計算工学講演会論文集　Vol.29 (2024年6月)　日本計算工学会

深層学習による数値積分の効率化（積分点数の最適化）

DL-based Efficient Numerical Quadrature by means of Optimization of the Number of Quadrature Points

柏原大輝[1)]，大石篤哉[2)]
Daiki Kashihara and Atsuya Oishi

1) 徳島大学大学院創成科学研究科理工学専攻機械科学コース（〒770-8506 徳島県徳島市南常三島町２－１）
2) 博士（工学） 徳島大学大学院 准教授（〒770-8506 徳島市南常三島町２－１, E-mail: aoishi@tokushima-u.ac.jp）

This paper proposes a new DL-based method of efficient numerical quadrature for the calculation of element stiffness matrices by means of the optimization of the number of quadrature points. Basic properties of the proposed method are investigated in detail for linear and quadratic elements of tetrahedral and hexahedral shapes, and very promising results are obtained through some numerical examples.

Key Words : *Deep Learning, Finite Element Analysis, Element Stiffness Matrix, Numerical Quadrature*

1. はじめに

有限要素解析において各要素の要素剛性行列を算出する要素積分過程は重要な過程である．通常，数値積分により実行され，多数の積分点を用いれば精度の高い要素剛性行列が得られるが，計算量が積分点数に比例して増大するため，一定の精度を保ちながら可能な限り少ない積分点数による要素積分が望ましい．要素積分の収束性（精度）は当該要素の形状により異なるため．要素形状を規定する節点座標値から要素ごとに最適な積分点数を推定することにより，要素積分の計算効率向上が可能となる．

最適な積分点数の推定には深層学習が有効である[1-3]．多数の様々な形状の要素について最適な積分点数を求め，（要素形状，積分点数）のデータ対を多数収集し，これを学習データとして階層型ニューラルネットワーク（NN）の学習を行い，分類器を構築すればよい．

本研究では，6面体および4面体形状のソリッド要素に対して，深層学習による積分点数の最適化を行った．

2. 要素積分

要素剛性行列$[\,{}^{e}k]$は，$[B]$をひずみ－変位マトリックス，$[D]$を応力－ひずみマトリックス，v^eを要素領域として次式で表される．

$$[\,{}^{e}k] = \int_{v^e} [B]^T[D][B]\,dv \tag{1}$$

式(1)はGauss-Legendre積分などの数値積分法により，複数の評価点（積分点）における被積分関数値と重みの積和として求められる． 積分点を増やすことにより精度向上が可能であるが，積分点数に比例して計算時間が増大する．

要素積分の精度に関して次式のような誤差指標を定義する．

$$E(q) = \frac{\sum_{i,j}\left|[\,{}^{e}k^{q}]_{i,j} - [\,{}^{e}k^{q_m}]_{i,j}\right|}{\max_{i,j}\left|[\,{}^{e}k^{q_m}]_{i,j}\right|} \tag{2}$$

ここで，$[\,{}^{e}k^{q}]_{i,j}$は積分点q個で算出した要素行列のi行j列成分，q_{m}は最大積分点数（ほぼ真値が得られる積分点数）である．$E(q)$があらかじめ設定した許容誤差を下回る最小の積分点数を最適積分点数q^{opt}と定義する．本研究では，Fig. 1に示す6面体1次・2次要素および4面体2次要素を対象とする．

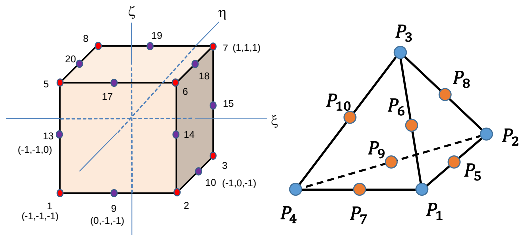

Fig. 1 Solid elements

3. 深層学習による積分点数の最適化

要素形状により要素積分の収束性が変化することはよく知られている．単一材料の場合，要素積分における被積分関数は基底関数と節点座標という有限個の要素パラメータで特定可能である．本研究では，深層学習により要素パラメータから最適積分点数への写像関係を階層型NN上に構築する． 本手法は次の３つのPhaseからなる[1-3]．

Phase1 様々な要素パラメータ（節点座標）をもつ多数の要素に対して，最適積分点数を求め，（要素パラメータ，最適積分点数）という学習パターンを大量に作成する．

Phase2 Phase1で作成した学習パターンを用いて要素パラメータを入力データ，最適積分点数を教師データとして階層型NNの学習を行う．

Phase3 学習済みNNを解析コードに組み込む．新たな要

素パラメータに対して学習済みNNが出力した最適積分点数を用いて要素積分を行う．

高速性が求められるPhase3における推定は迅速である．

4. 階層型NNの構築（６面体要素）

6面体要素の場合，$\xi\eta\zeta$各軸の積分点数は同一とし，1軸当たり積分点数を最適化する．1軸当たり最適積分点数q^{opt}（整数値）から次式で算出した最適積分点数r^{opt}（実数値）を深層学習の教師データとし，実際の数値積分では学習済みNNが回帰推定したr^{opt}を切り上げた整数値を用いる．なお，E_{th}はあらかじめ設定した許容誤差であり，本研究では．10^{-9}とした．

$$r^{opt} = (q^{opt} - 1) + \frac{log(E_{th}) - log\,E(q^{opt} - 1)}{log\,E(q^{opt}) - log\,E(q^{opt} - 1)} \quad (3)$$

単位立方体形状の要素を基準として各節点の座標をの範囲でランダムに移動させ，様々な形状の20万個の要素を生成した後，最適積分点数を算出して学習パターンを収集した．NNの中間層は層数4，ユニット数200，活性化関数はsigmoidとした．学習済みNNを別に生成した1万個の検証パターンで評価した結果の混同行列をFig. 2に示す．横軸が真の最適積分点数（１軸当たり）であり，縦軸はNNの推定値である．正解率は96%である．

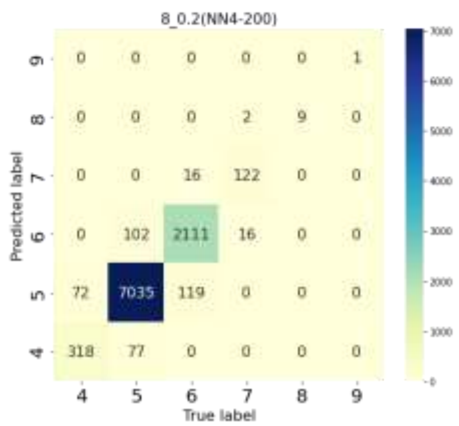

Fig. 2 Confusion Matrix

6面体2次要素においても，全中間節点が各辺の中点にある場合は95%，1個の中間節点が辺の中点にない場合は94%の正解率であった．

5. 階層型NNの構築（４面体要素）

4面体要素の場合，通常，4面体領域に対する専用の数値積分法が用いられ，あらかじめ算出された積分点と重みを用いる[4]．このため，6面体要素の場合は回帰問題としてr^{opt}（１軸当たり）を推定したが，4面体要素では分類問題としてq^{opt}（１要素あたり）を推定する．

4面体1次要素および各辺の中点に中間節点を持つ4面体2次要素は要素積分精度が形状に依存しないため，本手法では少なくとも1つの中間節点が辺の中点にない要素を対象とする．1個あるいは3個（同一要素面内）の中間節点が中点にない要素についてNNを構築した結果，それぞれ，97%，86%の正解率となった．

6. 実施例

Fig. 3のように左端を固定し右端上半面に引張荷重を印加した際の右端中央部の節点変位の精度を有限要素解析により求めた．16個の6面体1次要素で構成され，下側8要素は立方体形状である．要素積分には，Fig. 2のNNで推定した積分点数を用いた．比較のため，全要素を1軸当たり2,3,4,5点の積分点数で要素積分た場合もそれぞれ解析した．Fig. 4に結果を示す．縦軸左側は全積分点数，右側は右端中央部の節点変位の精度（誤差）である．本手法により少ない積分点数でも高精度な解析ができることがわかる．

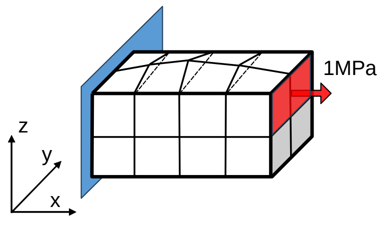

Fig. 3 Tested Mesh

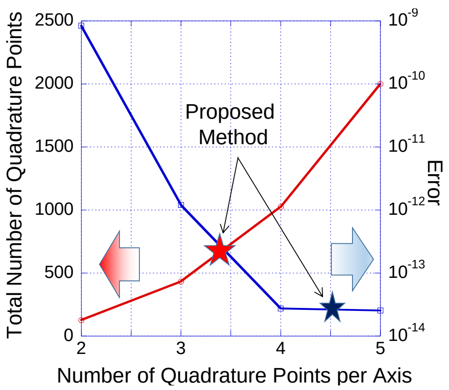

Fig. 4 Results

7. まとめ

有限要素解析における要素積分に対して，深層学習により要素形状から最適積分点数を推定することにより要素積分の効率向上が可能である．実際に6面体1次・2次要素および4面体2次要素に本手法を適用し，要素積分効率改善をできることを示した．

参考文献

[1] Oishi, A. and Yagawa, G.: Computational mechanics enhanced by deep learning, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 327, pp. 327-351, 2017

[2] Yagawa, G. and Oishi, A.: Computational Mechanics with Neural Networks, Springer, 2021.

[3] Yagawa, G. and Oishi, A.: Computational Mechanics with Deep Learning: An Introduction, Springer, 2022.

[4] Jaśkowiec, J. and Sukumar, N.: High-order symmetric cubature rules for tetrahedra and pyramids. *Int. J. for Numer. Meth. Engrg.*, Vol. 122, pp. 148-171, 2021.