

機械学習による物理ベース階層 マルチスケールモデル構築の試み

梅野 宜 崇*

1. はじめに

物理現象のほとんどは微分方程式で記述されることが知られており、その支配方程式を数値積分することによって現象を計算機上で再現する数値シミュレーションは、以前から幅広い物理問題に適用されてきた。計算機能力の飛躍的な向上も相まってその適用範囲が大きく広がり、数値シミュレーションは今や材料強度分野のみならず、材料工学分野、熱流体工学分野、社会基盤工学分野など様々な分野で活用されている。例えば、材料工学分野においては第一原理計算による材料物性評価や材料探索が、熱流体工学分野では連続体あるいは格子モデルによる流体挙動解析が定着し、産業応用がなされるレベルにまで発展してきたことから、こうした分野での数値シミュレーションの「地位」は比較的高いといえることができる。一方、材料強度分野においては、固体材料の変形・破壊シミュレーションに対する学術的・工業的な取り組みが以前から行われているにも関わらず、強度設計のための本格的なシミュレーション活用までには至っていない。もちろん、実験のみでは難しい材料内部の力学的情報へのアクセスがシミュレーションを用いれば比較的簡単に行えることから、材料に対する力学実験を補完し学術的な知見を得るといった点で数値シミュレーションの果たす役割は小さくないが、産業応用が十分にできるほど技術的に成熟したものとはなっていない。

その理由の一つに、固体材料の変形・破壊問題は極めてマルチスケール的な現象を扱う必要があるため、という点が挙げられるであろう⁽¹⁾。例えばき裂進展問題においては、マクロな応力・ひずみ場は連続体モデルでよく記述されるものの、き裂先端近傍の力学状態は厳密には、分子動力学法

(Molecular Dynamics; MD)などナノレベルの精密なモデルで取り扱う必要がある。また塑性変形問題においては、結晶すべりを司る転位同士あるいは転位と種々の結晶欠陥などとの相互作用が重要であり、転位動力学法などのメゾスケールモデルで取り扱わねばならない。材料の変形・破壊においては、厳密にはこれらの大きく異なる空間スケールでの現象が互いに強い連成関係にあり、それぞれを独立に取り扱うことができないため、これらのモデルを組み合わせたマルチスケール解析が極めて重要となる。

本稿では、マルチスケール解析における階層間接続問題について述べるとともに、それを克服するための機械学習を用いた我々の新しい手法について解説する。具体例として、我々が現在取り組んでいる、繰り返し変形を受ける金属における転位組織形成問題への適用について紹介する。

2. スケール間接続の問題

マルチスケール解析は、同期的(concurrent)手法と階層的(hierarchical)手法の2つに分類される。前者はシミュレーションモデルを複数の領域に分割し、一部を解像度の高い下位スケールのモデルで、それ以外の部分を計算コストの低い上位スケールのモデルでハイブリッド的に解く方法である⁽¹⁾。分割した領域間をできるだけ滑らかに接続するための方法に工夫が必要ではあるが、基本的には計算技術的(テクニカル)な問題である。但し、き裂進展問題のように上位・下位スケールで取り扱うべき領域が容易に区別可能な場合は良いが、そうでない場合には適用が難しい。一方後者は、異なるスケール域のシミュレーションを別々に行い、それぞれのモデルで得られた「そのスケールにおける」材料挙動を、隣接するスケールのそれと矛盾の無いように接続する方法

* 東京大学生産技術研究所; 教授(〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1)

Building Physics-based Hierarchical Multiscale Models Using Machine Learning; Yoshitaka Umeno (Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Tokyo)

Keywords: *dislocation network, fatigue, persistent slip band, reaction diffusion model, inverse problem, artificial neural network, constitutive law*
2023年8月21日受理[doi:10.2320/materia.63.24]

(scale bridging)である。

あるスケールのシミュレーションで得られた解析結果をもとに材料構成式などを構築し、それを隣接するより上位のスケールのシミュレーションに供する、というボトムアップ式のスケール間接続がよく行われている。例えば、第一原理計算によって求めた原子間ポテンシャルを分子動力学法解析に供し、その解析で得られた転位間相互作用の式を用いて転位動力学計算を行い・・・というように、マクロな連続体モデルまで多段階に接続していけば、ナノからマクロ域を繋いだ階層型マルチスケール解析が原理的には可能である。このようなボトムアップ型の接続法は、演繹的(Deductive)接続とも呼ばれる。

逆に、マクロにおける実験結果や計測を出発点とし、それに辻褃が合うような現象論的モデルを組み立てるという方法もある。これは上位スケールの情報をもとに下位スケールの物理法則を探りだすトップダウン型のスケール接続法と解釈でき、帰納的(Inductive)接続と呼ぶことができる。

演繹的階層間接続によるマルチスケール解析は、例えば疲労き裂進展問題などに適用が試みられ、実験値によるフィッティングなしに疲労寿命が予測できることが示されるなど、数々の成功例が報告されている⁽²⁾⁽³⁾。しかしながら、階層間接続の際に用いる構成式やそのパラメータに無視できない誤差が含まれる可能性は高く、多段階の階層間接続を繰り返してマクロ域まで達したとき、その誤差が蓄積することで現実の結果と大きく乖離してしまう恐れが本質的にある。一方、帰納的階層間接続は、これを多段階に繰り返してより下位のスケール域に降りていく、ということ自体が難しい。何故なら下位スケールのモデルは上位スケールのそれに比べ解像度が高く、構成式はより多くの情報を含むことになるため、未定係数が多すぎて決定が難しいからである。上位スケールでの材料挙動と辻褃が合うように下位スケールにおける直観的なモデル構築を行わねばならず、その信頼性を担保することが難しい。

3. 演繹的・帰納的方法の統合の試み

(1) 機械学習による階層間接続

上述のような階層型マルチスケールモデリングにおける階層間接続の問題を解決するため、我々は機械学習を取り入れることで、演繹的・帰納的方法を組み合わせた新たな枠組み(Deduction-Induction integrated Multiscale Simulation; DIMS)の構築に取り組んでいる⁽⁴⁾。

このコンセプト(図1)の核心部分は、あるスケール域を記述するモデルについて、入力情報(構成式に含まれるパラメータ)と出力情報(解析結果として得られる材料挙動などの情報)を人工ニューラルネットワーク(Artificial Neural Network)モデルにより対応(mapping)させることにある。これによって、そのスケールにおいて得られるべき解析結果からモデルに供したパラメータセットを「逆算」することが可能となる。

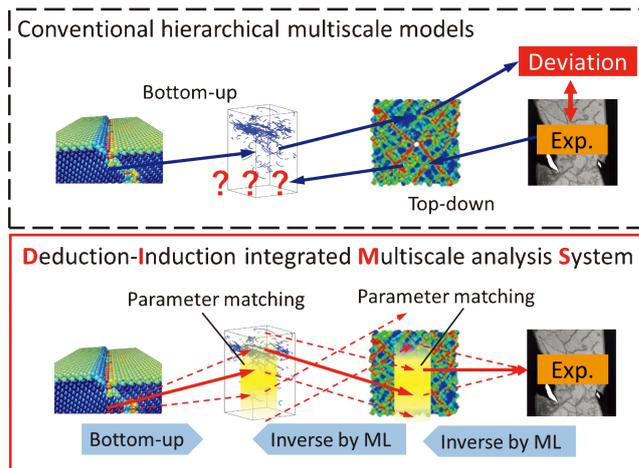


図1 従来の階層型マルチスケール解析(上)と物理ベース階層接続モデル DIMS(下)。(オンラインカラー)

例えば、実験観察・計測によって材料の振る舞いが定量的・定性的に分かっているとき、「どのようなパラメータを入力値として与えれば同様の材料挙動がシミュレーションで再現できるのか」を、このマッピングを利用することにより見つけ出すことができる。このようにして帰納的方法で選択したモデルパラメータ群と、原子スケールから演繹的に(ボトムアップ的に)導いたそれとが整合すれば、ナノスケールから実験スケール(マイクロ～マクロ)まで矛盾なく(すなわち「物理を失わずに」)繋がったマルチスケールモデルが構築できたことになる。

(2) 転位組織形成モデルに対する帰納的階層接続

ここでは、DIMS 構築の取り組みとして、繰り返し荷重を受ける金属材料における転位組織形成問題への適用を試みた例を紹介する⁽⁴⁾。

繰り返し荷重を受ける金属では、塑性ひずみを受け持つために線欠陥である転位が運動し、それらが相互作用をすることで転位ネットワークが形成される。ひずみ振幅に応じて、vein 構造, ladder-like 構造, cell 構造などと呼ばれる異なるパターンの転位自己組織が形成されることが知られており⁽⁵⁾、その形成機序を解明することが疲労き裂発生メカニズムを解明するために重要とされている。これまで、反応拡散理論に基づく現象論的な転位組織形成モデルが Walgraef と Aifantis によって提唱され広く用いられてきた⁽⁶⁾⁽⁷⁾。このモデルでは、単独で自由に運動できる可動(mobile)転位の密度分布 ρ_m と、双極子群などにトラップされ易動度が低い(immobile)転位(不動転位と呼んでいるが、全く動かないわけではない)の密度 ρ_i の時間変化が次のような偏微分方程式で表される(以後、WA 方程式と呼ぶ)。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} &= D_i \frac{\partial^2 \rho_i}{\partial x^2} + \alpha(\rho_{0i} - \rho_i) - \beta \rho_i + \gamma \rho_m \rho_i^2 \\ \frac{\partial \rho_m}{\partial t} &= D_m \frac{\partial^2 \rho_m}{\partial x^2} + \beta \rho_i - \gamma \rho_m \rho_i^2 \end{aligned} \quad (1)$$

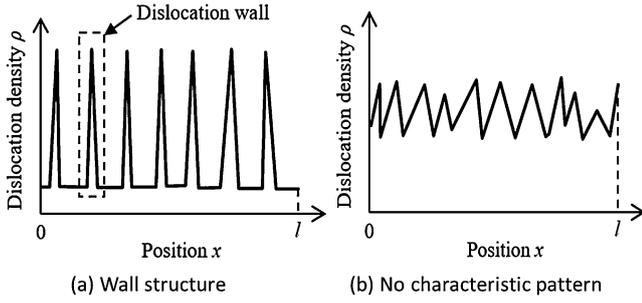


図2 1次元WA方程式求解によって得られる不動転位密度分布の模式図。(a)は転位壁構造の形成、(b)は転位パターンが発現しない場合に対応する。

但しここでは簡単のため1次元問題を考えており、密度分布は x のみの関数としている。右辺第1項は転位の自己拡散を表し、 $\alpha(\rho_{0i} - \rho_i)$ は新たに生成される転位のピン止め(ρ_{0i} は不動転位源密度であり、均等に分布すると仮定し $\rho_{0i} = 0.5 \mu\text{m}^{-2}$ と設定した)を表現する。 $\beta\rho_i$ は不動転位群からの転位の離脱(可動転位化)を、 $\gamma\rho_m\rho_i^2$ は可動転位が不動転位群にトラップされ不動化することを表現している。

我々はサブミクロン～ミクロン領域を司るモデルとしてWA方程式を採用し、解析結果として得られる転位密度分布 $\rho_i(x)$ と入力パラメータ群 $\{D_i, D_m, \alpha, \beta, \gamma\}$ をマッピングするANNの構築を行った。パラメータの値によって、図2に示すように転位の自己組織化(転位壁構造の形成に相当する)が起こる場合とそうでない場合が生じる。

まずANNの教師データ取得のため、モデルサイズ $l=1.0 \mu\text{m}$ として両端($x=0, l$)において密度勾配をゼロと仮定したうえで、パラメータ群を様々な値に設定したWA方程式を解析し、それぞれ転位構造を得るという作業を行う。このとき、5つのパラメータ $D_i, D_m, \alpha, \beta, \gamma$ は互いに独立でないため、すべてを任意に決めることはできない。Schillerら⁽⁸⁾によれば

$$\alpha = \frac{D_i}{l_i^2}, \gamma = \frac{v_m^2}{2\rho_{0i}^2 D_m} \quad (2)$$

(l_i, v_m はそれぞれ不動転位の平均自由行程、可動転位の有効速度と定義され、ここでは $l_i = 0.01 \mu\text{m}$, $v_m = 10 \mu\text{m/s}$ と設定する)の関係がある。そこで、 α, γ は従属変数として扱うこととし、 D_i, D_m, β の値をそれぞれ三種類ずつ設定した。まず前者2つについては $D_i = 10^{-4}, 10^{-3.5}, 10^{-3} \mu\text{m}^2/\text{s}$, $D_i/D_m = 0.002, 0.005, 0.01$ とした。 β については、Spiliotisらの線形不安定解析⁽⁷⁾より与えられる二つの臨界値 β_c, β_H を参照して決定する。 β_H はHopf分岐値と呼ばれ、 $\beta > \beta_H$ のとき時間に伴って転位パターンが振動してしまう。また β_c ($< \beta_H$)はTuring分岐値と呼ばれ、 $\beta > \beta_c$ で転位パターンが形成する。 β_c, β_H は次のように与えられている。

$$\beta_c = \left(\sqrt{\alpha} + \sqrt{\frac{cD_i}{D_m}} \right)^2$$

$$\beta_H = \alpha + c$$

$$c = \gamma\rho_{0i}^2 \quad (3)$$

これらを用いて、 β については $\beta_1 = 0.9\beta_c, \beta_2 = \beta_c + \frac{\beta_H - \beta_c}{3}$,

$\beta_3 = \beta_2 + \frac{\beta_H - \beta_c}{3}$ の3つの値を採用した($\beta_1 < \beta_c < \beta_2 < \beta_3 < \beta_H$)。

ここで、WA方程式を解いて得られる最終的な転位パターンは、入力パラメータのみによって決まるのではなく、初期構造として与える転位密度分布($\rho_i(x), \rho_m(x)$ の初期分布)にも依存することに注意せねばならない。そこで、単純に0から1の範囲で乱数を発生させ、それを $\rho_{i,m}(x)$ の初期値として与える方法(Scheme Aと呼ぶ)、およびあらかじめ設定したいくつかの波数と乱数で決めた振幅を持つsine関数の重ね合わせにより $\rho_{i,m}(x)$ の初期値を与える方法(Scheme Bと呼ぶ)の2種類の方法を採用した(Scheme Bの詳細はここでは割愛する。文献(4)を参照されたい)。結局、WAパラメータセットは $3 \times 3 \times 3 = 27$ 個であり、それぞれに対しSchemes AおよびBで各10種の初期構造を用いて計算を行った。

つぎに、こうして得られたWA方程式の解(十分時間経過後の $\rho_{i,m}(x)$ 分布)を、転位パターンを表現するようないくつかの数値に落とし込む必要がある。不動転位の分布 $\rho_m(x)$ は図2(a)に模式的に示すような形状を持つが、これが最終的に形成された転位パターンを表す。この分布関数の形状を分析し、 p_1 :パターン形成の有無(図2(a)の場合1, (b)の場合0), p_2 :転位壁(ピーク)の数, p_3 :転位壁の平均厚さ、の3つの値で数値表現する。

以上の手続きにより得られたデータ(WA方程式の入力パラメータ vs 転位パターン)を教師データとし、これを再現するANNモデルを構築する。ANNの構造(隠れ層の数、各層のノード数、活性化関数など)は任意であるが、ここでは各層のノード数を $5 \rightarrow 6 \rightarrow 6 \rightarrow 4 \rightarrow 3$ とし、活性化関数にはシグモイド関数を用いた。

ANNフィッティングの結果を図3に示す。ここで p_1 は値が0/1であり傾向がやや見えづらいため、 p_2, p_3 のみについてWA方程式の計算結果とANNによる予測値を比較して示す。個々のケースの結果は薄いシンボルにて、10個の初期構造に関して平均を取ったものを濃いシンボルにて示している。個々のケースについてはばらつきがみられるが、初期構造に対して平均を取れば極めて良い一致が見られることがわかる。図4は構築したANNモデルを、教師データに一定の偏差を加えたものをテストデータとして評価した結果である。ここで、偏差の大きさは教師データのパラメータ値を基準に0.1%, 1%, 10%とした。 p_2 についてはテストデータに対しても非常に良い精度で再現されていることがわかる。一方 p_3 については部分的に(グラフの右端付近)で無視できない乖離がみられた。しかしながら、これらの大きな乖離が現れるケースは、テストデータが教師データの範囲の外側であった場合に限られていた。ANNは物理モデルではなく単なる数理モデルであるため、外挿に対しては著しく精度が低下しがちであることが知られているが、ここでもそれを裏付ける結果となった。逆に、内挿に対しては非常に良い精度を

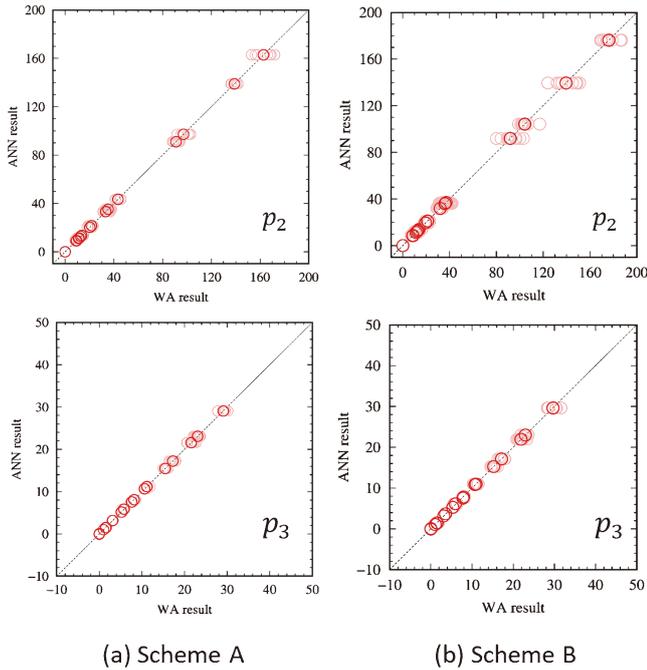


図3 転位構造を予測するANNの学習結果. 転位壁の数(p_2 [μm^{-1}]), 転位壁の平均厚さ(p_3 [nm])ともに, 異なる初期構造 (Scheme A および B) に対してよく再現されている. (オンラインカラー)

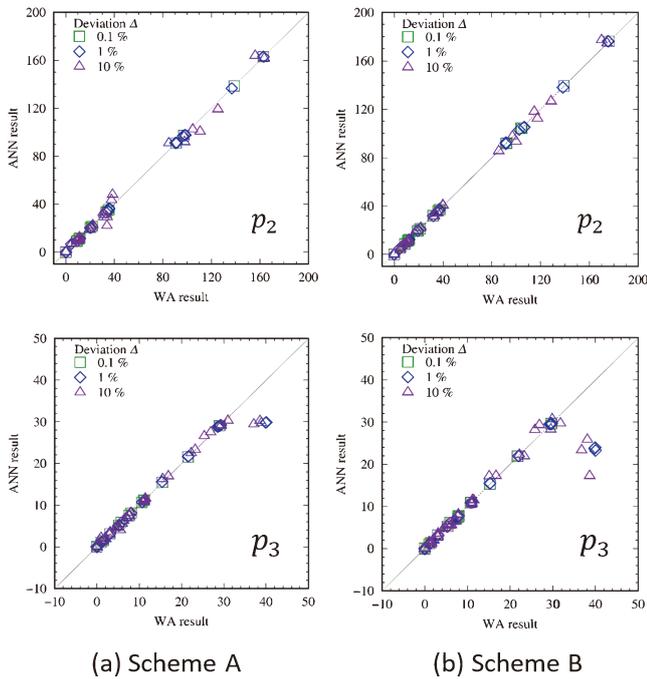


図4 転位構造を予測するANNの信頼性テスト結果. テストデータが学習データの範囲外となった点については, p_3 に対して乖離がみられるが, 学習データ範囲内については精度は良好である. (オンラインカラー)

示していることから, 教師データを十分な範囲に取ることで信頼性の高いANN予測モデルが構築できると考えられる.

(3) 演繹的パラメータ決定のためのモデル構築

前節の方法で, 帰納的(トップダウン)方法による最適パラメータの推定は簡単になるが, これが原子レベルから演繹的(ボトムアップ)に導かれるパラメータと整合している必要がある. このとき, 多くのパラメータから最適なものをふるい分けることが理想であり, 計算コストの低い演繹的方法の構築が望ましい. ここでは, 先のWA方程式で用いるパラメータのうち, 転位の拡散係数($D_{i,m}$)を演繹的に決定するためのランダムウォークモデル提案⁽⁹⁾について紹介する.

図5 (a)に示すような N 個の刃状転位が含まれる $L_x \times L_y$ の矩形領域に, せん断ひずみが繰り返し負荷されるとき, 転位の Burgers ベクトル方向への1次元的運動を考える. 矩形領域には転位トラップサイト(原子空孔などの結晶欠陥に対応する)が散在しており, 動き始めた転位は次のトラップサイトに会おうまで運動すると考える(理想結晶中に孤立した刃状転位の易動度が極めて高いとがMD解析によって確認でき, この仮定は妥当であると言える). すなわち, 転位の拡散の素過程は, 確率論的に選択された1個の転位が一定距離 l (トラップサイト間距離)だけ運動するものと考えられる. ひずみ振幅 γ_{max} のせん断ひずみを正と負の方向に与えることが1サイクルに相当する. これが繰り返されるこ

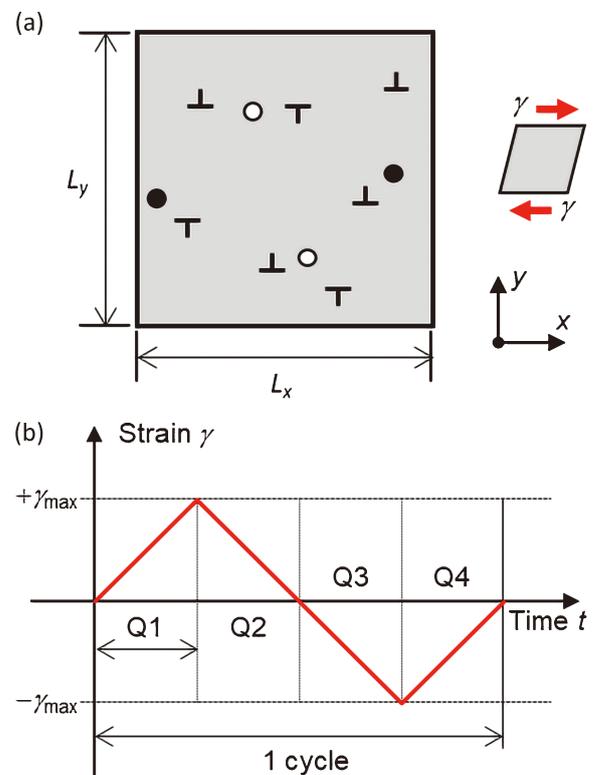


図5 (a) 転位拡散のランダムウォークモデルの模式図. ○, ●はそれぞれ転位トラップサイトとなる空孔, 不純物を表す. (b) 1サイクル内のひずみ変化. (オンラインカラー)

とで転位が拡散するが、この時の転位の変位量 ξ の確率分布 $P_{\text{cycle}}(\xi)$ を理論的に導出することで転位の拡散係数 D を算出する。

図 5(b) は 1 サイクル中のひずみ変化を示す。まず、初期状態から最大ひずみ γ_{max} までの 1/4 サイクル(図中 Q1) について検討する。素過程において転位のうち 1 個だけが選択され運動すると考えると、ある転位が 1 回の素過程において $+l$ だけ動く確率は $1/N$ 、動かない確率は $1-1/N$ である。残りの過程 Q2-Q4 についても同様である(ただし Q2, Q4 では逆方向に動く)ことから、ひずみ負荷に伴う転位の挙動は、この二項試行の列(ランダムウォーク)として記述される。なお、以下では確率分布を表す記号として、転位の運動回数 k に対しては $p(k)$ を、転位の移動距離 ξ に対しては $P(\xi)$ をそれぞれ用いる ($\xi = kl$)。

1/4 サイクルを構成する素過程の個数を m とすると、各転位の 1/4 サイクルあたりの運動回数の確率分布 $p_{Q1}(k)$ は、発生確率 $1/N$ 、試行回数 m の二項分布 $B(1/N, m)$ で与えられる。すなわちある転位が 1/4 サイクル中に k 回だけ運動する確率 $p_{Q1}(k)$ は

$$p_{Q1}(k) = B\left(\frac{1}{N}, m\right) = \binom{m}{k} \left(\frac{1}{N}\right)^k \left(1 - \frac{1}{N}\right)^{m-k} \quad (4)$$

となり、de Moivre-Laplace の定理を用いれば二項分布 $B(1/N, m)$ は正規分布 $N(\mu, \sigma^2)$ を用いて近似でき

$$p_{Q1}(k) \approx N(\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(k-\mu)^2}{2\sigma^2}\right),$$

$$\mu = \frac{m}{N}, \quad \sigma^2 = \frac{m}{N} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \quad (5)$$

ここで、 μ および σ^2 は 1/4 サイクル当たりの転位移動量の平均値および分散を表す (σ は標準偏差)。1/4 サイクル当たりの転位移動量の総和 Δ は、剛完全塑性を仮定すれば $\Delta = L_x L_y \gamma_{\text{max}} / b$ で与えられ (b は Burgers ベクトルの大きさ)、 $m = \Delta / l$ より結局 $m = L_x L_y \gamma_{\text{max}} / lb$ を得る。転位の変位は $\xi = kl$ であるから、Q1 における転位の変位の確率分布は

$$P_{Q1}(\xi_{Q1}) = N(\mu, l^2 \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi l^2 \sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\xi_{Q1} - \mu l)^2}{2l^2 \sigma^2}\right) \quad (6)$$

と求められる。同様にして Q2-Q4 については $P_{Q2}(\xi_{Q2}) = P_{Q3}(\xi_{Q3}) = N(-\mu, l^2 \sigma^2)$, $P_{Q4}(\xi_{Q4}) = N(\mu, l^2 \sigma^2)$ が得られるから、1 サイクル後の変位 $\xi = \xi_{Q1} + \xi_{Q2} + \xi_{Q3} + \xi_{Q4}$ の確率分布は

$$P_{\text{cycle}}(\xi) = N(0, 4l^2 \sigma^2) = N(0, \zeta^2) \\ = \frac{1}{\sqrt{2\pi \zeta^2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2\zeta^2}\right), \quad \zeta^2 := 4l^2 \sigma^2 \quad (7)$$

となる (ζ^2 は 1 サイクル後の変位の分散に相当する)。1 次元拡散での拡散係数は $D = \zeta^2 / 2$ で与えられるから

$$D = \frac{\zeta^2}{2} = \frac{2\gamma_{\text{max}} l}{b\rho} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \quad (8)$$

が得られる。ここで、 σ は転位の数密度である。なお、ここで得られた拡散係数は 1 サイクル当たりの量であり、単位時間当たりの量として定義される通常の拡散係数とは異なることに注意されたい。

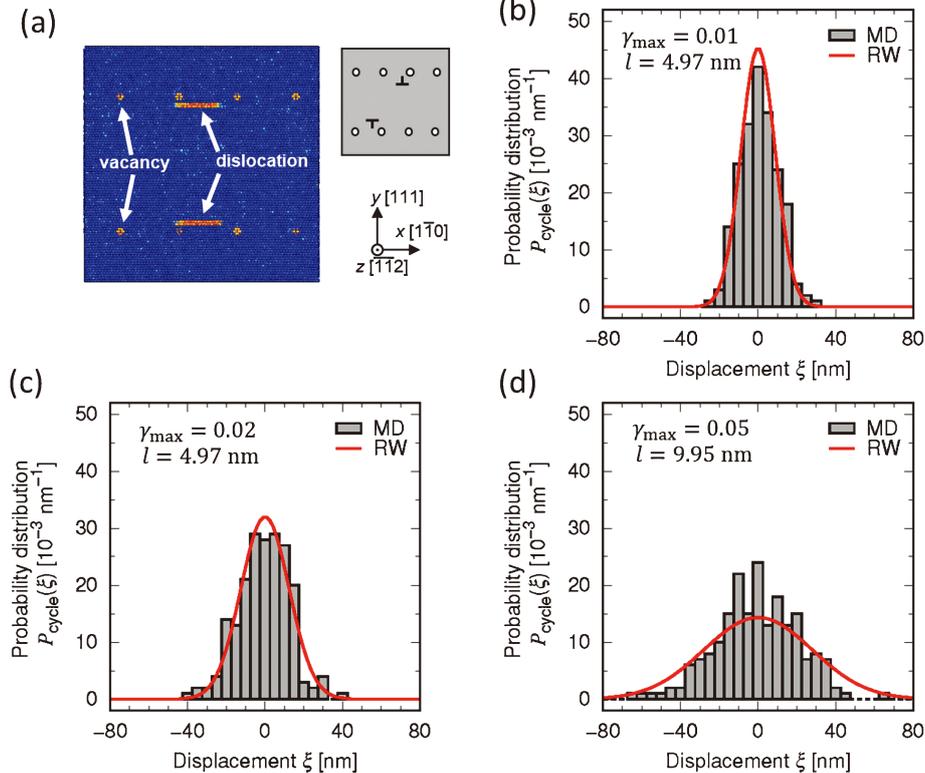


図 6 転位拡散のランダムウォークモデルによる予測と MD 計算結果の比較。(a) に示す MD モデルにより検証したところ、(b) ~ (d) いずれの条件に対しても、転位の変位確率密度分布 $P_{\text{cycle}}(\xi)$ が良好に再現できた。(オンラインカラー)

