サロゲートモデル構築のための深層学習ソフトウェア Neural Concept Studio (NCS) ご紹介

サイバネットシステム株式会社
デジタルエンジニアリング事業本部 エンジニアリング事業部
データサイエンス部

CYBERNET

サロゲートモデルとは？

■ CAEソルバーの代わりにAIで解析結果を予測する技術

- ▶ サロゲート(surrogate=代理)

■ Neural Concept Studio (NCS)で構築するサロゲートモデルの特長

- ▶ 形状データを直接読み込み、瞬時に3D-CAE結果を予測
- ▶ あらゆるソルバー/解析分野に対応
- ▶ 3D形状生成AIと連携した形状最適化が可能

サロゲートAIの活用領域

サロゲートによる設計プロセス全体の高速化

CYBERNET

シミュレーション主導プロセスの実現

お客様の声(設計プロセスの課題)

CYBERNET

経営

【課題】

CAE先駆者の方々のノウハウを残したい。(実機コリレーション含めたCAEノウハウを設計プロセスに組み込み、抜本的な開発プロセスを創りたい)

使えるCAEデータベースを構築、運用したい。CAEに携わる方々が、自らがデータを蓄積する仕組みと運用の構築。

設計部門

【課題】

意匠を含む部品は、上流段階でデザインが決まるが、3D CADデータが揃うまでCAEで性能検証できない。検証結果がNGとなった場合、大きな手戻りが発生してしまう。

【課題】

設計変更するたびに、性能検証にかかるCAE解析時間が膨大。たとえば1設計につき8HのCAE解析を40条件で検証しようとする、 $8 \times 40 = 320\text{H}$ もかかってしまい、十分な設計検討ができない。

生産技術部門

【課題】

時間が足りない。設計から図面が届いてから、生産工程の検討結果を回答するまでに3日~1週間しか時間がない。CAEも実施しているが、1日3回解析をまわすのが限度で、十分な検討時間を確保できない。

CAE解析部門

【課題】

最適な設計を探索したいが、最適化を行うには多数のCAE解析が必要で、現実的な時間内に最適解にたどり着けない。遺伝的アルゴリズムで最適化しようとする、たとえば100個×5世代=500回程度の解析が必要になり非現実的。

サロゲートによる設計プロセスの高速化

CYBERNET

1つの究極系～手書きスケッチから空力性能を予測

▶ まだ研究段階ですが近い将来実現できると思われま

手書きスケッチ

3D形状を予測

サロゲートで空力性能を予測

デモ動画(ショート版) <https://vimeo.com/603789143>
デモ動画(ロング版) <https://vimeo.com/603784652>
関連論文 <https://arxiv.org/abs/2104.00482>

3D CAE

データ収集

SPDM

データ蓄積

Data
Science

データ分析・選別・加工

AI学習

3Dディープラーニング

サロゲートモデル

形状・解析条件と解析結果の
データをたくさん用意する
(100個以上推奨)

AI学習に適した
データを選び出す

形状・解析条件と解析結果の
関係を学習させる

NEURAL
CONCEPT

Why Cybernet ?

弊社がサロゲートAIを扱う意義

Why Cybernet ?

CYBERNET

CAEとAI双方に理解のある「CAE×AI技術者」が在籍

CAE技術者

AI技術者

CAE×AI技術者

○ CAEデータへの理解
物理現象の理解とモデル化

○ AI・機械学習の知識やノウハウ
データ分析(データサイエンス)

△ AIに関する知識
AIとCAEの違い

△ 必要なCAEデータの見極め
物理現象の理解

○ 物理的観点からの適切な課題設定
CAEデータを蓄積するためのアドバイス
必要なCAEデータの見極めと分析
etc.

良質なサロゲートAIを構築するには
CAE×AI技術者の協力が不可欠

Why Cybernet ?

CYBERNET

高度なCAEデータ分析力

- ▶ CAEとAI双方の視点からデータを分析
- ▶ データの裏側に潜む物理的背景を理解

AIだけの視点

どうやらデータが2つのクラスタに分かれているようですね。
予測精度を上げるために、それぞれのクラスタにラベルをつけてみるのはいかがでしょうか？

CAE×AIの視点(当社のCAEデータ分析力)

構造解析では寸法と応力の関係は連続的になるはず
です。不連続になるとしたら接触ぐらいしかありません。
もし接触がないモデルであれば元のデータが間違っ
ているかもしれませんので、見直されてみてはいか
がでしょうか？

AI導入基盤を構築する周辺ソリューションが充実

- ▶ 3DCAE
 - Ansys, Cybernet CAE Cloud
- ▶ SPDM
 - Ansys Minerva, Aras
- ▶ データサイエンス
 - Ansys optiSLang, Optimus
 - BigData Analysis (BDA)

Neural Concept Studio(NCS) ご紹介

NCSの特長

■ 形状データを直接読み込み、瞬時に3D-CAE結果を予測

- ▶ 結果も3Dで得られるため直感的に取り扱える
- ▶ CADデータをそのまま入力できるため、CAEツールの知識や経験を問わず利用できる

■ あらゆるソルバー/解析分野に対応

- ▶ NCSは物理式を解かないため、流体・構造・音響・磁場などあらゆる解析分野に対応できる
- ▶ 用意するデータはSTLやCSVなど一般的な中間形式なのでソルバーの種類を問わず利用できる

Geometry

STL, STEP等

Scalar

$$a=1.4$$
$$b=1.7$$

...

Field

CSV, JSON等

Signal

■ 3D形状生成AIと連携した形状最適化機能を搭載

- ▶ パラメータに依存しない様々な3D形状をAIで生成
- ▶ サロゲートと連携し最適形状を探索

NCS製品概要

CYBERNET

製品名: Neural Concept Studio

- ▶ 日本国内ではサイバネットが初の代理店
- ▶ SaaSで提供(オンプレミスも対応)

開発元: NEURAL CONCEPT 社

- ▶ <https://neuralconcept.com/>
- ▶ 本社: スイス(ローザンヌ) 拠点: ドイツ(ミュンヘン)
- ▶ 設立: 2018年(スイス連邦工科大学発スタートアップ)
- ▶ ユーザー数: 60社以上
- ▶ NAFEMSメンバー ([Engineering Data Science Working Group](#)に所属)

独自のAIテクノロジー

- ▶ Geometric Convolutional Neural Network (GCNN)
 - 3D形状を直接入力
 - 分布結果、時系列結果、グラフ、数値の出力が可能
 - 信頼度指標が計算され、予測の不確かさを確認できる

予測の不確かさの表示

予測結果の信頼度が低い場合に警告を表示

必要なデータ

■ ジオメトリデータ

▶ 対応ファイル形式

- STL, STEP, Parasolid等の中間ファイル形式
- CATIA, NX, SolidWorks等のCADデータ
- CAEメッシュからの形状抽出も可能

■ 解析結果データ (必要に応じて)境界条件、材料データ

▶ 対応ファイル形式

- CSV, JSON
- CAEソルバーの結果ファイル (対応ソルバー: Ansys, Fluent, LS-Dyna, EnSight, Abaqus等)

Scalar

$a=1.4$
 $b=1.7$
...

スカラーデータ
(応力MAX値、Cd値など)

Field

分布データ
(応力分布、流速分布など)

Global Signal

時系列のスカラーデータ
(変位vs荷重グラフなど)

Local Signal

時系列の分布データ
(変形の履歴など)

必要なデータ数

少ない教師データ数で高い予測精度を達成

- ▶ 変更するパラメータ数が5個以下の場合、教師データ数は100~150個が推奨値、30~50個が最低ライン

<https://www.neuralconcept.com/post/how-many-simulations-do-you-need-to-train-your-predictive-model>

<https://www.neuralconcept.com/post/data-collection-and-generation-for-ai-models>

3D形状生成AIと形状最適化

NCSは3D形状生成AIも搭載（Neural Design Module）

- ▶ DeepSDF等の3D形状生成AIにより、CADパラメータに依存せずに形状を大量生成できる
- ▶ 3D生成AIとサロゲートAIを組み合わせた最適化も可能

3D形状生成AIと形状最適化

逆止弁の形状最適化事例（Danfoss社様）

サロゲートモデルを構築

CFD simulation

NCS prediction

Static pressure on the piston head, on a test sample

3D形状生成AIを構築

AIで解析結果を予測

AIで新しい形状を大量生成

最適化

目標：
ピストン作用力最大化
質量流量最大化

最適化：
多目的最適化
合計750形状を生成し評価

結果：
質量流量10%向上
GPU使用10時間

The main title of the slide, "弊社PoC事例のご紹介とサロゲートモデル構築のポイント", is displayed in a large, black, sans-serif font. A vertical red bar is positioned to the left of the text.

弊社PoC事例 非線形構造解析

目的

- ▶ ラバードームスイッチの寸法を変更したときの解析結果をNCSで予測する

解析モデル

- ▶ 右図に示す形状を2次元軸対称でモデル化
 - 下板(固定)、押し子(強制変位)でゴムを変形・座屈させる

解析手法

- ▶ Ansys Mechanicalを利用
- ▶ 非線形静的構造解析(大変形、材料非線形、摩擦接触)

解析結果

- ▶ 変位量、ミーゼス応力
- ▶ フィーリングカーブ(変位vs反力グラフ)
- ▶ クリック率

NCSの入力データと出力データ

NCSの入力データ

- ▶ ゴムのジオメトリデータ(STLファイル)
 - 下板と押し子は形状が変化しないため除外
 - 寸法は入力データに用いない
- ▶ 境界条件は入力しない

NCSの出力データ

- ▶ クリック率
- ▶ 時系列の変位分布とミーゼス応力分布
- ▶ 時系列の変位と反力(フィーリングカーブの構成要素)
 - PyAnsysを用いてデータをCSV(一部JSON)で出力

ポイント①
スカラー/時系列/分布データを
まとめて予測可能

データ準備

- ▶ Workbenchのパラメータスタディ機能を利用して学習データを350個生成
 - データセットを train : test = 0.9 : 0.1 に分割

形状バリエーションの例

【補足】

本モデルは中央の突起が下板に接触するまで変形させている。変位量(突起と下板の距離)はモデルにより異なるが、変位量はNCSに入力していない。また、軸対称拘束や接触も入力していない。NCSは深層学習で形状の特徴を捉えるため、これらは形状から暗黙的に理解される。

ポイント②
形状から推測できる境界条件は
入力する必要がない

NCSによるディープニューラルネットワークの学習

NCSで必要な設定を行って学習を実行

- ▶ ディープニューラルネットワークはNCSにより自動的に構築される
- ▶ 学習環境: Tesla V100, VRAM32GB
- ▶ ステップ数: 87,000
- ▶ 学習にかかった時間: 約2時間

▶ 補足

- 今回は学習の状況に鑑みて、変位・反力(フィーリングカーブ)についてはデフォルトのL2 LossからL1 Lossに変更している
 - ※ある程度の機械学習の知見が必要

NCSによる予測結果

testデータ Sample Id: 105

X方向変位分布

▶ 良い予測ができています

ミーゼス応力分布

▶ 良い予測ができています

NCSによる予測結果

時系列の反力

- ▶ 一部を除き、良い予測ができています

横軸は時間（この問題ではY方向に線形に変位を与えているため、フィーリングカーブと同様のグラフになる）
青: CAE結果、赤: NCS予測結果

- ▶ Ansys結果と比較するとオーソドックスな挙動を示すものは予測精度が高いことがわかる
- ▶ 一方、物理的にも予測が難しい挙動を示すものは予測が難しかったことがわかる
 - このようなサンプルを予測対象から外すか、データを追加してAIモデルの適用範囲を広げるといった対策が必要

Ansysの相当応力コンタ図
(変形等倍)

AIとCAEでは解の求め方が異なるため、結果の解釈には注意が必要

- ▶ 主な注意点① AIにおける精度は損失関数の値であり、CAEにおける精度とは異なる
 - たとえばNCSでは分布結果のL2損失が小さければ予測精度が高いとみなすが、これは分布が全体的にみるとCAEに合っているという意味であり、局所的には(物理的に見て)不可解な結果になっていることもある
 - 対策としてはデータ追加やディープラーニングの設定変更などが挙げられる
- ▶ 主な注意点② 出力同士に物理的な関係があるとは限らない
 - したがって反力では誤差が大きくても、応力分布の誤差は小さいといったことが発生する(下図参照)
 - 対策としては損失関数の設定変更などが挙げられる

ポイント③
サロゲートモデルの評価には工学的知見と
機械学習の知見がともに必要

反力グラフ

応力分布

- NCSはマルチなデータの学習が可能であり、スカラー/時系列/分布データをまとめて予測できる
- NCSでは境界条件を付与する位置は、形状から暗黙的に理解できる
- サロゲートモデルの評価にあたっては物理的・工学的知見と機械学習の知見がともに必要になる

弊社にはCAEとAIの知見をあわせ持つCAE×AI技術者が在籍しており
お客様のCAEサロゲートモデル構築を強力に支援いたします

- ✓ NCSは3D形状データを直接読み込み、瞬時に3D-CAE結果を予測
- ✓ 形状の概略検討段階での性能予測が可能となり、フロントローディングを実現
- ✓ 弊社のCAE×AI技術者が、お客様のCAEサロゲートモデル構築を支援します

お問い合わせ

AI-support@cybernet.co.jp

サイバネットシステム株式会社

デジタルエンジニアリング事業本部
エンジニアリング事業部 データサイエンス部

ホームページ | https://www.cybernet.co.jp/iot/products/neural_concept_shape.html
お問い合わせ | AI-support@cybernet.co.jp

CYBERNET

VISION 技術とアイデアで、社会にサステナビリティとサプライズを。

MISSION 想像を超える、創造力で、課題のブレイクスルーを導く。