

深層学習を用いた応力場予測における 相対度数の均等化によるデータ拡張の有効性について

Study on the effectiveness of data augmentation by equalized relative frequency
in stress field prediction using deep learning

豊吉巧也¹⁾, 篠田正宗²⁾

Takuya Toyoshi and Masamune Shinoda

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)

2) 愛知工科大学 工学部 機械システム工学科 学生

(〒443-0047 愛知県蒲郡市西迫町馬乗50-2, E-mail: 20203016@g.aut.ac.jp)

This study discussed the effectiveness of a data analysis method for generating a surrogate model of numerical simulation results, such as the finite element method. This method focused on the relative frequency of learning data and its equalizing. A feature of this method is likely to reduce bias in training data and solve imbalanced data problems. On the other hand, using augmented data increases the number of learning data, and it leads to increased learning time. Investigating the prediction accuracy and effectiveness of different augmentation numbers in fewer epochs is necessary. The method is applied to predict the stress field, and the prediction results show a decrease in the prediction error compared with the unapplied method.

Key Words : Data Augmentation, Relative Frequency, Stress Field Prediction, Deep Learning

1. はじめに

近年、深層学習を用いた数値解析結果の予測技術に関する研究が盛んに行われている。これらは一定数のデータを学習し、学習モデル(サロゲートモデル)を生成する。この利点として、生成された学習モデルを用いることで計算の手間やコストを削減することができる点が挙げられる。学習モデルの生成には、マルチレイヤーパーセプトロン(Multilayer Perceptron, MLP) [1]や、Physics-Informed Neural Networks (PINNs) [2], ガウス過程回帰(Gaussian Process regression, GPR) [3]などのさまざまな方法が提案されており、有限要素法による構造解析結果を用いてそれぞれの方法について比較、検討されている [4]。

数値解析結果の予測のような回帰問題において、学習データは一般的に不均衡となることが多い。深層学習において不均衡なデータを学習に用いた場合、サロゲートモデルが有する表現力の高さから、学習データに特化しすぎることにより汎化性能が低下する恐れがある。この対策として正則化技術が挙げられるが、正則化に用いるパラメータは問題によって個別な調整が必要となる。この他に、学習モデルの予測精度向上に有効な手段のひとつとして、学習データの拡張(データ拡張技術)がある。一般的なデータ拡張技術としてノイズ付与が挙げられるが、ノイズ付与後の平均値が元の値になるようにする必要があり、ノイズ付与されたデータ同士が他の入力とオーバーラップしないような範囲でノイズを付与する必要

があるなどの制約も多い。このように、ノイズ付与ではノイズの範囲を慎重に決定する必要がある。また、これらの決定は予測対象ごとの検討が必要となることから、データ拡張技術としての汎用性に欠けてしまうという欠点を持つ。

このように、数値解析結果を予測する学習モデルの生成において、不均衡データに対する具体的な解決方法が検討されていないというのが現状である。また、学習モデルの生成時間を短縮するために、少ない学習時間で予測精度を向上することも求められている。このような問題を解決するために、著者らは学習データの相対度数に着目したデータ拡張を提案している[5, 6]。

一般的に拡張されたデータは、学習元の総データ数が多くなることから、同じepoch数での比較が困難である。そこで、本稿では拡張されたデータとの比較に、拡張数の最大値を定め、元のデータ数および拡張時のデータ数をすべて揃えて、相対度数の均等化によるデータ拡張手法を応力場の予測に適用し、その有効性について検討した。

2. 数値解析による学習データ生成について

応力場の予測に用いる学習データは、二次元有限要素法による解析結果を用いる。幅、高さ50 mmの平板に直径12.5 mm の円孔を有する厚さ2 mmの平板を対象とし、対称の境界条件より1/4モデルでの解析を行った(図1)。材

料のヤング率およびポアソン比はそれぞれ210 GPa, 0.3とした．四角形二次要素を用い，要素数および節点数はそれぞれ，900, 2821とした．ただし，学習データ量削減のため，学習には中間節点を除く961点のデータを扱うものとする．荷重 P は1kNごとに1～10kNの全10ケースの解析を予め行い，データを用意した．

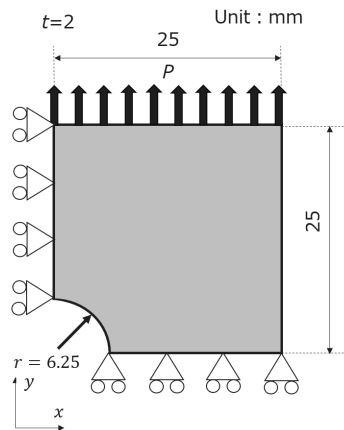


図-1 学習データとして用いる解析対象および条件

3. 学習モデルとデータ拡張手法について

前述の全10ケースの有限要素法による解析結果から，5 kNを予測対象とし，これを除く9ケースのデータを用いることとする．また，学習および予測の対象となる応力成分は σ_{yy} とし，節点に外挿された値を用いることとする．

学習モデルへの入力，各節点座標と荷重で構成されるベクトルで定義し，重み W とバイアス b による線型結合と活性化関数を用いたニューラルネットワークにより得られる値を出力とする．出力される値と有限要素法による解析結果の値を最小化することで学習モデルの生成を行う．これらの概要を図2に示す．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．

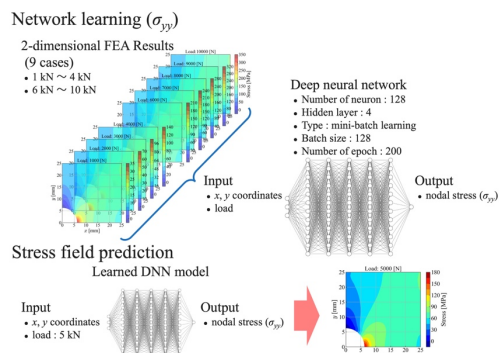


図-2 学習モデルの生成と予測

最適化関数にはAdam，損失関数には平均二乗和誤差(MSELoss)，活性化関数にはSiLUを用いた．また，学習モデルの生成には，全学習データからランダムに抽出したデータを用いて学習するミニバッチ学習によって行い，

ミニバッチサイズは128とした．全ての学習データに対して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．

学習データはそれぞれの値の最大値および最小値を用いて， x, y 座標では-1.0から1.0の範囲で，荷重および応力 σ_{yy} はゼロ除算が生じないように0.01から1.0の範囲で正規化を行った．

表-1 学習モデル構成

| 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 |

データ拡張手法は，まず階級数 n_b を決め各階級の相対度数 r_f を求め，式(1)より相対度数の偏りが減少するような相対度数 r'_f を求める．この r'_f よりデータを1回拡張するときのそれぞれの階級のデータ数を求める．これを繰り返すことで，データ拡張を行う．

$$r'_f = \frac{1 - r_f}{n_b - 1} \tag{1}$$

ここで，正規化後の σ_{yy} ($P = 1$ kNのみ) について，階級数を10としたときの相対度数を図3に示す．

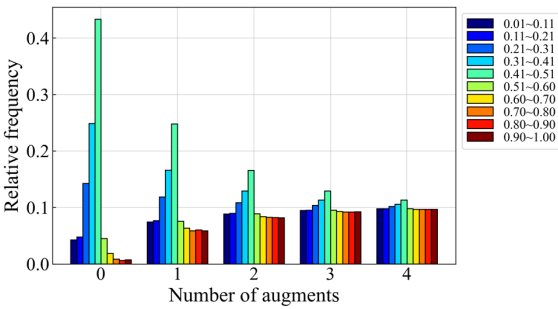


図-3 σ_{yy} ($P = 1$ kNのみ) のデータ拡張による相対度数の変化

データの拡張回数を拡張数とよび，拡張数0では，0.3～0.4の階級の度数が高く，0.9から0.1の（応力の値が高い）階級の度数が低い．このような相対度数に極端な偏りがある場合にはノイズ付与のみで相対度数の偏りを改善す

ることが困難であることが想定され、予測精度の向上に効率的でないと考えられる。本稿でのデータ拡張手法より、拡張回数が増えるごとに、相対度数が均等化されていく様子が確認できる。

このデータ拡張手法を学習データ全体に適用したものを図4に示す。図4より、拡張数0では応力の値が高いデータが極端に少ないという度数分布となるが、拡張回数が増えることで、全体的になだらかな度数分布となることが確認できる。

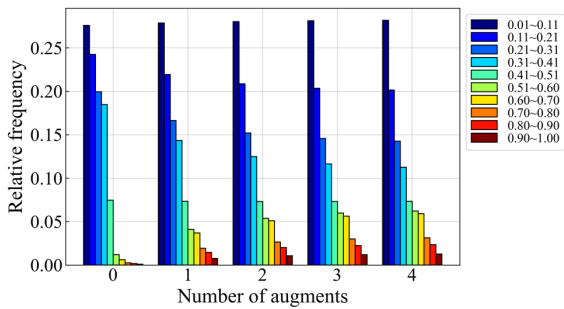


図-4 σ_{yy} (学習データ全て) のデータ拡張による相対度数の変化

本稿でのデータ拡張手法において、1回のデータ拡張において、拡張する前のデータ数と同数とした。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。本稿では、拡張数4をデータ拡張の最大値とし、学習モデル生成時のデータ数は各拡張数で拡張数4と同数とした。

4. 結果および考察

(1) 拡張後のデータを用いた学習について

拡張数0～4の学習モデル生成時の予測精度を図5に示す。どの拡張数においてもepoch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。また、どの拡張数においても学習開始時からおおよそ90%の予測精度であることが確認できる。

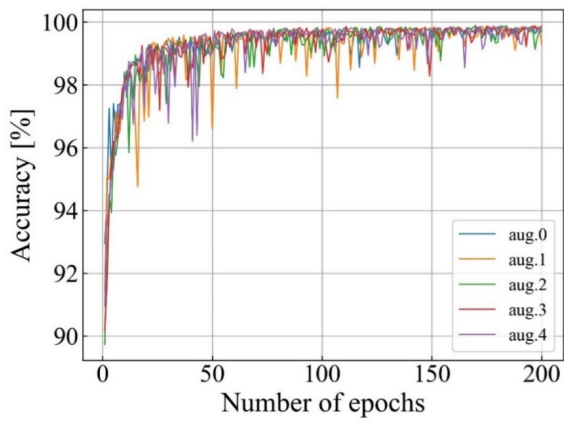


図-5 学習モデル生成時の予測精度

次に、各拡張数での予測精度の最終値を表2、拡張前に比べ拡張後の予測精度の変化を表3に示す。予測精度の最終値はすべての拡張数で約99%であることが確認でき、学習時に過学習等が発生せず学習が正しく行われていることが確認できる。拡張後の予測精度については、拡張数1では減少している結果となったが、それ以外では上昇していることが確認された。

表-2 拡張数ごとの予測精度

| | aug. 0 | aug. 1 | aug. 2 | aug. 3 | aug. 4 |
|---------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Acc [%] | 99.685 | 99.295 | 99.801 | 99.861 | 99.697 |

表-3 拡張前と拡張後の比較

| | aug. 1 | aug. 2 | aug. 3 | aug. 4 |
|---------|--------|--------|--------|--------|
| Acc [%] | -0.390 | 0.116 | 0.176 | 0.012 |

(2) $P = 5 \text{ kN}$ の予測結果について

学習データとして使用していない σ_{yy} ($P = 5 \text{ kN}$) の予測結果について、有限要素法による解析結果との差を予測誤差として、その最大値ならびに最小値を表4に示す。予測誤差の最小値については、どの拡張数についても同様の結果となったが、予測誤差の最大値はデータ拡張により減少することが確認された。また、拡張前の予測誤差と比較の差を表5に示す。この結果より、予測誤差の最大値については拡張数2以降で予測誤差を約半分程度まで低減できていることが確認された。

表-4 予測誤差の最大値と最小値

| | Max. [MPa] | Min. [MPa] |
|--------|------------------------|------------------------|
| aug. 0 | 9.306×10^{-1} | 2.213×10^{-4} |
| aug. 1 | 6.351×10^{-1} | 9.338×10^{-3} |
| aug. 2 | 3.820×10^{-1} | 1.144×10^{-4} |
| aug. 3 | 4.560×10^{-1} | 3.357×10^{-4} |
| aug. 4 | 4.905×10^{-1} | 2.899×10^{-4} |

表-5 拡張前の予測誤差と比較

| | Max. [MPa] | Min. [MPa] |
|--------|-------------------------|-------------------------|
| aug. 1 | -2.955×10^{-1} | -9.117×10^{-3} |
| aug. 2 | -5.486×10^{-1} | -1.068×10^{-4} |
| aug. 3 | -4.745×10^{-1} | 1.144×10^{-4} |
| aug. 4 | -4.401×10^{-1} | 6.866×10^{-5} |

次に、拡張数4の学習モデルを用いた σ_{yy} ($P = 5 \text{ kN}$) の応力場の予測結果を図8に示す。この結果より、円孔周辺部の応力集中も十分に表現できていることが確認できる。また、拡張数4の学習モデルを用いた場合の予測誤差は表4より、最大値0.491MPa、最小値 2.899×10^{-4} MPaであることから、未学習の応力場 (σ_{yy}) を0.49MPa以下の予測誤差で予測可能であることが確認された。

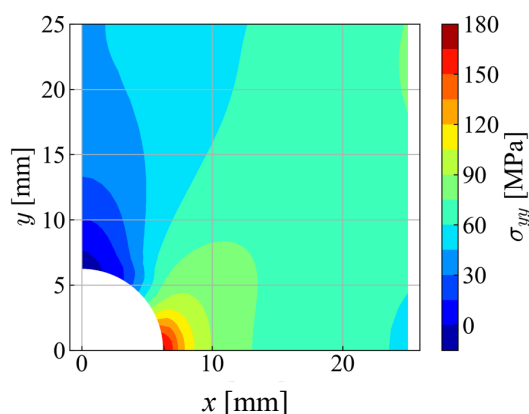


図-8 応力場の予測結果(拡張数4)

最後に、拡張数0および拡張数4の予測結果と有限要素法による解析結果との差を予測誤差として、それぞれの予測誤差を図9および10に示す。拡張数0の学習モデルによる予測誤差(図9)では応力集中部である円孔周辺に予測誤差が集中していることが確認できる。一方で、拡張数4の学習モデルによる予測誤差(図10)では円孔周辺に予測誤差が集中していないことが確認できる。この結果から、相対度数の低い応力集中部についても十分に学習できたことで予測誤差が低減できたものと考えられる。

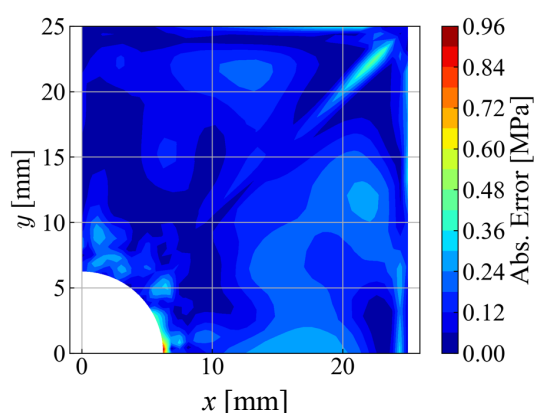


図-9 応力場の予測誤差(拡張数0)

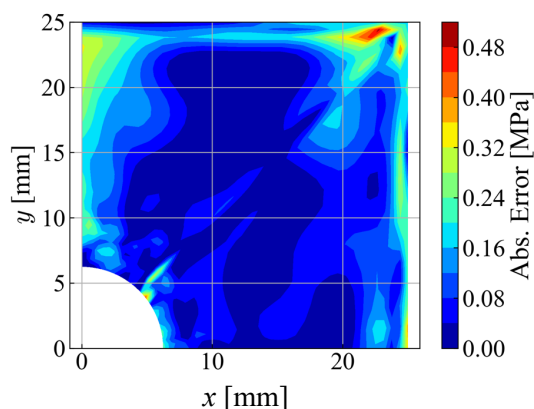


図-10 応力場の予測誤差(拡張数4)

5. おわりに

本研究では、相対度数の均等化によるデータ拡張手法を用いて、元のデータ数もしくは拡張後のデータを複製し、データ数をすべて揃えて予測精度の比較を行い、手法の有効性について検討した。その結果、以下の結論が得られた。

- 少ないエポック数においても予測精度は拡張前に比べ拡張数 2~4 では向上した
- 提案するデータ拡張後の予測誤差の最大値は拡張数 0 に比べ低下することが確認された
- 拡張数 4 での学習モデルによる未学習の応力場に対する予測誤差は最大 0.491MPa であった
- 提案するデータ拡張により、相対度数の低い円孔周辺部の応力場の予測誤差が低減された

提案するデータ拡張は相対度数の低い予測結果の信頼性の向上に寄与できる可能性が高いといえる。また、データ拡張後の予測精度が向上していることから提案手法では、少ないエポック数でより良い結果が得られたことが分かった。以上の結果から、相対度数を均等化するデータ拡張手法は、数値解析結果の深層学習によるサロゲートモデル化に有効であると考えられる。

参考文献

- [1] Rosenblatt, F., The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain, *Psychological Review*, Vol.65, No.6 (1958), pp.386–408.
- [2] 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, No.1 (2019), pp. 686-707.
- [3] Williams, CKI. and Rasmussen, CE., *Gaussian Processes for Regression*, *Advances in neural information processing systems* 8 (1996), pp.514-520.
- [4] Hoffer, J. G., Geiger, B. C., Ofner, P. and Kern, R., Mesh-Free Surrogate Models for Structural Mechanic FEM Simulation: A Comparative Study of Approaches, *Appl. Sci.* 11(20) 9411 (2021), pp.1-32.
- [5] 豊吉 巧也: 深層学習を用いた応力場予測に関するデータ拡張手法, 計算工学講演会論文集, Vol.28, 2023.
- [6] 豊吉 巧也: 相対度数の均等化によるデータ拡張を用いた応力場およびひずみ場の予測に関する研究, 日本機械学会第36回計算力学講演会, OS-2417, 2023.