

物理シミュレーションのサロゲートモデル活用による ものづくり DX

篠崎明ⁱ, 宮本裕平ⁱⁱ

Manufacturing DX Using Surrogate Model of Physical Simulation.

Akira SHINOZAKI, Yuhei MIYAMOTO

新しい技術であるデータサイエンスを活用することで物理シミュレーションのサロゲートモデルを構築できるようになってきた。従来、シミュレーションの適用が難しく、経験的な検討が主流となっている開発・設計や製造条件検討の初期段階でサロゲートモデル活用により、定量的・客観的な検討、すなわち、ものづくり DX が可能となり、後工程の検討を効率化できる。本報では、設計・開発や製造工程に関するサロゲートモデル作成の事例を紹介し、開発・設計や製造条件検討の初期段階への適用によるフロントローディングについて述べる。

(キーワード): 設計, 製造プロセス, サロゲートモデル, フロントローディング, 放熱, めっき

1 はじめに

製品の開発・設計の初期段階や製造条件検討の初期段階では形状をはじめ様々な仕様が定まっていなことから試作や実験による検討は効率が悪い。このため、製品の開発・設計、製造条件検討の初期段階に試作や実験を適用することは難しい。こうした局面において、物理シミュレーションであれば試作や実験よりも効率的に検討が可能であると期待されてきた。しかし、開発・設計や製造条件検討の初期段階の意思決定にはスピード感が求められるなか、物理シミュレーションにかかる時間が長く、適用できない場合が多かった。例えば、開発・設計や製造条件検討の初期段階における仕様及び後工程のシミュレーションや実験・試作で検証する条件を決める会議において、その場でシミュレーションを実行して結果を参考にするには、一般に難しい。このため、開発・設計や製造条件検討の初期段階の意思決定は経験的、保守的に行われることが多く、候補を多めに用意しておいて、後工程であるシミュレーションや実験・試作による検討において候補を絞っていき、設計や製

造条件を確定するというアプローチが主流となっている。

最近のデータサイエンスの発展により、シミュレーション結果を学習データとしてサロゲートモデルを構築することができるようになってきた。物理シミュレーション結果から構築したサロゲートモデルを使用することで、数時間を要するシミュレーションの傾向を極めて短い時間、例えば数秒で予測することができる。数秒程度といった短い時間で結果が得られれば実験やシミュレーションの活用が難しかった開発・設計や製造条件検討の初期段階において活用が可能であり、経験に加えてシミュレーションに基づいた理論的・客観的な検討によるものづくり DX が可能になると考えられる。すなわち、開発・設計や製造条件検討の初期段階における会議中にサロゲートモデルで検討候補が目的とする性能を発揮するか否かを確認しながら仕様や条件を決定できるようになり、フロントローディングが可能になると期待される。図 1 に上述の考え方の概念図を示す。

サロゲートモデルの予測には「正解」としてのシミュレーション結果に予測誤差が加わっており注意が

ⁱ サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム 上席主任コンサルタント 博士（工学）

ⁱⁱ サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム 主任コンサルタント 博士（理学）

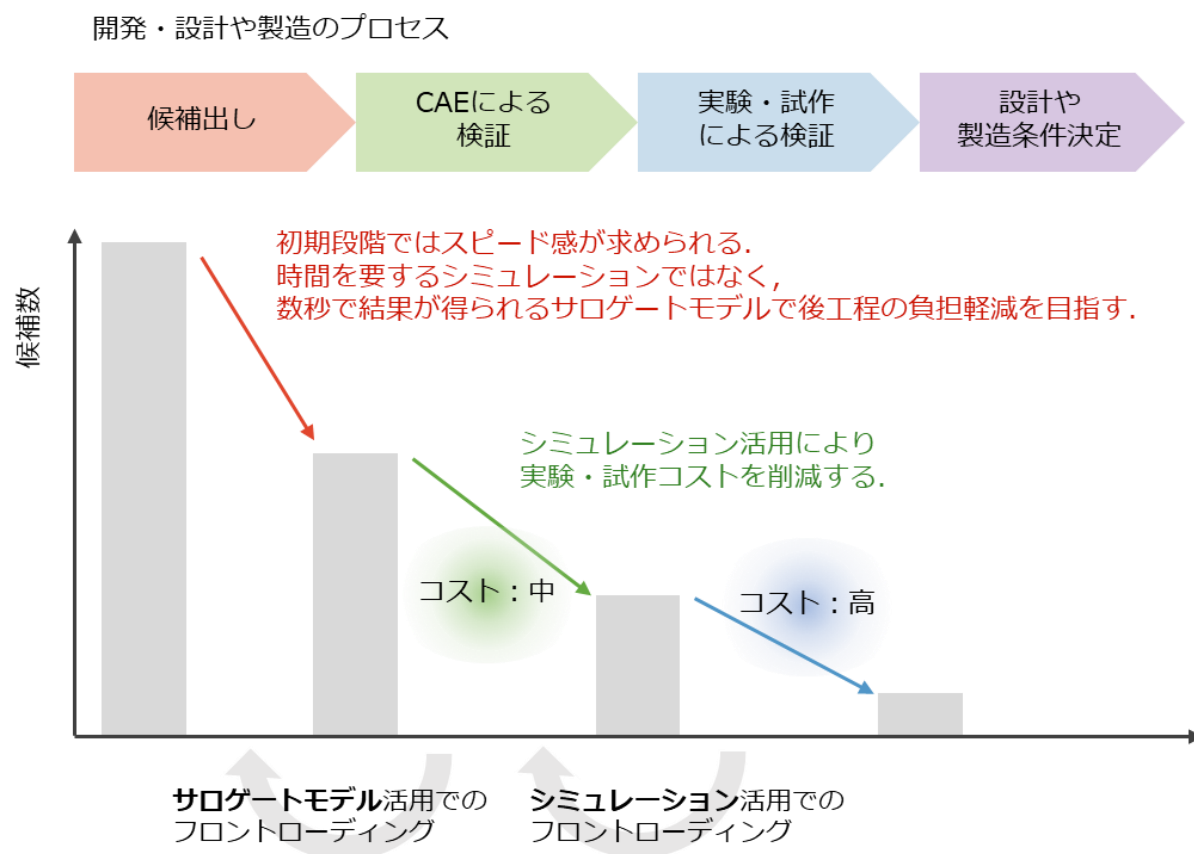


図 1 サロゲートモデルを活用したフロントローディング

必要であるが、完全にシミュレーションを代替するものではなくても、後工程の工数削減に貢献できると考えられ、開発・設計や製造条件検討の初期段階でサロゲートモデルを活用することでエンジニアリングを加速できると考えられる。

当社は、開発・設計や製造条件検討の初期段階での活用事例として、放熱設計に関するサロゲートモデルとめっきプロセスに関するサロゲートモデルを構築した。作成したサロゲートモデルによる予測結果とシミュレーションによる結果（正解）を比較し、構築したサロゲートモデルがシミュレーション結果の傾向を再現できることを確認した。以降ではこれらの検討の内容について示し、サロゲートモデルが設計の開発・設計や製造条件検討の初期段階で活用できる可能性を述べる。

2 サロゲートモデルの作成

2.1 放熱シミュレーションのサロゲートモデル

2.1.1 放熱シミュレーション

デスクトップ PC の筐体内の CPU から発生する熱

をファンにより冷却する放熱設計のために PC 内の温度分布を予測するシミュレーションについて示す。後述のサロゲートモデル構築の学習データはこのシミュレーションにより作成する。解析対象の部品の構成について図 2 に示す。発熱体として CPU があり、空冷の為のファンが二つ考慮されている。一つは外部から空気を取り込む、もう一つは内部から外部に空気を排出する役割を担う。また、空気が自由に入り出せる隙間が考慮されている。解析対象の寸法は図中に示す通りである。熱計算の境界条件として図 3 のように、筐体の壁面は熱伝達境界を設定し、ファンから流入する空気温度は 20℃とした。CPU は表面の温度を指定する設定とした。また、流体計算の境界条件として、筐体の壁面では滑り無し条件を設定した。二つのファンは回転数（rpm）を入力条件とし、公開されているデータを元に当社にて仮想的に定めた回転数と流量の関係式から流量を決めている。CPU 表面の温度、ファンの回転数はパラメータとして検討条件によって値を変化させた。流体は非圧縮性とし、乱流計算には低レイノルズ数モデルを用いた。式(1)から式(4)に基礎式を示す。(1)式は連続の式、

(2)式はナビエ-ストークスの式, (3)は乱流粘性の計算式 (0 方程式モデルを使用), (4)は熱伝導方程式である. ここで, ρ は密度, $\mathbf{u}$ は流速, p は圧力, $\mu_{eff}(=\mu + \mu_t)$ は有効粘性係数, μ は分子粘性係数, μ_t は乱流粘性係数, κ は混合長に関するモデルパラメータ, y_p は壁面からの無次元距離, y_* は境界層厚さに関するモデルパラメータ, C_p は比熱, T は温度, k_{eff} は有効熱伝導係数を表す. 有効熱伝達気数は Kays-Crawford モデルにより求めている.

$$\rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu_{eff} \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2)$$

$$\mu_t = \begin{cases} 0.5\mu \left(-1 + \sqrt{1 + \kappa(y_p - y_*)} \right) & y_p > y_* \\ 0 & y_p \leq y_* \end{cases} \quad (3)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T - k_{eff} \nabla^2 T = 0 \quad (4)$$

各種物性値, ファンの PQ 特性, 熱伝達係数などは本シミュレーション用に仮定したものを使用している. シミュレーションは COMSOL Multiphysics®¹⁾で行った. 図 4 にシミュレーション結果の一例として CPU 温度 70℃, ファン 1 の回転数を 900rpm, ファン 2 の回転数を 900rpm とした条件の温度分布を示す.

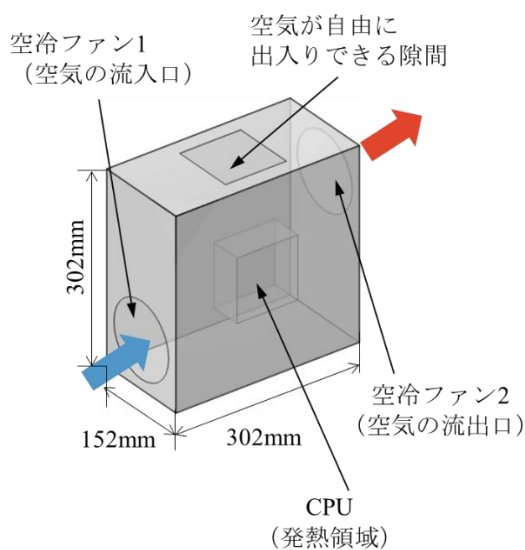


図 2 放熱シミュレーションの構成

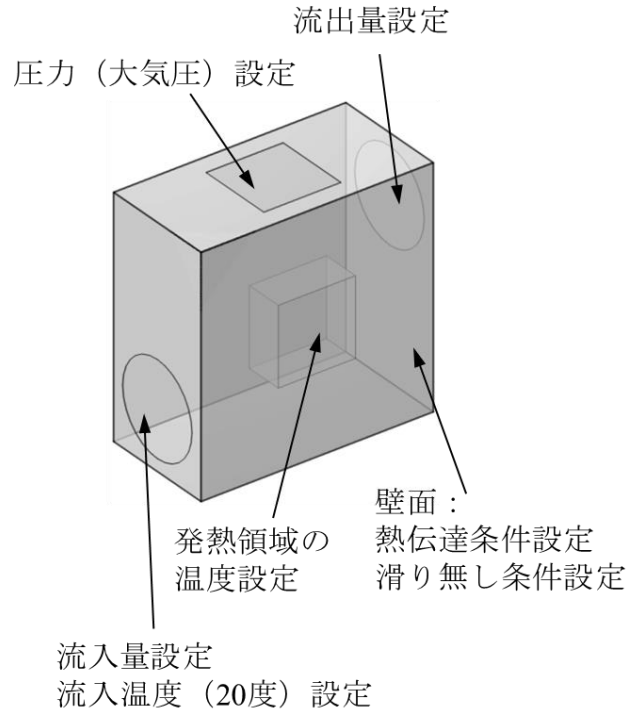


図 3 シミュレーションモデルの境界条件

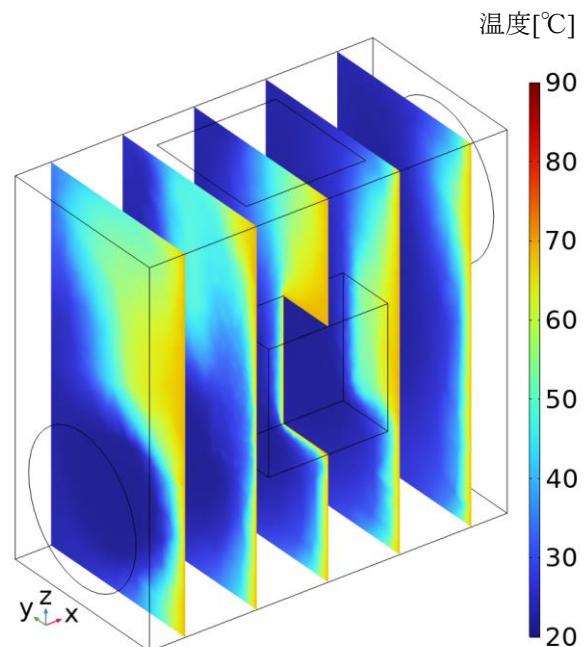


図 4 筐体内の温度（内部断面の分布を表示）

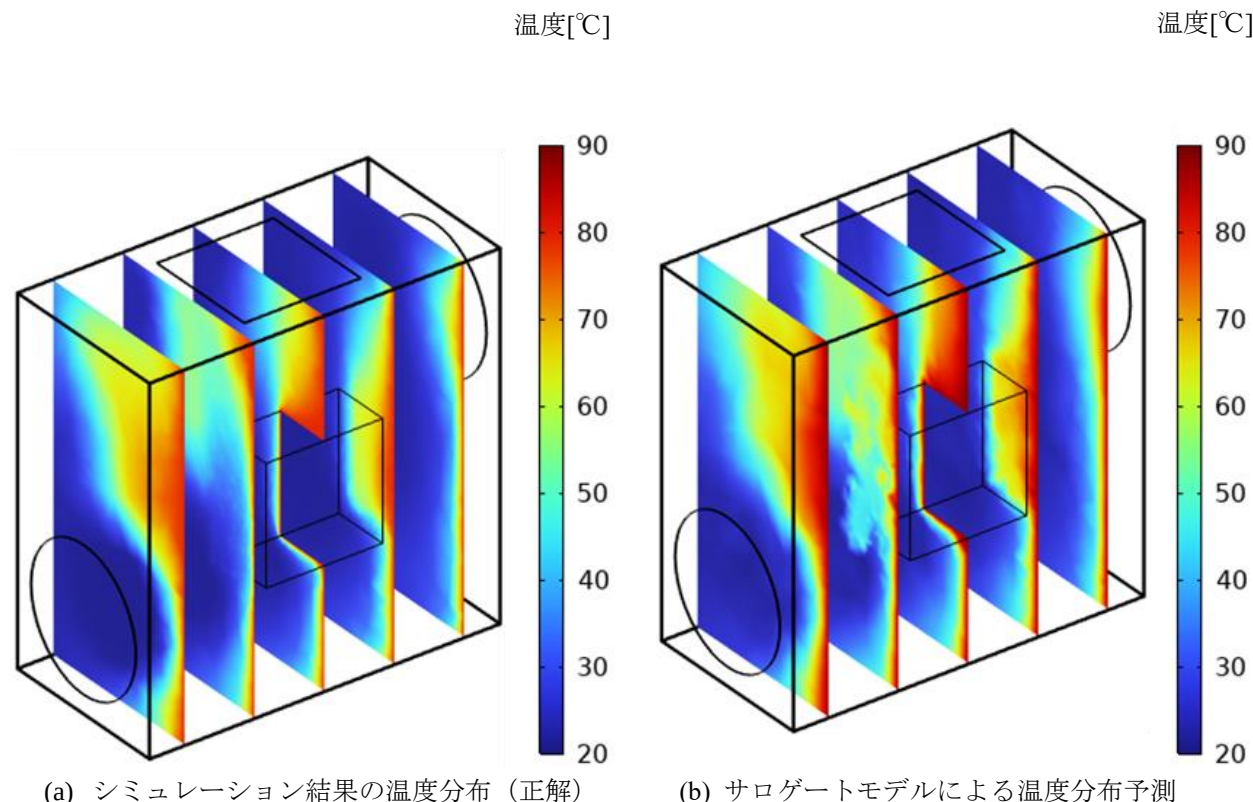


図 5 シミュレーションとサロゲートモデルの比較

サロゲートモデル構築

一定の範囲の CPU 温度に対し、ファン 1 とファン 2 の回転数を変更した時に、筐体内部（節点数 8087）の温度分布がどのようになるかを高速に予測するようなサロゲートモデル構築を考える。CPU 温度 50°C, 70°C, 90°C, ファン 1 とファン 2 の回転数を 600, 900, 1500rpm とした組み合わせ 27 通りの条件で計算を実施し、データを作成した。全データ 218349（節点数（8087）×条件数（27）の内 8 割を訓練データ、残り 2 割をテストデータとして、サロゲートモデルを構築した。入力値である CPU 温度を 80°C, ファン 1 の回転数を 1400rpm, ファン 2 の回転数 750rpm とした条件のシミュレーション結果（正解）とサロゲートモデルによる予測結果の比較を図 5 に示す。

定量的には異なるところはあるものの、定性的にはサロゲートモデルの予測がシミュレーション結果（正解）を表すことが確認される。学習データ量を増やすことで予測精度は向上できると考えられる。

2.2 めっきシミュレーションのサロゲートモデル

2.2.1 めっきシミュレーション

電解めっきにおける被めっき物のめっき厚を予測するシミュレーションについて示す。このシミュレーション結果をサロゲートモデル構築の学習データとして用いる。

電解めっきの構成を図 6 に示す。めっき槽内は電解液で満ちており、そこに複数の電極と被めっき物を配置する。電極から電解液を経由して被めっき物に電流を流すことで、電解質中に含まれる金属（金属イオン）が被めっき物表面に析出し、“めっき”が生成される。図 7 にめっき解析のシミュレーションモデルを示す。図 6 の模式図の構成に従っている。シミュレーションの境界条件としてめっき槽周囲は絶縁としている。後述の学習データの作成においては、各電極に電流を流すか否かの“On-Off”を考慮しており、乱数を使って On にする電極を決めている。各電極に流す電流は総電流量を固定し、On にした電極の数で等分している。シミュレーションは二次電流分布を仮定しており、被めっき物表面では分極特性をバトラー・ボルマー式により考慮している。シミュレーションの基礎式を式(5)から式(8)に示す。(5)式は電

流保存, (6)式はオームの法則, (7)式は過電圧を表している, (8)式はバトラー・ボルマー式である. ここで ϕ は電位, $\mathbf{i}$ は電流密度ベクトル, σ は電気伝導度, E_{eq} は平衡電位, i_{loc} は反応電流, F はファラデー定数, R は気体定数, i_0 は交換電流密度, 添え字 l, s はそれぞれ電解質と電極を表す. 物性値等は本検討用に仮定した値を用いた. シミュレーションは COMSOL Multiphysics®で行った.

$$\nabla^2 \phi_{l/s} = 0 \quad (5)$$

$$\mathbf{i} = \sigma_{l/s} \nabla \phi_{l/s} \quad (6)$$

$$\eta = \phi_s - \phi_l - E_{eq} \quad (7)$$

$$i_{loc} = i_0 \left(\exp\left(\frac{0.5F\eta}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-0.5F\eta}{RT}\right) \right) \quad (8)$$

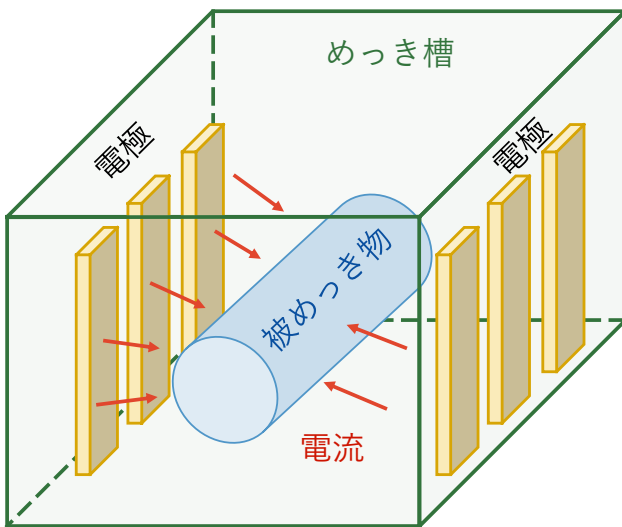


図 6 電解めっき装置の構成

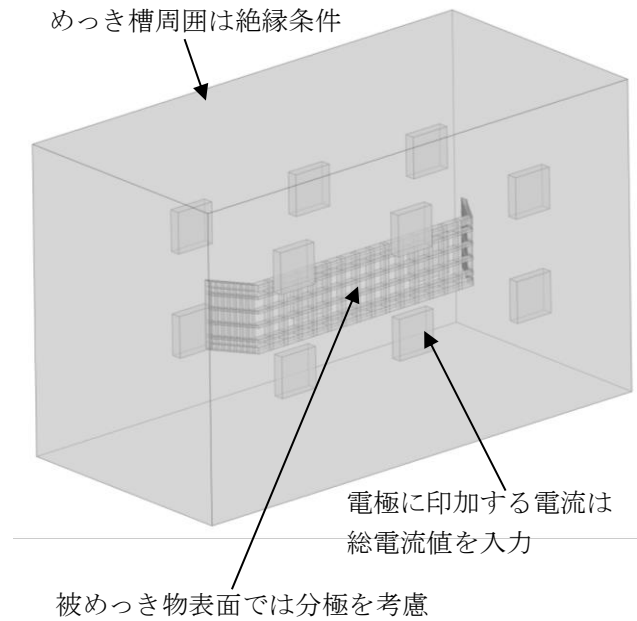


図 7 めっき解析のシミュレーションモデル

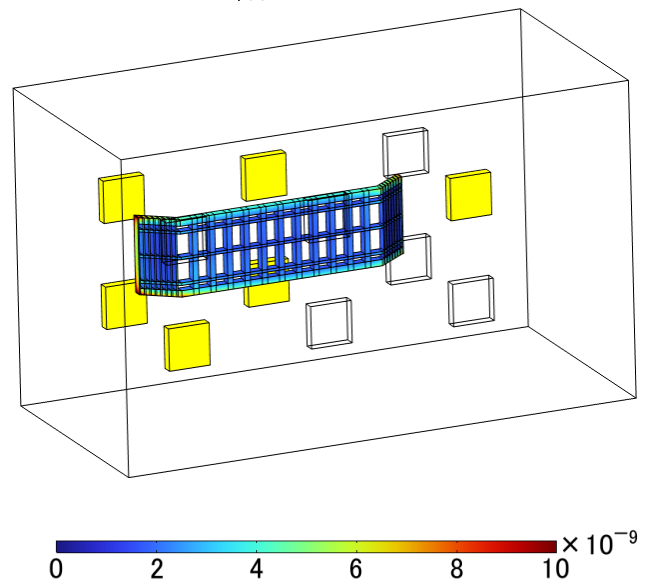
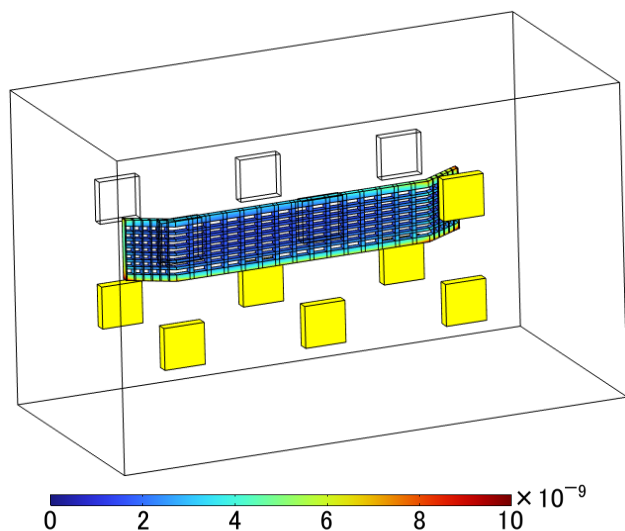


図 8 めっき厚分布 (コンターは単位時間当たりのめっきの厚みの増加量[m/s]を示している)

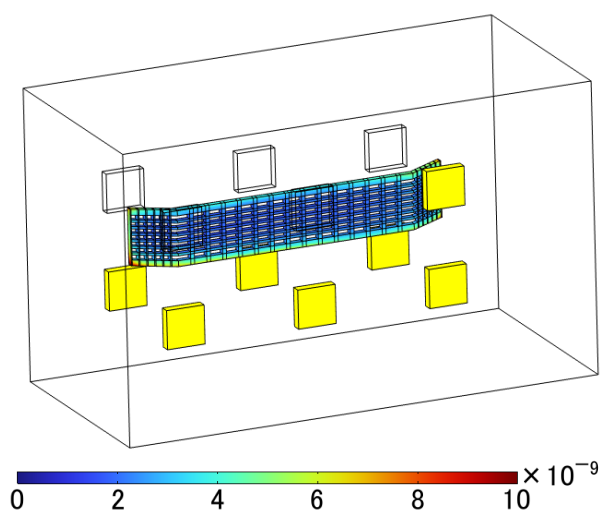
図8にめっきシミュレーションの結果の一例を示す。12個ある電極の内黄色に塗ったものをOn(電流が流れる)としており、透明のものはOff(電流が流れない、すなわち絶縁条件)である。図のコンターは単位時間当たりのめっきの厚みの増加量を示している。一般に、被めっき物の端部では電流が集中して厚くめっきされる。また、Onになっている電極が多い所では厚くめっきされる傾向が見られている。

2.2.2 サロゲートモデル構築

電極の On-Off の組み合わせと被めっき物の形状をパラメータとして、前述のめっきシミュレーションを実施し、1000 通りの条件での学習データを用意した。このうち 950 条件を訓練データ、50 条件をテストデータとし、電極の On-Off と被めっき物の形状を入力としてめっき厚を出力するサロゲートモデルをニューラルネットワークにより作成した。サロゲートモデルにより計算した予測結果を COMSOL Multiphysics®で読み込み、めっき厚を可視化している。



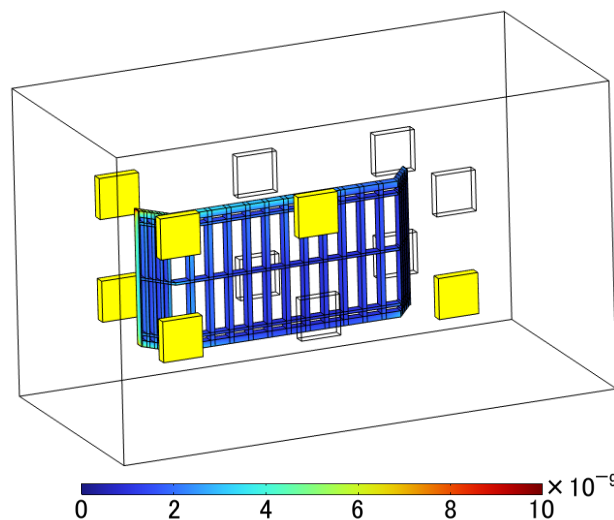
(a) シミュレーション結果（正解）



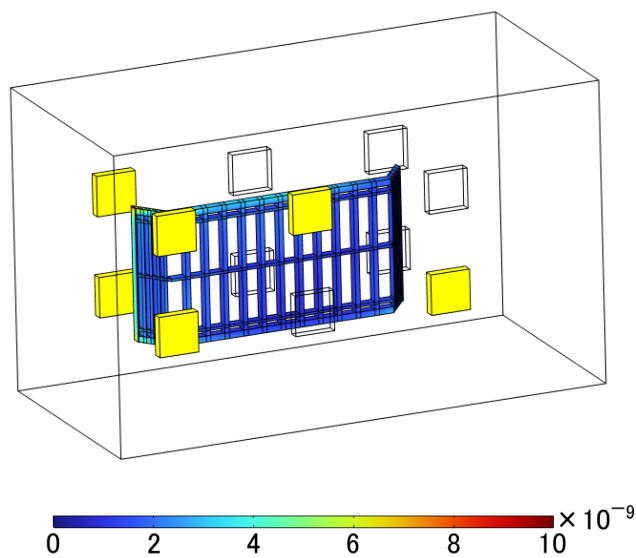
(b) サロゲートモデルによる予測結果

図 9 めっき厚分布の比較：形状 A（コンターは単位時間当たりのめっきの厚みの増加量[m/s]を示している）

図 9 から図 12 に異なる被めっき物形状 A, B, C, D に対してシミュレーションで求めためっき厚分布とサロゲートモデルで予測しためっき厚分布の比較を示す。被めっき物の形状 A, B, C, D において、被めっき物の端部でめっきが厚くなる傾向や、On になっている電極が多い所で厚くめっきされる傾向がサロゲートモデルの予測結果でも表れており、シミュレーション結果（正解）と傾向がよくあっていることが確認される。



(a) シミュレーション結果（正解）



(b) サロゲートモデルによる予測結果

図 10 めっき厚分布の比較：形状 B（コンターは単位時間当たりのめっきの厚みの増加量[m/s]を示している）

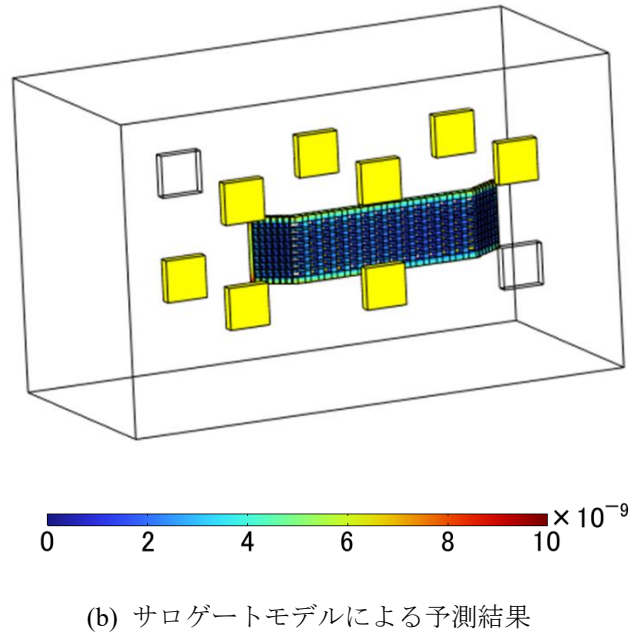
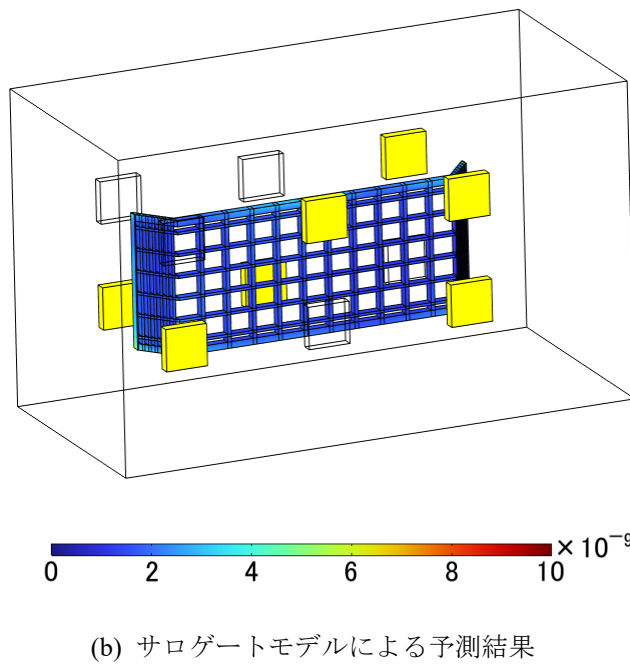
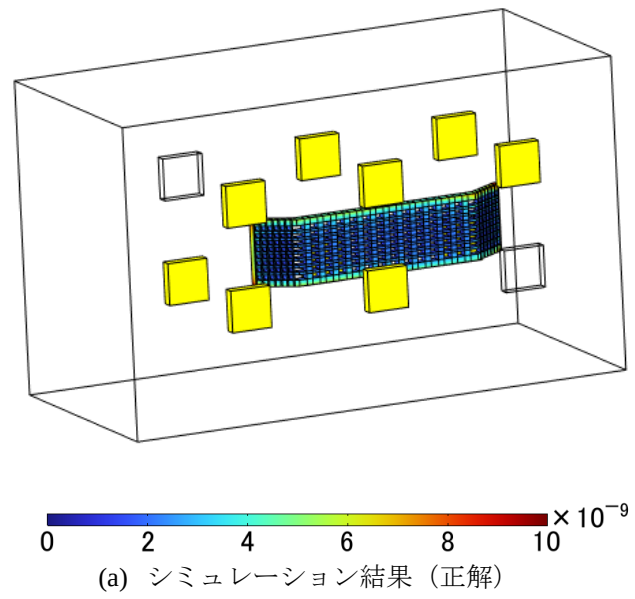
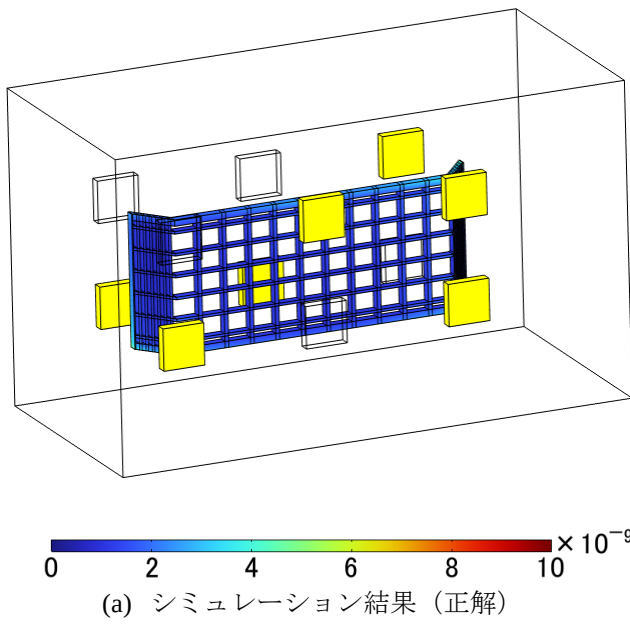


図 11 めっき厚分布の比較：形状 C（コンターは単位時間当たりのめっきの厚みの増加量[m/s]を示している）

図 12 めっき厚分布の比較：形状 D（コンターは単位時間当たりのめっきの厚みの増加量[m/s]を示している）

3 まとめ

設計の初期段階、製造条件検討の初期段階で数値計算に基づいた客観的な検討、すなわち、ものづくりDXを可能にし、後工程のシミュレーションや実験・試作の負荷を低減する、フロントローディングを実現する方法としてサロゲートモデルの活用を提案した。放熱設計に関するサロゲートモデルとめっきプロセスに関するサロゲートモデルを構築した。サロゲートモデルによる予測にかかる時間は数秒程度であった。また、シミュレーションによる結果（正解）との比較を行い、構築したサロゲートモデルによりシミュレーション結果の傾向を再現できることを確認した。これらにより、サロゲートモデルが設計の初期段階、製造条件検討の初期段階で活用できることを示した。

構築済みのサロゲートモデルを使用した予測計算はパラメータや形状を決定するのみでよく、シミュレーションで必要なメッシュ作成や数値計算を安定化させる設定の検討などが不要なため、解析専任者でなくても使用しやすいという利点がある。また、サロゲートモデルを簡便に構築する商用ツールの提供も始まっており、サロゲートモデル活用のハードル

は低くなってきている。一方で設計や製造条件検討の初期段階でのサロゲートモデルの活用はまだ発展途上と思われる。その理由の一つに、サロゲートモデルの構築コストの問題がある。例えば、設計対象の形状が変わるたびにサロゲートモデルを構築しなおすが必要になると、訓練データ作成のためのシミュレーションを行う必要があり、かえってコストが増すこともある。そのため、設計対象の形状が変わっても再学習の必要が無いサロゲートモデルを構築するか、あるいは再学習が簡単にできるサロゲートモデルを構築することが考えられる。本報では、サロゲートモデル構築コストに関する議論までは十分に行えなかった。今後はサロゲートモデル構築コストも考慮した検討を行っていき、設計や製造プロセスのフロントローディングによる効率化に貢献していきたい。

引用文献

- 1) COMSOL AB, Stockholm, Sweden, COMSOL Multiphysics®, www.comsol.com, (2023/10/24)