

# グラフオートエンコーダによる 製造プロセスを考慮した曲面デザイン生成

Graph Auto-Encoder-Based Surface Design Generation  
with Manufacturing Process Conditions

酒井佑典<sup>1)</sup>, 奥田洋司<sup>2)</sup>

Yusuke Sakai and Hiroshi Okuda

1) 東京大学 新領域創成科学研究所 (〒227-8563 千葉県柏市柏の葉5-1-5, E-mail: yusuke-sakai@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)

2) 工博 東京大学 新領域創成科学研究所 教授 (〒227-8563 千葉県柏市柏の葉5-1-5, E-mail: okuda@edu.k.u-tokyo.ac.jp)

Thermoplastic materials are formed to fit various product designs, contributing to their aesthetic appeal. However, in their manufacturing process, challenges exist in predicting the formability of each design and proposing alternative shapes that can be mass-produced. While forming simulations are useful for determining manufacturability, they have limitations in predicting and proposing new alternative shapes. In this report, we propose shape generation model that considers the manufacturing process, based on learning from the simulation results of multiple design shapes with graph autoencoder.

**Key Words :** Graph Neural Network, Auto-Encoder, Finite Element Method, Forming Simulation

## 1. 緒言

樹脂やガラス等の熱可塑性材料は、多様な製品デザインに応じて成形・加工され意匠性に寄与している。これらの成形工程においては、デザイナーや客先から求められる多様なデザイン形状に応じて、製品規格内で製造するためのプロセス条件を都度見い出す必要がある。材料の成形・加工は、決められた装置および製造プロセスによって行われることが多く、時に要求されるデザイン形状が成形可能範囲を超える場合も生じる。非線形CAEが広く普及した昨今、成形可否の判断は製造プロセスを再現した数値シミュレーションによって行われることも多く、製造装置で実現可能な条件内で、どの程度までデザインとの形状偏差を小さくした成形が可能か、成形中に材料へどの程度の応力が発生するかといった、成形指標を事前に予測することが可能である。一方、複雑さや急峻な曲率変化を持つデザイン形状であると、装置の成形可能範囲を超えてしまうことも起こり得る。その場合、成形可能な範囲まで難度を緩和した代替形状を提案することが製品の実現に向けて必要となる。しかし、順方向のシミュレーションでは、代替形状の生成は難しく、未知形状の成形可否予測のためには、人力でのCADモデルの修正と再モデリング、計算が必要である。これらの作業を繰り返し試行錯誤することで代替形状を探索しなければならない。

そこで本研究では、図-1に示すようにグラフオートエンコーダ（GAE : Graph Auto-Encoder）を用いて想定される複数のデザイン形状から特徴量を抽出し、CAEから得られる成形指標と紐付ける機械学習モデルを提案する。特徴量空間から、実現可能な成形指標範囲に収まる形状を見い出すことで、製造プロセスの制約を考慮した代替形状を生成することが可能となる。

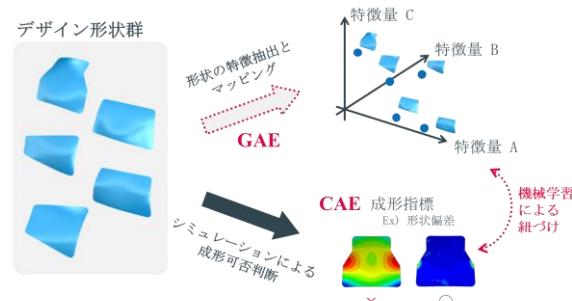


図-1 GAEによるデザイン形状と成形指標の紐付け

## 2. 製造プロセスシミュレーションの問題設定

GAEを用いた形状生成を検討するにあたり、板材料の成形工程を模擬したシミュレーションモデルを構築し、学習データの生成に用いた。モデルの概要を図-2に示す。熱可塑性樹脂の真空成形プロセスを想定し、加熱により軟化した粘弹性体板が面圧により剛体金型に押し当てられて成形される過程を計算した。金型はデザイン形状外周を延長した面で設計されており、金型サイズに合わせて、デザインよりも大きい1000mm×800mm×1mmの板材が成形される。成形後の板材は、デザインの外形状に沿って切り取られ最終的な製品となる。図-2中右に示すように、このシミュレーションモデルにより、成形終了時の板材下面の最大主応力分布および、切り取られた成形後の材料形状と元のデザイン形状との差分である形状偏差分布の2つが、成形性を評価する指標として求められる。計算はAbaqus (Dassault Systems社製) を用いて、有限要素法 (FEM : Finite Element Method) による非定常解析にて実施した。

計算条件を以下に示す。粘弾性体は3項のProny級数で定義した応力緩和曲線と、WLF式によるシフト関数で定義された。面圧は0.1Pa一定とした。プロセス条件としては、成形時間と成形温度の2つがある。本検討においては、成形時間は30sec一定とし、成形温度のみ200, 250, 300°Cの3水準で計算した。シフト関数により、成形温度が高いほど、粘弾性体の粘性が下がり応力緩和が促進されるため、同じ面圧、成形時間においても材料の変形は大きくなる。結果として、金型へより材料が馴染むためデザイン形状に近い（形状偏差の小さい）成形が行われる。図-2右下の3つの形状偏差分布のコンター図は、成形温度を変えた際の違いを示した例であり、同じデザイン形状においても条件によって結果が異なることがわかる。計算は非定常で行われるが、所望の成形時間が経った段階の応力値および形状偏差の結果を以降の学習に用いた。

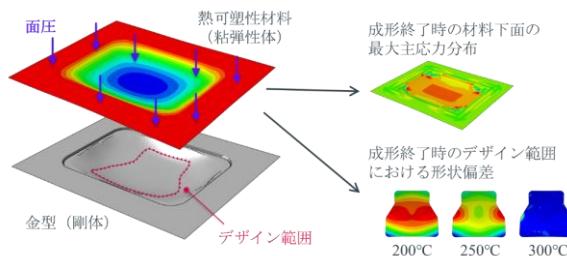


図-2 成形シミュレーションモデルと成形指標

複数のデザイン形状についての計算結果を学習に用いるため、外形状や面内の曲率分布を大きく変更した曲面形状を48パターン準備した。その一部を図-3に示す。図中に示すように、各デザイン形状はアスペクト比や曲面の凹凸の観点で大きく異なるため、代表寸法や平均曲率といった単純な指標で特徴を表現することが難しく、成形性の判断にはCAEを用いることが必要である。各形状に対して、前述した成形シミュレーションを実施し、次章で述べるGAEのための学習データを得た。

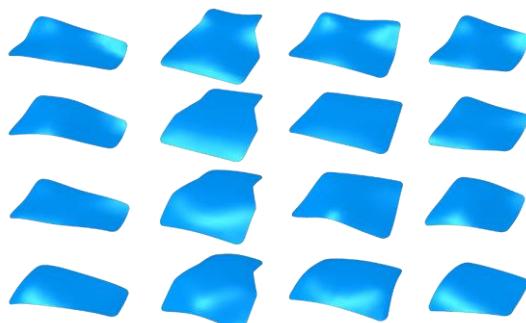


図-3 学習に用いるデザイン形状の例

### 3. グラフオートエンコーダの構成

#### (1) シミュレーションと機械学習の連携

近年、数値シミュレーションと機械学習の連携による

高速計算や広域な解探索手法の検討が、盛んに行われている。中でもCAEが広く使われている工学的な設計問題に対しては、異なる幾何学形状をどのように機械学習で取り扱うかが課題であるが、グラフ表現上で機械学習を行うグラフニューラルネットワーク（GNN: Graph Neural Network）の適用が効果を発揮している[1,2,3]。GNNを用いることで、サイズの異なるデータを1つの機械学習モデルで取り扱うことが可能となるため、形状やメッシュ数の異なるCAEデータを同時に学習することが可能となる。CAEモデルのメッシュ節点をグラフのノードと見做し、隣接するノード間にエッジを設けることによりGNNで取り扱う方法が一般的である。エッジを介して周囲情報の疊み込み演算を重ねることで、得たい変数を出力するようにネットワークを学習させる。

CAEデータの学習と予測に留まらず、生成モデルを用いることで新たな設計案を創発する試みもなされており、実設計に近い対象への適用も増えている。例えば、オートエンコーダ（AE: Auto-Encoder）や敵対的生成ネットワーク（GAN: Generative Adversarial Network）は、機械学習における代表的な生成モデルであるが、CFDと連携させて車体設計に活用した例[4]や、トポロジー最適化の形状[5]やミクロ構造[6]の生成に活用した例がある。一方、製造プロセスとの連携や、予測結果を基にして生成範囲を制御する試みはまだ十分でない。

#### (2) デザイン形状と成形指標の学習モデル

本研究においては、グラフを用いた生成モデルであるGAEを用いることで、前述した様々な曲面形状からの特徴量抽出と、成形指標との紐付けを試みた。図-4に示すように、本研究にて提案するモデルは1つのエンコーダと、3つのデコーダで構成される。

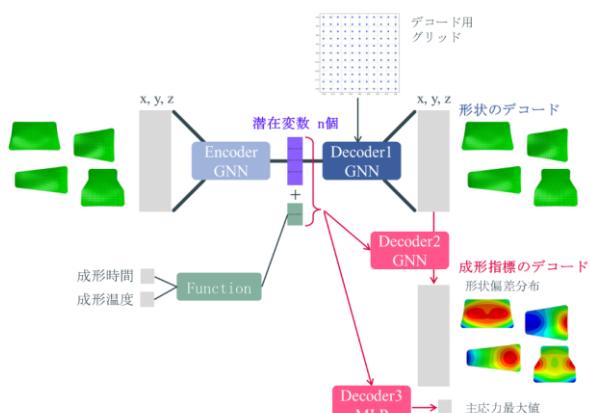


図-4 本研究で用いたGAEの構成

エンコーダへは、メッシュによって離散化された各デザイン形状の節点座標がノード上の変数として入力され、n個（ユーザーが指定するパラメータ）の潜在変数へと幾何学的情報が圧縮される。つまり、潜在変数は $1 \times n$ のベクトルとして指定され、各々の形状はn次元空間にマッピング

グされることを意味する。GNNを用いたエンコードにより、デザイン形状の非線形なモード分解が行われ、各モードの特徴が潜在変数の各成分の値として現れることが期待される。デコーダ1は、これらの潜在変数から元の形状を復元する機能を持つ。入力したデザイン形状を、2章のプロセスに従って成形することを想定して、プロセス条件である成形時間と成形温度を併せて入力する。これらは、デザイン形状から得た潜在変数と併せてデコード用の情報として用いられる。この情報とデコーダ1から得た復元形状をデコーダ2に通すことにより、位置毎の形状偏差値を予測し、プロセス条件に従った形状偏差分布を得る。また、デコード用情報を直接デコーダ3に入力することで、成形終了時点の材料の最大主応力の面内最大値を予測する。教師データによる学習により、上記のエンコーダおよびデコーダを一度得ることが出来れば、新たな潜在変数ベクトルをデコーダに入力することで、新たな形状の生成と、それに対応した成形指標の予測が可能となる。

エンコーダ、デコーダ1および2にはGNNを用いた。各ノードにおいて、k近傍探索 (k=8とした) によって隣接点との間にエッジを生成し、それを用いた畳み込みを行うことで、形状全体の情報を圧縮することを試みた。デコーダ3のみ多層パーセプトロン (MLP: Multilayer Perceptron) を用いた。いずれにおいても、活性化関数はSwish関数を適用した。エンコーダへ入力する形状データは、CAEのプリ処理によって各形状に合わせてメッシングしたものを使っているためノード数はまちまちである。一方、一度n個まで圧縮された潜在変数には、形状毎の元々のノード数の情報が含まれておらず、元のノード数通りに復元することは困難である。そのため、潜在変数からの形状のデコードにおいては、一律にm個のノードによって形状の復元を行うこととした。具体的には、35×35個のグリッド状の点群をデコーダ2に与え、これらの点を潜在変数の情報を基に変形させることで、入力されたデザイン形状と同等の離散化曲面を復元させた。

### (3) 損失関数

前節で述べたエンコーダとデコーダを学習させるにあたり、デコーダの復元誤差と学習制約に関する、大きく分けて2つの損失を定義し、それらの和を小さくする方向に学習を行った。復元誤差は、形状、形状偏差分布、主応力最大値に関する3つの損失に更に分かれる。前節で述べた通り、入力形状と復元形状ではノード数が異なるため、各ノードの座標を直接比較して誤差を求ることは難しい。そこで、三次元点群の機械学習で用いられるChamfer Distanceを適用した。点群Xと点群Yの比較をする際、Chamfer Distanceは式(1)のように定義される。点群X、Yに所属する各点x, yに対して、相手の点群内での最近傍点を見付け、そこまでの距離を求め全点に対して平均する。両点群の値を加算することで、点群間の合致度を評価する

指標CDとなる。式(1)中、N<sub>x</sub>とN<sub>y</sub>は点群X、Yのデータ数である。今回は、入力形状と復元形状に対してこれを求め、L<sub>CD</sub>とした。

$$CD(X, Y) = \frac{1}{N_x} \sum_{x \in X} \min_{y \in Y} \|x - y\| + \frac{1}{N_y} \sum_{y \in Y} \min_{x \in X} \|x - y\| \quad (1)$$

形状偏差においては、Chamfer Distanceと同様に入力形状と復元形状の両点群に対してお互いの最近傍点を探索した後、その点上で、形状偏差値の真値と予測値の平均二乗誤差 (MSE: Mean Square Error) を求めた。その全点における平均値をL<sub>Dev</sub>とした。主応力最大値に関しては、真値、予測ともにスカラー値であるため、プロセス条件毎にMSEを求めたものをL<sub>PS</sub>とした。

続いて、学習制約に関して説明を行う。復元形状はm個のノードから構成されるが、復元形状の評価・利用の観点から、より均等にノードが分散された状態で曲面が表現されていることが望ましい。そのため、復元形状を構成する各点とそのk近傍点との距離を求め、それらの全点における標準偏差をL<sub>Std</sub>として設定した。次に、ユーザーが新たな潜在変数を指定して新規形状のデコードを行う際に、生成される形状の変化挙動をわかりやすくするために、以下の2つの制約を追加した。1つ目は、デザイン形状群を潜在変数空間に射影した際の分布の中心を、0に近づけるためのL<sub>Ave</sub>である。教師データはN<sub>batch</sub>個ずつのバッチに分けて学習に用いられるが、それらをエンコードした潜在変数ベクトル群に対して、成分毎にバッチ平均値を求めた後、全成分に対して再度平均した値をL<sub>Ave</sub>とした。2つ目は、潜在変数の成分間の独立性を高めるためのもので、式(2)で求めた成分間の共分散値を式(3)で全成分に対して平均化したL<sub>Covar</sub>として定義した。ここで、式(2)中のx<sub>ji</sub>はバッチ内のi番目のデータに対するj成分目の潜在変数であり、上付きのバーはバッチ内での平均値を表す。

$$Covar(j, k) = \frac{1}{N_{batch}} \sum_{i=1}^{N_{batch}} (x_{ji} - \bar{x}_j)(x_{ki} - \bar{x}_k), \quad (j \neq k) \quad (2)$$

$$L_{Covar} = \frac{1}{N_{Latent}} \sum_{k=1}^{N_{Latent}} Covar(j, k), \quad (j \neq k) \quad (3)$$

以上の6つの損失の重み付き線形和を、式(4)のように損失関数L<sub>Total</sub>とし、AdamWをオプティマイザとして学習を実施した。重みλ<sub>1</sub>～λ<sub>6</sub>は、ハイパーパラメータとした。

$$L_{Total} = \lambda_1 L_{CD} + \lambda_2 L_{Dev} + \lambda_3 L_{PS} + \lambda_4 L_{Std} + \lambda_5 L_{Ave} + \lambda_6 L_{Covar} \quad (4)$$

#### 4. 学習および予測

##### (1) 学習条件

2章で述べた48個のデザイン形状に対して、それぞれ成形温度3水準の解析を実施し、計144個のデータを得た。3個のデザイン形状を生成精度検証用として分け、残りの45形状×3条件のデータのうちの8割を学習データ、残りをテストデータとした。つまり、テストデータは、学習に用いた既知形状を未知の成形温度条件で予測した場合の精度評価に、最初に分けた3形状は、形状・成形温度とともに学習に用いられていない条件での予測精度評価に用いられる。潜在変数の個数は、いくつかの値で比較をした結果、予測精度を担保しつつ極力小さな値であるn=4を採用した。より少ない変数で形状を特徴付けることで、生成され得る形状の解釈性を上げることを目指し、可能な限り小さな値とした。

##### (2) 予測結果

学習したモデルを使って、形状および形状偏差分布について予測した結果の一例を以下に示す。図-5は、テストデータに対してデコードを行った例である。左図は三次元空間でデザイン形状をプロットしたもので、赤四角の元形状（入力）に対して、青丸の予測形状（復元）が良く一致していることが見て取れる。右のXY平面コンター図も、真値と予測を比較したもので、上段はZ座標を示しており先の三次元プロットと同義である。下段は、与えた成形温度に対して形状偏差分布を求めたものである。前述の通り、テストデータの形状は学習データにも含まれているので、外形状が若干緩慢になっているものの、Z座標で示される曲面形状がよく復元出来ているのは順当な結果と言える。形状偏差分布については、未知の成形温度に対する予測結果であるが、真値に近い分布を示しており、Decoder2が適切に学習されていると言える。

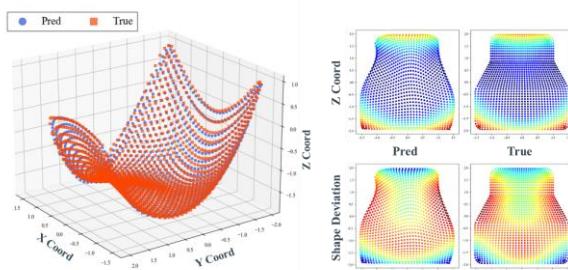


図-5 テストデータの予測結果例

続いて、生成精度検証用のデータを用いて、未知形状の予測を行った結果を図-6に示す。図の見方は図-5と同様である。図-6に示した例は、図-5と同じ外形状であるが、面内の曲率分布は大きく異なる。その場合でも、三次元形状、形状偏差とともに真値に近い分布を出力することが出来た。

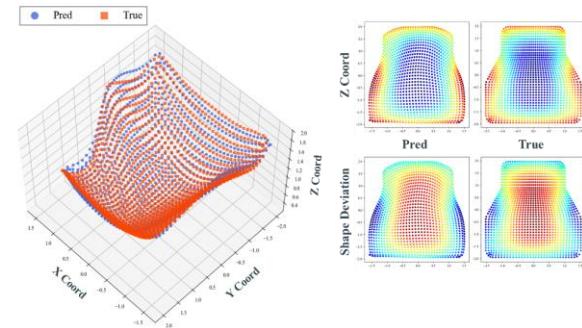


図-6 生成精度検証データの予測結果例

最後に、成形指標の予測精度について表-1に示す。形状偏差については、形状毎に求めた分布から面内最大値を抽出し、真値との二乗平均平方根誤差 (RMSE : Root Mean Square Error) をデータ群に対して求めた。応力については、最大主応力の面内最大値の予測値に対して真値とのRMSEを求めた。表の通り、いずれも0.03程度の値に収まっている。一方、応力に比べて形状偏差の方が、教師データに対して、テストデータおよび生成精度検証用データのRMSE値が悪化する傾向が見られる。これは、応力がスカラー値の学習なのに対して、形状偏差は面分布を異なるデータ点数で復元した結果を基に学習しており、予測の難度が高いためと考えられる。また、RMSE値から真値からの平均的なパーセント誤差に換算すると、形状偏差は3%程度、応力は15%程度の誤差となった。応力の予測精度に改善の余地があるものの、デザイン形状変化に対する指標の感度評価には十分実用的な結果と考える。

表-1 成形指標の予測精度

データ	形状偏差 RMSE	応力 RMSE
教師	0.0075	0.0252
テスト	0.0121	0.0291
生成精度検証	0.0234	0.0314

以上の結果より、学習済みのデコーダにより新たな形状生成と成形指標の予測が可能であることが示された。

#### 5. 結言

製造プロセスを考慮したデザイン形状生成を目指して、FEMによるシミュレーションデータとGAEによる機械学習モデルの連携手法を提案し、学習結果と予測精度を示した。本手法を用いて、実現可能な成形指標範囲に収まる潜在変数を探索し、そこから形状を新たに生成することで、製造プロセスを考慮した代替形状の提案が可能となる。

#### 参考文献

- [1] Pfaff, T., et al.: Learning mesh-based simulation with graph networks, ICLR, 2021.

- [2] Tierz, A., et al.: Graph neural networks informed locally by thermodynamics, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, Vol.144, 2025.
- [3] Horie, M., et al.: Isometric Transformation Invariant and Equivariant Graph Convolutional Networks, *ICLR*, 2021.
- [4] Tran, J., et al.: Aerodynamics-guided machine learning for design optimization of electric vehicles, *Commun. Eng.*, Vol.3, 174, 2024.
- [5] Yaji, K., et al.: Data-driven multifidelity topology design using a deep generative model: Application to forced convection heat transfer problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.388, 2022.
- [6] Suzuki, M., et al.: Deep learning-aided inverse analysis framework to accelerate the exploration of DP steel microstructures, *Materials Today Communications*, Vol.41, 2024.