I－9　応答曲面法による材料ミクロ組織内の力学特性の同定

東北大学　学生員　○日下　桂一
学生員　松井　和己
正員　寺田　賢二郎

1.　はじめに

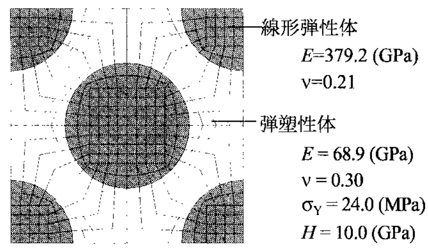
均質化法に基づいたマルチスケール解析[1)]によって，材料の微視領域で観察される力学現象に起因した巨視的な機械特性を評価することが可能となった．たとえば，及川ら[2)]は金属材料の微視構造に注目し，その違いによって巨視的に観察される加工硬化特性やBauschinger効果の程度が異なることを示した．さらに，マルチスケール解析によって，Bauschinger効果発現のメカニズムを微視領域における力学挙動という観点から説明した．

このように，マルチスケールモデリングによって複雑な材料特性の解明が可能になるものと期待されるが，実現象を忠実に再現するシミュレートのためにはまだ多くの課題が残されているといわざるを得ない．一般に，マルチスケール解析において微視構造としてモデル化される領域は非常に小さいものであり，この領域に対して通常の材料試験から材料の機械特性を得ることは困難である．また，このような微視領域には未だ力学的なメカニズムが解明されていない現象も多く残されている．

本研究では特に微視領域における力学特性に注目し，この同定を試みる．この同定問題を，実験から得られた応力・ひずみ関係とマルチスケール解析との誤差を最小化する最適化問題であると設定し，これを満たすような微視領域の力学特性を同定する．最適化手法には応答局面法を採用し，簡単な例題によって本手法の有効性を示す．

2.　応答曲面法による最適化[3)]

応答曲面法は複雑あるいは未知の目的関数や拘束条件をいくつかのサンプリング点での情報を元にして大域的にある関数で近似しようとする手法である．本手法は独立変数の範囲を決定するための実験計画法，応答と独立変数の適切な近似関係を成立させるような統計的手法，望むべき応答値，すなわち最適解が得られる独立変数を決定するような最適化手法からなる．以下に一連のプロセスを示す．



図−1　弾塑性体のミクロモデル

まず応答曲面の近似モデルを作成する．一般的に，ある力学応答 y はその影響因子 $x_1, x_2, \cdots, x_k$ に依存することから，次のような関係が成り立つ．

$$y = f(x_1, x_2, \cdots, x_k) + \varepsilon \tag{1}$$

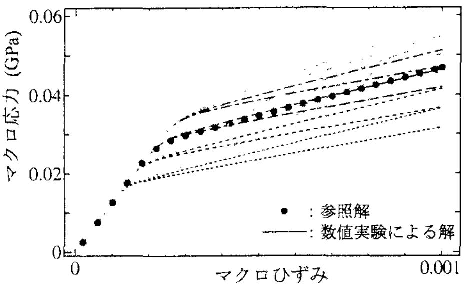
この応答関数 f の形式は未知，あるいは複雑なものであり，これの近似関数を応答曲面と呼ぶ．また ε はその他の因子による影響を表し，観測誤差などに対応する．本研究では応答曲面の近似関数として，次のような完全2次多項式を考える．

$$\begin{aligned} y_i \;=\; & \beta + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_k x_k \\ & + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \cdots + \beta_{kk} x_k^2 \\ & + \beta_{12} x_{i1} x_{i2} + \cdots + \beta_{(k-1)k} x_{k-1} x_k + \varepsilon \end{aligned} \tag{2}$$

この近似関数の未知の係数 $\boldsymbol{\beta} = \{\beta_1, \beta_2, \cdots \beta_{kk}\}^T$ を，いくつかのサンプリング点での結果を用いて最小二乗法によって決定する．また，最小二乗法によって得られた応答曲面がどれほどの適合性，信頼性があるか統計学的に検討する必要があるため，各係数の適合性を評価するための t 検定を行う．

最後に得られた応答曲面を用いて最適化を行う．一般には数理的最適化手法が用いられるが，本研究では二次の完全多項式を仮定しているため解析的に最適解を求めることも可能である．

〒 980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 06
Key Words: 応答曲面法，弾塑性マルチスケール解析



図−2　数値解析による応力ひずみ関係

3.　数値解析例

本節では簡単な数値解析例を示し，本手法の有効性を示す，ここではあらかじめ解が既知である問題に対して,応答曲面法を適用しその妥当性を検証する.

(1)　問題設定

あらかじめ**図−1**に示す微視構造に対して，巨視的に一様引っ張りとなるマルチスケール解析を行った(**図−2**中参照解). ここで材料Aは降伏関数が次式で与えられる線形の硬化則のみを仮定した弾塑性体，材料Bは線形弾性体であるとした.

$$f(\sigma,\alpha) = \| \operatorname{dev}(\sigma) \| - \sqrt{\frac{2}{3}}(\sigma_{\mathrm{Y}} + \mathrm{H}\alpha) \qquad (3)$$

この微視領域における材料のうち，材料Aの塑性パラメータ(σ_Y, H)を未知であるとして，巨視的な応力・ひずみ関係があらかじめ求めたものと等しくなるような値を応答曲面法によって同定する.

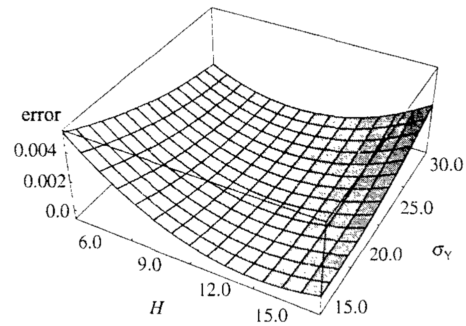
巨視的な応力・ひずみ関係における両者の差errの二乗和を目的関数とすると，この同定問題は次のような最適化問題となる.

$$\underset{\sigma_Y, H}{\text{minimize}}\, g = \underset{\sigma_Y, H}{\text{minimize}} \sum_{i=1}^{n} (err_i)^2 \qquad (4)$$

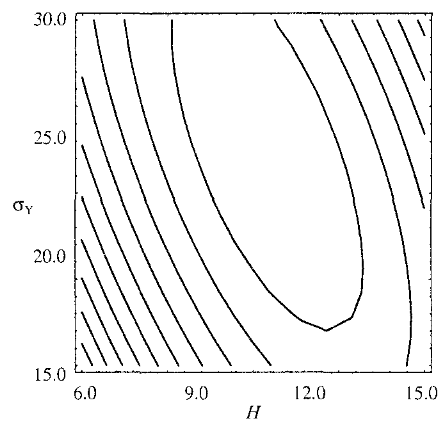
(2)　解析結果

応答曲面を求めるために,設計変数をそれぞれ$\sigma_{\mathrm{Y}} = \{15, 20, 25, 30\ (\mathrm{MPa})\}$, $H = \{6, 9, 12, 15\ (\mathrm{GPa})\}$と変化させてマルチスケール解析を行った. こうして得られた16個の数値実験結果(**図−2**)それぞれについて参照解との誤差の二乗和(応答)を求め,これらから最小二乗法およびt検定によって得られた応答曲面を**図−3**に示す.

ここで得られた近似関数は凸関数であるため，次のような簡単な停留条件によって最小値を与える設計変数σ_{Y}, Hを求めることができる.



図−3　目的関数 error の関数形



図−4　目的関数 error の等高線プロット

$$\frac{\partial g}{\partial \sigma_Y} = 0, \quad \frac{\partial g}{\partial H} = 0 \qquad (5)$$

ここから得られた値は，それぞれ$H = 10.7459(\mathrm{GPa})$, $\sigma_Y = 23.724(\mathrm{MPa})$であり,参照解との誤差がそれぞれ7.4%, 1.15%であることから，本手法が未知の材料特性の同定法として有効であることが分かる.

4.　おわりに

マルチスケール解析と応答曲面法により,巨視的な応力・ひずみ関係から微視領域における非線形機械特性を同定することができた.

参考文献

1) Terada, K. and Kikuchi, N.: A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.190, pp.5427-5464, 2001.
2) 及川兼司，松井和己，寺田賢二郎，秋山雅義，久保木孝: 鋼の微視的構造に起因する巨視的弾塑性特性に関する考察，計算工学講演会論文集，Vol.6, pp.453-454, 2001.
3) Myers, R.H. and Montgomery, D.C.: Response surface methodology, John Wiley & sons ,INC, 1995.