

COMSOL®と連携した予測解析と不確かさの 定量化ソリューションSmartUQのご紹介

2021/05/21

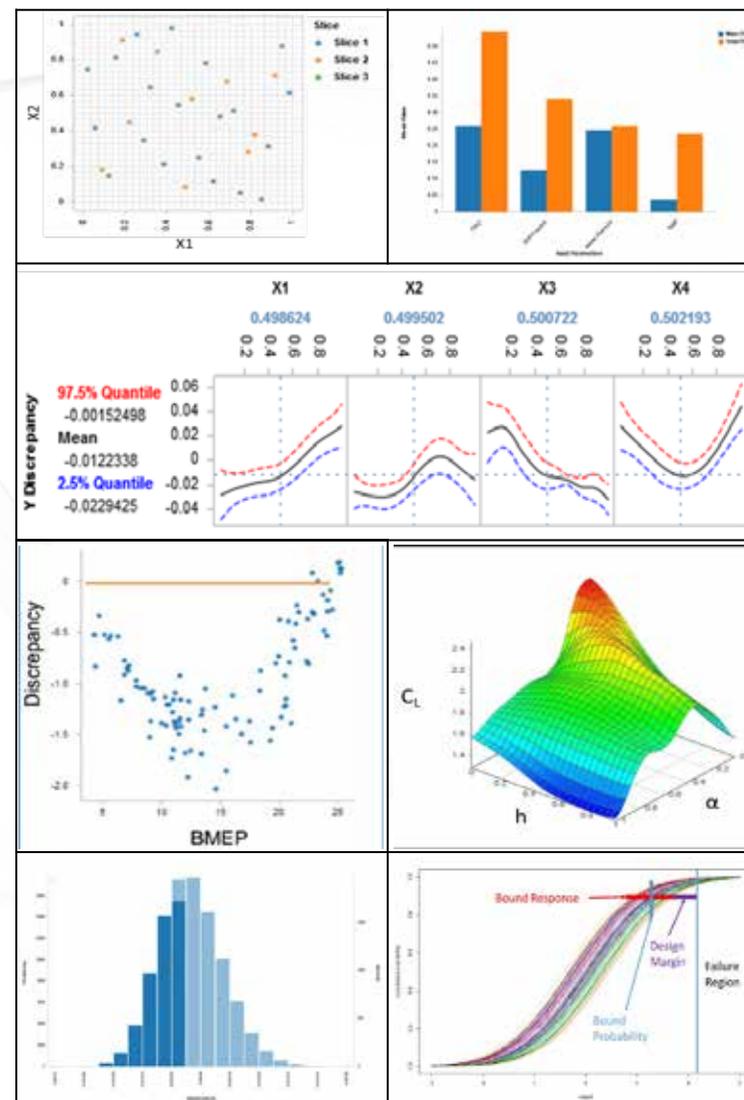
計測エンジニアリングシステム
セールスマーケティング
中野智宏

nakano@kesco.co.jp

KESSCO
KEISOKU ENGINEERING SYSTEM

SmartUQについて

- ウィスコンシン州マディソンの本社
- もともとは、エンジンジェットメーカー(P&W)における不確かさの定量化(UQ)の問題を扱うためにスタート
- UQ及び高度な解析ソフトウェアとコンサルティング
- 現在、航空宇宙・防衛、ターボ機械、重機、医療機器、半導体、3D積層造形、エネルギー、石油・ガスプラントなどの様々なクライアントにサービスを提供



アジェンダ

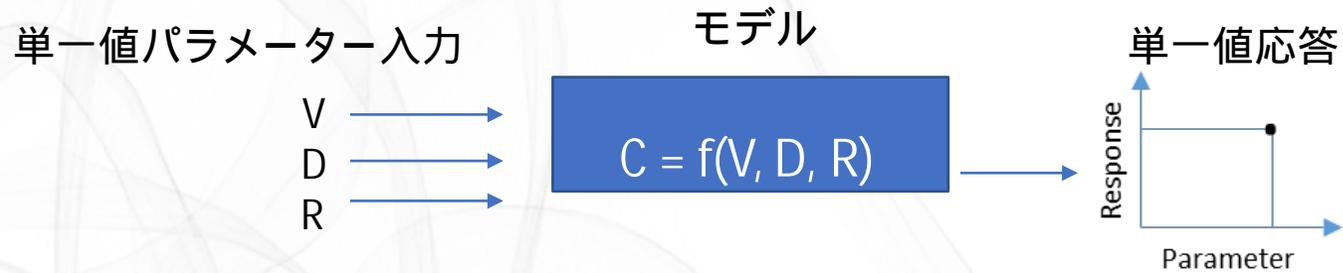
- 確率論的解析とは・予測モデル入門
- シミュレーションにおける予測モデルの利点
- ワークフローに沿ったプラットラス橋のモデル例を使ったデモ
 - 実験計画法
 - 予測モデルの作成
 - 設計空間探査
 - 不確かさの伝播
 - 統計的最適化
 - 統計的キャリブレーション
 - 逆解析
- 今後のセミナー、トレーニング、資料
- まとめ

- 不確かさの定量化
- 確率論的解析
- 予測解析
- 統計的機械学習
- 統計的最適化

複雑なデータやエンジニアリングの問題を解決する
ための**時間**、**コスト**、**リスク**を軽減

確率論的解析とは？

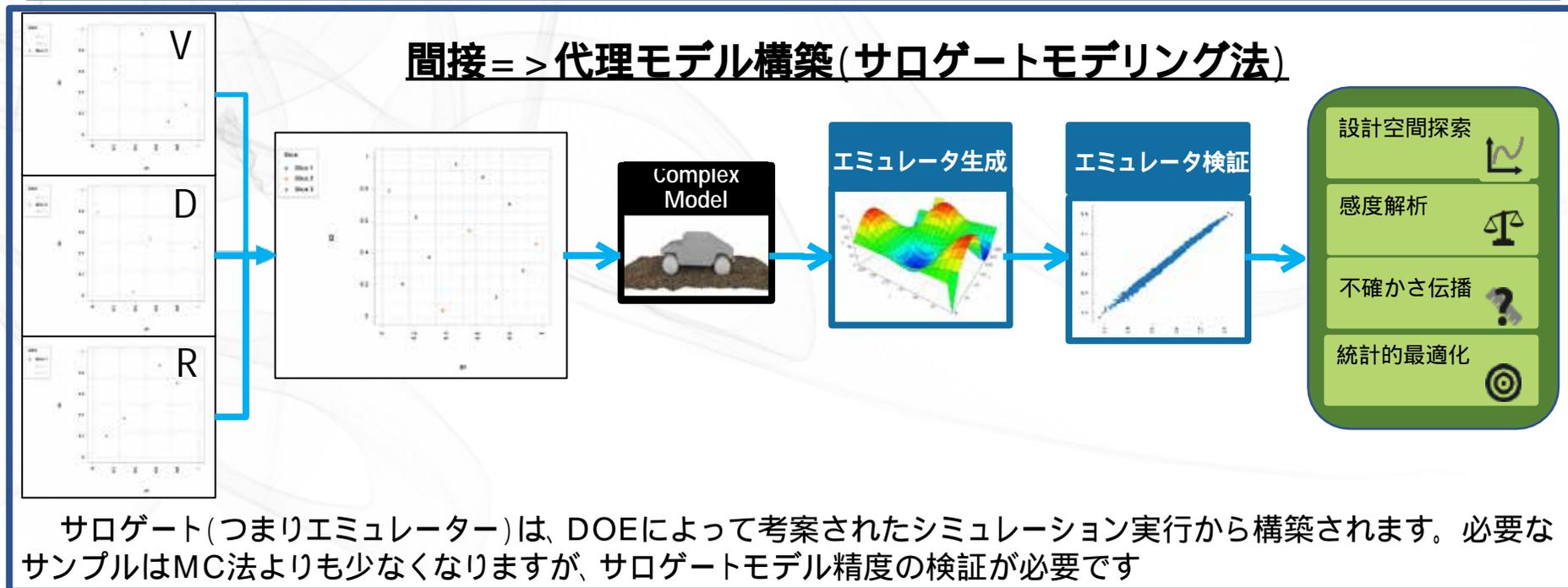
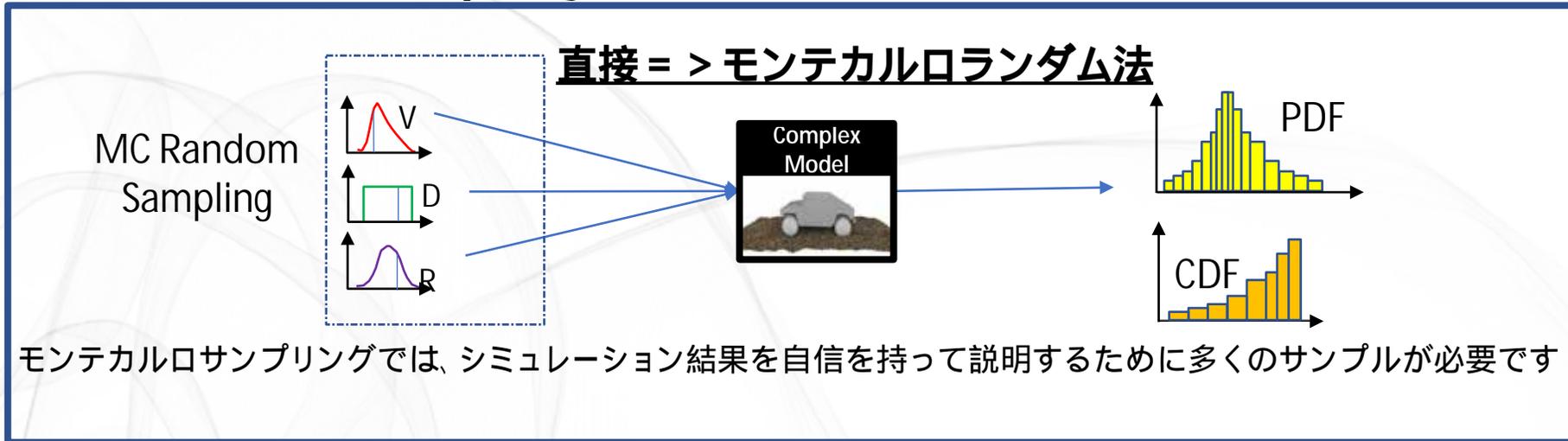
決定論的解析は、すべての面で確実性を前提としています。適切な入力を与えられたいくつかの「実験」の結果を説明する単一のソリューションを生成することを意味します。決定論的モデルの例は、タイムテーブル、料金体系、マップなど



確率論的解析は、起こり得る結果の分布を示すことを目的としています。これはすべての結果を説明し、それぞれが発生する可能性の程度を測定します。確率論的解析の例は、材料の疲労、溶接からの残留応力場、および臨床薬物試験など



基本的なUQのワークフロー



SmartUQを分解してみると 削減, 再現, 可視化

実験計画法
とデータサ
ンプリング

+

予測
モデリング

+

データの
解析

システムの実験評価に必
要なデータの削減

効率的な統計モデルを
用いてシステムの動作
を再現

システムに関する実行
可能な情報を可視化

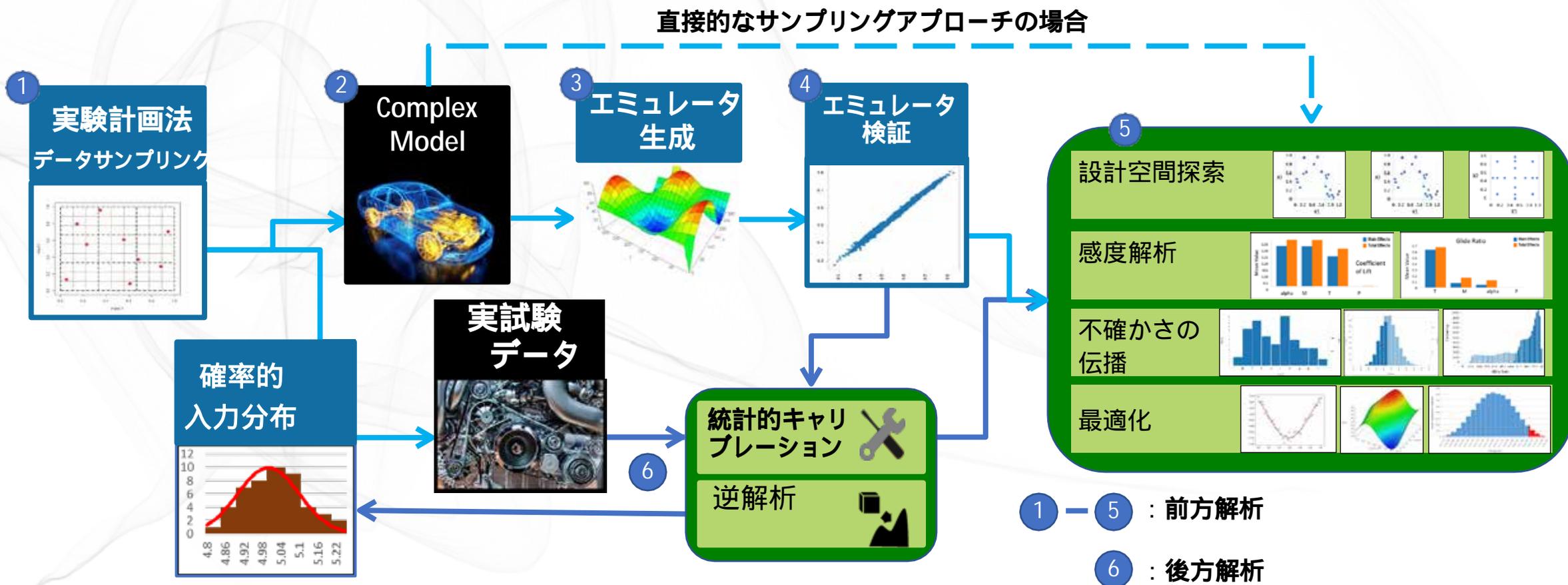
P&Wの複雑で高次元の問題を処理するために
一から構築されました

予測モデルと不確かさの定量化プロセスフロー

実験計画/データサンプリング - 必要なシミュレーションやテストの数を最小限に抑える方法

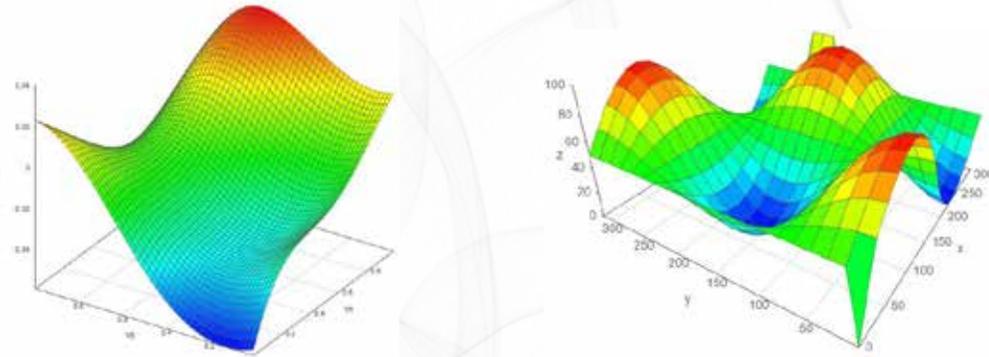
予測モデル生成 - 物理ベースのシステムの予測統計モデル(エミュレータまたはサロゲートモデル)を構築、
効率的な設計探索と再現(シミュレーション)を行う

ポスト解析 - 技術的リスクを軽減するために使用できるシステム情報を抽出するためのツール



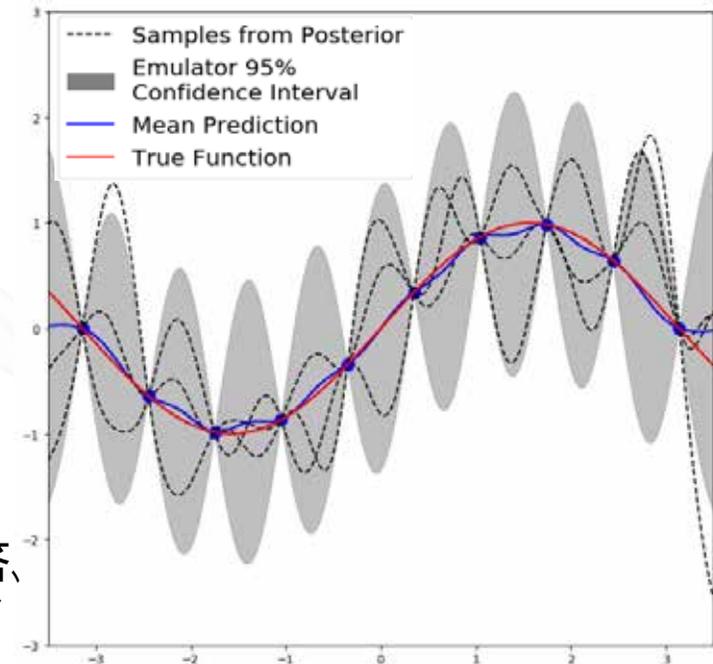
予測モデル (aka. エミュレータ)

機械学習アルゴリズムを用いて、学習データセットの入出力関係を「学習」することができる統計モデル



ガウス過程回帰 (GP) エミュレータ

- サロゲート(代理)モデル、応答曲面モデルと呼ばれることもある
- 不規則な応答挙動、すなわち現実的な非線形な応答に対応できかつ、高速な回帰モデルであるかどうか重要
- 離散/カテゴリ値を持つパラメータ、空間(3次元座標)値、過渡応答、連続パラメータなど、工学解析では一般的なさまざまな入出力タイプのパラメータに使用可能なエミュレータが必要

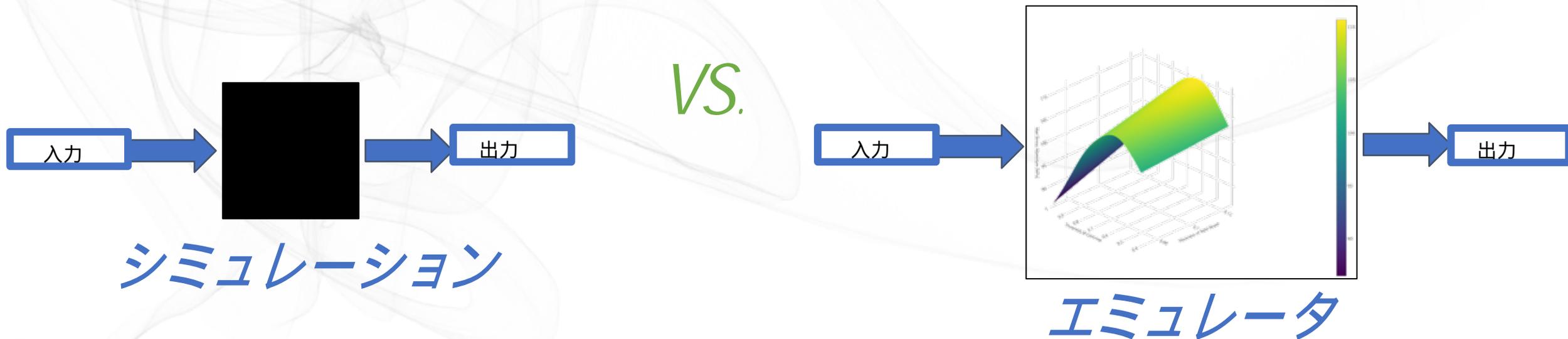


シミュレーションに使う予測モデルの間違った認識

- 予測モデルはシミュレーションを加速させるためにのみ有用である ➡ 誤り
 - シミュレーションに時間がかかるほど予測モデルを使用することで得られるメリットが大きくなる
 - シミュレーションが単独ですばやく実行される場合、予測モデルを使用しても意味がない

シミュレーションのための予測モデルの第一の利点

- シミュレーションは基本的にはブラックボックス関数 (COMSOLは別)。シミュレーションだけでは、入出力**関係**の形を提供することは困難
- 予測モデルは、ブラックボックスを開き、入出力関係の明確なプロットを表示することができる



シミュレーションのための予測モデルの第二の利点

高速で実行できるシミュレーションでも、逆解析や統計的キャリブレーションなどの解析タスクを実行するには、予測モデルを利用する必要があります

シミュレーションのための予測モデルの第3の利点

解析手法によっては、正確な結果を得るために何万回もの評価が必要な場合がある。このようなプロセスでは、評価ごとに数秒でも時間を節約することで、プロセス全体の時間を大幅に節約することができます。

例

シミュレーションは1回の実行に10秒かかるのに対して、エミュレータは1回の予測を行うのに0.00002秒で済みました。

評価算出回数	1	1,000	100,000
総シミュレーション時間(秒)	10	10,000	1,000,000
エミュレータの合計時間(秒)	0.00002	0.02	2.0
節約された時間(分)	0.167	167	16,667
節約された時間(時)	0.00	2.78	277.78

(SmartUQのような) 予測解析ツールが必要とされる理由

1. 入力パラメータが多い: サンプルングする量の問題(次元の呪い)
2. 高負荷な計算コスト: 高忠実度 = > 主要なパラメータの特定=>低次元化モデル
3. シミュレーションモデルと物理試験の不一致:



データを解析して背後にある複雑なメカニズムを解釈したり、データに基づいた意思決定や問題解決を行いたいという動機

SmartUQとCOMSOLの統合と自動化ツール

SmartUQはCOMSOLのためのGUIベースの統合を提供します

- COMSOLシミュレーションオブジェクトをSmartUQライブラリバーに追加
- SmartUQへの学習用に必要なCOMSOLモデルパラメータのインポート
- DOEをSmartUQからCOMSOLに直接送信し、自動的に結果を返す
- COMSOLモデルで直接解析を実行

SmartUQのダイナミックエミュレーション機能との統合が可能

- ユーザーが一変量(単一出力)シミュレーションを選択
- ユーザーは、エミュレータの精度目標値と、その目標値に到達するために許可されるシミュレーションの最大実行回数を定義
- SmartUQは、シミュレーションの実行、結果の収集、エミュレータのトレーニング、精度の評価を、目標とする精度の閾値またはシミュレーションの最大実行回数に達するまで、完全に自動化された反復プロセスに従います

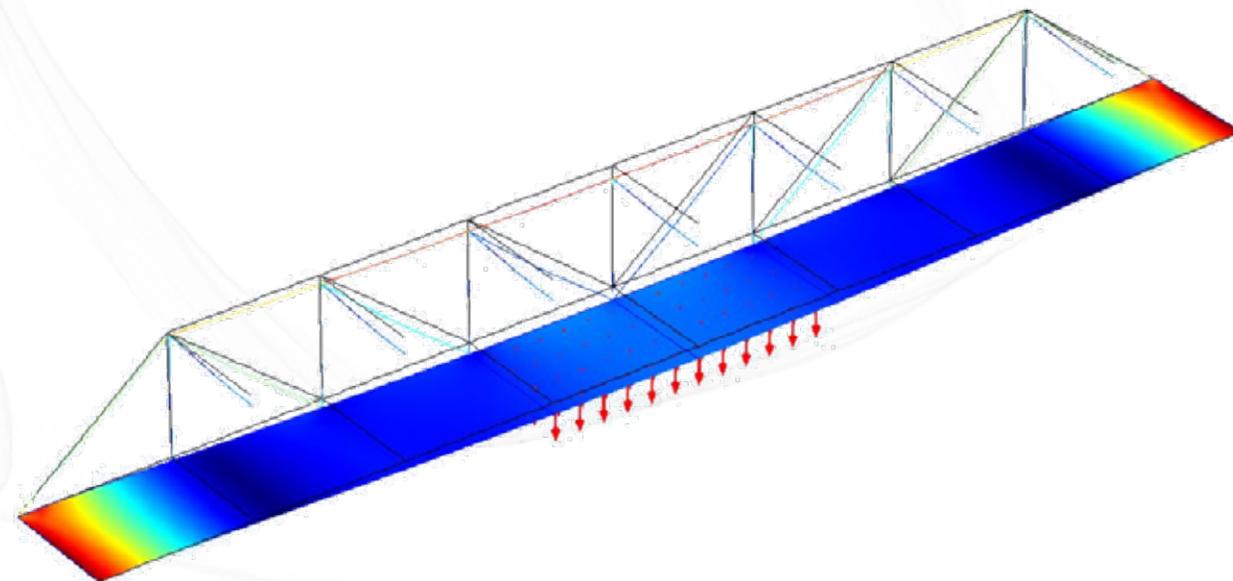
Pythonとの連携

プラットトラス橋の事例

紹介

- COMSOL Multiphysicsによるプラットラス橋の構造シミュレーション
- シミュレーションは1回の実行で10秒程度
- 高速シミュレーションのための予測モデルの3つの利点を実証するために使用

13 入力	6 出力
長さ	コンクリートの重量
高さ	梁の重量
幅	コンクリートの最大応力
コンクリート厚	鋼の最大応力
鋼梁の厚さ	アルミのマス応力
アルミニウム梁径	最大変位置
負荷の大きさ	
コンクリートの密度とヤング率(2)	
鋼の密度とヤング率 (2)	
アルミニウムの密度とヤング率 (2)	



予測モデル作成のための実験計画

- 予測モデルを訓練するためのCOMSOLシミュレーションを定義するために、100回のDOEを使用
 - 100回のシミュレーションの総実行時間は約15分
- 材料特性値は、後で統計的キャリブレーションを使用して試験データと一致するように「正しい」値に調整される

Input Parameter	Lower Bound	Upper Bound
Length [ft]	70.000	110.000
Width [ft]	8.000	12.000
Height [ft]	16.000	24.000
Diameter of Aluminum [ft]	0.070	0.125
Beam Thickness of Steel [ft]	0.070	0.125
Thickness of Concrete [ft]	0.400	1.000
Load [Lbf]	18,000.000	22,000.000
Density of Concrete [slug/ft ³]	4.00	5.00
Young's Mod. of Concrete [slug/(ft*s ²)]	4.7e8	5.7e8
Density of Aluminum [slug/ft ³]	4.750	5.760
Young's Mod. of Aluminum [slug/(ft*s ²)]	1.2e9	1.9e9
Density of Steel [slug/ft ³]	13.725	16.750
Young's Mod. of Steel [slug/(ft*s ²)]	3.7e9	4.6e9

キャリブレーション用の
材料特性値

SmartUQ Demonstration

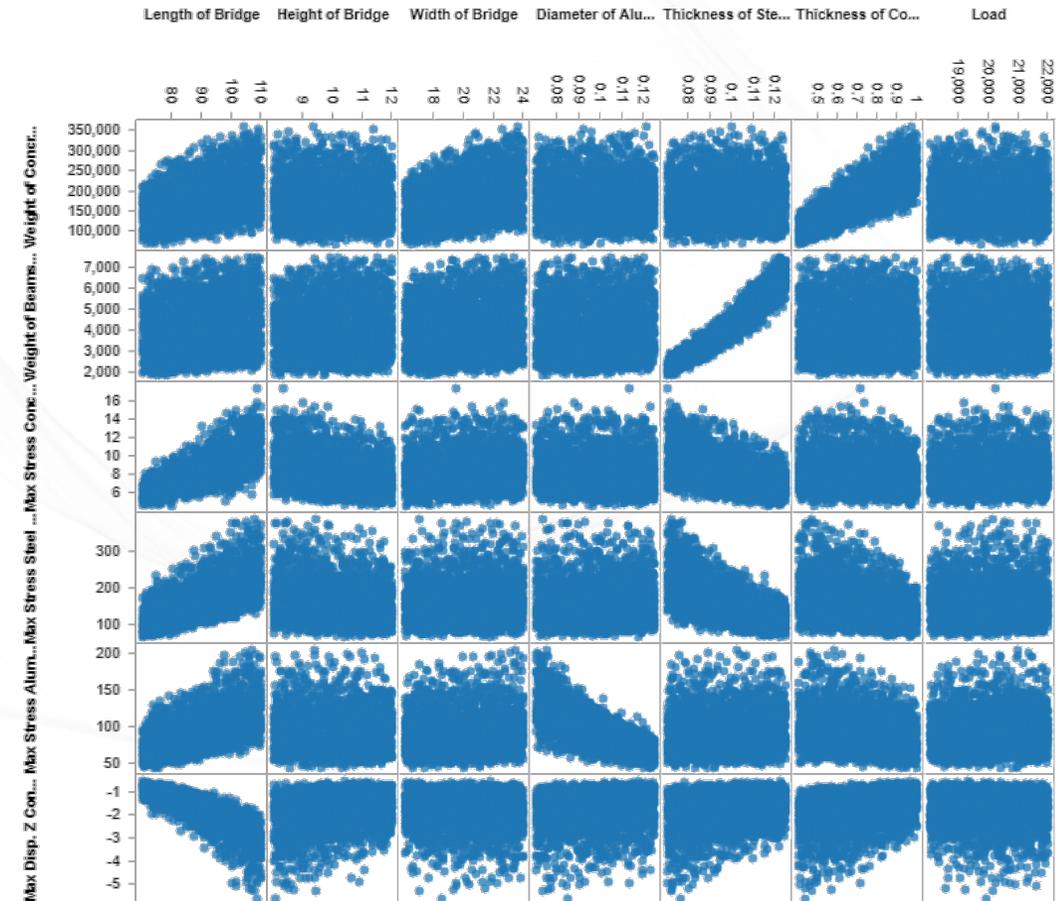
エミュレータ vs 直接的な方法：設計空間の探索

- 2,000回の実行で設計空間のマッピングが可能
- 100回の実行で学習したエミュレータは、2,000回の予測を1秒以内に行う
- 2,000回のシミュレーションを直接実行するのに10時間50分かかかる
- 直接的アプローチでは結果の可視化からある程度の傾向を見ることができるが、エミュレータアプローチでは、そのスピードからより多くのデータ収集が可能になるだけでなく、入出力関係のプロットを予測する能力によって、より多くの(そしてより明確な)情報を得ることができる

この場合も2,000回の直接シミュレーションを用いてエミュレータの検証を行い、優れた一致を示しました

出力値	Standardized RMSE*
コンクリートの重量 [lbf]	0.0023495
梁の重量 [lbf]	0.0037402
最大応力コンクリート[MPa]	0.0638016
最大応力鋼[MPa]	0.0526730
最大応力アルミニウム[MPa]	0.0646633
最大変位Zコンクリート[インチ]	0.0731695

* (RMSE)予測精度の指標として、は予測値と実測値の差をとって二乗した平均をとった平均二乗誤差(MSE)にルートをとって標準化した値が良く使用される



エミュレータ vs 直接的な方法: 決定論的な最適化

目的

- 与えられた材料特性で100フィートの長さの橋の総重量を最小化する

制約

- 最大応力コンクリート < 10 MPa
- 最大応力スチール < 175 MPa
- 最大応力アルミニウム < 150 MPa
- コンクリートの厚さ > 0.5 ft

最適化パラメータ	直接法	エミュレータ
Height of Bridge	10.89661	9.936889
Width of Bridge	16.00692	16.04811
Diameter of Aluminum	0.092157	0.117278
Thickness of Steel Beam	0.101926	0.107179
Thickness of Concrete	0.5	0.5
計算時間	0:49:56	<0:00:01

- エミュレータでは、シミュレーション上で直接最適化を行う場合と比較して、同様の結果が得られますが、より迅速に最適化を行うことができます
- 最適化の結果が最も変化するパラメータ、例えばアルミニウムの直径などは、最適化の目標に対して最も重要性が低いパラメータです（感度解析で示されています）

確率的最適化 不確かさの下での最適な意思決定

- シミュレーションの入力に不確かさが存在する場合、シミュレーションの出力は確率的なものとして扱われます。
- シミュレーションの入力は、不確かさを持つもの、確率的な入力と、(決定論的な)決定変数を持たないものに分けることができます。
- 確率的最適化の目的は、確率的入力の分布に関して出力の期待値を最適化するために必要な(決定論的)決定変数の最適値を見つけることです。

Steps

1. 最適化される目的関数を近似するために、確率的入力からランダムなサンプルを生成します
2. 近似された問題を解決するために決定論的最適化を実行します

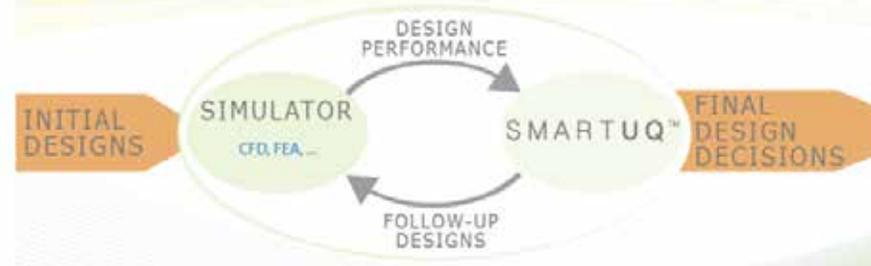


図1: 統計的最適化のフローチャート

プラットラス橋の確率的最適化

- プラットラス橋の確率的最適化橋梁の設計パラメータは、決定変数、すなわち橋の高さと幅、アルミニウムの直径、および鋼製の梁とコンクリートの厚さです
- (一方)材料特性パラメータは、確率的な入力である
 - シミュレーションの入力境界の中間値に等しい平均値を持つガウスとして扱われます
 - 目的関数を近似するために300個のランダムサンプルを使用
- 確定的最適化と同じ目標ですが、2つの制約が追加されます
 - コンクリートの重量のばらつきが175 lb2以下
 - 鉄骨梁の重量のばらつきが5.25 lb2未満

確率的入力の分布

確率的入力	平均	標準偏差
コンクリートの密度 [slug/ft ³]	4.5	.00049
コンクリートのヤング率 [スラッグ/(ft*s ²)]	5.2e8	21,491.976
アルミニウムの密度 [slug/ft ³]	5.255	.00089
アルミニウムのヤング率 [スラッグ/(ft*s ²)]	1.55e9	2,030,443.831
鋼の密度 [slug/ft ³]	15.2375	.008776
鋼のヤング率[スラッグ/(ft*s ²)]	4.15e9	2,611,427.783

モデルキャリブレーション

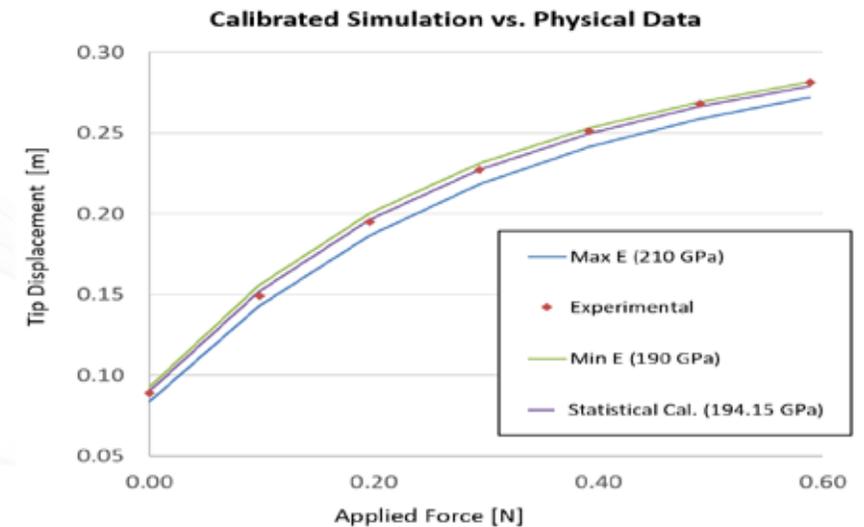
モデル・キャリブレーションとは、モデルが物理データとよりよく一致するように、モデルのキャリブレーション・パラメータを調整するプロセスです。

Purpose:

- モデルの予測能力を向上させる
- データやモデルの誤差のレベルを把握する

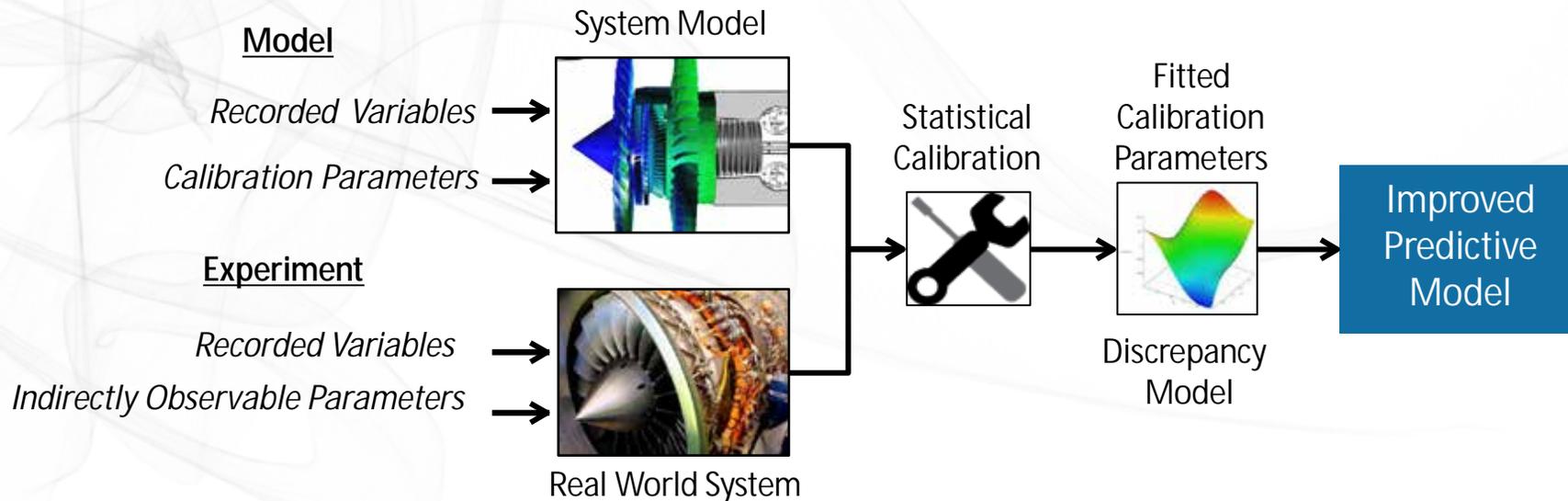
Types and Applications:

- 統計的キャリブレーション
校正パラメータの推定値を改善するための確率的な更新。
不一致メトリックは、モデル誤差を識別する
- データマッチングキャリブレーション
最適化アプローチを使用して、誤差項を最小化します。
モデル形式の不確かさを考慮しない



統計的キャリブレーション

- キャリブレーション・パラメータと呼ばれる特定のモデル・パラメータは、シミュレーションと物理的なテスト・データ間の適合性を向上させるために使用されます
- 一般的に、キャリブレーションパラメータは物理世界で直接測定することはできませんが、シミュレーションモデルへの入力として存在します
- 統計的な校正プロセスでは、予測モデルを使用する必要があります



キャリブレーション例セットアップ

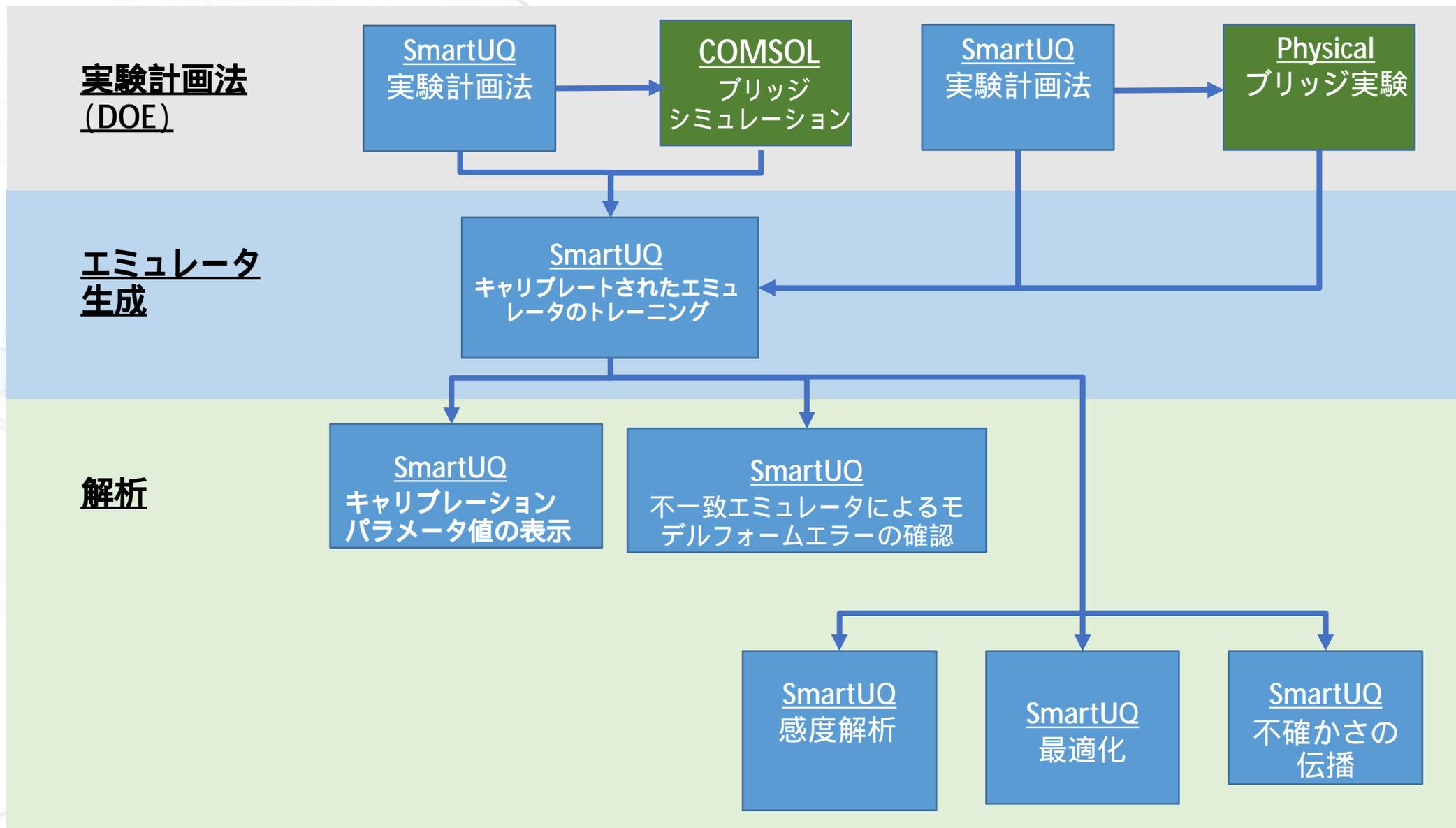
- シミュレーション材料特性パラメータを、模擬物理データに合わせてキャリブレーションを実行
- キャリブレーションするパラメータの値を固定し、物理パラメータを変化させた25点DOEを実行することで、25点の「物理データ」を作成しました。
- 統計的キャリブレーションは、次のように使用されます
 - シミュレーション結果と物理的な結果を一致させるために、最適な材料特性値を見つけます。
 - 予測精度を向上させるために校正された予測を調整するための不一致モデルを作成し、モデル形状の不確かさの領域を調査します。

物理パラメータ

材料特性パラメータ

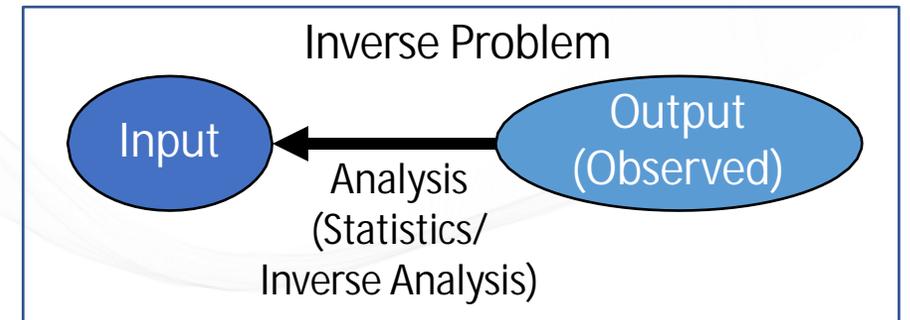
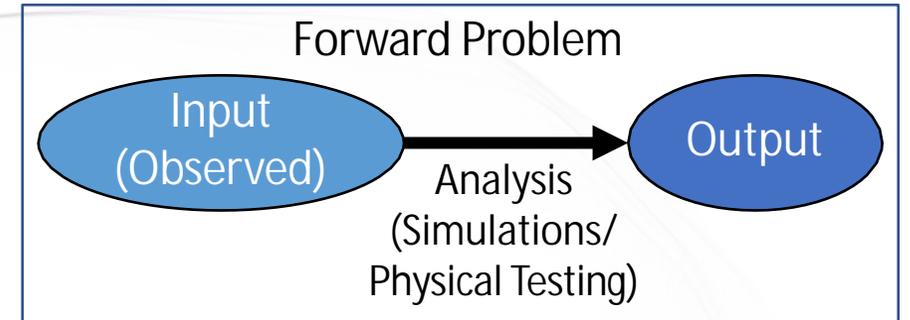
入力パラメータ	下限値	上限値
Length [ft]	70.000	110.000
Width [ft]	8.000	12.000
Height [ft]	16.000	24.000
Diameter of Aluminum [ft]	0.070	0.125
Beam Thickness of Steel [ft]	0.070	0.125
Thickness of Concrete [ft]	0.400	1.000
Load [Lbf]	18,000.000	22,000.000
Density of Concrete [slug/ft ³]	4.375	
Young's Mod. of Concrete [slug/(ft*s ²)]	5.2e8	
Density of Aluminum [slug/ft ³]	5.200	
Young's Mod of Aluminum [slug/(ft*s ²)]	1.6e9	
Density of Steel [slug/ft ³]	14.5	
Young's Mod of Steel [slug/(ft*s ²)]	4.1e9	

キャリブレーションプロセスの概要



逆解析

- 逆問題は、モデル出力に基づいてモデル入力を記述します。
- 逆問題は多くの場合、非線形で不適切な解決策であり、固有の解決策がない場合があります。
- 予測モデルの使用が必要(不可欠)
- 統計的逆解析手法は、観測された出力をもたらし最も可能性の高い入力分布を見つけます。
観測された出力データは、物理的な試験データやシミュレーション結果の場合があります。



逆解析の例

- 逆解析を使用して、テストデータに存在する材料特性の分布を決定します。
- 正規分布を仮定すると、結果は材料特性の「真の」値、すなわち模擬物理データ作成で固定された値とよく一致しています。

入力パラメータ	"True" Value (From Mock Physical Data Creation)	Distribution Mean (From Inverse Analysis)	Percent Error
Density of Concrete [slug/ft ³]	4.44	4.38	-1.57
Young's Mod. of Concrete [slug/(ft*s ²)]	5.21E+08	5.20E+08	-0.18
Density of Aluminum [slug/ft ³]	5.25	5.20	-0.91
Young's Mod of Aluminum [slug/(ft*s ²)]	1.53E+09	1.60E+09	4.57
Density of Steel [slug/ft ³]	14.98	14.50	-3.19
Young's Mod of Steel [slug/(ft*s ²)]	4.13E+09	4.10E+09	-0.65

予測モデルと解析の用途



シミュレーション作業の加速



製造のばらつきに対する不確かさの解析



実験や設計評価の計画立案



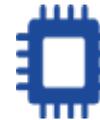
不確かさの下での意思決定を最適化



モデルの較正と検証(V & V)



実際のシステムへの様々な適用



デジタルツイン



3Dプリンタ、積層造形技術



リスク、根本原因解析

まとめ

- シミュレーションの予測モデルにより、シミュレーション結果を高速に探索し、理解を深めることができます。
 - 高速実行シミュレーションに予測モデルを使用すると、実行に必要な合計時間を大幅に短縮できます。
 - 設計空間の探索
 - 不確かさの伝播
 - 感度解析
 - 最適化
- 予測モデルは、物理データや実験データを組み込む解析にも使用できます。
 - 統計的キャリブレーション
 - 逆解析

トレーニング/資料/今後のセミナー

• トレーニング及びサポート

- まずは、フリートライアルを試してみて、お使いのシミュレーションのモデルで適用可能の可否を確認する
- またはヒアリングを行い、業務の中での適用可能範囲を決めてからトライアルトレーニング概念実証
- 学習用のポータルサイトがあるのでそちらを使って様々な機能を実習可能

• 資料

SmartUQ White Paper - 予測解析による高速で簡単な不確かさの定量化

SmartUQ White Paper - 統計的手法を用いてシミュレーションツールをより有効に活用する方法

セミナー予定

- エンジニアリングシミュレーションのための機械学習とAI
- ものづくりにおける不確かさの定量化
- 実験データへのキャリブレーション活用(ベイズキャリブレーション)
- 統計的最適化をテーマとしたSmartUQ活用事例



SMARTUQ®

ありがとうございました

製品HP: <https://kesco.co.jp/service/smartuq/>
SmartUQ社HPは<https://www.smartuq.com/>

質問、資料のご請求は、
弊社 セールスマーケティング 中野までお気軽にお問合せください。
nakano@kesco.co.jp
TEL 03-6273 7505

KEESCO
KEISOKU ENGINEERING SYSTEM

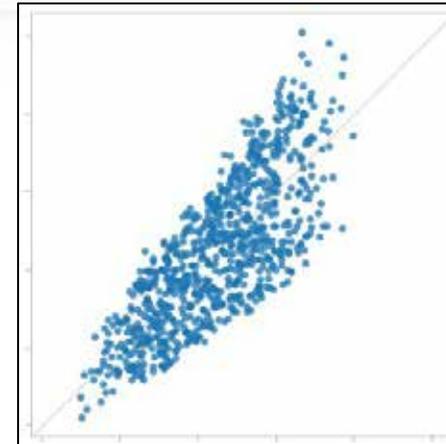


SMARTUQ®

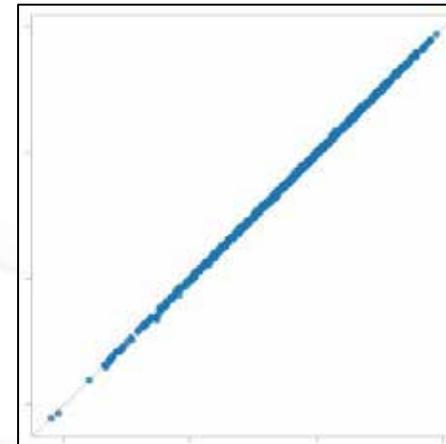
モデルの精度を検証するには？

- クロスバリデーション(CV)は、主に統計モデルの予測性能を測定する方法
 - CV **誤差**は、Leave One Out(リーブワンアウト法) 予測値と観測された訓練データとの間の二乗平均平方根誤差のこと
- リーブワンアウト(Leave-One-Out)法とは、学習用データの全体のうちで一つのポイントを使ってテストデータとして使用、それを全事例にわたり繰り返す方法のこと
- ポイントが対角線に近いほど、エミュレータの精度が高くなる

Poor
Emulator
Accuracy



Good
Emulator
Accuracy



エラーメトリック値の意味

- 標準化されたクロスバリデーションは、CVの誤差をデータセットの標準偏差で割ったもの
- 標準化されたCV値は、 $1 - CV^2$ の次の式で大まかにR2値に変換できる
- 例えば、標準化されたCVが0.30であれば、R2は0.91になる
- 精度は、どのような分析を行う必要があるかにもよるが、以下の表はいくつかの指針を与えてくれる

Standardized CV Value	Accuracy of the Model
0.05 or below	とても正確なモデル
0.05 to 0.10	正確なモデル
0.10 to 0.20	プロジェクトの要件に基づいた予測を正確に行うことができる
0.20 to 0.30	感度解析と入力の相互作用の理解用としての的確
Above 0.30	正確なエミュレータではなく、制限された使い勝手

補足資料 エミュレータ VS 直接的な方法: 不確かさの伝播

- 入力不確かさ分布から採取した1,300個のサンプルを伝播させ、コンクリートの重量に対する出力不確かさ分布を決定

—同様の結果が得られますが、エミュレータのプロセスには1秒未満かかりますが、直接アプローチには5時間17分かかります。

—理想的には、より大きなサンプルを使用して、結果の精度を高めることができます。ただし、実行時間が長いため、直接的なアプローチではこれは困難ですが、エミュレーターによるアプローチでは簡単です

アウトプット	直接法 平均値	エミュレー タ平均値	誤差 平均値
コンクリートの重量 [lbf]	115824.868	115588.0454	-0.204%
梁の重量 [lbf]	4903.745	4910.780	0.143%
最大応力コンクリート[MPa]	7.430	7.361	-0.935%
最大応力鋼[MPa]	174.048	175.527	0.850%
最大応力アルミニウム[MPa]	75.244	75.718	0.630%
最大変位Zコンクリート[インチ]	-1.952	-1.942	-0.531%

補足資料 エミュレータ vs 直接的な方法: 確率論的最適化

- 最適化は、エミュレータを用いて複数回、シミュレーションを用いて直接1回実行しました
- エミュレータ版の確率的最適化は、ステップ1の確率的入力異なるサンプルを用いて500回実行されました**
 - ステップ1の500個のランダムサンプルのそれぞれは、確率的入力の分布から300ポイントを引き出しました。
 - ステップ2の確定的最適化では、収束するまでに平均70回の反復が必要でした。
 - 合計で10,500,000回の評価、つまり、500個のランダムサンプルの倍数、各ランダムサンプルで300ポイント、および決定論的最適化アルゴリズムの平均で70回の反復が必要です。

- 必要な評価時間のため、確率的最適化はシミュレーションを直接使用して一度だけ実行されました

ステップ1は、確率的入力の分布から300ポイントのランダムサンプルを引き出しました。

ステップ2の確定的最適化では、収束するまでに30回の反復が必要でした。

合計9,000回の評価(30回の反復×300ポイントのランダムサンプル)

確率論的最適化の結果

パラメータ	直接法	エミュレータ
Height of Bridge [ft]	11.883	11.883
Width of Bridge [ft]	16.000	16.000
Diameter of Aluminum [ft]	0.984	0.983
Thickness of Steel Beam [ft]	0.982	0.979
Thickness of Concrete [ft]	0.500	0.500
計算時間	25 hours	1.02 seconds

補足資料 キャリブレーション結果

- 全体的なキャリブレーション結果は、模擬物理データの「真」の値とよく一致しました。
- 最もよく一致したのはコンクリートと鋼の密度です。これは、感度解析の結果、コンクリートと鋼の密度がシミュレーション出力にとって最も重要な材料特性パラメータであることが示されたため、予想通りの結果となりました。

パラメータ	“真” 値	較正された値	% エラー
Density of Concrete	4.375	4.374257	0.016981
Young's Mod. of Concrete	5.20E+08	4.82E+08	7.381226
Density of Aluminum	5.2	5.03724	3.130005
Young's Mod. of Aluminum	1.60E+09	1.49E+09	6.68033
Density of Steel	14.5	14.5075	-0.05175
Young's Mod. of Steel	4.10E+09	4.6E+09	-12.0854

補足資料 不一致エミュレータの重要性

- キャリブレーション済みエミュレータは、パラメータの不確かさのみを考慮する。つまり、キャリブレーションパラメータの値を「適切に」選択することで、シミュレーションと物理データの間で可能な限りの最良の一致を達成しました。
- 不一致エミュレータは、モデル形状誤差や実験ノイズなどの他の不確かさを考慮して、キャリブレーション済みエミュレータの予測を調整するために使用することが可能です。

出力値	Std RMSE for Calibrated Emulator Prediction	Std RMSE for Prediction Adjusted by Discrepancy Emulator	Percent Improvement
Weight of Concrete	0.001841	0.002261	-18.58%
Weight of Beams	0.005247	0.003744	40.13%
Max Stress in Concrete	0.492208	0.100429	390.11%
Max Stress in Steel	0.295452	0.116881	152.78%
Max Stress in Aluminum	0.166567	0.205312	-18.87%
Max Displacement	0.078378	0.07425	5.56%