粒子パッキングソフトのご紹介とDEMにおけるデータサイエンスの可能性について

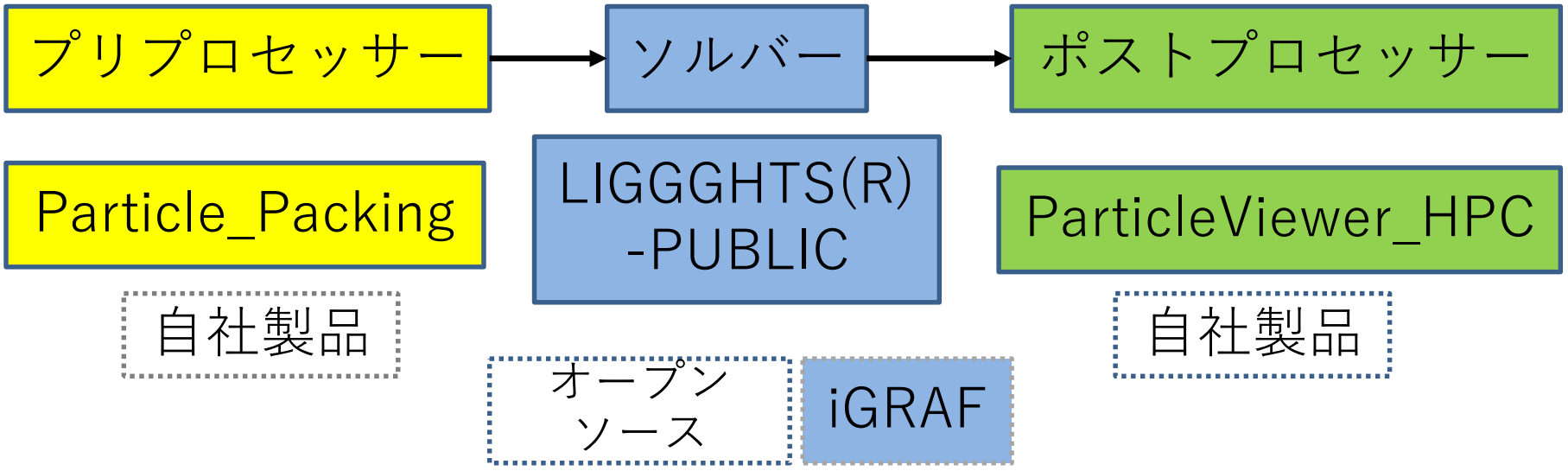
国際粉体工業展東京2022
粉体シミュレーションゾーン
2022/12/07 14:00-14:15

株式会社インサイト
三好昭生

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

会社紹介

- 株式会社インサイト
- 東京都文京区本郷5丁目
- 国産自社開発でシミュレーション関連ソフトを開発して23年
- 粉体解析ソリューション



Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

0. 最近の活動(1)

① 富岳プロジェクトへの参画 / HPC解析の実践
- 石炭火力、洋上風力等の連成解析のカプラー開発、熱伝導解析、疲労解析
- サロゲートモデル作成

② シミュレーション結果のVR&AR可視化
- HMD(Oculus (Meta))を使用

③ 資格取得支援事業
- 機械学会計算力学技術者固体力学： 公認技能講習・2級・1級

④ 自社製アプリ＋DSとの融合
- 主に、モデル生成、可視化

⑤ 各種受託アプリ開発(シミュレーション関連)
- GUIが得意。六面体自動メッシュ生成、交通流

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

1. DL関連の受注実績(1)

- 原子炉設計における人工知能利用技術の調査
(国立研究開発法人 FY2020)
- 地震動の次元圧縮、地震動応答のガウス過程回帰による
サロゲートモデル作成（国立研究開発法人 FY2021)
- 深層学習に基づく地震動データ解析等支援業務
(国立研究開発法人 FY2021)
  - cGANを用いた地震動データの生成の実装
  - 地震動予測式の生成(OSS AI Feynmanを利用)
- 発電用大型風車のスーパーシミュレーションとAIを連携
活用したサロゲートモデル構築作業支援
(東京大学様 FY2022)

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

本日の話題

① Meshman_ParticlePacking 性能向上

② Meshman_FiberPackingのご紹介

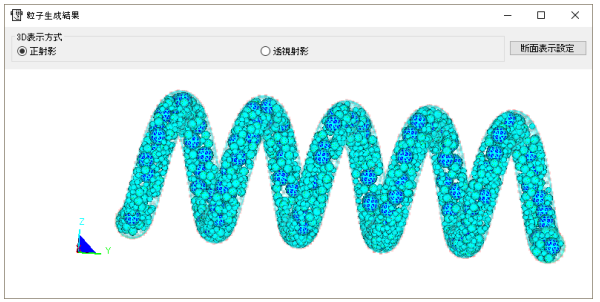
③ DEMにおけるデータサイエンスの可能性

④ データサイエンス勉強会

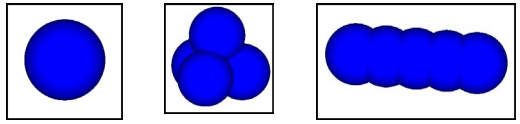
Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

2.ParticlePackingについて(1)

< Meshman_ParticlePacking Ver. 2.4 >



- 任意の容器内に
- ランダムに
- 粒径分布の有る粒子を
- 指定した比率と充填率で配置させるアプリ
- 複合粒子の生成も可能(混在も可)
- 単一粒径で64%もの高充填率を達成
- Ver. 2.4の新機能(オプション)
  - 大粒径から小粒径に充填する事で充填率を従来より高速に、より高く出来るカスタマイズ機能



Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

2.ParticlePackingについて(2)

＜ **用途** ＞

- DEM解析の初期粉体配置を作るプリプロセッサ
  - 搬送、混合、成型、沈降等
  - 利点:より望ましい初期配置を用意出来る為、DEM解析の計算時間の節約になる
- 粉体成型のシミュレーション
  - 粒径分布が与えられた時、総充填率の幾何学的上限を知る
    - 特定粒径の体積絶対値も分かる
  - 粒径分布をパラメータとして、総充填率(間隙率)の変化を知る
- 粒子を空孔と見做すとポーラス材料のモデルが作れる

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

2.ParticlePackingについて(3)

- 性能向上の為のアルゴリズム改良(リリース予定)

- アルゴリズム:粒子同士の接触判定で、バケット群を処理するときに、
  - ✓従来(ケースA):端から処理する
  - ✓改良後(ケースB):中央から処理する

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

2.ParticlePackingについて(4)

- 性能向上の為のアルゴリズム改良(リリース予定)
- 問題設定
  - 容器形状：1辺30の立方体
  - 粒径は3種類
    - 直径：10, 2, 0.5 (20 : 4 : 1)
    - 体積比率：1, 2, 4
  - 粒子の寄せ：無し
  - 大粒径から小粒径の順で、充填
- 目標充填率
  - 100%

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

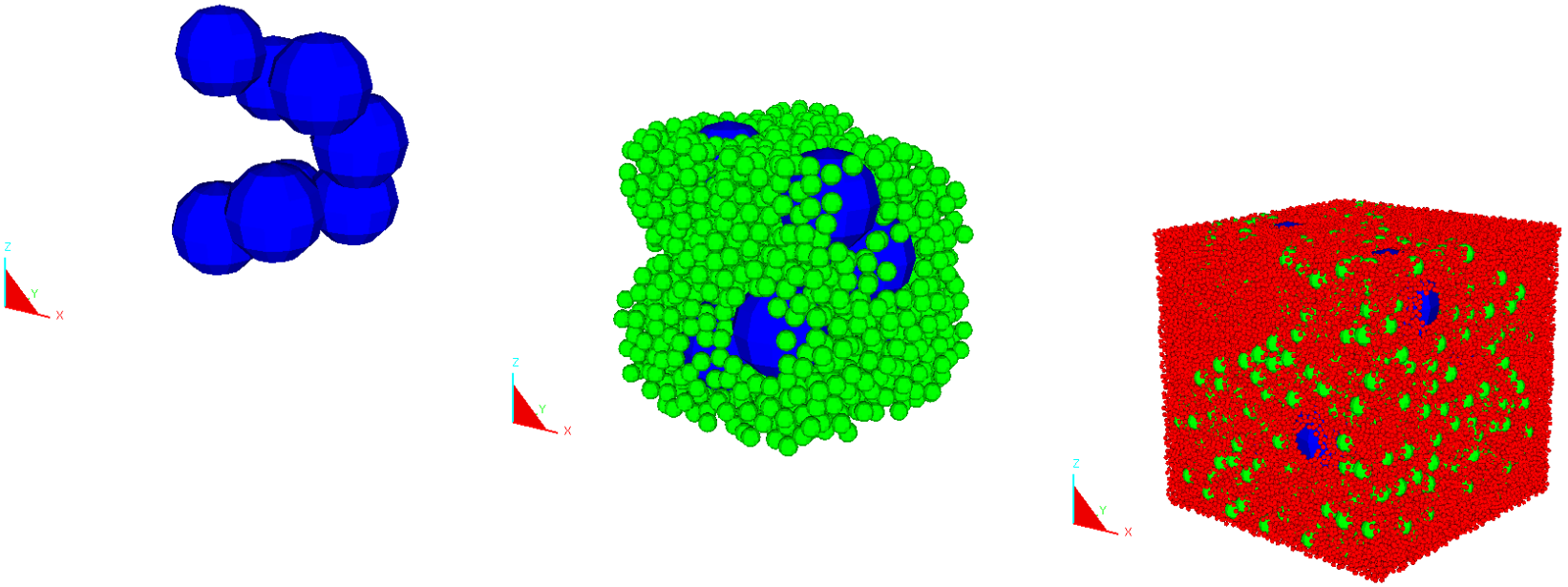
2.ParticlePackingについて(5)

- 性能向上の為のアルゴリズム改良 (リリース予定)
- 結果
  - ケースA, B 共通
    - 生成粒子数 : 80, 332
    - 実現体積比率 : 1 : 1.84 : 1.23
    - 実現充填率 : 63.1%
  - ケースA 実行時間 : 14分58秒
  - ケースB 実行時間 : 5分38秒
    - 62.4%減

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

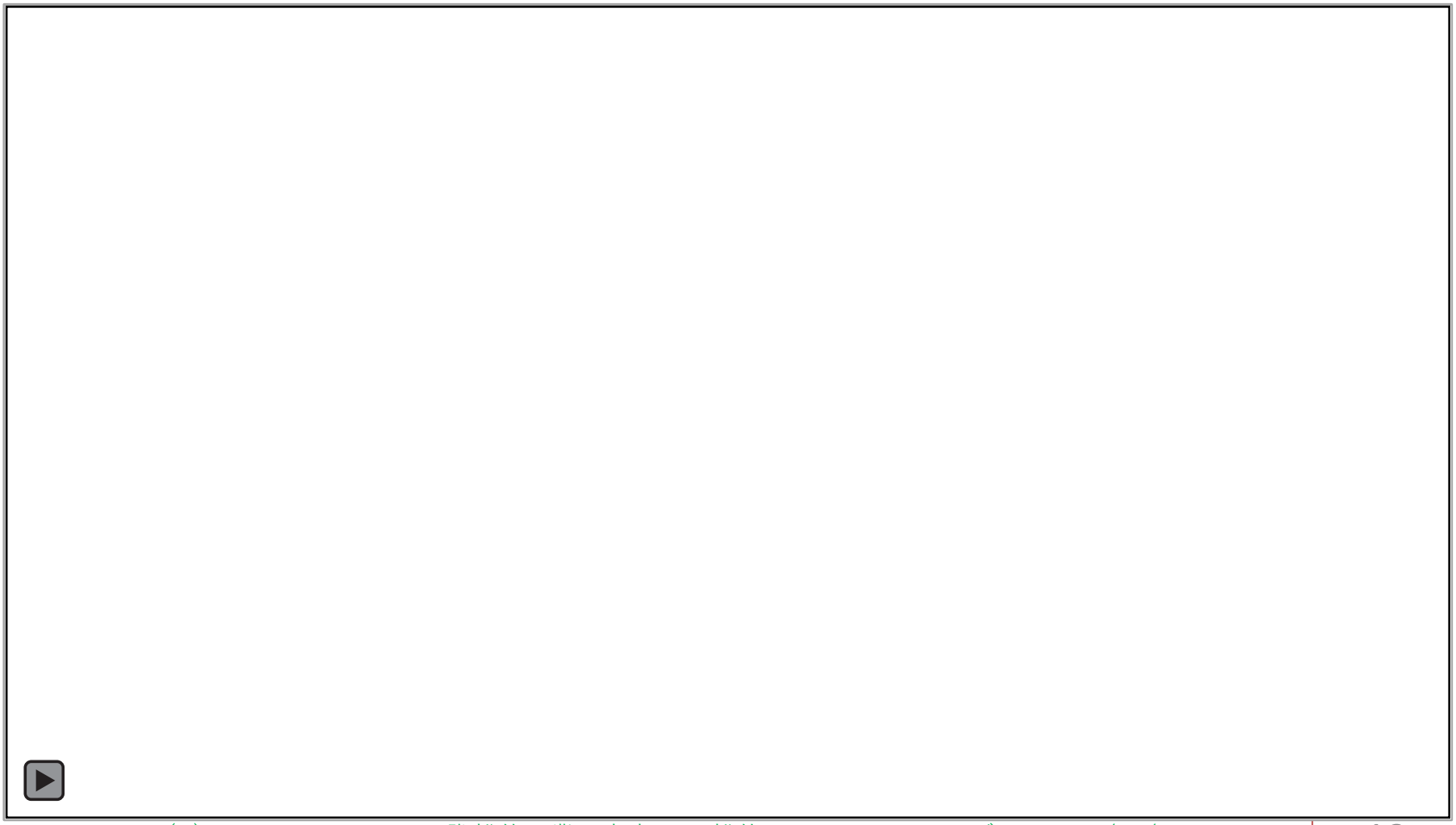
2.ParticlePackingについて(6)

- 性能向上の為のアルゴリズム改良(リリース予定)
- 左から、各粒径充填終了時のスナップショット



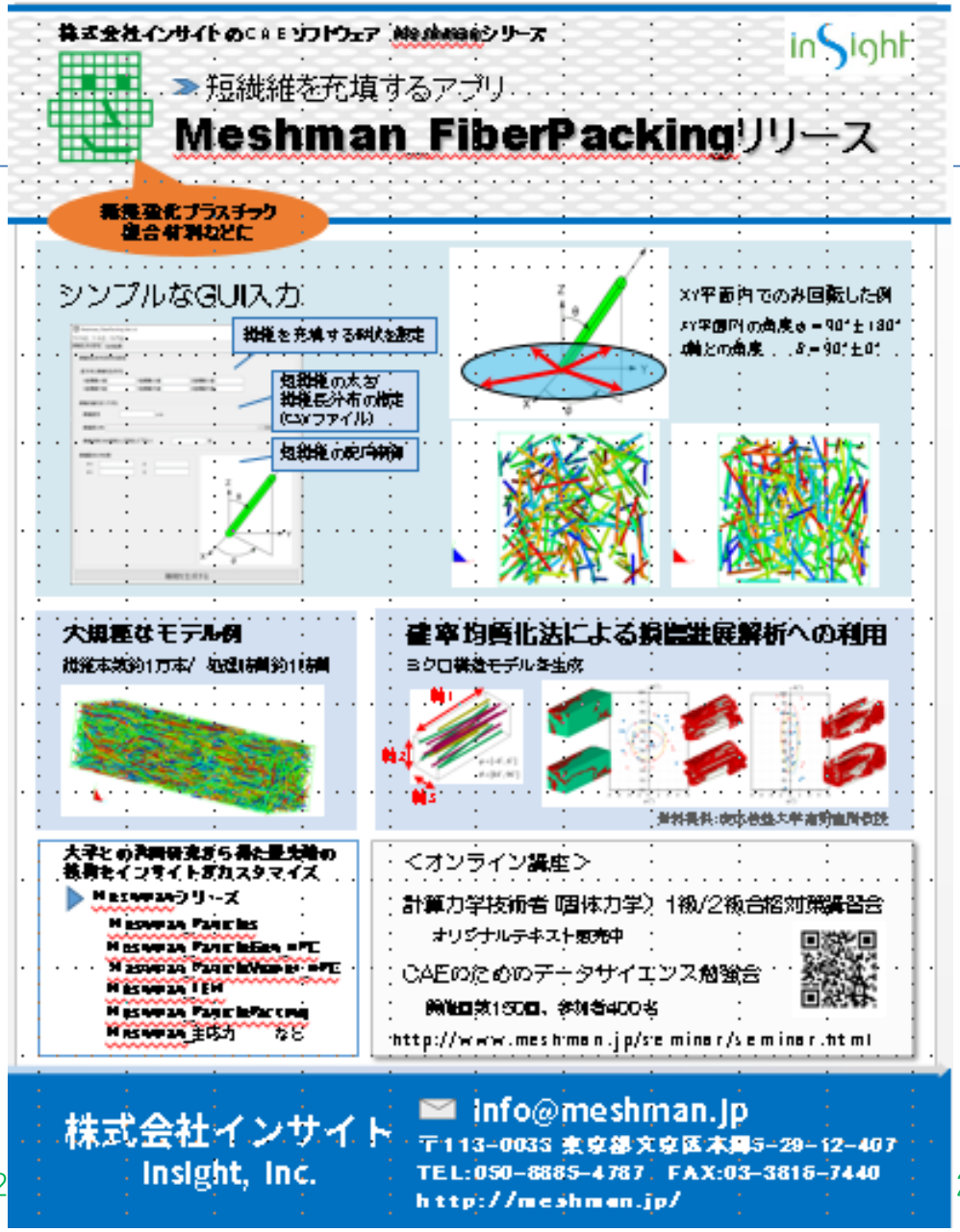
Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

3.Meshman_FiberPacking(1)



Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

3.Meshman_FiberPacking(2)



Copyright (C) 202

4.DEMにおけるデータサイエンスの可能性(1)

- 粉体解析の主要なツールは、DEM(離散(又は個別)要素法)である
- 現在所謂CAEとか計算力学と呼ばれる、物理現象を再現するシミュレーションの業界では、機械学習及びその周辺の技術を導入する事が、大々的に行われている
- 但し、それは、連続体力学(FEM, FVM, FDM, PM)においては、実績が大量に有るが、DEMのような純粋に離散的な手法については、非常に実例が少ない

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

4.DEMにおけるデータサイエンスの可能性(2)

では、連続体力学では、どのようなデータサイエンスが行われているだろうか?

- サロゲートモデルの利用による計算時間の劇的な短縮化
- それに伴うパラメトリックスタディの範囲の拡大、解析モデルの高精度化の可能性拡大
- データ同化の利用による、計測とシミュレーションの融合(精度に裏打ちされたデジタルツイン) 又、パラメータ同定
- 強化学習の利用による、メッシュ最適化や構造最適化の高度化
- (自然言語処理の利用による、過去の解析結果資産の活用)
- 生成モデルの利用による、データ不足の解消

Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

4.DEMにおけるデータサイエンスの可能性(3)

更に計算力学の中で圧倒的に多用されている、深層学習(DNN)と言う技術において、究極の切り札とも言うべき技術が2017に登場し、もの凄い勢いで発展しつつある。

- PINN (Physics Informed Neural Network)
- 物理情報を付加したニューラルネットワーク
- NNに現象を支配する偏微分方程式を考慮させる技術である
  - 観測データは少なくても良い
  - 実質メッシュフリー
  - 定式化の自由度が大きい
  - 逆問題もOK(パラメータ同定)

Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

4.DEMにおけるデータサイエンスの可能性(4)

では、DEMで機械学習を利用している先行事例を紹介する。

- 文献:

  https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250921003973

- 著者組織:米国エネルギー技術研究所

Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

4.DEMにおけるデータサイエンスの可能性(5)

- 動機:DEMの計算コストが膨大な為、その適用性に限界が有る
- 目的:DNNの代表的形態のCNN(Convolutional Neural Network)を用いて、DEMの計算速度を桁違いに高速化する
- DEMツール:Mfix(オープンソース)
  - https://mfix.netl.doe.gov/products/mfix/
  - 利用目的:機械学習の為の教師付きデータを生成する為

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

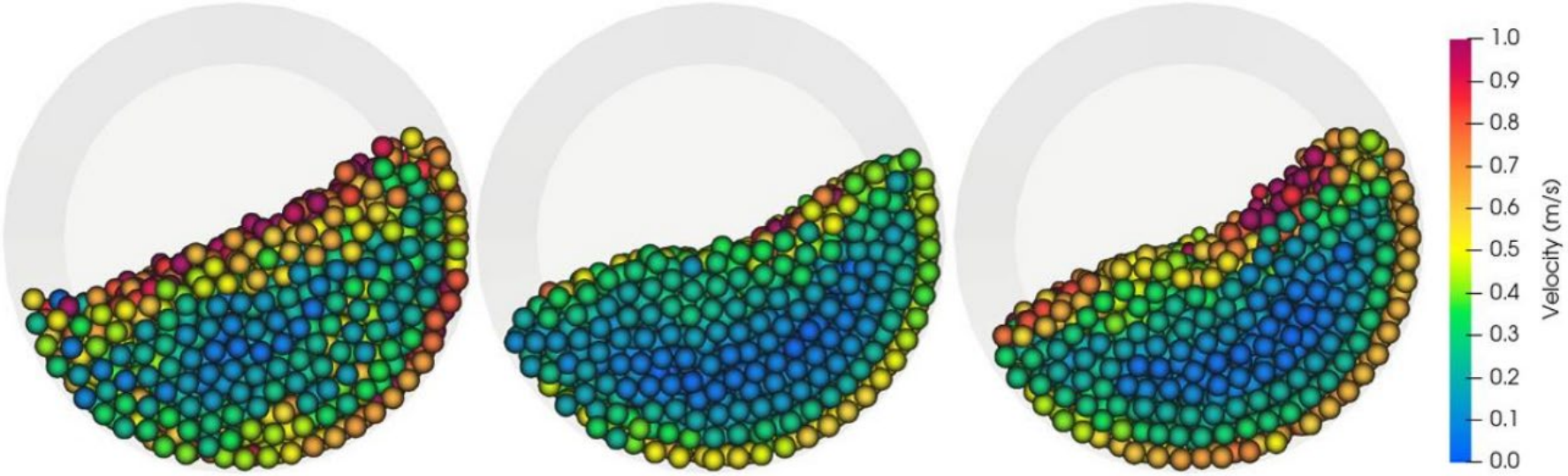
4.DEMにおけるデータサイエンスの可能性(6)

- 手法:3次元連続畳み込み(3D-CNN)
- 損失関数:マルチスケール損失関数

Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

4.DEMにおけるデータサイエンスの可能性(7)

＜適用事例1:回転ドラム＞



(a) MFiX-DEM

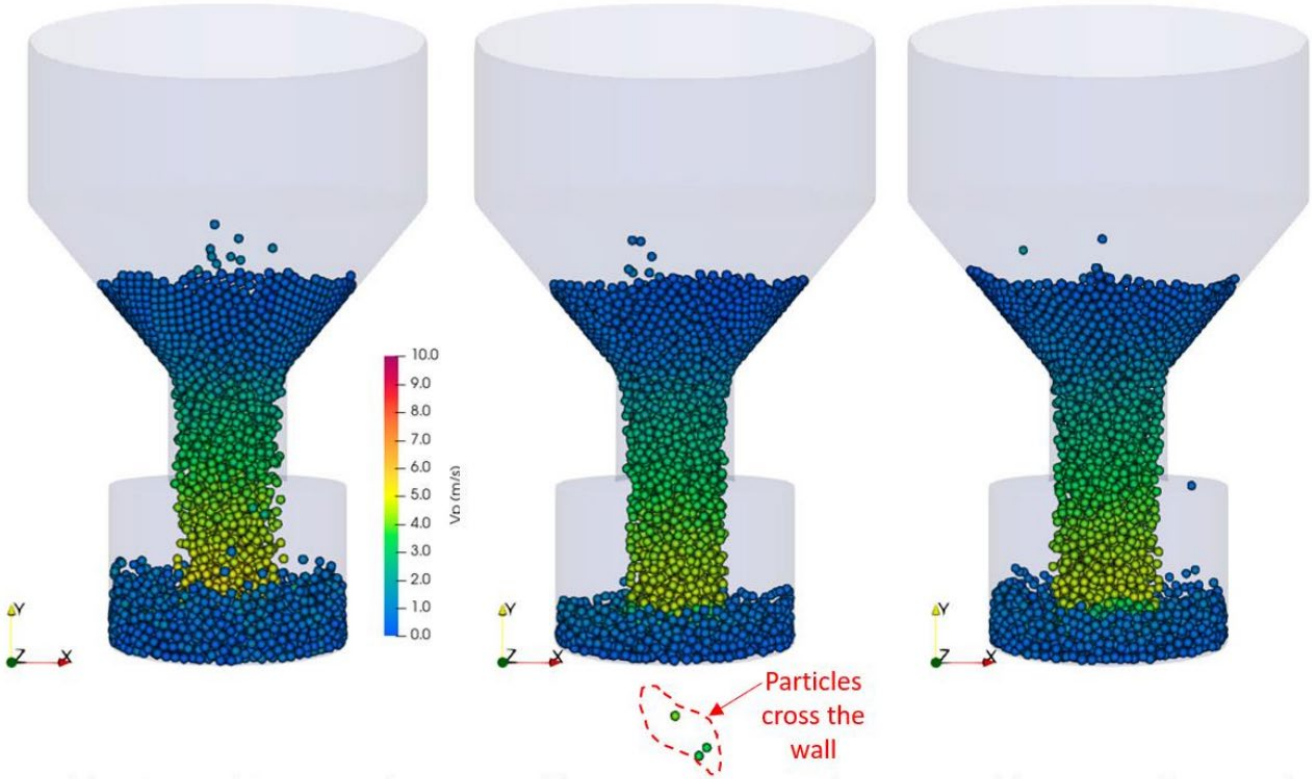
(b) Loss function with 100% micro-scale error

(c) Loss function with 50% micro-scale and 50% macro-scale error

Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

4.DEMにおけるデータサイエンスの可能性(8)

＜適用事例2：ホッパー＞



(a) MFiX-DEM (Δt = 0.04 ms)　(b) Conv-DEM (Δt = 20 ms)　(c) Conv-DEM (Δt = 10 ms)

Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

4.DEMにおけるデータサイエンスの可能性(9)

＜**結論**＞

- ConvDEMは、従来のMFiX-DEMと比較して、精度をほとんど落とさずに78倍の高速化を達成した

- 主な知見は以下の通りである

  1) 機械学習技術を用いることで、より大きな時間ステップを用いた粒状流の離散的シミュレーションを高速化する事ができる

  2) 物理学に着想を得たマルチスケール損失関数により、機械学習モデルの安定性と精度を向上させることができる

  3) 各トレーニングステップでより多くのフレームを使用することにより、精度を向上させることができる

  4) 時間ステップが大きい為、一部の粒子が壁の境界を越える可能性があるが、これは時間ステップを小さくすれば解決できる

Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

データサイエンス勉強会(1)

- 当初の目的は、データ同化技術の習得と普及
- その後、シミュレーションと親和性の高そうな技術を求めて、新しいテーマを開拓
  - 現在23テーマ実施済
- 現在では、工業現場で得られる計測・実験データの分析、パラメトリックスタディの効率化、解析結果の解釈・分類、解析技法のパラメータ最適化、サロゲートモデルの作成にも含む
- 2018/11/15 : 第1回データサイエンス勉強会(ベイズ統計学)開催
  - 以降月約1回のペースで新規テーマ開催
  - 累計140回開催。延べ380名以上参加
  - 開催アナウンスは弊社ホームページ

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

データサイエンス勉強会(2)

＜ 勉強会の構成 ＞

- 基礎理論の説明
- Pythonにより理論を実装したソースコードの説明
- ケーススタディ（なるべくシミュレーションの事例を選択）
- 自由討論
- 開催時間： 3.5時間

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.

データサイエンス勉強会(3)

＜ **勉強会の狙い** ＞

- ソースコードを説明する事により、理論の実現方法が理解出来る。
- 基礎理論を学ぶ事で機械学習技術に対する目利き力が養われる
- 網羅的に勉強する事で適用例を思い付き易くなる。
- 組織のグループの1名が参加するのでは無く多くのメンバーが参加する事で組織力を養う

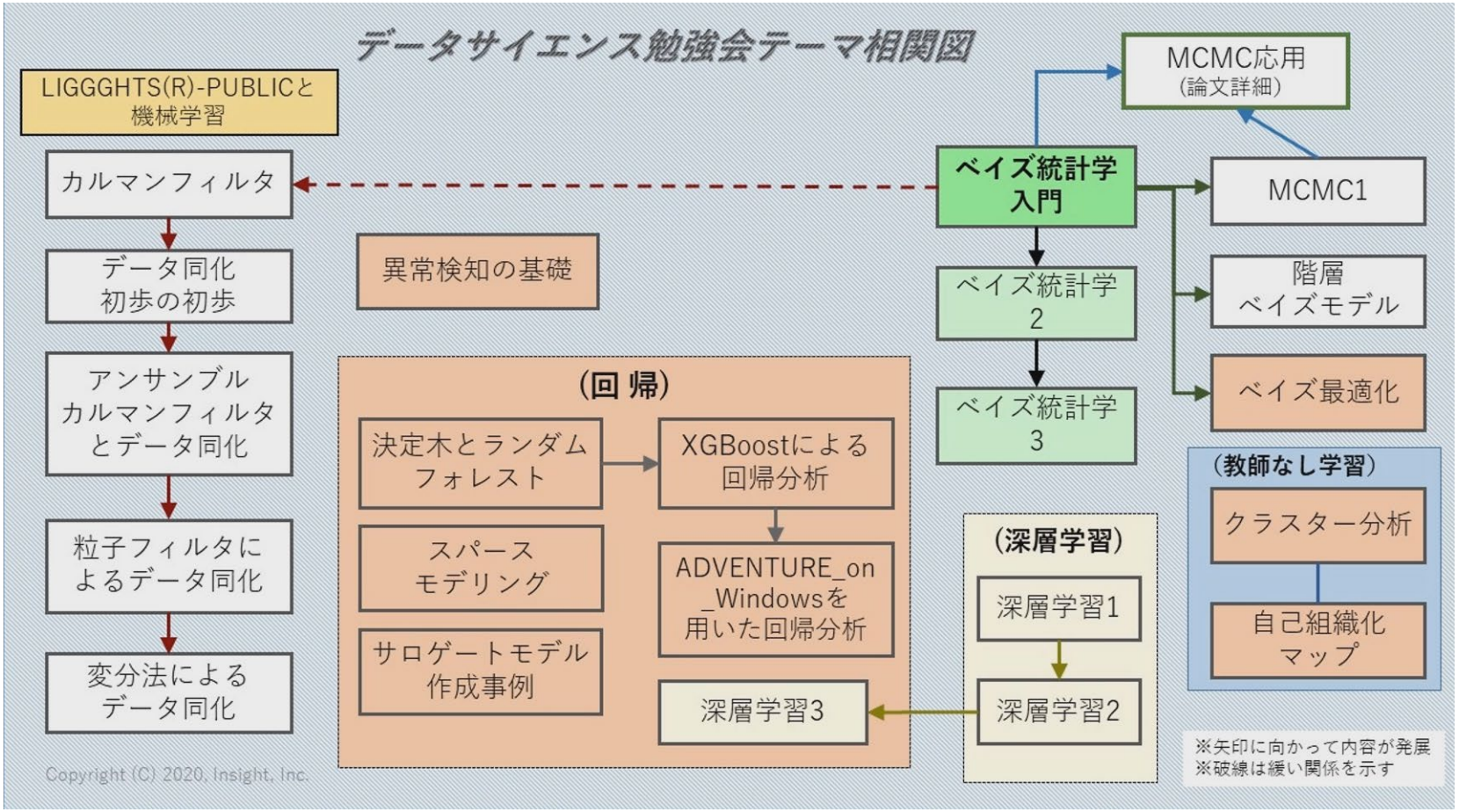
Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

データサイエンス勉強会(4)

- ベイズ統計学入門
- ベイズ統計学2
- ベイズ統計学3
- クラスター分析
- 自己組織化マップ
- MCMC1
- MCMC応用（論文詳細）
- 階層ベイズ・モデル
- ベイズ最適化
- カルマンフィルタ
- データ同化初歩の初歩
- アンサンブルカルマンフィルタとデータ同化
- 粒子フィルタによるデータ同化
- 変分法によるデータ同化
- 決定木とランダムフォレスト
- スパース・モデリング
- サロゲートモデル作成事例
- XGBoostによる回帰分析
- Adventure_on_Windowsを用いた回帰分析
- 異常検知の基礎
- 深層学習1
- 深層学習2
- 深層学習3
- (粉体解析)LIGGGHTS(R)-PUBLICと機械学習
- CAE技術者の為のPython/Numpy基礎講習会
- Pandasコーディング技術

Copyright (C) 2022, Insight, Inc. 国際粉体工業展東京2022粉体シミュレーションゾーン2022/12/07

データサイエンス勉強会(5)



資料&コンタクト

- この資料は、1週間以内に弊社HP

  http://www.meshman.jp/

  にPDFで掲載します。

- 弊社へのコンタクトは、

  info@meshman.jp

  迄お願いします。

Copyright (C) 2022, Insight, Inc.