応答曲面法を利用した材料探索技術の開発

Development of Material Optimization Technology using Response Surface Method

〇正 野中紀彦 (日立機械研)

Norihiko NONAKA, Hitachi Ltd.,
Mechanical Engineering Research Laboratory, 832-2, Horiguchi,
Hitachinaka, Ibaraki 312-0034, Japan

正 岩崎富生 (日立機械研)

Tomio IWASAKI, Hitachi Ltd.,
Mechanical Engineering Research Laboratory, 832-2, Horiguchi,
Hitachinaka, Ibaraki 312-0034, Japan

Key Words: Response surface model, Kriging model, Material search, Optimization technology

Material searching technology using optimization technology has been developed. The present technology has two key features: (1) Kriging model is used as a response surface method in order to search the target material, (2) the Kriging model can be constructed by a fewer sampling points by developed sampling selection method. The effectiveness of the proposed technology was demonstrated by applying it to the searching material of electrode files. It was found that the technology reduced the material searching time by 70% compared with that for previous way.

1. はじめに

グローバル事業を展開していくためには、市場の要求に素早く対応できるスピードと品質が設計開発に要求されている。これを実現するためには、解析主導設計の徹底活用が急務である。設計開発期間の短縮化に大きく寄与するシミュレーションを活用した設計探索、最適設計技術は極めて重要となっている。このため、機械構造物を対象とした最適化手法は数多く提案されている^(1,2)。一方、材料探索において、分子動力的シミュレーション技術の発達により、材料の拡散係数などの物性値を予測することが可能になっている⁽³⁾。しかし、材料の決定のために全ての材料のシミュレーションを実施するため、非常に多くの時間を費やしていた。このため、材料選定期間の短縮化が必要である。

そこで本研究では、短時間で材料選定を行うことを目的として、応答曲面法を利用した材料探索技術を開発する。本報では、本技術の概要と共に適用例を報告する。

2. RSM を利用した材料探索

材料探索とは、与えられた材料の中から拡散係数などの指標となる物性値が小さい材料を選定することである。このため、最適化技術を適用することにより、所望の材料を効率的に見出すことができると考えられる。最適化計算では、繰返し計算を行うため、最適化時間の短縮化が課題であり、その解決方法として応答曲面法を利用した最適化手法が提案されている⁽⁴⁾。応答曲面法は、設計空間内を補間関数により近似し、通常のシミュレーションに代替して、補間関数により短時間で応答値を得るものである。本研究では、応答曲面法の材料探索への適用を検討する。

応答曲面法は連続関数を仮定している。しかし、アルミニウム、銅などの材料の物性値は、原子番号表から離散的である。ここでは材料間の物性値は連続的変化すると仮定し、応答曲面法を適用した。応答曲面モデルは、2次関数近似モデ

ルや、ニューラルネットワークの一種である RBF (Rational Basis Function) モデルなど数多く存在する。ここでは、近年注目されている Kriging Model⁽⁴⁾を利用した。

次に材料探索の処理フローを検討する。分子動力的シミュレーションは多くの解析時間を要する。このため、少ないサンプリング数で必要な情報が得られる応答曲面を構築することが必要である。そこで、図1に Kriging model の構築方法を示す。ここで応答値は材料探索における目的関数、設計変数は材料物性である。④、⑤は、構築した Kriging model を利用し、設計空間内に 500 点程のサンプリング点を発生させ、サンプリング点に対応する応答値を算出することで、図2に示す散布図を表示する。⑥において、次サンプリング点を選択する際には、目的関数が最小となる設計変数値付近の材料を選択する。通常の最適化問題では、最適化アルゴリズムにより、最小点を算出することが可能である。しかし、材料探索において、材料間の物性値が離散データとなる。

Fig. 1 Construction of Kriging model

Fig.2 Scatter diagram

このため、図2で示す散布図を利用し、目的関数が最大付近に対応する材料を選択することで、次サンプリング点を決定する。Kriging modelを構築後、材料探索を実施する。検討すべき設計変数となる材料の物性値を、Kriging modelに入力し、目的関数である応答値を算出することで評価する。このように、分子動力学シミュレーションによって算出していた材料物性値評価を、応答曲面で代替することにより材料探索する。

3. 適用例

図3に示す表面弾性波フィルタのコンデンサ構造において、強誘電体膜 LiNbO_3 に接触して形成する電極膜の選定問題へ適用する。電極膜は、マイグレーションという拡散起因の気泡が発生しないように界面での自己拡散係数ができるだけ小さい材料を選ぶ必要がある。そこで、自己拡散係数が最小となる材料を選定する。ここで探索対象の材料として31種類の元素を選んだ。設計変数は、元素の主な材料物性値である短辺(a)、長辺(b)の格子定数、融点、凝集エネルギーであり、目的関数は自己拡散係数である。また、Kriging modelを構築する際の初期サンプリング数は6点とし、次サンプリング点は4点、繰返し回数は1回とした。初期サンプリングにおける設計空間の散布図を図4に示す。図から凝集エネルギーにはピークが存在し、短辺の格子定数は正の相関、融点には負の相関があることが読み取れる。これらの設計空間の状態から、次サンプリング点4個を決定した。次に10個のサンプリング点を利用し、Kriging modelを再構築し、残りの材料の自己拡散係数を予測した。

予測した自己拡散係数が大きい元素3個に対し、予測値と、その後確認解析を実施したときの自己拡散係数とを比較したものを表1に示す。表が示すとおり、3%以内で応答値を予測できていることが分かる。以上により、31種類の材料に対して、従来全ての材料において分子動力学シミュレーションを実施して材料選定をしていたが、本手法により10ケースの計算で選定できることを確認した。これにより、材料探索時間を1/3に短縮化できることを確認した。

Fig.3 Surface acoustic wave filter

Fig.4 Scatter diagram

Table 1 Comparison of predicted value and calculated value

	Predicted value (Log(m²/s))	Calculated value (Log(m²/s))	Error (%)
1	-13.9	-14.1	1.5
2	-11.4	-11.1	3
3	-11.1	-11.04	0.9

4. まとめ

応答曲面法を利用した材料探索技術を開発し、以下の結論を得た。

- (a) 少ないサンプリング点で適切な応答値が得られるKriging modelを利用した応答曲面構築手法を開発した。
- (b) 誘電体膜 LiNbO_3 に接触して形成する電極膜の選定問題に適用し、自己拡散係数最小の電極材料の探索期間を、1/3に短縮できることを確認した。

5. 参考文献

- [1] 三木光範, 他3名: 実最適化問題における進化的アプローチの有効性: 日本航空宇宙学会誌, 52, 608, (2004-9)
- [2] 杉村和之, 他2名: ニューラルネットワークを用いた創発的最適化設計システムの開発と翼形状最適化問題への適用: 日本機械学会 第5回最適化シンポジウム, (2002-10)
- [3] Tomio Iwasaki, Molecular dynamics study of adhesion strength and diffusion at interfaces between interconnect materials and underlay materials, Computational Mechanics, 25, 78-86, 2000
- [4] Hyoun-Seog Chung, et. al., Using Gradients to Construct CoKriging Approximation Models for High-Dimensional Design Optimization Problems, 40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, January 14-17, 2002/Reno, NV
- [5] Shinkyu Jeong, et. al., Kriging-Based Probabilistic Method for Constrained Multi-Objective Optimization Problem, AIAA Paper 2004-6437, AIAA 1st ISTC, Chicago, September, 2004.