

動的サロゲートモデル作成手法 romAI の DEM への適用

Application of dynamic surrogate modeling method "romAI" to DEM

○ 園田 拓郎^{*1}, Stefan Pantaleev^{*2}, Livio Mariano^{*2}
Takuro SONODA^{*1}, Stefan Pantaleev^{*2}, Livio Mariano^{*2}

^{*1} アルテアエンジニアリング株式会社 Altair Engineering Ltd.

^{*2} Altair Engineering, Inc.

DEM is computationally expensive when the number of particles is large. So, it is generally difficult to apply DEM to optimization or system simulation. Therefore, this paper presents a case study of applying romAI, a deep learning-based reduced order modeling method, to DEM for efficient optimization and system simulation. The method of romAI is consisted of combination of deep learning and differential equation of state space. This method focuses on behavior which can be described by differential equation and predicts shape of functions on differential equation of state space by deep learning. If the selection of state quantities is correct, many physical phenomena can be predicted through this method.

Key Words : MBD, Reduced order model, Machine Learning, Deep Learning, DEM, Discrete Element Method, Digital Twin, Optimization, Altair romAI

1. 結 言

近年、重機、自動車、鋁業、製鉄、製菓など様々な産業分野でバルク材・粉粒体シミュレーションに離散要素法 (DEM) が活用されている。しかし、粒子数が数十万を超えるモデルの場合には、比較的計算負荷が高く、高性能な計算環境が必要となる場合が多い。近年では、GPU 計算により高速化が進んでいるものの^①、DEM を最適化や複雑なシステムシミュレーションに適用するにはハードルが高いのが現状である。

それに対して本論文では、物理現象を記述する微分方程式を、ディープラーニングを用いて予測する手法である romAI を用いて、DEM の低次元化を行った。この romAI による低次元化により、高精度かつ高速な計算が可能となるため、高性能な計算環境を用意せずとも粒子・粉体挙動を含んだシステムシミュレーションや最適化を行うことができる。本論文では、romAI の原理とともに、romAI を DEM に適用した事例について報告する。

2. romAI の原理^①

romAI は、実験データや 3DCAE 結果からディープラーニングを用いて動的な 1D モデルを作成する手法である。この romAI は、時系列データそのものを予測するのではなく、入力・出力間の関係を表す微分方程式を予測し、それを積分することで予測結果の時系列データが得られる点が特徴である。そのため、romAI が対象とするものは状態空間表現の微分方程式で表されるもののみとなる。ここで対象となる状態空間表現の微分方程式とは、式 (1) のように一階の連立微分方程式で表され、出力 (ベクトル y) が入力 (ベクトル u) とその状態量 (ベクトル x)、時刻 t 、および一連の特性パラメータ θ によって定義されるものを指す。

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = f(x(\theta, t), u(t)) \\ y(t) = g(x(\theta, t), u(t)) \end{cases} \quad (1)$$

romAI は、この状態空間表現をベースとし、式(1)の f, g をディープラーニングにより予測する手法であり、状態量の選定が正しければ、多くのケースで妥当なモデルを得ることができる。

3. 粉体混合シミュレーションの動的 ROM 化と最適化での活用⁽³⁾

粉体混合は、製薬、食品、化学など幅広い分野の製造プロセスにおいて重要であり、DEM でのシミュレーションが活用されている。しかし、DEM での詳細な 3D シミュレーションでは計算コストが高く、多くのサイクルを回すには課題がある。そのため、最適な混合器の挙動、即ち最適な混ぜ方を検討するには DEM による粉体混合シミュレーションを 1D モデルに落とし込むことが必要である。そこで、DEM と romAI の組み合わせにより、低次元化による計算コスト低減を試みる。

まず、機械学習用のトレーニングデータ作成のために DEM でパラメータスタディを行う。入力パラメータは図 1 に示すように、混合器の回転速度 w 、ねじれ角 ϕ 、混合器内の粒子質量 m の 3 つとした。出力パラメータは式 (2) で表される、2 種の粒子 ij 間の混ざり具合を表す分離指数 SI とした。ここで c_{ij} は粒子 i と j の間の接触回数を表す。この分離指数 SI は 2 種の粒子間の混合均一性に反比例し、図 2 に示すように混合時間と共に減少していく指数である。

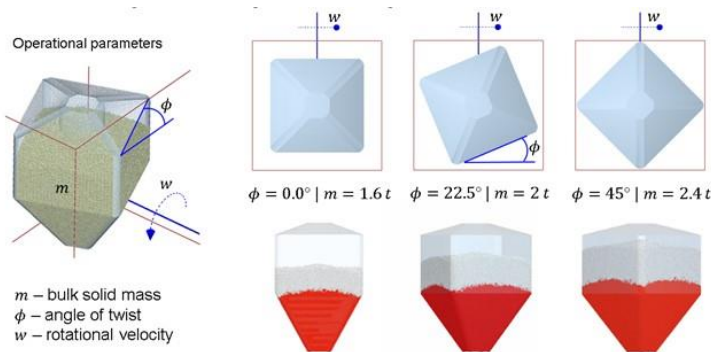


Fig. 1 Blender operational parameter space

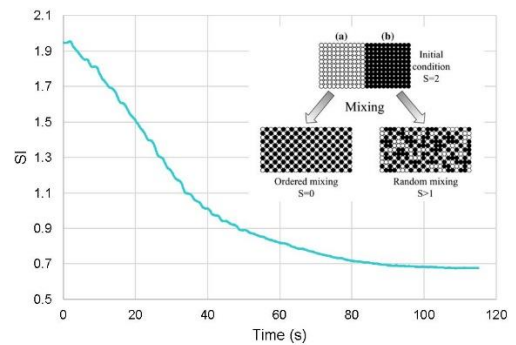


Fig. 2 Example result for the Segregation Index

$$SI = \sum_{i,j} \left(\frac{c_{ii}}{\sum_j c_{ij}} \right) \quad (2)$$

上記モデルを用い、実験計画法によるパラメータスタディとして、表 1 に示す 9 仕様の解析を行う。これをもとに、入力を混合器の回転速度、ねじれ角、混合器内の粒子質量、状態量及び出力を分離指数として romAI により 1D モデルを作成した。その結果として得られた romAI モデルで予測した分離指数と DEM との比較を図 3 に示す。図 3 は、学習には使用していない条件だが、分離指数の変化を精度よく予測できることが示された。さらに、今回使用したトレーニングデータは 115 秒までの解析結果であり、115 秒以降の結果は学習していないが、図 3 の結果は 115 秒以降も精度良く再現しており、romAI モデルがトレーニングデータに含まれる時間範囲を超えた分離指標を精度良く予測することができることが確認された。また、DEM では約 24 時間要した解析が、romAI モデルでは約 2 秒に短縮され、計算効率を飛躍的に向上することができた。

Table.1 DEM simulation runs in DoE

Training runs - Taguchi DoE (3x3)			
Run	m (t)	w (rpm)	ϕ (deg)
1	1.6	8	0
2	1.6	12	22.5
3	1.6	16	45
4	2	8	0
5	2	12	22.5
6	2	16	45
7	2.4	8	0
8	2.4	12	22.5
9	2.4	16	45

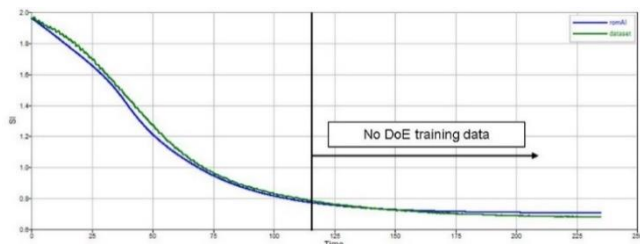


Fig. 3 Comparison of DEM result and romAI prediction

作成された 1D モデルを用い、最適化により分離指数 SI の最小化を試みた。その結果を表 2 および図 4 に示す。1D モデルの最適化で得られた入力パラメータで DEM の解析を実施した結果（図 4 緑線）ともよく一致しており、最適化の結果として有効であることが示された。また、DEM で 50 ケースの最適化を実施する場合には約 50 日を要するものが、romAI で 1D モデル化することで約 1.5 分に短縮され、効率的な最適化ができていることを確認した。

Table.2 Optimization Result

	Input			Output* ※DEM verification run
	m(t)	w(rpm)	ϕ (deg)	SI($t=235$ sec)
Initial	1.60	8.00	0.00	0.664
Optimized	1.87	9.84	19.48	0.634

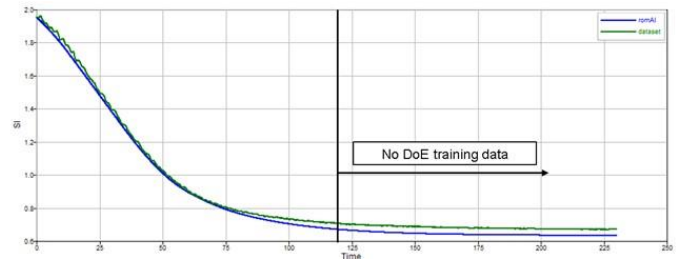


Fig. 4 Verification of the optimized parameter - romAI vs DEM result

4. 土砂 DEM モデルの動的 ROM 化と掘削シミュレーションへの適用⁽⁴⁾

次に、romAI を土砂の掘削シミュレーションに適用した例を示す。近年では、建設機械の設計検討において機構解析と DEM の連成解析による掘削シミュレーションが活用されているが、DEM の計算コストが高く、多くのサイクルを回すには課題がある。そこで、粉体混合シミュレーションと同様に DEM と romAI の組み合わせにより、低次元化による計算コスト低減を試みる。

粉体混合シミュレーションと同様に、最初に機械学習用のトレーニングデータ作成のために DEM でパラメータスタディを行う。入力パラメータは図 5 に示すように、バケットの前後、上下方向の変位、速度、および角度、角速度の 6 つとした。出力パラメータは前後、上下方向のバケット反力およびトルクと掘削量の計 4 つとした。

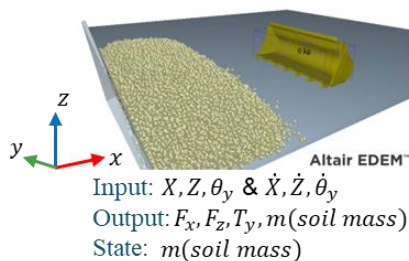


Fig. 5 Excavation parameter

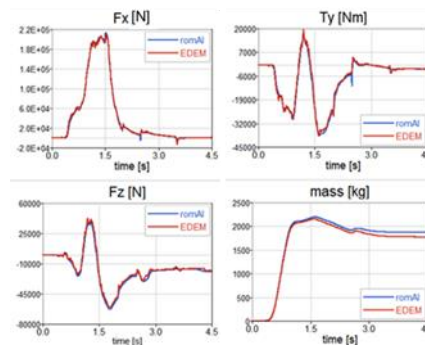


Fig. 6 Comparison of DEM result and romAI excavation prediction

上記モデルでバケットの動きを 5 パターン作成し、この解析結果をもとに入力をバケットの変位、速度、角度、角速度、状態量を掘削量、出力をバケット反力、トルク、掘削量として romAI により 1D モデルを作成した。その結果として得られた romAI モデルで予測した力や掘削量と DEM との比較を図 6 に示す。romAI が予測した結果は DEM の結果とよく一致しており、精度良く再現していることが確認された。

図 7 にホイールローダーの機構解析モデルと DEM の連成解析モデル外観を、図 8 に DEM を romAI により作成された 1D モデルに置き換えたシステムモデルを示す。また、それぞれのモデルでの掘削シミュレーション結果の比較を図 9 に示す。最大油圧荷重の誤差は 1.4% 以内であり、リフトアーム最大応力の誤差は 1.3% 以内となっていることから、土砂 1D モデルの精度が良好であることを確認した。また、計算時間は 11.2 分から 20 秒に短縮され、建設機械の設計検討のスピードアップに対して有効な 1D モデルとなっていることが確認された。



Fig. 7 Multibody - DEM coupling model

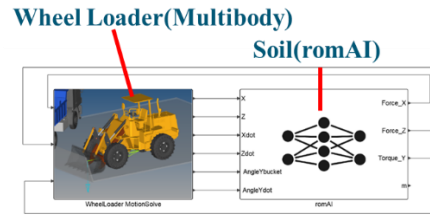


Fig. 8 Multibody - romAI coupling model

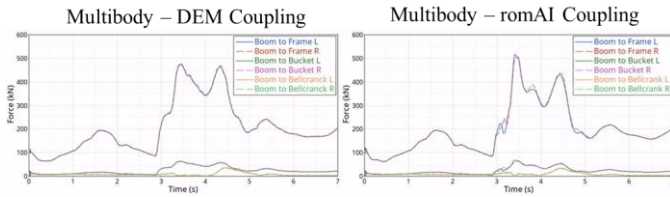


Fig. 9(a) Comparison of Hydraulic Forces

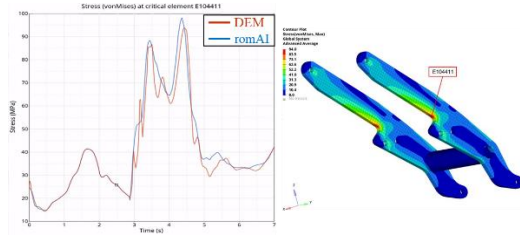


Fig. 9(b) Comparison of VonMises stress on arm

Fig. 9 Comparison of Multibody -DEM coupling result and Multibody - romAI coupling result

5. 結 語

本論文では、DEM の低次元化に、ディープラーニングを用いて微分方程式を予測する手法である romAI を適用した。本手法により、DEM の結果を精度よく再現し、且つ計算負荷の少ない、動的な 1D モデル化が可能になり、最適化や複雑なシステムシミュレーションを効率化できることを示した。romAI は DEM に限らず、様々な物理現象に対して適用可能な手法であるため、今後 1DCAE の可能性を広げることを期待する。

文 献

- (1) 池田公輔, Livio Mariano, “AI による実験・3DCAE 結果を用いた効率的な 1D モデル化手法 romAI の提案”, 1DCAE・MBD シンポジウム 2021 講演論文集, pp. 27-30.
- (2) 西浦泰介, 阪口秀, “GPU を用いた DEM の高速化アルゴリズム”, 日本計算工学会論文集, Vol.2010, pp. 7-18 (2010)
- (3) Stefan Pantaleev, “Combining AI and simulation for efficient bulk solids handling optimization”,
https://community.altair.com/community?id=community_blog&sys_id=ba3d501cdb3dc510cfdf5f6a4e29619b9
- (4) 園田拓郎, “動的サロゲートモデル作成ツール romAI の重機設計への適用事例”,
https://www.altairjp.co.jp/resource/atcx-ohv-2022-05?_hstc=142694250.00367db415d5ba6cf157854a8bbe78c6.1604975668034.1660271269049.1660282164354.1491&_hssc=142694250.2.1660282164354&_hsfp=2804886646