

(19)日本国特許庁(JP)

## (12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7633521号  
(P7633521)

(45)発行日 令和7年2月20日(2025.2.20)

(24)登録日 令和7年2月12日(2025.2.12)

(51)国際特許分類	F I
G 0 6 F 30/20 (2020.01)	G 0 6 F 30/20
G 0 6 F 30/27 (2020.01)	G 0 6 F 30/27

請求項の数 8 (全28頁)

(21)出願番号	特願2021-113566(P2021-113566)	(73)特許権者	000005223 富士通株式会社 神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号
(22)出願日	令和3年7月8日(2021.7.8)	(74)代理人	110002918 弁理士法人扶桑国際特許事務所
(65)公開番号	特開2023-9904(P2023-9904A)	(72)発明者	ハデルバシュ アミル 神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号 富士通株式会社内
(43)公開日	令和5年1月20日(2023.1.20)	(72)発明者	白幡 晃一 神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号 富士通株式会社内
審査請求日	令和6年4月4日(2024.4.4)	審査官	合田 幸裕

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 プログラム、推論方法および情報処理装置

## (57)【特許請求の範囲】

## 【請求項1】

複数の節点と前記複数の節点を接続する複数のエッジとを含むメッシュデータと、前記メッシュデータが示す物体に与える力を示す境界条件データとに基づいて、前記複数のエッジに対応する複数の剛性の値を含む剛性マトリクスと、前記複数の節点に対応する複数の力の値を含む力ベクトルとを算出し、

前記剛性マトリクスと前記力ベクトルとから特徴データを生成し、

前記メッシュデータが示す前記複数の節点の接続関係に従って、前記特徴データに対して畳み込み演算を行うことで、前記複数の節点に対応する複数の変位量を推論する、  
処理をコンピュータに実行させるプログラム。

10

## 【請求項2】

前記特徴データは、前記複数の節点に対応する複数の特徴ベクトルを含み、

前記畳み込み演算は、第1の節点の特徴ベクトルを、前記第1の節点と接続された第2の節点の特徴ベクトルを用いて更新するグラフ畳み込み演算である、

請求項1記載のプログラム。

## 【請求項3】

前記複数の変位量の推論は、前記グラフ畳み込み演算を行う1以上のグラフ畳み込み層を含むニューラルネットワークに前記特徴データを入力することを含む、

請求項2記載のプログラム。

## 【請求項4】

20

前記特徴データの生成は、前記剛性マトリクスと前記力ベクトルとを結合して、同一の節点に関連する剛性の値と力の値とが同一の行に並んだ特徴行列を生成することを含む、請求項 1 記載のプログラム。

【請求項 5】

前記特徴データの生成は、前記複数の節点に対応する複数の特徴ベクトルを生成し、前記複数の特徴ベクトルに含まれる特徴量を正規化し、主成分分析により前記正規化された複数の特徴ベクトルの次元数を削減することを含む、

請求項 1 記載のプログラム。

【請求項 6】

前記メッシュデータと異なる物体を示す他のメッシュデータと他の境界条件データとに基づいて、他の剛性マトリクスと他の力ベクトルとを算出し、前記他の剛性マトリクスおよび前記他の力ベクトルを含む方程式の解を示す変位ベクトルを算出し、

前記他の剛性マトリクスと前記他の力ベクトルとから他の特徴データを生成し、前記他の特徴データから前記変位ベクトルを推論する推論モデルを生成する、

処理を前記コンピュータに更に実行させ、

前記複数の変位量の推論は、前記推論モデルに前記特徴データを入力することを含む、

請求項 1 記載のプログラム。

【請求項 7】

複数の節点と前記複数の節点を接続する複数のエッジとを含むメッシュデータと、前記メッシュデータが示す物体に与える力を示す境界条件データとに基づいて、前記複数のエッジに対応する複数の剛性の値を含む剛性マトリクスと、前記複数の節点に対応する複数の力の値を含む力ベクトルとを算出し、

前記剛性マトリクスと前記力ベクトルとから特徴データを生成し、

前記メッシュデータが示す前記複数の節点の接続関係に従って、前記特徴データに対して畳み込み演算を行うことで、前記複数の節点に対応する複数の変位量を推論する、

処理をコンピュータが実行する推論方法。

【請求項 8】

複数の節点と前記複数の節点を接続する複数のエッジとを含むメッシュデータと、前記メッシュデータが示す物体に与える力を示す境界条件データとを記憶する記憶部と、

前記メッシュデータと前記境界条件データとに基づいて、前記複数のエッジに対応する複数の剛性の値を含む剛性マトリクスと、前記複数の節点に対応する複数の力の値を含む力ベクトルとを算出し、前記剛性マトリクスと前記力ベクトルとから特徴データを生成し、前記メッシュデータが示す前記複数の節点の接続関係に従って、前記特徴データに対して畳み込み演算を行うことで、前記複数の節点に対応する複数の変位量を推論する処理部と、

を有する情報処理装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明はプログラム、推論方法および情報処理装置に関する。

【背景技術】

【0002】

コンピュータシミュレーションの 1 つに構造解析シミュレーションがある。構造解析シミュレーションは、物体の形状と物体に付与される力とから、物体の変形を算出することがある。また、コンピュータシミュレーションは、数値解析法として有限要素法 ( F E A : Finite Element Method ) を使用することがある。

【0003】

例えば、有限要素法は、物体が存在する空間に複数の節点 ( ノード ) を配置し、節点間を接続するエッジ ( 辺 ) によって空間を小領域に分割する。有限要素法は、物理量を示す変数を各節点に割り当て、物理法則を示す支配方程式に従って、節点間の関係を離散的に

10

20

30

40

50

表現した係数行列を算出する。また、有限要素法は、境界条件に基づいて右辺ベクトルを算出する。有限要素法は、係数行列と右辺ベクトルとによって規定される連立方程式を、共役勾配法 (CG: Conjugate Gradient) などの反復法によって解く。

【0004】

有限要素法を使用して物体の変形を算出する構造解析シミュレーションは、変位量を示す変数を各節点に割り当てる。変位量と力との間の関係は、剛性マトリクスと変位ベクトルとの積が力ベクトルに一致するという連立方程式で表現される。そこで、構造解析シミュレーションは、支配方程式と境界条件とに基づいて剛性マトリクスと力ベクトルとを算出し、連立方程式を解いて変位ベクトルを算出する。

【0005】

なお、メッシュデータから有限要素法によって剛性マトリクスと荷重ベクトルを算出し、剛性マトリクスと荷重ベクトルから係数行列  $A$  と右辺ベクトル  $f$  を生成し、 $Ax = f$  を満たす解ベクトル  $x$  を算出するシステムが提案されている。また、主成分分析 (PCA: Principal Component Analysis) によって次元数を削減し、高次導関数をニューラルネットワークで近似するサロゲートモデル生成方法が提案されている。

【0006】

また、幾何データと境界条件から多層ニューラルネットワークを用いて近似解を算出し、近似解を変数に代入して有限要素法ソルバをウォームスタートさせる有限要素法シミュレーションが提案されている。また、異なる幾何データのシミュレーション結果を訓練データとして用いて機械学習を行い、材料特性を修正しながら有限要素法を実行する構造解析シミュレーションが提案されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0007】

【文献】米国特許第 5 7 5 4 1 8 1 号明細書

【文献】特開 2 0 1 6 - 1 4 6 1 6 9 号公報

【文献】米国特許出願公開第 2 0 1 7 / 0 0 3 2 0 6 8 号明細書

【文献】特開 2 0 2 1 - 2 3 4 2 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0008】

大規模連立方程式を反復法によって解く線形ソルバは、計算量が大きく実行時間が長くなることがある。そこで、物体の変形を算出する構造解析シミュレーションは、厳密な有限要素法によらずに、各節点の変位量を簡易的に推論することが考えられる。変位量の推論には、節点間での特徴量の畳み込み演算を使用することが考えられる。例えば、畳み込み演算を行う畳み込みニューラルネットワークなどの推論モデルが使用されてもよい。

【0009】

この場合、どのような入力データから変位量を推論すればよいか重要となる。入力データの規定方法によっては、実用的な精度で変位量を推論することが難しいことがある。例えば、有限要素法の入力データである境界条件データから各節点の変位量を直接的に推論しようとする、推論精度が低くなる可能性がある。そこで、1つの側面では、本発明は、構造解析シミュレーションを高速化することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0010】

1つの態様では、以下の処理をコンピュータに実行させるプログラムが提供される。複数の節点と複数の節点を接続する複数のエッジを含むメッシュデータと、メッシュデータが示す物体に与える力を示す境界条件データとに基づいて、複数のエッジに対応する複数の剛性の値を含む剛性マトリクスと、複数の節点に対応する複数の力の値を含む力ベクトルとを算出する。剛性マトリクスと力ベクトルとから特徴データを生成する。メッシュデータが示す複数の節点の接続関係に従って、特徴データに対して畳み込み演算を行うこ

10

20

30

40

50

とで、複数の節点に対応する複数の変位量を推論する。

【 0 0 1 1 】

また、1つの態様では、コンピュータが実行する推論方法が提供される。また、1つの態様では、記憶部と処理部とを有する情報処理装置が提供される。

【 発明の効果 】

【 0 0 1 2 】

1つの側面では、構造解析シミュレーションを高速化できる。

【 図面の簡単な説明 】

【 0 0 1 3 】

【 図 1 】 第 1 の実施の形態の情報処理装置を説明するための図である。

10

【 図 2 】 第 2 の実施の形態の情報処理装置のハードウェア例を示す図である。

【 図 3 】 ホイールのシミュレーション結果の例を示す図である。

【 図 4 】 有限要素法のシミュレーション空間の例を示す図である。

【 図 5 】 グラフ畳み込みネットワークによる変位量予測の例を示す図である。

【 図 6 】 第 2 の実施の形態の変位量予測のデータフロー例を示す図である。

【 図 7 】 メッシュデータと剛性マトリクスと力ベクトルの構造例を示す図である。

【 図 8 】 節点特徴ベクトルとエッジ特徴ベクトルの構造例を示す図である。

【 図 9 】 剛性マトリクスと力行列の連結例を示す図である。

【 図 1 0 】 グラフ畳み込み演算の例を示す図である。

【 図 1 1 】 第 2 の実施の形態のグラフ畳み込みネットワークの例を示す図である。

20

【 図 1 2 】 節点数に応じた最適層数と最適特徴数の例を示すグラフである。

【 図 1 3 】 構造解析シミュレーションの実行時間の例を示すグラフである。

【 図 1 4 】 カンチレバーのシミュレーション結果の例を示す図である。

【 図 1 5 】 情報処理装置の機能例を示すブロック図である。

【 図 1 6 】 第 2 の実施の形態のモデル生成の手順例を示すフローチャートである。

【 図 1 7 】 第 2 の実施の形態の変位量予測の手順例を示すフローチャートである。

【 図 1 8 】 第 3 の実施の形態の変位量予測のデータフロー例を示す図である。

【 図 1 9 】 特徴行列の正規化と主成分分析の例を示す図である。

【 図 2 0 】 第 3 の実施の形態のグラフ畳み込みネットワークの例を示す図である。

【 図 2 1 】 節点数に応じた節点あたり特徴数の例を示す図である。

30

【 図 2 2 】 第 3 の実施の形態のモデル生成の手順例を示すフローチャートである。

【 図 2 3 】 第 3 の実施の形態の変位量予測の手順例を示すフローチャートである。

【 発明を実施するための形態 】

【 0 0 1 4 】

以下、本実施の形態を図面を参照して説明する。

[ 第 1 の実施の形態 ]

第 1 の実施の形態を説明する。

【 0 0 1 5 】

図 1 は、第 1 の実施の形態の情報処理装置を説明するための図である。

情報処理装置 1 0 は、付与される力に応じた物体の変形を解析する構造解析シミュレーションを実行する。情報処理装置 1 0 は、有限要素法に従って生成される大規模連立方程式を直接解く代わりに、ニューラルネットワークなどのモデルを用いて解を推論する。情報処理装置 1 0 は、クライアント装置でもよいしサーバ装置でもよい。情報処理装置 1 0 が、コンピュータ、推論装置またはシミュレーション装置と呼ばれてもよい。

40

【 0 0 1 6 】

情報処理装置 1 0 は、記憶部 1 1 および処理部 1 2 を有する。記憶部 1 1 は、R A M ( Random Access Memory ) などの揮発性半導体メモリでもよいし、H D D ( Hard Disk Drive ) やフラッシュメモリなどの不揮発性ストレージでもよい。処理部 1 2 は、例えば、C P U ( Central Processing Unit )、G P U ( Graphics Processing Unit )、D S P ( Digital Signal Processor ) などのプロセッサである。ただし、処理部 1 2 が、A S

50

IC (Application Specific Integrated Circuit) や FPGA (Field Programmable Gate Array) などの特定用途の電子回路を含んでもよい。プロセッサは、例えば、RAM などのメモリ (記憶部 11 でもよい) に記憶されたプログラムを実行する。プロセッサの集合が、マルチプロセッサまたは単に「プロセッサ」と呼ばれてもよい。

【0017】

記憶部 11 は、メッシュデータ 13 と境界条件データ 14 とを記憶する。メッシュデータ 13 は、物体の形状を表しており、複数の節点とそれら節点を接続する複数のエッジとを含む。メッシュデータ 13 は、節点およびエッジによって、物体が存在する空間を複数の小領域に分割する。物体が存在する空間は、二次元平面でもよいし三次元空間でもよい。小領域の形状は、三角形、四角形、四面体、六面体などである。メッシュデータ 13 は、物体の外形を表す CAD (Computer Aided Design) データから、メッシュ生成ソフトウェアによって自動的に生成されてもよい。

10

【0018】

境界条件データ 14 は、メッシュデータ 13 が示す物体に与える力を示す。物体の外から与えられる力は、荷重または外力と呼ばれてもよい。境界条件データ 14 は、物体表面のうち力が与えられる範囲、力の方向および力の大きさを規定してもよい。例えば、境界条件データ 14 は、物体上面に対して下方向に力  $f_z$  が付与されることを規定する。

【0019】

処理部 12 は、メッシュデータ 13 と境界条件データ 14 とに基づいて、剛性マトリクス 15 (剛性マトリクス A) とカベクトル 16 (カベクトル b) とを算出する。剛性マトリクス 15 およびカベクトル 16 は、有限要素法でも使用される行列およびベクトルである。有限要素法は、 $Ax = b$  という連立方程式を満たす変位ベクトル 17 (変位ベクトル  $x$ ) を、共役勾配法などの反復法によって算出する。後述するように、処理部 12 は、この連立方程式を直接解く代わりに、変位ベクトル 17 を簡易的に推論する。

20

【0020】

剛性マトリクス 15 は、メッシュデータ 13 が示す複数のエッジに対応する離散化された複数の剛性の値を含む。例えば、剛性マトリクス 15 の行は節点に対応し、剛性マトリクス 15 の列は節点に対応し、行と列の交点は 2 つの節点を接続するエッジに対応する。処理部 12 は、例えば、エッジで接続された 2 つの節点の座標と、材質と、力に応じた物体の変形に関する支配方程式とから、当該 2 つの節点の間の剛性の値を算出する。例えば、処理部 12 は、節点間の長さ、断面積、弾性率などのパラメータを使用する。また、例えば、処理部 12 は、全ての力を合成するとゼロになることを示すつり合い方程式、歪み変位関係式および応力歪み関係式を、支配方程式として使用する。

30

【0021】

カベクトル 16 は、メッシュデータ 13 が示す複数の節点に対応する離散化された複数の力の値を含む。カベクトル 16 は、応力ベクトル、外力ベクトルまたは荷重ベクトルと呼ばれてもよい。例えば、処理部 12 は、境界条件データ 14 に基づいて、複数の節点それぞれにかかる力を算出する。境界条件データ 14 で指定された範囲の外側にある節点の力の値は、ゼロであってもよい。また、物体の内側にある内部節点の力の値は、ゼロであってもよい。境界条件データ 14 で指定された範囲内にある物体表面の節点の力の値は、境界条件データ 14 で指定された力を表してもよい。

40

【0022】

変位ベクトル 17 は、メッシュデータ 13 が示す複数の節点に対応する離散化された複数の変位量を含む。変位量は、物体に力が加わることで節点が移動した量である。変位量は未知数であり、節点に割り当てられる変数に相当する。よって、変位ベクトル 17 は、複数の節点に対して割り当てられた複数の変数を列挙したベクトルである。

【0023】

処理部 12 は、剛性マトリクス 15 とカベクトル 16 とから特徴データ 18 を生成する。特徴データ 18 は、変位量の推論に用いられる入力データである。特徴データ 18 は、複数の節点に対応する複数の特徴ベクトルを含んでもよい。また、特徴データ 18 は、剛

50

性マトリクス 15 と力ベクトル 16 とを連結した特徴行列であってもよい。このとき、処理部 12 は、同一節点に関する剛性の値と力の値とを同一行に並べるなど、剛性マトリクス 15 の要素および力ベクトル 16 の要素を並べ替えてもよい。

【0024】

また、特徴データ 18 に含まれる特徴量は、剛性マトリクス 15 に含まれる剛性の値および力ベクトル 16 に含まれる力の値そのものであってもよいし、剛性の値や力の値を加工したものであってもよい。例えば、処理部 12 は、複数の節点に対応する複数の特徴ベクトルに含まれる特徴量を正規化してもよい。また、処理部 12 は、主成分分析により、それら複数の特徴ベクトルの次元数を削減してもよい。

【0025】

処理部 12 は、メッシュデータ 13 が示す節点間の接続関係に従って、特徴データ 18 に対して畳み込み演算を行って各節点の変位量を推論する。処理部 12 は、畳み込み演算を行うモデル 19 に特徴データ 18 を入力してもよい。モデル 19 は、機械学習によって事前に生成されていてもよい。モデル 19 は、1 以上の畳み込み層を含む畳み込みニューラルネットワーク (CNN: Convolutional Neural Network) であってもよい。また、モデル 19 は、いわゆるグラフ畳み込み演算を行う 1 以上のグラフ畳み込み層を含むグラフ畳み込みネットワーク (GCN: Graph Convolutional Network) であってもよい。

【0026】

畳み込み演算として、例えば、処理部 12 は、ある節点の特徴ベクトルを、その節点に接続された他の節点の特徴ベクトルを用いて更新する。例えば、処理部 12 は、他の節点の特徴ベクトルに係数を乗じ、積を上記節点の特徴ベクトルに足し合わせる。係数を含むカーネルは、例えば、機械学習を通じて決定される。処理部 12 は、推論された変位ベクトル 17 を出力する。処理部 12 は、変位ベクトル 17 を不揮発性ストレージに保存してもよいし、表示装置に表示してもよいし、他の情報処理装置に送信してもよい。

【0027】

以上説明したように、第 1 の実施の形態の情報処理装置 10 は、物体の形状を示すメッシュデータ 13 と、物体に与える力を示す境界条件データ 14 とに基づいて、物体の変形を算出する構造解析シミュレーションを実行する。これにより、情報処理装置 10 は、工業部品の設計など物体形状の設計にとって有用な情報を提供することができる。

【0028】

また、情報処理装置 10 は、連立方程式  $Ax = b$  を解いて変位ベクトル 17 を算出する代わりに、特徴データ 18 から変位ベクトル 17 を推論する。例えば、情報処理装置 10 は、特徴データ 18 をモデル 19 に入力して各節点の変位量を推論する。これにより、構造解析シミュレーションの計算量が削減され、その実行時間が短縮される。

【0029】

また、情報処理装置 10 は、連立方程式  $Ax = b$  にも使用される剛性マトリクス 15 と力ベクトル 16 とを算出し、剛性マトリクス 15 と力ベクトル 16 とから特徴データ 18 を生成する。そして、情報処理装置 10 は、節点間の接続関係に従って特徴データ 18 に対して畳み込み演算を行うことで、各節点の変位量を推論する。これにより、変位ベクトル 17 の推論精度が向上し、推論結果を実用的に利用することが可能となる。

【0030】

例えば、有限要素法の入力データであるメッシュデータ 13 および境界条件データ 14 から直接的に、モデル 19 の入力データを作成する方法も考えられる。例えば、各節点の特徴ベクトルに、節点の座標、弾性係数などの材質パラメータ、境界条件データ 14 が示す力などの特徴量を含める方法も考えられる。しかし、これらの特徴量そのものは各節点の変位量との関連性が弱く、これらの特徴量から変位量を推論することは難易度が高い。また、力が与えられない範囲の節点や内部節点には、有用な特徴量が付与されないことがある。これに対し、剛性マトリクス 15 や力ベクトル 16 に基づく特徴量は、各節点の変位量との関連性が強く、変位量を推論することが容易になる。

【0031】

10

20

30

40

50

## 〔第2の実施の形態〕

次に、第2の実施の形態を説明する。

第2の実施の形態の情報処理装置100は、構造解析シミュレーションを実行し、外力に応じた物体の変形を解析する。また、情報処理装置100は、機械学習によってモデルを生成し、生成されたモデルを用いて有限要素法の計算結果を予測する。ただし、機械学習とモデルの使用は、異なる情報処理装置によって実行されてもよい。情報処理装置100は、例えば、工業部品の設計に利用される。情報処理装置100は、クライアント装置でもよいしサーバ装置でもよい。情報処理装置100が、コンピュータ、推論装置、シミュレーション装置、設計装置または機械学習装置と呼ばれてもよい。

## 【0032】

図2は、第2の実施の形態の情報処理装置のハードウェア例を示す図である。

情報処理装置100は、バスに接続されたCPU101、RAM102、HDD103、GPU104、入力インタフェース105、媒体リーダ106および通信インタフェース107を有する。CPU101は、第1の実施の形態の処理部12に対応する。RAM102またはHDD103は、第1の実施の形態の記憶部11に対応する。

## 【0033】

CPU101は、プログラムの命令を実行するプロセッサである。CPU101は、HDD103に記憶されたプログラムおよびデータの少なくとも一部をRAM102にロードし、プログラムを実行する。情報処理装置100は、複数のプロセッサを有してもよい。プロセッサの集合が、マルチプロセッサまたは単に「プロセッサ」と呼ばれてもよい。

## 【0034】

RAM102は、CPU101で実行されるプログラムおよびCPU101で演算に使用されるデータを一時的に記憶する揮発性半導体メモリである。情報処理装置100は、RAM以外の種類の揮発性メモリを有してもよい。

## 【0035】

HDD103は、OS(Operating System)、ミドルウェア、アプリケーションソフトウェアなどのソフトウェアのプログラム、および、データを記憶する不揮発性ストレージである。情報処理装置100は、フラッシュメモリやSSD(Solid State Drive)などの他の種類の不揮発性ストレージを有してもよい。

## 【0036】

GPU104は、CPU101と連携して画像処理を行う。また、GPU104は、情報処理装置100に接続された表示装置111に画像を出力する。表示装置111は、例えば、CRT(Cathode Ray Tube)ディスプレイ、液晶ディスプレイ、有機EL(Electro Luminescence)ディスプレイまたはプロジェクタである。なお、情報処理装置100に、プリンタなどの他の種類の出力デバイスが接続されてもよい。

## 【0037】

入力インタフェース105は、情報処理装置100に接続された入力デバイス112から入力信号を受け付ける。入力デバイス112は、例えば、マウス、タッチパネルまたはキーボードである。情報処理装置100に複数の入力デバイスが接続されてもよい。

## 【0038】

媒体リーダ106は、記録媒体113に記録されたプログラムおよびデータを読み取る読み取り装置である。記録媒体113は、例えば、磁気ディスク、光ディスクまたは半導体メモリである。磁気ディスクには、フレキシブルディスク(FD:Flexible Disk)およびHDDが含まれる。光ディスクには、CD(Compact Disc)およびDVD(Digital Versatile Disc)が含まれる。媒体リーダ106は、記録媒体113から読み取られたプログラムおよびデータを、RAM102やHDD103などの他の記録媒体にコピーする。読み取られたプログラムは、CPU101によって実行されることがある。

## 【0039】

記録媒体113は、可搬型記録媒体であってもよい。記録媒体113は、プログラムおよびデータの配布に用いられることがある。また、記録媒体113およびHDD103が

10

20

30

40

50

、コンピュータ読み取り可能な記録媒体と呼ばれてもよい。

【0040】

通信インタフェース107は、ネットワーク114に接続され、ネットワーク114を介して他の情報処理装置と通信する。通信インタフェース107は、スイッチやルータなどの有線通信装置に接続される有線通信インタフェースでもよいし、基地局やアクセスポイントなどの無線通信装置に接続される無線通信インタフェースでもよい。

【0041】

次に、外力に応じた物体の変形を解析する構造解析シミュレーションを説明する。

図3は、ホイールのシミュレーション結果の例を示す図である。

メッシュデータ41は、ホイールの形状を示す。メッシュデータ41は、設計中のホイールの形状を示すCADデータから、メッシュ生成ソフトウェアによって生成される。メッシュデータ41は、複数の節点と節点間を接続する複数のエッジとを含む。メッシュデータ41は、ホイールが存在する三次元空間を小領域に細分化したものである。細分化された小領域の面は、3つの節点および3つのエッジで囲まれる三角形である。

【0042】

ここでは、構造解析シミュレーションは、メッシュデータ41に対して以下のような境界条件を設定する。ホイールの上部に対して、鉛直下方向に一定の大きさの外力が加えられる。ホイールの下部は、移動しない固定ポイントである。上からの外力に応じて、ホイールが変形する可能性がある。ホイールは、単一の材質で製造される。

【0043】

構造解析シミュレーションは、メッシュデータ41と上記の境界条件とに基づいて、各節点の変位量を算出する。変位量の分布によって、変形後のホイールの形状が特定される。構造解析シミュレーションは、変位量の分布を可視化した可視化データを出力してもよい。この境界条件のもとでは、通常、上側の節点ほど変位量が大きく、下側の節点ほど変位量が小さい。境界条件のパラメータを変えながら、同一形状のホイールに対して構造解析シミュレーションが繰り返されることがある。境界条件のパラメータには、例えば、力強度、材質、力付与範囲および固定範囲が含まれる。

【0044】

力強度は、ホイール上部に与えられる鉛直下方向の外力の大きさである。力強度の候補は、例えば、1, 10, 100, 10000である。材質は、ホイールの材料の種類である。材質の候補は、例えば、鋼、銅、アルミニウム、コバルト、鉄、マグネシウム、マンガン、ニッケルおよびチタンである。力付与範囲は、ホイールの高さのうち外力が付加される上部の高さの割合である。力付与範囲の候補は、例えば、4分の1、8分の1および10分の1である。固定範囲は、ホイールの高さのうち位置が変化しない下部の高さの割合である。固定範囲の候補は、例えば、4分の1、8分の1および10分の1である。

【0045】

図4は、有限要素法のシミュレーション空間の例を示す図である。

典型的な構造解析シミュレーションは、有限要素法によって各節点の変位量を算出する。構造解析シミュレーションは、複数の節点それぞれに対して変位量を示す変数を割り当てる。複数の節点に対応する複数の変位量を列挙することで、変位ベクトル $x$ が得られる。また、構造解析シミュレーションは、メッシュデータと境界条件データとに基づいて、剛性マトリクス $A$ と力ベクトル $b$ とを算出する。

【0046】

剛性マトリクス $A$ は、物体の剛性を位置毎に細分化して離散的に表現したものであり、節点間の剛性を列挙した行列である。2つの節点の間の剛性は、2つの節点の座標と、物体の材質と、物理法則を示す支配方程式とから算出される。剛性は、節点間の長さ、断面積および弾性率に依存する。支配方程式は、つり合い方程式、歪み変位関係式および応力歪み関係式を含む。つり合い方程式は、全ての力を合成するとゼロになることを示す。歪み変位関係式は、歪みと変位量との間の関係を示す。応力歪み関係式は、応力と歪みとの間の関係を示す。これらの支配方程式を解くことで、剛性が算出される。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 4 7 】

カベクトル  $b$  は、複数の節点に対応する複数の力を列挙したベクトルである。カベクトル  $b$  は、応力ベクトル、外力ベクトルまたは荷重ベクトルと呼ばれてもよい。各節点にかかる力は、境界条件から算出される。力付与範囲にある物体表面の節点にかかる力は、境界条件で指定された値であってもよい。力付与範囲から外れた節点や物体内部の節点にかかる力は、ゼロであってもよい。これら剛性マトリクス  $A$ 、カベクトル  $b$  および変位ベクトル  $x$  の間には、 $Ax = b$  という関係が成立する。

## 【 0 0 4 8 】

構造解析シミュレーションは、 $Ax = b$  という連立一次方程式を解くことで変位ベクトル  $x$  を算出する。連立一次方程式の求解には、線形ソルバが用いられる。線形ソルバは、共役勾配法などの反復法によって  $x$  の解を求める。例えば、線形ソルバは、 $x$  に仮の値を代入して  $b$  の残差を求め、勾配に基づいて残差が小さくなるように  $x$  を更新する。線形ソルバは、残差が収束するまで  $x$  の更新を反復する。

10

## 【 0 0 4 9 】

例えば、メッシュデータは、節点  $171, 172, 173$  (節点  $v_1, v_2, v_3$ ) を含む。節点  $171, 172, 173$  は、相互にエッジで接続されている。よって、メッシュデータは、節点  $171, 172$  間のエッジと、節点  $172, 173$  間のエッジと、節点  $171, 173$  間のエッジとを含む。エッジは無方向である。よって、エッジの特徴量には対称性があり、剛性マトリクス  $A$  は対称行列である。

## 【 0 0 5 0 】

節点  $171, 172, 173$  は、 $X$  軸と  $Y$  軸と  $Z$  軸とを含む直交座標系の三次元空間に配置されている。節点  $171, 172, 173$  の位置は、三次元座標によって識別される。節点  $171, 172, 173$  には、 $Z$  軸に沿って力が与えられる。節点  $171, 172, 173$  にかかる力は、カベクトル  $b$  によって規定される。この力を受けて、節点  $171, 172, 173$  は三次元空間の中を移動する。この移動の大きさが変位量である。節点  $171, 172, 173$  の変位量は、変位ベクトル  $x$  として表現される。なお、節点  $171, 172, 173$  の変位量は互いに異なることがある。また、力の方向は  $Z$  軸であるものの、節点  $171, 172, 173$  は  $X$  軸方向や  $Y$  軸方向にずれることがある。

20

## 【 0 0 5 1 】

このように、典型的な構造解析シミュレーションは、線形ソルバによって  $Ax = b$  を解くことで変位ベクトル  $x$  を算出する。しかし、線形ソルバによる大規模連立方程式の求解は、計算量が大きく長時間を要することがある。そこで、情報処理装置 100 は、 $Ax = b$  を直接解く代わりに、機械学習モデルを利用して  $x$  を予測することを試みる。

30

## 【 0 0 5 2 】

図5は、グラフ畳み込みネットワークによる変位量予測の例を示す図である。

1つの方法では、変位ベクトル  $x$  の予測にグラフ畳み込みネットワーク (GCN) 31 が使用される。グラフ畳み込みネットワーク 31 は、グラフ畳み込み演算を行う1以上のグラフ畳み込み層を含む多層ニューラルネットワークである。

## 【 0 0 5 3 】

通常の畳み込みニューラルネットワーク (CNN) は、複数の画素が格子状に並んだ画像データを取り扱う。畳み込みニューラルネットワークは、隣接する画素の間で特徴量の畳み込み演算を行う。複数の画素の隣接関係は、その配列から自明である。一方、グラフ畳み込みネットワーク 31 は、複数の節点がエッジで接続されたグラフデータを取り扱う。グラフ畳み込みネットワーク 31 は、隣接する節点の間で特徴量の畳み込み演算を行う。複数の節点の隣接関係は自明ではなく、グラフデータによって明示的に規定される。

40

## 【 0 0 5 4 】

物体が配置される三次元空間を格子状の画素に分割した場合、物体が存在しない空の画素が多く発生する。このため、通常の畳み込みニューラルネットワークと比べてグラフ畳み込みネットワーク 31 の方が、入力データがコンパクトになり効率的である。

## 【 0 0 5 5 】

50

グラフ畳み込みネットワーク 31 は、特徴データ 32 を受け付ける。特徴データ 32 は、節点数  $n \times 9$  次元の特徴行列である。節点 1 つ当たりの特徴ベクトルは、座標、力、材料密度、弾性係数およびポアソン比を含む。座標は、直交座標系における節点の位置を示す三次元座標である。力は、節点にかかる外力の方向および大きさを示す 3 次元ベクトルである。前述のホイールの例の場合、力の X 成分および Y 成分はゼロである。また、固定範囲に属する節点および物体内部の節点の力は、ゼロベクトルである。

【 0 0 5 6 】

材料密度、弾性係数およびポアソン比は、1 次元のスカラー値である。各節点の座標は、メッシュデータから抽出される。力、材料密度、弾性係数およびポアソン比は、境界条件データから抽出される。グラフ畳み込みネットワーク 31 は、メッシュデータと特徴データ 32 から、変位データ 33 を算出する。変位データ 33 は、節点数  $n \times 3$  次元の変位行列である。変位データ 33 は、変位ベクトル  $x$  に相当する。変位量は、直交座標系における節点の移動の方向および大きさを示す三次元ベクトルである。

10

【 0 0 5 7 】

上記の特徴データ 32 は、有限要素法の入力であるメッシュデータおよび境界条件データから直接的に抽出される特徴量を含む。グラフ畳み込みネットワーク 31 は、このような特徴データ 32 から各節点の変位量を予測する。しかし、上記のグラフ畳み込みネットワーク 31 の予測精度は低くなることがある。

【 0 0 5 8 】

上記の境界条件は原始的パラメータであり、力の伝播に関する物理法則を表現していないため、変位量との親和性が低い。このため、節点間で力の情報を適切に伝播して各節点の変位量を精度よく予測するようにグラフ畳み込みネットワーク 31 の機械学習を行うことは、難易度が高い。そこで、第 2 の実施の形態の情報処理装置 100 は、グラフ畳み込みネットワークに入力する特徴データを、以下のように規定する。

20

【 0 0 5 9 】

図 6 は、第 2 の実施の形態の変位量予測のデータフロー例を示す図である。

情報処理装置 100 は、通常の有限要素法と同様に、メッシュデータ 141 と境界条件データ 142 とから、離散化 131 によって剛性マトリクス 143 (剛性マトリクス  $A$ ) と力ベクトル 144 (力ベクトル  $b$ ) とを算出する。通常の有限要素法は、線形ソルバを用いて、 $Ax = b$  を満たす変位ベクトル 146 (変位ベクトル  $x$ ) を算出する。

30

【 0 0 6 0 】

これに対して、情報処理装置 100 は、線形ソルバによって  $Ax = b$  を直接解く代わりに、剛性マトリクス 143 と力ベクトル 144 とから、特徴抽出 132 によって特徴データ 145 を生成する。特徴データ 145 は、剛性マトリクス 143 および力ベクトル 144 から抽出される特徴量を含む。例えば、特徴データ 145 は、剛性マトリクス 143 と力ベクトル 144 とを連結した特徴行列である。

【 0 0 6 1 】

情報処理装置 100 は、メッシュデータ 141 と特徴データ 145 とをグラフ畳み込みネットワーク 133 に与える。グラフ畳み込みネットワーク 133 は、1 以上のグラフ畳み込み層を含む。グラフ畳み込みネットワーク 133 は、メッシュデータ 141 が示す節点間の隣接関係に従って、特徴データ 145 に含まれる特徴量の畳み込み演算を行う。これにより、情報処理装置 100 は、変位ベクトル 146 を予測する。

40

【 0 0 6 2 】

このように、情報処理装置 100 は、有限要素法の前半に相当する離散化 131 を実行する一方、有限要素法の後半に相当する線形ソルバをスキップする。有限要素法の中で、離散化 131 は比較的計算量が小さく実行時間が短い一方、線形ソルバは比較的計算量が大きく実行時間が長い。また、特徴抽出 132 やグラフ畳み込みネットワーク 133 の実行時間は十分に短い。よって、線形ソルバをスキップすることで、構造解析シミュレーションの全体の計算量が削減されて実行時間が短縮される。

【 0 0 6 3 】

50

また、剛性マトリクス 1 4 3 および力ベクトル 1 4 4 に含まれる特徴量は、力の伝播に関する物理法則が反映されており、変位量との親和性が高い。このため、各節点に対して適切な特徴量が割り当てられ、各節点の変位量を精度よく予測するようにグラフ畳み込みネットワーク 1 3 3 の機械学習を行うことが可能となる。その結果、グラフ畳み込みネットワーク 1 3 3 の予測精度が向上する。

【 0 0 6 4 】

また、境界条件データ 1 4 2 は、解析したい物体の種類や事象に依存するため、情報としての汎用性が低い。例えば、前述の特徴データ 3 2 は、材料密度と弾性係数とポアソン比をパラメータとして含むものの、解析したい物体や事象によっては他のパラメータを含むことが好ましい場合がある。これに対して、剛性マトリクス 1 4 3 と力ベクトル 1 4 4 とは、変位ベクトル 1 4 6 を予測する上で、境界条件データ 1 4 2 に依存せずに汎用的に生成される。よって、グラフ畳み込みネットワーク 1 3 3 の汎用性が向上する。

10

【 0 0 6 5 】

図 7 は、メッシュデータと剛性マトリクスと力ベクトルの構造例を示す図である。

メッシュデータ 1 4 1 は、節点行列 1 4 7 および隣接行列 1 4 8 を含む。節点行列 1 4 7 は、 $n \times 3$  のサイズの行列である。節点行列 1 4 7 の  $n$  個の行は、 $n$  個の節点に対応する。節点行列 1 4 7 の 3 つの列は、 $X$  座標、 $Y$  座標および  $Z$  座標に対応する。節点行列 1 4 7 の 1 つの行は、1 つの節点の三次元座標を表す。

【 0 0 6 6 】

隣接行列 1 4 8 は、 $n \times n$  のサイズの行列である。節点行列 1 4 7 の  $n$  個の行は  $n$  個の節点に対応し、節点行列 1 4 7 の  $n$  個の列は  $n$  個の節点に対応する。行と列の交点には、0 または 1 のフラグが配置される。0 は、行と列に対応する 2 つの節点の間にエッジが無いことを表す。1 は、行と列に対応する 2 つの節点の間にエッジがあることを表す。隣接行列 1 4 8 は、 $i$  行  $j$  列の値と  $j$  行  $i$  列の値とが同一である対称行列である。

20

【 0 0 6 7 】

情報処理装置 1 0 0 は、メッシュデータ 1 4 1 と境界条件データ 1 4 2 とに基づいて、剛性マトリクス 1 4 3 と力ベクトル 1 4 4 とを生成する。剛性マトリクス 1 4 3 は、 $3n \times 3n$  のサイズの行列である。剛性マトリクス 1 4 3 の中の連続する  $3 \times 3$  の要素が、1 つのブロックを形成する。ブロックの 3 つの行は、ある節点の  $X$  方向、 $Y$  方向および  $Z$  方向に対応する。ブロックの 3 つの列は、ある節点の  $X$  方向、 $Y$  方向および  $Z$  方向に対応する。よって、 $3n$  個の行は、 $n$  個の節点の  $X$  方向、 $Y$  方向および  $Z$  方向に対応する。 $3n$  個の列は、 $n$  個の節点の  $X$  方向、 $Y$  方向および  $Z$  方向に対応する。

30

【 0 0 6 8 】

剛性マトリクス 1 4 3 に含まれる  $n \times n$  個のブロックのうち、対角線上にある対角ブロックは、同一節点内の剛性を表す。対角線上にない非対角ブロックは、異なる節点間の接続の剛性を表す。 $3 \times 3$  のサイズのブロックは、剛性の  $XX$  成分、 $XY$  成分、 $XZ$  成分、 $YX$  成分、 $YY$  成分、 $YZ$  成分、 $ZX$  成分、 $ZY$  成分および  $ZZ$  成分を含む。

【 0 0 6 9 】

剛性の  $XX$  成分は、 $X$  方向の力と  $X$  方向の変位との関係を表す。 $XY$  成分は、 $X$  方向の力と  $Y$  方向の変位との関係を表す。 $XZ$  成分は、 $X$  方向の力と  $Z$  方向の変位との関係を表す。 $YX$  成分は、 $Y$  方向の力と  $X$  方向の変位との関係を表す。 $YY$  成分は、 $Y$  方向の力と  $Y$  方向の変位との関係を表す。 $YZ$  成分は、 $Y$  方向の力と  $Z$  方向の変位との関係を表す。 $ZX$  成分は、 $Z$  方向の力と  $X$  方向の変位との関係を表す。 $ZY$  成分は、 $Z$  方向の力と  $Y$  方向の変位との関係を表す。 $ZZ$  成分は、 $Z$  方向の力と  $Z$  方向の変位との関係を表す。

40

【 0 0 7 0 】

剛性マトリクス 1 4 3 の  $n \times n$  個のブロックは、エッジに方向が無いため対称行列を形成する。また、隣接していない 2 つの節点に対応するブロックは、ゼロ行列である。剛性マトリクス 1 4 3 は、非ゼロ要素が少ない疎行列である。なお、第 2 の実施の形態は三次元空間で構造解析シミュレーションを行っているため、空間自由度が 3 であり、各ブロックのサイズは  $3 \times 3$  である。二次元空間で構造解析シミュレーションを行う場合、空間自

50

自由度が2であり、各ブロックのサイズは $2 \times 2$ になる。

【0071】

カベクトル144は、 $3n \times 1$ のサイズのベクトルである。カベクトル144の中の連続する3つの要素が、1つのブロックを形成する。ブロックの3つの行は、ある節点にかかる力のX成分、Y成分およびZ成分を表す。よって、 $3n$ 個の行は、 $n$ 個の節点のX成分、Y成分およびZ成分に対応する。なお、二次元空間で構造解析シミュレーションを行う場合、空間自由度が2であり、各ブロックのサイズは $2 \times 1$ になる。

【0072】

ここで、剛性マトリクス143に含まれる対角ブロックの値は、節点に関する特徴量とみなすことが可能である。また、剛性マトリクス143に含まれる非対角ブロックの値は、エッジに関する特徴量とみなすことが可能である。また、カベクトル144に含まれるブロックの値は、節点に関する特徴量とみなすことが可能である。情報処理装置100は、このような節点に関する特徴量とエッジに関する特徴量とを利用する。

10

【0073】

図8は、節点特徴ベクトルとエッジ特徴ベクトルの構造例を示す図である。

ここでは、前述の節点171, 172, 173に着目する。節点171, 172はエッジe12で接続されており、節点171, 173はエッジe13で接続されており、節点172, 173はエッジe23で接続されている。

【0074】

剛性マトリクス143とカベクトル144とからは、節点171に関する節点特徴ベクトル174と、節点172に関する節点特徴ベクトル175と、節点173に関する節点特徴ベクトル176とが生成される。節点特徴ベクトル174, 175, 176はそれぞれ、12個の特徴量を含む12次元ベクトルである。12個の特徴量のうち9個の特徴量は、剛性マトリクス143の中の対角ブロックに含まれる値である。12個の特徴量のうち3個の特徴量は、カベクトル144のブロックに含まれる値である。

20

【0075】

よって、節点特徴ベクトル174は、剛性マトリクス143の中の節点171に対応する対角ブロックに含まれる値と、カベクトル144の中の節点171に対応するブロックに含まれる値とを含む。節点特徴ベクトル175は、剛性マトリクス143の中の節点172に対応する対角ブロックに含まれる値と、カベクトル144の中の節点172に対応するブロックに含まれる値とを含む。節点特徴ベクトル176は、剛性マトリクス143の中の節点173に対応する対角ブロックに含まれる値と、カベクトル144の中の節点173に対応するブロックに含まれる値とを含む。

30

【0076】

また、剛性マトリクス143とカベクトル144とからは、エッジe12に関するエッジ特徴ベクトル177と、エッジe13に関するエッジ特徴ベクトル178と、エッジe23に関するエッジ特徴ベクトル179とが生成される。エッジ特徴ベクトル177, 178, 179はそれぞれ、9個の特徴量を含む9次元ベクトルである。これら9個の特徴量は、剛性マトリクス143の中の非対角ブロックに含まれる値である。

【0077】

よって、エッジ特徴ベクトル177は、剛性マトリクス143の中の節点171, 172に対応する非対角ブロックに含まれる値を含む。エッジ特徴ベクトル178は、節点171, 173に対応する非対角ブロックに含まれる値を含む。エッジ特徴ベクトル179は、節点172, 173に対応する非対角ブロックに含まれる値を含む。

40

【0078】

このように、情報処理装置100は、剛性マトリクス143およびカベクトル144から、節点の特徴量とエッジの特徴量を抽出する。ただし、グラフ畳み込みネットワーク133は、隣接する節点間で特徴ベクトルの畳み込み演算を行う。このため、エッジの特徴量は、そのエッジに関連する節点の特徴ベクトルに分配されることになる。特徴データ145のフォーマットとしては、幾つかのバリエーションが考えられる。

50

## 【 0 0 7 9 】

図 9 は、剛性マトリクスと力行列の連結例を示す図である。

情報処理装置 1 0 0 は、剛性マトリクス 1 4 3 を剛性マトリクス 1 5 1 に変換する。剛性マトリクス 1 5 1 は、剛性マトリクス 1 4 3 に含まれる  $3n \times 3n$  個の要素を並び替えたものであり、 $n \times 9n$  のサイズの行列である。剛性マトリクス 1 5 1 の  $n$  個の行は、 $n$  個の節点に対応する。剛性マトリクス 1 5 1 の  $9n$  個の列は、剛性マトリクス 1 4 3 の連続する 3 行分の要素、すなわち、 $3 \times 3n$  個の要素に対応する。 $3 \times 3$  のサイズのブロックが、 $1 \times 9$  のサイズに横方向に引き延ばされている。

## 【 0 0 8 0 】

また、情報処理装置 1 0 0 は、力ベクトル 1 4 4 を力行列 1 5 2 に変換する。力行列 1 5 2 は、力ベクトル 1 4 4 に含まれる  $3n \times 1$  個の要素を並び替えたものであり、 $n \times 3$  のサイズの行列である。力行列 1 5 2 の  $n$  個の行は、 $n$  個の節点に対応する。力行列 1 5 2 の 3 つの列は、力ベクトル 1 4 4 の連続する 3 つの要素に対応する。力の X 成分、Y 成分および Z 成分が、横方向に並べられている。

## 【 0 0 8 1 】

情報処理装置 1 0 0 は、剛性マトリクス 1 5 1 と力行列 1 5 2 とを横方向に連結して、特徴行列 1 5 3 を生成する。特徴行列 1 5 3 は、特徴データ 1 4 5 に相当する。特徴行列 1 5 3 は、 $n \times (9n + 3)$  のサイズの行列である。特徴行列 1 5 3 の 1 つの行は、1 つの節点の特徴ベクトルに相当する。よって、節点の特徴ベクトルは  $9n + 3$  個の特徴量を含む。特徴ベクトルは、節点内の剛性に関する 9 つの特徴量と、他の節点との間の剛性に関する  $9(n - 1)$  個の特徴量と、節点にかかる力に関する 3 つの特徴量とを含む。

## 【 0 0 8 2 】

ただし、 $n \times n$  通りの節点ペアのうちエッジで接続されている節点ペアは一部であるため、剛性マトリクス 1 4 3 は疎行列である。その結果、特徴行列 1 5 3 も疎行列である。そこで、情報処理装置 1 0 0 は、特徴行列 1 5 3 からゼロ要素を削除し、非ゼロ要素を左詰めしてもよい。これにより、特徴行列 1 5 3 の列数が削減される。また、ある節点の特徴ベクトルは、その節点から一定範囲内にあるエッジ（例えば、一定ホップ数以内のエッジ）に限定してエッジの特徴量を含むようにしてもよい。

## 【 0 0 8 3 】

図 1 0 は、グラフ畳み込み演算の例を示す図である。

上記の方法により、節点 1 7 1 に対応する特徴ベクトル 1 8 1 と、節点 1 7 2 に対応する特徴ベクトル 1 8 3 と、節点 1 7 3 に対応する特徴ベクトル 1 8 5 とが生成される。グラフ畳み込みネットワーク 1 3 3 は、節点 1 7 1, 1 7 2, 1 7 3 の隣接関係に従って、特徴ベクトル 1 8 1, 1 8 3, 1 8 5 のグラフ畳み込み演算を行う。ここでは、節点 1 7 1 の特徴ベクトル 1 8 1 を更新する手順を説明する。

## 【 0 0 8 4 】

グラフ畳み込みネットワーク 1 3 3 は、節点 1 7 1 の特徴ベクトル 1 8 1 にカーネルを適用して、特徴ベクトル 1 8 2 を生成する。カーネルは、特徴量の重みを示す係数の集合であり、機械学習を通じて最適化される。特徴ベクトル 1 8 1 から特徴ベクトル 1 8 2 への変換は、ニューラルネットワークとして表現され得る。特徴ベクトル 1 8 2 に含まれる特徴量の個数は、特徴ベクトル 1 8 1 と同じでもよいし、特徴ベクトル 1 8 1 より少なくてもよいし、特徴ベクトル 1 8 1 より多くてもよい。出力される特徴量の個数は、機械学習の際にユーザから指定されるハイパーパラメータである。

## 【 0 0 8 5 】

同様に、グラフ畳み込みネットワーク 1 3 3 は、節点 1 7 2 の特徴ベクトル 1 8 3 にカーネルを適用して、特徴ベクトル 1 8 4 を生成する。グラフ畳み込みネットワーク 1 3 3 は、節点 1 7 3 の特徴ベクトル 1 8 5 にカーネルを適用して、特徴ベクトル 1 8 6 を生成する。特徴ベクトル 1 8 2, 1 8 4, 1 8 6 の特徴量の個数は、同じである。特徴ベクトル 1 8 1, 1 8 3, 1 8 5 に適用されるカーネルは、同一でもよいし異なってもよい。

## 【 0 0 8 6 】

10

20

30

40

50

グラフ畳み込みネットワーク 133 は、特徴ベクトル 182, 184, 186 の特徴量を足し合わせて特徴ベクトル 187 を生成する。特徴ベクトル 187 は、節点 171 の更新後の特徴ベクトルである。同様の手順で、グラフ畳み込みネットワーク 133 は、節点 172, 173 の特徴ベクトル 183, 185 も更新する。1つのグラフ畳み込み層において、各節点の特徴ベクトルが 1 回更新される。

【0087】

グラフ畳み込み演算は、数式 (1) のように表現される。数式 (1) において、 $x$  は特徴ベクトル、 $i$  は着目する節点、 $N(i)$  は節点  $i$  とエッジで接続された隣接節点の集合、 $k$  は時刻、 $\Theta$  はカーネル、 $deg$  は隣接節点の個数である。

【0088】

【数 1】

$$x_i^{(k)} = \sum_{j \in N(i) \cup \{i\}} \frac{1}{\sqrt{\deg(i)} \sqrt{\deg(j)}} \Theta \cdot x_j^{(k-1)} \quad (1)$$

【0089】

図 11 は、第 2 の実施の形態のグラフ畳み込みネットワークの例を示す図である。

グラフ畳み込みネットワーク 133 は、4つのグラフ畳み込み層を含む。グラフ畳み込みネットワーク 133 は、グラフ畳み込み層 161, 163, 165, 167、非線形活性化層 162, 164, 166, 168 および全結合層 169 を含む。4つのグラフ畳み込み層と 4つの非線形活性化層とは、交互に配置される。

【0090】

グラフ畳み込み層 161 は、 $n \times (9n + 3)$  のサイズの特徴行列 153 を受け付ける。グラフ畳み込み層 161 の後ろに非線形活性化層 162 がある。非線形活性化層 162 の後ろにグラフ畳み込み層 163 がある。グラフ畳み込み層 163 の後ろに非線形活性化層 164 がある。非線形活性化層 164 の後ろにグラフ畳み込み層 165 がある。グラフ畳み込み層 165 の後ろに非線形活性化層 166 がある。非線形活性化層 166 の後ろにグラフ畳み込み層 167 がある。グラフ畳み込み層 167 の後ろに非線形活性化層 168 がある。非線形活性化層 168 の後ろに全結合層 169 がある。全結合層 169 は、 $n \times 3$  のサイズの変位行列を出力する。

【0091】

グラフ畳み込み層 161, 163, 165, 167 は、複数の節点の特徴ベクトルに対して、前述のグラフ畳み込み演算を実行する。非線形活性化層 162, 164, 166, 168 は、特徴量を関数  $\tanh$  で変換する。ただし、シグモイド関数など他の活性化関数が使用されてもよい。全結合層 169 は、非線形活性化層 168 が出力する多数の特徴量を合成して、変位行列に含まれる  $3n$  個の要素を算出する。なお、グラフ畳み込み層の個数はハイパーパラメータであり、機械学習の際にユーザによって変更され得る。

【0092】

図 12 は、節点数に応じた最適層数と最適特徴数の例を示すグラフである。

情報処理装置 100 は、機械学習の際に、グラフ畳み込みネットワーク 133 の予測精度が最も高くなるようなグラフ畳み込み層の個数を探索するハイパーパラメータ探索を行うことも可能である。最適なグラフ畳み込み層の個数は、節点数  $n$  に依存する。曲線 42 は、最適なグラフ畳み込み層の個数の探索結果の例を示す。

【0093】

$n = 28$  では 6 層が最適である。 $n = 60$  では 8 層が最適である。 $n = 130$  では 10 層が最適である。 $n = 260$  では 12 層が最適である。 $n = 516$  では 14 層が最適である。 $n = 1035$  では 16 層が最適である。 $n = 2238$  では 20 層が最適である。このように、メッシュデータの節点が多いほど、グラフ畳み込み層を増やすことで予測精度が向上することがある。ただし、グラフ畳み込み層を過度に増やしても予測精度は向上せず

10

20

30

40

50

、最適なグラフ畳み込み層の個数が存在する。

【0094】

また、情報処理装置100は、機械学習の際に、グラフ畳み込みネットワーク133の予測精度が最も高くなるような中間層の特徴数を探索するハイパーパラメータ探索を行うことも可能である。最適な特徴数は、節点数 $n$ に依存する。曲線43は、最適な特徴数の探索結果の例を示す。曲線43に示すように、メッシュデータの節点が多いほど、中間層の特徴数を抑制した方が予測精度が向上することがある。

【0095】

図13は、構造解析シミュレーションの実行時間の例を示すグラフである。

実行時間44, 45はそれぞれ、離散化131の実行時間の測定値である。実行時間46は、線形ソルバの実行時間の測定値である。実行時間47は、グラフ畳み込みネットワーク133による予測の実行時間の測定値である。通常有限要素法では、実行時間44, 46の合計が、構造解析シミュレーションの実行時間に相当する。第2の実施の形態では、実行時間45, 47の合計が、構造解析シミュレーションの実行時間に相当する。

10

【0096】

通常有限要素法では、線形ソルバの実行時間46が長く、構造解析シミュレーション全体の実行時間の大部分を占める。これに対して第2の実施の形態では、線形ソルバの実行時間46が、グラフ畳み込みネットワーク133の実行時間47に置き換えられる。グラフ畳み込みネットワーク133の実行時間47は、線形ソルバの実行時間46よりも顕著に短い。よって、構造解析シミュレーション全体の実行時間が顕著に短縮する。

20

【0097】

図14は、カンチレバーのシミュレーション結果の例を示す図である。

ここでは、他の物体に対する変位量予測の例を説明する。解析結果51~58は、カンチレバーの右端に一定量の力を加えた場合の変形後のカンチレバーの形状を示している。解析結果51は、 $n=28$ のメッシュデータから、線形ソルバによって変位ベクトルを算出した例である。解析結果52は、 $n=60$ のメッシュデータから、線形ソルバによって変位ベクトルを算出した例である。解析結果53は、 $n=130$ のメッシュデータから、線形ソルバによって変位ベクトルを算出した例である。解析結果54は、 $n=260$ のメッシュデータから、線形ソルバによって変位ベクトルを算出した例である。

【0098】

解析結果55は、 $n=28$ のメッシュデータから、グラフ畳み込みネットワーク133によって変位ベクトルを予測した例である。解析結果56は、 $n=60$ のメッシュデータから、グラフ畳み込みネットワーク133によって変位ベクトルを予測した例である。解析結果57は、 $n=130$ のメッシュデータから、グラフ畳み込みネットワーク133によって変位ベクトルを予測した例である。解析結果58は、 $n=260$ のメッシュデータから、グラフ畳み込みネットワーク133によって変位ベクトルを予測した例である。

30

【0099】

グラフ畳み込みネットワーク133は、線形ソルバにより算出される変位ベクトルを高い精度で予測している。特に、グラフ畳み込みネットワーク133は、節点数が少ないメッシュデータほど、変位ベクトルを高い精度で予測する。

40

【0100】

次に、情報処理装置100の機能および処理手順について説明する。

図15は、情報処理装置の機能例を示すブロック図である。

情報処理装置100は、メッシュデータ記憶部121、境界条件記憶部122およびモデル記憶部123を有する。これらの記憶部は、例えば、RAM102またはHDD103を用いて実装される。また、情報処理装置100は、離散化部124、線形ソルバ125、特徴抽出部126、機械学習部127および予測部128を有する。これらの処理部は、例えば、CPU101とプログラムを用いて実装される。

【0101】

メッシュデータ記憶部121は、グラフ畳み込みネットワークの機械学習に使用される

50

メッシュデータを記憶する。メッシュデータ記憶部 1 2 1 は、機械学習用に、同一種類の物体の異なる形状を表す複数のメッシュデータを記憶してもよい。また、メッシュデータ記憶部 1 2 1 は、解析対象の物体の形状を表すメッシュデータを記憶する。

【 0 1 0 2 】

境界条件記憶部 1 2 2 は、グラフ畳み込みネットワーク 1 3 3 の機械学習に使用される境界条件データを記憶する。境界条件記憶部 1 2 2 は、物体への外力のかかり方や物体の材質が異なる複数の境界条件データを記憶してもよい。モデル記憶部 1 2 3 は、機械学習によって生成されたグラフ畳み込みネットワーク 1 3 3 を記憶する。

【 0 1 0 3 】

離散化部 1 2 4 は、メッシュデータ記憶部 1 2 1 からメッシュデータを読み出し、境界条件記憶部 1 2 2 から境界条件データを読み出す。離散化部 1 2 4 は、メッシュデータと境界条件データと支配方程式から、剛性マトリクスとカベクトルを算出する。機械学習の際には、離散化部 1 2 4 は、剛性マトリクスとカベクトルを複数セット算出する。変位量予測の際には、離散化部 1 2 4 は、解析対象の剛性マトリクスとカベクトルを算出する。

10

【 0 1 0 4 】

線形ソルバ 1 2 5 は、機械学習の際に、離散化部 1 2 4 から剛性マトリクスとカベクトルを取得する。線形ソルバ 1 2 5 は、共役勾配法などの反復法により、 $Ax = b$  を解いて変位ベクトルを算出する。この変位ベクトルは、与えられた剛性マトリクスおよびカベクトルのもとでの正解の変位ベクトルであり、教師データに相当する。ただし、 $Ax = b$  の求解以外の方法によって正解の変位ベクトルが導出されてもよい。線形ソルバ 1 2 5 は、複数セットの剛性マトリクスとカベクトルから、複数の変位ベクトルを算出する。

20

【 0 1 0 5 】

特徴抽出部 1 2 6 は、離散化部 1 2 4 から剛性マトリクスとカベクトルを取得する。特徴抽出部 1 2 6 は、剛性マトリクスとカベクトルを合成して特徴行列を生成する。例えば、特徴抽出部 1 2 6 は、1つの行が1つの節点に対応するように、剛性マトリクスおよびカベクトルをそれぞれ変形し、横方向に連結する。

【 0 1 0 6 】

この特徴行列は、グラフ畳み込みネットワークの入力データに相当する。機械学習の際には、特徴抽出部 1 2 6 は、線形ソルバ 1 2 5 から変位ベクトルを取得し、入力データに相当する特徴行列と教師データに相当する変位ベクトルとを組み合わせる。特徴抽出部 1 2 6 は、特徴行列と変位ベクトルを複数セット含む訓練データを生成する。変位量予測の際には、特徴抽出部 1 2 6 は、解析対象の特徴行列を出力する。

30

【 0 1 0 7 】

機械学習部 1 2 7 は、特徴抽出部 1 2 6 から特徴行列と変位ベクトルを取得し、メッシュデータ記憶部 1 2 1 からメッシュデータを読み出す。機械学習部 1 2 7 は、誤差逆伝播法などの最適化アルゴリズムに従って、グラフ畳み込みネットワークを最適化する。例えば、機械学習部 1 2 7 は、特徴行列とメッシュデータに基づいてグラフ畳み込み演算を行って変位ベクトルを予測し、教師データとの誤差を評価する。機械学習部 1 2 7 は、誤差が小さくなるように、グラフ畳み込み層のパラメータを更新する。機械学習部 1 2 7 は、生成されたグラフ畳み込みネットワークをモデル記憶部 1 2 3 に保存する。

40

【 0 1 0 8 】

予測部 1 2 8 は、モデル記憶部 1 2 3 からグラフ畳み込みネットワークを読み出し、メッシュデータ記憶部 1 2 1 から解析対象のメッシュデータを読み出し、特徴抽出部 1 2 6 から解析対象の特徴行列を取得する。予測部 1 2 8 は、グラフ畳み込みネットワークに特徴行列とメッシュデータを与えて、変位ベクトルを予測する。予測部 1 2 8 は、予測した変位ベクトルを出力する。予測部 1 2 8 は、変位ベクトルを HDD 1 0 3 に保存してもよいし、表示装置 1 1 1 に表示してもよいし、他の情報処理装置に送信してもよい。

【 0 1 0 9 】

図 1 6 は、第 2 の実施の形態のモデル生成の手順例を示すフローチャートである。

( S 1 0 ) 離散化部 1 2 4 は、メッシュデータと境界条件データから、 $3n \times 3n$  の剛

50

性マトリクスAと、 $3n \times 1$ の力ベクトルbとを生成する。

【0110】

(S11)線形ソルバ125は、ステップS10のA, bから、反復法によって連立一次方程式 $Ax = b$ を解いて、 $3n \times 1$ の変位ベクトルxを算出する。

(S12)特徴抽出部126は、 $3n \times 3n$ の剛性マトリクスAを、要素を並べ替えて $n \times 9n$ の剛性マトリクスAに変換する。また、特徴抽出部126は、 $3n \times 1$ の力ベクトルbを、要素を並べ替えて $n \times 3$ の力行列bに変換する。また、特徴抽出部126は、 $3n \times 1$ の変位ベクトルxを、要素を並べ替えて $n \times 3$ の変位行列xに変換する。これにより、剛性マトリクスAの1行が1つの節点に対応し、力行列bの1行が1つの節点に対応し、変位行列xの1行が1つの節点に対応する。

10

【0111】

(S13)特徴抽出部126は、 $n \times 9n$ の剛性マトリクスAと $n \times 3$ の力行列bとを横方向に連結して、 $n \times (9n + 3)$ の特徴行列Fを生成する。特徴抽出部126は、特徴行列Fと変位行列xを組み合わせて訓練データを生成する。

【0112】

(S14)機械学習部127は、グラフ畳み込みネットワークに含まれるグラフ畳み込み層の個数と、各グラフ畳み込み層が出力する特徴量の個数とを設定する。層数および特徴数は、ユーザから指定されてもよい。また、機械学習部127は、ハイパーパラメータ探索によって、層数および特徴数を最適化してもよい。

【0113】

(S15)機械学習部127は、ステップS13の訓練データを用いて、 $n \times (9n + 3)$ の特徴行列Fから $n \times 3$ の変位行列xを予測するグラフ畳み込みネットワークを生成する。ここでは、グラフ畳み込み層で使用されるカーネルが最適化される。

20

【0114】

(S16)機械学習部127は、生成されたグラフ畳み込みネットワークを保存する。

図17は、第2の実施の形態の変位量予測の手順例を示すフローチャートである。

(S20)離散化部124は、メッシュデータと境界条件データから、 $3n \times 3n$ の剛性マトリクスAと、 $3n \times 1$ の力ベクトルbとを生成する。

【0115】

(S21)特徴抽出部126は、 $3n \times 3n$ の剛性マトリクスAを、要素を並べ替えて $n \times 9n$ の剛性マトリクスAに変換する。また、特徴抽出部126は、 $3n \times 1$ の力ベクトルbを、要素を並べ替えて $n \times 3$ の力行列bに変換する。

30

【0116】

(S22)特徴抽出部126は、 $n \times 9n$ の剛性マトリクスAと $n \times 3$ の力行列bとを横方向に連結して、 $n \times (9n + 3)$ の特徴行列Fを生成する。

(S23)予測部128は、 $n \times (9n + 3)$ の特徴行列Fをグラフ畳み込みネットワークに入力して、 $n \times 3$ の変位行列xを予測する。

【0117】

(S24)予測部128は、 $n \times 3$ の変位行列xを、要素を並べ替えて $3n \times 1$ の変位ベクトルxに変換する。予測部128は、変位ベクトルxを出力する。

40

以上説明したように、第2の実施の形態の情報処理装置100は、メッシュデータと境界条件データとから、各節点の変位量を算出する構造解析シミュレーションを実行する。これにより、情報処理装置100は、物体形状の設計にとって有用な情報を提供できる。また、情報処理装置100は、線形ソルバによって $Ax = b$ を解いて変位ベクトルxを算出する代わりに、特徴行列から変位ベクトルxを予測する。これにより、構造解析シミュレーションの計算量が削減されて実行時間が短縮される。

【0118】

また、情報処理装置100は、特徴行列をグラフ畳み込みネットワークに入力し、グラフ畳み込み演算を通じて変位ベクトルxを予測する。これにより、格子状に画素が配置された画像データを扱う通常の畳み込みニューラルネットワークと比べて、空の画素が削減

50

されて入力データがコンパクトになる。また、節点間の隣接関係に従って、節点の特徴量の畳み込み演算が効率的に行われ、力の情報が効率的に伝播される。

#### 【 0 1 1 9 】

また、情報処理装置 1 0 0 は、剛性マトリクス A と力ベクトル b とから特徴行列を生成する。これにより、各節点に対して、力の伝播に関する物理法則が反映された適切な特徴量が割り当てられ、変位ベクトル x の予測精度が向上する。また、剛性マトリクス A と力ベクトル b は、構造解析シミュレーションでは、境界条件データの項目に依存しない汎用的データである。このため、特徴行列の構造が汎用的になり、グラフ畳み込みネットワークの汎用性が向上して様々な構造解析に利用することが可能となる。

#### 【 0 1 2 0 】

##### [ 第 3 の実施の形態 ]

次に、第 3 の実施の形態を説明する。第 2 の実施の形態との違いを中心に説明し、第 2 の実施の形態と同様の内容については説明を省略することがある。第 3 の実施の形態の情報処理装置は、図 2 , 1 5 と同様のハードウェア構造およびソフトウェア構造によって実現できる。そこで、以下、図 2 , 1 5 と同じ符号を用いて第 3 の実施の形態を説明する。

#### 【 0 1 2 1 】

第 2 の実施の形態のグラフ畳み込みネットワークに入力される特徴行列は、節点数 n に応じて、 $n \times (9n + 3)$  のサイズをもつ。よって、各節点に対して  $9n + 3$  個の特徴量が付与されることになる。ただし、エッジで接続されていない節点ペアに対応する剛性はゼロであるため、この特徴行列はゼロ要素が多い疎行列である。例えば、特徴行列に含まれる特徴量のうち約 7 0 % の特徴量が、ゼロであることがある。そこで、第 3 の実施の形態は、特徴行列のサイズを圧縮することを試みる。

#### 【 0 1 2 2 】

前述のように、情報処理装置 1 0 0 は、特徴行列からゼロ要素を削除し、非ゼロ要素を左詰めして特徴行列の列数を削減する方法も考えられる。ただし、特徴行列から単にゼロ要素を削除すると、相手節点の異なる特徴量がグラフ畳み込み演算で混ざって使用されることになり、情報のロスが大きく、節点間で特徴量が適切に伝播するのに時間を要することがある。その結果、グラフ畳み込みネットワークの予測精度が低下するおそれがある。

#### 【 0 1 2 3 】

この予測精度の低下は、グラフ畳み込み層を増やすことで緩和されることがある。ただし、第 2 の実施の形態で検討したように、グラフ畳み込み層の増加による予測精度の向上には限界があり、グラフ畳み込み層を過度に増やしても予測精度はそれ以上向上しない。また、メッシュデータの節点が多いほど予測精度が低下しやすい。そこで、第 3 の実施の形態は、主成分分析を利用して、各節点の特徴ベクトルの次元数を削減する。

#### 【 0 1 2 4 】

図 1 8 は、第 3 の実施の形態の変位量予測のデータフロー例を示す図である。

情報処理装置 1 0 0 は、第 2 の実施の形態と同様に、メッシュデータ 1 4 1 と境界条件データ 1 4 2 とから、離散化 1 3 1 によって剛性マトリクス 1 4 3 と力ベクトル 1 4 4 とを算出する。情報処理装置 1 0 0 は、算出された剛性マトリクス 1 4 3 と力ベクトル 1 4 4 とから、特徴抽出 1 3 4 によって特徴データ 1 4 9 を生成する。そして、情報処理装置 1 0 0 は、メッシュデータ 1 4 1 と特徴データ 1 4 9 とをグラフ畳み込みネットワーク 1 3 7 に与えて、変位ベクトル 1 4 6 を予測する。

#### 【 0 1 2 5 】

特徴データ 1 4 9 は、第 2 の実施の形態の特徴データ 1 4 5 よりも少ない特徴量をもつ特徴行列である。節点 1 つ当たりの特徴量の個数、すなわち、特徴行列の列数は、特徴データ 1 4 9 の方が特徴データ 1 4 5 よりも少ない。このような特徴データ 1 4 9 を生成するため、特徴抽出 1 3 4 は、正規化 1 3 5 および主成分分析 1 3 6 を含む。

#### 【 0 1 2 6 】

第 2 の実施の形態と同様に、特徴抽出 1 3 4 は、1 つの行が 1 つの節点に対応するように、剛性マトリクス 1 4 3 を  $n \times 9n$  の剛性マトリクスに変形する。また、特徴抽出 1 3

10

20

30

40

50

4は、1つの行が1つの節点に対応するように、カベクトル144を $n \times 3$ の力行列に変形する。そして、特徴抽出134は、変形した剛性マトリクスと力行列とを連結して、 $n \times (9n + 3)$ の特徴行列を生成する。特徴抽出134は、この特徴行列に対して、正規化135と主成分分析136とを実行する。

#### 【0127】

正規化135は、特徴行列に含まれる特徴量を-1以上1以下の数値に変換するスケール変換を行う。正規化135は、特徴行列の列単位(次元単位)で行われる。正規化135は、Maximum Absolute Scalerである。正規化135により、絶対値が最大の特徴量は1または-1に変換され、元の0は0に維持される。正規化135は、列の中から絶対値が最大の特徴量を抽出し、その特徴量が正である場合は1になるよう変換倍率を決定し、その特徴量が負である場合は-1になるよう変換倍率を決定する。

10

#### 【0128】

主成分分析136は、正規化された特徴行列に対して主成分分析処理を行って、特徴行列の列数を削減する。これにより、節点1つ当たりの特徴量の個数が削減され、節点に付与される特徴ベクトルの長さ(次元数)が減少する。主成分分析136は、共分散の固有値を最大化するように固有ベクトルの基底を算出する。

#### 【0129】

主成分分析136は、例えば、以下のように行われる。主成分分析136は、ある行列 $X$ に対して、共分散行列 $= (1/m) X^* \times X$ を算出する。主成分分析136は、特異値分解(SVD: Singular Value Decomposition)により、共分散行列を $= USV$ に分解する。Uは左特異行列、Sは特異値行列、Vは右特異行列である。主成分分析136は、圧縮後の次元数に相当する個数だけ左特異行列Uから列を抽出し、抽出した列を並べた行列 $U_r$ を生成する。主成分分析136は、行列 $Z = U_r \times X$ を算出する。この行列Zが、主成分分析136によって行列Xから変換されたものである。

20

#### 【0130】

圧縮後の次元数は、固定であってもよいし、ユーザから指定されてもよいし、節点数に応じて決定されてもよい。例えば、主成分分析136は、変換後の特徴行列の分散が変換前の95%になるように、圧縮後の次元数を調整する。圧縮後の次元が少ないほどデータ量が小さくなる一方、分散が小さくなって情報ロスが発生する。圧縮後の次元が多いほど分散が大きくなって情報ロスが抑制される一方、データ量が大きくなる。

30

#### 【0131】

グラフ畳み込みネットワーク137の構造は、第2の実施の形態のグラフ畳み込みネットワーク133と類似する。ただし、入力データのサイズがグラフ畳み込みネットワーク133と異なる。また、後述するように、グラフ畳み込みネットワーク137は、グラフ畳み込みネットワーク133よりも少ないグラフ畳み込み層をもつ。

#### 【0132】

図19は、特徴行列の正規化と主成分分析の例を示す図である。

ここでは、メッシュデータ141の節点数が28である場合を説明する。特徴行列154は、剛性マトリクス143とカベクトル144を連結して生成される。特徴行列154は、28行 $\times$ 255列の行列である。特徴行列154が、正規化135によって特徴行列155に変換される。特徴行列155は、28行 $\times$ 255列の行列である。特徴行列155の各特徴量は、-1以上1以下に正規化されている。そして、特徴行列155が、主成分分析136によって特徴行列156に変換される。

40

#### 【0133】

ここでは、圧縮後の次元数が20に設定されている。そのため、特徴行列156は、28行 $\times$ 20列の行列である。これにより、各節点の特徴ベクトルの長さが、255から20に減少する。また、主成分分析136は特徴行列155の全体を考慮するため、特徴行列154からゼロ要素を削除する方法と比べて情報ロスが抑制される。また、ある節点の特徴量には、その節点から遠い他の節点の特徴量もある程度反映される。

#### 【0134】

50

図 20 は、第 3 の実施の形態のグラフ畳み込みネットワークの例を示す図である。

上記のように、情報処理装置 100 は、主成分分析によって特徴行列を変換する。この主成分分析を通じて、ある節点の特徴量には、その節点から遠い他の節点の特徴量も適度に反映されることになる。そのため、ある節点の特徴量を隣接節点に伝播するグラフ畳み込み演算の回数を削減することが可能となる。そこで、第 3 の実施の形態のグラフ畳み込みネットワーク 137 は、グラフ畳み込み層を 1 つのみ含む。

#### 【0135】

グラフ畳み込みネットワーク 137 は、グラフ畳み込み層 161、非線形活性化層 162 および全結合層 169 を含む。グラフ畳み込み層 161 は、 $n \times m$  のサイズの特徴行列を受け付ける。この  $m$  は圧縮後の次元数であり、 $9n + 3$  より小さい。グラフ畳み込み層 161 の後ろに非線形活性化層 162 がある。非線形活性化層 162 は、特徴量を関数  $\tanh$  で変換する。非線形活性化層 162 の後ろに全結合層 169 がある。全結合層 169 は、 $n \times 3$  のサイズの変位行列を出力する。

10

#### 【0136】

図 21 は、節点数に応じた節点あたり特徴数の例を示す図である。

テーブル 48 は、節点数と、節点 1 つ当たりの特徴量の個数と、節点 1 つ当たりの非ゼロ特徴量の個数と、主成分分析後の節点 1 つ当たりの特徴量の個数の例を示す。節点数  $n$  を 28, 60, 130, 260, 516, 1035, 2238, 4473, 9162 と増やしていくと、節点 1 つ当たりの特徴量の個数は、 $9n + 3$  に従って線形に増加する。

#### 【0137】

ただし、 $9n + 3$  個の特徴量のうち非ゼロ特徴量は少なく、 $n$  が大きくなっても非ゼロ特徴量の個数はあまり増加しない。これは、 $n$  が大きくなっても、節点 1 つ当たりの隣接節点の個数はローカリティによりあまり増加せず、剛性マトリクス 143 が対角行列に近い形をもつためである。主成分分析後の節点 1 つ当たりの特徴量の個数は、主成分分析前と比べて約 1/3 に減少している。なお、この特徴量の個数は、分散を 95% 維持することができるような特徴量の個数である。

20

#### 【0138】

図 22 は、第 3 の実施の形態のモデル生成の手順例を示すフローチャートである。

(S30) 離散化部 124 は、メッシュデータと境界条件データから、 $3n \times 3n$  の剛性マトリクス  $A$  と、 $3n \times 1$  の力ベクトル  $b$  とを生成する。

30

#### 【0139】

(S31) 線形ソルバ 125 は、ステップ S30 の  $A$ ,  $b$  から、反復法によって連立一次方程式  $Ax = b$  を解いて、 $3n \times 1$  の変位ベクトル  $x$  を算出する。

(S32) 特徴抽出部 126 は、 $3n \times 3n$  の剛性マトリクス  $A$  を  $n \times 9n$  の剛性マトリクス  $A$  に変換し、 $3n \times 1$  の力ベクトル  $b$  を  $n \times 3$  の力行列  $b$  に変換し、 $3n \times 1$  の変位ベクトル  $x$  を  $n \times 3$  の変位行列  $x$  に変換する。

#### 【0140】

(S33) 特徴抽出部 126 は、 $n \times 9n$  の剛性マトリクス  $A$  と  $n \times 3$  の力行列  $b$  とを横方向に連結して、 $n \times (9n + 3)$  の特徴行列  $F$  を生成する。

(S34) 特徴抽出部 126 は、ステップ S33 の特徴行列  $F$  を Maximum Absolute Scaler で正規化する。正規化は列単位で行われ、特徴量が -1 から 1 の範囲に分布する。

40

#### 【0141】

(S35) 特徴抽出部 126 は、正規化された  $n \times (9n + 3)$  の特徴行列  $F$  に対して主成分分析を行い、 $n \times m$  の特徴行列  $F$  に変換する。圧縮後の特徴数  $m$  は、節点数  $n$  に応じて決定されてもよく、分散が基準値を超えるように決定されてもよい。特徴抽出部 126 は、特徴行列  $F$  と変位行列  $x$  を組み合わせて訓練データを生成する。

#### 【0142】

(S36) 機械学習部 127 は、ステップ S35 の訓練データを用いて、 $n \times m$  の特徴行列  $F$  から  $n \times 3$  の変位行列  $x$  を予測するグラフ畳み込みネットワークを生成する。グラフ畳み込みネットワークに含まれるグラフ畳み込み層は 1 つでもよい。

50

## 【0143】

(S37) 機械学習部 127 は、生成されたグラフ畳み込みネットワークを保存する。

図 23 は、第 3 の実施の形態の変位量予測の手順例を示すフローチャートである。

(S40) 離散化部 124 は、メッシュデータと境界条件データから、 $3n \times 3n$  の剛性マトリクス A と、 $3n \times 1$  の力ベクトル b とを生成する。

## 【0144】

(S41) 特徴抽出部 126 は、 $3n \times 3n$  の剛性マトリクス A を  $n \times 9n$  の剛性マトリクス A に変換し、 $3n \times 1$  の力ベクトル b を  $n \times 3$  の力行列 b に変換する。

(S42) 特徴抽出部 126 は、 $n \times 9n$  の剛性マトリクス A と  $n \times 3$  の力行列 b とを横方向に連結して、 $n \times (9n + 3)$  の特徴行列 F を生成する。

10

## 【0145】

(S43) 特徴抽出部 126 は、ステップ S42 の特徴行列 F を Maximum Absolute Scaler で正規化する。正規化は列単位で行われ、特徴量が -1 から 1 の範囲に分布する。

(S44) 特徴抽出部 126 は、正規化された  $n \times (9n + 3)$  の特徴行列 F に対して主成分分析を行い、 $n \times m$  の特徴行列 F に変換する。

## 【0146】

(S45) 予測部 128 は、 $n \times m$  の特徴行列 F をグラフ畳み込みネットワークに入力して、 $n \times 3$  の変位行列 x を予測する。

(S46) 予測部 128 は、 $n \times 3$  の変位行列 x を  $3n \times 1$  の変位ベクトル x に変換する。予測部 128 は、変位ベクトル x を出力する。

20

## 【0147】

以上説明したように、第 3 の実施の形態の情報処理装置 100 は、グラフ畳み込みネットワークに入力される特徴行列のサイズを削減する。これにより、情報処理装置 100 は、GPU メモリなど限られた記憶容量のメモリを用いてグラフ畳み込み演算を実行することができる。また、グラフ畳み込みネットワークの計算量が削減される。

## 【0148】

また、情報処理装置 100 は、正規化と主成分分析とを通じて特徴行列のサイズを削減する。これにより、元の特徴行列の全体を考慮して各節点の特徴ベクトルが導出され、情報のロスが抑制されると共に、各節点の特徴ベクトルには遠くの節点の情報もある程度反映される。よって、グラフ畳み込みネットワークの予測精度が向上する。また、グラフ畳み込み演算の回数を削減しても高い予測精度を維持することが可能となり、グラフ畳み込みネットワークが層数の小さいコンパクトなモデルになる。

30

## 【0149】

また、剛性マトリクスと力ベクトルの連結後に正規化と主成分分析とが行われるため、剛性と力との相関も特徴量に反映される。これにより、予測精度が向上する。

## 【符号の説明】

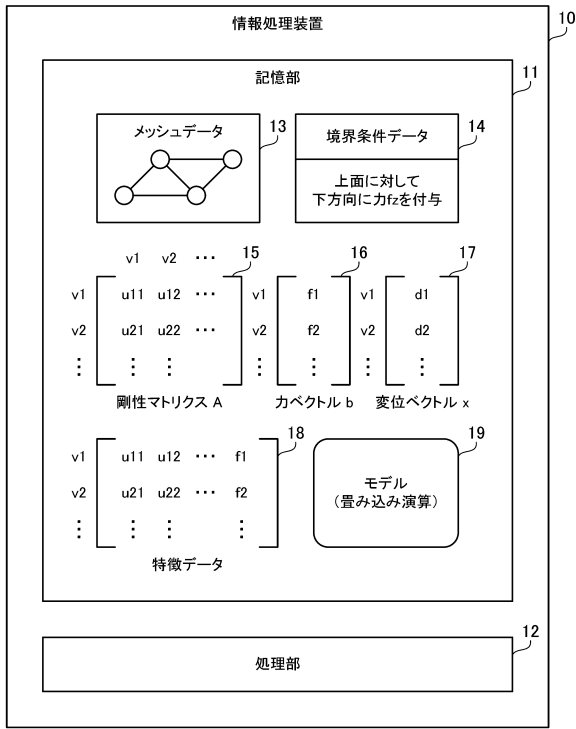
## 【0150】

- 10 情報処理装置
- 11 記憶部
- 12 処理部
- 13 メッシュデータ
- 14 境界条件データ
- 15 剛性マトリクス
- 16 力ベクトル
- 17 変位ベクトル
- 18 特徴データ
- 19 モデル

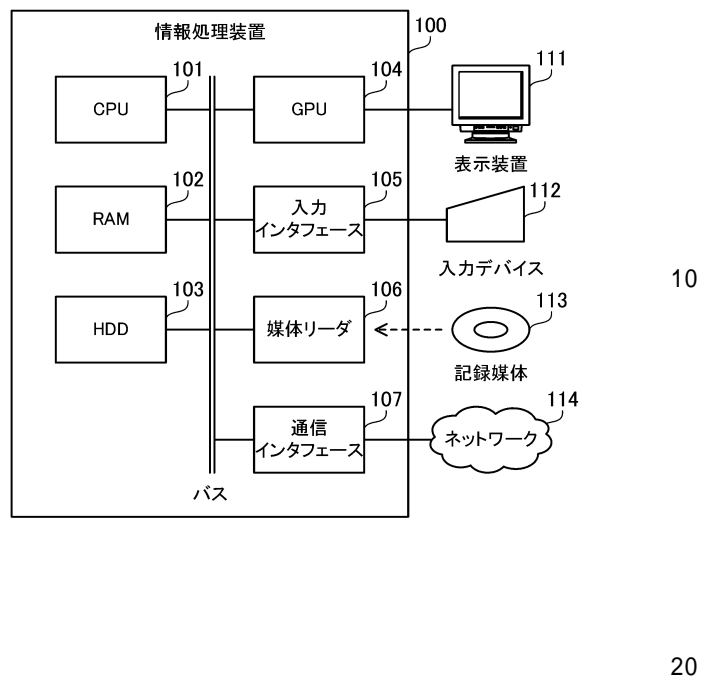
40

【図面】

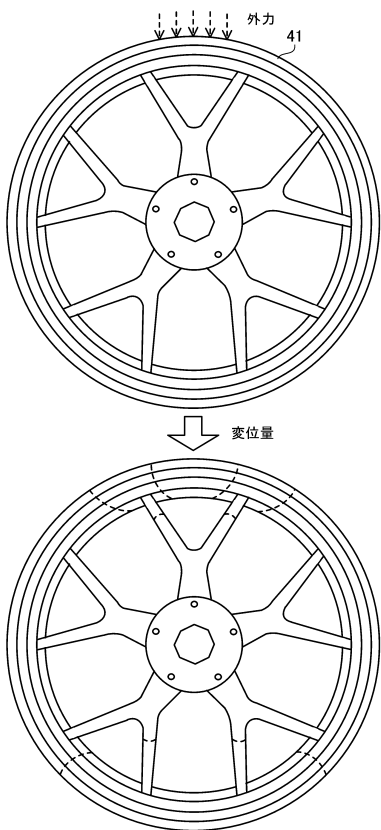
【図 1】



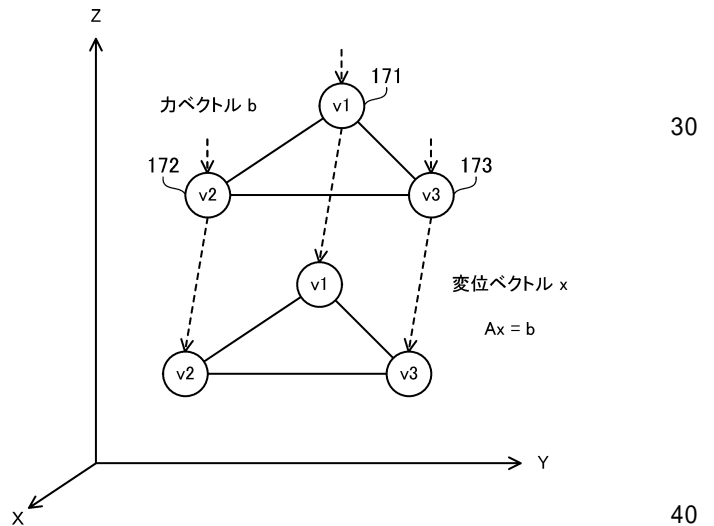
【図 2】



【図 3】

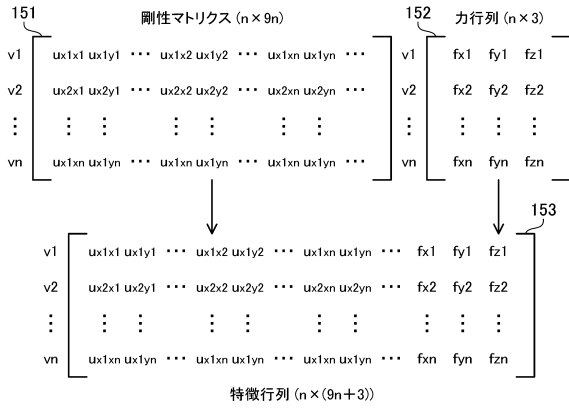


【図 4】

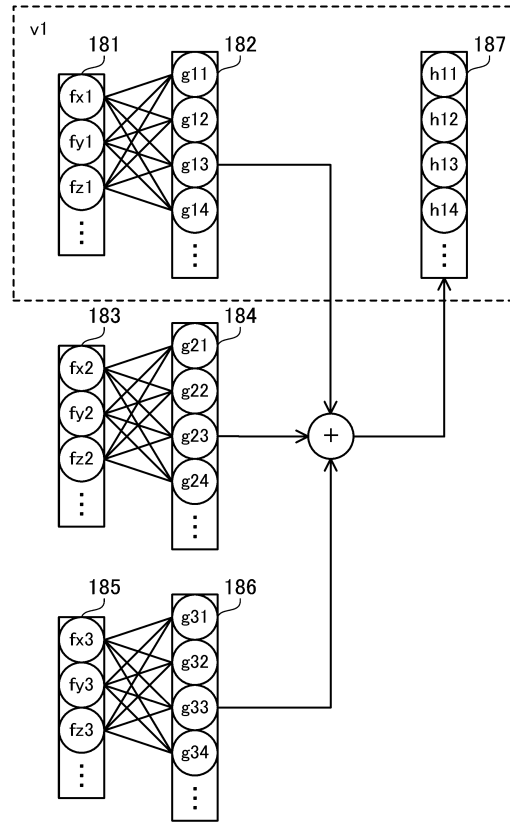




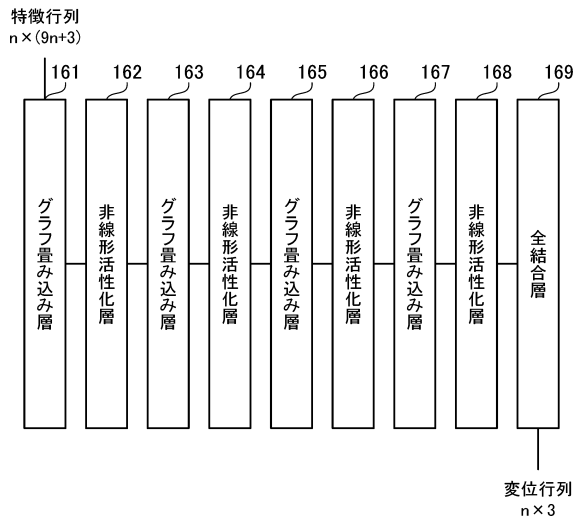
【 図 9 】



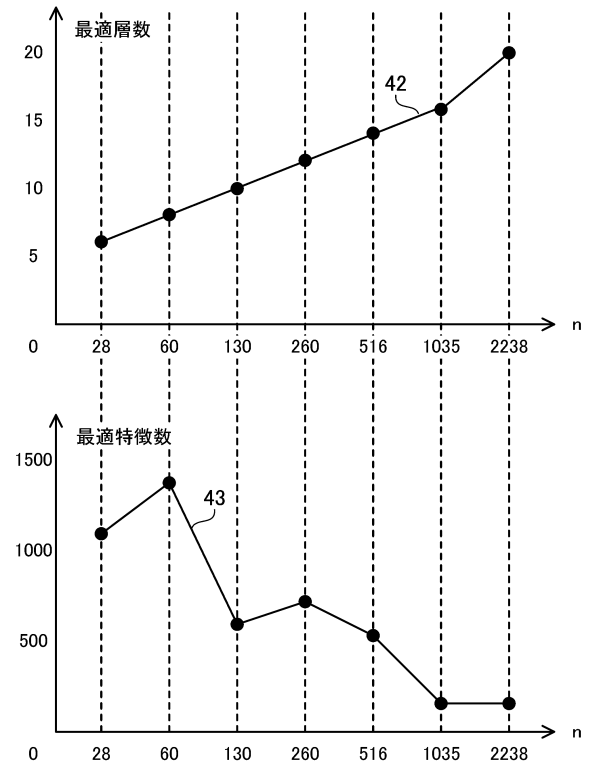
【 図 10 】



【 図 11 】



【 図 12 】



10

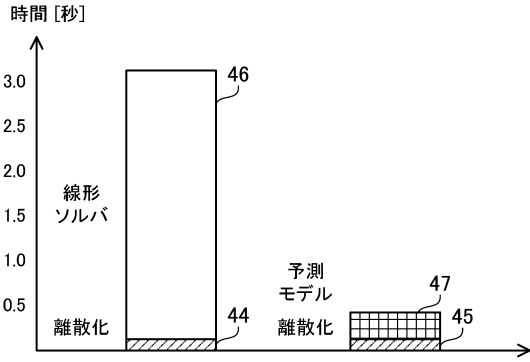
20

30

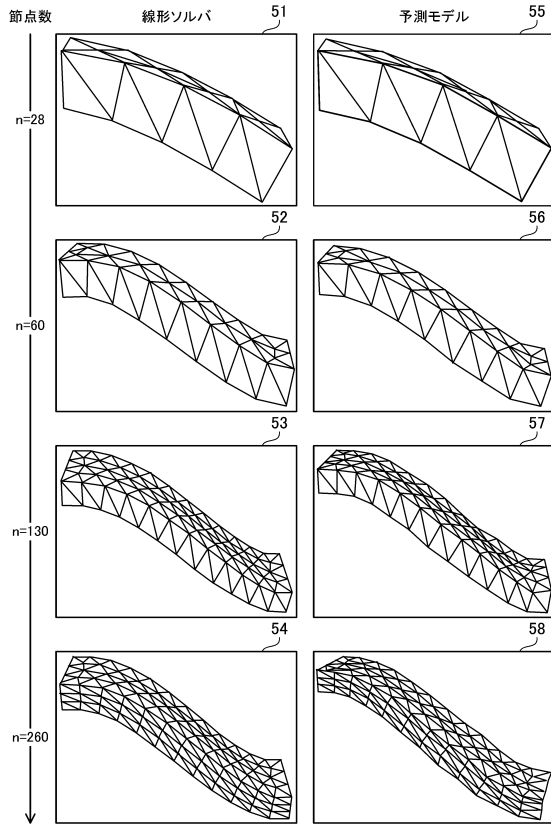
40

50

【図 1 3】



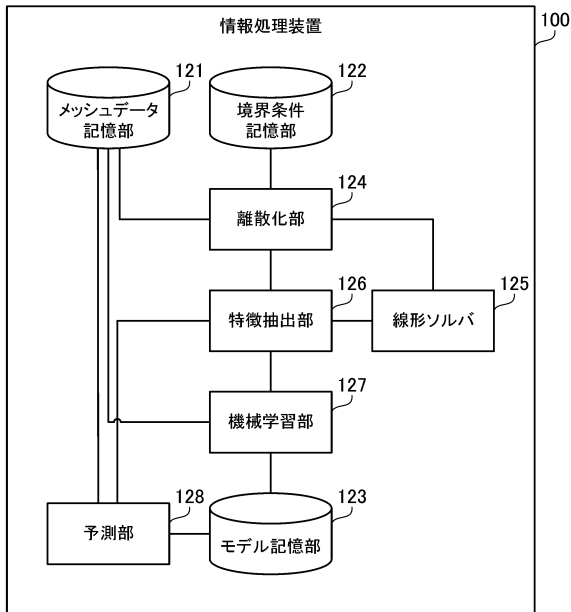
【図 1 4】



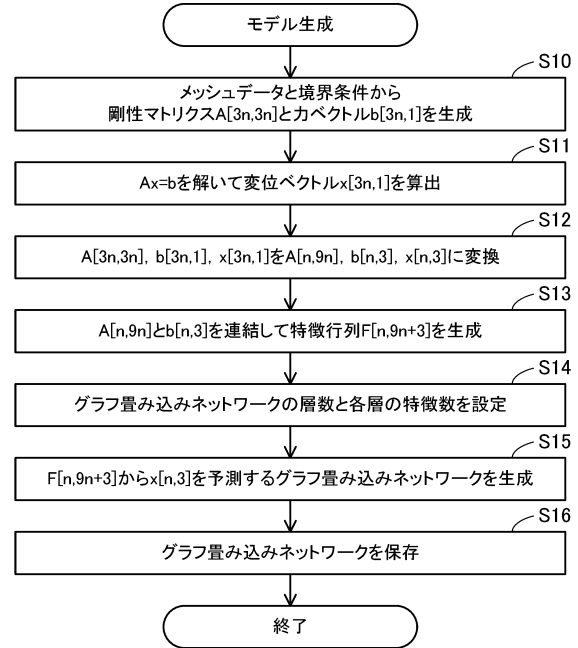
10

20

【図 1 5】



【図 1 6】

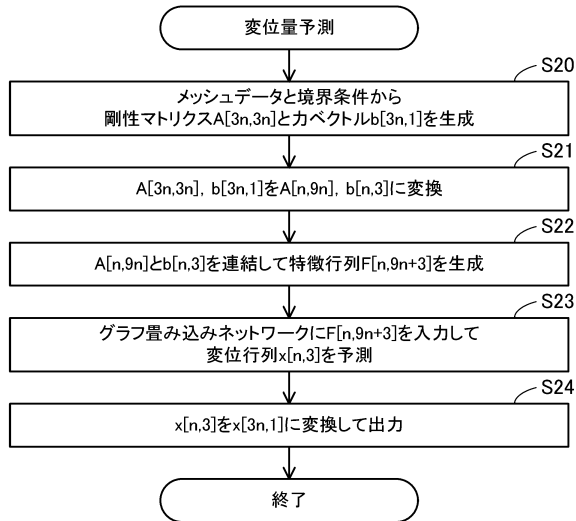


30

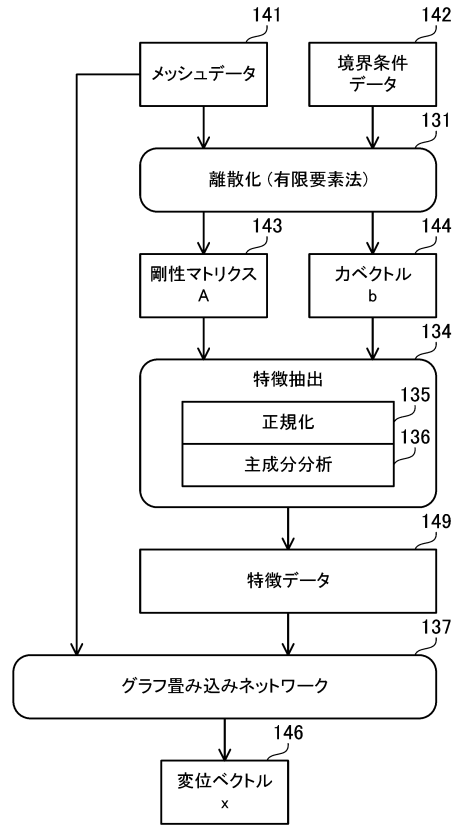
40

50

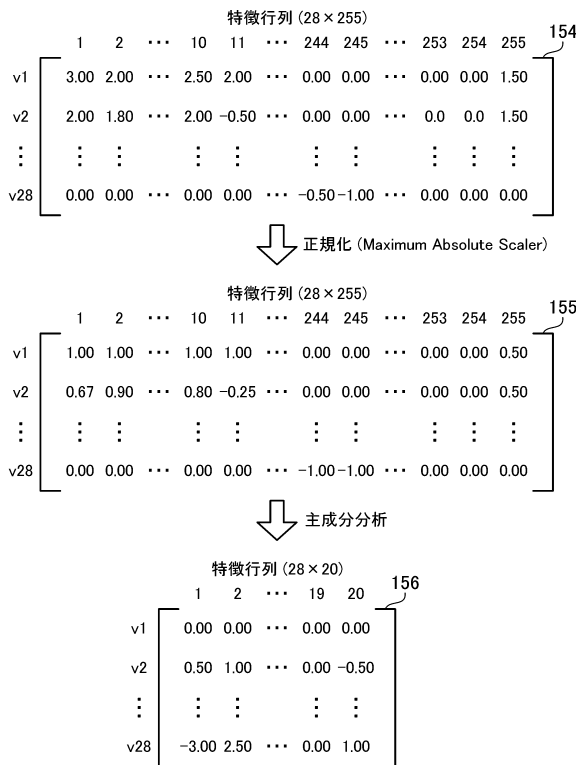
【図 17】



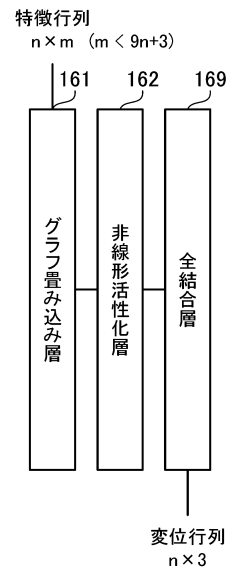
【図 18】



【図 19】



【図 20】



10

20

30

40

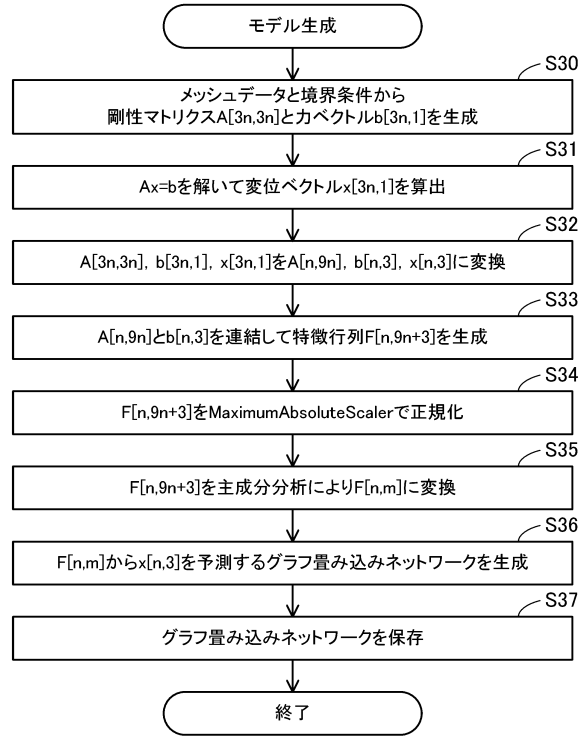
50

【図 2 1】

節点数 n	特徴数 9n+3	非ゼロ特徴数	PCA特徴数
28	255	106	20
60	543	127	40
130	1173	120	89
260	2343	138	173
516	4647	138	341
1035	9318	156	692
2238	20145	156	1511
4473	40260	-	2998
9162	82461	-	6546

48

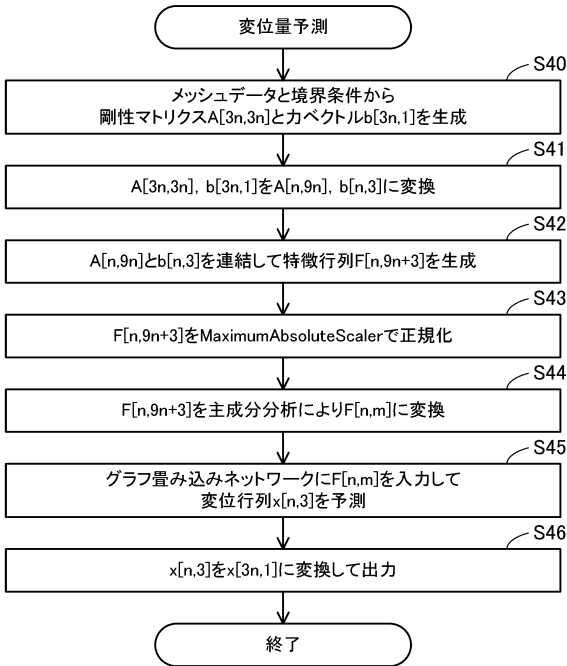
【図 2 2】



10

20

【図 2 3】



30

40

50

---

フロントページの続き

- (56)参考文献 特開2016-170080(JP,A)  
特開2020-016982(JP,A)  
特開2015-005230(JP,A)  
特開2019-128815(JP,A)  
米国特許出願公開第2017/0032068(US,A1)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)  
G06F 30/00 - 30/398  
IEEE Xplore  
JSTPlus(JDreamIII)