

DeepSDFに基づく3D生成AI：21,998ケースのオイラー型弾塑性解析データセットによる訓練と性能評価

3D Generative AI Based on DeepSDF: Training and Performance Evaluation Using a Dataset of 21,998 Eulerian Elastoplastic Analyses

西口浩司¹⁾²⁾戸井田一聖³⁾千葉直也⁴⁾干場大也⁵⁾加藤準治⁶⁾
Ryohei Katsumata, Koji Nishiguchi, Hiroya Hoshiba, and Junji Kato

¹⁾博(工)名古屋大学 大学院工学研究科 准教授

(〒 464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町, E-mail: kojinishiguchi.r9@f.mail.nagoya-u.ac.jp)

²⁾博(工)理化学研究所 計算科学研究センター AI for Science プラットフォーム部門 上級研究員
(〒 103-0027 東京都中央区日本橋 1-4-1 日本橋一丁目三井ビルディング 15 階)

³⁾修(工)名古屋大学 大学院工学研究科

(〒 464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町, E-mail: kojinishiguchi.r9@f.mail.nagoya-u.ac.jp)

⁴⁾博(情報科学) 大阪大学 D3 センター 准教授

(〒 560-0043 大阪府豊中市待兼山町 1-32, E-mail: chiba@nchiba.net)

⁵⁾博(工)名古屋大学 大学院工学研究科 助教

(〒 464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町, E-mail: hoshiba.hiroya.y6@f.mail.nagoya-u.ac.jp)

⁶⁾Dr.-Ing. 名古屋大学 大学院工学研究科 教授

(〒 464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町, E-mail: kato.junji.i5@f.mail.nagoya-u.ac.jp)

3D shape generation using AI has advanced rapidly, especially in text-to-3D tasks. However, existing methods often rely on pre-trained models like CLIP and struggle to incorporate mechanical information due to the lack of suitable datasets. To address this, we propose a DeepSDF-based 3D generative model conditioned on mechanical parameters. Using a dataset of 21,998 automotive crash box models generated via linear topology optimization and Eulerian elastoplastic analysis, our model learns to generate 3D shapes that satisfy given parameters such as height, depth, width, and impact energy absorption.

Key Words : 3D Shape Generation, Deep Implicit Representation, Eulerian Analysis

1. 緒言

(1) 研究背景

ChatGPT や Stable Diffusion に代表される生成 AI 技術は目覚ましい発展を遂げ、テキストから画像や 3D 形状を生成するタスク (Text-to-3D) が注目されている。Point-E, Shape-E, Magic3D, DreamFusion といった 3D 形状生成 AI は、拡散モデル等を活用し多様な形状生成を実現している。

しかし、これらのモデルの多くは、ImageNet や ShapeNet [4] といった既存の大規模データセットや、言語と画像の関連性を学習した CLIP [1] のような事前学習モデルに依存している。これらのデータセットは主に CG や CV 分野向けであり、材料特性や力学的挙動といった工学設計に必要な情報は不足している。また、力学的情報のような、大規模データセットが存在しない分野では、CLIP のような事前学習モデルの適用が困難である。

この課題に対し、力学的パラメータを入力として指定し、その条件を満たす 3D 形状を生成する「Parameter-to-3D モデル」の開発が重要となる。このモデルは、単なる形状生成に留まらず、力学的適合性を備えた設計ソリューションを提供し、製造・エンジニアリング分野

の設計プロセス革新に貢献することが期待される。

Parameter-to-3D モデル開発において、3D 形状表現手法も重要である。ボクセル、点群、メッシュといった従来の表現には、解像度とメモリ、表面表現、滑らかさなどの点で課題がある。近年、空間座標に対応する値をニューラルネットワークでモデル化する Neural Field (DeepSDF [5], NeRF [6], Occupancy Network など) が注目されている。Neural Field は、連続的で滑らかな高精度表現、任意解像度への適応性といった利点を持つ。

(2) 本研究の目的

以上の背景に基づき、本研究は以下の 2 点を目的とする。

- **力学的パラメータを含む 3D 形状データセットの構築：**自動車のクラッシュボックスを対象とし、線形トポロジー最適化 [2] を用いて多様な形状を生成し、オイラー型弾塑性解析 [3] によって各形状の力学的パラメータ（高さ・奥行・幅・衝撃吸収エネルギー）を算出し、大規模データセットを構築する。

- **Parameter-to-3D モデルの提案と検証：**構築したデータセットを用いて、Neural Field の一種である

DeepSDF [5] を基盤とし、力学的パラメータを入力条件として考慮可能な深層生成モデルを構築する。提案モデルの有効性を、再構築タスクと生成タスクによって評価し、汎化性能を検証する。

2. 提案手法

(1) データセット合成

本研究では、力学的に意味のある多様な3D形状データセットを構築するため、以下の手順を用いた。

1. 対象：自動車の衝突安全部品であるクラッシュボックスを対象とした。クラッシュボックスは構造により衝撃吸収特性が大きく異なるため、多様な形状と性能の関係性を学習データとして与えることにより意義がある。
2. 形状生成（線形トポロジー最適化）：和田ら (2023) [2] の Building-Cube 法を用いた線形弾性体のトポロジー最適化手法を適用。剛性最大化（コンプライアンス最小化）を目的関数とし、設計領域（中空直方体）への荷重方向を多数変化させることで、多様な形状を生成した。体積率は 5% に固定し、設計領域の寸法（高さ・奥行・幅）も複数パターン設定した。これにより、21,998 個のクラッシュボックス形状を合成した（富岳を使用）。
3. 力学的パラメータ付与（オイラー型弾塑性解析）：合成した全形状に対し、Nishiguchi ら (2021) [3] のオイラー型弾塑性解析を実施。上下を剛体で挟み、上部剛体を一定速度 (15m/s) で押し込むシミュレーションを行い、各形状の衝撃吸収エネルギー（弾性エネルギーと塑性散逸エネルギーの和）を算出した。押し込み量は 2.5mm, 5.0mm, 10.0mm の 3 種類で実施し、各押し込み量に対応するエネルギー値をデータとした。
4. データセット：最終的に、各形状データに、形状寸法（高さ・奥行・幅）と 3 種類の押し込み量に対応する衝撃吸収エネルギーが付与された、計 21,998 個のデータセット（訓練用 20,000、テスト用 1,998）を構築した。

(2) DeepSDF に基づく生成モデル

本研究では、Jeong ら (2019) [5] の DeepSDF を基盤とし、力学的パラメータを条件として入力可能な生成モデルを構築した。

1. 基本構造（オートデコーダー）：DeepSDF は、空間点座標を入力とし、その点から物体表面までの符号付き距離（Signed Distance Function, SDF）を出力するニューラルネットワークである。表面は SDF=0 の等値面として表現され、Marching Cubes 法 [7] でメッシュ化できる。本研究では、エンコーダーを用いて潜在ベクトルとネットワークパラメータを直接最適化するオートデコーダー構造を探用し (c.f. [8])、学習効率と安定性の向上を図った。
2. 条件付け（潜在ベクトルと力学的パラメータ）：単一ネットワークで多様な形状を扱うため、各形状を表現する低次元の潜在ベクトル L を導入した。さらに、指定された力学的条件（高さ・奥行・幅・衝撃吸収エネルギー）を満たす形状を生成するため、

これらのパラメータもネットワークへの入力とした。入力は、潜在ベクトル（40 次元）、Positional Encoding で次元拡張されたサンプル点座標（60 次元）、正規化された力学的パラメータ（4 次元）で構成される。

3. 高精度化（Positional Encoding）：サンプル点座標 x に Positional Encoding (Mildenhall ら, 2021 [6]) を適用し、高周波成分を含む特徴量（60 次元）に変換することで、形状の細部再現性を向上させた。
4. 学習：

- サンプル点：訓練時は、形状表面近傍に重点的に（正規分布ノイズ付加）、残りを空間全体に配置。再構築・生成時は空間全体に均一配置。各 50,000 点使用。
- 損失関数：以下の 3 つの項から構成される損失関数 $\mathcal{L}_{\text{total}}$ を最小化するように、ネットワークパラメータ θ と各形状の潜在ベクトル $\{z_i\}$ を最適化する。
 - \mathcal{L}_{SDF} ：予測 SDF 値 $f_\theta(z_i, x_j)$ と真の SDF 値 s_j の誤差（L1 損失を clamp）。
 - \mathcal{L}_{reg} ：潜在ベクトル z_i が事前分布（平均 0、分散 σ^2 の正規分布）に従うように促す正則化項 ($\|z_i\|_2^2$)。
 - \mathcal{L}_{Lip} ：潜在ベクトルの変化に対する出力の滑らかさを保証するためのリップシツ正則化項 (Lipman ら, 2022 [9])。
- ネットワーク詳細：8 層の全結合 NN（各層 512 次元、ReLU 活性化、Dropout 20

3. 結果と考察

(1) 訓練結果

名古屋大学スーパーコンピュータ「不老」Type (GPU: NVIDIA Tesla V100) を用い、8 ノード 32GPU による分散学習 (DDP) を実施した。SDF 損失、潜在ベクトル分布損失、リップシツ定数損失が順調に収束することを確認し、潜在ベクトル分布損失が十分に収束した 600 エポックで学習を終了した（約 13 時間）。

(2) 再構築タスクの汎化性能検証

学習済みモデルが、与えられた形状データをどの程度正確に再構築できるかを検証した。テスト形状データに対し、対応する力学的パラメータと、SDF 値から最適化された潜在ベクトルを入力として与え、再構築された形状と元の形状の類似度を Chamfer Distance で評価した。

- 訓練形状 20,000 個の平均 Chamfer Distance : 0.0187m.
- テスト形状 1,998 個の平均 Chamfer Distance : 0.0210m.

訓練形状とテスト形状の再構築誤差 (Chamfer Distance) の分布は非常に類似しており、モデルが高い形状再現能力と汎化性能を持つことが示された。定性的には、全体形状は良好に再現されるものの、表面の微細な凹凸はやや平滑化される傾向が見られたが、これは応力集中緩和の観点からは利点とも考えられる。

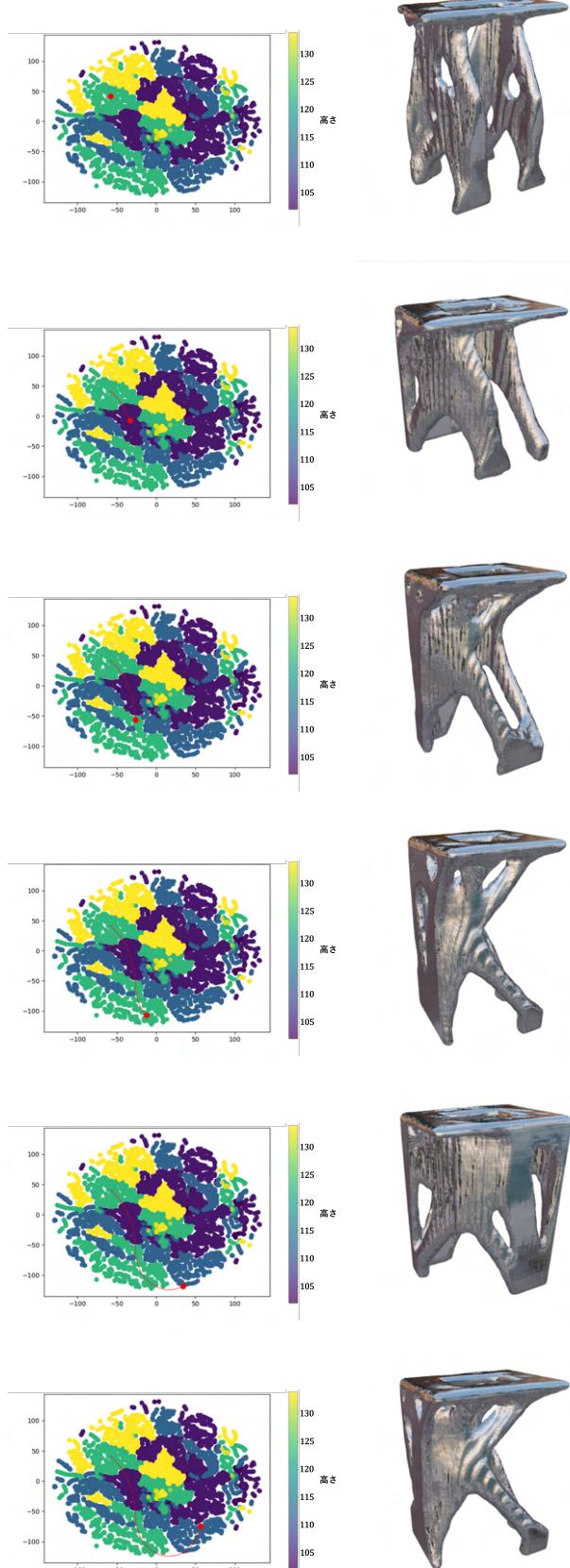


図-1 訓練済みモデルの潜在ベクトル空間（各ペア左: t-SNE, 色は高さ）と対応する生成形状（各ペア右）の例。

(3) 生成タスクの汎化性能検証

・寸法精度：

- 内挿範囲のパラメータ入力では、高さ・奥行・幅いずれも平均精度 99%以上と非常に高い精度を示した。
- 外挿範囲のパラメータ入力では、外挿となるパラメータが増えるほど精度は低下したが、比較的高い精度を維持し、ある程度の外挿性能も確認された（例:3 パラメータ全て外挿の場合、高さ 97.4%，奥行 88.3%，幅 86.6%）。

・衝撃吸収エネルギー精度：

- 内挿範囲：押し込み量が大きくなる（非線形性が強くなる）につれて精度は低下する傾向が見られたものの、10.0mm 押し込み時でも平均精度 92.5%と高い生成精度を示した。
- 外挿範囲：精度低下が顕著となり、特に 10.0mm 押し込み時では平均精度 53.0%まで低下した。最小精度も内挿範囲に比べ大幅に低かった（10.0mm 押し込み時で最小 18.5%）。

・考察：

本モデルは、内挿範囲においては、線形的な寸法パラメータだけでなく、非線形性の強い衝撃吸収エネルギーについても、指定された条件を満たす多様な形状を高精度に生成できることが示された。ランダムな潜在ベクトルを用いることで、同一パラメータに対しても異なる形状を生成可能である。

一方、外挿範囲、特に衝撃吸収エネルギーについては精度が大きく低下した。これは、学習データ範囲外のパラメータ、特に寸法パラメータに適応しようとする過程で、生成形状が物理的に不安定になったり、破綻したりしたことが原因と考えられる。また、押し込み量が大きくなり座屈などの複雑な変形挙動が支配的になると、初期形状とエネルギーの関係性がより複雑になるため、精度が低下したと考えられる。外挿性能の向上には、データセットの拡充や、物理法則に基づく制約の導入、ネットワーク構造の改良が必要である。

図 1 は、訓練データセット全形状に対応する潜在ベクトルを t-SNE により 2 次元に圧縮し可視化した一例である。点の色は各形状の高さを示しており、類似した高さを持つ形状（類似色）が潜在空間上で比較的近い領域に分布する傾向が見て取れる。これは、本モデルが学習を通じて、形状の幾何学的特徴（この場合は高さ）を連続的な潜在空間上の構造として捉えていることを示唆している。生成タスクではこの空間からランダムに潜在ベクトルをサンプリングするが、このようにある程度構造化され、かつ学習により滑らかさが担保された（リップシット正則化 [9] が寄与）潜在空間からは、学習データに類似した妥当な形状が生成されることが期待される。図 1 の右に示すように、潜在空間内的一点（赤点）からデコードすることで、対応する 3D 形状が生成される。潜在空間内を連続的に移動させれば、形状も滑らかに変化すると考え

られ、これは設計探査への応用可能性も示唆する。

4. 結論と今後の課題

(1) 結論

本研究では、力学的パラメータを入力条件として3D形状を生成するParameter-to-3Dモデルの開発を目指し、以下の成果を得た。

1. DeepSDF [5]を拡張し、力学的パラメータ（高さ・奥行・幅・衝撃吸収エネルギー）を条件として入力可能な深層生成モデルを提案した。Positional Encoding [6]の導入により空間解像度も向上させた。
2. 線形トポロジー最適化 [2]とオイラー型弾塑性解析 [3]を組み合わせ、自動車クラッシュボックスを対象とした、力学的パラメータ付きの大規模3D形状データセット（21,998個）を構築した。
3. 再構築タスクにおいて、訓練データ・テストデータ共に低いChamfer Distanceを示し、モデルの高い形状再現性と汎化性能を実証した。
4. 生成タスクにおいて、内挿範囲の力学的パラメータに対しては、寸法・衝撃吸収エネルギー共に高い精度で条件を満たす多様な形状を生成できることを確認した（例：10mm押し込み時エネルギー精度92.5%）。
5. 外挿範囲の力学的パラメータに対しては、寸法精度はある程度維持されたものの、衝撃吸収エネルギーの精度は大幅に低下することを確認した（例：10mm押し込み時エネルギー精度53.0%）。

(2) 今後の課題

本研究の知見に基づき、以下の課題に取り組む必要がある。

1. 外挿性能の向上：

- 訓練データセットの多様性向上（パラメータ範囲の拡大、異なる構造タイプ）。
- 物理法則に基づく制約（例：応力、ひずみ）の損失関数への組み込み。
- 変形挙動を考慮可能なネットワーク構造の検討。

2. ハイパーパラメータ最適化：学習率、ネットワーク構造（層数、次元数）、損失関数の重みなど、より体系的な探索による性能向上。

3. 対象パラメータの拡充：材料特性（ヤング率等）や境界条件、より複雑な性能指標（例：最大荷重、座屈挙動）への対応。

4. 大変形領域への対応：押し込み量が大きく、座屈などの大変形が支配的になる領域での精度検証と向上策の検討。

5. 潜在空間の解析：潜在ベクトルと生成形状の不安定性との関連性を調査し、より安定した生成を促す手法の検討。

謝辞： 本研究は、HPCIシステム利用研究課題（課題番号：hp240296、課題代表者：西口浩司）を通じて、理化学研究所が提供するスーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け、実施した。また、本研究はJSPS科研費24K14968の助成を受けた。

参考文献

- [1] Radford, Alec, et al. "Learning transferable visual models from natural language supervision." International conference on machine learning. PMLR, 2021.
- [2] Wada, Yuji, et al. "Billion-design-variable-scale topology optimization of vehicle frame structure in multiple-load case." Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering 238.12 (2024): 3863-3874.
- [3] Nishiguchi, Koji, et al. "Eulerian elastoplastic simulation of vehicle structures by building-cube method on supercomputer Fugaku." Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region. 2024.
- [4] Chang, Angel X., et al. "Shapenet: An information-rich 3d model repository." arXiv preprint arXiv:1512.03012 (2015).
- [5] Park, Jeong Joon, et al. "Deepsdf: Learning continuous signed distance functions for shape representation." Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. 2019.
- [6] Mildenhall, Ben, et al. "Nerf: Representing scenes as neural radiance fields for view synthesis." Communications of the ACM 65.1 (2021): 99-106.
- [7] Lorensen, William E., and Harvey E. Cline. "Marching cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm." Seminal graphics: pioneering efforts that shaped the field. 1998. 347-353.
- [8] Bloesch, Michael, et al. "Codeslam—learning a compact, optimisable representation for dense visual slam." Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2018.
- [9] Liu, Hsueh-Ti Derek, et al. "Learning smooth neural functions via lipschitz regularization." ACM SIGGRAPH 2022 Conference Proceedings. 2022.