

Supercomputing Japan 2026

# モノづくりCAEにおけるサロゲートモデルの進化

力技から賢いサンプリング、そして履歴・場の予測へ

劉 継紅

2026.2.2



大阪成蹊大学  
OSAKA SEIKI UNIVERSITY

# 目次

1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置づけ
2. 基本形：スカラー出力の予測
3. 学習データの削減：効率的なサンプリング
4. 高度化：履歴・場の予測
5. まとめ：現場実装の論点と今後

# 目次

1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置づけ
2. 基本形：スカラー出力の予測
3. 学習データの削減：効率的なサンプリング
4. 高度化：履歴・場の予測
5. まとめ：現場実装の論点と今後

# 1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置づけ

- CAE（計算科学）

- ▶ 物理法則を表す偏微分方程式を離散化手法で解く

Model-based simulation

モデル駆動とする演繹的な手法

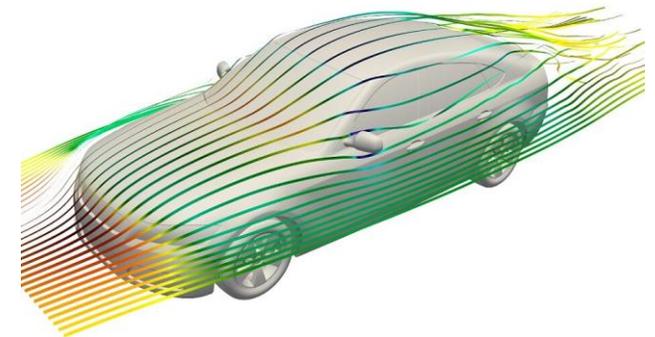
時空間の詳細結果、洞察の容易さ

- ▶ 理論科学と実験科学に次ぐ**第3の科学**
- ▶ モノづくりを中心に広く使われている
- ▶ 高度な専門知識とスキルが必要、シミュレーションに時間がかかる  
設計や営業の現場で使いにくい  
ソフトウェアが高価

mass-energy equivalence  
the concept that the mass of a body is a measure of its energy content

$$E = mc^2$$

E : energy  
m : mass  
c : the speed of light



# 1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置づけ

- AI（データサイエンス・機械学習）

- ▶ 方程式を使わず、知識や経験のデータを機械学習して予測

Phenomenon-based simulation (AI model, Surrogate model)

データ駆動とする帰納的な手法

時空間の結果の迅速な予測・探索

- ▶ **第4の科学（第4のパラダイムとも）**

- ▶ 各分野で利用が急速に拡大中

- ▶ 物理破綻、解釈性の問題

大量かつ質の高いデータが必要

機械学習アルゴリズム



データ駆動



# 1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置づけ

- CAEとAIの融合

- ▶ CAEの課題解決にAIを活用

- CAEの入出力データをAIで機械学習し、CAEと同様の予測を行う

- ▶ サロゲートモデル

- 高速に予測でき、CAEでは不可能な網羅的な時空間探索が可能に  
設計の効率化

- CAEの強みを生かしながら限界（高い専門性・長い計算時間）を打破

CAE × データサイエンスは必然

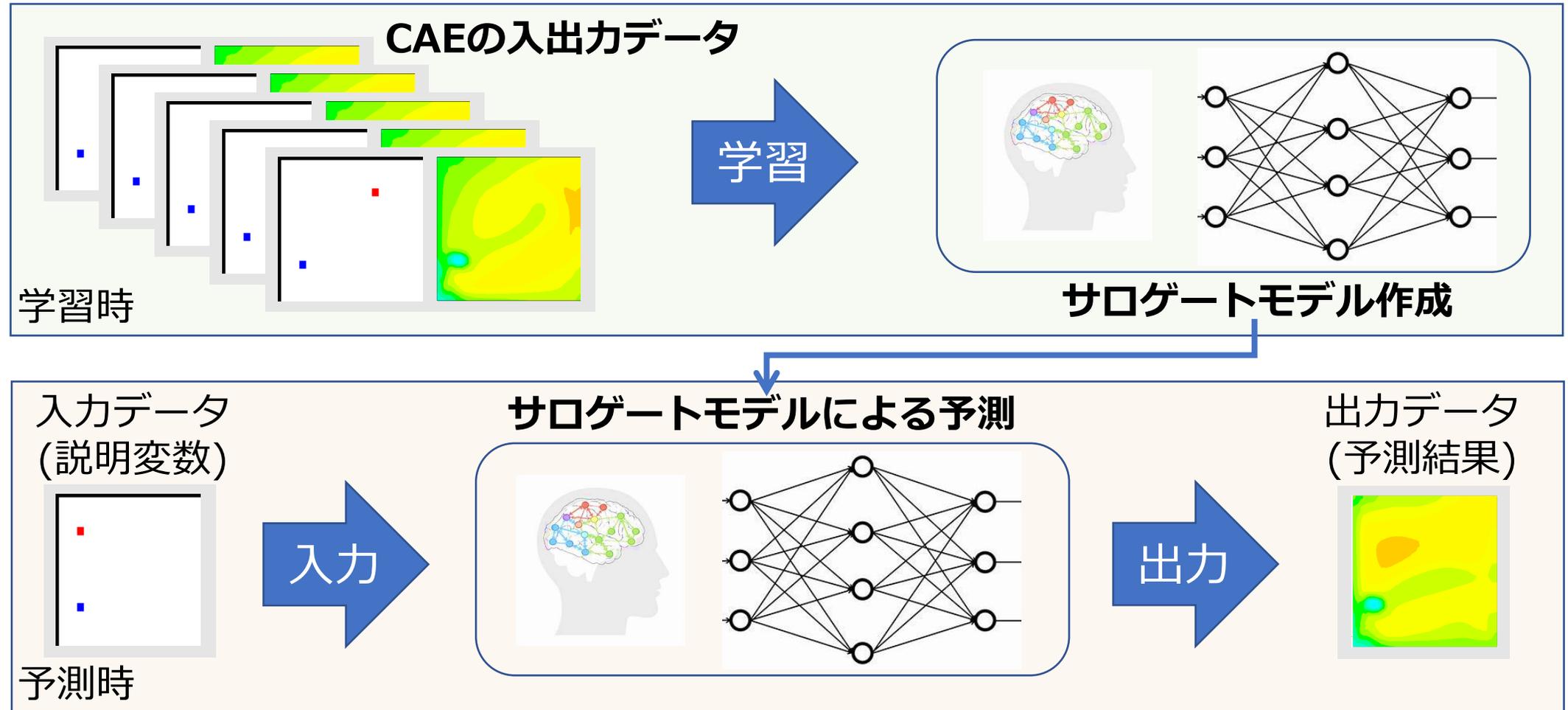
# 1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置づけ

- ・ サロゲートモデルの位置づけ
  - ▶ 高速化  
結果がリアルタイムに得られる
  - ▶ 逆問題と最適化  
時空間での最適化を探索
  - ▶ データ構造の理解  
入出力データからの相関解析、主成分分析（PCA）、固有直交分解（POD）
  - ▶ 複雑問題（ばらつき等）・ PDE解法（Neural Operator等）
  - ▶ **予測対象のレベル整理**  
**スカラー／分類／履歴（関数）／場（分布）**

# 1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置づけ

- ・ サロゲートモデルの作成と適用のワークフロー

CAEは学習データ生成に集中し、予測はサロゲートで回す

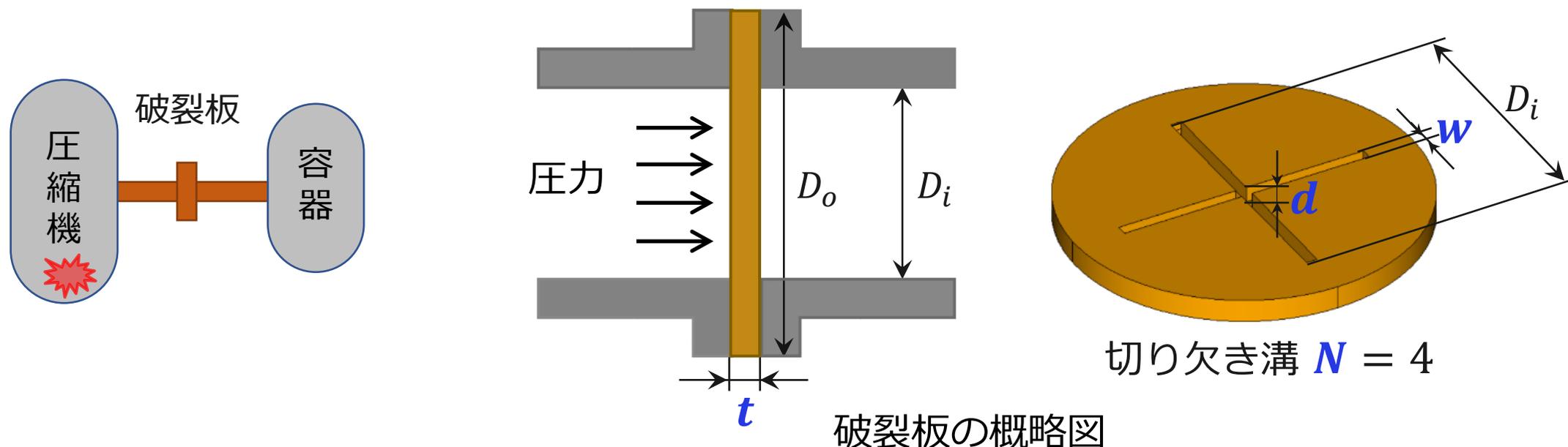


# 目次

1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置付け
2. 基本形：スカラー出力の予測
3. 学習データの削減：効率的なサンプリング
4. 高度化：履歴・場の予測
5. まとめ：現場実装の論点と今後

## 2. 基本形：スカラー出力の予測

- 空調圧縮機破裂板の強度予測
  - ▶ 冷媒圧力上昇への安全対策：破裂板で圧力逃がし
  - ▶ 破裂圧（強度）を設計変数から即時推定、設計現場でのリアルタイム判断へ  
変数： $t$ （厚さ）、 $N$ （切欠き溝本数）、 $d$ （深さ）、 $w$ （幅）
  - ▶ CAEで強度を計算して学習データ化（960ケース）



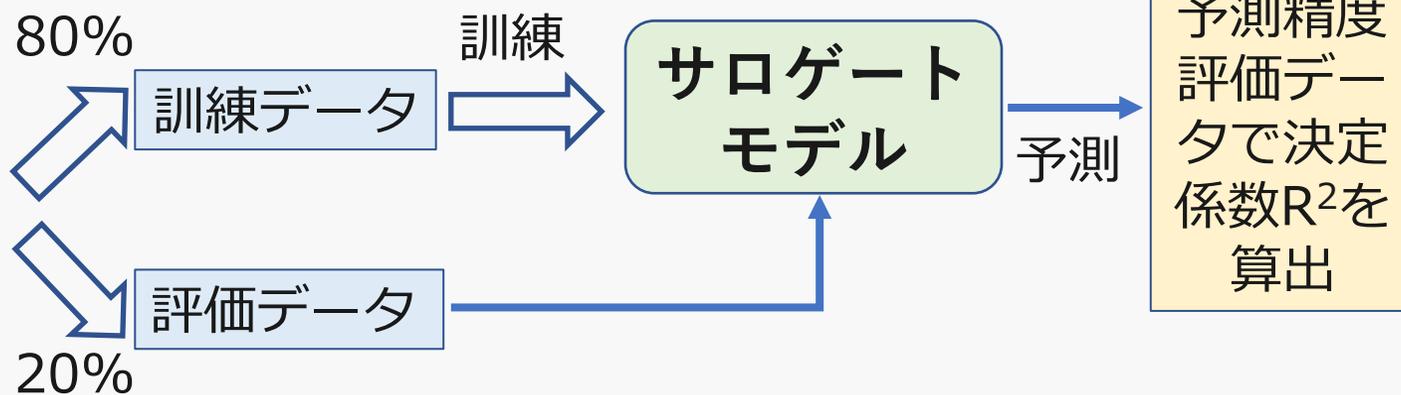
## 2. 基本形：スカラー出力の予測

- 学習データとサロゲートモデルの構築
  - 力技アプローチ：CAEの入力出データを多数作成し、訓練と評価のデータとする
  - 各種機械学習アルゴリズムで破裂板の強度を予測する**サロゲートモデルを作成**

力技アプローチ：多数学習ケースでまず作る（動かす）

学習データ（960ケース）

t	N	d	w	P
0.5	2	0.1	0.2	17.0978
0.5	2	0.1	0.3	16.9287
0.5	2	0.1	0.4	16.4175
0.5	2	0.1	0.5	16.367
0.5	2	0.1	0.7	16.3933
0.5	2	0.1	1	16.4779
0.5	2	0.1	1.5	16.9126
0.5	2	0.1	2	17.1771
0.5	2	0.1	3	17.1635



## 2. 基本形：スカラー出力の予測

- 各種機械学習手法の結果

- ▶ 線形重回帰より、決定木系の手法で作成したサロゲートモデルは予測精度が全般に良好
- DNNによるサロゲートモデルも予測精度が良い

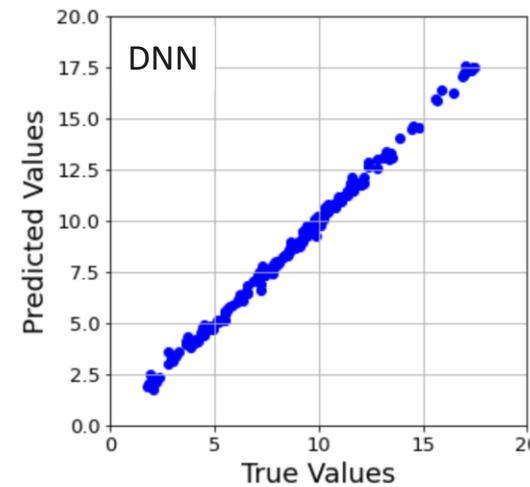
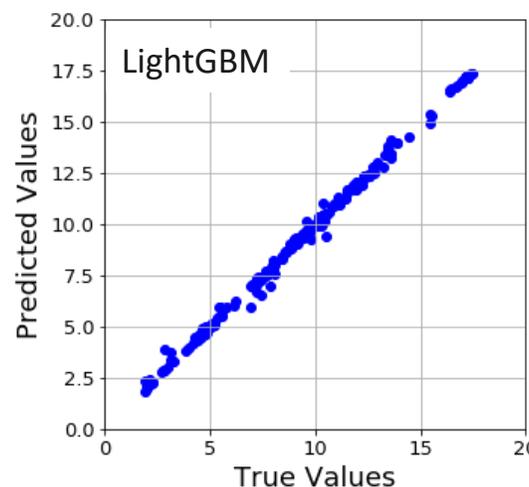
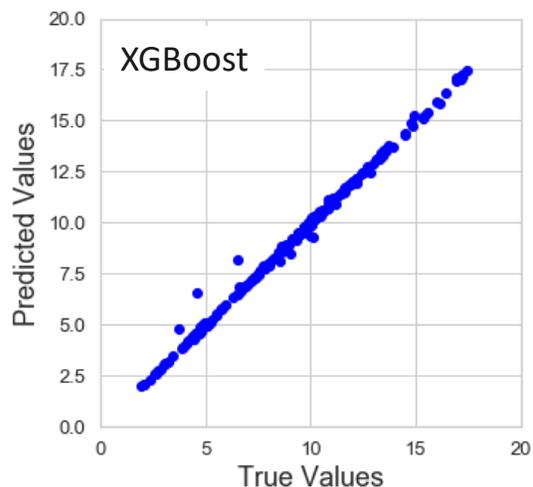
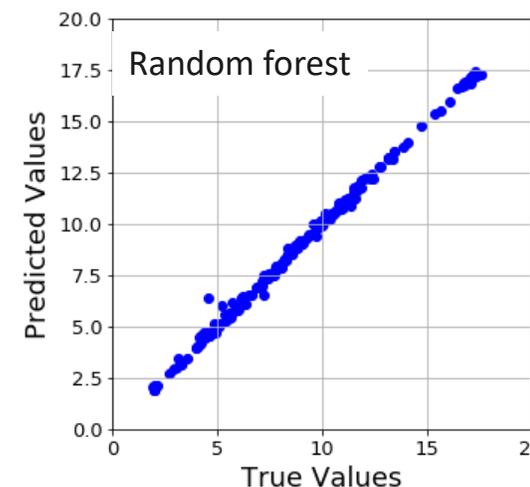
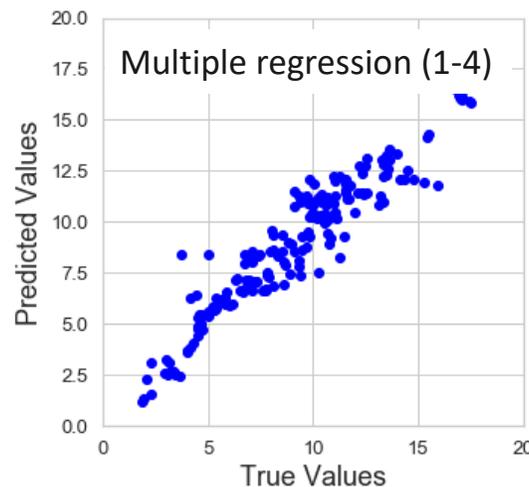
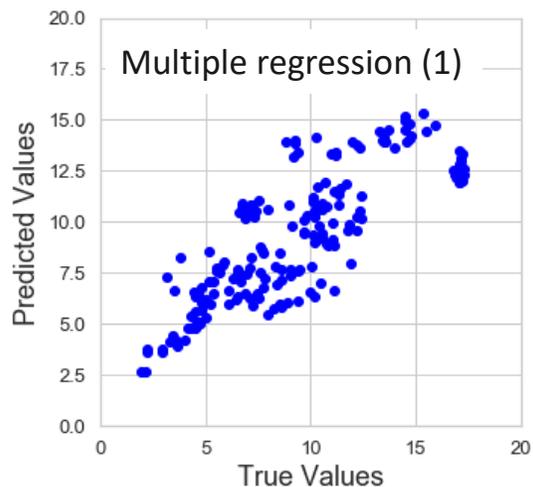
Coefficient of determination of various surrogate models

Method of machine learning	決定係数 $R^2$ (評価データ)
Linear Multiple regression (1st order)	0.6536
Multiple regression (1st ~ 4th order)	0.9149
Random forest	0.9975
XGBoost	0.9964
LightGBM	0.9964
DNN	0.9966

## 2. 基本形：スカラー出力の予測

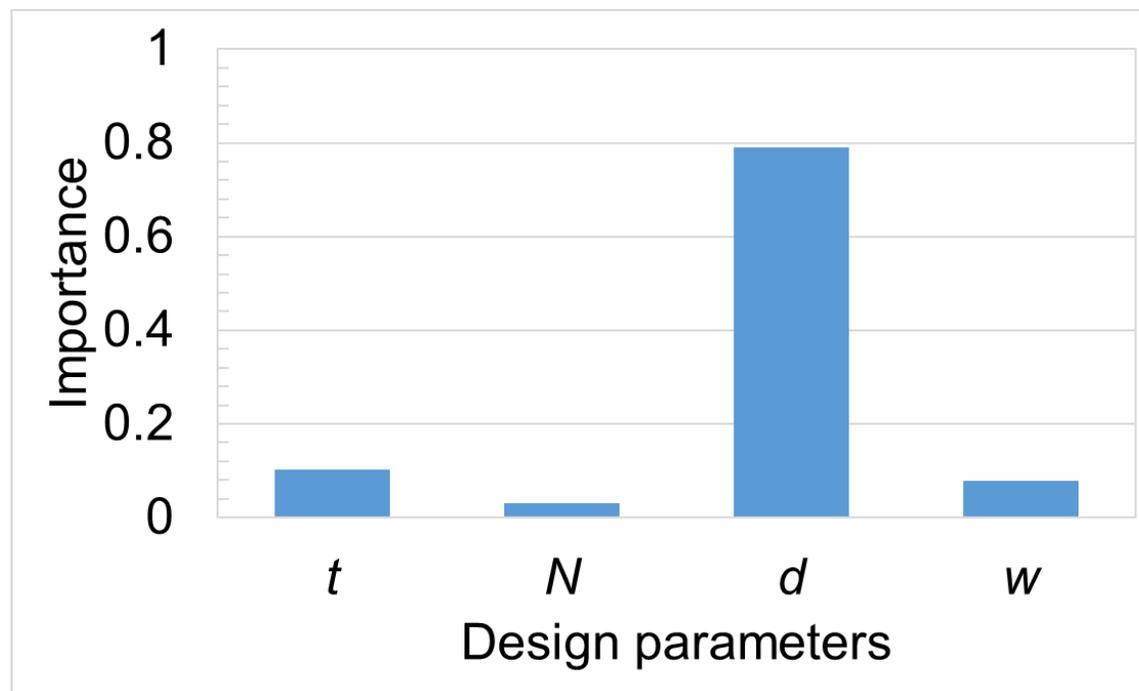
線形は厳しい／決定木系とDNNは良い

- 各手法の真値と予測値の比較（参考）



## 2. 基本形：スカラー出力の予測

- 設計パラメータの重要度 ～Random Forestの場合～
  - 深さ  $d$  が強度に及ぼす影響が支配的、本数  $N$  と幅  $w$  および破裂板の厚さ  $t$  が限定的  
 $N$  と  $w$  については納得 → 有用な知見  
 $t$  は  $d$  と相関が強く、重要度の解釈は注意



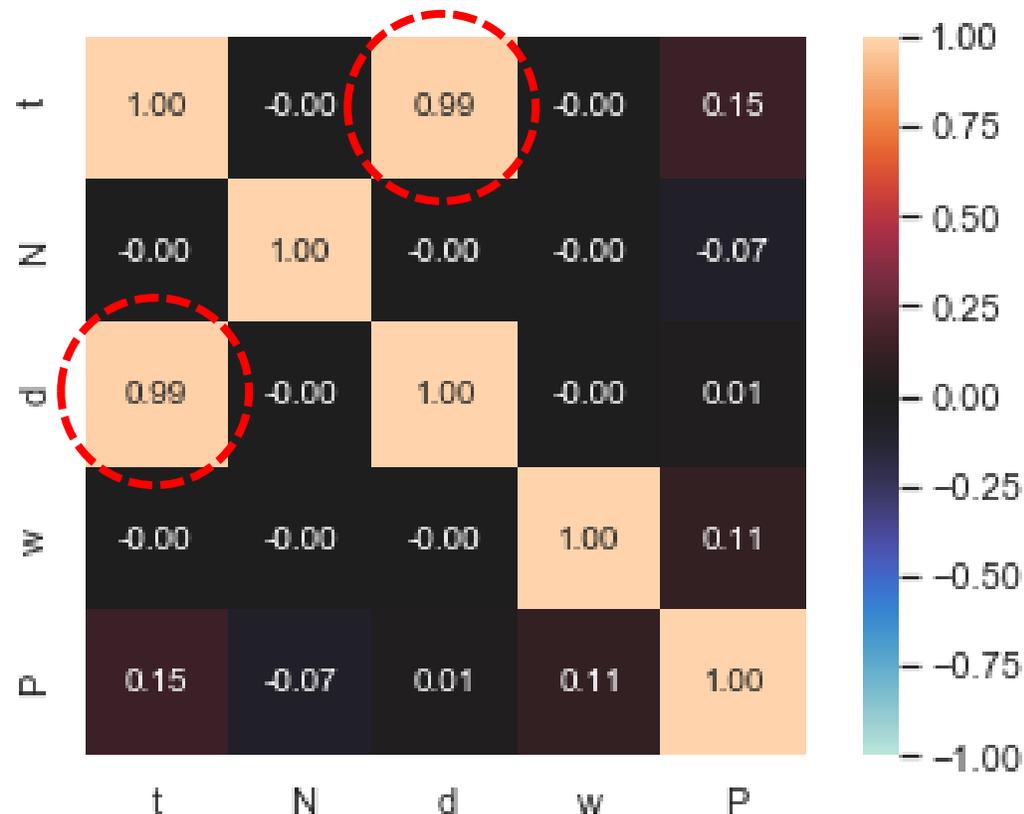
## 2. 基本形：スカラー出力の予測

- 設計パラメータの相関関係

- 破裂板の厚さ  $t$  と切り欠き溝の深さ  $d$  は強い相関

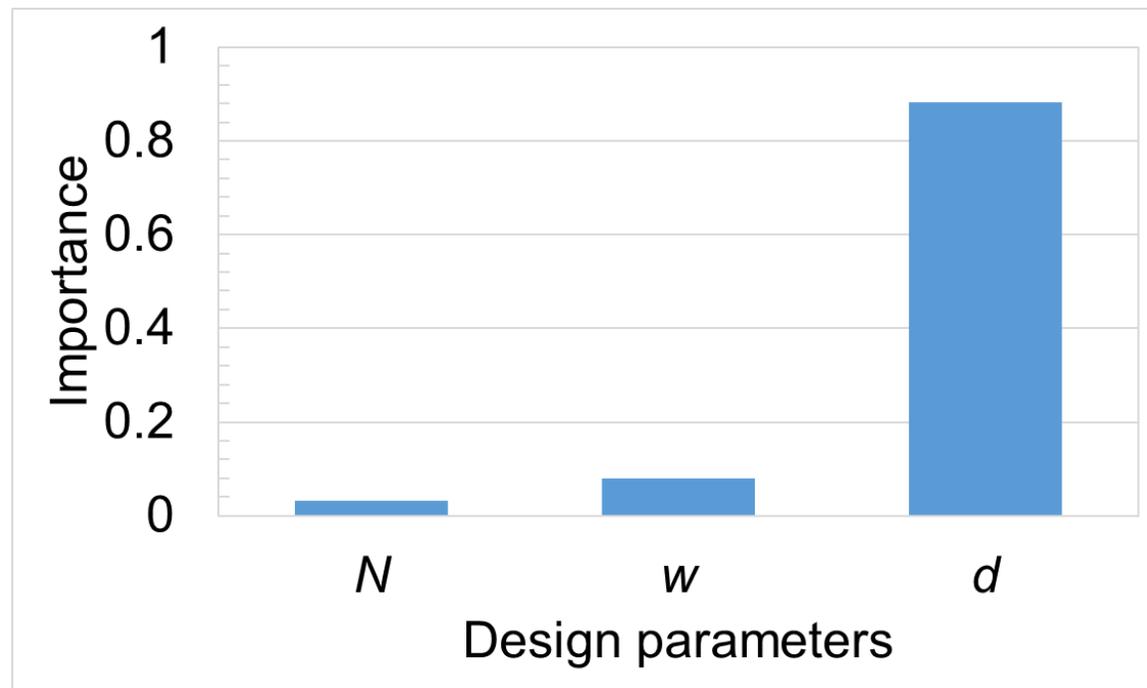
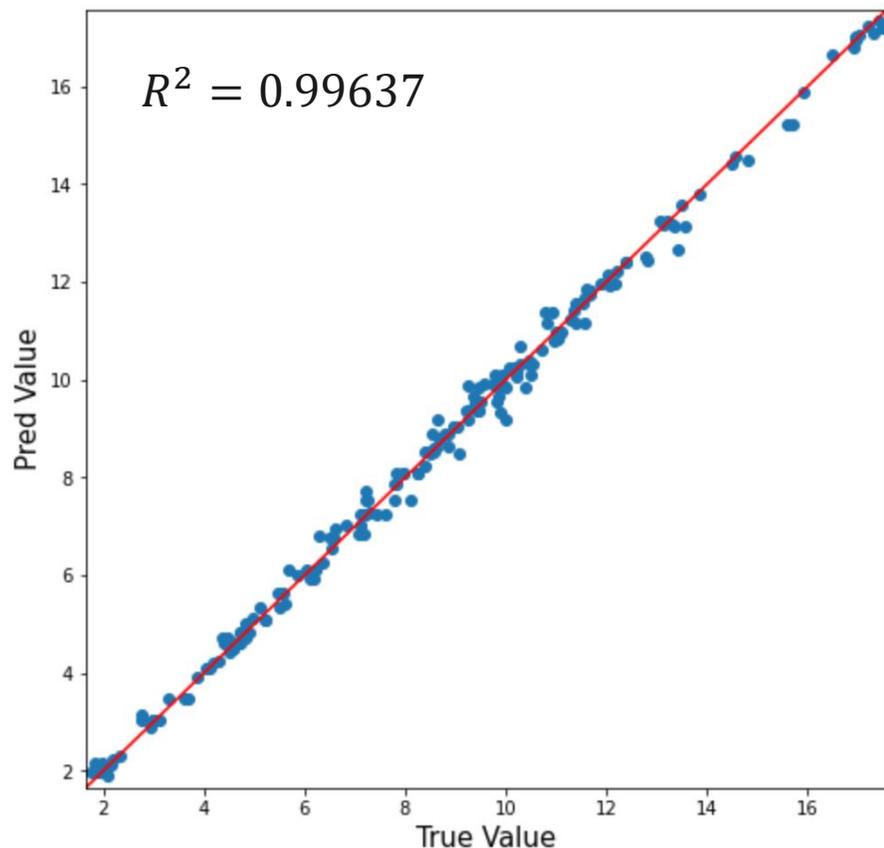
多重共線性の問題（各説明変数間に強い相関関係が存在）

重要度は相関で動くので注意



## 2. 基本形：スカラー出力の予測

- 設計パラメータの重要度 ～Random Forestの場合～
  - 厚さ  $t$  を除外 ( $d$  が代表) した場合のサロゲートモデル



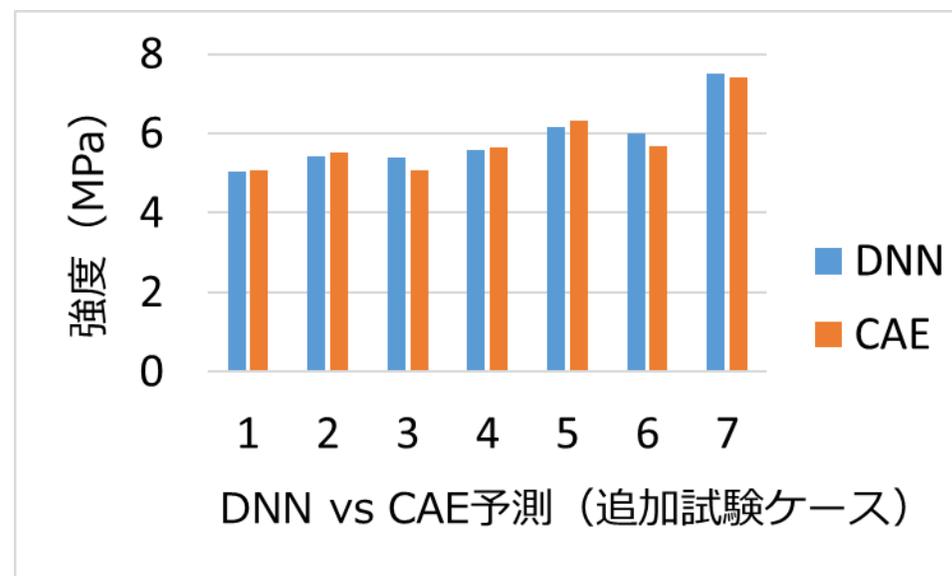
## 2. 基本形：スカラー出力の予測

### ・ 汎化性能の検証

- ▶ 汎化評価の結果、決定木よりDNNが最も高精度（追加試験データでも良好に一致）
- ▶ CAE（1ケース：1211s/8core）→ 予測（約1s）：1200倍以上の高速化
- ▶ 設計現場でのリアルタイム判断・探索（最適設計の当たり付け）が可能

手法比較（汎化評価の要点）

機械学習手法	平均絶対誤差 (%)
Random Forest	9.51
XGBoost	9.59
LightGBM	7.93
DNN	2.87



「当たる」 + 「速い」 = CAEは設計の道具に

# 目次

1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置付け
2. 基本形：スカラー出力の予測
3. 学習データの削減：効率的なサンプリング
4. 高度化：履歴・場の予測
5. まとめ：現場実装の論点と今後

### 3. 学習データの削減：効率的なサンプリング

- 空調圧縮機破裂板の強度予測
  - ▶ サロゲートモデルの構築には、CAEによる学習データの作成にコストがかかる  
力技：960ケースの学習データ
  - ▶ 少ない学習データで、高精度なサロゲートモデルを効率よく構築したい
  - ▶ サンプリング：どこをCAEで計算するかを決めること

### 3. 学習データの削減：効率的なサンプリング

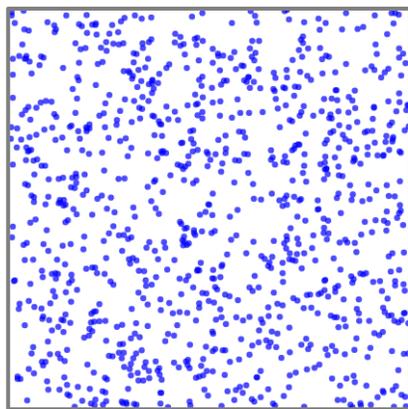
- ・ サンプリング手法

- ▶ 事前決定型

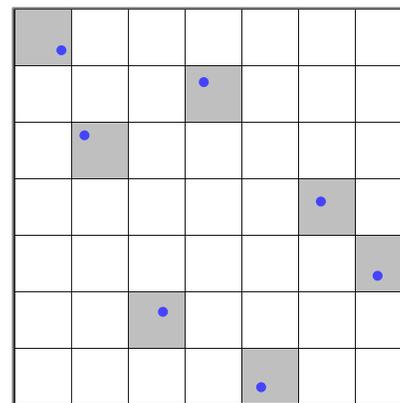
定義域を事前にムラなく均一にサンプリング

多峰性や連続性など目的変数の特性を反映しにくく、サンプリング効率の向上が困難

e.g. ランダムサンプリング、ラテン超方格法



ランダムサンプリング



ラテン超方格法

### 3. 学習データの削減：効率的なサンプリング

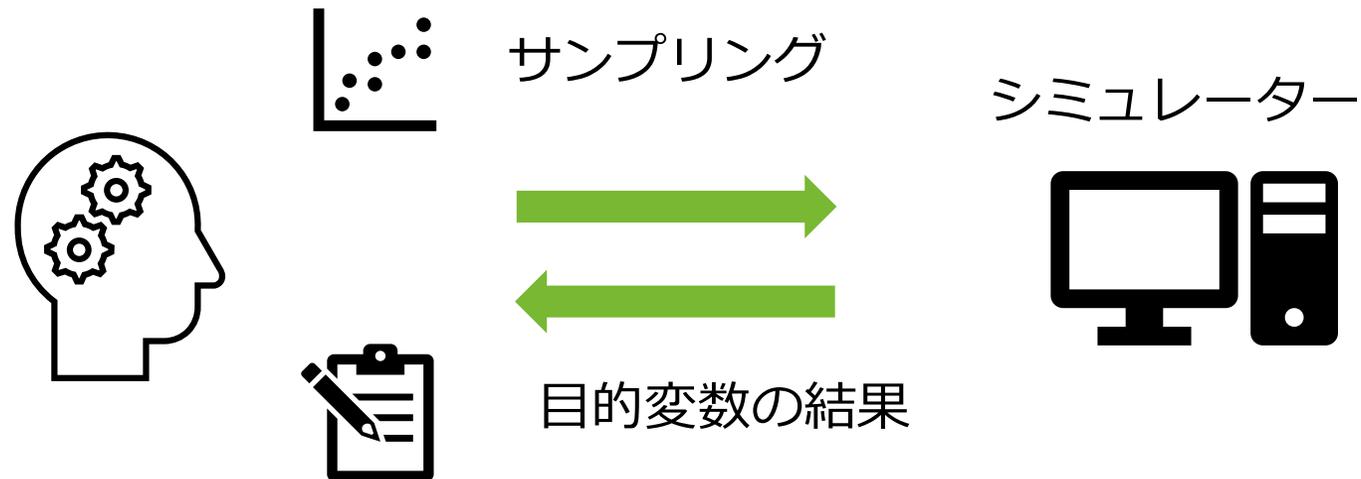
- ・サンプリング手法

- ▶ アダプティブ（能動学習など）

CAEモデルを用いて目的変数を計算した点の情報をもとに、次に計算（サンプリング）すべき点を決める

適切な方策を定めることで、効率の良いサンプリングが期待できる

e.g., ボロノイサンプリング・能動学習



### 3. 学習データの削減：効率的なサンプリング

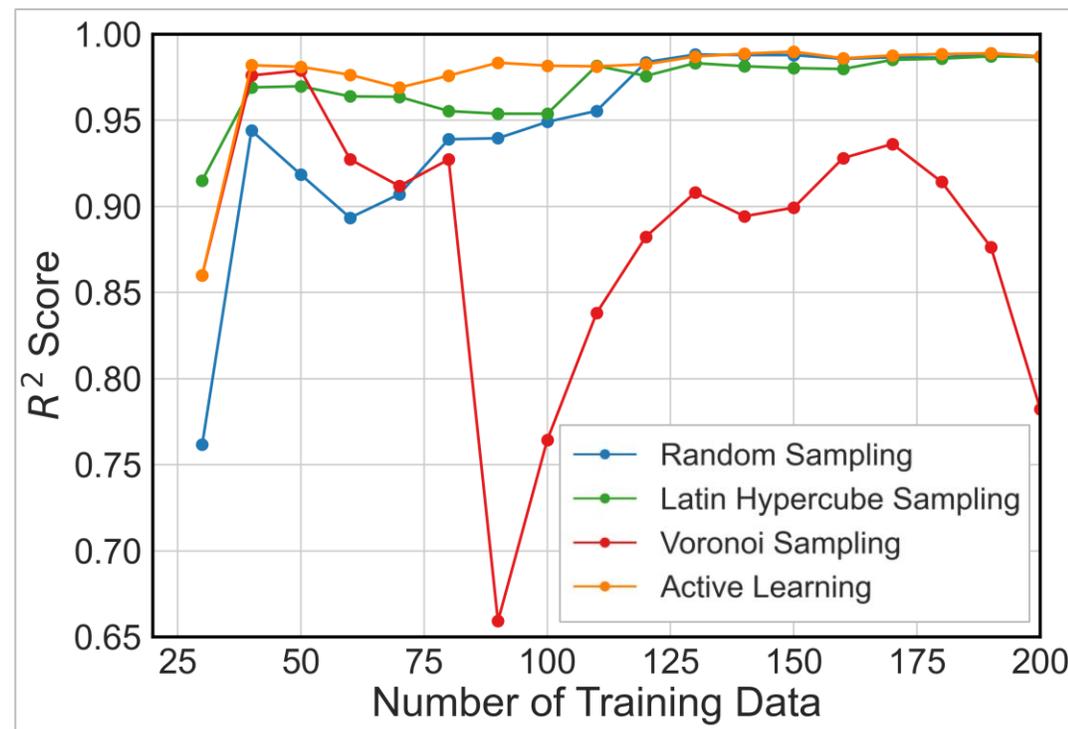
- 学習効率の比較

- ▶ 学習データ数（横軸）に対するサロゲートモデルの決定係数 $R^2$ （縦軸）の変化

- ▶ 能動学習において、最も学習効率が良い

能動学習により、少ないCAE計算で高精度化＋不確かさ低減が可能（本ケース）

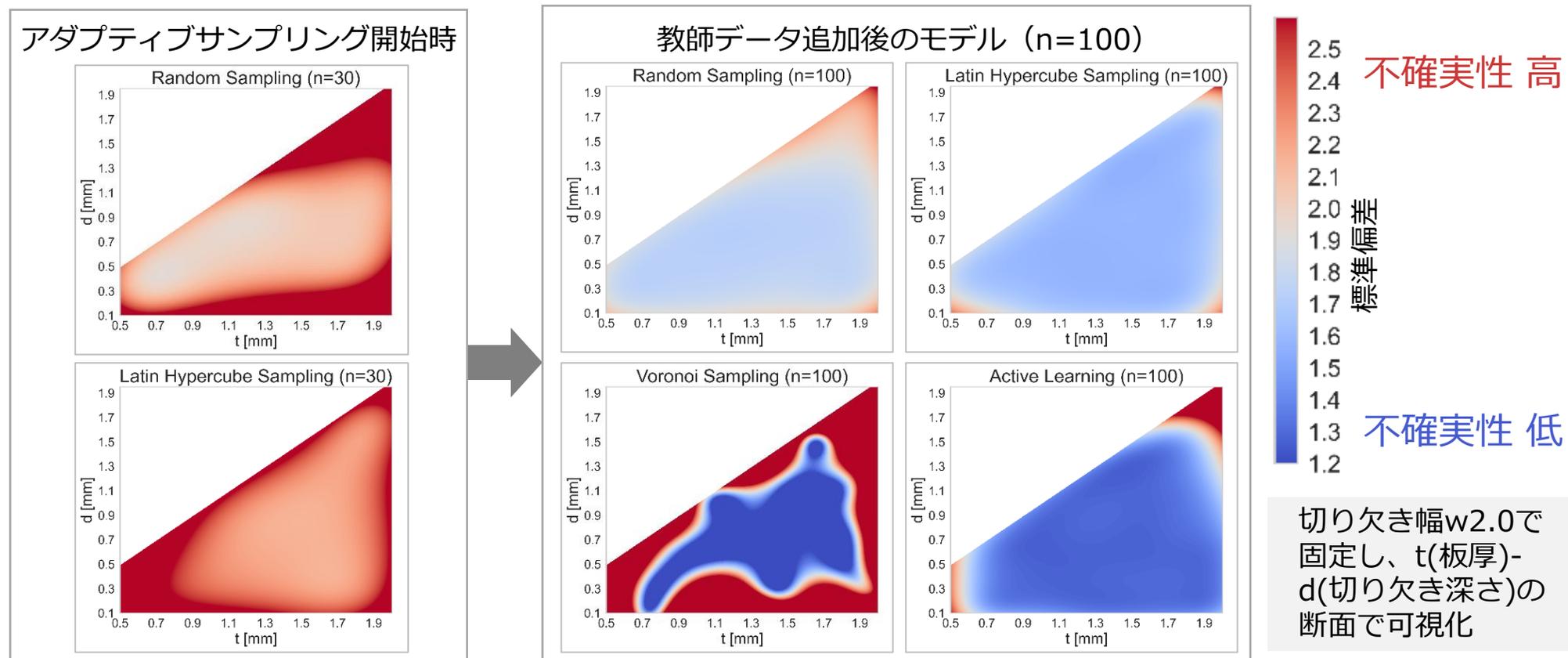
- ▶ 本ケースでは、ボロノイサンプリングの学習効率が低かった



### 3. 学習データの削減：効率的なサンプリング

#### ・不確実性の比較

- ▶ 不確実性（予測のばらつき）を可視化し、「どこが不安か」を把握
- ▶ 本ケースでは、**能動学習**において、不確実性が満遍なく低下



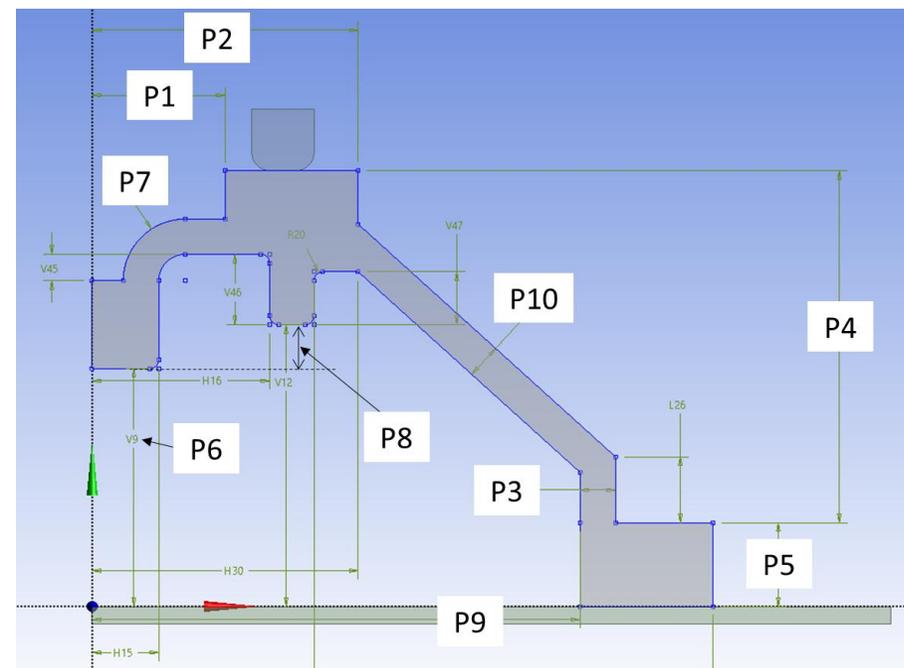
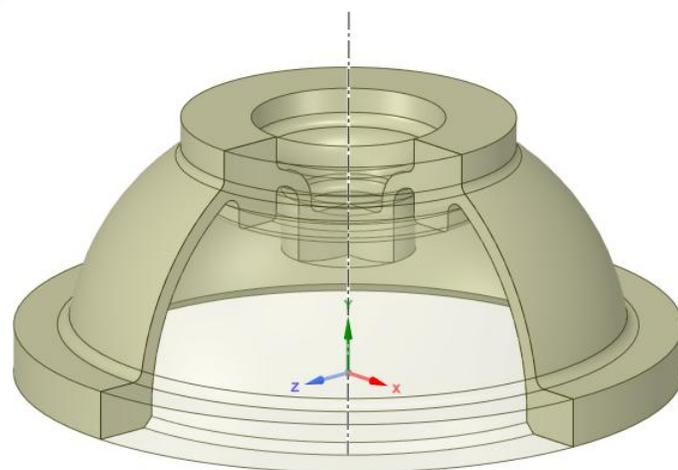
# 目次

1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置付け
2. 基本形：スカラー出力の予測
3. 学習データの削減：効率的なサンプリング
4. 高度化：履歴・場の予測
5. まとめ：現場実装の論点と今後

## 4. 高度化：履歴・場の予測

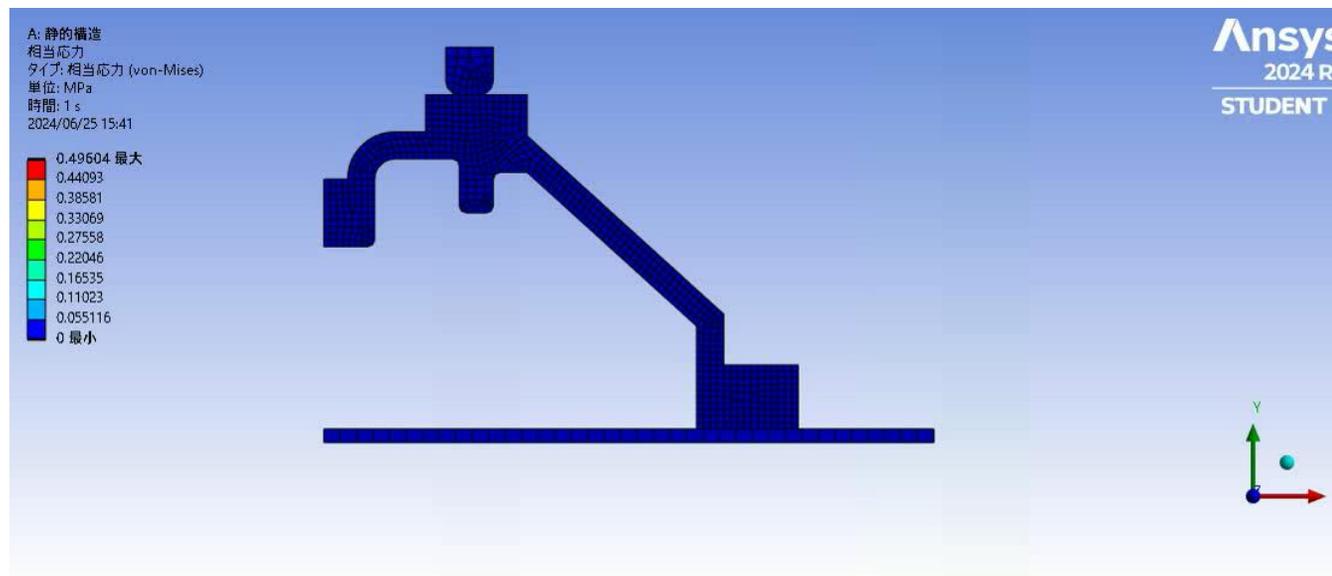
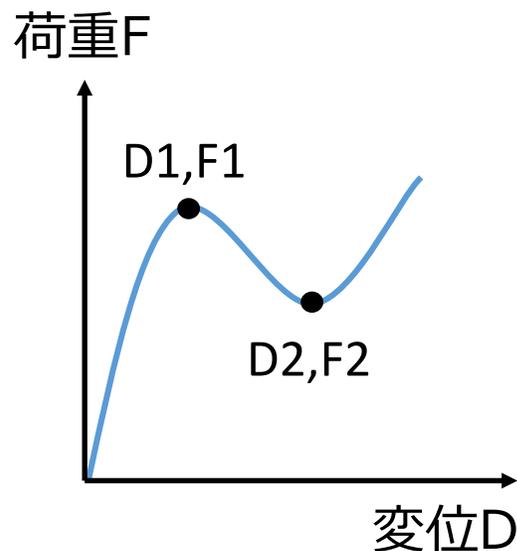
### ・キーボードダイアフラムの設計

- ▶ 代表的な設計変数10個だけでも組み合わせ数が膨大、形状だけで挙動予測が困難
- ▶ 座屈を伴う材料・幾何・境界の非線形問題で、CAE解析の難易度が高い
- ▶ CAE解析と機械学習の融合による高速予測可能なサロゲートモデル
- ▶ 打ち心地（クリック感）を設計変数から即時に見積もる



## 4. 高度化：履歴・場の予測

- キーボードダイアフラムの設計：打ち心地評価
  - ▶ フィーリングカーブ  
変位と反力グラフ
  - ▶ クリック率



$$\text{クリック率}[\%] = \frac{F1 - F2}{F1} \times 100$$

曲線そのものを当てる前に、設計判断に効く“指標”を定義

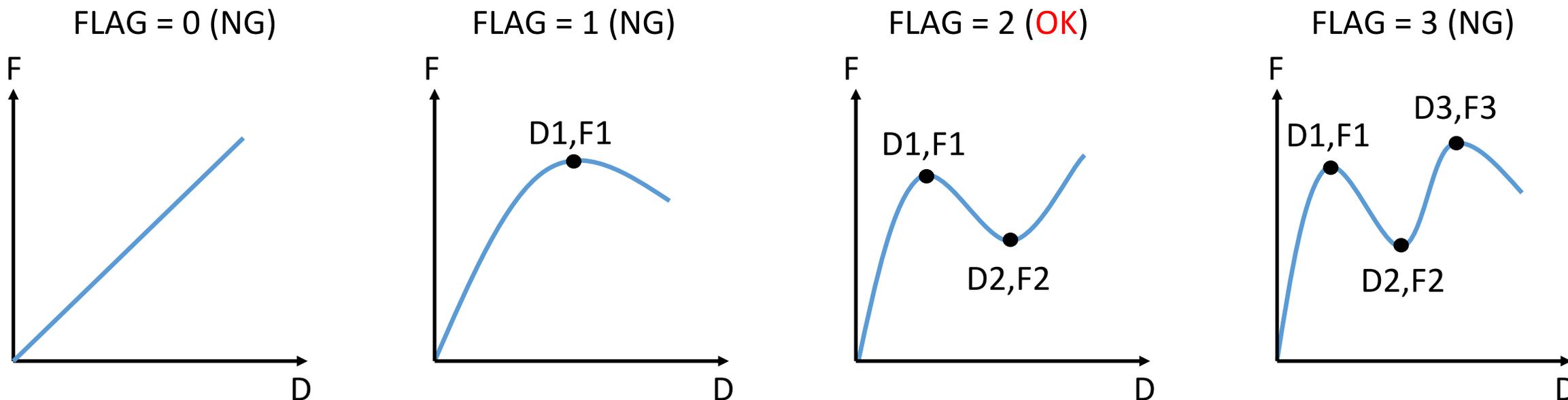
## 4. 高度化：履歴・場の予測

・ キーボードダイアフラムの設計：好ましい打ち心地形状の効率的探索

- ▶ フィーリングカーブの種類： 分類
- ▶ クリック率： 回帰
- ▶ フィーリングカーブの形状： PCA履歴
- ▶ 反力最大／最小極値の応力分布： POD場分布

成立条件：Flag = 2

目標レンジ：クリック率40~60%



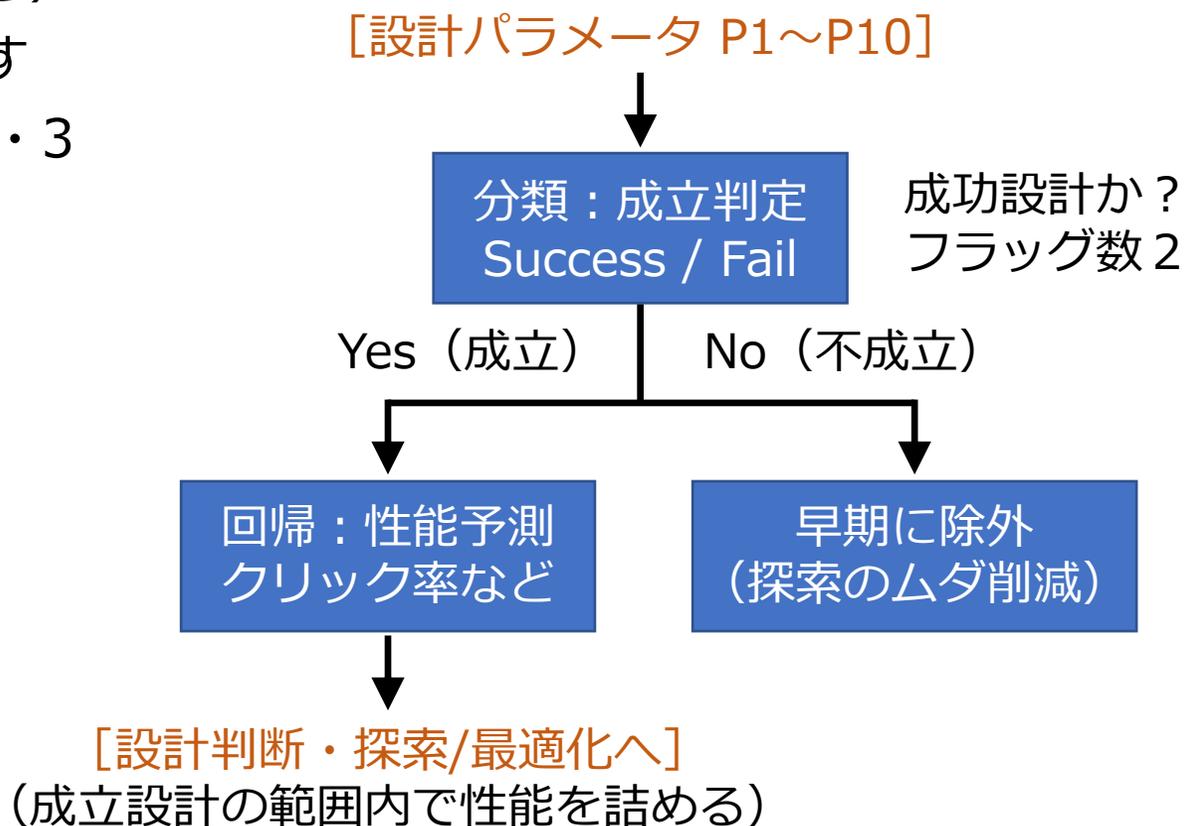
## 4. 高度化：履歴・場の予測

- 分類：まず「成立する設計」を選ぶ

- ▶ 入力パラメータだけで「打ち心地が成立する設計か？」を素早く判断したい  
(=後段の最適化・探索の入口を作る)

- ▶ 連続量を当てる前に、成功設計を通す  
失敗：計算失敗／フラッグ数0・1・3  
成功：フラッグ数2（成立設計）

回帰の前に、「設計として成立する領域」を分類で切り出す  
回帰精度と実装性を同時に上げる



## 4. 高度化：履歴・場の予測

- 分類の効果：探索のムダを減らし、回帰を当てやすくする
  - ▶ 多クラスより、目的に直結する成功／失敗の二値化が現場では有効
  - ▶ 二値分類で、高い識別性能（成功設計の抽出が安定）  
分割を変えても性能が大きく崩れず、汎化が確認できる
  - ▶ 成立しない設計を早期に排除（探索・最適化の効率化）  
後段の回帰（クリック率等）を「成立設計の範囲」に限定でき、精度・安定性が上がる

分類設定/手法	Accuracy (Test)	F1 (Test)	伝えたいこと
多クラス (NN)	0.78	0.80	目的（成立判定）に対しては精度が伸びにくい
<b>二値 (NN)</b>	<b>0.92</b>	<b>0.92</b>	<b>成立/不成立の判定が高精度</b>
二値 (Logistic 回帰)	0.80	0.81	NN (二値) が相対的に優位

分割を変えても指標が高水準で安定  
(参考) 100回ランダム分割で平均Accuracy≈0.90

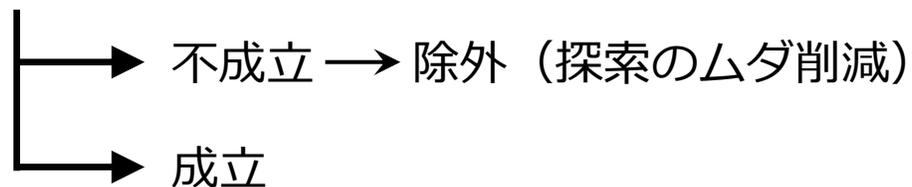
## 4. 高度化：履歴・場の予測

- ・ 回帰：設計成立の範囲でクリック率を当てる
  - ▶ 分類で「成立（フラッグ数2）」を通った設計だけに対して、クリック率（連続値）を予測し、打ち心地のよい設計を探索

[設計パラメータ P1~P10]



[成立判定（分類）]



[クリック率 予測（回帰）]



[40~60%を満たす設計を優先探索]

回帰手法（成立設計のみ）	評価 R <sup>2</sup> （テスト）
Random Forest	0.8869
XGBoost	0.9006
<b>DNN</b>	<b>0.9439</b>

「成立設計の範囲」に絞って回帰することで、設計判断に使える精度まで引き上げられる

## 4. 高度化：履歴・場の予測

- ・ 回帰の効果：汎化性能と未知データでの有効性
  - ▶ 成立判定（分類） + 性能予測（回帰）をつなぎ、探索のゲートを作る
  - ▶ 未知データでも崩れない = 「使える」サロゲートとして運用可能性が高い

検証の観点	指標	意味（設計現場）
汎化（100回ランダム分割）	回帰 $R^2$ 平均 $\approx 0.93$	分割「ガチャ」でも性能が安定
未知データ（独立1000件）	分類 Accuracy $\approx 0.92$	成立／不成立の見極めに使える
未知データ（独立1000件）	回帰 $R^2 \approx 0.94$	成立設計の性能予測が崩れない

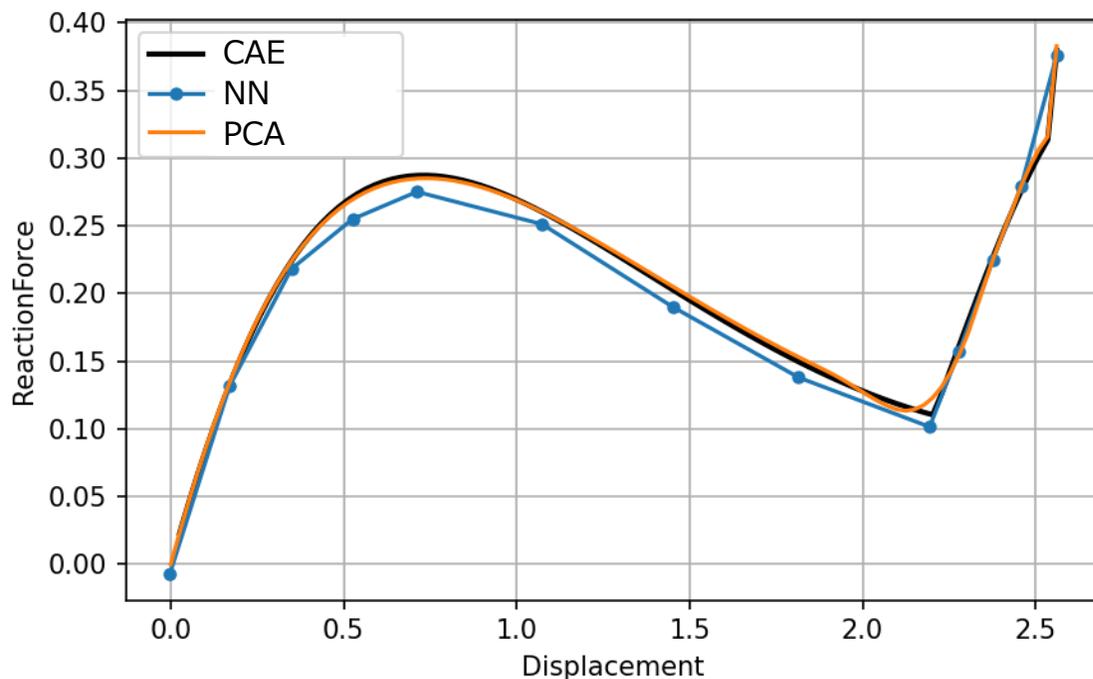
未知データでも精度が崩れないことが、  
設計現場で「使えるモデル」の最低条件

## 4. 高度化：履歴・場の予測

- 履歴予測：変位（ストローク）－反力曲線
  - 反力-変位の履歴（曲線）を高速予測し、設計探索へ
  - 曲線をPCAで低次元化 → 回帰（GPR）で主成分係数を予測 → 曲線を復元
  - 同等精度（RMSEほぼ同等）／推論はPCAが約82倍高速

手法	平均RMSE	平均推論時間 (s)
NN	0.01917	0.05549
<b>PCA</b>	<b>0.01818</b>	<b>0.000676</b>

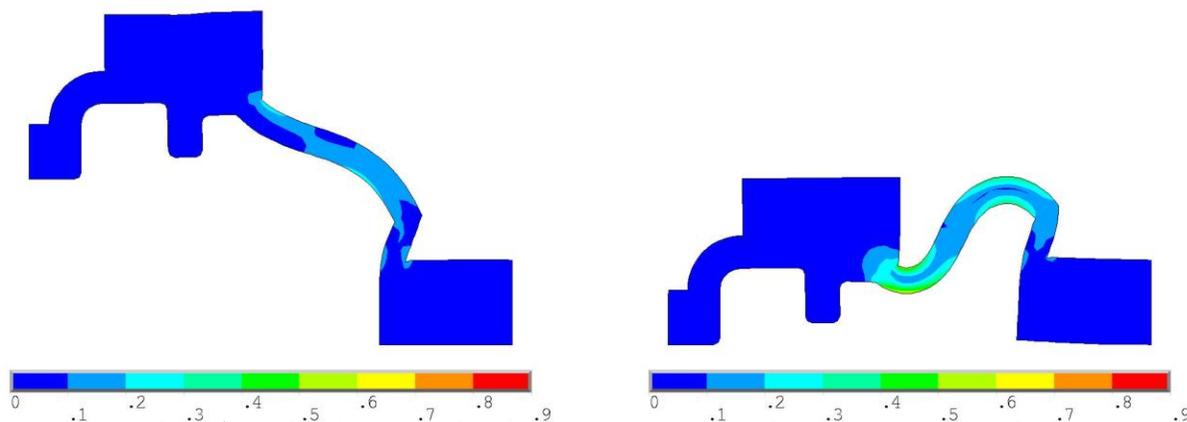
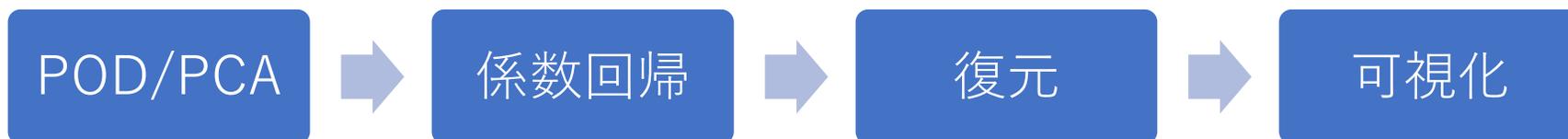
履歴予測では、精度が同等なら「推論の速さ」が勝つ。PCAにより、曲線予測を設計現場の即時判断に組み込める



※NNは特徴点13点を回帰し、急峻部の形状保持のため直線補間

## 4. 高度化：履歴・場の予測

- 場の予測：画像ではなく変位・応力場（数値）を予測
  - ▶ 画像（RGB）を直接回帰すると、カラーマップ変換・ジャギー・余白等の非本質な部分まで学習しやすい
  - ▶ 変位・応力場の数値を出力対象にし、最後に可視化（コンター表示）
  - ▶ PODで低次元化（=PCA相当） → 係数回帰 → 復元 → コンター（進行中）



反力が極大値と極小値における変形と相当応力分布

「画像を当てる」のではなく、「物理量の場を当てて可視化する」のが実用的

# 目次

1. CAEとAIの融合：CAEサロゲートモデルの位置付け
2. 基本形：スカラー出力の予測
3. 学習データの削減：効率的なサンプリング
4. 高度化：応答履歴・場の予測
5. まとめ：現場実装の論点と今後

## 5. まとめ：現場実装の論点と今後

- ・今日の結論
  - ▶ 分類 → スカラー → 履歴 → 場へ：予測対象を拡張できる
  - ▶ **力技** → **賢いサンプリング**へ：CAE計算を「打つ場所」が鍵
- ・現場実装の3論点
  - ▶ **データ設計**（サンプリング／追加計算の判断）
  - ▶ **外挿・不確かさ**（“当たらない領域”の検知）
  - ▶ **物理解釈**（相関・制約・安全側の判断）
- ・今後
  - ▶ CAE×AIで、HPCを設計現場に届ける

CAE計算は「数」ではなく「使い方」  
サロゲートは設計現場に届けるための橋渡し

# Take Home Message

**CAE×AIの鍵は、CAE計算の「数」ではなく「打つ場所」と「使い方」  
分類で成立領域を切り出し、スカラーから履歴・場へ予測対象を拡張、  
賢いサンプリングと不確かさ管理でHPCを設計現場の意思決定に届ける**

## CAEとAIの融合が切り拓く未来 ノーベル賞が証明する最先端技術の意義

計算科学とディープラーニングの研究者の受賞に見るCAEの可能性

# 2021年 – 計算科学（CAE）の力が世界を変えた

## ・ 2021年 ノーベル物理学賞

- ▶ 真鍋淑郎氏（プリンストン大学 上席研究員）が受賞
- ▶ 業績：地球気候の物理的モデリング、気候変動の定量化、地球温暖化の確実な予測（*For the physical modeling of Earth's climate, quantifying variability and reliably predicting global warming*）

地球気候を物理法則に基づき数値シミュレーション  
CO<sub>2</sub>の増加が地球温暖化に及ぼす影響を予測

- ▶ CAEにも通じる「物理モデリング」×「数値シミュレーション」の意義が世界的に評価



# 寄稿（参考）と予測

## ・CAEとノーベル賞に思うこと

NPO [特定非営利活動法人]

復刊第7号

# CAE

Computer Aided Engineering

# 懇話会

2021 秋・冬

第28号

BOUNDARYLESSで、  
知と心の交流の場を提供。



会誌 NEWS LETTER

### 新しい時代のCAE

#### 「CAEとノーベル賞に 思うこと」

劉 継紅  
ダイキン工業株式会社

米国プリンストン大学上級研究員の真鍋直樹博士が2021年のノーベル物理学賞を受賞しました。受賞理由は「地球温暖化を確実に予測する気候モデルの開発」とのことです。この気候モデルは、大気・海洋結合（耦合）モデルとも呼ばれ、物理法則をもとにして空気や水の流れにより温度などが変化する様子、大気と海洋を一体化して予測する計算モデルで、大気中の二酸化炭素濃度が気候に与える影響や地球温暖化など地球の気候をコンピュータでシミュレーションする基礎となっています。これは、理論科学と実験科学に次いで第三の科学と呼ばれる計算科学（コンピュータシミュレーションまたはCAE、以下、適宜使い分ける）の価値が高く評価されたということにはなりません。CAEに携わる一人の技術者として嬉しい限りです。余談ですが、現在、第四の科学とも言われることのあるデータサイエンスの中核技術をなすディープラーニングの開発関係者が、もしかしたら将来ノーベル賞を受賞するかもしれません。

真鍋博士が受賞した地球の気候をシミュレーションするための「気候モデル」に関する研究開発はまさに我々が日々行っているCAEの研究開発そのもので、これは、すなわち、CAEがノーベル賞の受賞対象になりうるということと理解しても差し支えないと思います。こう考えると、ノーベル賞もとても身近な存在になっているように感じます。

今日、CAEが研究開発や製品開発になくてはならない手法となっていることに異論を唱える人はいないでしょう。真鍋博士が大学の学術研究において開発した「気候モデル」はおそらく特許出願をしていなかったと思われませんが、企業の製品開発においては、製品保護の手段としてCAEの結果を活用したモノの数値限定の特許出願（設計事項として拒絶されることもあります）が、説得力を持って論理を組み立てれば登録される可能性は十分あります。やCAEにより発見された思いも付かないようなモノの機構や構造、構成などの特許出願が行われるようになっていきます。一方、CAE（シミュレーション）手法・モデルそのものについての特許出願はまだ少ないのが現状ではないでしょうか。筆者も20数年前に一度構造シミュレーション手法の特許を出願し登録されたことがありますが、基本的にCAE結果を活用したモノの特許出願を中心に行ってきました。遅まきながら昨年からシミュレーション手法・モデルの特許出願にも軸足を伸ばそうとしております。モノあつてのシミュレーション手法・モデルについて充分認識しているつもりですが、

企業の商品開発においては、モノの価値を重く見て、目に見えないシミュレーション手法・モデルの価値を低く見る傾向があるように感じます。モノより手法・モデル

に対する理解不足が原因で作成したCAEモデルの計算結果が信用できず、実際に事故やヒヤリハットにつながる例も後を絶ちません。CAE懇話会が、物理法則をより深く理解するための場を提供する役割をさらに強化し、技術者がスパイラルアップで基礎を固める一助になればと思います。

また近年、CAEとAI（データサイエンス）との融合によるサロゲートモデル（代理モデル）の作成に関する取り組みが活発になり、開発現場でのCAEのリアルタイム活用が期待されています。サロゲートモデルの作成で取り扱う学習データはシミュレーションによって生成されるので、CAEモデルの品質がサロゲートモデルの精度を決定します。CAEとAIとの融合が大きな流れになりつつある今日、物理法則を深く理解した上でのCAEモデルの作成がより一層求められます。

物理法則をもとにして複雑さをもたらす技術未熟を削り、物事の本質を見抜き、その本質をCAEモデルで表すことができれば、そのモデルを使って、製品の挙動やまだ見ぬ将来のことも予測することができるのである。

#### 著者プロフィール

劉 継紅  
[現在の所属]  
ダイキン工業株式会社  
[所属学会]  
日本機械学会  
[趣味]  
読書、スポーツジムで体を動かすこと、サウナ、散歩  
[現在の関心事]健康、社会動向、AI

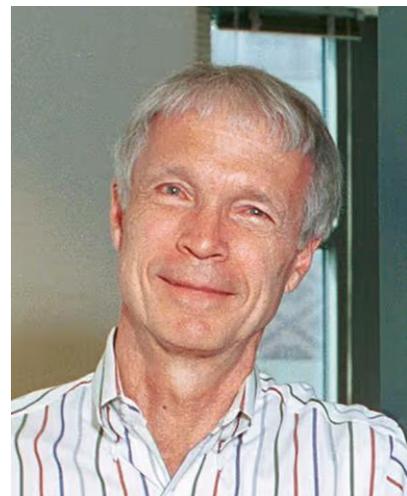
【CAE懇話会：NEWSLETTER 2021年秋・冬号】 5

者として嬉しい限りです。余談ですが、現在、第四の科学とも言われることのあるデータサイエンスの中核技術をなすディープラーニングの開発関係者が、もしかしたら将来ノーベル賞を受賞するかもしれません。

# 2024年 – 予測が現実に

## ・ 2024年 ノーベル物理学賞

- ▶ ジョン・ホップフィールド氏 (John Hopfield, プリンストン大学名誉教授) & ジェフリー・ヒントン氏 (Geoffrey Hinton, トロント大学名誉教授) が受賞
- ▶ 業績：人工ニューラルネットワークによる機械学習を可能にした基礎的な発見と発明 (*for foundational discoveries and inventions that enable machine learning with artificial neural networks*)  
AI、特にディープラーニングの進展に寄与
- ▶ もう一つの基盤技術であるAIが世界に認められた



John Hopfield



Geoffrey Hinton

# CAE × AI が導く次のフロンティア

- CAE（物理シミュレーション）とAI（データ駆動型技術）の融合
  - ▶ 物理ベース × データベースで加速する研究開発
  - ▶ **CAE × AI の融合的な視点** が重要