与える重みの動的な定め方を議論した。著者らの先行研究[10]では、式(16), (17)で定める動的重みの適用は順解析に留まっていた。本研究では、同様に定めた重みをPINNを用いた逆解析に適用した。特定の損失項が対応する勾配のみによって減少するという仮定が導入されているものの、数値実験から、その一定の有用性を確認した。熱拡散方程式に関する数値実験では、逆解析の高速化・高精度化において一定の成果があることを確認したものの、移流拡散方程式においては、重みを適用しない場合と比較してほぼ同等の結果であった。これまでに、重みを調整しなくとも一定の精度で順解析・逆解析が可能である例も複数示されていることから[3,9,20]、今回数値実験例として取り上げた移流拡散方程式（また、考えた初期条件、境界条件）も重みの効果が顕著に表れなかったものと考えている。今後は、[8]に倣い、式(11), (12)のヘッシアン $\mathbf{H}^{(n)}$ の情報を活用することで、問題に応じ、重み調整の必要性を検討する予定である。また、著者らが提案する動的重みの性質として、指数減衰を施しているため、学習の初期段階では重みが初期値向きにバイアスされている。特に、 β が1.0に近い値をとるとき、長時間の学習をしなければ重み変動し辛いいため、動的重み付け法にも改善の余地がある。例えば、Adam[14]に倣い、バイアス補正を施すことなどで、学習初期段階から適切に重み変動することが期待できる。上記の課題に関しても、今後検討する予定である。

謝辞: 本研究は、JSPS科研費JP20H02418, JST次世代研究者挑戦的研究プログラムJPMJSP2136, および九州大学数理工学・データサイエンス教育研究センターの支援を受けた。ここに記して謝意を表する。

参考文献

[1] Karniadakis, G.E., Kevrekidis, I.G., Lu, L. et al.: Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, Vol. 3, pp. 422-440, 2021.

[2] von Rueden, L., Mayer, S., Beckh, K. et al.: Informed Machine Learning – A Taxonomy and Survey of Integrating Prior Knowledge into Learning Systems, *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, Vol. 35, No. 1, pp. 614-633, 2023.

[3] Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis, G.E.: Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, Vol. 378, pp. 686-707, 2019.

[4] Sahli Costabal, F., Yang, Y., Perdikaris, P. et al.: Physics-informed neural networks for cardiac activation mapping, *Frontiers in Physics*, Vol. 8, pp. 42, 2020.

[5] Cai, S., Wang, Z., Fuest, F. et al.: Flow over an espresso cup: inferring 3-D velocity and pressure fields from tomographic background oriented Schlieren via physics-informed neural networks, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 915, pp. A102, 2021.

[6] Buhendwa, A.A., Adami, S. and Adams, N.A.: Inferring incompressible two-phase flow fields from the interface motion using physics-informed neural networks, *Machine Learning with Applications*, Vol. 4, pp. 100029, 2021.

[7] 出口翔大, 柴田洋佑, 浅井光輝: 予測に物理的意味を付与した機械学習 PINNs による誤差を含む教師データからのパラメータ推定, 土木学会論文集A2 (応用力学), Vol. 77, No. 2, pp. I_35-I_45, 2021.

[8] Wang, S, Teng, Y. and Perdikaris, P.: Understanding and Mitigating Gradient Flow Pathologies in Physics-Informed Neural Networks, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 43, No. 5, pp. A3055-A3081, 2021.

[9] Rohrhofer, F.M., Posch, S. and Geiger, B.C.: On the Pareto Front of Physics-Informed Neural Networks, *arXiv: 2105.00862*, 2021.

[10] Deguchi, S. and Asai, M.: Dynamic & norm-based weights to normalize imbalance in back-propagated gradients of physics-informed neural networks, *Journal of Physics Communications* (submitted).

[11] Maddu, S., Sturm, D., Müller, C.L. and Sbalzarini, I.F.: Inverse Dirichlet weighting enables reliable training of physics informed neural networks, *Machine Learning: Science and Technology*, Vol. 3, No. 1, pp. 015026, 2022.

[12] Jin, X., Cai, S., Li, H. and Karniadakis, G.E.: NSFnets (Navier-Stokes flow nets): Physics-informed neural networks for the incompressible Navier-Stokes equations, *Journal of Computational Physics*, Vol. 426, pp. 109951, 2021.

[13] 出口翔大, 柴田洋佑, 浅井光輝: 空間特徴量抽出を援用した PINNs によるパラメータ逆解析の効率化, 土木学会論文集, Vol. 79, No. 15, pp. 22-15011, 2023.

[14] Glorot, X. and Bengio, Y.: Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks, *Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, Vol. 9, pp. 249-256, 2010.

[15] Kingma, D.P. and Ba, J.: Adam: A Method for Stochastic Optimization, *3rd International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2015.

[16] Abadi, M., Agarwal, A. Barham, P. et al.: TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Systems, 2015.

[17] Tartakovsky, A.M., Marrero, C.O., Perdikaris, P. et al.: Physics-Informed Deep Neural Networks for Learning Parameters and Constitutive Relationships in Subsurface Flow Problems, *Water Resources Research*, Vol. 56, No.

5, pp. e2019WR026731, 2020.

[18] Kharazmi, E., Zhang, Z. and Karniadakis, G.E.M.: hp-VPINNs: Variational physics-informed neural networks with domain decomposition, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 374, pp. 113547, 2021.

[19] Mojtabi, A. and Deville, M.O.: One-dimensional linear

advection–diffusion equation: Analytical and finite element solutions, *Computers & Fluids*, Vol. 107, pp. 189-195, 2015.

[20] Lu, L., Meng, X., Mao, Z. et al.: DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations, *SIAM Review*, Vol. 63, No. 1, pp. 208-228, 2021.

OS09 深層学習、機械学習と計算工学

[A-11] OS09 深層学習、機械学習と計算工学 (2)

座長:三好 昭生(株式会社インサイト)

Fri. Jun 2, 2023 10:30 AM - 11:45 AM Room A (1F Conference Room 101)

[A-11-01] 有限要素解析および赤外線測定による応力分布に基づく転移学習を用いた CFRP 単純形状内の欠陥3次元情報の予測

*児嶋 佑太¹、平山 健太¹、遠藤 克浩²、原田 祥久²、村松 真由¹ (1. 慶應義塾大学、2. 産業技術総合研究所)

10:30 AM - 10:45 AM

[A-11-02] Generating the human body structure of the corresponding anime character based on DiscoGAN

*劉 思涵¹、塩谷 隆二¹、中林 靖¹ (1. 東洋大学)

10:45 AM - 11:00 AM

[A-11-03] DPDシミュレーション用パラメータの非経験的算定の機械学習による効率化

*土居 英男¹、松岡 壮太¹、奥脇 弘次¹、畑田 峻¹、南 聡次朗¹、栖原 涼輔¹、望月 祐志^{1,2} (1. 立教大学、2. 東京大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[A-11-04] 物理現象の性質を導入した機械学習モデルによる輸送現象の学習

*堀江 正信^{1,2}、三目 直登³ (1. 株式会社R I C O S、2. JSTさきがけ、3. 筑波大学)

11:15 AM - 11:30 AM

[A-11-05] 深層学習を用いた応力場予測に関するデータ拡張手法

*豊吉 巧也¹ (1. 愛知工科大学)

11:30 AM - 11:45 AM

有限要素解析および赤外線測定による応力分布に基づく 転移学習を用いたCFRP単純形状内の 欠陥3次元情報の予測

Prediction of 3D Information of Defects in a Simple Shaped CFRP Specimens
Using Transition Learning Based on Stress Distribution
from Finite Element Analysis and Infrared Measurements

児嶋佑太¹⁾ 平山健太²⁾ 遠藤克浩³⁾ 原田祥久⁴⁾ 村松真由⁵⁾

Yuta Kojima, Kenta Hirayama, Katsuhiko Endo, Yoshihisa Harada and Mayu Muramatsu

¹⁾慶應義塾大学大学院理工学研究科 (〒 223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1, E-mail: kojimayuta@keio.jp)

²⁾慶應義塾大学大学院理工学研究科 (〒 223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1, E-mail: kenta_hirayama@keio.jp)

³⁾国立研究開発法人産業技術総合研究所 (〒 305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1, E-mail: katsuhiko.endo@aist.go.jp)

⁴⁾国立研究開発法人産業技術総合研究所 (〒 305-8564 茨城県つくば市並木 1-2-1, E-mail: harada.y@aist.go.jp)

⁵⁾博 (工) 慶應義塾大学理工学部機械工学科 准教授 (〒 223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1, E-mail: muramatsu@mech.keio.ac.jp)

This study proposes a framework of Non-destructive Testing (NDT) for predicting the three-dimensional structure of internal defects in Carbon Fiber Reinforced Plastic (CFRP) structures from the distributions of sum of principal stress on surface (DSPSS) through transition learning. DSPSS are obtained from both the Finite Element Method (FEM) and infrared stress measurement. The infrared stress measurement uses Kelvin's theory to convert the surface temperature fluctuation under cyclic loading into DSPSS. The machine learning model used in this framework is a three-dimensional convolutional neural network (CNN). The transition learning method employed in this framework is as follows; First, a 3D-CNN that predicts the 3D-structure of defects is trained from the DSPSS by FEM with noise. Noise is added to the FEM DSPSS, for which a large amount of training data is available. This noise imitates thermal noise generated by infrared stress measurements and noise generated by differences in the physical properties of the resin and carbon fiber bundle. Next, the 3D-CNN is trained by transition learning using DSPSS obtained from infrared stress measurements. The amount of available data is limited. The accuracy is evaluated using DSPSS from the infrared stress measurements that are not used for training.

Key Words : Machine Learning, Non-destructive Testing, Finite Element Method, Carbon Fiber Reinforced Plastic, Convolutional Neural Network, Infrared Stress Measurement

1. 諸言

炭素繊維強化プラスチック (Carbon Fiber Reinforced Plastic, CFRP) は、樹脂を母材とし、炭素繊維を強化材とした複合材料である。高い比弾性率を持つため、宇宙・航空分野で多く使用されている。例えば、ボーイング 787 型機の機体構造の 50%以上に CFRP が使用されている [1]。また、この材料は一方向に高い強度と剛性を持つ一方向強化材であるプリプレグを、積層して使用されるのが一般的である [2]。しかし、積層板の損傷は、剥離、繊維破断、母材割れなど著しく複雑であり、高効率かつ高精度な損傷解析が必要である。一般に損傷解析は、超音波測定 [3]、放射線透過法 [4] などの非破壊検査 (Non-destructive Testing, NDT) で行われている。これには多大な労力と時間、安全管理、経済的負担および計測技術者の経験が必要である。上記の既存の損傷解析手法の他に、赤外線サーモグラフィを用いた手法 [5] がある。赤外線サーモグラフィは、赤外線センサを用いて対象物の表面から放射される赤外線エネ

ルギーを測定する方法である。測定した赤外線エネルギーは、温度分布に変換される。既存の損傷解析手法と比較して、安全管理が不要、解析コスト・時間コストが低い、接触媒体が不要、試験技術者の技量が結果に影響しない、などの利点がある。近年では、赤外線分析で得られた温度変動から表面主応力とを算出し、損傷解析に用いることが多い。構造物の赤外線応力解析が橋梁の欠陥検出に有用であることを確認した研究がある [6]。一方、欠陥位置推定に機械学習を用いた研究も行われている。Byonらは、CFRP積層板を長手方向に10個のサンプルに分割し、固有振動数と損傷の位置・量を学習データとして数値解析と実験を行い、先端の2要素を除く8要素に損傷を与え、欠陥位置を予測するニューラルネットワークモデルを開発した [7]。この方法を用いて、1次から3次の固有振動数を入力データとして、2次元の位置と損傷量を決定する機械学習モデルを開発した。しかしながら、欠陥位置が8ヶ所と限定的で解像度が低いという課題がある。Hasebeらは、実験におい

て損傷を有する CFRP 積層版の表面性状から衝突による損傷を、決定技ベースのマルチタスク学習を用いて予測し、既存手法との精度比較を行った [8]。また、本研究グループは有限要素法 (Finite Element Method, FEM) のみのデータを用いて表面主応力和分布から欠陥情報の 3 次元構造を予測する概念実証を行なった [9]。しかしながら、使用したデータは FEM による表面主応力和分布のみであり、実験で得られる表面主応力和分布を用いた欠陥情報の 3 次元構造の予測は行われていない。本研究では、健全短冊形 CFRP 試験片と、異物としてプリプレグ層間にテフロン製シートを挿入した短冊形 CFRP 試験片に対し、3 次元畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network, CNN), FEM および赤外線応力測定から得られる表面主応力和分布を用いて異物の 3 次元構造を予測する。精度評価には、モデルの訓練に使用していない赤外線応力測定により得られた表面主応力和分布を用いる。なお本研究の試験片は、CFRP 製構造物を作成する際に最も発生しやすい欠陥として知られているフィルムのはがし忘れによる異物混入を想定している。

2. 転移学習 [11]

近年、画像認識分野において、CNN は多くのタスクでの高い精度から高い注目が集まっている。ImageNet [12] のような大規模なデータセットを用いた CNN の学習により獲得される特徴は非常に汎用性が高く、同一のドメインのみならずその他のドメインにおいても応用する研究がなされている [13]。転移学習を行うことのメリットとして、質が高く大量のデータセットを用意することができるドメインで学習された特徴を、少量のデータセットしか用意できないドメインに応用することができるという点が挙げられる。

3. 提案する欠陥逆推定手法

提案する欠陥逆推定手法の流れ (図 1) と利点について説明する。本手法は、FEM から得られる表面主応力和分布により訓練された 3 次元 CNN を、赤外線応力測定から得られる表面主応力和分布により転移学習を行う。具体的な流れを以下に示す。まず初めに、FEM により表面主応力和分布を計算する。次に、赤外線応力測定で発生するノイズを模擬したノイズを加える。得られたノイズあり FEM 表面主応力和分布を用いて異物の空間情報を予測する 3 次元 CNN を訓練する。最後に、引張りによる疲労を加えた試験片の表面における温度変動から Kelvin の理論に基づき計算された表面主応力和分布を用いて、3 次元 CNN の転移学習を行う。これにより、表面主応力和分布から異物の空間情報を予測する 3 次元 CNN を構築する。

4. 方法

(1) 赤外線応力測定

a) 作成した試験片設計図

赤外線応力測定で使用した CFRP 製短冊形試験片の設計図例を図 2 に示す。試験片は 1 方向強化材料であるプリプレグ (厚さ 0.3 mm) を 10 層貼り合わせた構造をしている。積層する一方向強化複合材の繊維方向は

$0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, -45^\circ, 0^\circ, 0^\circ, -45^\circ, 90^\circ, 45^\circ, 0^\circ$ とする。積層板の寸法は $200.0 \text{ mm} \times 25.0 \text{ mm} \times 3.0 \text{ mm}$ とし、異物は図中破線部分に挿入し、異物長さ a , 幅 b , x 方向挿入位置 c , y 方向挿入位置 d , 挿入層を変更することにより試験片を用意する。図中 A, B の領域は振動試験機の治具に挟み込むための GFRP 製タブを貼り付けた領域である。工場における異物混入では異物が含まれていない構造物の数が多いことを想定し、異物の含まれない試験片を 17 枚、異物の含まれる試験片を 12 枚用意する。

b) 赤外線応力測定の実験設定

実験に使用した振動試験器は 810 Material Test System, 赤外線サーモグラフィは FLIR SC7500 である。振動試験器の設定条件は引張 - 引張の繰り返し荷重, 引張上限値は 2.0 kN, 引張下限値は 0.2 kN, 荷重波形は sin 波であり, 周波数は 5 Hz である。赤外線サーモグラフィの解像度は 320×256 である。また, ロックイン処理に使用したフレーム数は 4000 枚である。試験片表面には反射による測定の乱れを防ぐために, 黒色塗装を施している。さらに振動試験機の治具に挟み込む部分は GFRP 製のタブを貼り付けている。貼り付けには接着剤を使用しており, タブのサイズは $50.0 \text{ mm} \times 25.0 \text{ mm}$ である。FEM で計算した応力和分布の解像度は 150×50 である。これらを合わせて, 標準化した画像を機械学習に使用する表面主応力和分布とする。得られた表面主応力和分布を図 3 に示す。

(2) FEM 解析

本研究では、FEM に基づく数値解析により機械学習で使用する表面の表面主応力和分布を得る。FEM 解析では、実験で用意した積層板と同様の設計の積層板に対し解析を行った。CFRP 部分と異物部分の物性値を表 1 に示す。異物部分の物性値には赤外線応力測定で異物として挿入したテフロンの物性を参考にしている。解析条件を図 4 に示す。

(3) 機械学習で用いるデータセット

上記の条件で FEM 解析を行うことで、異物の空間情報と積層板表面の表面主応力和分布をペアにしたデータセットを得た。異物のデータ形状は $150 \times 50 \times 5$, 表面主応力和分布の形状は 150×50 である。これにより、異物の位置とサイズを変更することにより、1 個の異物なし表面主応力和分布と 1033 個の異物あり表面主応力和分布を用意した。さらに、FEM 解析による応力分布に、赤外線応力測定により発生する熱ノイズや、樹脂と炭素繊維束の物性値の違いにより発生するノイズを擬似的に加えた。ノイズを異物あり表面主応力和分布は 5000 パターン、異物なし表面主応力和分布には 5 パターン加えることにより、異物なしのデータセットを 5000 組、異物ありのデータセットを 5165 組作成した。

また、赤外線応力測定による表面主応力和分布の訓練用データとテスト用データを図 5 に示す。データセットの振り分けでは、異物挿入層の偏りなくデータセットの割り当てを行った。

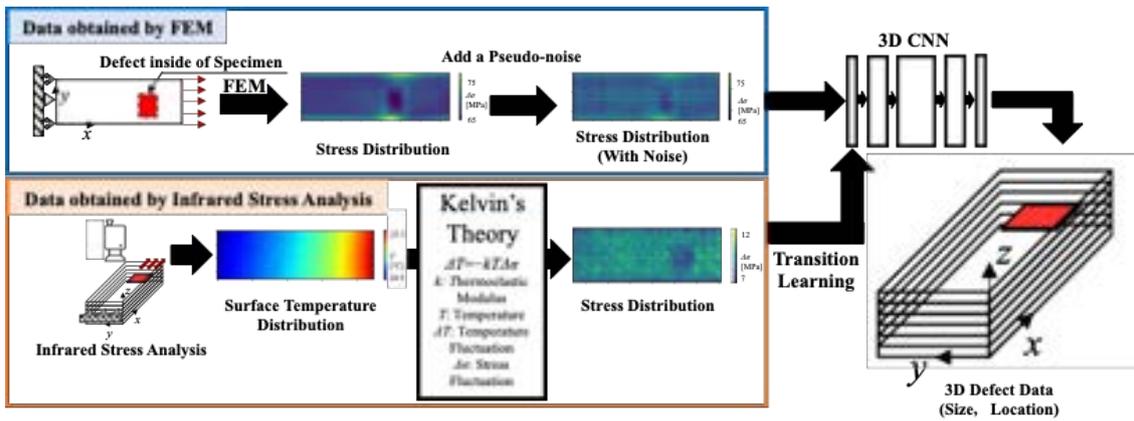


図-1. 提案する逆推定手法の流れ.

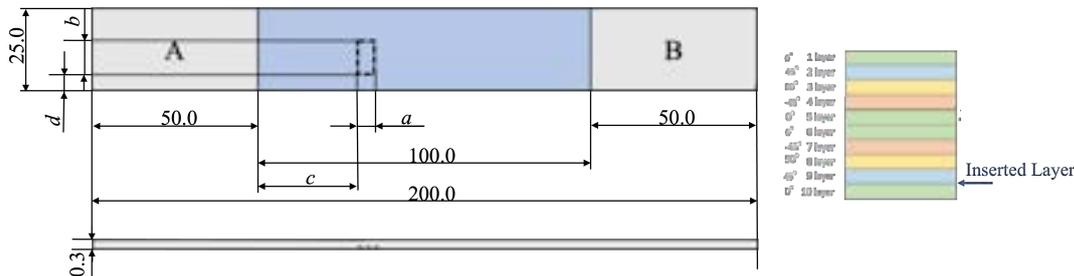
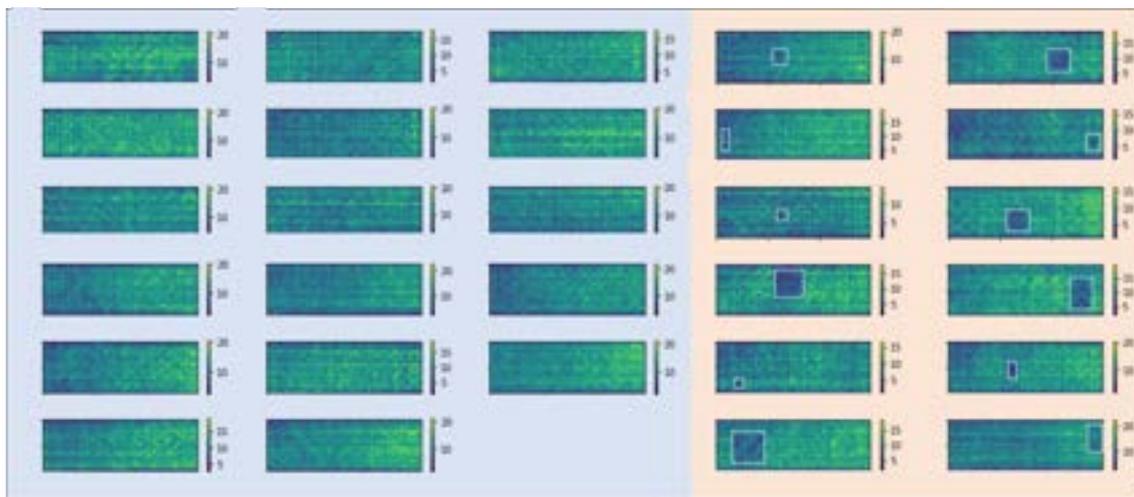


図-2. CFRP 試験片設計図の例.



(a)

(b)

図-3. 赤外線応力測定により得られた表面主応力和分布。(a) 内部に異物を挿入していない健全試験片の応力分布と (b) 異物あり試験片の応力分布。白破線は異物挿入部分。

(4) 3次元 CNN の訓練条件と転移学習による予測結果の評価方法

a) 3次元 CNN の訓練条件

本研究では、ノイズあり FEM 応力分布を用いて訓練を行った 3 次元 CNN に対して、赤外線応力測定による表面主応力和分布を用いた転移学習を行う。ノイズあり FEM 応力分布を用いて訓練を行う CNN のアーキテクチャ及び訓練プロセスを図 6 に示す。また、CNN の訓練条件を表 2 に示す。訓練用データに異物なしの

データセット 3000 組と異物ありのデータセット 3095 組、検証用データとテスト用データに異物なしのデータセット 1000 組と異物ありのデータセット 1035 組をそれぞれ割り当てた。64 画像で 1 ミニバッチを構成し、損失関数の評価と重みの更新を 800 回繰り返すことで訓練を行った。

赤外線応力測定による表面主応力和分布を用いて転移学習を行う CNN のアーキテクチャ及び訓練プロセスを図 7 に示す。また、CNN の訓練条件を表 3 に示す。

表-1. 各領域の物性値. Young 率 E , せん断弾性係数 G の単位は MPa とした.

	E_1	E_2	E_3	Nu_{12}	Nu_{13}	Nu_{23}	G_{12}	G_{13}	G_{23}
CFRP	136600	9650	9650	0.29	0.29	0.40	5200	5200	3400
Defect	200000	200000	200000	0.39	0.39	0.39	-	-	-

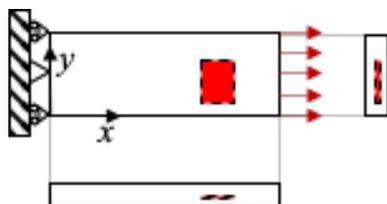
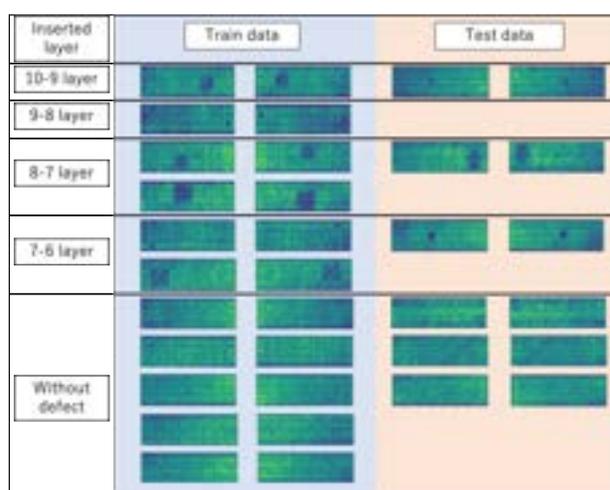
図-4. FEMの解析条件. 灰色部分は異物挿入部分. x 軸方向に 1.0 kN の引張を加え, yz 平面拘束を与えた.

図-5. 赤外線応力測定による表面主応力分布の訓練用データとテスト用データ. 180° 回転のデータオーギュメンテーションを行なっている.

表-2. ノイズあり FEM 表面主応力分布を用いた 3 次元 CNN の訓練条件.

損失関数	Binary Crossentropy
最適化手法	Adam (学習率 0.00007)
バッチサイズ	64
訓練回数	800
訓練データ	異物なし 3000 組+異物あり 3095 組
検証データ	異物なし 1000 組+異物あり 1035 組
テストデータ	異物なし 1000 組+異物あり 1035 組

訓練用データに異物なしのデータセット 10 組と異物ありのデータセット 12 組, テスト用データに異物なしのデータセット 6 組と異物ありのデータセット 6 組をそれぞれ割り当てた. 1 画像で 1 ミニバッチを構成し, 損失関数の評価と重みの更新を 1000 回繰り返すことで訓練を行った.

表-3. 転移学習における赤外線応力測定による表面主応力分布を用いた 3 次元 CNN の訓練条件.

損失関数	Binary Crossentropy
最適化手法	Adam (学習率 0.00007)
バッチサイズ	1
訓練回数	1000
訓練用データ数	異物なし 10 組+異物あり 12 組
テスト用データ数	異物なし 6 組+異物あり 6 組

b) 転移学習による予測結果の評価方法

転移学習による赤外線応力測定による表面主応力分布から異物の 3 次元情報を予測した結果について, 異物平面位置予測の一致率 R と異物挿入層の予測 P の二つの定量評価指標を用いる.

異物の平面位置予測の一致率 R では, Ground Truth の異物領域内に存在する, 予測結果が異物である割合を算出する. 式 (1) に R の定義式を示す. 赤外線応力測定による応力分布と異物挿入位置のずれを考慮して, 2 mm 異物領域より範囲を広めている.

$$R = \frac{\text{異物領域から 2 mm 範囲を広めた領域内の異物予測ピクセル数}}{\text{異物領域内のピクセル数}} \quad (1)$$

異物挿入層の予測 P では, 3 次元 CNN の予測した異物挿入層を異物ありと予測したピクセル数から確率的に算出する. 各層間における異物ありと予測したピクセル数の合計値を, 全層における異物ありと予測したピクセル数で割ることにより, 異物挿入層の各層に対する存在確率を導出する.

5. 結果と考察

本章ではまず, ノイズあり FEM 応力分布から異物の 3 次元情報を予測する 3 次元 CNN の予測結果を述べる. 次に, 赤外線応力測定による表面主応力分布を用いて転移学習を施した 3 次元 CNN の予測結果をまとめる.

(1) ノイズあり FEM 応力分布 (テストデータ) から異物の 3 次元情報を予測した結果

本節では, ノイズあり FEM 応力分布から異物の 3 次元情報を予測したときの出力 (Predicted Data) と教師データ (Ground Truth) を可視化し, 比較したところ, それぞれ欠陥の大きさごとに, 異物が存在する平面位置と挿入されている層を正しく予測できていることがわかった. これらの結果から, 赤外線応力測定で発生するノイズの擬似ノイズを加えた FEM 表面主応力分布

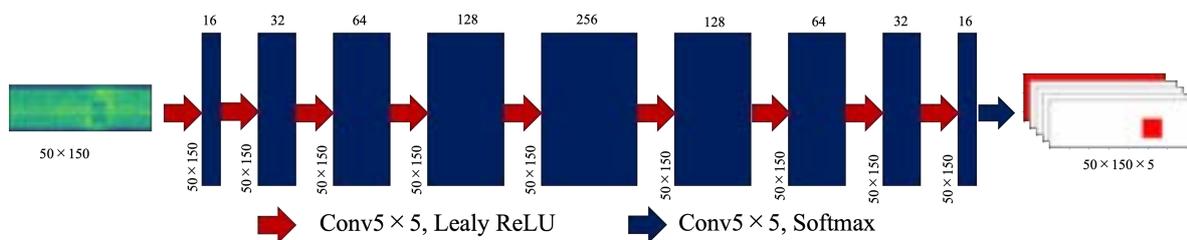


図-6. 3次元 CNN のアーキテクチャ及びノイズあり FEM 表面主応力和分布を用いた訓練プロセス。

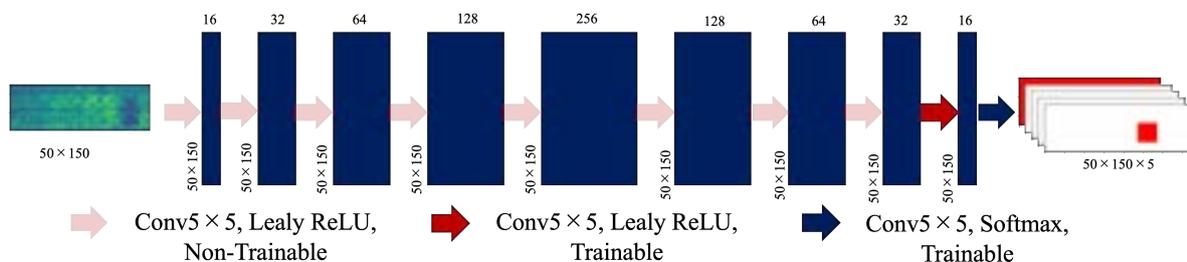


図-7. 転移学習における 3 次元 CNN のアーキテクチャ及び赤外線応力測定による表面主応力和分布を用いた訓練プロセス。

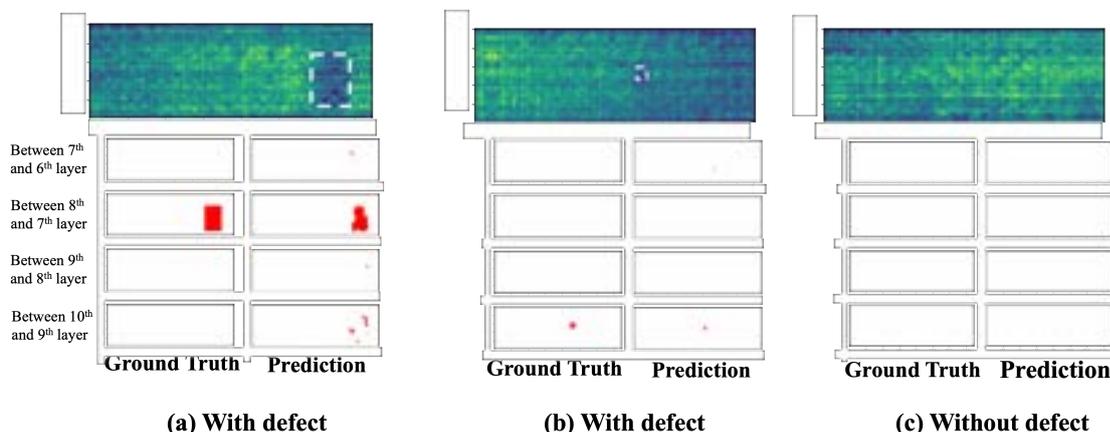


図-8. (a), (b) 異物が挿入されたテストデータの赤外線応力測定による表面主応力和分布 (上), Ground Truth(左下) と予測データ (右下) と (c) 異物が挿入されていないテストデータの赤外線応力測定による表面主応力和分布 (上), Ground Truth(左下) と予測データ (右下)。

表-4. 平面位置予測の一致率 R と異物挿入層の予測 P 。

	Test Data No.1		Test Data No.2		Test Data No.3		Test Data No.4		Test Data No.5		Test Data No.6		
	Prediction	Ground Truth											
R	0.56	1.00	0.83	1.00	0.81	1.00	0.31	1.00	0.82	1.00	0.59	1.00	
P	7-6 layer	0.21	0.00	0.02	0.00	0.56	1.00	0.21	0.00	0.86	0.00	0.52	1.00
	8-7 layer	0.00	0.00	0.84	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.79	1.00	0.08	0.00
	9-8 layer	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
	10-9 layer	0.79	1.00	0.13	0.00	0.44	0.00	0.79	1.00	0.27	0.00	0.41	0.00

に対して、異物の 3 次元情報を精度よく予測できていることがわかる。したがって、この 3 次元 CNN を用いて転移学習を行うこととする。

(2) 赤外線応力測定による表面主応力和分布を用いた転移学習

ノイズあり FEM 表面主応力和分布を用いて訓練した 3 次元 CNN に対し、赤外線応力測定による表面主応力和分布を用いて転移学習を行う。学習に使用していない

テストデータに対する出力 (Predicted Data) と教師データ (Ground Truth) を可視化し、比較する。図 8 に異物が挿入されたテストデータと、異物が挿入されていないテストデータにおける赤外線応力測定による表面主応力和分布と、3 次元 CNN の予測データ、Ground Truth の例を示す。

これらの結果から、赤外線応力測定から得た表面主応力和分布を用いた転移学習により、異物ありと異物なしの試験片を正確に判断することができていること

がわかる。さらに、異物あり試験片についてはおおよその挿入層の予測ができていことがわかる。赤外線応力測定による表面主応力和分布のノイズや、輪郭における応力値の揺らぎの影響で正確な概形は予測されず、複数の層間において異物ありと予測されていることもわかる。一方、異物の平面位置予測はおおよそ正しい位置を予測できていることもわかる。このため、異物あり試験片に対する予測結果について、平面位置予測の一致率 R と異物挿入層の予測 P の両方の指標を用いて予測結果を定量評価する。それぞれのテストデータに対する平面位置予測の一致率 R と異物挿入層の予測 P を表 4 に示す。異物平面位置の一致率 R は、異物サイズが小さい場合数値的に劣るが、Ground Truth より 2 mm 広いサイズ内に収まっていることを確認した。さらに、異物挿入層の位置を確率的に導出した際、全ての異物を挿入したテストデータにおいて正しい層における P が 0.5 より大きい結果となった。

6. 結論

本研究では、健全短冊形 CFRP 試験片と異物としてプリプレグ層間にテフロンシートを挿入した短冊形 CFRP 試験片に対し、FEM と赤外線応力測定から得られる表面主応力和分布を用いて異物の 3 次元情報を予測した。その結果、以下の項目を確認した。

- 3次元 CNN を用いて、学習に使用していない赤外線応力測定による表面主応力和分布から異物あり・なしを正確に判別することができること。
- 3次元 CNN を用いて、おおよその異物挿入層の予測と平面位置予測ができること。
- 異物平面位置一致率 R は、Ground Truth より 2 mm 広いサイズ内に収まっていること。
- 異物挿入層の位置を確率的に導出した際、全てのテストデータにおいて正しい層における異物挿入層の予測 P が 0.5 より大きい結果となること。

本研究の手法により、既存手法である X 線透過法や超音波測定法で発生する、超音波測定、放射線透過法などの既存の非破壊検査手法で必要とされている多大な労力と時間、安全管理、経済的負担、計測技術者の経験を必要としない内部欠陥推定が可能であり、既存手法の代替手法となる可能性がある。

参考文献

- [1] Ning, F. D., Cong, W. L., Pei, Z. J., & Treadwell, C. (2016). Rotary ultrasonic machining of CFRP: a comparison with grinding. *Ultrasonics*, **66**, 125-132.
- [2] Christensen, Richard M. *Mechanics of Composite Materials*. Courier Corporation, 2012.
- [3] Scarponi, C., & Briotti, G. (2000). Ultrasonic technique for the evaluation of delaminations on CFRP, GFRP, KFRP composite materials. *Composites Part B: Engineering*, **31**(3), 237-243.
- [4] Sultan, M. T. H., Worden, K., Pierce, S. G., Hickey, D., Staszewski, W. J., Dulieu-Barton, J. M., & Hodzic, A. (2011). On impact damage detection and quantification for CFRP laminates using structural response data only. *Mechanical Systems and Signal Processing*, **25**(8), 3135-3152.
- [5] Sakagami, T., & Kubo, S. (2002). Applications of pulse heating thermography and lock-in thermography to quantitative nondestructive evaluations. *Infrared Physics & Technology*, **43**(3-5), 211-218.
- [6] Sakagami, T., Izumi, Y., Shiozawa, D., Fujimoto, T., Mizokami, Y., & Hanai, T. (2016). Nondestructive evaluation of fatigue cracks in steel bridges based on thermoelastic stress measurement. *Procedia Structural Integrity*, **2**, 2132-2139.
- [7] Byon, O., & Nishi, Y. (1998). Damage identification of CFRP laminated cantilever beam by using neural network. In *Key Engineering Materials* (Vol. **141**, pp. 55-64). Trans Tech Publications Ltd.
- [8] Hasebe, S., Higuchi, R., Yokozeki, T., & Takeda, S. I. (2023). Multi-task learning application for predicting impact damage-related information using surface profiles of CFRP laminates. *Composites Science and Technology*, **231**, 109820.
- [9] Kojima, Y., Hirayama, K., Endo, K., Hiraide, K., & Muramatsu, M. (2022). Inverse estimation method for internal defects based on surface stress of carbon-fiber-reinforced plastics using machine learning. *Advanced Composite Materials*, 1-13.
- [10] Bengio, Y., Goodfellow, I., & Courville, A. (2017). *Deep learning* (Vol. **1**). Cambridge, MA, USA: MIT press.
- [11] 神島敏弘. (2010). 転移学習. *人工知能*, **25**(4), 572-580.
- [12] Krizhevsky, A., Sutskever, I., & Hinton, G. E. (2017). Imagenet classification with deep convolutional neural networks. *Communications of the ACM*, **60**(6), 84-90.
- [13] Zhuang, F., Qi, Z., Duan, K., Xi, D., Zhu, Y., Zhu, H., ... & He, Q. (2020). A comprehensive survey on transfer learning. *Proceedings of the IEEE*, **10**(1), 43-76.

Generating the human body structure of the corresponding anime character based on DiscoGAN

Liu Sihan¹⁾, Ryuji Shioya²⁾ and Yasushi Nakabayashi²⁾

1) Graduate School of Information Sciences and Arts, Toyo University (350-0815 2100 Kujirai Kawagoe Saitama,

E-mail: ishlauin@gmail.com)

2) Faculty of Information Sciences and Arts, Toyo University

With the popularity of social networking services and smartphones, photo processing applications have become widely used, and there is a growing interest in more advanced photo processing techniques. In the field of image generation, methods based on Generative Adversarial Networks (GANs) have shown particularly superb results. We discussed Generating the human body structure of the corresponding anime character based on GANs. This research is expected to be applied in the field of drawing that can be used as a tool to significantly reduce learning period or provide a new study method for drawing beginners.

Key Words: GANs, generating, body structure, anime character

1. INTRODUCTION

Over the past few years, many researchers have shown an interest in assisting painting based on deep learning. Even though there is much research have adopted the approach that fully automatic [1][2] and semi-automatic [3][4] supplementary methods, either method has little effect on efficiency or cost. The problem seems to lie in the fact that they always focus on colorization or directly generate a character and image. However, there has been little study done concerning how to help learners to draw a good sketch, and beginners always spend too much time and energy on learning how to draw a correct human body structure of character. In order to help beginners to gain more experience in less time, it is important to find a fully automatic way to human body structure extraction of anime characters. The main objective of this thesis is to build a model to automatically recognize the pose of the anime characters in the illustration, through this pose [5] to generate the corresponding human body structure and make sure they could get a correct reference rapidly.

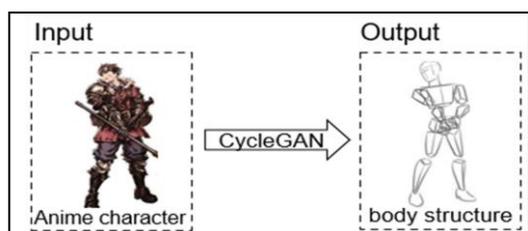


Fig. 1: The flow with using CycleGan

2. PURPOSE

Although the ultimate purpose of this research is to help

drawing beginners get a faster grasp on how to draw a correct anime style character's body structure, the current purpose is to find a way to quickly and accurately extract the specified style of body structure from anime characters, therefore, the flow assumed as Fig. 1. Meanwhile, most pioneer researchers generally believe that it is more valuable to keep the content in the original image unchanged and make changes to its style or translate it. And it is meaningless to research if the output results in random content. This view leads to less prior research on how to use deep learning models to modify the content of images, so how to control the output results within a certain range is one of the difficulties in this research.

3. MODEL

In this section, we propose a way how to convert an anime character image to a simple body structure image. The current dataset for this study was collected on the web, but unfortunately, we could not find a website that specifically stored images about anime style human body structures, which led to a difficult collection of paired datasets. While pix2pix [8] is very powerful in image generation and transformation, and the result is always satisfactory, it is not suitable for this study due to its high requirements on the training set (needs pairs of images). Unsupervised model CycleGan [9] does not use paired image datasets as shown in Fig.2, it for the most part solves the problem of difficult collection of data sets.

Although we will use an unpaired dataset in this research, the original CycleGan neural network will only change the style of the image, not the content of the image, so the loss function needs to be reset or changed to allow the model to modify the

content of the image. By changing the loss function and adjust the model to achieve the desired results.

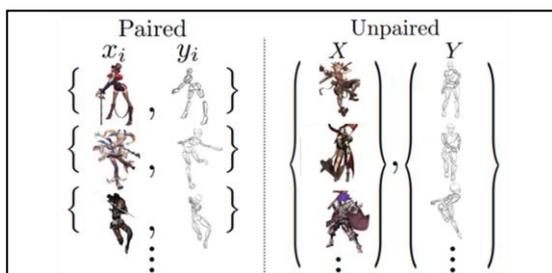


Fig. 2: Paired training data (left) consists of training examples $\{x_i, y_i\}$ $N_i=1$, where the y_i that corresponds to each x_i is given [9].

4. CYCLEGAN

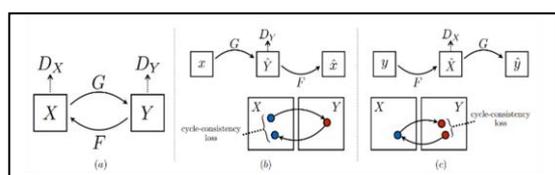


Fig. 3: The structure of CycleGan.

Fig. 3 shows the structure of CycleGan. (a) Our model contains two mapping functions $G: X \rightarrow Y$ and $F: Y \rightarrow X$, and associated adversarial discriminators D_Y and D_X . D_Y encourages G to translate X into outputs indistinguishable from domain Y , and vice versa for D_X , F , and X . To further regularize the mappings, we introduce two “cycle consistency losses” that capture the intuition that if we translate from one domain to the other and back again, we should arrive where we started: (b) forward cycle-consistency loss: $x \rightarrow G(x) \rightarrow F(G(x)) \approx x$, and (c) backward cycle-consistency loss: $y \rightarrow F(y) \rightarrow G(F(y)) \approx y$. We could clearly observe that CycleGan uses the loss function to improve the quality of the learning and generation results, and to maintain the shape and structure of the input images without changing, but only the style of the images. However, in our study, not only the style changes, but also the content of the images (shape and structure of the characters) changes, so the loss function needs to be changed or selectively removed to some extent.

5. DISCOGAN

DiscoGAN [11] (Discover Cross-Domain Relations with Generative Adversarial Networks), using the discovered relations, the network successfully transfers style from one domain to another while preserving key attributes such as orientation and face identity. Moreover, pairing images can become tricky if corresponding images are missing in one domain or there are multiple best candidates. Hence, the model constructs one step further by discovering relations between two visual domains without any explicitly paired data [12].

The model for relation discovery – DiscoGAN – couples the previously proposed model. Each of the two coupled models learns the mapping from one domain to another, and also the reverse mapping to for reconstruction [13]. The two models are trained together simultaneously. The two generators G_{BA} and the two generators G_{AB} share parameters, and the generated images x_{BA} and x_{AB} are each fed into separate discriminators L_{D_A} and L_{D_B} , respectively.

One key difference from the previous model is that input images from both domains are reconstructed and that there are two reconstruction losses: L_{CONST_A} and L_{CONST_B} .

$$L_G = L_{G_{AB}} + L_{G_{BA}} \quad (1)$$

$$= L_{GAN_B} + L_{CONST_A} + L_{GAN_A} + L_{CONST_B}$$

$$L_D = L_{D_A} + L_{D_B} \quad (2)$$

As a result of coupling two models, the total generator loss is the sum of GAN loss and reconstruction loss for each partial model (Equation 1). Similarly, the total discriminator loss L_D is a sum of discriminator loss for the two discriminators D_A and D_B , which discriminate real and fake images of domain A and domain B (Equation 2).

Now, this model is constrained by two L_{GAN} losses and two L_{CONST} losses. Therefore, a bijective mapping is achieved, and a one-to-one correspondence, which we defined as cross-domain relation, can be discovered.

6. EXPERIMENT

The color is a critical factor in matching the relationship between the two domains, and we also use the Otsu's method to process the anime character data.

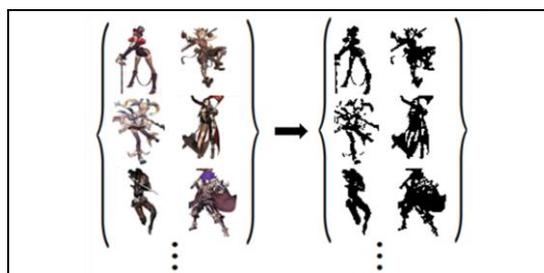


Fig. 4: Automatic image thresholding.

Fig. 4 demonstrates the results of image processing using the Otsu's method, named after Nobuyuki Otsu (Ōtsu Nobuyuki) [15], is used to perform automatic image thresholding. In the simplest form, the algorithm returns a single intensity threshold that separate pixels into two classes, foreground and background. This threshold is determined by minimizing intra-class intensity variance, or equivalently, by maximizing inter-class variance. Otsu's method is a one-dimensional discrete

analog of Fisher's Discriminant Analysis, is related to Jenks optimization method, and is equivalent to a globally optimal k-means performed on the intensity histogram. The extension to multi-level thresholding was described in the original paper, and computationally efficient implementations have since been proposed.

First, CycleGAN was used for training, and the results were obtained as shown in Fig. 5. Since the output results were almost unchanged except for the pixel values, we decided to remove the consistency loss function in order to change the results.

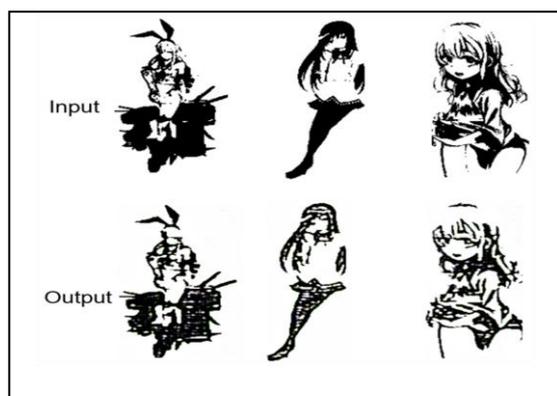


Fig. 5: Testing with CycleGAN

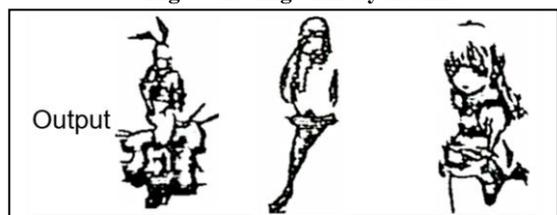


Fig. 6: Removing consistency loss

Removing the consistency loss function, the results are illustrated in Fig. 6, but still no more progress is achieved, therefore, we believe that CycleGAN is not applicable in this study. The next step will be to use DiscoGAN to re-train.

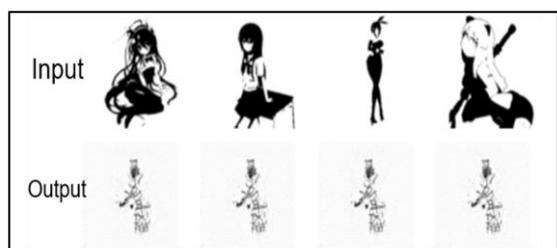


Fig. 7: Testing with DiscoGAN

We have made unprecedented progress, as shown in Fig. 7, where an image similar to the human body structure is demonstrated, although the human body structure is not clearly delineated between parts for the time being, but no longer as usual, with no change in the results.

7. CONCLUSION

We use the CycleGAN model, which not only makes the style of the image slice change, but no enables the content of the

image to be modified. CycleGAN is too obsessed with the retention of the content of the transformed images, and the results remain unchanged even after the removal of the consistency loss function. Compared with CycleGAN, DiscoGAN is more focused on discovering the connection between two domains. Therefore, in the subsequent research, DiscoGAN will be used for more far-reaching training, and we expect to get a better result, on which the model will be modified and adjusted to achieve an acceptable effect.

REFERENCES

- [1] Larsson G, Maire M, Shakhnarovich G. Learning representations for automatic colorization[C]//European conference on computer vision. Springer, Cham, 2016: 577-593.
- [2] Varga D, Szirányi T. Fully automatic image colorization based on Convolutional Neural Network[C]//2016 23rd International Conference on Pattern Recognition (ICPR). IEEE, 2016: 3691-3696.
- [3] Furusawa C, Hiroshiba K, Ogaki K, et al. Comicolorization: semi-automatic manga colorization [M]//SIGGRAPH Asia 2017 Technical Briefs. 2017: 1-4.
- [4] Jacob V G, Gupta S. Colorization of grayscale images and videos using a semiautomatic approach[C]//2009 16th IEEE International Conference on Image Processing (ICIP). IEEE, 2009: 1653-1656.
- [5] Toshev A, Szegedy C. Deeppose: Human pose estimation via deep neural networks [C] //Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2014: 1653-1660
- [6] P. Isola, J.-Y. Zhu, T. Zhou, and A. A. Efros. Image-to-image translation with conditional adversarial networks.In CVPR, 2017.
- [7] Zhu J Y, Park T, Isola P, et al. Unpaired image-to-image translation using cycle-consistent adversarial networks[C]//Proceedings of the IEEE international conference on computer vision. 2017: 2223-2232.
- [8] Kim T, Cha M, Kim H, et al. Learning to discover cross-domain relations with generative adversarial networks[C]//International conference on machine learning. PMLR, 2017: 1857-1865.
- [9] Kotecha D. Learning cross domain relations using deep learning[D]. Dhirubhai Ambani Institute of Information and Communication Technology, 2018.
- [10] Angsarawane T, Kijisirikul B. Generating images with desired properties using the DiscoGAN model enhanced with repeated property construction[C]//Proceedings of the International Conference on Advanced Information Science and System. 2019: 1-9
- [15]Otsu N. A threshold selection method from gray-level histograms[J]. IEEE transactions on systems, man, and cybernetics, 1979, 9(1): 62-66.

DPDシミュレーション用パラメータの 非経験的算定の機械学習による効率化

Improving Efficiency of Non-Empirical Calculation of Parameters
for DPD Simulation by Machine Learning

土居英男¹⁾, 松岡壮太²⁾, 奥脇弘次³⁾, 畑田峻²⁾,
南聡次朗⁴⁾, 栖原涼輔⁴⁾, 望月祐志^{5,6)}

Hideo Doi, Sota Matsuoka, Koji Okuwaki, Ryo Hatada,
Soujiro Minami, Ryosuke Suhara and Yuji Mochizuki

- 1) 博(理) 立教大学理学部化学科 助教 (〒171-8501 東京都豊島区 西池袋3丁目34-1, E-mail: hideo-doi@rikkyo.ac.jp)
- 2) 学(理) 立教大学理学部研究科化学専攻 大学院生 (〒171-8501 東京都豊島区 西池袋3丁目34-1)
- 3) 博(理) 立教大学理学部化学科 研究員 (〒171-8501 東京都豊島区 西池袋3丁目34-1)
- 4) 学(理) 立教大学理学部化学科 学部生 (〒171-8501 東京都豊島区 西池袋3丁目34-1)
- 5) 理博 立教大学理学部化学科 教授 (〒171-8501 東京都豊島区 西池袋3丁目34-1, E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp)
- 6) 理博 東京大学生産技術研究所 リサーチフェロー (〒153-8503 東京都目黒区駒場4-6-1)

In recent years, the demand for advanced materials development has increased in the field of materials science. Dissipative Particle Dynamics (DPD) simulations are used to study materials. However, these simulations require parameters that describe the interactions between DPD particles. Therefore, we sought to optimize the calculation of χ parameters for DPD simulations by machine learning.

Key Words : DPD, FMO, Machine Learning, Interaction energy, Chi parameter

1. はじめに

近年、マテリアルサイエンスや創薬の分野で高度な機能を有した材料開発の要求が高まっている。メゾスケールでの構造や振る舞いの予測・制御が重要であるためである。通常、メゾ構造の予測には散逸粒子動力学 (DPD) や粗視化分子動力学のシミュレーションを用いられるが、これらのシミュレーションの実行には分子や粒子同士の相互作用を表現するパラメータが必要である。これらのパラメータは実験データを元にフィッティングする[1, 2]か古典的な分子力学 (MM) にもとづいて算定[3]されることがほとんどであった。実験データは時間的、金銭的成本が高く、MMに基づく算定は力場と現実の齟齬が大きな問題となる。そこで、我々は、フラグメント分子軌道(FMO)計算に基づいて非経験的[4, 5]にDPDシミュレーションのためのパラメータを算定するソフトウェアFCEWS(FMO-based Chi parameter Evaluation Workflow System)[6, 7]を開発した。

FCEWSでは、分子をある程度の分子セグメントに分割し、その分子セグメント毎に数千構造の非経験的分子軌道法による相互作用エネルギーの計算を行う。この相互作用計算は分子セグメントのペア毎に行う必要があるため、非経験的分子軌道法を用いて相互作用計算を行っているため、多大な計算リソースと時間が必要である。

近年、機械学習の進歩により、相互作用計算を高速化するための新しい方法が開発されており、製薬で重要であるタンパク質とのバインディングエネルギーや毒性など広範な目的のために使用されている[8]。Chemielら、非経験的分子軌道法の結果などから機械学習を非経験的分子軌道法のシミュレーションの結果から分子動力学シミュレーションのためのポテンシャルを自動で生成し評価した[9]。また、Alibakhshiらは機械学習によって溶媒和自由エネルギーの予測精度を向上させた[10]。機械学習で部分電荷を予測する取り組みも行われている[11-13]。

そこで、我々は機械学習を用いてDPDシミュレーションのための χ パラメータの算定の効率化を試みた。

2. FCEWSにおける χ パラメータの算定

χ パラメータはFlory-Hugginsの格子理論で定義される粒子間の相互作用パラメータである。FCEWSでは、ある分子セグメント1と分子セグメント2の間の χ パラメータをどのように計算しているのかを手短かに説明する。詳しくは文献[7]を参照されたい。

$$\chi = \frac{(Z_{12}S_{12}E_{12} + Z_{21}S_{21}E_{21}) - (Z_{11}S_{11}E_{11} + Z_{22}S_{22}E_{22})}{RT} \quad (1)$$

ここで、配位数 Z_{12} は分子セグメント1を中心に配置した時、分子セグメント2を最大でいくつ配置できるかの変数である。スケーリングファクター S_{12} は系の異方性を表現するパラメータである。エネルギー E_{12} は分子セグメント1と分子セグメント2の平均的な相互作用エネルギーである。 E_{21}, E_{11}, E_{22} も同様である。エネルギー E_{12} は式(2)で計算する。

$$E_{12} = \frac{\sum E_i \exp(-E_i/RT)}{\sum \exp(-E_i/RT)} \quad (2)$$

エネルギー E_i は i 番目の分子セグメント1と分子セグメント2の二量体の相互作用エネルギーで、定数 R は気体定数であり、変数 T は温度である。通常、この時計算される二量体の個数は2000個である。スケーリングファクター S_{12} は以下のように計算する。ある分子セグメント1を原点に配置し、その周囲に標本点と呼ばれる点を6個配置する。座標は(1,0,0),(-1,0,0),(0,1,0),(0,-1,0),(0,0,1),(0,0,-1)をランダムに回転させた点である。分子セグメント1の周囲に分子セグメント2が配置され、ある i 番目の二量体の構造があり、分子セグメント2の中心から最近接の標本点を j ($j = 1, \dots, 6$)とすると、各標本点の重み W は式(3)で計算できる。

$$W_j = \sum \exp(-E_i/RT) \quad (3)$$

重み W_j は、空間を6分割し、ある空間に存在する分子セグメント1と2の間に存在する相互作用エネルギーのボルツマン因子の総和となっている。スケーリングファクター S_{12} は、式(4)で計算する。

$$S_{12} = \sum_{j=1}^6 \frac{W_j}{\text{Max}(W)} \quad (4)$$

このスケーリングファクターは、セグメント1が等方的に相互した場合は1に近くなり、特定の結合サイトと強く相互作用する場合は小さくなるような変数である。

上記で示したように、ある分子セグメントの組み合わせの二量体の相互作用エネルギーが計算、もしくは予測しさえできれば、 χ パラメータは計算が可能である。

3. 機械学習手法

本研究では、Scikit-learn (version 0.24.2) [14]に実装されているRandom Forest [15]を用いて回帰分析を行った。なお、今回はハイパーパラメータの最適化は行わず、max_depth (決定木のノード深さを)80, n_estimators (推定器の数)を50に、その他をデフォルトで分析を行った。

4. データセット

本研究では、ヘキサン-ニトロベンゼンの系を予測対象に選び、ヘキサン-ヘキサン(H-H)、ヘキサン-ニトロベンゼン(H-N)、ニトロベンゼン-ニトロベンゼン(N-N)の二量体の相互作用エネルギーの予測を試みた。

教師データとして、ABINIT-MP[16, 17]を使用し各分子の二量体をFMO-MP2/6-31G†レベルで計算し、モノマーのエネルギーとの差を相互作用エネルギーとした。各分子のモノマーの構造は、GAUSSIAN16[18]を用いてB97D/6-31G(d)レベルで最適化を行った。1つの分子の組み合わせ毎に2000構造の二量体構造を生成し、計6000構造の相互作用エネルギーを使用した。

記述子として、以下の5種類を用意した。1: クーロン相互作用 D_q を式(5)で計算した。モノマーのRESP電荷[19-21]を使用し、静電相互作用を計算した。RESP電荷はABINIT-MPを使用して算定した。

$$D_q = \sum \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (5)$$

変数 q_i, q_j は各分子における原子 i, j の電荷であり、距離 r_{ij} は原子 i, j 間の距離であり、定数 ϵ_0 は真空中の誘電率である。2: レナード-ジョーンズポテンシャルの記述子 D_{LJ} として、式(6)で計算を行った。力場として、GAFF [22], Gchemical [23], UFF [24]を使用し、計算は、OpenBabel [25]で行った。

$$D_{LJ} = \sum 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (6)$$

定数 σ, ϵ とともに、各力場での固有のパラメータである。3: 原子間距離の記述子 D_d として、各原子の種類毎に式(7)で計算を行った。

$$D_d = \sum \left(\frac{1}{r_{ij}} \right)^n \quad (7)$$

冪数 n として、{3,4,5,6,8,10,12}を使用し、原子種として、{H,C,O,N}を、原子種の組み合わせとして{H-H,H-C,H-N,H-O,...,O-O}を使用した。4: 各二量体構造における、各分子の幾何中心間の距離を記述子 D_c として使用した。5: 原子種の組み合わせごとの最近接原子間距離の記述子として D_n を使用した。

5. 結果と考察

χ パラメータの算出に必要なのは相互作用エネルギーのみである。そこで本研究では、相互作用エネルギーの予測に必要なFMO計算の回数と、その時の予測精度を調査した。事前に2000回のFMO計算を行い、そのうち学習に

使用するデータ数を250, 500, 1000, 1500と変化させ、二量体の相互作用エネルギー予測を行った。予測の精度評価は5-fold cross validationでの R^2 を使用し、また学習に使用しなかったデータも Q^2 で評価した。結果を表-1に示した。

全体的に、データ数が多くなるにつれて予測精度が高くなっていった。また、予測精度は分子の組み合わせの影響を大きく受け、非極性分子であるHexaneペア(H-H)の予測精度はデータ個数が250程度であっても R^2 が0.94程度と高い精度だったが、極性分子であるNitrobenzeneを含むペア(H-N, N-N)での予測精度はどちらも低く、データ個数を1500まで上げて0.90程度であった。データ個数を250から1500にしたところ、どの分子ペアでもMAEは概ね2/3程度の予測精度向上が見られた。学習データでの R^2 と非学習データの Q^2 を比較した結果、両者はほとんど同じであり過学習などは起こっていないと思われた。図-1に、N-Nでの1500個のデータを使用しての学習結果におけるテストデータの散布図を示す。

表-1 各分子ペアでの予測精度に対する学習データの数の影響 (a) 学習データでの R^2 の値

(b) 非学習データでの Q^2 の値

(a)

	250	500	1000	1500
H-H	0.941	0.963	0.971	0.976
H-N	0.834	0.864	0.903	0.907
N-N	0.841	0.873	0.913	0.917

(b)

	250	500	1000	1500
H-H	0.953	0.959	0.965	0.968
H-N	0.857	0.870	0.881	0.889
N-N	0.859	0.867	0.883	0.893

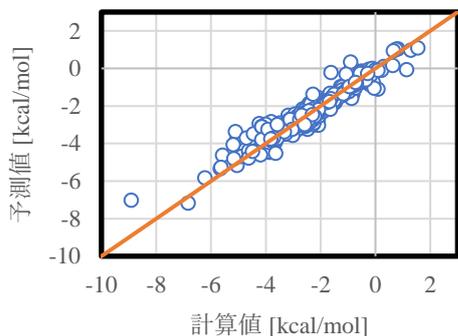


図-1 N-Nにおける計算値と予測値の散布図

次に、上記で予測した個々の相互作用エネルギーを使用して、平均相互作用エネルギー E_{ij} を計算し、学習数別で比較した。なお、平均相互作用エネルギーを計算する時の温度として300 Kを設定した。結果を表-2に示す。

表-2 300 Kでの平均相互作用エネルギー E_{ij} の予測精度に対する学習データの数の影響

	250	500	1000	1500	2000
H-H	-1.48	-1.48	-1.48	-1.49	-1.50
H-N	-2.85	-3.22	-3.40	-3.48	-3.73
N-N	-4.74	-5.88	-6.98	-7.85	-8.06

全ての分子の組み合わせで、予測値は2000構造で計算された値よりも高い値が算出された。また、学習データを増やすと誤差は減少した。H-Hでは、250構造を使用しての予測値は-1.48と計算値の-1.50とほぼ同じだったが、H-N, N-Nでは、予測値と計算値の差は非常に大きかった。平均相互作用エネルギーを計算する時のボルツマン因子は、エネルギーが低いほど重みが大きくなり、数値に与える影響が大きいため、相互作用エネルギーが低い場合、平均エネルギーに対して大きな影響を与える。しかし、そのような構造は数が少ない。特に、H-N, N-Nの組み合わせのように、極性分子が存在し、分子が特定の配置の場合、安定な相互作用エネルギーが計算されており、そのため、教師データが不足しており、機械学習による予測が難しく、このような結果になったと考えられる。

次に相互作用エネルギーの予測値のスケーリングファクター S_{ij} への影響を調べた。結果を表-3に示す。こちらも、平均相互作用エネルギーの場合と同様で、スケーリングファクターの誤差は非常に大きかった。

表-3 300 Kでのスケーリングファクター S_{ij} の予測精度に対する学習データの数の影響

	250	500	1000	1500	2000
H-H	0.79	0.78	0.78	0.78	0.78
H-N	0.72	0.62	0.62	0.59	0.54
N-H	0.54	0.49	0.50	0.48	0.44
N-N	0.50	0.45	0.40	0.34	0.33

表-4 300 Kで算定された χ パラメータの予測精度に対する学習データの数の影響

	250	500	1000	1500	2000
χ	1.1	3.3	2.5	1.3	2.0

次に相互作用エネルギー E_{ij} とスケーリングファクター S_{ij} を使用して χ パラメータを計算し、機械学習の予測値と実際の計算値との比較を行った。結果を表-4に示す。なお、このヘキサン-ニトロベンゼンの系は、293 K付近で χ パラメータが2.0になることが実験的にわかっており[1]、300 Kで約2.0になることがわかっている。予測値を使用した場合、データ数に関係なく誤差が大きくなった。全体の内の75%の構造である1500個の構造の相互作用エネルギーをFMO計算していたとしても、予測した χ パラメータにおける誤差が非常に大きく、予測値なしで計算した2.0とは大きく異なっていた。これは、DPDシミュレーションに

使用するための χ パラメータとして不適切な水準であった。全体の内、25%である500個の構造の相互作用エネルギーに予測値を使用するだけで χ パラメータに大きな影響を与えるということは、素朴なアプローチだけでは、機械学習の予測値を使用することができないことを意味し、何か他のアプローチを取る必要があることが明らかになった。一方で、このような機械学習を利用し、 χ パラメータの予測を行うことが可能であることを示せた意義は大きく、今後の進歩が望まれる結果となった。

6. 謝辞

本研究は、立教SFRRから支援を受けました。また、本研究開発にあたり、JSOL(株)の小沢拓氏との情報交換・議論が有益であることを記します。

参考文献

- [1] Drozd-Rzoska, A. et al.: Liquid-liquid phase equilibria in nitrobenzene-hexane critical mixture under negative pressure. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Vol.6, pp. 2291-2294, 2004.
- [2] Polymer Property Predictor and Database (<https://pppdb.uchicago.edu/chi>)
- [3] Fan, C.F. et al.: Application of molecular simulation to derive phase diagrams of binary mixtures. *Macromolecules*, Vol.25, pp. 3667-3676, 1992.
- [4] "The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems", ed. D.G. Fedorov and K. Kitaura, CRC Press (2009).
- [5] "Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method - Enhanced Performance and Applicability", ed. Y. Mochizuki, S. Tanaka and K. Fukuzawa, Springer (2021).
- [6] Okuwaki, K. et al.: An automated framework to evaluate effective interaction parameters for dissipative particle dynamics simulations based on the fragment molecular orbital (FMO) method. *J. Comput. Chem. Jpn.*, Vol.17, pp. 102-109, 2018.
- [7] 奥脇弘次, 土居英男, 望月裕志 : フラグメント分子軌道(FMO)法を用いた散逸粒子動力学シミュレーションのための有効相互作用パラメータ算出の自動化フレームワーク. *J. Comput. Chem. Jpn.*, Vol.17, pp. 102-109, 2018.
- [8] Wu, Z. et al.: MoleculeNet: a benchmark for molecular machine learning. *Chem. Sci.*, Vol.9, pp. 513-530, 2018.
- [9] Chmiela, S. et al.: Towards exact molecular dynamics simulations with machine-learned force fields. *Nat. Commun.*, Vol.9, pp. 3887, 2018.
- [10] Alibakhshi, A., Hartke, B.: Improved prediction of solvation free energies by machine-learning polarizable continuum solvation model. *Nat. Commun.*, Vol.12, pp. 3584, 2021.
- [11] Bleiziffer, P. et al.: Machine learning of partial charges derived from high-quality quantum-mechanical calculations. *J. Chem. Inf. Model.*, Vol.58, pp. 579-590, 2018.
- [12] Kato, K. et al.: High-precision atomic charge prediction for protein systems using fragment molecular orbital calculation and machine learning. *J. Chem. Inf. Model.*, Vol.60, pp. 3361-3368, 2020
- [13] Doi, H. et al.: Screening toward the Development of Fingerprints of Atomic Environments Using Bond-Orientational Order Parameters. *ACS Omega*, Vol.7, pp. 4606-4613, 2022.
- [14] Pedregosa, F. et al.: Scikit-learn: Machine Learning in Python. *J. Mach. Learn. Res.*, Vol.12, pp.2825-2830, 2011.
- [15] Breiman, L.: Random Forests. *Mach. Learn.*, Vol.45, pp. 5-32, 2001.
- [16] Tanaka, S. et al.: Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Vol.16, pp. 10310-10344, 2014.
- [17] Y. Mochizuki et al., "The ABINIT-MP Program" in Ref. [5], pp. 53-67.
- [18] Frisch, M.J. et al.: *Gaussian16 Revision B.01*. 2016.
- [19] Cornell, W.D. et al.: Application of RESP charges to calculate conformational energies, hydrogen bond energies, and free energies of solvation. *J. Am. Chem. Soc.*, Vol.115, pp. 9620-9631, 1993.
- [20] Okiyama, Y. et al.: Application of the fragment molecular orbital method for determination of atomic charges on polypeptides. *Chem. Phys. Lett.*, Vol.449, pp. 329-335, 2007.
- [21] Okiyama, Y. et al.: Application of the fragment molecular orbital method for determination of atomic charges on polypeptides. II. Towards an improvement of force fields used for classical molecular dynamics simulations. *Chem. Phys. Lett.*, Vol.467, pp. 417-423, 2009.
- [22] Wang, J. et al.: Development and testing of a general amber force field. *J. Comput. Chem.*, Vol.25, pp. 1157-1174, 2004.
- [23] Hassinen, T., Peräkylä, M.: New energy terms for reduced protein models implemented in an off-lattice force field. *J. Comput. Chem.*, Vol.22, pp. 1229-1242, 2001.
- [24] Rappe, A.K. et al.: UFF, a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations. *J. Am. Chem. Soc.*, Vol.114, pp. 10024-10035, 1992.
- [25] O'Boyle, N.M. et al.: Open Babel: An open chemical toolbox. *J. Cheminform.*, Vol.3, pp. 33, 2011.

11:15 AM - 11:30 AM (Fri. Jun 2, 2023 10:30 AM - 11:45 AM Room A)

[A-11-04] 物理現象の性質を導入した機械学習モデルによる輸送現象の学習

*堀江 正信^{1,2}、三目 直登³ (1. 株式会社R I C O S、2. JSTさきがけ、3. 筑波大学)

深層学習を用いた応力場予測に関するデータ拡張手法

Data augmentation method for stress field prediction using deep learning

豊吉巧也¹⁾

Takuya Toyoshi

1) 博(工) 愛知工科大学 工学部 機械システム工学科 准教授

(〒443-0047 愛知県蒲郡市西迫町馬乗50-2, E-mail: takuya.toyoshi@g.aut.ac.jp)

Data augmentation is generally used to improve prediction accuracy, and four arithmetic operations or random noise addition are performed on the original learning data. This paper proposes an effective data augmentation method for deep learning to predict analysis results, such as the finite element method. This method focuses on the appearance probability of learning data and aims to improve prediction accuracy efficiency. As a result of examining the prediction of the stress distribution of the 2-dimensional finite element analysis result, the effectiveness of the method was shown.

Key Words : Deep learning, Data augmentation, Finite Element Method, Stress Field Prediction

1. はじめに

畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional neural network, CNN) や[1,2]グラフニューラルネットワーク (Graph neural networks, GNNs) [3]などを用いた、有限要素法などによる数値解析結果を、深層学習技術を用いて予測する研究が、近年数多く報告されている。これらは、ある一定数の学習データを学習し、深層学習モデル (以下、学習モデル) を生成する。この学習モデルの予測精度を向上させるためには、学習データの拡張 (以下、データ拡張) は有効な手段の一つである。CNNにおいて、入力として画像を使う場合では、画像の反転、拡大縮小、回転、ノイズ付与などがデータ拡張手法として用いられる。一方で、数値解析結果の予測においては、入力および出力が数値となるため、ノイズ付与によるデータ拡張が考えられる。このような場合、平均値が元の値となるようにノイズを付与する必要があることに加え、許容される範囲についても慎重な検討が必要である。

本稿では、学習データの出現確率に着目したデータ拡張手法を提案する。2次元の有限要素解析結果の応力場の予測を対象に、提案手法の有効性について検討した。

2. 解析および予測対象

応力場の予測に用いる学習データとなる、有限要素法による解析条件を図1に示す。解析対象は幅50 mmの平板に12.5 mmの円孔を有する厚さ2mmの平板とし、対称の境界条件より1/4モデルでの解析を行なった。四角形二次要素を用いて解析を行い、解析によって得られた節点応力 (σ_{yy}) を学習する。解析に用いた要素数および節点数はそれぞれ、900, 2821である。学習データ量の削減のため、学習には中間節点以外の節点の値を用いるため、1つ

の解析で学習に用いる節点数は961となる。荷重 P は1 kNごとに、1 kN~10 kNの10ケースの解析を行い、すべての値がゼロとなる0 kNの全11ケースのデータを用意した。

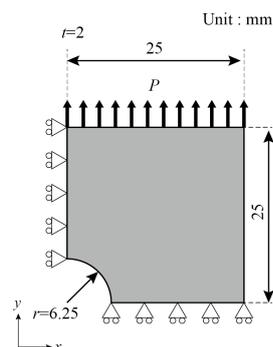


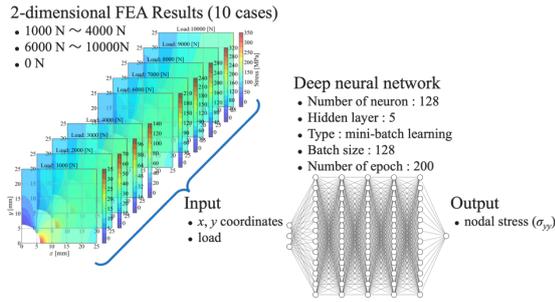
図-1 学習データとして用いる解析対象および条件

3. 深層学習モデルとデータ拡張

前述の有限要素解析結果から、5 kNの結果を除く10ケースのデータを用いて学習モデルを生成し、5 kNの結果を予測対象とした。学習モデルの生成および応力場予測の概要を、図2に示す。学習モデルの入力は節点の x, y 座標と荷重 P とし、出力を節点応力 σ_{yy} とした。また、学習モデルは表1に示す構成とし、Pytorchにより実装した。最適化関数にはAdam、損失関数には平均二乗誤差 (MSELoss)、活性化関数にはSiLUを用いた。

学習モデルの生成には、すべての学習データ (全サンプル) から、ランダムに抽出したデータを用いて学習を行う、ミニバッチ学習を用いた。ここで、ランダムに抽出するデータ数をミニバッチサイズ n とよび、ミニバッチサイズは128とした。また、全サンプルの1回の学習を終えることを1エポックとよび、エポック数の上限は200とした。

Network learning



Stress field prediction

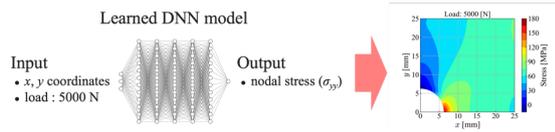


図-2 深層学習モデルの生成と応力場予測の概要

表-1 深層学習モデルの構成

Layer	Layer (type)	Input size	Output size
1	Input	3	3×128
2	Fully connected	128×128	128×128
3	Activation (SiLU)	128×128	128×128
4	Fully connected	128×128	128×128
5	Activation (SiLU)	128×128	128×128
6	Fully connected	128×128	128×128
7	Activation (SiLU)	128×128	128×128
8	Fully connected	128×128	128×128
9	Activation (SiLU)	128×128	128×128
10	Fully connected	128×128	128×128
11	Output	128×128	1

予測対象となる出力の節点応力 σ_{yy} は、学習時に0.0~1.0の範囲で正規化を行う。正規化された節点応力について、階級数を10（階級の幅を0.1）としたときの確率分布を図3に示す。学習データ全体において応力の値が低い節点の出現確率が高く、高い節点の出現確率が低い分布となり、出点確率に極端な偏りがあることが図3より確認できる。このような場合、ノイズを付与するデータ拡張では、予測精度の向上が困難であることが予想できる。

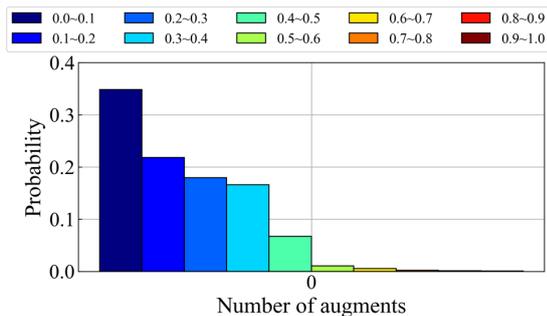


図-3 データ拡張前の確率分布

ここでデータ拡張として、各階級のデータの出現確率 P_r が、どの階級においても近い値となるような P'_r となるように、式(1)を使いデータを拡張する。拡張するデータ数は、1回の拡張において、拡張するデータと同数とする。そのため、拡張数を n とすると、拡張後のデータ数は、最初のデータ数 $\times 2^n$ となる。この手法に基づいて、データを4回拡張（以降、拡張数4とよぶ、データ数は元のデータ数の 2^4 倍）したときの各拡張時の各区間の出現確率の変化を図4に示す。図4より、各階級のデータの出現確率が0.1に近づいていることが確認できる。

$$P'_r = \frac{1/P_r}{n_{bins} - 1} \quad (1)$$

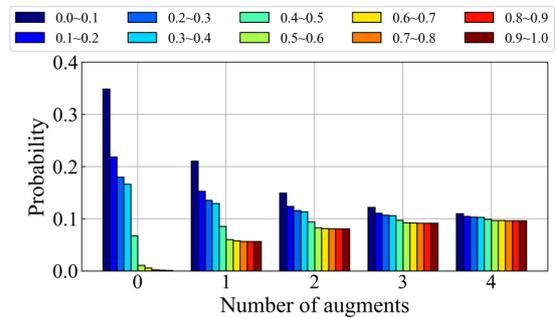


図-4 データ拡張ごとの確率分布

4. 結果

(1) 拡張されたデータを用いた学習について

拡張前の学習データを拡張数0とし、拡張数1~4の学習データを用いて学習モデルをそれぞれ生成した。各拡張数での学習における損失値の推移を、図5に示す。

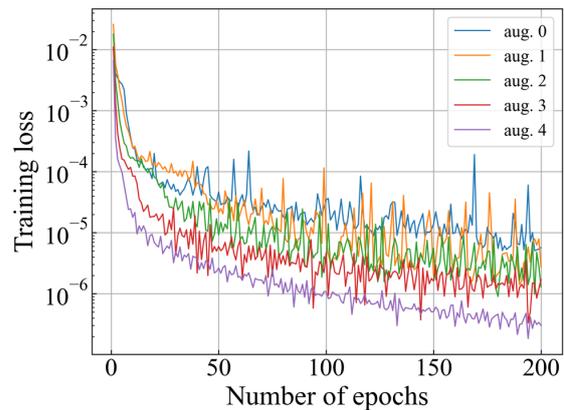


図-5 各拡張数での損失値の推移

すべての学習において、損失値が減少後に増大するような過学習の傾向は確認されなかった。拡張数0や1dでは、損失値がスパイク状に高い値を示すことが確認できるが、拡張数が大きくなるに従い、それらが低減していること

が確認できる。

次に、拡張数0～4の学習モデルによる予測精度を図6に示す。どの拡張数においても、エポック数が増えるに従い、予測精度が向上していることが確認できる。拡張数1では、学習開始時の正解率は拡張数0に比べて低い値を示すが、エポック数が3を超えると精度は逆転することが確認できる。拡張数4では、学習開始時から90%を超える予測精度で学習が進んでいることが確認できる。これらの結果から、深層学習における予測精度は学習データの出現確率に影響を受けることが確認され、本提案手法によるデータ拡張が学習に対して有効であることが確認された。

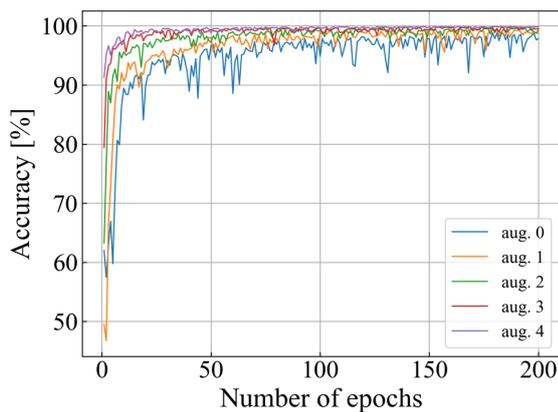


図-6 学習時の正解率の推移

(2) 応力場の予測結果について

拡張数0～4の学習モデルにより、荷重 $P=5\text{kN}$ の応力場を予測したときの予測誤差の最大値と最小値を図7に示す。予測誤差の最小値は $10^{-2} \sim 10^{-4}$ オーダーであり、データ拡張による大きな変化は確認されなかった。一方、予測誤差の最大値は、データの拡張数に応じて低減することが確認された。5kNの予測結果に対して、拡張数3以降では最大予測誤差が1MPaを下回ることが確認され、全体的にも拡張数が大きくなるにつれ最大予測誤差が低下していることが確認できる。

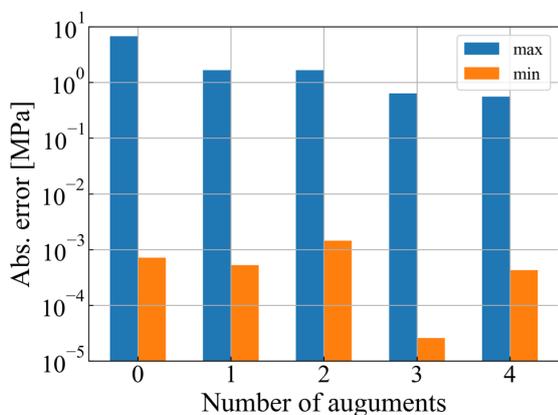


図-7 各拡張数での予測誤差

拡張数4の学習モデルによる応力場の予測結果を図8に示す。応力場の予測誤差の最大値および最小値はそれぞれ0.554 MPa, 4.270×10^{-4} MPaであった。

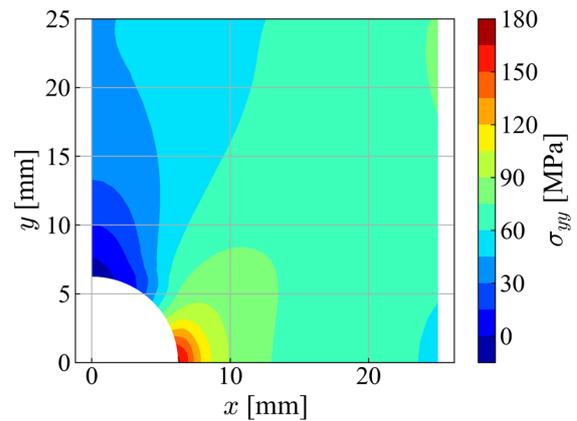


図-8 応力場の予測結果 (拡張数4)

5. さいごに

本稿では、応力場のような数値解析結果を、深層学習を用いて予測する際の、予測精度向上に向けたデータ拡張手法を提案し、その有効性について検討した。提案手法により学習時の損失値が効率よく低下することが確認された。また、少ないエポック数でも高い予測精度を示すことが確認された。

学習データに含まれない応力場の予測は、提案したデータ拡張により、1 MPa以下の予測誤差で応力場を予測することが可能であることが確認された。これらの結果から、本提案手法のようなデータの出現確率を一定に近づけるデータ拡張手法は、数値解析解を深層学習によって予測する場合に有効であることがいえる。

本稿でのデータ拡張手法は、異なる事象への応用も視野に含め、シンプルとなるよう提案しているため、幅広く利用されることが期待できる。

参考文献

- [1] 豊吉巧也, 小澤暦世, 泰地隆平, 和田義孝: 畳み込みニューラルネットワークを用いた疲労き裂進展の予測 (第1報 単一のななめき裂に対する予測), 日本機械学会論文集, Vol.88, No.915, 12pages, 2022.
- [2] Nie, Z., Jiang, H. and Kara, L. B.: Stress field prediction in cantilevered structures using convolutional neural networks, J. Comput. Inf. Sci. Eng., Vol.20, No.1, 8pages, 2022.
- [3] Maurizi, M., Gao, C. and Berto, F.: Predicting stress, strain and deformation fields in materials and structures with graph neural networks, Scientific Reports, Vol.12, No.21834, 12pages, 2022.

OS09 深層学習、機械学習と計算工学

[A-12] OS09 深層学習、機械学習と計算工学 (3)

座長:和田 義孝(近畿大学)

Fri. Jun 2, 2023 1:15 PM - 2:45 PM Room A (1F Conference Room 101)

[A-12-01] (キーノート講演)熱力学法則に基づく深層学習による材料構成則の検討

*山下 拓三¹ (1. 防災科学技術研究所)

1:15 PM - 1:45 PM

[A-12-02] PINNsによる2次元静磁場問題解析の基礎的検討

*荻野 正雄¹ (1. 大同大学)

1:45 PM - 2:00 PM

[A-12-03] ナイーブベイズフィルタによるコンクリート表面画像のひび割れ抽出法

*芦田 拓海¹、車谷 麻緒¹ (1. 茨城大学)

2:00 PM - 2:15 PM

[A-12-04] 決定木ベースのマルチタスクラーニングを用いた複合材料の衝突損傷と残留圧縮強度予測

*長谷部 早紀¹、樋口 諒¹、横関 智弘¹、武田 真一² (1. 東京大学、2. 宇宙航空研究開発機構)

2:15 PM - 2:30 PM

[A-12-05] 機械学習による高強度・高延性を示す最適な Dual Phase鋼材料組織の探索

*鈴木 美智¹、志澤 一之¹、村松 真由¹ (1. 慶應義塾大学)

2:30 PM - 2:45 PM

熱力学法則に基づく深層学習による材料構成則の検討

Investigation of material constitutive model by using deep neural networks based on thermodynamics

山下拓三¹⁾
Takuzo Yamashita

¹⁾博(工)防災科学技術研究所 主任研究員 (〒 305-0006 茨城県つくば市天王台 3-1)

The author aims to construct a unified framework of material constitutive models by deep learning based on thermodynamic. In this study, a simplified modeling of the elastic-plastic model with a von Mises-type isotropic hardening law was attempted. First, the Helmholtz free energy was trained using data from the elastic analysis, and then the neural network that outputs the increment of plastic strain was trained using data from the elasto-plastic analysis. By using this trained model, the stress-strain relationship of the elasto-plastic constitutive law was successfully reproduced.

Key Words : Constitutive Model, Machine Learning, Artificial Neural Network, Thermodynamics

1. はじめに

防災科研では、地震による構造物の損傷・破壊現象をソリッド要素を用いた詳細有限要素法 (FEM) によって精緻に予測する数値シミュレーションシステム (数値震動台) を開発してきた。

鋼構造, RC 造, 木造等の様々な構造形式の構造物を、免震, 制振デバイス, 各種非構造部材, 地盤まで含めて、まるごと解析するためには、様々な材料に対して材料構成則を準備する必要がある。それぞれの材料に対して科学的知見の蓄積により現象を深く理解してモデル化することが、高精度な構成則を開発するために重要である。しかし、考案したモデルを構造解析プログラムに実装するには、数値計算技術に対する高い専門性が必要であり、多様な材料の高精度なモデルを網羅的に開発するには膨大な開発コストが見込まれる。そこで、筆者は構造解析プログラムへの実装を容易にする弾塑性損傷構成則の統一的なモデル化フレームワークの開発を目指している。

Kirchdoerfer and Ortiz[1] は、材料構成則をモデル化せず材料実験のデータと数値解析を直接つなぐ「データ駆動型計算力学」のアイデアを提案している。また、ニューラルネットワークによる材料構成則をモデル化の研究は多くなされている [2]。しかし、これら帰納的なアプローチのみでは、大規模なデータの必要性や外挿能力, 汎化能力といった点で問題がある。これらの問題に対処するため、材料に共通する物理法則を利用することが考えられる。物理法則と機械学習を融合した手法として Physics-Informed Learning の研究が注目されている [3]。Raissi らはニューラルネットワークの自動微分の機能を利用して偏微分方程式をネットワークに導入した Physics-Informed Neural Network(PINN) でシミュレーションを代理する手法を開発している [4]。

本研究では熱力学法則に整合するニューラルネットワークによる材料構成則の統一的なモデル化フレームワーク構築を目指して、von-Mises 型等方硬化則の弾塑

性構成則を対象とした簡易的なモデル化を試行する。

2. 提案手法

本節では、まず構想している材料構成則のフレームワークについて説明し、本報で試行する簡易的なモデルについて説明する。

(1) 構想する材料構成則のフレームワーク

熱力学第 2 法則から、弾性構成則と一般化流速 $J = \{\dot{\epsilon}^p, \dot{V}_k\}$ の以下の発展式が導かれる。

$$\sigma = \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \epsilon^e} \quad (1)$$

$$\dot{\epsilon}^p = \dot{\Lambda} \frac{\partial F}{\partial \sigma} \quad (2)$$

$$\dot{V}_k = \dot{\Lambda} \frac{\partial F}{\partial A_k} \quad (3)$$

ここに、 σ は応力、 ρ は質量密度、 φ は Helmholtz の自由エネルギー関数、 ϵ^e は弾性ひずみ、 Λ は正の未定スカラー乗数、 F は散逸ポテンシャル関数、 $\dot{\epsilon}^p$ は塑性ひずみ速度、 \dot{V}_k は選択した内部変数の変化率で、 A_k はその同伴な変数である。対象とする材料によって選択すべき内部変数 \dot{V}_k は異なってくるが、本提案では内部変数の選択後の統一的なモデル化を考えている。

Helmholtz の自由エネルギーの関数の具体的な例として次式が考えられる。

$$\varphi(\epsilon^e, \mathbf{D}, r, \beta) = \varphi^e(\epsilon^e, \mathbf{D}) + \varphi^p(r) + \varphi^d(\beta) \quad (4)$$

ここに、 φ^e , φ^p , φ^d はそれぞれ弾性変形, 塑性変形, 損傷による自由エネルギーで、 \mathbf{D} は損傷変数、 r は等方硬化の内部変数、 β は損傷強化の内部変数である。

この時、一般化力は以下のように求まる。

$$\sigma = \frac{\partial(\rho\varphi^e)}{\partial\epsilon^e} \quad (5)$$

$$Y = \frac{\partial(\rho\varphi^e)}{\partial D} \quad (6)$$

$$R = \frac{\partial(\rho\varphi^p)}{\partial\beta} \quad (7)$$

$$B = \frac{\partial(\rho\varphi^d)}{\partial\beta} \quad (8)$$

散逸ポテンシャル関数の具体的な例として次式が考えられる。

$$F(\sigma, Y, R, B; D) = F^p(\sigma, R; D) + F^d(Y, B) \quad (9)$$

ここに、 F^p 、 F^d はそれぞれ塑性散逸と損傷散逸ポテンシャルである。この時、一般化流速は以下のように求まる。

$$\dot{\epsilon}^p = \dot{\Lambda}^p \frac{\partial F^p}{\partial \sigma} \quad (10)$$

$$\dot{t} = \dot{\Lambda}^p \frac{\partial F^p}{\partial (-R)} \quad (11)$$

$$\dot{D} = \dot{\Lambda}^d \frac{\partial F^d}{\partial Y} \quad (12)$$

$$\dot{\beta} = \dot{\Lambda}^d \frac{\partial F^d}{\partial (-B)} \quad (13)$$

Masi らは、本提案と同様に熱力学理論を導入したニューラルネットワークによる弾塑性構成則を開発している [5]。Masi らの手法では内部変数も教師データとして学習している。しかし、対象となる材料によって内部変数の選択は様々であり、モデル化を統一化するためには訓練データ（入力データと教師データ）はあらゆる材料で必須となるひずみと応力（または、それらの増分）のみにすることが望まれる。

本提案では、一般化力と一般化流速の関係式を取り込んだ図-1 のようなネットワークで材料構成則をモデル化することを目指す。青色で示す全ひずみが入力データで、桃色で示す応力が教師データである。赤矢印で示すように、それぞれの自由エネルギー関数と散逸ポテンシャル関数はニューラルネットワークでモデル化する。青矢印で示すように、自動微分により自由エネルギーと散逸ポテンシャルを偏微分することにより、一般化力と一般化流速を求める。緑色の内部変数はネットワークの計算の中で求まるもので、これらの内部変数の教師データは必要としない。

(2) 簡易的な材料構成則のモデル

最終的に目指すモデル化では複数のニューラルネットワークが含まれた複雑なネットワーク構造をしている。そこで、まずは von Mises 型の等方硬化則の材料構成則を対象として図-2 に示す簡易的なモデル化を試行する。塑性ひずみ増分については、散逸ポテンシャル

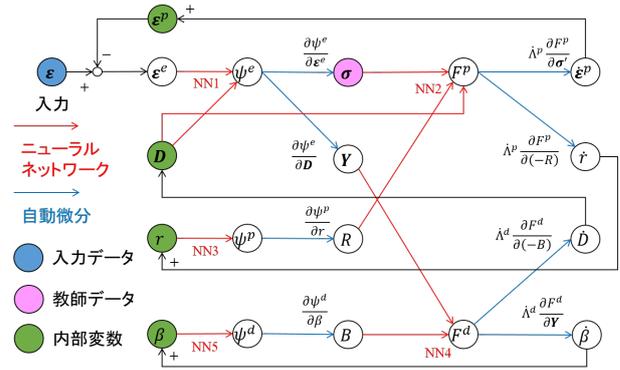


図-1 最終的に目指す材料構成則のモデル

をニューラルネットワークでモデル化してそれを応力で偏微分して求めるのではなく、ニューラルネットワーク NN_{ϵ_p} の出力として求めることとした。応力については、Helmholtz の自由エネルギー関数をニューラルネットワーク NN_{φ_e} でモデル化してそれを弾性ひずみで偏微分して求めることとした。

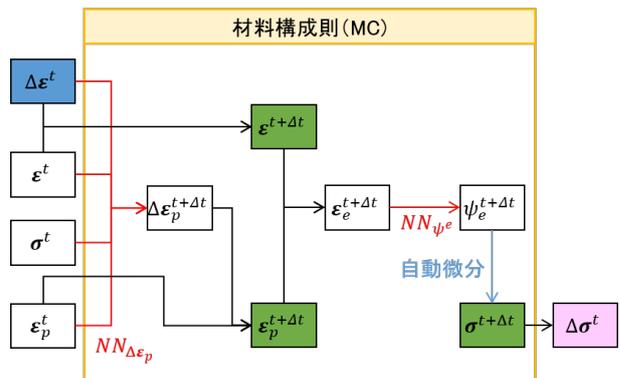


図-2 簡易的な材料構成則のモデル

この材料構成則を用いて、図-3 に示すように、ひずみ、応力、塑性ひずみの初期値と $t = 0$ から $t = T$ までのひずみ増分の時系列データを入力して、 $t = 0$ から $t = T$ までの応力増分の時系列データを予測する。

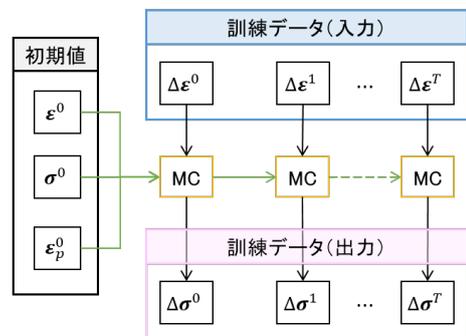


図-3 時系列予測の構造

$NN_{\Delta\epsilon_p}$ のネットワーク構造について、入力層はひず

み増分 $\Delta \epsilon$, ひずみ ϵ , 応力 σ , 塑性ひずみ ϵ_p を最大値, 最小値で正規化したものであり, その次元は 24 次元である. 中間層は 2 層としてそれぞれの次元を 48 次元とした. 出力層は応力増分でありその次元は 6 次元である. 活性化関数には ReLU を用いて, 3 層目と 4 層目の間では活性化関数は用いなかった.

3. 訓練データと検証データの生成

図-4 に解析モデルと境界条件を示す. 解析モデルは 1 辺 10mm の立方体の形状で 1 要素 (C3D8R) のモデルである. 境界条件は負側の Z 面を固定し, 正側の Z 面に強制変位を加える.

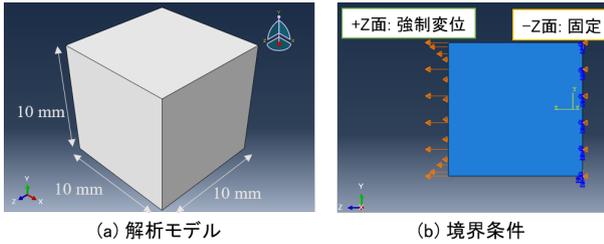


図-4 解析モデルと境界条件

荷重の種類は軸方向荷重, せん断 1 方向荷重, せん断 2 方向荷重, 軸方向とせん断 1 方向荷重, 軸方向とせん断 2 方向荷重の 5 種類である. 各荷重方法で生成するサンプル数を表-1 に示す. 強制変位の荷重履歴は, 図-5 に示す方法に従って生成する.

表-1 データセットのサンプル数

荷重方法	サンプル数
軸方向荷重	100
せん断 1 方向荷重	100
せん断 2 方向荷重	200
軸方向とせん断 1 方向荷重	200
軸方向とせん断 2 方向荷重	400

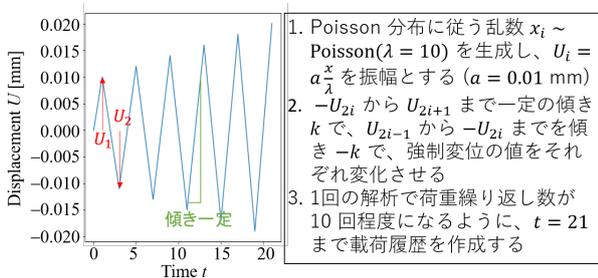


図-5 荷重履歴の生成方法

材料について, 弾性材料と von-Mises 型の等方硬化則の弾塑性材料の 2 種類それぞれで, 表-1 に示すデータセットを作成する. 材料パラメータを表-2 に示す.

表-2 材料パラメータ

ヤング率 E [MPa]	205000
ポアソン比 [-]	0.3
初期降伏応力 σ_0 [MPa]	235
硬化係数 H [MPa]	205(= $E/1000$)

FEM には Abaqus を用いて, 時間刻みを 0.01 として弾性解析と弾塑性解析を実行した.

弾塑性解析で生成した各荷重の種類でのデータセットについて, 塑性化している時間の割合のヒストグラムを図-6 に示す. いずれの荷重の種類でも生成されたデータセットの全てのサンプルで塑性化しており, 塑性化している時間の割合も幅広く分布している. 弾塑性解析での応力ひずみ関係の一例を図-7 に示す. いずれの荷重の種類でも塑性化による履歴ループが確認できる.

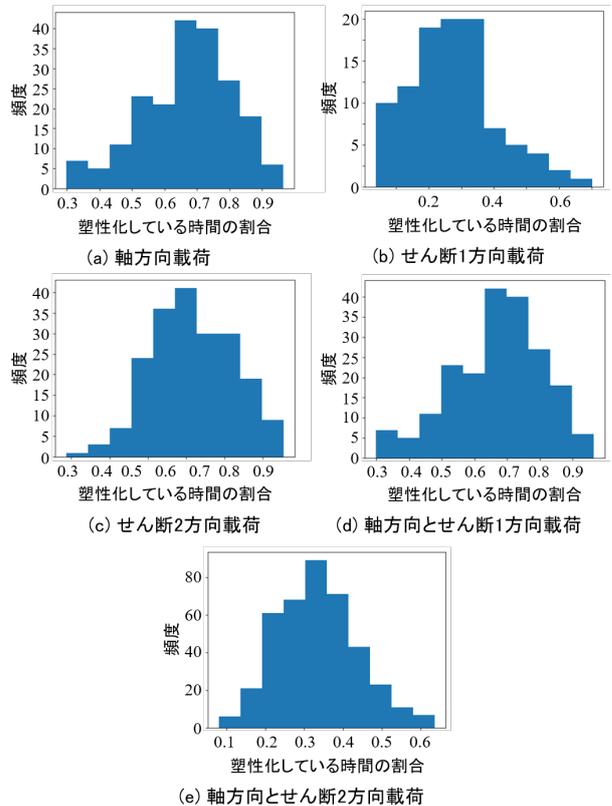


図-6 塑性化している時間の割合のヒストグラム

4. 材料構成則の学習と予測の結果

本節では図-2 の材料構成則のモデルを学習して, 図-3 に示すように, 初期値とひずみ増分の時系列を入力して応力増分の時系列を予測する. 材料構成則の学習と予測には, ライブラリとして TensorFlow2.7 を用いた. 損失関数 L は次式で定義した.

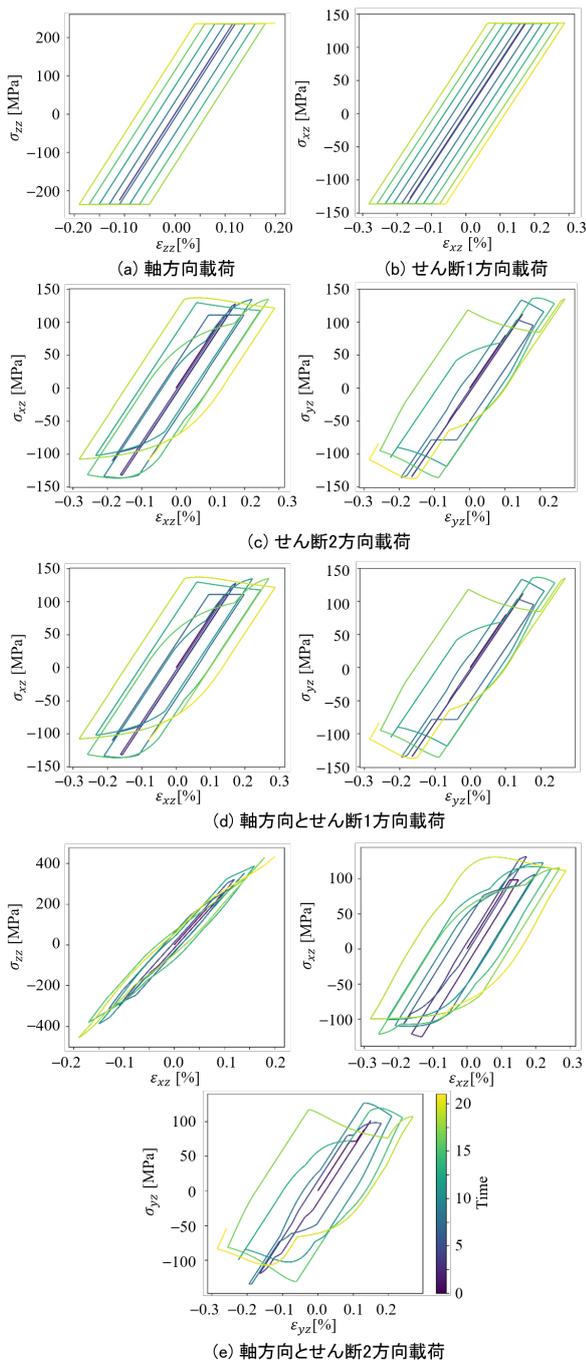


図-7 訓練データの例

$$L = \frac{1}{6N_t} \sum_{t=t_s}^{t_e} \|\sigma_t^{(pred)} - \sigma_t^{(true)}\| \quad (14)$$

ここに、 N_t は時系列の個数であり、 t_s と t_e は入力する時系列データの開始時刻と終了時刻のインデックスであり、上付きの (pred), (true) はそれぞれ予測値と正解値を意味する。

学習における最適化手法として確率的勾配降下法 (SGD) の改良版である Adam を使い、バッチサイズを 256 とした。FEM では、時間刻みを 0.01 としたが、学習においては時間刻みは 0.1 とした。この場合、全て

の時系列を用いると、時系列の数が 210 となり学習時に膨大な計算リソースが必要となる。そこで図-8 に示すように、時系列の長さが 15、オーバーラップする長さが 5 になるように、入力データを分割して学習した。予測においてはデータを分割することなく、210 個の時系列データを入力した。

以降では、表-3 に示す学習ケースについて、それらの結果を述べる。

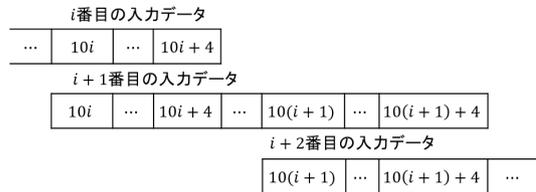


図-8 入力データの分割

表-3 学習ケース

ケース名	モデル構成	2段階学習	データセット
ケース 1	NN_{φ^e}	—	弾性
ケース 2	$NN_{\varphi^e} + NN_{\Delta \epsilon^p}$	なし	弾性
ケース 3	$NN_{\varphi^e}^{Case1} + NN_{\Delta \epsilon^p}$	あり	弾性
ケース 4	$NN_{\varphi^e}^{Case1} + NN_{\Delta \epsilon^p}$	あり	弾性

(1) ケース 1 での学習結果

ケース 1 では、 $NN_{\Delta \epsilon^p}$ の出力が 0 となるようにして弾性解析のデータセットを用いて NN_{φ^e} を学習した。ケース 1 での学習曲線を図-9 に、学習済みデータの剛性行列の各成分と正解値との比較を図-10 に示す。過学習がなく安定して学習が進んでおり、剛性行列の各成分が良好に正解値に収束していることがわかる。

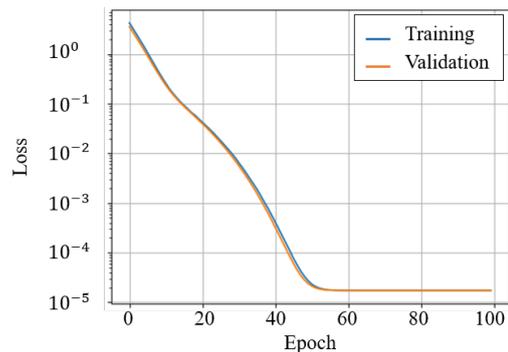


図-9 学習曲線 (Case1)

(2) ケース 2 での学習結果

ケース 2 では、弾性解析のデータセットを用いて NN_{φ^e} と $NN_{\Delta \epsilon^p}$ を同時に学習した。ケース 2 での学習曲線を

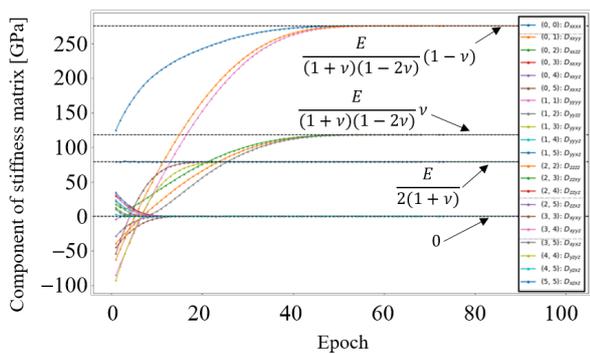


図-10 剛性行列の各成分の値の推移 (Case1)

図-11 に、学習済みデータの剛性行列の各成分と正解値との比較を図-12 に示す。過学習がなく安定して学習が進んでいるが、剛性行列の各成分は正解値と対応しない結果となった。NN φ^e と NN $\Delta\epsilon^p$ を同時に学習することにより弾性解析の応力の時刻歴は予測できているが、NN φ^e により導出された弾性テンソルが物理的に対応しない結果となった。これは、提案する材料構成則に塑性判定のプロセスが入っていないことが原因として考えられる。

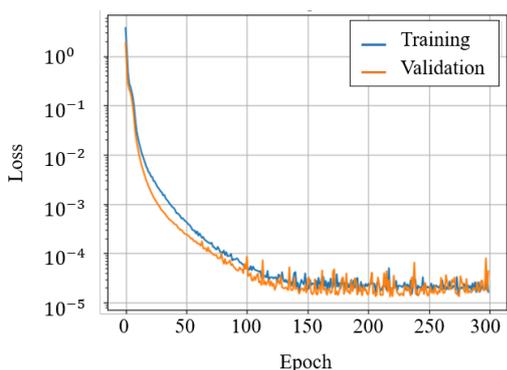


図-11 学習曲線 (Case2)

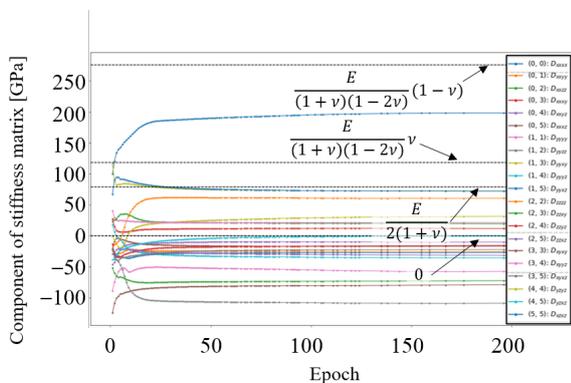


図-12 剛性行列の各成分の値の推移 (Case2)

(3) ケース 3 での学習結果と予測結果

ケース 3 では、ケース 1 で学習した NN φ^e を固定して、弾性解析のデータセットを用いて NN $\Delta\epsilon^p$ を学習した。ケース 3 での学習曲線を図-13 に、テストデータで予測した応力ひずみ関係の一例を図-14 に示す。過学習がなく安定して学習が進んでおり、応力ひずみ関係もほぼ一致しており、高い精度で弾性構成則を予測できていることがわかる。

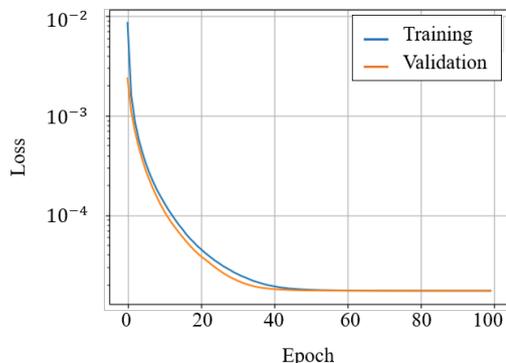


図-13 学習曲線 (Case3)

(4) ケース 4 での学習結果と予測結果

ケース 4 では、ケース 1 で学習した NN φ^e を固定して、弾塑性解析のデータセットを用いて NN $\Delta\epsilon^p$ を学習した。ケース 4 での学習曲線を図-15 に、テストデータで予測した応力ひずみ関係の一例を図-16 に示す。過学習がなく安定して学習が進んでおり、応力ひずみ関係もほぼ一致しており、高い精度で弾塑性構成則を予測できていることがわかる。

5. おわりに

熱力学法則に基づく深層学習による材料構成則の統一フレームワーク構築に向けて、von-Mises 型等方硬化則の弾塑性モデルを対象として簡易的なモデル化を試行した。Helmholtz の自由エネルギー関数を弾性解析のデータで学習した後に、塑性ひずみを出力するニューラルネットワークを弾塑性解析のデータを用いて学習することで、良好に von-Mises 型等方硬化則の弾塑性モデルを予測できた。

今後の課題を以下に述べる。まず、塑性ひずみ増分を出力するニューラルネットワークの処理を、塑性ポテンシャルをニューラルネットワークでモデル化してその塑性ポテンシャルを自動微分して塑性ひずみ増分を出力する処理に変更する。続いて、塑性判定とリターンマッピングを含めた応力積分の処理を導入して、Helmholtz の自由エネルギーと塑性ポテンシャルを同時に学習する方法を開発する。

謝辞: 本研究は JSPS 科研費 JP21K04347 の助成を受けたものです。プログラム作成に際しては、株式会社先端力学シミュレーション研究所のノノ瀬友宏氏にご協力いただきました。ここに記して謝意を表します。

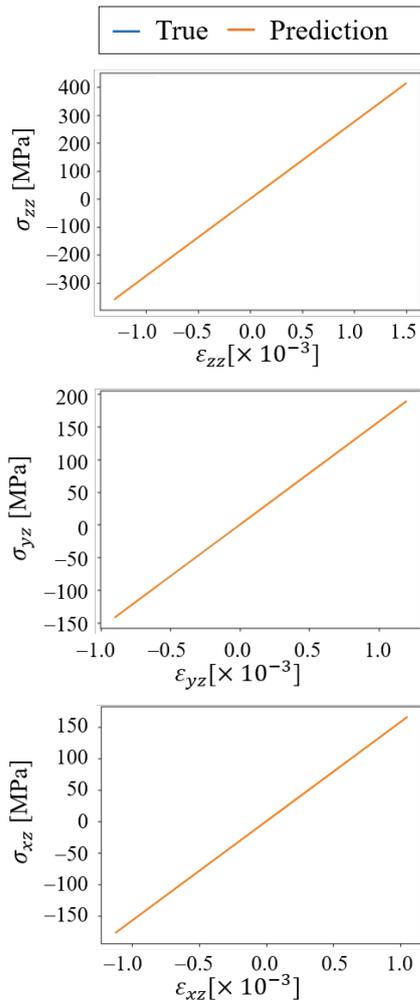


図-14 応力ひずみ関係 (Case3)

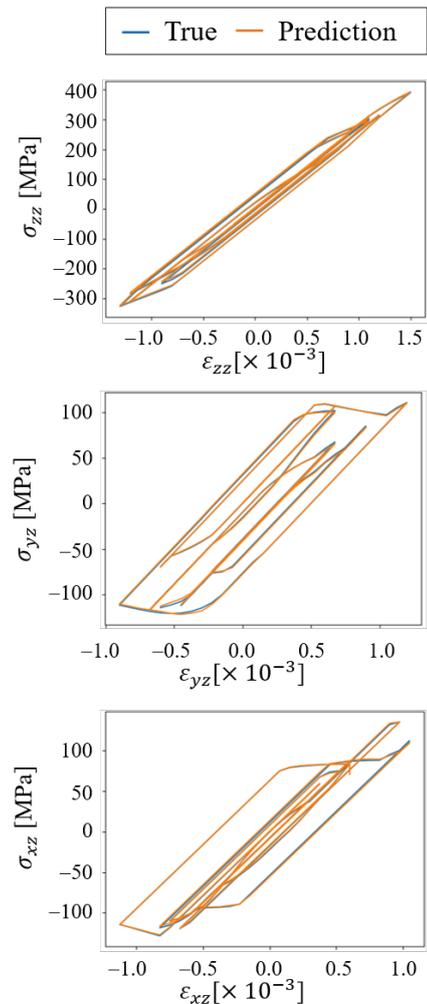


図-16 応力ひずみ関係 (Case4)

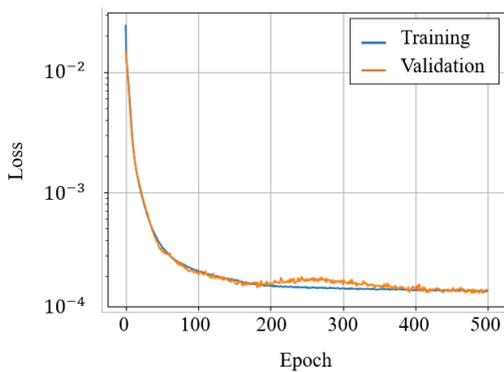


図-15 学習曲線 (Case4)

成則の応力計算法, 日本建築学会構造系論文集, 2020;85(778):1565-1573

- [3] Karniadakis GE, Kevrekidis IG, Lu L, et al. Physics-informed machine learning. *Nat. Rev. Phys.* 2021;3:422-440.
- [4] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis GE. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *J. Comput. Phys.* 2019;378:686-707
- [5] Masi F, Stefanou I, Vannucci P, Maffi-Berthier V. Thermodynamics-based artificial neural networks for constitutive modeling. *J. Mech. Phys. Solids*, 2021;147:104277.

参考文献

- [1] Kirchdoerfer T, Ortiz M. Data-driven computational mechanics. *Comput. Methods in Appl. Mech. Eng.* 2016;304:81-101.
- [2] 寺西正輝：ニューラルネットワークを援用したリターンマッピングアルゴリズムによる材料構

PINNsによる2次元静磁場問題解析の基礎的検討

Fundamental Study on Two-dimensional Magnetostatic Field Analysis by PINNs

荻野正雄¹⁾

Masao Ogino

1) 博(工) 大同大学 情報学部 准教授 (〒457-8530 愛知県名古屋市区南区滝春町10-3, E-mail: m-ogino@daido-it.ac.jp)

For the magnetostatic field problem derived from Maxwell's equations, the A method with the magnetic vector potential as the unknown is widely used as the formulation, and the finite element method with edge elements as the spatial discretization. There is also the H method in which the magnetic field is an unknown as a classical formulation. This paper reports the results of applying PINNs to boundary value problems of partial differential equations formulated by A method and H method respectively.

Key Words : PINNs, Magnetostatic field analysis, Machine Learning

1. はじめに

連続体力学分野で現れる偏微分方程式の初期値境界値問題の数値解析においては、時間・空間を離散化し、節点(格子点)の値を用いた近似多項式を求める方法が広く利用されている。一方、機械学習・人工知能分野においては様々なニューラルネットワークが提案され、利用されている。ニューラルネットワークは任意の連続な関数を近似できる普遍性定理(Universal Approximation Theorem) [1][2]が示されており、万能な関数近似器であると言える。すなわち、偏微分方程式の初期値境界値問題の解関数を近似するニューラルネットワークの構築も可能である。これに対し、近年Physical-Informed Neural Network (PINNs) [3][4]と呼ばれる機械学習手法が注目されている。PINNsは非線形偏微分方程式で記述された物理法則を与えたときに教師あり学習のタスクを解くための機械学習手法である。ニューラルネットワークを構築するための損失関数の設計に偏微分方程式などの物理法則を組み込むことが最大の特徴であるが、実験や観測データを学習データとして与えることで物性値等のパラメータ同定も可能であるという利点がある。

本研究は、Maxwell方程式から導出される静磁場問題にPINNsを適用し、関数近似器としての性能評価を行うことを目的とする。電磁界分野におけるPINNsの適用例[5][6]は少なく、また有限要素法などの従来からの数値解析手法でも解きづらい問題として知られている。今回は比較的解きやすい2次元静磁場問題に適用した数値実験結果について報告する。

2. 2次元静磁場問題に対するPINNs

(1) 静磁場問題

静磁場問題とはMaxwell方程式における時間変化の項を除いて導出される磁場 $\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)$ と磁束密度 $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ に関する偏微分方程式であり、次式で表される。

$$\text{rot } \mathbf{H} = \mathbf{J}, \quad \text{div } \mathbf{B} = 0 \quad (1)$$

ただし、 $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ は電流密度である。また、磁場 \mathbf{H} と磁束密度 \mathbf{B} の間には次の構成式を与える。

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (2)$$

ただし、 μ は透磁率である。今回は磁場と磁束密度が線形である問題を考える。これらの式に基づいて定式化を進める方法をH法と呼ぶ。

また、静磁場問題においては $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ を満たす磁気ベクトルポテンシャル $\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z)$ の存在が知られている。これを用いると、式(1)と(2)から \mathbf{A} を未知数とする次式が得られる。これをA法と呼ぶ。

$$\text{rot} \left(\frac{1}{\mu} \text{rot } \mathbf{A} \right) = \mathbf{J}, \quad \text{div } \mathbf{A} = 0 \quad (3)$$

式(3)の第2式はゲージ条件と呼ばれ、磁気ベクトルポテンシャルの不定性を除去する役割がある。

(2) 問題設定と定式化

今回は図1に示す十分に長い電線周りの磁束密度を求める2次元静磁場問題を考える[7]。解析領域全体を Ω 、真空領域の境界面を Γ_{vacuum} とすると、式(3)よりA法は次式を解くことになる。

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial A_z}{\partial y} \right) = -J_z & \text{in } \Omega \\ A_z = 0 & \text{on } \Gamma_{vacuum} \end{cases} \quad (4)$$

第1式が支配方程式となる偏微分方程式、第2式は境界条件である。式(4)は A_z に関する2次元ポアソン方程式の境界値問題となっている。式(4)を解いて得られた A_z を用いて、磁束密度は次式で求める。

$$B_x = \frac{\partial A_z}{\partial y}, \quad B_y = -\frac{\partial A_z}{\partial x} \quad (5)$$

すなわち、興味があるのはポアソン方程式の解の導関数である。

近年の静磁場問題の数値解析ではA法が広く利用されているが、今回はPINNsによる関数近似の性能評価を目的とするためにH法についても検討する。式(1)と(2)よりH法は次式を解くこととする。

$$\begin{cases} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = J_z & \text{in } \Omega \\ \frac{\partial(\mu H_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\mu H_y)}{\partial y} = 0 & \text{in } \Omega \\ H_x n_x + H_y n_y = 0 & \text{on } \Gamma_{vacuum} \end{cases} \quad (6)$$

ただし、 $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ は境界 Γ_{vacuum} における外向き単位法線ベクトルである。式(6)を解いて得られた磁場の値を式(2)に代入することで磁束密度が求まる。

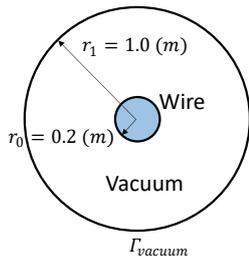


図-1 十分に長い電線周りの静磁場問題

(3) PINNs

PINNsにおける損失関数を設計する。ここではA法の場合を示す。ある点 (x, y) におけるニューラルネットワークによる磁気ベクトルポテンシャル A_z の予測値を $u(x, y)$ とする。さらに、式(4)の第1式に基づく次の関数 f を考える。

$$f(x, y) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \right) + J_z \quad (7)$$

ニューラルネットワークによる予測値が十分な精度を持つのであれば $f = 0$ になる。これらを用いて、損失関数 \mathcal{L} を境界条件(BC)と偏微分方程式(PDE)それぞれに対する平均2乗誤差 \mathcal{L}_u と \mathcal{L}_f の加重和とする。

$$\mathcal{L} = w_u \mathcal{L}_u + w_f \mathcal{L}_f \quad (8)$$

ただし、

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_u &= \frac{1}{N_{BC}} \sum_{i=1}^{N_{BC}} |u(x_u^i, y_u^i) - u^i|^2, \\ \mathcal{L}_f &= \frac{1}{N_{PDE}} \sum_{i=1}^{N_{PDE}} |f(x_u^i, y_u^i)|^2 \end{aligned} \quad (9)$$

であり、 N_{BC} と N_{PDE} はそれぞれ境界面と領域内の選点数である。

3. 数値実験

(1) 実験設定

物性値である透磁率 μ は真空領域と電線の両方において、 4π または $4\pi \times 10^{-7}$ とする。また、電流密度 J_z は真空領域では $J_z = 0$ 、電線内では $J_z = 1$ とする。

ニューラルネットワークは全結合3層とし、入力座標

(x, y) 、出力は磁気ベクトルポテンシャル A_z の予測値である。隠れ層のユニット数20、活性化関数は \tanh 、重みの初期値はGlorotらの方法、バイアスの初期値はゼロとした。また、OptimizerにはL-BFGS法を用いた。

選点数について N_{BC} は50、 N_{PDE} は200、1,000、または2,000とし、最初にランダムで与えたものを学習中は固定で用いた。

また、全ての計算は倍精度浮動小数点数で行った。

(2) A法の実験結果1

透磁率 $\mu = 4\pi$ のときの磁束密度の大きさ $\|\mathbf{B}\|$ の分布について、選点数を変えたときの結果を図2から4に示す。各図は、電線の中心に原点を置いた場合のある軸上における磁束密度の大きさの分布であり、点線は理論解、実線はPINNsで予測した A_z から計算した値を描画している。図より、選点数を増やすことで理論解に近づいており、電線と真空領域の境界付近におけるピークも予測できていることが分かる。

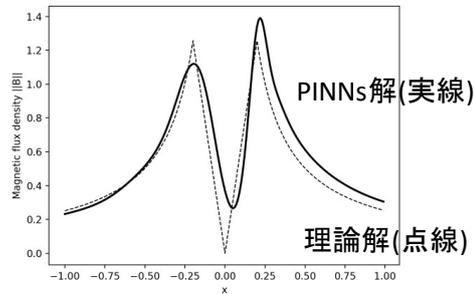


図-2 透磁率 4π かつ選点数200における $\|\mathbf{B}\|$ の予測解

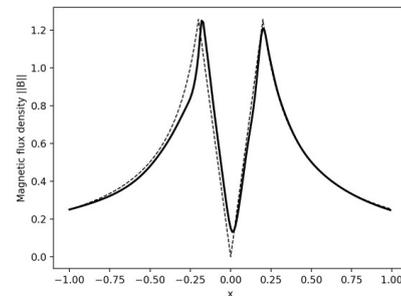


図-3 透磁率 4π かつ選点数1000における $\|\mathbf{B}\|$ の予測解

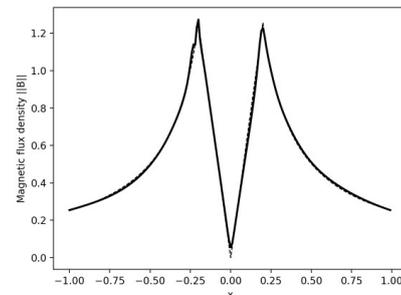


図-4 透磁率 4π かつ選点数2000における $\|\mathbf{B}\|$ の予測解

(3) A法の実験結果2

次に、透磁率 $\mu = 4\pi \times 10^{-7}$ のときの磁束密度の大きさ $\|\mathbf{B}\|$ の分布について、選点数2,000における結果を図5に示

す。図より、PINNsによる予測解が理論解と大きく異なっていることがわかる。前項との違いは透磁率の値のオーダーのみであるが、式(7)より関数 f に含まれる3つの項に与える影響が異なることが分かる。今回の問題設定ではそのオーダーの違いは7桁程度になるが、透磁率の値の大きさを1桁刻みで変えた実験を行ったところ、徐々に精度が低下する現象が確認された。

転移学習を用いてこの問題を解決する。前項と同じ透磁率 $\mu = 4\pi$ で学習したニューラルネットワークに対して、透磁率 $\mu = 4\pi \times 10^{-7}$ に対して出力層のファインチューニングを行った。転移学習した場合のPINNsの予測解を図6に示す。図5の結果に比べて理論解に近い解が得られていることが分かる。

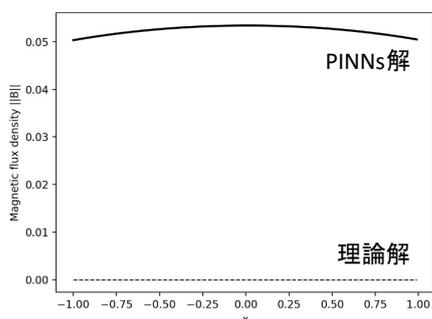


図-5 透磁率 $4\pi \times 10^{-7}$ における $\|B\|$ の予測解

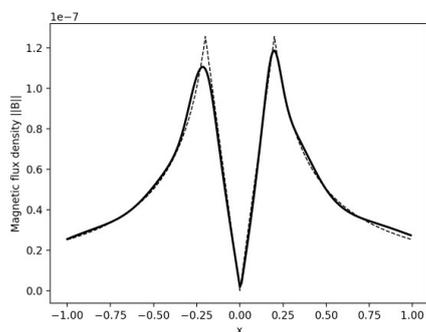


図-6 転移学習の結果

(4) H法の実験結果

次にH法に対する実験結果を示す。選点数は1,000とし、透磁率 $\mu = 4\pi$ のときの磁束密度の大きさ $\|B\|$ の分布を図7、透磁率 $\mu = 4\pi \times 10^{-7}$ の結果を図8に示す。図3と図7を比較すると、H法に基づくPINNsの予測解は定性的には解の分布をとらえているが、A法に比べると精度が低いものとなった。一方、図8は転移学習を行っていない結果であるが、H法であれば透磁率の値を変えた場合でも比較的近い解を予測できていることが分かる。

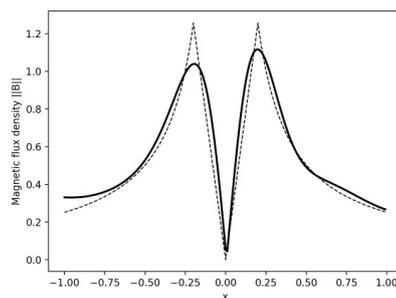


図-7 透磁率 4π かつH法における $\|B\|$ の予測解

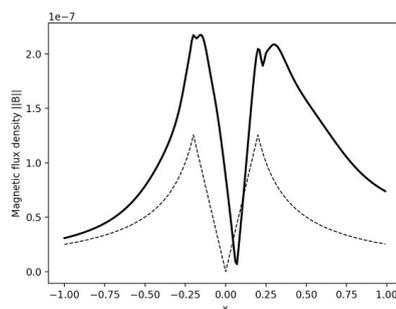


図-8 透磁率 $4\pi \times 10^{-7}$ かつH法における $\|B\|$ の予測解

4. おわりに

静磁場問題の近似解を求めるためにA法またはH法に基づくPINNsを構築し、理論解との比較を行った。その結果、偏微分方程式に基づく関数における各項のオーダーによっては予測しづらくなり、その場合は転移学習が有効であることが得られた。また、電磁場問題の数値解析では古典的な方法であるH法も利用に適したケースがあり得る知見が得られた。今後は、3次元問題や非線形静磁場問題への適用、観測や有限要素法による数値実験のデータなどを用いたData drivenアプローチでの検証などを進めていく。

謝辞：本研究はJSPS 科研費 No. 22H03605 並びに No. 18KK0278の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] Cybenko, G.: Approximation by superpositions of a sigmoidal function, *Math. Control, Signals and Systems*, Vol. 2, pp. 303-314, 1989.
- [2] Hornik, H., Stinchcombe, M., White, H.: Multilayer feedforward networks are universal approximators, *Neural Networks*, Vol. 2, Issue 5, pp. 359-366, 1989.
- [3] Raissi, M., Perdikaris, P., and Karniadakis, G.E.: Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *J. Comput. Phys.*, Vol. 378, pp. 686-707, 2019.
- [4] Cuomo, S., Di Cola, V.S., Giampaolo, F., Rozza, G., Raissi, M., and Piccialli, F.: Scientific machine learning through

physics-informed neural networks: where we are and what's next, *arXiv*, arXiv:2201.05624v4, 2022.

- [5] Chen, Y., Lu, L., Karniadakis, G.E. et al.: Physics-informed neural networks for inverse problems in nano-optics and metamaterials, *Optics Express*, Vol. 28, Issue 8, pp. 11618-11633, 2020.
- [6] Fang, Z. and Zhang, J.: Deep physical informed neural networks for metamaterial design, *IEEE Access*, Vol. 8, No. 24, pp. 506-24,513, 2020.
- [7] Backstrom, B. and Backstrom, G.: Simple Fields of Physics by Finite Element Analysis, *GB Publishing*, 2005.

2:00 PM - 2:15 PM (Fri. Jun 2, 2023 1:15 PM - 2:45 PM Room A)

[A-12-03] ナイーブベイズフィルタによるコンクリート表面画像のひび割れ
抽出法

*芦田 拓海¹、車谷 麻緒¹ (1. 茨城大学)

2:15 PM - 2:30 PM (Fri. Jun 2, 2023 1:15 PM - 2:45 PM Room A)

[A-12-04] 決定木ベースのマルチタスクラーニングを用いた複合材料の衝突
損傷と残留圧縮強度予測

*長谷部 早紀¹、樋口 諒¹、横関 智弘¹、武田 真一² (1. 東京大学、2. 宇宙航空研究開発機構)

2:30 PM - 2:45 PM (Fri. Jun 2, 2023 1:15 PM - 2:45 PM Room A)

[A-12-05] 機械学習による高強度・高延性を示す最適な Dual Phase鋼材料
組織の探索

*鈴木 美智¹、志澤 一之¹、村松 真由¹ (1. 慶應義塾大学)

OS09 深層学習、機械学習と計算工学

[A-13] OS09 深層学習、機械学習と計算工学 (4)

座長:中林 靖(東洋大学)

Fri. Jun 2, 2023 3:00 PM - 4:30 PM Room A (1F Conference Room 101)

[A-13-01] (キーノート講演)ニューラルネットワークによるフィレット部応力予測手法のトランスミッションケースへの適用検討

*久野 一城¹、山口 太一²、奥田 洋司² (1. 株式会社アイシン・デジタルエンジニアリング、2. 東京大学)

3:00 PM - 3:30 PM

[A-13-02] 2次元ブロック後流を対象とした PINNsによる内挿手法の検討

*辻 将吉¹、道岡 武信¹ (1. 近畿大学)

3:30 PM - 3:45 PM

[A-13-03] サブグリッドスケール項の機械学習モデリング

*朝比 祐一¹、前山 伸也²、藤井 恵介³ (1. 日本原子力研究開発機構、2. 名古屋大学、3. Oak Ridge National Laboratory)

3:45 PM - 4:00 PM

[A-13-04] 航空写真を用いたセマンティックセグメンテーションによる土地利用分類モデルの構築

*羽物 裕人¹、大川 博史²、檜山 和男¹ (1. 中央大学、2. 株式会社エイト日本技術開発)

4:00 PM - 4:15 PM

[A-13-05] 機械学習によるシミュレーションレス CAEを利用したロバスト設計手法の検討

*角 有司¹、飯山 洋一¹、佐藤 甫²、小池 晋太郎²、山下 貴志²、松澤 邦裕²、中川 貴文³ (1. 宇宙航空研究開発機構、2. アドバンスソフト株式会社、3. 京都大学)

4:15 PM - 4:30 PM

ニューラルネットワークによるフィレット部応力予測手法 のトランスミッションケースへの適用検討

Investigation of Application of Fillet Stress Prediction Method Using Neural Network to Transmission Case

久野一城¹⁾, 山口太一²⁾, 奥田洋司³⁾

Kazuki Kuno, Taichi Yamaguchi and Hiroshi Okuda

- 1) (株) アイシン・デジタルエンジニアリング (〒444-1154 愛知県安城市桜井町北阿原下48-8,
E-mail: kazuki.kuno@ade.aisin.co.jp)
- 2) 博(環) 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 客員連携研究員 (〒227-8563 千葉県柏市柏の葉5-1-5)
- 3) 工博 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 教授 (同上, E-mail: okuda@edu.k.u-tokyo.ac.jp)

In this paper, we examined the possibility of practically applying the stress prediction method for fillet sections [1] using a neural network, which has been proposed as a previous study. A neural network was used to learn the relationship between the stress distribution of a simple corner model using tetrahedral quadratic elements and the stress values of a fillet model. The machine learning model was used to predict the stress at the fillet of an automatic transmission case and its accuracy was evaluated. As a result, it was confirmed that the prediction accuracy was within the practical range when the geometry did not change significantly when simplifying from the fillet model to the corner model. On the other hand, when a complicated geometry such as an automatic transmission case is simplified to an edge model, the geometry changes significantly and the accuracy is not improved.

Key Words : Stress concentration, Neural network, Finite element method, Automatic transmission

1. はじめに

自動車部品の製品開発においてCAE (Computer Aided Engineering) は重要な役割を担うようになってきている。モノづくりの開発期間短縮のため実機評価をバーチャル評価に置き換えることも行われている。そのために3D-CAEの精度を向上させる必要があり、結果として解析規模が増大し計算に多くの時間を要するという問題がある。計算の高速化方法として計算サーバーや並列数の増強が考えられるが、それだけでは十分な高速化効果が得られないという課題がある。そのため近年ではCAEの結果を機械学習モデルで予測することによって計算時間を大幅に短縮する試みが行われている。

機械学習による構造解析の応力予測に注目した先行研究事例は多くなく、3D-CAEへの適用事例はさらに少ない。その中に全体の形状や境界条件に依存せず、様々な形状に適用可能性のある応力予測手法としてフィレット部の応力をニューラルネットワーク (NN) で予測する山口ら [1,2] の提案手法があった。しかし先行研究として簡易形状かつ六面体二次要素での精度評価にとどまっている。図-1に示すトランスミッションケースのような鋳造品は形状が複雑であり六面体要素での離散化が難しい。そのため汎用性の高い四面体二次要素が多く使われている。山口ら [1,2] の提案手法が実務レベルの問題に適用できれば構造解析におけるメッシュ作成時間の短縮及び問題によっては計算時間の短縮に繋がる。



図-1 トランスミッション

本研究では山口ら [1,2] の提案手法が実務問題 (複雑な形状) への適用に拡張することが可能なか検討する。そのため六面体二次要素から四面体二次要素への拡張検討、及びトランスミッションケースを用いたNNによるフィレット部応力予測の精度評価を行う。

2. NNによるフィレット部応力予測手法

(1) 予測手法の概要

図-2にNNによるフィレット部応力予測手法の概要を示す。図-2の上段左に示す簡易コーナーモデルを四面体二次要素で離散化し線形静解析を実施する。その結果から得られたコーナー部の応力値とその周辺応力値及び正解データに対応するフィレット半径の大きさをNNへの入力データとする。また図-2の上段右に示す簡易フィレットモデルも同様に四面体二次要素で離散化し線形静解析を実

施する。その結果から得られたフィレット部の応力値を正解データとする。これらのデータから図-2の中段に示す学習データセットを作成しNNを用いてコーナーモデルの応力分布とフィレットモデルの応力値の関係を学習させる。この学習済みNNを用いて図-2の下段左に示す実機コーナーモデルのコーナー部応力から実機フィレットモデルの任意のフィレット部応力を予測する。

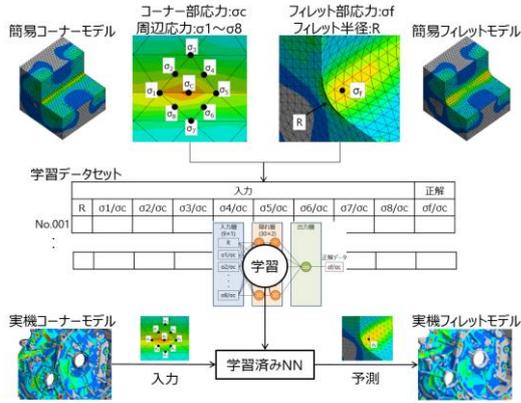


図-2 NNによるフィレット部応力予測手法の概略図

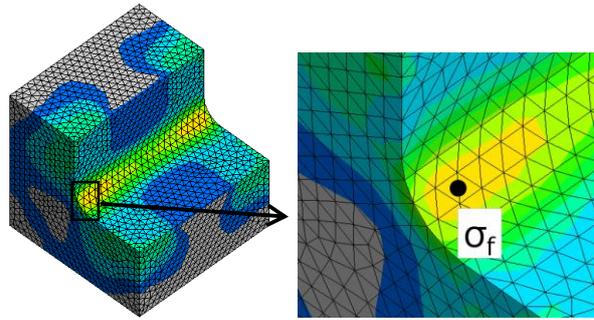
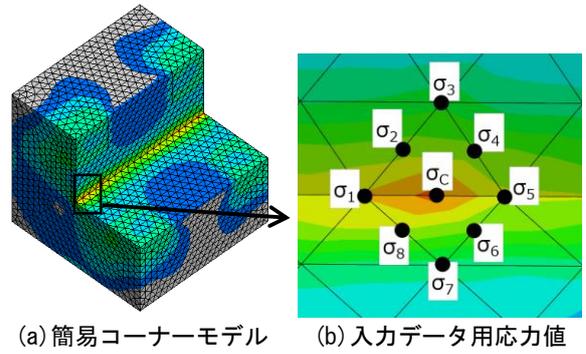


図-3 学習用モデル

(2) NNの構成

学習用入力データとして図-3に示す簡易コーナーモデル(図-3(a))のコーナー部とその周辺のVon Mises応力値9点(図-3(b)), 簡易フィレットモデル(図-3(c))のVon Mises応力値1点(図-3(d))及びフィレット半径の大きさを使用し、応力値は $\sigma_1 \sim \sigma_8$ と σ_f を σ_c で除した値($\sigma_1/\sigma_c, \sigma_2/\sigma_c, \sigma_3/\sigma_c, \sigma_4/\sigma_c, \sigma_5/\sigma_c, \sigma_6/\sigma_c, \sigma_7/\sigma_c, \sigma_8/\sigma_c, \sigma_f/\sigma_c$)に対し正規化を行った。

フィレット部応力予測モデルの作成には単純な構成の多層パーセプトロンを使用した。今回用いたNNの構成を図-4に示す。活性化関数にはReLU, 損失関数には平均二乗誤差, 最適化アルゴリズムにはAdamを用いた。またバッチサイズは32, エポック数は3000とした。

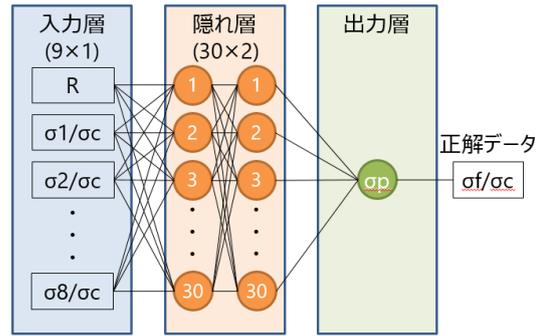


図-4 NNの構成

(3) NNを学習させるためのデータセット

学習用データセットの作成として図-3(a)に示すフィレットのない簡易コーナーモデルを用いた荷重条件76パターンの解析と図-3(c)に示す簡易フィレットモデルを用いたフィレット半径5パターンの解析を実施した。これらの解析から作成されたデータセットは505個であった。データセットからランダムに選択した70%を訓練データとして利用し、残りの30%を予測精度の検証データとして利用した。実施した解析の形状や条件の詳細は山口ら先行研究の文献[1]に委ねる。

(4) 学習結果の評価

学習結果の評価は各データに対し予測値 σ_p と正解値 σ_f との差を正解値で除した値(パーセント誤差)の絶対値を1から引いた値を予測精度 p^i とした(式1)。その総和をデータ数 n で除した値を平均予測精度 p とした(式2)。

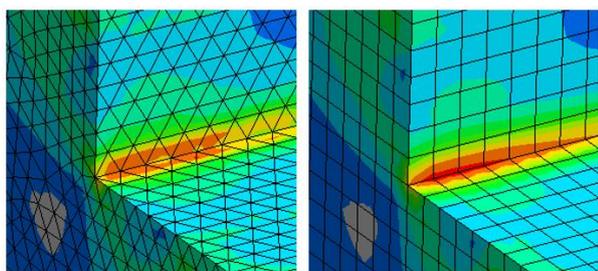
$$p^i = 1 - \frac{|\sigma_p^i - \sigma_f^i|}{\sigma_f^i} \tag{1}$$

$$p = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p^i \tag{2}$$

3. 四面体二次要素への拡張

(1) 入力データの検討

図-5に示すように四面体二次要素と六面体二次要素は節点配置が異なるだけでなく応力分布も異なるため、NNへの入力データにどの節点を使用するか検討が必要である。本研究では表-1に示す6タイプの入力タイプで予測精度を確認した。



(a)四面体二次要素 (b)六面体二次要素

図-5 簡易コーナーモデルの応力分布 (要素長 2mm)

表-1 NN への入力タイプ

入力データ	TYPE I	TYPE II	TYPE III	TYPE IV	TYPE V	TYPE VI
フィレット半径	○	○	○	○	○	○
使用節点	-					

(2) 各入力タイプの学習結果

各入力タイプの学習結果を表-2に示す. 平均予測精度の最も高かった入力タイプはコーナー節点 σ_c の周囲8節点を全て使用したTYPEVIであった. TYPEVIの平均予測精度は訓練データセットで96.88%, 検証データセットで97.03%であった.

表-2 各入力タイプの平均予測精度 p

入力タイプ	平均予測精度 [%]	
	訓練データ n=354	検証データ n=151
TYPE I	85.07	87.23
TYPE II	88.69	91.79
TYPE III	93.71	93.40
TYPE IV	95.31	95.57
TYPE V	95.40	95.44
TYPE VI	96.88	97.03

表-3に各入力タイプの学習済みNNを用いて, 学習に利用した全データに対して予測を行った結果を示す. 最も精度の高かったTYPEVIの平均予測精度は98.13%, 標準偏差は1.70%, 予測精度の最小は85.86%であった. 学習に利用したデータに対する予測精度は高いことが確認できた.

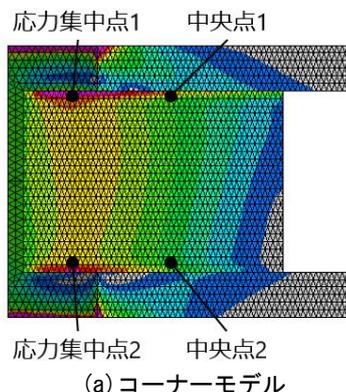
表-3 学習に使用した全データに対する予測精度

入力タイプ	全データ n=505			
	平均予測精度 [%]	予測精度の最大 [%]	予測精度の最小 [%]	標準偏差 [%]
TYPE I	90.51	99.98	61.18	7.21
TYPE II	93.22	99.99	60.65	6.21
TYPE III	95.97	99.99	58.65	4.47
TYPE IV	97.04	99.99	84.43	2.84
TYPE V	97.09	100.00	64.56	3.58
TYPE VI	98.13	100.00	85.86	1.70

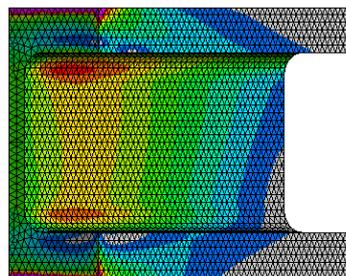
(3) テスト用モデルによる予測精度

図-6(a)に示すテスト用コーナーモデルを使用し, 学習に使用した形状と異なる形状で汎化性能を確認した. 検証データ及び全データに対する予測で精度の良かった

TYPEVIの学習済みNNを使用して図-6(b)に示すテスト用フィレットモデルのVon Mises応力値を予測した. 評価点は図-6(a)に示す応力集中点2箇所と中央点2箇所の計4箇所とし, フィレット半径を1mmから5mmまで1mm刻みで変更した合計20点のVonMises応力値を予測し, フィレットモデルのVon Mises応力に対する予測精度を確認した. 形状及び条件の詳細は山口ら先行研究の文献[1]に委ねる.



(a) コーナーモデル



(b) フィレットモデル

図-6 テスト用モデル(H形鋼 1/2 対称モデル)

表-4にテストモデルによる予測精度を示す. 実業務で重要となる応力集中点1, 2(n=10)の平均予測精度は85.57%であった. この結果は先行研究[1]で行われた六面体二次要素によるテストモデルの予測精度94.88%より約9%低い結果となった. 六面体要素に比べ四面体要素は節点配置が均一でなかったり応力分布が不連続であったりするため, 予測精度が低くなったと考えられる. また, 応力集中のない中央点1,2(n=10)の平均予測精度は78.21%となり応力集中点の精度より約7%低い結果となった. この点の精度が低くなる要因として, 今回の学習に使用した応力値に応力集中近傍の値のみを使用したことが考えられる.

表-4 テストモデルの予測精度

フィレット半径 [mm]	予測精度 p^i [%]			
	TYPEVI			
	集中点1	集中点2	中央点1	中央点2
R1	80.40	63.83	86.70	74.03
R2	84.27	80.27	80.13	56.35
R3	82.61	86.43	92.76	59.28
R4	90.98	95.88	94.19	69.41
R5	99.32	91.71	98.39	70.84
平均予測精度	87.52	83.63	90.43	65.98
	85.57		78.21	

このような箇所への予測が必要になる場合は応力集中のない応力値も学習データセットに入れる必要があると考えられる。

テストモデルにおける四面体二次要素の予測精度は六面体二次要素のそれよりも低下した。しかしトランスミッションケースで予測するフィレット半径の多くはR3以上であるため、R3以上に絞った平均予測精度を見ると91.16%であり活用可能な予測精度を確保できていると判断した。

4. 実務モデルへの適用

(1) テストモデル

実務問題への適用検討として、トランスミッションケースを用いた精度評価を行った。図面に対して忠実に作成されているCADモデル（フルフィレットモデル）から2つのテストモデルを作成した。1つ目は図-7(a)に示すフィレットを全て削除したフルコーナーモデル、2つ目は図-7(b)に示す一部のフィレットを削除した部分コーナーモデルである。これら2つのテストモデルに対し、学習済みNN (TYPEVI) を用いてフィレット部の応力を予測した。図-8に予測箇所の一例としてフルフィレットモデル（図-8(a)）、フルコーナーモデル（図-8(b)）、部分コーナーモデル（図-8(c)）の形状と応力分布を示す。

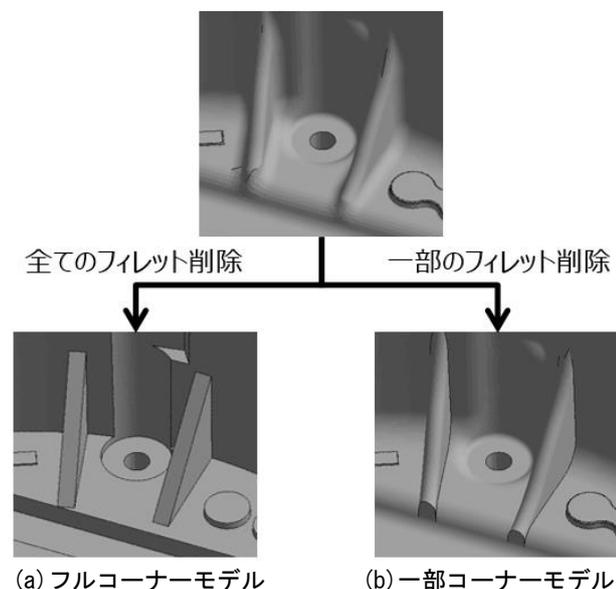


図-7 テストモデル(一部を表示)の作成

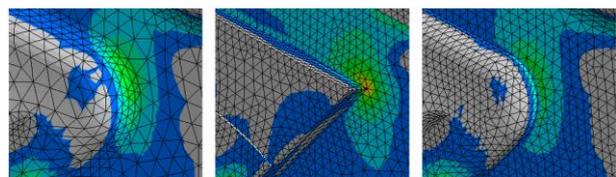


図-8 モデルの違いの一例(応力計測箇所 A)

(2) 予測結果

トランスミッションケースのフルコーナーモデルと部分コーナーモデルのフィレット部応力の予測精度を表-5に示す。フルコーナーモデルの平均予測精度は71%、部分コーナーモデルの平均予測精度は91%であった。n=9の予測結果ではあるが、部分コーナーモデルでは実務に活用可能な予測精度が得られた。一方フルコーナーモデルは図-8に示すように形状が大きく変化する箇所があるため、形状要因により予測精度が低下したと考えられる。

表-5 トランスミッションケースの予測精度

応力計測箇所	フィレット半径[mm]	予測精度 p^i [%]	
		フルコーナーモデル	部分コーナーモデル
A	5.0	52.1	96.5
B	5.0	97.4	89.5
C	4.0	96.9	97.5
D	5.0	95.5	68.4
E	5.0	32.4	99.3
F	5.0	43.8	85.2
G	5.0	73.8	97.5
H	5.0	56.3	92.5
I	5.0	90.9	93.0
平均予測精度		71.0	91.1

(3) 課題

実務問題への適用に対する課題を述べる。

a) フィレット削除による形状変化

本研究で用いたトランスミッションケースのように形状が複雑でフィレットが重なるような部品ではフィレットを削除すると形状が変化してしまう場合がある。そのような箇所では予測精度が低くなる傾向が見られた。したがって、フィレットを削除する際に注意が必要となる。

b) 応力値の出力

一般的にFEA (有限要素解析) で計算した応力値の出力はポストプロセッサを用いることで手間なく任意箇所の応力を得ることが可能である。しかし本手法ではコーナーモデルのFEA計算後、フィレット応力を求めたい箇所の代表節点とその周辺8節点の応力を出力し、その出力値を用いて学習済みNNで計算する必要がある。そのため、フィレット応力を得るまでに手間が掛かってしまう。したがって、実務適用には代表節点を選択するだけでフィレット応力を算出できるように、汎用ポストプロセッサにアドオンするプログラムの開発が必要である。

c) 計算時間

本手法ではフィレットを削除することでメッシュ作成工数及び計算時間を低減させる狙いがあった。しかし、トランスミッションケースにおいては狙い通りに節点数が減少せず、計算時間がフルフィレットモデルと同等であった。今回節点数が減少しなかった理由としてはメッシュ作成工数を低減させるために要素サイズを一律で作成したことが挙げられる。したがってフルフィレットモデ

ルのメッシュ作成と同様に要素サイズに粗密をつけ節点数を減少させることで計算時間を低減させることが可能だと考える。また要素長を大きくした簡易モデルの学習をすることで実機モデルの要素長も大きくすることができるため、計算時間を低減できると考える。

5. 結論

本研究では山口ら[1,2]の提案手法が実務レベルの問題に対し適用できるのかトランスミッションケースを用いて検討した。その結果、部分コーナーモデルにおいては平均予測精度91%でフィレット部応力が予測できることが確認できた。また本手法には六面体二次要素だけでなく四面体二次要素の適用も可能だと分かった。しかし実務適用には以下の課題があることが分かった。

- ・フィレット削除時の形状変化による精度低下
- ・フィレット応力値算出までの工数が大きい
- ・計算時間がフィレットモデルと変わらない

今回の学習に使用したデータは505個（1つのフィレット半径につき約100個）と十分なデータ数を準備できなかったため、応力分布やメッシュのパターンを増やすことでさらなる予測精度向上が期待される。

謝辞: 本研究においてデータ作成に協力頂いた弊社石川英樹氏、山崎弘美氏、原樹里氏にはこの場を借りて謝意を表す。

参考文献

- [1] Yamaguchi, T. and Okuda, H.: Prediction of Stress Concentration at Fillet by Neural Network for Efficient Finite Element Analysis, *Mechanical Engineering Letters*, Vol.6 (2020).
- [2] 山口太一, 橋本学, 奥田洋司: ニューラルネットワークによるフィレット部の応力予測, 計算工学講演会論文集, Vol.23 (2018).

2次元ブロック後流を対象とした PINNsによる内挿手法の検討

Investigation on Interpolation Method with PINNs
for a Two-dimensional Block Wake

辻将吉¹⁾, 道岡武信²⁾

Masayoshi Tsuji and Takenobu Michioka

1) 近畿大学大学院 総合理工学研究科 (〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1, E-mail: 2333330337n@kindai.ac.jp)

2) 博(工) 近畿大学理工学部 教授 (〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1, E-mail: michioka@mech.kindai.ac.jp)

Recently, a machine learning model called Physics-Informed Neural Networks (PINNs) was proposed to address the black box problem of machine learning. This study applies PINNs to the flow field behind a simple two-dimensional block and the model outputs the flow velocities in the block wake. The PINNs can interpolate the flow velocities in the block wake with reasonable accuracy from a relatively small amount of training data obtained by numerical simulations.

Key Words : Two-dimensional block wake, Interpolation, Physics-Informed Neural Networks

1. はじめに

近年, 機械学習の適用は流体力学分野にも広がりつつあり, 乱流解析などを対象に機械学習の技術に応用する手法が検討されている[1,2]. このように物理現象に対するアプローチとして適用されるデータ駆動型の一般的な機械学習モデルでは, 最適な学習アルゴリズムを構築することで任意の学習結果を出力することができる. その一方で, こうした機械学習モデルは学習プロセスを通して得られた膨大な数のパラメータにより, モデル入出力の関係性がブラックボックス化され, 最終的に得られるモデル出力に関して物理的整合性および解釈性が低下する問題が懸念される. これに対し, Raissi et al. (2019) [3]は対象とする物理現象の支配方程式を損失関数に導入したPINNs (Physics-Informed Neural Networks) と呼ばれる機械学習モデルを提案した. PINNs では出力がその支配方程式を満足するように学習が進行するため, 一般的な機械学習モデルに比べて物理的整合性の向上した出力を得ることができる. PINNs は, 損失関数にあらゆる事象の支配方程式を扱うことができる性質から幅広い分野においてその研究例が示されている[3-5].

本研究ではPINNsの基礎的な検討として, 簡易な2次元ブロック周りの流れ場を対象に扱う. 2次元ブロック周りの流れ場を数値シミュレーションで再現し, 数値シミュレーション結果とPINNsの出力結果を比較することでPINNsによる内挿手法の適用性について検討する.

2. 数値シミュレーション

本研究の数値シミュレーションには, オープンソースソフトウェアであるOpenFOAMを使用した. 2次元ブロック周りの流れ場は出口ら(2022) [4]に倣い, 図-1に示すよ

うな計算領域を対象とした. 計算領域の大きさは2.5 m (x) × 1.5 m (y)とし, $x = 0.50$ m, $y = 0.0$ mの座標に1辺の長さ0.1 mの2次元ブロックを設置した. 境界条件について, 計算領域の左端境界に一樣流速5 m/sの流入風を与え, 上下境界にはスリップ条件を設定した. これらの条件で数値シミュレーションを行ったところ, 2次元ブロックの後流で強い渦と弱い渦が相互的に生成されることを確認した(図-1). PINNsに用いる学習データの取得は図-1内の学習領域 ($1.0 \text{ m} \leq x \leq 2.0 \text{ m}$, $-0.50 \text{ m} \leq y \leq 0.50 \text{ m}$) に限定し, 時間 $t = 1.0 \text{ s}$ から 2.0 s における主流方向速度 u , および主流直角方向速度 v のデータを0.1 s刻みに取得した. 取得した各学習データは総数 $N = 112200$ の座標点から構成される.

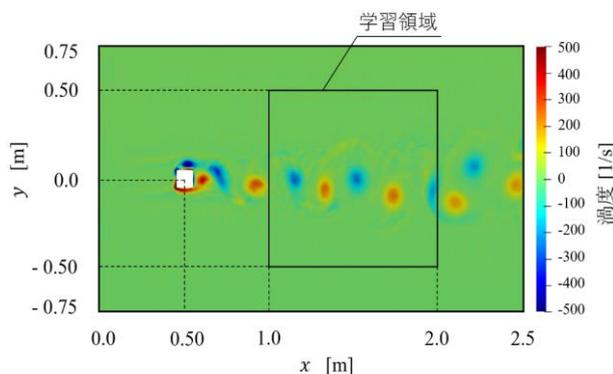


図-1 2次元ブロック周りの流れ場

3. PINNsの構築

前章で示した流れ場を対象に, 2次元ブロック後流の流速を出力するPINNsを構築した. PINNsの損失関数には流体の質量保存則を記述した連続の式を導入した. 本研究

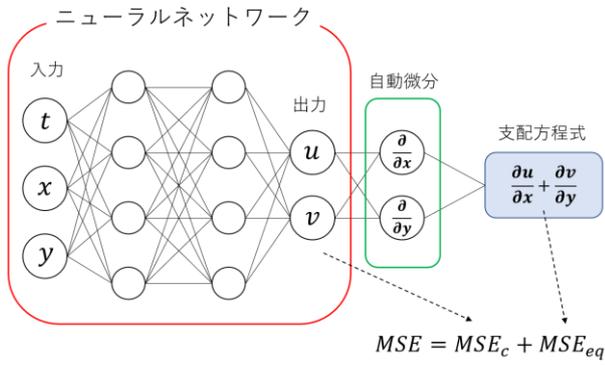


図-2 PINNsの概略図

で構築したPINNsの概略図を図-2に示す。PINNsの入力は時間 t と直交座標 x, y から構成される3次元ベクトル (t, x, y) とし、2次元ブロック後流の主流方向速度 u および主流直角方向速度 v を出力する。図-2左側のニューラルネットワークでは、学習データとPINNsの出力との平均二乗誤差 MSE_c が最小となるように学習が進行する。一方で図-2右側では、PINNsの出力を自動微分することで連続の式を算出し、連続の式の残差 MSE_{eq} が最小となるように学習が進行する。したがって、PINNsの損失関数は式(1)のように定義される。以上より、PINNsの学習はニューラルネットワークの平均二乗誤差 MSE_c と連続の式の残差 MSE_{eq} を包括的に最小化する最適化問題とみなすことができる。

$$MSE = MSE_c + MSE_{eq} \quad (1)$$

次に損失関数 MSE_c について、支配方程式の拘束条件（初期条件、境界条件）を導入することで以下のように定義した。

$$MSE_c = MSE_{ini} + MSE_{bc} + MSE_{data} \quad (2)$$

$$MSE_{ini} = \frac{1}{N_{ini}} \sum_{i=1}^{N_{ini}} (\mathbf{u}_{ini}^i - \mathbf{u}^i)^2 \quad (3)$$

$$MSE_{bc} = \frac{1}{N_{bc}} \sum_{i=1}^{N_{bc}} (\mathbf{u}_{bc}^i - \mathbf{u}^i)^2 \quad (4)$$

$$MSE_{data} = \frac{1}{N_{data}} \sum_{i=1}^{N_{data}} (\mathbf{u}_{data}^i - \mathbf{u}^i)^2 \quad (5)$$

ここで、 \mathbf{u}_{ini}^i 、 \mathbf{u}_{bc}^i 、 \mathbf{u}_{data}^i はそれぞれ初期条件、境界条件、全学習領域からランダムサンプリングした流速の学

習データ、 \mathbf{u}^i はそれらに対するPINNsの出力を表す。 N_{ini} 、 N_{bc} 、 N_{data} は各条件における評価点数であり、 $N_{ini} = 5100$ 、 $N_{bc} = 2200$ 、 $N_{data} = 15140$ とした。よって、PINNsに使用する学習データの総数は22440点となり、これは取得した学習データ総数 N の20%に相当する。

続いて、連続の式の評価点数を N_{eq} として損失関数 MSE_{eq} を次式のように定義した。

$$MSE_{eq} = \frac{1}{N_{eq}} \sum_{i=1}^{N_{eq}} \left(\frac{\partial u^i}{\partial x} + \frac{\partial v^i}{\partial y} \right)^2 \quad (6)$$

上式から確認できるように、損失関数 MSE_{eq} は連続の式の残差から直接的に算出されるものであり、数値シミュレーションの学習データを必要としない。そのため、評価点数 N_{eq} を増大させることによる資源的負担は生じないことから、評価点数 N_{eq} は学習データ総数 N に相当する112200点とした。

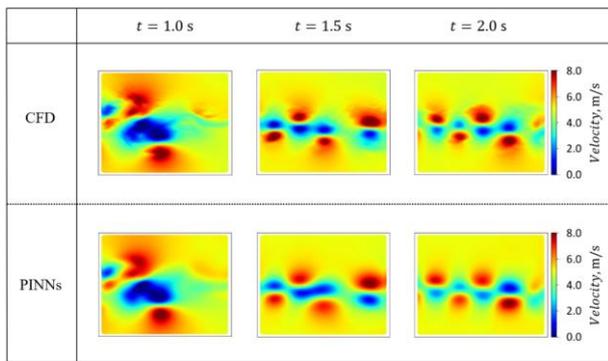
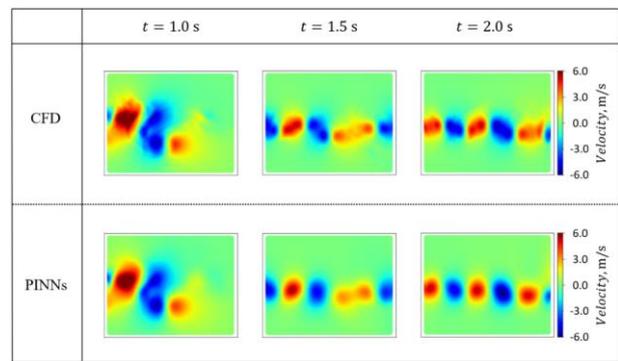
本研究のネットワーク構造について、中間層8層、ノード数20からなるニューラルネットワークを構築した。活性化関数にはTanh関数、最適化アルゴリズムにはL-BFGSを適用し、損失関数が十分に収束することを確認できるまで反復学習を実施した[5]。

4. 結果

前章で示した各条件に基づいてPINNsの学習を実行した後、座標点112200点に対して主流方向速度 u 、および主流直角方向速度 v の出力を行った。図-3、図-4はそれぞれ時間 $t = 1.0, 1.5, 2.0$ sにおける主流方向速度 u 、および主流直角方向速度 v の出力であり、各図の上段には学習データとして用いた数値シミュレーション結果を示している。また、座標点112200点におけるPINNsの出力と数値シミュレーション結果との二乗平均平方根誤差 (RMSE) を算出したところ、主流方向速度 u は 3.86×10^{-1} m/s、主流直角方向速度 v は 4.69×10^{-1} m/sであった。本研究では、PINNsの学習には取得した学習データ総数 N の20%しか使用しておらず、その他の80%の部分における流速については連続の式を満足するようPINNsにより内挿されている。図-3および図-4より、部分的にPINNsの予測精度が低い箇所が見受けられるが、全体としてPINNsは数値シミュレーション結果の流速分布を的確に捉えている様子が確認できる。

5. 結言

本研究では2次元ブロック周りの流れ場を例題として、PINNsによる内挿手法の適用性について検討した。損失関数に連続の式を導入したモデルを構築し、数値シミュレーションで取得した20%の学習データから、2次元ブロック後流の流速を恒常的に程良い精度で予測できることを示した。

図-3 主流方向速度 u の出力結果図-4 主流直角方向速度 v の出力結果

謝辞: 本研究の一部は科研費 (22K04440) の助成を受けたものである。ここに謝意を表す。

参考文献

- [1] Fukami et al.: Super-resolution reconstruction of turbulent flows with machine learning, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.870, pp.106-120, 2019.
- [2] 道岡武信, 小坂溪太, 瀧本浩史, 佐藤歩: 機械学習による複雑地形上の地上風予測, 計算工学講演会論文集, Vol.27, 2022.
- [3] M. Raissi et al.: Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, Vol.378, pp.686-707, 2019.
- [4] 出口翔大, 柴田洋佑, 浅井光輝: 空間特徴抽出を援用した実践的PINNsによるパラメータ逆推定, 計算工学講演会論文集, Vol.27, 2022.
- [5] 宮本崇, 西尾真由子, 全邦釘: Physics-Informed Neural Networksによる1次元連続体の動的解析, AI・データサイエンス論文集, 2巻J2号, pp.152-156, 2021.

3:45 PM - 4:00 PM (Fri. Jun 2, 2023 3:00 PM - 4:30 PM Room A)

[A-13-03] サブグリッドスケール項の機械学習モデリング

*朝比 祐一¹、前山 伸也²、藤井 恵介³ (1. 日本原子力研究開発機構、2. 名古屋大学、3. Oak Ridge National Laboratory)

航空写真を用いたセマンティックセグメンテーション による土地利用分類モデルの構築

Development of Land Use Classification Model
by Semantic Segmentation Using Aerial Photographs

羽物裕人¹⁾ 大川博史²⁾ 樫山和男³⁾
Yuto Habutsu and Hiroshi Okawa and Kazuo Kashiya

¹⁾修士 中央大学大学院 理工学研究科 (〒 112-8551 東京都文京区春日 1-13-27, E-mail: a19.6t5r@g.chuo-u.ac.jp)

²⁾株式会社エイト日本技術開発 (〒 164-8601 東京都中野区本町 5-33-11, E-mail: ookawa-hi@ej-hds.co.jp)

³⁾工博 中央大学 理工学部 教授 (〒 112-8551 東京都文京区春日 1-13-27, E-mail: kaz@civil.chuo-u.ac.jp)

This paper presents a land use classification model for aerial photographs based on a deep learning image classification method. In order to examine the validity of the present classification model, the model is applied to aerial photographs of the target area.

Key Words : Deep Learning, Aerial Photographs, Semantic Segmentation

1. はじめに

著者らはこれまで津波、高潮、洪水氾濫等の数値解析 [1] を行ってきたが、土地利用区分毎に粗度係数を与える際には、半自動で行い労力のかかるものであった。

そこで本研究では、深層学習に基づく画像分類手法により、航空写真の土地利用分類モデルを構築する。本モデルに一般に公開されている対象地域の航空写真を転移学習させ、モデルの精度検証および評価を行った。

2. 画像分類手法

(1) データの取得

分類モデル構築の流れを図-1 のフローチャートに示す。本研究は、教師あり学習の手法に基づき、分類モデルの構築を行う。

トレーニングデータは、国土地理院が公開している GSI データセット [2] を用いる。本データセットは、国土地理院の研究成果として公開されたものである。普通建物、茶畑、水田、針葉樹林、水部、道路のデータを使用した。データの例を図-2 に示す。

テストデータは、国土地理院が公開している地理院タイルの電子国土基本図(オルソ画像)[3] から航空写真を取得する。対象地域を高知県中土佐町久礼地区としてテストデータの作成を行った。対象地域の写真を図-3(a) に示す。本研究は、赤線で囲われている小領域を対象領域としている。

分類項目は、細密数値情報に基づき、建物、田・畑、山林、海・河川、道路の 5 クラスとした。

(2) 分類手法

a) データの前処理

取得した航空写真に対して予め施した処理について説明する。テストデータの作成のため、取得した航空写真を GIS ソフトを用い格子状に航空写真を分割する。

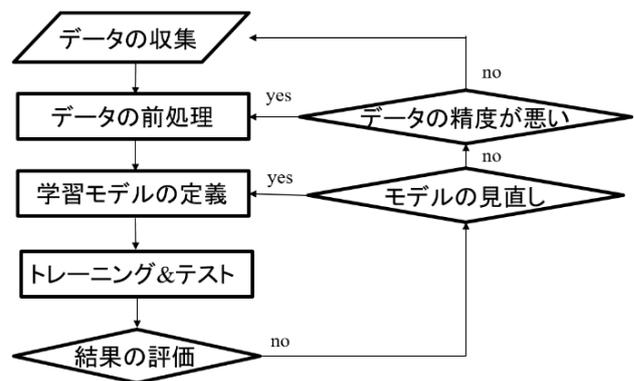


図-1 フローチャート

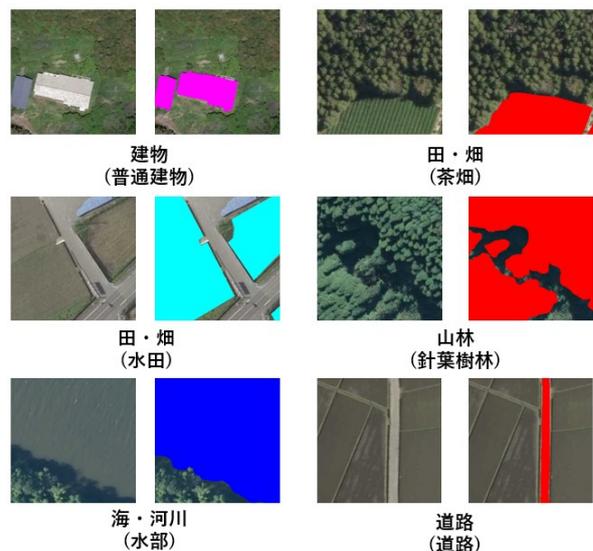


図-2 トレーニングデータの例

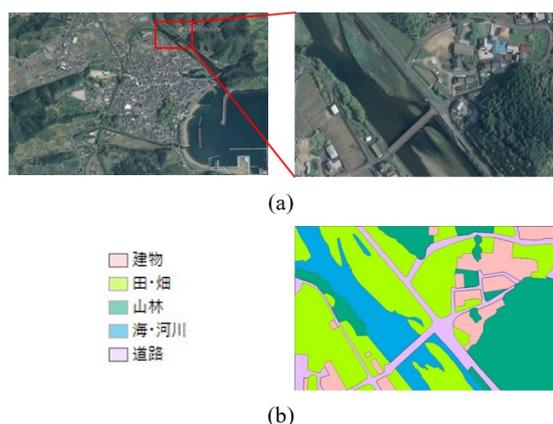


図-3 テストデータについて

表-1 データの詳細

分類項目	トレーニングデータ		テストデータ
	項目	データ数	データ数
建物	普通建物	6,000ペア	69ペア
	茶畑	3,200ペア	201ペア
田・畑	水田	13,000ペア	
山林	針葉樹林	4,000ペア	127ペア
海・河川	水部	6,250ペア	79ペア
道路	道路	10,000ペア	64ペア

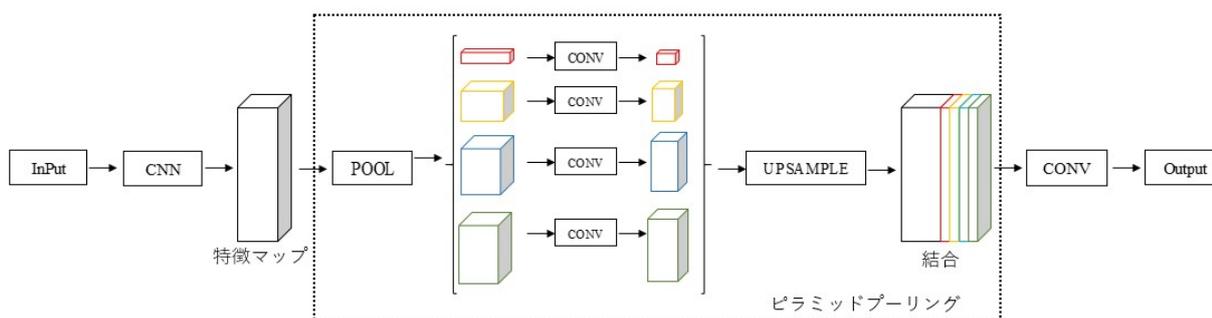


図-4 分類に使用したネットワークモデル図

また、テストデータは土地利用区分ごとにアノテーションする必要がある。テストデータのアノテーションについても GIS ソフトを使用して行った。アノテーション結果を図-3(b)に示す。

b) 深層学習モデルについて

本研究の画像分類手法として完全畳み込みニューラルネットワーク [4](Fully Convolution Networks; FCN) の終盤層に空間ピラミッドプーリングを用いるディープラーニングセグメンテーションタスクの PSPNET(Pyramid Scene Parsing Network)[5]を採用し、モデルを構築する。PSPNET のネットワークモデルの概要を図-4 に示す。

通常 FCN では、Encoder によって入力画像から抽出された特徴マップのサイズはダウンサンプリングされ、元の入力画像より小さいサイズとなる。しかし、PSPNET では、Encoder で得られる画像サイズの小さい特徴マップに対して複数の解像度で Max Pooling を用いる Pyramid Pooling により、それぞれのスケールで捉えた特徴マップが得られる。得られた各特徴マップを元の特徴マップと同じスケールにアップサンプリングする。アップサンプリングされた各特徴マップを元の特徴マップにチャンネルを追加する方法で連結を行う。これにより、大域的に特徴を捉えられることに加え、局所的な細かい情報を得ることが可能になる。この連結した特徴マップに対してフィルターサイズ 1*1 の畳み込み処理を行い、セマンティックセグメンテーションの結果を得る。

c) 学習環境・条件

ハードウェア環境は、CPU: Xeon W-2225, GPU: Geforce RTX3090, OS: Ubuntu20.4, RAM: 32GB である。データの詳細を表-1 に示す。トレーニングデータ

は学習用データと検証用データに分けて学習を実行する。構築された分類モデルをテストデータに転移学習させ、モデルの精度検証および評価を行う。

3. 学習結果

対象領域に対する学習結果およびその評価は、講演時に示す。

4. おわりに

本研究では、取得した GSI データセットを用いた深層学習により航空写真の土地利用分類モデルの構築を行い、構築した分類モデルに転移学習を行った。

今後は、学習に用いるトレーニングデータの項目の追加、テストデータの領域拡大、より有効な分類モデルの構築を行っていく予定である。

参考文献

- [1] 利根川大介, 檜山和男, 安定化有限要素法による津波遡上及び流体力の解析手法の構築, 応用力学論文集 (土木学会), Vol.12, pp.127-134, 2009.
- [2] 大野裕幸ら: AI を活用した地物自動抽出に関する研究 (第 1 年次), 国土地理院平成 30 年度調査研究年報, pp.180-183, 2019.
- [3] 電子国土基本図 (オルソ画像): <https://www.gsi.go.jp/gazochosa/gazochosa40001>, (参照 2022-8-25).
- [4] J.Long, E.Shelhamer and T.Darrell: Fully Convolutional Networks for Semantic Segmentation, CVPR, 2015.
- [5] Hengshuang Zhao et al. Pyramid Scene Parsing Network, CVPR, 2017.

機械学習によるシミュレーションレスCAEを利用した ロバスト設計手法の検討

Study of robust design method using simulation-less CAE by machine learning

角有司¹⁾, 飯山洋一¹⁾, 佐藤甫²⁾, 小池晋太郎²⁾, 山下貴志²⁾, 松澤邦裕²⁾, 中川貴文³⁾

Yuji Kado, Youichi Iiyama, Hajime Sato, Shintaro Koike, Takashi Yamashita, Kunihiro Matsuzawa,
and Takafumi Nakagawa

- 1) 宇宙航空研究開発機構 技術領域主幹(〒305-8505 茨城県つくば市千現 E-mail: kado.yuji[at]jaxa.jp)
- 2) 宇宙航空研究開発機構 主任研究開発員(〒305-8505 茨城県つくば市千現 E-mail: iiyama.youichi[at]jaxa.jp)
- 3) アドバンスソフト株式会社(〒101-0062東京都千代田区神田駿河台, E-mail: h-sato[at]advancesoft.jp)
- 4) アドバンスソフト株式会社(〒101-0062東京都千代田区神田駿河台, E-mail: koike.shintaro[at]advancesoft.jp)
- 5) アドバンスソフト株式会社(〒101-0062東京都千代田区神田駿河台, E-mail: Yamashita.takashi[at]advancesoft.jp)
- 6) アドバンスソフト株式会社(〒101-0062東京都千代田区神田駿河台, E-mail: kmatsu[at]advancesoft.jp)
- 7) 京都大学生存圏研究所 准教授 (〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄, E-mail: tifm0820[at]gmail.com)

In recent years, machine learning for design engineering and numerical simulation is progressing. The authors have developed a robust design method and optimization tool (JIANT) for nonlinear simulation. In this research, we propose an environment for creating a surrogate model for machine learning by utilizing the multi-level orthogonal matrix, which is a feature of JIANT. This is expected to enable high-speed data assimilation and robust design (quality engineering, set-based design).

Key Words : *Quality Engineering, Set Based Design, Data Assimilation, Machine Learning*

1 はじめに

1.1 概要

近年、設計工学や数値シミュレーションの分野への機械学習の導入が検討されている。筆者らはこれまで、非線形CAEに対応したロバスト設計手法と最適化ツール(JIANT)の検討を進めている。本研究では、JIANTに機械学習を導入することで、多水準直交表を用いた高精度なサロゲートモデルを作成しそれを利用したロバスト設計(品質工学、セットベース設計)が可能な環境を考案したので、その概要を報告する。

2 JAXAにおけるロバスト設計とデータ同化

2.1 ロバスト設計の取組

(1) 品質工学ツール(JIANT)の特徴

ロバスト設計とは、製造、材料、環境などのバラつきに対して安定した性能を発揮できる製品を設計するための手法である。品質工学は、自動車・電機業界等で広く利用されているロバスト設計の一つの手法であり、これまで部品設計や加工設計を中心に効果を上げている[1]。その特徴は外乱を誤差因子として明確に定義する点と、直交表を用いる事により網羅的な計算を効率的に行う点と、要因効果図を使用して多くのパラメータを視覚的に判断する点にある。JIANTは品質工学の考えをベースとしつつ、

以下のa)~c)の改良を反映したツールである。これにより、品質工学になじみがない宇宙分野の設計者であっても、相互にCAEによる設計結果を共有し、システム全体の最適設計を行う狙いがある[2]。

a) パラメータ成立範囲の算出

通常の品質工学でロバスト性の評価を行う際には、SN比という評価指標を使って、外乱に対して安定して動作できるパラメータ値を探す方法がとられるが、JIANTでは、品質工学とは別のロバスト設計の手法であるセットベースデザインの考えを導入し、制約条件を満足できるパラメータの成立範囲の算出を行う方法としている。セットベースデザインとは、多領域のパラメータの範囲集合を定義し、設計の進捗に合わせて結果を反映しながら絞り込むことで最適設計を行うものである。幅を持った数値で管理する事から、機械設計における公差の考えに近く品質工学のSN比のような予備知識が不要であることから、異なる分野の設計者との情報共有が容易となる。

b) 多水準直交表の利用

通常の品質工学では3水準直交表(L18直交表, L36直交表, 等)の直交表の利用が推奨されているが、JIANTでは、5,7,9,11水準といった多水準直交表による評価を可能としている。これにより、非線形CAEにおいても設計解の高精度化が可能となり、また上記a)のセットベースデザイ

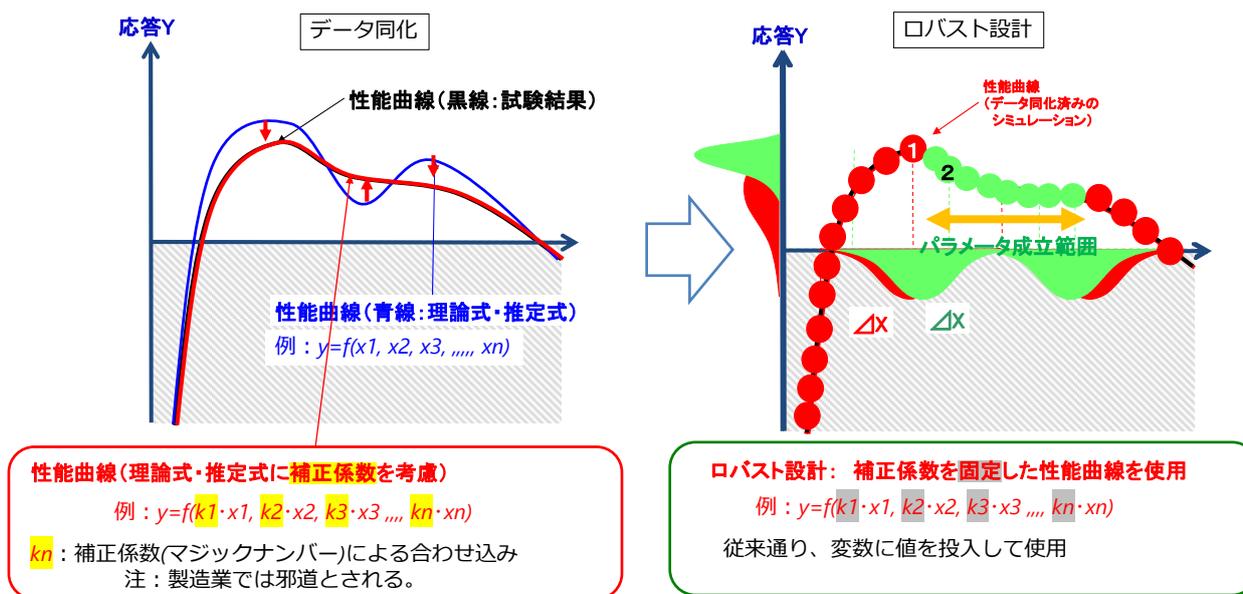


図 1 本研究におけるデータ同化とロバスト設計の全体像

ンにおけるパラメータ範囲の絞り込みを容易としている。

c) 制御因子と誤差因子の両方の評価

品質工学と同様に、パラメータを制御因子（設計者が扱えるパラメータ）と、誤差因子（設計者が扱えない外乱）とに分け、それらの直積実験を行う。しかしJIANTでは、品質工学と異なり、誤差因子も設計対象として絞り込みを行うとともに評価の対象としている。これは、人工衛星の設計などでは、人工衛星（制御因子）だけでなく、運用状況や外部環境（誤差因子）を同時に設計する必要がある事から、それらの同時設計を可能としたものである。また、制御因子と誤差因子を同時に設計する結果、衛星の設計者と、運用・環境の担当者との交流が活性化するという効果がみられている。

2.2 ロバスト設計の活動状況

JAXAでは、2008年から品質工学の社内研修[3]を行うとともに、2018年からは実際の設計へのJIANTの導入を進めており、火星惑星探査計画(MMX) [4]、月縦孔探査計画(UZUME) [5]等に効果を発揮している。今後はさらに利用を広めるために、設計者が使いやすいマニュアルやハンドブックの制定や、教育支援体制の強化などを実施中である。

2.3 データ同化の取組み

宇宙開発にロバスト設計を導入するための前提として、CAEの精度が保証されている必要がある。そこで本研究では、品質工学をベースとしたデータ同化手法の考え方についても検討している。

一般にCAEにおける誤差には、モデル化の誤差、離散化の誤差、数値計算の誤差、等がある[6][7]。これらの値の合わせ込みは、CAE開発者の勘と経験に基づく試行錯誤によって行われており、非常に労力がかかる作業となっ

ている。また、CAEの誤差をゼロにすることは不可能であり、データ同化の対象によって誤差は変化する場合が多い。この事は、データ同化に求められる精度を事前に確定する事は困難である事を意味している。

この問題を解決するためには、本研究では、データ同化とロバスト設計の両方が可能な環境を構築し、あらかじめCAEのデータ同化を行い、続いてデータ同化後のCAEを用いて実際に設計を行える環境を提案している。

具体的には、以下のプロセスで行う。

(1) データ同化

CAEのパラメータに補正係数というノミナル1の数値を掛け算できるように準備しておき、その補正係数をチューニングして試験とCAEの合わせ込みを行う。

(2) ロバスト設計

CAEを使用したロバスト設計を実施する。ユーザがCAEのパラメータに値を入力した際には、上記(1)で得られた補正係数を必ず掛け算する事により、試験に近い結果が得られる(図1)。

実際の設計においては、データ同化とロバスト設計のプロセスを何度かやり取りする事により行われる。製品に要求される性能要求を容易に満足しているのであればデータ同化の精度は荒くて良く、性能要求の達成がクリティカルな場合は、データ同化の精度を厳しく管理するといった判断が可能となる。

2.4 データ同化の活動状況

JAXAでは、京大生存圏研究所、等との間で共同研究を実施し、木造軸組構法住宅の耐震シミュレータのロバスト設計[8]およびデータ同化の研究を実施している。2階建て木造建築へ適用した事例では、JIANTを利用して、データ同化とロバスト設計の一連の作業を実施し、良好な結

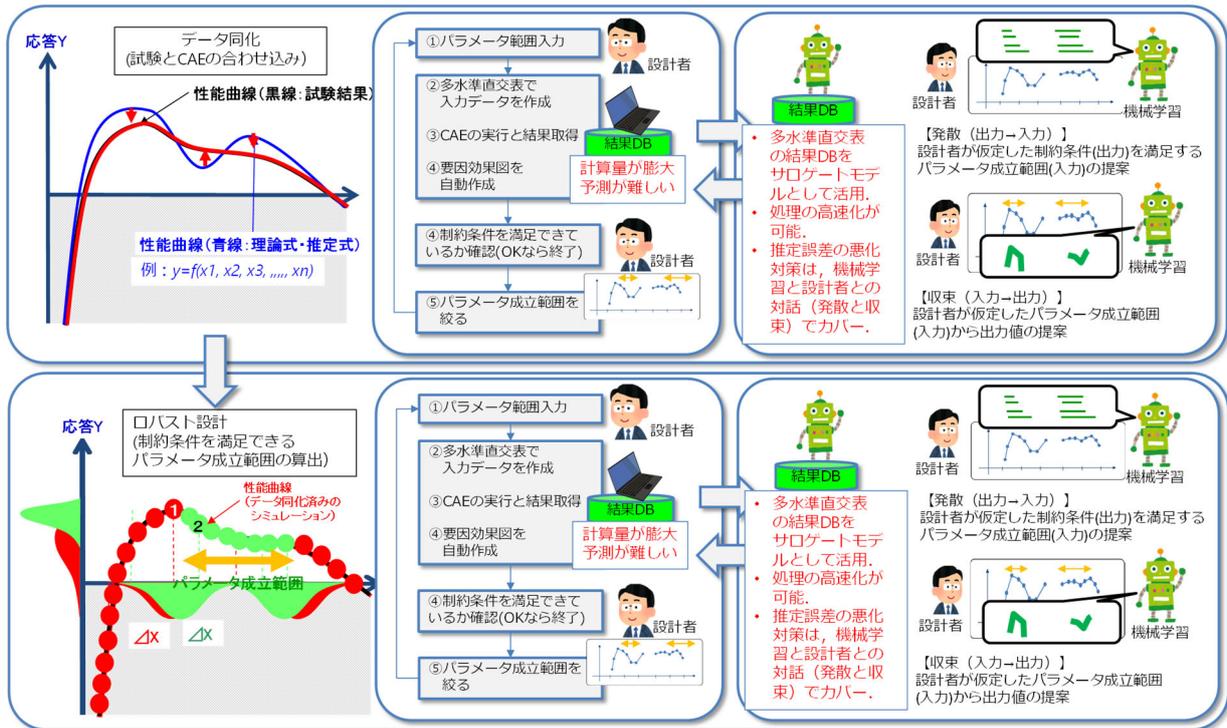


図 2 データ同化とロバスト設計における機械学習の導入

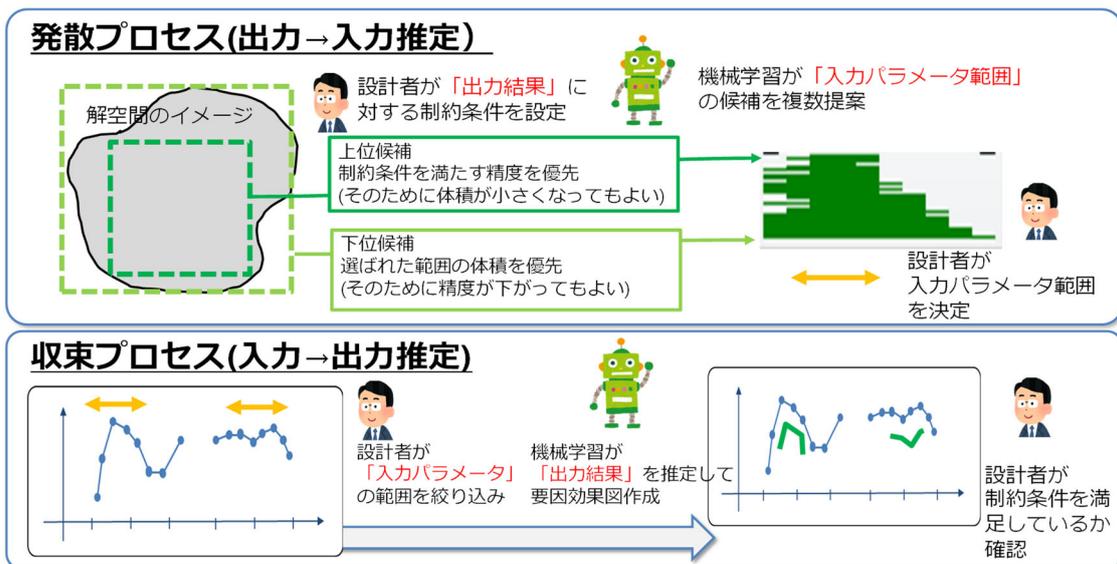


図 3 機械学習機能の定義 (発散プロセスと収束プロセス)

果を得ている[9][10]. 本検討は、1つの値を持った補正係数を用いた事例であるが、その後の検討により複数の試験結果、複数の環境条件を考慮した検討を実施しており、その場合は、最大値と最小値の幅を持った補正係数の利用を提案している[11].

3 非線形CAEによる設計支援と機械学習への期待

3.1 非線形CAEの現状

宇宙機、自動車などの開発では、製品の多機能化・高性能化に対応して非線形CAEの導入が進められているが、現時点では特定の事象の可視化が主な用途である。今後

は、非線形CAEを用いたロバスト設計や、CAEの高精度化のためのデータ同化の必要性が高まると考えられるが、そのためにはいくつかの課題がある。

3.2 非線形CAEの課題

(1) 大量の計算機リソースが必要となる。

流体解析、機構解析などに代表される非線形CAEは、一般的に大量の計算機リソースがかかるものが多い傾向がある。また、ロバスト設計(セットベース設計)は、その設計解を得るために網羅的な計算が必要となるものがあり、設計成立解の算出に多くの計算が必要となる。

さらに、CAEの精度を向上させるために、データ同化

(試験結果とCAE結果の合わせ込み)が検討されているが、この合わせ込みにも大量の計算が必要となる[12].

(2) 予測が困難

非線形CAEは、結果の予測が困難である。それは「初期条件によって鋭敏に反応して結果が大きく異なる」特徴や「計算過程で生じた端数処理に伴う誤差が、次のステップで相殺される場合もあれば、ステップを追うごとに拡大されて行く場合もある」といった非線形性の根本的な特徴に帰着する[13]。そのため、非線形性が強いCAEは、そのCAEを用いて実際に計算して設計に試してみる事が重要であり、結果の精度(収束度、発散度)と、要求への満足度のバランスを取る必要があると考える。

3.3 機械学習への期待

近年、CAEの代替としての機械学習への期待が高まっており、シミュレーションレスCAEという概念が提唱されている[14]。CAEの代替として機械学習を用いる事により、以下の可能性が議論されている[15].

- ① 高速化のための活用
- ② モデル化が困難な複雑な現象への活用
- ③ 逆問題・最適化への活用
- ④ 偏微分方程式の解法への活用
- ⑤ データ構造の理解への活用

しかし、実際の所は、工学設計への応用は難しいとされている。多くの工学問題ではどこかの場所のどのような物理量を学習させればよいのかの知見が全くないことが大きな課題であると指摘されている[16]。本研究では、この指摘の前提は、物理現象を直接的に機械学習に用いる事に起因していると解釈し、物理現象→機械学習ではなく、物理現象→CAE→機械学習の流れで利用する方法を提案する。しかし、前述した通り、特に非線形CAEは結果の予測が困難であり、機械学習はあくまで予測手段であるため、非線形CAEと機械学習の組み合わせはさらに予測精度が悪化する懸念がある。そこで、予測精度の向上のための工夫が必要となる。

4 データ同化とロバスト設計への機械学習の導入

4.1 機械学習を利用した設計プロセスの提案

データ同化とロバスト設計の一連のプロセスに対して有効となる機械学習の導入について検討する。ここで重要となる点は、非線形CAEに対して、機械学習を使う事による不確定性の増大をいかに減少させるかという点である。不確実性を減らすためには、予測精度そのものを向上させる工夫だけでなく、実際にロバスト設計解を算出し、その結果をもとに設計者との対話をしやすくする必要があったと考える。

本研究の提案プロセスを以下に示す(図2)。

- ① 多水準直交表の組み合わせ結果を用いて、サロゲートモデルを作成する。これにより、非線形CAEにおいても高精度な結果予測が可能と考えられる。

- ② 上記①を利用した機械学習によりデータ同化およびロバスト設計を行う。ロバスト設計解を算出し、製品に対する要求仕様を満足できるかを判断する事により、プロセス全体を俯瞰してトータルで評価する考えである。これは既報[9][10]で述べた、データ同化とロバスト設計の考え方の踏襲である。
- ③ 機械学習による予測は、入力から出力の推定と、出力から入力の推定の2方向とする。これは人間の創発行為の発散と収束プロセスをヒントに考案したものであり、設計行為を機械学習と設計者との対話であると解釈して考案したものである。
- ④ 機械学習が扱う情報は、パラメータ成立範囲によって行う事にする。ポイントベースではなく、セットベースにする事で、設計行為(機械学習と設計者との対話)を容易とする狙いがある。
- ⑤ 機械学習で得られた成立解を入力データとして、再度、CAEを用いた計算を行い、制約条件を満足できているかどうかの確認を実施する。ここで得られた結果は機械学習の予測計算は入っておらず、CAEの誤差だけの状態となっている。

4.2 機械学習機能の実装

4.2.1 概要

上記4.1①③④の実装に当たっては、Python言語を利用して実装を試みた[17]。いずれも、多水準直交法を用いたCAEの計算結果の入出力データの組み合わせ結果をもとにサロゲートモデルを作成して機械学習による予測を行う機能として定義した(図3)

4.2.2 機械学習機能の定義

(1) 発散プロセス：パラメータ範囲推定機能

サロゲートモデルに対して出力の制約条件を設定し、機械学習がそれを満足できる入力パラメータの範囲(最大値と最小値のセット)を推定し出力する機能である。ここで推定される範囲は、制約条件を100%満足する設計解だけでなく、90%程度満足する設計解も含めて、数多く提案する方法(発散プロセス)として、設計者が自由に選択する余地を残す考えとした。これは、以下の理由によるものである。

- ① 得られる入力パラメータの範囲は広い方が良いが、その広さは設計対象により異なるため一意に確定するのが困難であるため。
- ② 非線形CAEの候補は複数存在するため、目的に応じて判断する余地が必要のため。

設計者の側に立てば、後述する(3)の要因効果図推定機能で絞り込みが可能であるため、その設計判断の参考になる情報があれば十分であるとの判断に基づき実装した(図4)。

(2) 収束プロセス：要因効果図推定機能

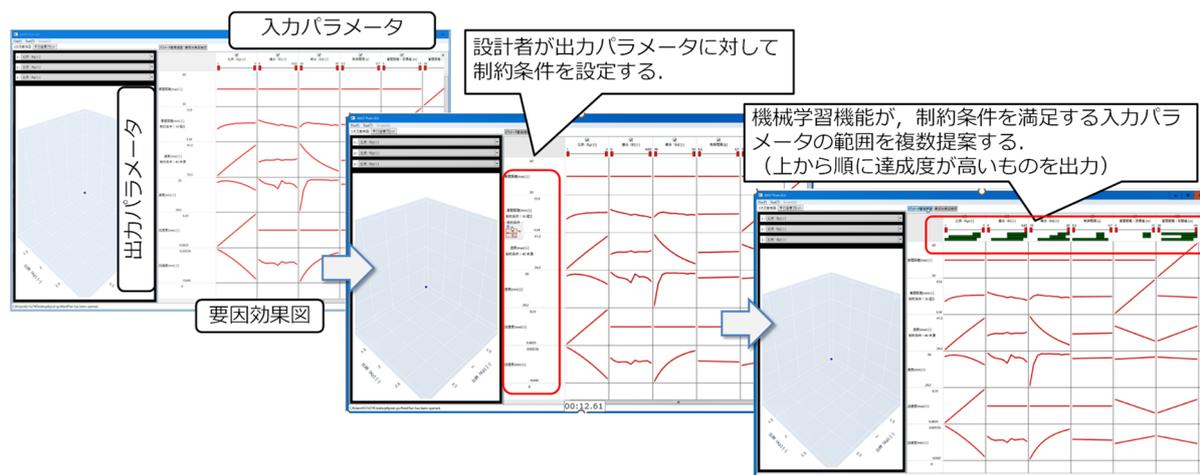


図 4 発散プロセスの実装（出力パラメータの制約条件を満足する入力パラメータ範囲の推定）

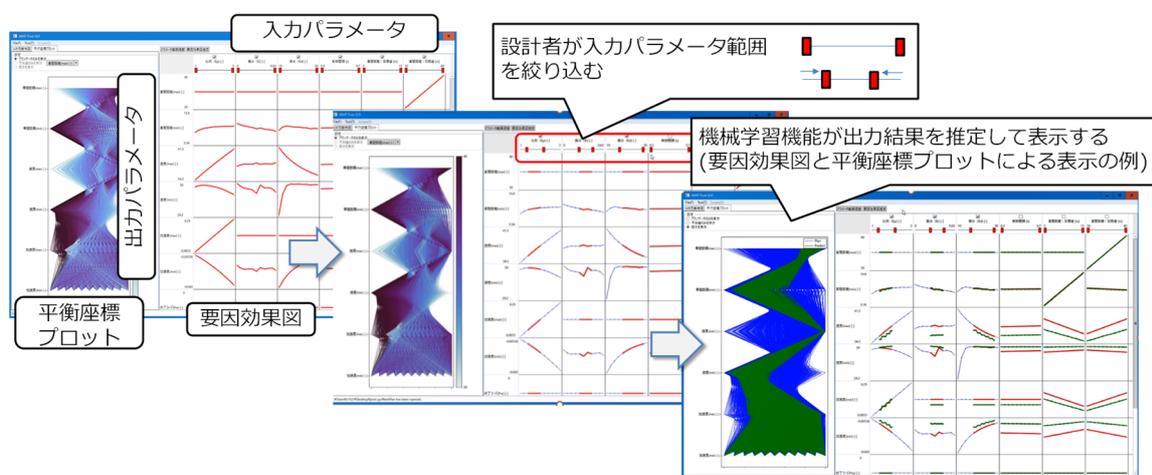


図 5 収束プロセスの実装（入力されたパラメータ範囲による出力結果の推定）

本機能は、既報（8）で述べた方法を高速化する目的で構築したものである。設計者は、前項で得られたパラメータ範囲と要因効果図を確認して制約条件を満足できそうな入力パラメータの範囲に絞りこみを行う。その範囲をもとに機械学習がサロゲートモデルを利用して絞りこみ範囲の要因効果図を推定する機能である。この機能は入力値に対して答えが一意に決まるものであり、上記(2)の機能のような繰り返し計算が不要であるため数秒で解が得られる利点がある(図 5)。

4.2.3 機械学習機能の実装

品質工学ツール(JIANT)に実装した結果を、図 4、図 5 で示す。品質工学の結果を可視化する方法として定評がある要因効果図を採用し、画面中心に配置している。図上部(横軸)に入力パラメータ、図左側(縦軸)に出力パラメータを並べている。発散プロセス(パラメータ範囲推定機能)を利用する場合は、該当する出力パラメータに制約条件を入力して、ボタンを押下すると、入力パラメータ上に推定範囲の候補が緑色で出力される(図 4)。収束プロセス(要因効果図推定機能)を使用する場合は、設計者が入力

パラメータの範囲を手動で絞り込み、ボタンを押下すると、その範囲で計算した結果の要因効果図が緑色の線で表示される(図 5)。

5 適用事例

木造建築の耐震設計に適用した事例を示す。これは既報[8]で述べたロバスト設計結果の再現させたものであり、提案した機械学習機能の動作確認を行う目的で実施したものである。既報では、JSS3を利用して12461回の計算を行い、前後処理を合わせて1サイクルの検討に1週間程度かかっていた。最終的なロバスト設計解を得るためには上記のプロセスを3サイクル繰り返す必要があるため、トータルで約1か月以上かかる計算となる。しかし、本研究では機械学習機能を利用する事で、発散プロセス(入力パラメータ範囲の推定)は数時間程度で可能であり、収束プロセス(出力結果の推定)は数秒で可能である。特に後者の収束プロセスの高速化の効果が高く、設計者が使いながら試行錯誤できるので対象問題の理解が進み、効率的な設計や、教育的な効果が期待できる。

課題: 大地震で100%倒壊しない(層間変位0.0933m以内)のパラメータ成立範囲の算出

得られたパラメータ成立範囲(色塗り斜体文字の範囲)



図6 木造建築耐震設計への適用事例

6 結論

設計工学や数値シミュレーションの分野へ機械学習の導入する方法を提案し、実際に品質工学ツール(JIANT)に導入した検討を行い、その有効性を検証した。今回は、木造建築の耐震設計を対象としたロバスト設計を対象として実施したが、同様な考えは前段に実施するデータ同化でも利用が可能である。今後は、試作した機械学習機能を利用して、データ同化とロバスト設計について行う予定である。データ同化もロバスト設計ともに、様々な製造分野で研究が進められているが、いずれも計算コストの削減と計算精度の向上が課題となっており、それは非線形シミュレーションを使用した際により一層求められる状況である。それらの検討を加速させるためにも、機械学習の導入は有効であると考えている。

謝辞

本研究は京都大学・大阪工業大学・奈良女子大学・JAXAによる共同研究「品質工学を用いた木造住宅倒壊解析シミュレーションのデータ同化手法の検討」の一環として実施した。また計算にはJAXAのスーパーコンピュータのJSS3[18]を利用した。

参考文献

- [1] 田口玄一：技術開発のための品質工学，日本規格協会，(1994)
- [2] 角有司：双対性を利用した大規模システム開発手法の提案，設計工学会「設計工学」2021年12月号
- [3] 荒木秀二，角有司，他：JAXAにおける安全・ミッション保証に関する研修制度，日本信頼性学会「信頼性」，(2020)
- [4] 角有司，他：品質工学を利用したMMX着陸シミュレーションのロバスト性評価，第63回宇宙科学技術連合講演会，(2019)
- [5] 角有司，他：1 DCAEによる惑星探査ミッションの多目的ロバスト・セットベース最適設計，日本機械学会1 DCAE/MBDシンポジウム2022，2022.12
- [6] ものづくり支援のための計算力学シミュレーションの品質保証に向けて，日本学術会議 計算科学シミュレーションと工学設計分科会，(2011/4/28)

レーションと工学設計分科会，(2011/4/28)

- [7] 小野謙二：シミュレーションの精度と利用価値，自動車技術会 MotorRing No.16,(2003)
- [8] 角有司，中川貴文，多様な地震波に対するロバストな木造建築の耐震設計手法の研究，第27回品質工学研究発表大会(2019)
- [9] 角有司，上松千陽，瀧野敦夫，難波宗功，中川貴文，品質工学を利用したデータ同化手法の検討と木造住宅倒壊シミュレーションへの適用第26回 計算工学講演会 2021.6.
- [10] 角有司，飯山洋一，中川貴文，難波宗功，瀧野淳夫，製品情報と運用情報の組み合わせ探索による設計手法の研究(第6報：ロバスト設計とデータ同化の統一的方法論の提案)，第32回日本機械学会設計工学システム部門講演会，2022.11
- [11] 角有司，上松千陽，瀧野敦夫，難波宗功，中川貴文，複数の地震波を考慮した3階建て木造建築耐震シミュレーションのデータ同化手法の検討，第27回計算工学講演会，2022.6
- [12] 菊池亮太，データ同化の基礎と活用に向けて，実験とシミュレーションを繋ぐデータ同化
https://www.tfc.tohoku.ac.jp/online_event/2020dsw/06/02_kikuchi.pdf (Accessed 2023.4.1)
- [13] 後藤蔚，非線形性の哲学，東洋大学文学部哲学科，
<https://www.toyo.ac.jp/uploaded/attachment/8032.pdf> (Accessed 2023.4.1)
- [14] 和田義孝，深層学習によるシミュレーションレスCAE~計算力学サロゲートモデルの構築~，第3回CMT分科会，2019.3.29
- [15] 宮川尚紀，シミュレーション解析における機械学習の展開可能性，みずほリサーチ&テクノロジーズ技報，https://www.mizuho-rt.co.jp/publication/giho/pdf/009_12.pdf (Accessed 2023.4.1)
- [16] 和田 義孝，深層学習によるき裂進展予測のためのサロゲートモデルの構築，日本原子力学会2018年秋の大会，計算科学技術部会セッション，人工知能技術の活用と将来展望，2018.9.7
- [17] Python，(<https://www.python.jp/>) (Accessed, 2023.4.1)
- [18] JSS3，(<https://www.jss.jaxa.jp/>)，(Accessed,2023.4.1)