

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 5 月 2 日現在

機関番号：32612

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24360047

研究課題名(和文) 確率的マルチスケール法の理論体系化と応用探索ならびに実用的システム開発

研究課題名(英文) Systematization of stochastic multiscale theory, study on its applications and development of practical system

研究代表者

高野 直樹 (Takano, Naoki)

慶應義塾大学・理工学部・教授

研究者番号：10206782

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,500,000円

研究成果の概要(和文)：工業材料や生体組織にみられる階層構造のマルチスケールモデリングにおいて、ミクロスケールの情報に含まれる不確かさ・ばらつきを考慮した確率的マルチスケール法の体系的な数理モデル記述法を見出し、その解法として一次漸近展開に基づく確率均質化法を核としたシミュレーション法を確立した。球状多孔質材料、コーティング粒子分散型複合材料ならびに多孔質な生体海綿骨にそれぞれ適用し、マクロ特性の分散の予測、確率的感度解析に基づくロバスト設計への発展、実験データが得られた際の予測更新の手法を提案し、有効性を確認した。多孔体に限るが市販ソフトウェアVOXELCONによる解析を可能とし、実用化の基礎を構築した。

研究成果の概要(英文)：For the multiscale modeling of hierarchical architecture of industrial materials and biological tissues considering the uncertainties and/or variability at the microscale, a systematic mathematical modeling methodology for stochastic multiscale analysis and computational method using first-order perturbation based stochastic homogenization method have been developed. This new method was applied to spherical porous material, coated particulate composite material and porous human trabecular bone. Together with the prediction of variability of macroscopic properties, a robust design method using the probabilistic sensitivity analysis and an update method of predicted properties using measured data have been proposed and found to be effective. In the limited application to porous materials, practical use of the developed stochastic multiscale computational method has been achieved by implementing it to commercial software VOXELCON.

研究分野：材料力学、計算力学、生体力学、複合材料

キーワード：マルチスケール法 確率均質化法 モンテカルロ法 サンプリング 複合材料 多孔質材料 海綿骨
画像相関法

1. 研究開始当初の背景

(1) 工学シミュレーションの品質保証が重用しされるようになる中で、緊急の課題として不確かさ(uncertainty)を考慮したモデリング・確率的有限要素解析法の確立に向け、学術的研究と産業界で活用可能な実用性の確保が求められている。

(2) マルチスケール法は種々の工業材料の力学的特性の予測やマイクロ構造設計のための手段として期待されてきたが、数値予測に基づき設計された材料は、実際に成形・製造してみると期待される特性が得られないことがほとんどであり、真に役に立つモデリング法および解析手法の改善が求められている。

(3) マルチスケールシミュレーションの妥当性確認(validation)は容易ではなく、これまではマクロ特性を実験結果と比較するにとどまっていた。マイクロな情報に基づきシミュレーションするマルチスケール法の妥当性確認は、本来はマイクロ情報を用いて行うべきであるが、計測の困難さが問題であった。

2. 研究の目的

(1) 多孔質材料・複合材料などの工業材料および生体組織にみられる階層構造のマルチスケールモデリングにおいて、ミクロスケールの情報に含まれる不確かさ・ばらつきを考慮した確率的マルチスケール法の体系的な数理モデル記述法ならびに数値解析法を開発する。

(2) 確率的マルチスケールシミュレーションによりはじめて可能となる付加価値を見出し、例題により有効性を実証する。

(3) 工業材料として球状多孔質材料ならびにコーティング粒子分散材料をとりあげることが、その他の応用可能性を見出す。

(4) 確率的マルチスケールシミュレーションを市販ソフトウェアを用いて誰でも実施できるようにし、実用性を示す。その他に、開発手法の情報発信の手段として、講演会での企画などを行う。

3. 研究の方法

(1) 数理モデル記述法の開発

ミクロスケールにおける幾何的パラメータを X 、物理的パラメータを D とし、マクロ特性 D^H を $D^H = D^H(X, D)$ と書く。この際、 X と D の具体的な記述法、すなわちパラメータ化について検討する。

(2) 数値解析手法の開発

物理的パラメータの不確かさについては一次漸近展開に基づく確率均質化法(First-order Perturbation based Stochastic Homogenization, 以降 FPSH と略記)を用い、幾何的パラメータの不確かさについてはモンテカルロ法と同様にサンプリング点を取り、最終的に重ね合わせ(mixture distribution)によりマクロ特性を計算する手法を確立する。さらに、この手法によりは

じめて可能になる付加価値として、確率的感度解析によるロバスト設計、ならびに、実験データが得られた際に予測更新を行う手法を開発する。

(3) 実用化研究

市販ソフトウェアで実行できる範囲を定めて、定式化と数値解析手法を確立する。

(4) 工業材料への適用 1

球状多孔質材料を例題とし、主に確率予測更新まで行うことで、開発手法の有効性を示す。

(5) 工業材料への適用 2

3 相複合材料の事例としてコーティング粒子分散型複合材料を例題とし、主に確率感度解析によるロバスト設計手法を提示し、開発手法の有効性を示す。

(6) 生体組織への適用

下顎骨海綿骨への適用を行い、特に歯科インプラント手術で問題となるドリリング時の荷重の予測を個体差を考慮して行う。活用事例として、力覚として提示する手法も開発し、実用化する。

(7) 応用探索

繊維強化プラスチック複合材料および金属 3D プリンターにより造形する多孔体への応用可能性について調査研究を行う。

4. 研究成果

(1) 数理モデル記述法の開発

物理的パラメータは、FPSH 法により解析するために、正規分布を仮定するランダム変数 α を用い、 $f(D) = D(\alpha)$ と書く。ここで $f(\cdot)$ は確率密度関数を表すものとする。具体的に以下のように 4 ケースにより、ほぼすべてのパターンを網羅する。

・ケース 1 (多孔質材料、ランダム変数 1 個)

$$f(D) = D(\alpha)$$

・ケース 2 (多孔質材料、ランダム変数 2 個)

$$f(D) = D(\alpha_1, \alpha_2) = D(E(\alpha_1), G(\alpha_2))$$

・ケース 3 (3 相複合材料、ランダム変数 3 個)

$$f(D) = \begin{cases} D(\alpha_1) & \text{in } \Omega_1 \\ D(\alpha_2) & \text{in } \Omega_2 \\ D(\alpha_3) & \text{in } \Omega_3 \end{cases}$$

ただし $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$

・ケース 4

ケース 3 とケース 2 の組合せ

次に、幾何的パラメータについては、強化材や気孔などの相の体積含有率 V と、モルフオロジー A より $X = X(V, A)$ と書いた上で、 A の具体的な記述は以下の例題において述べる。特に、 A にはもともとノンパラメトリックな因子が多く含まれることから注意が必要であり、実材料においては計測可能であること、および数値モデルに反映可能であること、の 2 点の条件を満足するようパラメータ化することが必要であるとの知見を見出した。これは応用探索で検討した実材料のモデル化において詳述する。

(2) 数値解析手法の開発

FPSH の開発については、物理的パラメータの不確かさのモデル化の上記 4 ケースについて定式化を行った。解くべき方程式はランダム変数が 1 個増えるごとに 1 つ増えることがわかり、必要な計算コストの見積りが可能となった。

幾何的パラメータの不確かさを表現するマイクロ構造モデルを n 個生成し、FPSH 法で個々に解析を行った後、以下の式で確率密度関数の重ね合わせを行う。

$$f(D^H) = \sum_{j=1}^n f(X_j) f(D_{X_j}^H)$$

ここに $f(X_j)$ はモデルの確からしきであり、材料製造前の事前予測ではフラット分布、すなわち $1/n$ とする。後に、実験データが得られた際には $f(X_j)$ を更新する。

以上の事前確率予測の解析フローを図 1 に示す。

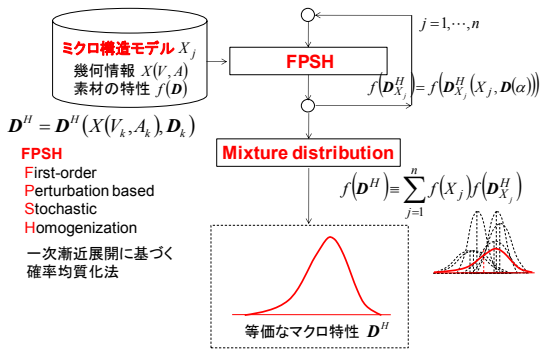


図 1 事前予測における確率的マルチスケール解析フロー

幾何的パラメータについてはモンテカルロ法と同様にサンプリング点をとる。これにより確率的応答曲面を求めることが可能となる。したがって、剛性を注目する物理量 (Quantity of Interest, QoI) とすると、従来の確定論的予測が 50% の信頼性を示す曲面であるのに対し、たとえば 95% の信頼性を示す曲面を求めることができる。これをマイクロ構造設計に用いれば、失敗する確率が 5% 未満であることが期待される。さらに、曲面の曲率、すなわち感度を求めることにより、ロバスト設計へとつなげることができる。

サンプリング点をとる利点は他にもあり、ロバスト設計の後、材料を試作し、マクロ特性を計測した際には、サンプリング点のいずれに近いかが探索できるため、どのようなモルフォロジーになっているかを観察なしに予測することができる。これを上記の $f(X_j)$ の更新として実現した。事後予測ともいえる。SEM にせよ、3D 計測手法のマイクロ CT や FIB-SEM はコストが高いため、観察なしにエクセルレベルの操作で事後予測ができれば、成形・製造プロセスへのフィードバック情報として有用であると期待される。このような手法は過去になく、開発手法による確率的マ

ルチスケールシミュレーションの付加価値といえる。

(3) 実用化研究

物理的パラメータのモデル化におけるケース 1 について、素材の物性 D によっては市販ソフトウェア VOXELCON で解析できることを見出し、以下の (4)、(6) の解析を行った。

(4) 工業材料への適用 1

気孔率 P の球状多孔質材料において、球径 R 、球状気孔の配置にわずかなばらつきがあると、幾何的パラメータを

$$X = X(P, R, A(m, c))$$

のように、2 つのランダム変数を用いてモルフォロジーを記述した。 m は気孔配置にばらつきを与えるための移動回数、 c はクラスター度を表す。マイクロ構造モデルの自動生成アルゴリズムとプログラムを開発し、図 1 により計算を行った。

図 2 は気孔率に関して整理した等価物性値の事前確率予測の結果である。図中のマイクロ構造は一見ランダムに見えるが、完全な規則配置にわずかなゆらぎを与えただけであり、製造において起こりうる不確かさをモデル化した結果である。気孔率 15.5% の場合に、数値実験データを与えた場合の事後確率予測を図 2 に、この計算のために予測したモルフォロジー $A(m, c)$ の予測結果を図 3 に示す。

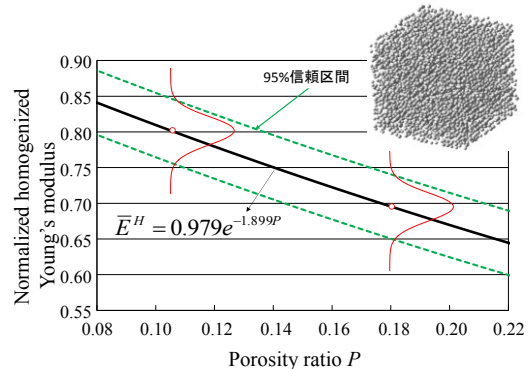


図 1 球状多孔質材料の事前確率予測結果

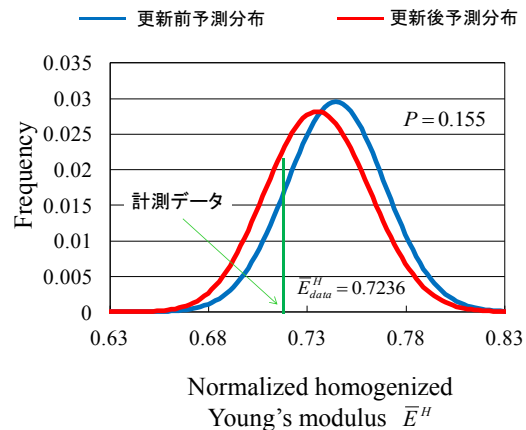


図 2 球状多孔質材料の事後確率予測結果

(5) 工業材料への適用 2

コーティング粒子分散型複合材料のコー

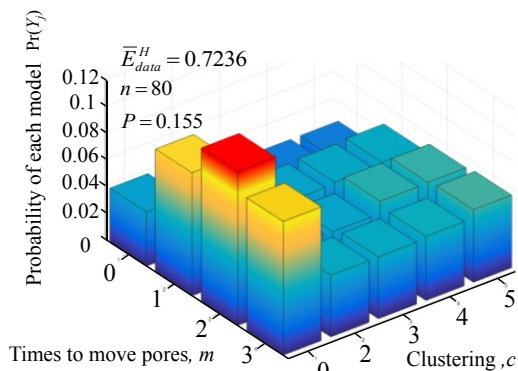


図3 実験データのモルフォロジー予測

ティング層が不均一であることを数理モデル化するため、粒子（添え字 p ）、コーティング材料（添え字 c ）の体積含有率とモルフォロジーをパラメータ化した。粒子のパラメータ m は球状多孔質材料と同じであり、コーティング材料については不均一である割合をパラメータ q とし、次式で表した。

$$X = X(V_p, R, A_p(m), V_c, h, A_c(q))$$

解析結果は図4に示す確率的応答曲面として整理し、これを微分することにより感度を計算した。確定論的な従来手法（信頼性 50%の結果に一致）と比較し、異なる感度が得られたことから、ロバスト設計への応用可能性を見出すことができた。

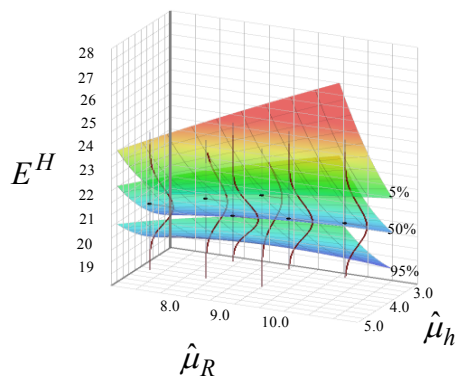


図4 コーティング粒子分散型複合材料のマクロなヤング率の確率的応答曲面

(6) 生体組織への適用

腰椎骨海綿骨のマクロなヤング率の確率的マルチスケールシミュレーション結果を、他者の多くの実験結果と比較し、そのばらつき範囲をカバーすることに成功した。ここで補正係数を定義し、実験により定めた。

腰椎骨でキャリブレーションされた数理モデルを実験データが乏しい下顎骨海綿骨に適用した。具体的に、口腔インプラント手術におけるドリリング荷重の予測を行った。

計算結果を再現できる力覚体感装置（口腔インプラント手術シミュレーター）を開発した。臨床医による評価を経て、歯科学士向け教育システムとして、試験を行い、有用性を検証した。

(7) 応用探索

繊維強化プラスチック (FRP) のハンドレイアップ成形積層板を対象とし、特にマイクロ構造の幾何的パラメータの選定と統計データの取得を行うことができた。また、金属 3D 造形品への適用も検討し、造形品のマイクロ CT 撮像から造形不良のパラメータ化と統計データの取得を行うことができた。いずれも、今後は数値モデルの自動生成と確率的マルチスケールシミュレーションに発展可能であることがわかった。

(8) その他の成果

画像相関法を用い、マイクロ・マクロの両スケールでのひずみに注目したマルチスケールモデルの妥当性確認を行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計 16 件）すべて査読有

- ① T. Matsuda, T. Ito, S. Akimoto, H. Kobori, K. Goto and N. Takano, Macro/micro Simultaneous Validation for Multiscale Analysis of Semi-periodically Perforated Plate Using Full-field Strain Measurement, International Journal of Mechanical Sciences, 110, pp.34-40, (2016).
- ② P. Wen, K. Kamijo, D. Kurita and N. Takano, Probabilistic Homogenization and Sensitivity Analysis for Robust Design of Coated Particulate Composite Material Considering Non-parametric Geometrical Uncertainty at Microscale, Transactions of Japan Society for Computational Engineering and Science, Vol. 2016, Paper No.20160005, pp.1-10, (2016).
- ③ P. Wen, K. Yokota and N. Takano, Probabilistic Prediction and Update of Homogenized Property for Spherical Porous Material Considering Micro-structural Uncertainties, Journal of Multiscale Modelling, 6-4, pp.1-9, (2015).
- ④ T. Matsuda, K. Goto and N. Ohno, Effects of Fiber Arrangement on Negative Poisson's Ratio of Angle-Ply CFRP Laminates: Analysis Based on a Homogenization Theory, Advanced Structured Materials, 64, pp. 219-230, (2015).
- ⑤ Y. Miyauchi, N. Takano and P. Wen, Stochastic Homogenization Analysis of FIB-SEM Image-based Hierarchical Model of Sprayed Porous ZrO_2 , Mechanical Engineering Letters, 1, Paper No. 15-00389, doi: 10.1299/mel.15-00389, (2015).
- ⑥ D. Tawara, M. Nagahata, N. Takano, H. Kinoshita and S. Abe, Probabilistic Analysis of Mechanical Behaviour of Mandibular Trabecular Bone Using a Calibrated Stochastic Homogenization Model, Acta Mechanica, 226-10, pp.3275-3287, doi

- 10:1007/s00707-0151381-8, (2015).
- ⑦ K. Goto, T. Matsuda, N. Kubota, Fully-Modeled Unit Cell Analysis for Macro/Micro Elastic-Viscoplastic Behavior of Quasi-Isotropic CFRP Laminates, Key Engineering Materials, 626, pp. 512-517, (2015).
- ⑧ Y. Yamanaka, T. Matsuda, Effects of Laminate Misalignment on Thermo-elastoviscoplastic Properties of Ultrafine Plate-Fin Structures, Key Engineering Materials, 626, pp. 301-306, (2015).
- ⑨ T. Matsuda, K. Goto, N. Kubota, N. Ohno, Negative Through-the-Thickness Poisson's Ratio of Elastic-Viscoplastic Angle-Ply Carbon Fiber-Reinforced Plastic Laminates: Homogenization Analysis, International Journal of Plasticity, 63, pp. 152-169, (2014).
- ⑩ 田原大輔, 辻上哲也, 岡本義之, 村上英樹, イメージベース力学解析による脊椎固定術用スクリューの緩み抑制を目指した固定ロッドの設計指針の検討, 日本設計工学会誌, 49, pp. 120-127, (2014).
- ⑪ D. Tawara, K. Noro, T. Tsujikami, Y. Okamoto, H. Murakami, Nonlinear Mechanical Analysis of Posterior Spinal Instrumentation for Osteoporotic Vertebra: Effects of Mechanical Properties of the Rod on the Failure Risks around the Screw, Journal of Biomechanical Science and Engineering, 9, pp. 13-00163, (2014).
- ⑫ K.S. Basaruddin, N. Takano, H. Akiyama and T. Nakano, Uncertainty Modeling in the Prediction of Effective Mechanical Properties Using Stochastic Homogenization Method with Application to Porous Trabecular Bone, Materials Transactions, 54-8, pp. 1250-1256, 10.2320/matertrans.ME201307, (2014).
- ⑬ T. Koda, T. Matsuda, Analysis of Elastic-Viscoplastic Behavior of Honeycomb Sandwich Panels Based on a Homogenization Theory for Free Edge Analysis, Key Engineering Materials, 535-536, pp. 357-360, (2013).
- [学会発表] (計 86 件)
- ① T. Matsuda, T. Ito, N. Takano and S. Akimoto, Multiscale Validation for Homogenization Analysis of Semi-periodic Perforated Plates, KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2015 (招待講演), Waseda University, Tokyo, 2015年10月26日.
- ② 伊藤祐・松田哲也・高野直樹・秋元秀介, プレートフィン構造体を用いた均質化法のマルチスケールの妥当性評価, 日本機械学会第28回計算力学講演会, 横浜国立大学(神奈川県横浜市), 2015年10月10-12日.
- ③ 高野直樹, 数理モデル・離散化モデルの工夫によるマルチスケールシミュレーションの実用化, 日本機械学会第28回計算力学講演会, 横浜国立大学(神奈川県横浜市), 2015年10月10-12日.
- ④ G. Kubo, T. Matsuda, K. Oide, Damage Development Simulation of Plain-Woven Laminates with Laminate Misalignment Using a Homogenization Theory, International Conference on Advanced Technology in Experimental Mechanics, Loiser Hotel Toyohashi, Toyohashi, Japan, 2015年10月4-8日.
- ⑤ P. Wen, K. Yokota, K. Kamijo, D. Kurita and N. Takano, Stochastic Prediction and Update of Macroscopic Property of Heterogeneous Material Considering Microstructural Uncertainties, 6th International Conference on Computational Methods (ICCM2015), Puuman Hotel, Auckland, New Zealand, 2015年7月14-17日.
- ⑥ 秋元秀介・高野直樹・松田哲也, DIC 相関による積層ずれを有する半周期構造に対するマルチスケール解析の検証, 日本計算工学会第20回計算工学講演会, つくば国際会議場(茨城県つくば市), 2015年6月8-10日.
- ⑦ 秋元秀介・高野直樹・松田哲也, 画像ひずみ相関法による全ひずみ計測を用いた積層ずれを有する半周期構造に対するマルチスケール解析の検証, 日本材料学会第64期学術講演会, 山形大学(山形県米沢市), 2015年5月23-24日.
- ⑧ 田原大輔, 高野直樹, 木下英明, 口腔インプラント手術シミュレーター開発のための個体差を考慮した下顎骨のドリリング特性評価, 日本機械学会第27回バイオエンジニアリング講演会, 朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター(新潟県新潟市), 2015年1月9日.
- ⑨ N. Takano and H. Kinoshita, Development of Oral Implant Surgery Training Simulator using Stochastic Multiscale Finite Element Analysis of Drilling Force, 12th International Symposium on Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, Amsterdam, Netherland, 2014年10月13-15日.
- ⑩ 長嶋真広, 高野直樹, 田原大輔, 木下英明, 口腔インプラント手術におけるドリリング荷重の確率的マルチスケール有限要素解析, 日本機械学会第25回バイオフロンティア講演会, とりぎん文化会館(鳥取県鳥取市), 2014年10月3-4日.
- ⑪ 伊藤祐, 山中優輝, 松田哲也, 小堀拓, 高野直樹, プレートフィン構造体の弾-粘塑性均質化解析に対するマイクロ/マクロ実験的検証, 日本機械学会 M&M2014 材料力学カンファレンス, 福島大学(福

- 島県福島市), 2014年7月18-21日.
- ⑫ 上野駿之, 長嶋真宏, 横田健一郎, 高野直樹, 田原大輔, 木下英明, 口腔インプラント手術ドリリング荷重の確率的解析と教育用シミュレーターへの応用, 日本計算工学会第19回計算工学講演会, 広島国際会議場(広島県広島市), 2014年6月11-13日.
- ⑬ T. Matsuda, K. Goto, N. Ohno, Negative Poisson's Ratio of Elastic-Viscoplastic Angle-Ply CFRP Laminates: Homogenization Analysis, International Symposium on Plasticity, Damage & Fracture 2015, Montego Bay, Jamaica, 2014年6月8日.
- ⑭ N. Takano, Stochastic Multiscale Finite Element Analysis of Porous Media, KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2014 (招待講演), Jeju, Korea, 2014年5月1日.
- ⑮ K. Yokota, M. Nagahata, T. Ueno, N. Takano, D. Tawara and H. Kinoshita, Development of Oral Implant Surgery Simulator as an Educational Tool Considering Inter-Individual Difference by Stochastic Multiscale FEM Analysis, Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems, 仙台国際センター(宮城県仙台市), 2014年4月13-16日.
- ⑯ P. Wen, H. Ichimura and N. Takano, Stochastic Homogenization Method applied to Microstructure Design of Porous Materials, Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems, 仙台国際センター(宮城県仙台市), 2014年4月13-16日.
- ⑰ D. Tawara, Y. Umemura, T. Bamba, T. Tsujikami and Y. Okano, Modeling of Uncertain Distribution of Porous Foam of Original Bone Model for Orthopaedic Simulator to Predict Its Mechanical Properties, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics, InterContinental Singapore, Singapore, 2013年12月12日.
- ⑱ Y. Yamanaka and T. Matsuda, Effects of Laminate Misalignment on Thermo-elastoviscoplastic Properties of Ultrafine Plate-Fin Structures, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics, InterContinental Singapore, Singapore, 2013年12月12日.
- ⑲ T. Suzuki, N. Takano and S. Masuyama, Microstructure Modeling and Homogenization Analysis of Porous Ceramics Based on FIB-SEM Images, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics, InterContinental Singapore, Singapore, 2013年12月12日.
- ⑳ N. Takano, Morphology Analysis of Trabecular Bone by Micro-CT Image-based Multiscale Biomechanics Simulation, The

5th International Symposium on Designing, Processing and Properties of Advanced Engineering Materials(ISAEM-2012) (招待講演), ロワジュールホテル豊橋(愛知県豊橋市), 2012年11月5日.

- ㉑ T. Matsuda, N. Yamamoto, H. Kobori, Effects of Random Laminate Misalignment on Elastic-Viscoplastic Properties of Ultrafine Plate-Fin Structures, International Computational Mechanics Symposium 2012(ICMS2012), Convention Hall, Kobe University and FIBER, Konan University (Kobe City, Hyogo), 2012年10月9日.
- ㉒ N. Takano and K.S. Basaruddin, Stochastic Image-based Homogenization Analysis of Osteoporotic Trabecular Bone, International Computational Mechanics Symposium 2012(ICMS2012), Convention Hall, Kobe University and FIBER, Konan University (Kobe City, Hyogo), 2012年10月9日.
- ㉓ K. Okamoto and N. Takano, Finite Element Mesh Superposition Method Applied to Stochastic Multiscale Analysis, International Computational Mechanics Symposium 2012(ICMS2012), Convention Hall, Kobe University and FIBER, Konan University (Kobe City, Hyogo), 2012年10月9日.
- ㉔ K.S. Basaruddin and N. Takano, Stochastic Modelling and Analysis of Porous Media using First-order Perturbation-based Homogenization Method, European Congress on Computational Methods in Applied Science and Engineering (ECCOMAS2012), Vienna, Austria, 2012年9月10日.

[その他]

ホームページ等

<http://www.takano.mech.keio.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

高野 直樹 (TAKANO, Naoki)
慶應義塾大学・理工学部・教授
研究者番号: 10206782

(2) 研究分担者

松田 哲也 (MATSUDA, Tetsuya)
筑波大学・システム情報系・准教授
研究者番号: 90345926

田原 大輔 (TAWARA, Daisuke)
龍谷大学・理工学部・講師
研究者番号: 20447907

(3) 連携研究者

中納 治久 (NAKANO, Haruhisa)
昭和大学・歯学部・准教授
研究者番号: 80297035