機械学習を用いた 3D 積層造形ポーラス金属の変形挙動予測

東京農工大学　大学院工学研究院
准教授　大島　草太
（2023 年度 奨励研究助成（若手研究者枠）　AF-2023041-C2）

キーワード：機械学習，グラフニューラルネットワーク（GNN），ポーラス金属

１．研究の目的と背景

ポーラス金属は，内部に多数の気孔を含んだ金属材料の総称である．ポーラス金属は軽量性と高い比強度を両立できる点に加え，優れたエネルギー吸収特性を有することから，航空宇宙分野などの輸送機器をはじめとした幅広い分野で応用が期待されている．近年，3D 積層造形技術（金属 3D プリンター）の発展に伴い，ポーラス金属の構造を自由に設計・制御することが可能となり，狙った力学的特性を有するポーラス金属の作製も実現しつつある．

例えば，宇宙航空研究開発機構(JAXA)の小型月着陸実証機「SLIM (Smart Lander for Investigating Moon)」では，3D 積層造形により作製されたポーラス金属が着陸脚用の衝撃吸収材として採用された．この開発においては，複数の幾何構造および熱処理条件の比較検討により，最適な特性の探索が行われた[1]．特に航空宇宙機においては，重量や体積に極めて厳しい制約が課される中で，十分な衝撃吸収能力を発揮できる構造を選定する必要がある．このような目的に応じた設計を行う際，3D-CAD 空間上で設計したセル形態を高精度で再現可能な金属積層造形法は，ポーラス金属の作製において極めて効果的なアプローチである．

これまでに，金属積層造形法で作製されたポーラス金属の力学的特性評価に関する研究が多数行われてきた．例えば，濱口ら[2]は，セル配置の不規則性がポーラス金属の力学的挙動に影響を及ぼし，異方性の低減や衝撃吸収特性の向上につながる可能性を示している．しかし，不規則セルのように複雑な幾何トポロジーを有するポーラス金属の研究は現段階では限られており，その力学的特性を正確に予測することは容易ではない．この予測の難しさが，目的の特性から構造を決定する逆設計の手順を複雑化させる要因となっている．この課題を解決するための従来の手法としては，実際に試験片を作製して圧縮試験等により評価する実験的アプローチや，幾何モデルを用いた有限要素解析(FEA)による数値シミュレーションが行われてきた．しかし，いずれの手法も多大な時間的・金銭的コストおよび計算リソースを要するという欠点を有している[3]．

そこで本研究では，ポーラス金属の力学的特性を高速かつ低コストで予測する手法として，機械学習モデルの一つであるグラフニューラルネットワーク(GNN)を用いる方法を提案する．GNN は，ノード（頂点）とエッジ（辺）からなるグラフ構造データを直接入力として学習できるニューラルネットワークである．本研究では，対象とするポーラス金属のセル構造（幾何学的構造）を，頂点の三次元位置と各頂点に接続されるストラット（はり）で定義されるグラフデータへと変換し，GNN の入力データとした．

具体的には，3D 金属積層造形法により実際に作製された複数の構成を有するポーラス金属を対象とし，それらの圧縮試験データから得られた物性値を教師ラベルとして用意した．次に，各ポーラス金属をグラフ化して物性値と対応付けることで，一連の学習用データセットを構築した．最終的に，このポーラス金属のグラフ表現から，弾性率および初期降伏応力を予測する回帰モデルを構築した．以上のアプローチにより，従来手法よりも少ない計算・実験リソースで，金属積層造形ポーラス金属の力学特性を効率的に予測することを目指した．

２．研究方法

2・1　ポーラス金属のグラフ表現

GNN へポーラス金属を入力するために，幾何学的なトポロジー情報をノード（頂点）とエッジ（辺）からなるグラフ構造データへと変換する必要がある．本研究では，ポーラス金属を構成するストラット（はり）同士の交点をノードとし，交点間を結ぶストラット自体を双方向のエッジとして定義した．

対象とする幾何形状として，規則構造である FCC（面心立方）格子，BCC（体心立方格子），および HCP（六方最密）格子を母点とした 3D-Voronoi（ボロノイ）分割セルを採用した．ボロノイセルは，Python の SciPy ライブラリを用いて，三次元空間内にランダム配置した母点を基準に空間分割を行うことで幾何データを生成し，得られたセルのエッジおよび頂点情報を抽出して PyTorch Geometric 形式のユニットセルグラフを構築した．さらに，マクロな試験片サイズを表現するため，構築したユニットセルグラフを空間方向（x, y, z 軸方向）にそれぞれ実際の試験片の大きさに基づいて繰り返し複製・結合するアルゴリズムを実装した．この際，隣接するセル間の境界において重複生成される同一頂点の結合・縮約処理を適切に行うことで，一連のポーラス金属全体をグラフ構造へと拡張した．図 1 に作成したグラフ構造の一例として，ユニットセルと拡張した構造（BCC の荷重 001 方向モデル）を示す．

2・2　データセットの概要と特徴量設計

本研究における GNN モデルの学習・検証には，計 65 個の 3D 積層造形により作製したポーラス金属試験片のデータセットを用いた．対象とした母材材料は，17-4PH ステンレス鋼，難燃性マグネシウム合金(AZX912)，純チタン

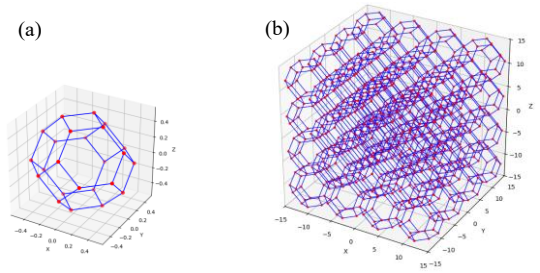


図 1　グラフ構造の可視化，(a) ユニットセルモデル，(b) 連結モデル

(CP-Ti)，およびアルミニウム合金（Al-Mg-Sc 合金，Al-Si-Mg 合金）の 5 種類であり，種々の熱処理条件を施した．すなわち，材料および熱処理条件に対応する様々な母材の機械的性質（母材ヤング率，母材 0.2%耐力）を有している．

本研究では，構造の幾何学的トポロジーのみならず，母材自体の材質や積層造形後の熱処理等に伴う機械特性の変化を考慮可能な特徴量設計を行っている．ノード特徴量には，各交点の三次元空間座標 x, y, z を与えた．エッジ特徴量には，ストラットの幾何特性として，ストラットの太さ（断面寸法）および三次元空間における配向（方向ベクトル）を付与した．グラフ全体特徴量としては，ポーラス金属の母材自体の力学的特性がマクロな応答に決定的な影響を与えるため，母材のヤング率および 0.2%耐力を与えた．教師ラベルとしては，実験から得られたポーラス金属の弾性率および初期降伏応力を与えた．これにより，入力された構造の幾何形状および母材の特性から，ポーラス金属のマクロな力学特性を出力する回帰問題として定式化される．

2・3　モデル設計および検証条件

エッジ特徴量（太さ・配向）をノード間の情報・特徴伝播プロセスに直接組み込むため，GNN アーキテクチャとして GINEConv (Graph Isomorphism Network with Edge features)を採用した．モデルの予測性能および汎化性能を評価するため，全 65 個のデータセットに対して k 分割交差検証(k-fold cross validation)を適用した．k 分割交差検証では，データを重複なく順番に学習と評価に用いることで，データ分割の偏りによる影響を排除し，モデルの汎化性能を客観的に評価することが可能となる．損失関数には平均絶対誤差(MAE)を採用し，評価指標として MAE および決定係数(R^2)を用いた．また，実際の実験データに基づく特性予測モデルの構築に先立ち，幾何学的な情報伝播が正しく行われるかを確認するため，単純化したダミーデータを用いた基礎的なモデル検証ステップを設けた．ダミーデータを用いた予備検証により，提案したノード・エッジ特徴量の設計および GINEConv を用いた情報伝播機構が，設計通りの相関関係を評価できることを確認した．

表 1　ハイパーパラメータの一覧（固定値）

乱数シード	42
バッチサイズ	32
学習率	2.0×10^{-3}
重み減衰	1.0×10^{-4}
隠れ層の次元数	32
GNN の層数	2
ドロップアウト率	0.1

表 2　検証した条件の一覧

条件番号	最大エポック数	交差検証分割数	エッジ長	圧縮方向なす角
1	200	5	-	-
2	300	5	-	-
3	400	5	-	-
4	500	5	-	-
5	300	3	-	-
6	300	5	✓	-
7	300	5	-	✓
8	300	5	✓	✓

3．研究成果

3・1　ハイパーパラメータ・学習回数の影響

実際の実験データ（65 個）を用いた力学的特性予測において，エッジ特徴量の組み合わせや学習回数（エポック数）を変化させた複数の学習条件（条件 1〜8）を比較検討した．本研究では，単一のモデル構成で弾性率および降伏応力の双方に対する予測性能を検証している．学習に使用したハイパーパラメータのうち，すべての条件で共通に使用したものを表 1，変化させたものを表 2 にそれぞれ示す．モデルの学習ステップにおいては，実験データの提示順序によるバイアスを排除し，学習の収束を安定化させるため，各エポックにおいてデータをランダムにシャッフルしてモデルに入力する手法を採用した．また，小規模なデータセットにおける学習の再現性と客観的な性能評価を担保するため，実行時には乱数シードを固定して検証を行った．

これらの条件に基づいて学習したのちに，検証データを使って得られた予測精度（k 分割交差検証の平均値）について，各条件における MAE を図 2 に，R^2 スコアを図 3 にそれぞれ示す．

まず，予測対象による最適条件の差異に着目すると，弾性率の予測タスクにおいては，追加の特徴量を付与せずエポック数を 300 回とした条件 2 において，最も低い MAE (0.116 GPa)および最大の決定係数 R^2 (0.419)を記録し，優れた予測精度を示した．これに対し，降伏応力の予測タスクにおいては，同じ特徴量セットでエポック数を 500 回まで増加させた条件 4 において，最小の MAE(2.110 MPa)および最大の R^2 (0.712)を達成した．この結果から，予測対

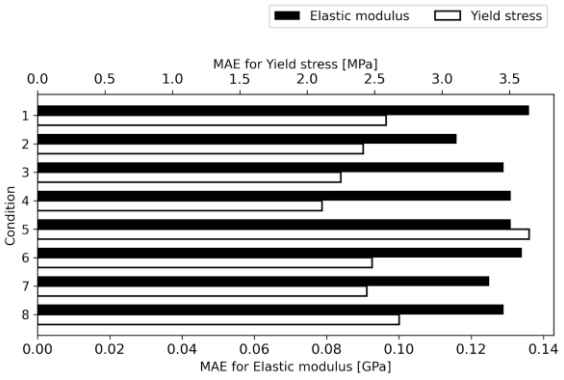


図 2　条件毎の MAE の変化

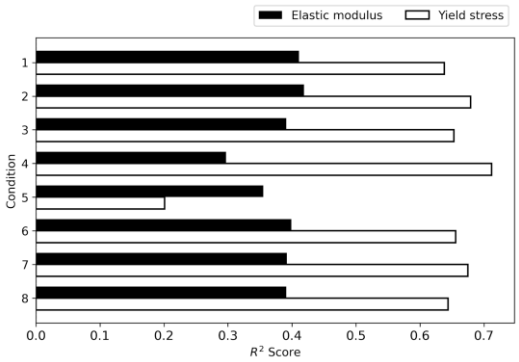


図 3　条件毎の R^2 の変化

象とする力学的特性（弾性率または降伏応力）によって，モデルの最適化に必要な学習の深さや適切なハイパーパラメータが異なることが示された．

ここで，学習回数がモデルに与える影響を詳細に検証するため，同一の特徴量セットでエポック数を 200 から 500 回まで段階的に変化させた条件 1〜4 を比較した．弾性率予測における R^2 の推移を分析すると，エポック数の増加に伴って予測精度は一度上昇し，300 回（条件 2：$R^2 = 0.419$）においてピークに達したものの，400 回（条件 3：$R^2 = 0.391$），500 回（条件 4：$R^2 = 0.297$）へと増加させると精度は段階的に低下した．これは，限定されたデータセットに対してパラメータ更新が過度に進んだ結果，訓練データへの過度な適合が生じる過学習が引き起こされ，汎化性能が低下したためであると考えられる．

一方で，降伏応力予測における MAE は，エポック数の増加（200 回から 500 回）に伴って 2.586 MPa から 2.110 MPa へと単調に減少した．R^2 スコアについても，300 回（条件 2：0.679）から 400 回（条件 3：0.653）にかけて一時的な停滞は見られるものの，500 回（条件 4：0.712）において最大値を記録し，過学習に陥ることなく学習回数の増加が高精度化に直接寄与する挙動を示した．

以上の対比分析から，本対象における機械学習アプローチにおいては，弾性率予測では 300 回付近での早期の過学習に留意すべきである一方，降伏応力予測では 500 回以上の十分な学習回数を確保することが精度向上に有効であると判断された．したがって，目的とする力学指標の性質に応じた個別最適化，あるいはタスク毎の学習収束スピードの差を考慮したモデル選定が必要不可欠であることが明らかとなった．

3・2　予測精度の検証

交差検証における Fold 毎のテスト結果を詳細に分析したところ，平均的な予測精度は担保されているものの，モデルの予測挙動には Fold 間で偏りが存在することが判明した．一例として，条件 7（エポック数，角度特徴量あり）の初期降伏応力の Fold 毎の予測結果を図 4 に示す．図 4 より，特定の Fold では比較的高い R^2 を示し，良好な予測精度を達成している一方で，別の Fold では性能の低下が観察された．このように，平均 R^2 の推移は全体的な精度の底上げだけでなく，特定の Fold における突出した性能向上の影響を一部受けている可能性が示唆された．

この予測精度のばらつき，および全体的な R^2 の上限を招いている要因について，データセットの構造的特性の観点から考察を行った．全 65 個のグラフデータの内，12 個のグラフは熱処理条件を除き，全く同一の幾何構造・トポロジー特性を有していた．これらに対応する熱処理条件（＝母材特性）は 4 種類に限定されており，各条件に 3 個ずつ完全に重複した構造が含まれる構成となっていた．

図 3 の弾性率予測結果が示す通り，基本モデルである条件 2 ($R^2 = 0.419$)に対し，エッジ長さ（条件 6：$R^2 = 0.399$）や空間的な配向（条件 7：$R^2 = 0.392$）といった幾何学的な追加特徴量を加えるほど，平均 R^2 スコアがわずかに低下する傾向が見られた．エッジ特徴量としてストラットの太さのみを用いた場合（条件 2），幾何構造および入力された母材特性が同一であるグラフに対して，モデルは安定した力学特性予測値を出力する．これに対し，ストラットの空間的な配向（方向ベクトル）などの特徴量をエッジに加えた場合，トポロジー内の幾何配置の微細な特徴を検知し，より詳細な表現が可能となる．しかしその反面，幾何構造が完全に同一で熱処理条件のみが異なる（すなわち母材ヤング率や 0.2%耐力のみが異なる）グラフ群に対しては，幾何学的な特徴量の寄与が相対的に過大となったためか，母材側の力学的特性の差を表現しきれず，逆に予測誤差が増大するトレードオフが発生したと考えられる．

以上の分析から，現在の予測モデルにおける課題として，同一構造のグラフがデータセット内に多数重複して含まれていたことにより，モデルが学習できる幾何構造の多様性に対して，実質的な独立データ量が不足していた可能性が高い．加えて，同一のグラフ構造に対して異なる母材特性が付与されているケースにおいて，グラフ全体特徴量として与えた母材特性の数値情報を，マクロな試験片全体の特性へと非線形にマッピングする学習が十分に収束していないことが考えられる．これが原因となり，未知の構造や異なる母材特性に対するモデルの汎化性能が制限され，特定の Fold で誤差が顕著化する結果を招いた．

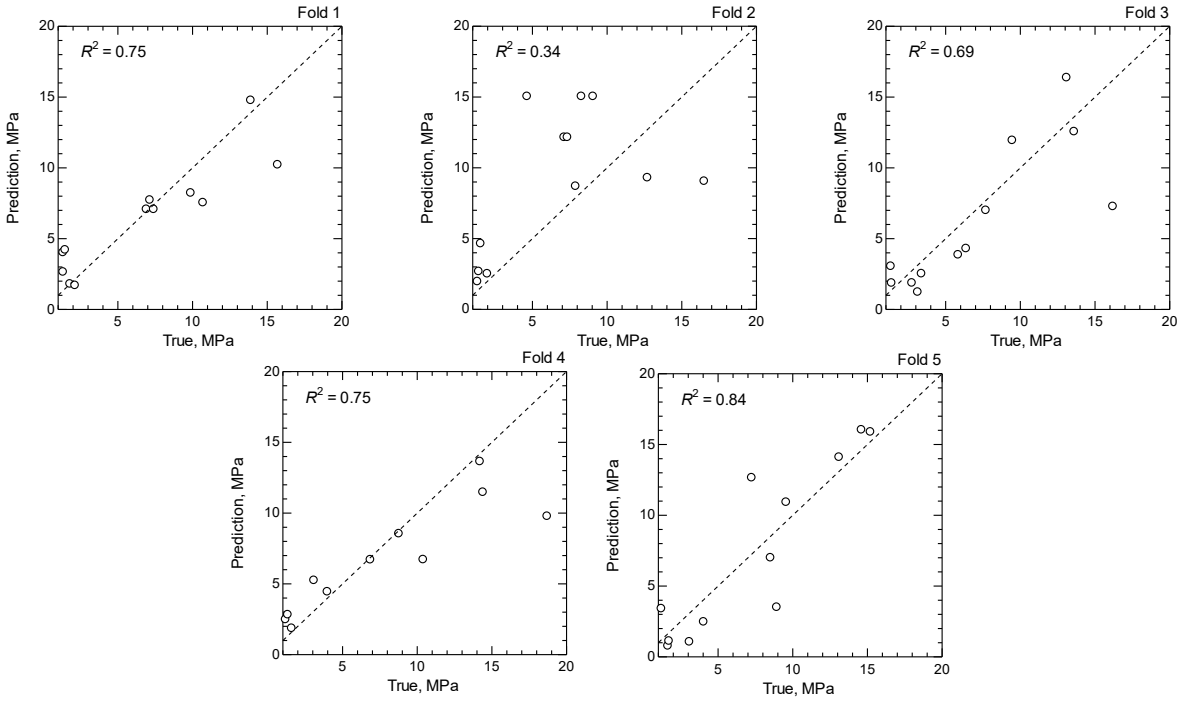


図 4　Fold 毎の予測結果（条件 7，初期降伏応力）

4．結び

本研究では, 金属積層造形により作製されたポーラス金属の弾性率および降伏応力を予測するため, GINEConv を用いたグラフニューラルネットワーク(GNN)による解析アプローチを構築し，その有効性と課題を検証した．ポーラス金属のストラット交点をノード, ストラットをエッジとし, ボロノイ分割や空間拡張アルゴリズムを組み合わせることで，複雑なポーラス構造を PyTorch Geometric のグラフ形式でデータ化する手法を確立した．

提案モデルの学習においてハイパーパラメータおよびエポック数の影響を評価した結果, 予測対象とする力学的特性によって学習の収束挙動が大きく異なることを明らかにした．具体的には，弾性率予測においてはエポック数 300 回をピークとして過学習に陥る傾向が確認された一方, 降伏応力予測においては学習回数の増加に伴って精度が単調に向上し，500 回において最大の予測精度(R^2 = 0.712)に達することを突き止めた．これにより，対象とする物性の性質に応じた個別最適化や学習回数の選定が必要不可欠であるという知見を得た．

交差検証における各 Fold の予測誤差分析により，データセット内に含まれる幾何構造の重複度合いがモデルの汎化性能に与える影響を明らかにした. エッジ長さや配向（角度）といった追加幾何特徴量の付与は幾何の違いを詳細に識別する上で有効である一方, 幾何構造が完全に同一で熱処理条件（母材特性）のみが異なるデータに対しては, 幾何特徴量の寄与が相対的に過大となり, 材料側の差異に起因する力学的特性の差をモデル化しきれずに予測誤差が増大するというトレードオフが存在することが明らかになった．

今後の展望としては, 幾何構造の多様性を担保した追加データの拡充を図るとともに, グラフ全体特徴量として与えた母材特性の数値情報をマクロな試験片全体の特性へと非線形にマッピングする学習機能を強化するため, 局所特徴量と全体特徴量の相互作用を強化した GNN アーキテクチャへの改良, あるいは物理的制約を考慮した学習アルゴリズムの導入を検討し, 実用的な逆設計システムへの適用に向けたさらなる予測精度の向上を目指す．

謝　辞

本研究の実施に当たっては, プログラムの作成に東京農工大学工学部の原田凌氏, 学習データの作成に東京都立大学システムデザイン研究科の小幡勇太郎氏に協力をいただきました．また，実験データについては東京都立大学航空宇宙システム工学科北薗幸一教授から提供を受けました．本研究は，公益財団法人天田財団の支援を受けて行われたものです．ここに記して謝意を表します．

参考文献

1) 北薗幸一・多田雷泰・杉山嘉一・三浦汀桜子：航空宇宙技術，17 (2018)，115.
2) 濱口拓也・郭世躍・髙玉怜史・北薗幸一：塑性と加工，61-717 (2020)，197.
3) Cortés, C.・Osorno, M. ・Uribe, D. ・Steeb, H. ・Ruiz-Salguero, O.・Barandiarán, I.・Flórez, J. Engineering with Computers, 35-1 (2019), 257.