

# 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<sup>1)</sup>, 築地巧実<sup>2)</sup>

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せね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畳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. 畳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微量を学習する。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)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微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微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。

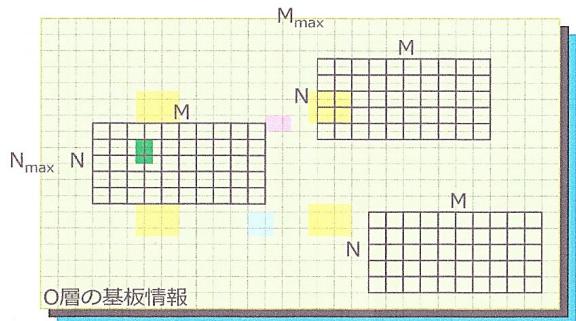
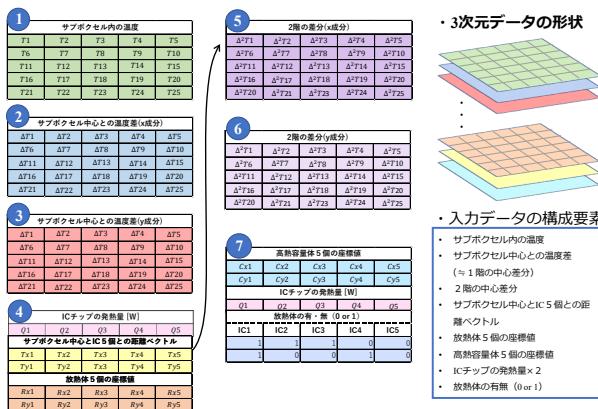


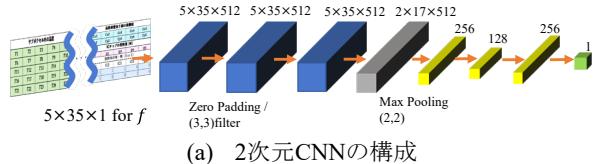
図-1 空間の分割とサブボクセル(MxN)の配置

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

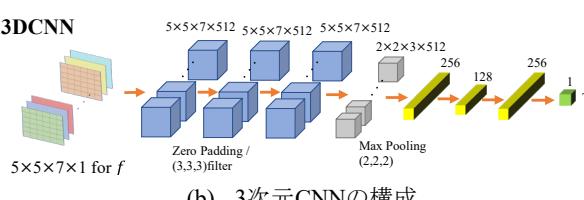
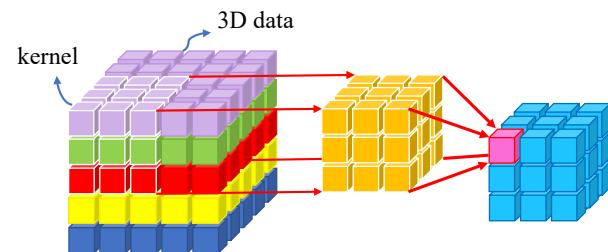
#### 4. ネットワーク構成

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



##### 3DCNN

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

#### 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、サブボクセルを用いた温度場予測は成立しているといえる。一方で、3次元CNNの予測結果は高温度部でよりよい一致を見せており、設計上必要な高温度部の評価には適切な予測結果を示している。

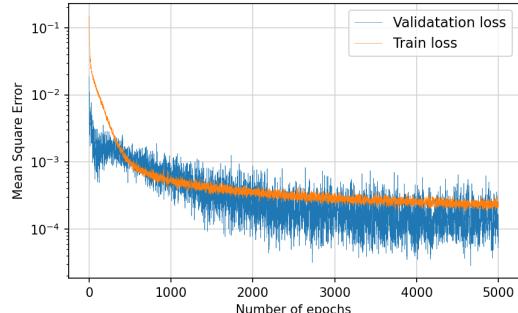
図-7は、予測対象全体の温度分布図を示す。双方ともに大きな誤差を含むような不自然さは見られず、要求精度によっては2次元CNNでも実用上適用できる可能性がある。一方で、高温度部分では、一部低めの予測値を示している。2つの結果をより明確にするために予測温度の絶対誤差の分布図を図-8に示す。3次元CNNによる予測は、明らかに誤差が少ないと分かる。一方で、高温度を示すICチップの四隅に誤差が高くなる傾向がある。これまでの知見に従いデータ拡張などを施し対処する必要がある。

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。

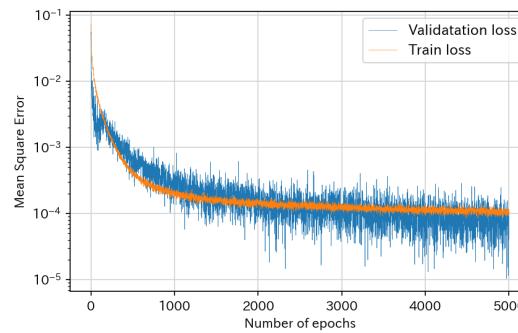
#### 6. 結言

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

より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こと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。

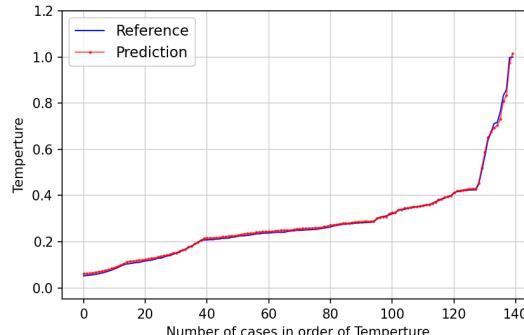


(a) 2次元CNNの損失の推移

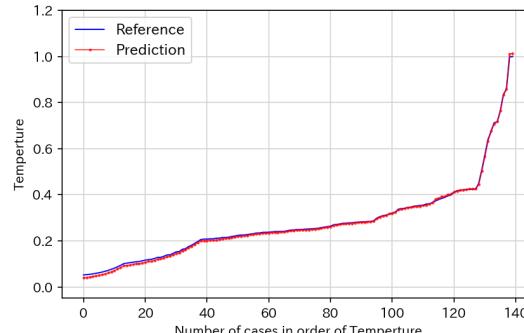


(b) 3次元CNNの損失の推移

図-5 学習と検証損失の推移

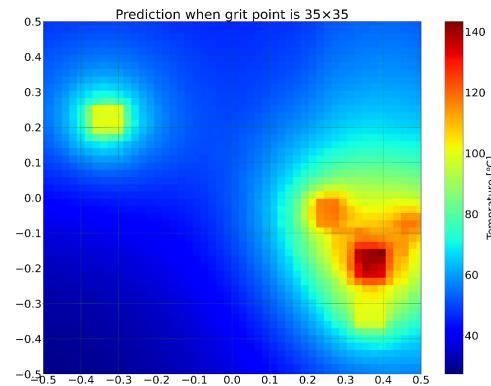


(a) 2次元CNNの温度予測

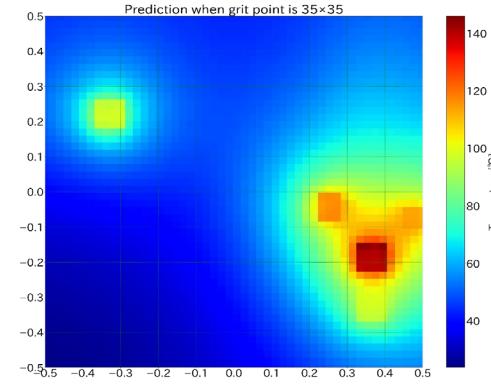


(b) 3次元CNNの温度予測

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

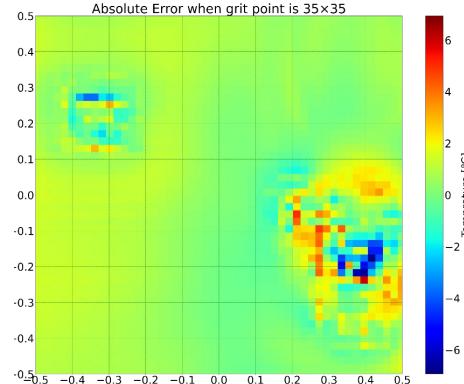


(a) 2次元CNNの温度場予測

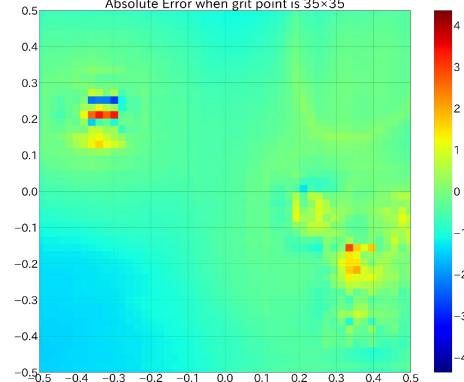


(b) 3次元CNNの温度場予測

図-7 ヒートマップによる予測結果の比較: 高温度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

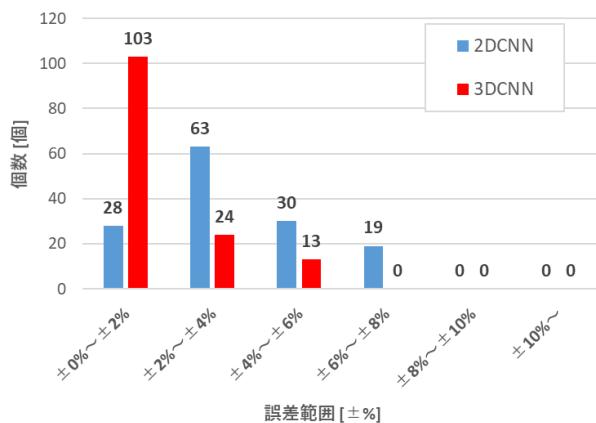


図-8 相対誤差の度数分布による評価:3次元CNNの予測精度が高く、2次元CNNにおいて大きな予測誤差を生じることはない

### 参考文献

- [1] 和田義孝,深層学習によるき裂進展評価～計算力学サブ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, 疊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