



大阪科学・大学記者クラブ 御中

(同時提供先：文部科学記者会、科学記者会)

2023年10月3日

大阪公立大学

AIで粉体の“混ざり具合”を高速シミュレーション 従来法の350倍の計算速度を実現！

<ポイント>

- ◇粉体が原料の製品（医薬品や電池等）は、粉体の“混ざり具合”が品質の決め手になる。
- ◇AIを活用して粉体の混ざり具合を高速シミュレーションする手法を開発。
- ◇従来法では実現できなかった、長時間にわたる粉体混合のシミュレーションが可能に。
- ◇粉体を用いる製造業のデジタルトランスフォーメーション（DX）に貢献。

<概要>

医薬品から電池まで、粉体はあらゆる製品の原材料として使用されており、原材料である粉体がいかに均一に混ざっているか、が製品の品質を大きく左右します。この“混ざり具合”を予測する従来のシミュレーション手法は、粉体を構成する固体粒子の運動挙動を一つ一つ計算するため、計算に膨大な時間がかかることが課題です。

大阪公立大学大学院 工学研究科の岸田 尚樹 大学院生（博士後期課程2年、JSPS 特別研究員 DC1）、仲村 英也准教授、大崎 修司准教授、綿野 哲教授らの研究グループは、AIを用いた新たなシミュレーション手法を開発し（図1）、従来法と変わらない精度で、計算速度を約350倍向上させることに成功しました。本手法を応用することで、今まで予測ができなかった、大規模（製造規模に相当）かつ長時間にわたる粉体混合シミュレーションの実現が期待されます。

本研究成果は、国際学術誌「Chemical Engineering Journal」のオンライン速報版に、2023年9月27日に掲載されました。

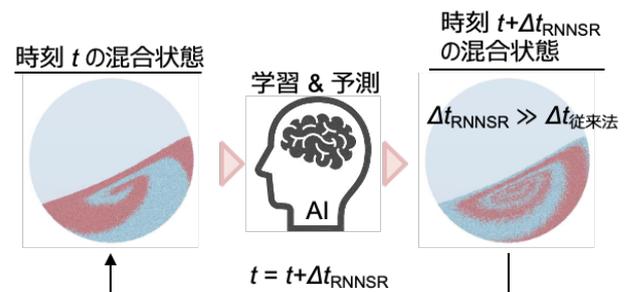


図1 開発した予測モデル(RNNsR)の概念図

私たちが長年研究してきた粉体工学に関する知見と、機械学習を組み合わせ、複雑な粉体特有の振る舞いを予測することに成功しました。本成果を発展させて、“粉体をどう扱うとどういう製品が出来上がるのか？”を仮想空間で予測しながら製品の開発や製造を迅速かつ効率良く行う、未来のものづくりの実現に貢献します。



上段 左より岸田大学院生、仲村准教授
下段 左より大崎准教授、綿野教授

<研究の背景>

2種類以上の粉（粉体）をかき混ぜて均質化する粉体混合は、医薬品から食品、電池、電子部品、セラミックスまで、あらゆる製造業で用いられており、ものづくりを支える重要な技術です。しかし、どのような条件で混ぜれば目的とする均質性が得られるかを予見することは難しく、今でも試行錯誤や技術者の経験に頼ることが多いのが現状です。

この課題を解決するため、粉体の混合を精度良く予測することができるシミュレーション手法として、離散要素法（Discrete element method: DEM）が開発されてきました。DEMは粉体を構成するすべての粒子について、極めて短い時間幅（100万分の1秒）の運動挙動を一つ一つ計算した後、その値を用いて粉体全体の動きを計算し直し、再び短時間先の粒子ごとの運動挙動を計算するという手順を何度も繰り返すことで、粉体混合を予測する手法です。しかし、計算に時間がかかるという別の課題があり、実際の製造業で求められる長時間の粉体混合を予測することはできません。

<研究の内容>

本研究では、長い時間幅でも精度よく粒子運動を計算できる新しい手法を開発し、これを“Recurrent Neural Network with Stochastically calculated Random motion: RNNSR”と名付けました（図1）。RNNSRは、DEMで計算したごく短時間の粒子運動パターンを学習させて構築するAIモデルで、従来法の数万倍長い時間幅での粒子運動挙動を予測することができます。粉体特有の運動挙動を精度よく学習・予測するために、巨視的な粉体の動きを回帰型ニューラルネットワーク（RNN）^{※1}で予測し、微視的な粒子のランダム運動を確率分布モデル^{※2}で予測することが特徴です。RNNSRを用いることで、DEMと変わらない精度で粉体混合を予測することに成功しました（図2）。さらに、DEMと比較して約350倍の計算速度を実証することができました。

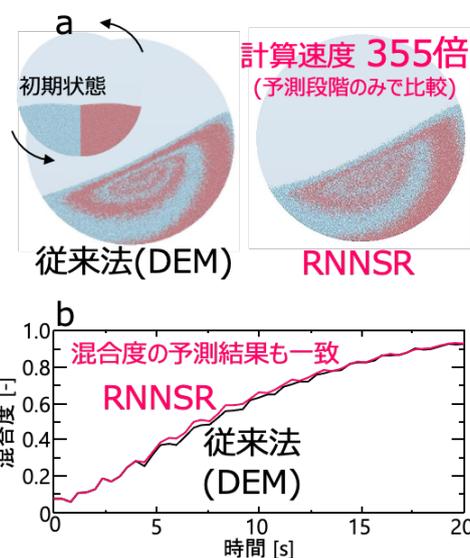


図2 従来法とRNNSRで予測した粉体混合状態(a)と混合度(混合均質性の指標)の時間変化(b)。RNNSRの予測結果は従来法とほぼ同じであり、計算速度は約350倍となることを実証。

<期待される効果・今後の展開>

近年の製造業では、デジタルトランスフォーメーション（DX）を駆使したものづくりへの転換が急速に進展しています。DXによって期待される未来の製造業は、“どう作るとどういう製品が出来上がるのか？”を仮想空間で予測しつつ、現実空間のものづくりを迅速に効率良く行うものです。本成果は、粉体を扱うものづくりでのDX推進に大きく貢献すると考えられます。

今後は、粉体のより複雑な混合挙動も予測できるようになること、さらに、実在粉体の特徴である不均質性（粉体を構成する粒子一つ一つの物性のバラツキ）を扱うことができる手法にまで展開したいと考えています。

<資金情報>

本研究は、科研費基盤研究（B）（22H01852）、日本学術振興会特別研究員奨励費 DC1（22KJ2627）などの支援を受けて行われました。

<用語解説>

※1 回帰型ニューラルネットワーク…機械学習の手法の一つであり、時間変化するデータの未来の結果を予測することに用いられている。

※2 確率分布モデル…統計的関数から求めた確率に従って、現象を表現するモデル。

<掲載誌情報>

【発表雑誌】 Chemical Engineering Journal

【論文名】 Development of ultra-fast computing method for powder mixing process

【著者】 Naoki Kishida, Hideya Nakamura, Shuji Ohsaki, and Satoru Watano

【掲載 URL】 <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.146166>

【研究内容に関する問い合わせ先】

大阪公立大学大学院 工学研究科
准教授 仲村 英也 (なかむら ひでや)

TEL : 072-254-9451

E-mail : hideyanakamura@omu.ac.jp

【報道に関する問い合わせ先】

大阪公立大学 広報課

担当 : 竹内

TEL : 06-6605-3411

E-mail : koho-list@ml.omu.ac.jp