

博士学位論文

氏名（本籍）	北海道
学位の種類	博士（工学）
学位記番号	博甲第180号
学位授与年月日	令和5年3月31日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項
学位論文題目	摂動法とベイズ的機械学習に基づく 確率的マルチスケール解析による 多孔質型吸音材の不確実性評価手法

論文審査委員	主査 山本 崇史
	副査 立野 昌義
	〃 鈴木 健司
	〃 大石 久己
	〃 山崎 徹（神奈川大学・教授）
	〃
	〃

目次

第 1 章	序論	1
1.1	研究の背景	1
1.2	多孔質型吸音材の音響特性の予測と不確実性	4
1.3	本論文の目的と構成	6
第 2 章	実験による吸音材の不確かさの把握	7
2.1	実験方法	8
2.2	実験結果	12
2.3	まとめ	23
第 3 章	多孔質型吸音材のマルチスケール解析	25
3.1	基礎事項	26
3.2	多孔質型吸音材の数値計算モデル	28
3.3	マルチスケール解析	31
3.4	ユニットセルのモデル化	34
3.5	まとめ	35
第 4 章	多孔質型吸音材の不確実性の評価手法	37
4.1	不確実性の定量化	37
4.2	多孔質型吸音材の不確実性	39
4.3	不確実性評価の定式化	39
4.4	モンテカルロ法による吸音率の確率分布の予測	43
4.5	サロゲートモデルによる吸音率の確率分布の予測	53
4.6	まとめ	58
第 5 章	摂動法による吸音率の確率分布の評価	61
5.1	摂動法の概要	61
5.2	摂動法の定式化	62
5.3	解析条件	65
5.4	解析結果	65
5.5	実験結果に基づく微視構造モデルの構築	74
5.6	実験結果と解析結果の比較	79

5.7	まとめ	83
第 6 章	ベイズ的機械学習による吸音率の確率分布の評価	85
6.1	機械学習とベイズ推論	86
6.2	ガウス過程回帰	87
6.3	ベイズ的機械学習による吸音率の確率分布の近似	92
6.4	解析条件	98
6.5	解析結果	99
6.6	各種法の計算効率の比較	101
6.7	まとめ	103
第 7 章	結論	105
7.1	本論文の総括	105
7.2	今後の展開と課題	107
付録 A	Appendix	109
A.1	摂動法によるモーメント近似の定式化	109
謝辞		119
参考文献		121
関連業績		127

目次

1.1	Trends in fuel efficiency regulations for automobiles in each country and region. Cited from reference [10].	3
1.2	Toyota Corolla weight trends. Data obtained from Toyota website.	3
1.3	Microstructure of porous materials. The left side shows glass fiber and the right side shows urethane foam sound-absorbing material. The upper side shows the macrostructure of the porous sound absorber, and the lower side shows the microstructure.	4
1.4	Structural overview of the thesis.	6
2.1	The microstructure of the fiber-type porous sound absorbing material. The image is obtained by scanning electron microscopy (SEM).	7
2.2	Impedance tube for measuring sound absorption coefficient of ϕ 29 at normal incidence of 500-6400 Hz using Brüel&Kjær Type 4206T.	8
2.3	Instrument for measuring flow resistance of porous materials.	10
2.4	Samples of fiber-based sound absorbing materials for sound absorption coefficient and microstructure analysis.	11
2.5	The general reaction process for the synthesis of polyurethane.	11
2.6	The foaming process that occurs when water and isocyanate are reacted.	11
2.7	Experimental samples of polyurethane foam.	12
2.8	The results of the sound absorption coefficients for 30 samples of fiber-based sound absorbing materials. Each sample's sound absorption coefficient is represented by the gray line, while the red line indicates the expected value of all measurements.	13
2.9	Histogram displays the distribution of sound absorption coefficients for 30 samples of fiber-based sound absorbing materials at various frequencies.	13
2.10	The results of fitting the measured sound absorption coefficient at 6000Hz using the truncated normal distribution (represented by the black solid line). The blue dotted line shows the result of fitting with the normal distribution.	14

2.11	The sound absorption coefficients of 30 different samples of polyurethane foam sound absorbing materials. Each sample's sound absorption coefficient is represented by the gray line, while the red line indicates the expected value of all measurements.	15
2.12	Histogram of sound absorption coefficient for polyurethane foam samples.	16
2.13	The microstructure of fiber-based porous materials captured through SEM.	16
2.14	Histogram of various microstructure features in fiber-based porous material samples. (a) shows the porosity, (b) shows the diameter of fibers, (c) shows the fiber distance, and (d) shows the interstitial distance.	17
2.15	Quantile-Quantile plot of porous microstructure parameters compared to normal distribution.	18
2.16	Comparison of the empirical cumulative distribution function $S(X)$ with the cumulative distribution function of the normal distribution $F(X)$. The statistic D represents the maximum deviation of $S(X)$ and $F(X)$	20
2.17	The microstructure of polyurethane foam porous materials, which was captured through SEM.	21
2.18	The microstructure of polyurethane foam porous materials, which was captured through SEM.	22
2.19	Quantile-Quantile plot of polyurethane foam microstructure parameters compared to normal distribution.	22
2.20	Comparison of the empirical cumulative distribution function $S(X)$ with the cumulative distribution function of the normal distribution $F(X)$ of polyurethane foam. The statistic D represents the maximum deviation of $S(X)$ and $F(X)$	23
3.1	A schematic view of the unit cell of a poroelastic material in multiscale analysis. (a) presents the macro structure, (b) shows the meso structure, and (c) shows the unit cell of the porous material.	25
3.2	Numerical simulation method for porous sound absorbers.	26
3.3	Propagation of acoustic waves in a cylindrical tube with one open and one closed end.	27
3.4	Direction and definitions of acoustic wave incident. Acoustic wave reflected on the interface S between medium I and II, where medium I and medium II have different properties.	27
3.5	Calculation model of sound absorption coefficient simulating impedance tube. The macroscopic properties of the porous material were obtained using the homogenization method and analyzed using the finite element method.	34
3.6	Example of creating the unit cells for multiscale simulation from various porous sound absorbing materials. (a) shows sintered aluminum particles, (b) polyurethane foam, and (c) ceramic materials.	35

4.1	Overview of uncertainty quantification in porous sound absorbing materials.	37
4.2	The figure illustrates the propagation of randomness in the sound absorption coefficient, which is a critical factor in designing acoustic materials.	43
4.3	Relative error between the expected value and the variance obtained by Monte Carlo simulation.	45
4.4	Comparison of samples from van der Corput sequence and uniform distributions.	47
4.5	Histogram of the normal distribution generated from low-discrepancy sequence using the inverse function method. The number of data points is 10,000.	48
4.6	The figure displays the relative error of the expected value obtained by Monte Carlo simulation with respect to the theoretical solution.	49
4.7	The figure illustrates the microstructure models used in multiscale analysis and Monte Carlo simulation.	49
4.8	Evaluation of expected value and standard deviation of sound absorption coefficient by Monte Carlo simulation.	51
4.9	Expected values of sound absorption coefficient with number of Monte Carlo calculations in rectangle unit cell. As a representative data, the results for unit cell size mean = 150 μm , standard deviation = 10 μm , porosity mean = 0.8, standard deviation = 0.05 are shown.	51
4.10	Standard deviation of sound absorption coefficient with number of Monte Carlo calculations in rectangle unit cell. As a representative data, the results for unit cell size mean = 150 μm , standard deviation = 10 μm , porosity mean = 0.8, standard deviation = 0.05 are shown.	52
4.11	Expected values of sound absorption coefficient with number of quasi-Monte Carlo calculations in rectangle unit cell. As a representative data, the results for unit cell size mean = 150 μm , standard deviation = 10 μm , porosity mean = 0.8, standard deviation = 0.05 are shown.	52
4.12	Standard deviation of sound absorption coefficient with number of quasi-Monte Carlo calculations in rectangle unit cell. As a representative data, the results for unit cell size mean = 150 μm , standard deviation = 10 μm , porosity mean = 0.8, standard deviation = 0.05 are shown.	53
4.13	The figure presents a schematic diagram of the interpolation of prediction points using a k-nearest neighbor regression model.	57
4.14	Probability distribution of sound absorption coefficient using surrogate model by k-nearest neighbor regression in Monte Carlo simulation.	58
5.1	Schematic diagram of the perturbation method for approximating probability distribution of sound absorption coefficient.	61
5.2	Approximation of the first derivative using the central difference method.	64

5.3	Approximation of response functions using Taylor series expansion. The random variable is the unit cell size, and the variation of sound absorption coefficient at 2000 Hz is shown.	64
5.4	Unit cell models used in the multiscale analysis to calculate the probability distribution of sound absorption coefficient. (a) is the lattice-based unit cell with the rectangular solid phase, and (b) is the unit cell with the shape imitating a fiber porous materials.	66
5.5	The randomness of the microstructure when fluctuating the random variables. Assuming that these variations are stochastically mixed, a probability distribution of the sound absorption coefficient is obtained.	67
5.6	Comparison of sound absorption probability distributions predicted by MC and perturbation results in the lattice-based shape homogeneous body. The black dashed line and the solid blue line represent the expected values. The black dotted line and the blue region represent the standard deviation of the sound absorption coefficient.	68
5.7	Comparison of probability distributions predicted by MC and perturbation method results in the fiber-based porous materials.	69
5.8	C.V. values of sound absorption coefficient obtained by the perturbation method and the MC in the lattice shaped homogeneous body.	70
5.9	C.V. values of sound absorption coefficient obtained by the perturbation method and the MC in the fiber porous homogeneous body.	71
5.10	Kullback-Leibler divergence of sound absorption coefficient obtained by perturbation method and Monte Carlo simulation in lattice-shaped homogeneous body.	72
5.11	Kullback-Leibler divergence of sound absorption coefficient obtained by perturbation method and Monte Carlo simulation in the fiber porous homogeneous body.	73
5.12	The base model of the unit cell used in multiscale analysis and comparison with experimental results.	74
5.13	The effect of fine fiber diameter on sound absorption coefficient.	75
5.14	The search for unit cells with values close to the experimental results. (a) shows TYPE1, (b) shows TYPE2, (c) shows TYPE3.	75
5.15	The multiscale analysis result of flow resistivity using the unit cell shown in Fig. 5.14.	76
5.16	Flow velocity contour plot of inside the unit cell of Fig. 5.14.	76
5.17	Sound absorption coefficient calculated from the unit cell model based on actual measurements. (a) shows TYPE3-1, (b) shows TYPE3-2, (c) shows TYPE3-3.	77
5.18	The flow resistivity results obtained from the TYPE3 study.	77

5.19	Sound absorption coefficient results for TYPE3-1 to TYPE3-3 of the unit cell model. The solid black line indicates the expected value of the sound absorption coefficient obtained experimentally, and the area filled with light blue indicates the expected value \pm standard deviation obtained experimentally.	78
5.20	Kelvin cell unit cell model for polyurethane foam microstructure.	79
5.21	Probability distribution of sound absorption coefficient obtained by perturbation method using TYPE3-3 Unit cell and comparison with experimental results. . . .	79
5.22	Comparison of standard deviations obtained from experimental results and perturbation method.	80
5.23	KL divergence results obtained from the experimental results and perturbation method in the fiber-type porous material.	81
5.24	Probability distribution of sound absorption coefficient obtained by perturbation method using Kelvin cell model and comparison with experimental results.	81
5.25	Comparison of standard deviations obtained from experimental results and perturbation method in the polyurethane foam.	82
5.26	KL divergence results obtained from the experimental results and perturbation method in the polyurethane foam.	83
6.1	Sampling result of the posterior distribution by Gaussian process regression. . . .	85
6.2	Comparison of Kernel functions. (a) Gaussian kernel, (b) exponential kernel. . . .	90
6.3	Optimization results for the hyperparameters of the kernel functions in Gaussian process regression. (a) Before parameter optimization, (b) after optimization by L-BFGS method.	91
6.4	Schematic diagram of Gaussian process regression in the Bayesian machine learning approach. At the red points, the sound absorption coefficient is calculated with the multiscale simulation and the response function is approximated by Gaussian process regression.	94
6.5	The flowchart of the Bayesian machine learning method to predict distribution of sound absorption coefficient.	94
6.6	Bayesian optimization with the variance of the integral of the Gaussian process regression as the acquisition function.	96
6.7	The probability distribution of sound absorption coefficient by the Perturbation method.	98
6.8	The KL divergence result of sound absorption coefficient distribution obtained from the Perturbation method and MC.	99
6.9	Prediction of probability distribution of sound absorption coefficient by Bayesian machine learning method at the initial sampling points.	100
6.10	Prediction of probability distribution of sound absorption coefficient by Bayesian machine learning method at the adaptive sampled points.	100

6.11	Comparison of $KL(\hat{P} \hat{Q})$ obtained by Bayesian approach and perturbation method. The probability distribution of the criterion is the distribution obtained by the MC method.	101
6.12	Calculation time vs. number of nodes of the microstructure in homogenization method.	102

表目次

1.1	The regulation value of exterior noise of passenger cars specified in Japan. Cited from reference[5], pp.4.	2
2.1	Summary of Shapiro-Wilk test for normality: W statistic and p-values for testing normal distribution hypothesis.	19
2.2	Summary of Kolmogorov-Smirnov test for normality: D statistic and p-values for testing normal distribution hypothesis.	20
2.3	Summary of test for normality: statistics are W and D and p-values for testing normal distribution hypothesis.	23
4.1	Summary of descriptive statistics for probability distribution including the Expectation, Variance, Kurtosis, and Skewness. These statistics provide a comprehensive understanding of the shape, spread, and skewness of the distribution.	43
4.2	Material properties of solid phases in multiscale simulation.	50
4.3	Material properties of fluid phases in multiscale simulation.	50
5.1	The parameters of the norm probability density function assumed for the random variables in grid shape microstructure.	65
5.2	The parameters of the normal probability density function assumed for the random variables in fiber microstructure.	66
6.1	The parameters of the normal probability density function assumed for the random variables.	98
7.1	Summarizing the advantages and disadvantages of the proposed methods.	107
7.2	Functional comparison table of proposed methods.	107

第1章

序論

1.1 研究の背景

自動車の車室内騒音は搭乗者の快適性に直接的に影響し、自動車から外部環境へ放射される騒音は騒音公害の原因となるため、自動車の騒音低減は重要な課題の一つである。車室内の騒音は、車両全体の印象を左右するため、車両設計の初期段階から検討される。近年では、自動車の動力源の電動化や自動運転技術の発展により、自動車の騒音に対する要求性能が変化している。モーターを動力源とする電気自動車 (Battery Electric Vehicle, BEV) では、モーターから発せられる騒音が小さいため、ガソリンエンジン車に比べて音圧レベルは低くなる。しかし、エンジン音でマスキングされていたロードノイズや風切り音などの中周波数域の車内騒音が相対的に目立つようになり、これらの騒音に対応した静音設計が要求されている [1][2]。さらに、コネクティッド化や自動運転技術の発展により、車室内での会話の明瞭性や音声アシスト機能の正常な動作が求められるようになり、従来の静音化とは異なる音設計技術が必要となる。

自動車から外部環境へ放射される騒音は、睡眠障害、耳鳴り、心疾患などの重大な健康被害を引き起こす騒音公害の原因となる。世界保健機関の報告によると、騒音公害は大気汚染に次いで有害な環境要因とされており [3]、多くの国や地域で自動車から放射される騒音レベルに関する法規制が制定されており、国際的には自動車の環境騒音規制として通過騒音が規定されている。日本では、国連欧州経済委員会が制定した UN Regulation No.51-03 Series[4] が 2016 年から段階的に導入されており、Phase3 の規制値と調和し、M1, M2, N1 カテゴリーに該当する車両は 2024 年より適用され、M3, N2, N3 カテゴリーに該当する車両は 2026 年から適用を開始する [5]。表 1.1 に、文献 [5] より引用した通過騒音の規制基準を示す。Phase3 では、M1 および M2 カテゴリーの通過騒音の基準値は 68-72 dB 以下となり、現在の Phase2 の基準より 2 dB 程度低く、自動車が走行中に発する騒音の低減が強く求められていることがわかる。

こうした自動車の騒音を低減するため、吸音材が用いられている。吸音材として、微細な繊維や発泡材料などで構成された多孔質型吸音材が広く用いられている。多孔質型吸音材は、微小な流路内部で音エネルギーを熱エネルギーに変換することで、中高周波数の騒音を効率的に低減することができるため、自動車では、ドアパネル、ピラー、フェンダーライナーおよびエンジンカバーなど、多くの内外装部材に使用されている。

吸音材を用いることで騒音を低減できる反面、環境負荷の増大や製品コスト増加の問題が生じる。

Table 1.1 The regulation value of exterior noise of passenger cars specified in Japan. Cited from reference[5], pp.4.

【許容限度目標値】 (単位：dB)

カテゴリー	人員の輸送を目的とする四輪以上の自動車	フェーズ3
M1 カテゴリー 人員の輸送を目的とする自動車であって運転席を含めて9席以下の座席を有するもの	PMRが120以下のもの	68
	PMRが120を超え160以下のもの	69
	PMRが160を超えるもの	71
	PMRが200を超え、乗車定員が4人以下、かつ、座面高さが地上より450mm未満のもの	72
M2 カテゴリー 人員の輸送を目的とする自動車であって運転席を含めて9席を超える座席を有し、かつ、技術的最大許容質量が5トン以下のもの	技術的最大許容質量が2.5トン以下のもの	69
	技術的最大許容質量が2.5トンを超え3.5トン以下のもの	71
	技術的最大許容質量が3.5トンを超え、最高出力が135kW以下のもの	72
	技術的最大許容質量が3.5トンを超え、最高出力が135kWを超えるもの	72
M3 カテゴリー 人員の輸送を目的とする自動車であって運転席を含めて9席を超える座席を有し、かつ、技術的最大許容質量が5トンを超えるもの	最高出力が150kW以下のもの	73
	最高出力が150kWを超え250kW以下のもの	76
	最高出力が250kWを超えるもの	77
カテゴリー	貨物の輸送を目的とする四輪以上の自動車	フェーズ3
N1 カテゴリー 貨物の輸送を目的とする自動車であって技術的最大許容質量が3.5トン以下のもの	技術的最大許容質量が2.5トン以下のもの	69
	技術的最大許容質量が2.5トンを超えるもの	71
N2 カテゴリー 貨物の輸送を目的とする自動車であって技術的最大許容質量が3.5トンを超え12トン以下のもの	最高出力が135kW以下のもの	74
	最高出力が135kWを超えるもの	75
N3 カテゴリー 貨物の輸送を目的とする自動車であって技術的最大許容質量が12トンを超えるもの	最高出力が150kW以下のもの	76
	最高出力が150kWを超え250kW以下のもの	77
	最高出力が250kWを超えるもの	79

吸音材の使用量は1960年代以降、騒音抑制の要求が高まるにともない増加してきた。自動車の多孔質型吸音材に着目すると、世界の自動車用の吸音材の市場は2020年では約45億ドルと推定されており、2027年には59億ドルに達すると予測されている。吸音材の使用量が増加する背景として、コネクティッド化、自動化、シェアリング、電動化などによる自動車産業構造の変化があり、快適性や高級感が重要になるためと推察される。

環境負荷の低減は産業界共通の目標であり、自動車産業は二酸化炭素排出量に占める割合が大きいため、環境負荷低減への貢献が強く求められている。自動車に使用される多孔質型吸音材の多くは、ポリウレタンやポリエステルなどの高分子材料が用いられているが、これら高分子材料の製造工程では温室効果ガスが排出される[6][7][8]。日本自動車工業会の報告によると、自動車の製造工程における二酸化炭素の排出量は、2020年度では約520万トンであり、産業・エネルギー転換部門の約1.6%を占めている[9]。音響特性を満足するために多孔質型吸音材の使用量を増やすと、このような製造時の温室効果ガスの排出量が増加する懸念がある。さらに、国土交通省が報告では、2020年の日本の総二酸化炭素排出量の約18%は自動車を中心とした運輸部門から排出されている。このような現状に対応するため、図1.1に示すように、欧州を筆頭に二酸化炭素の排出に関する環境規制の厳格化が段階的に進められている。現在の自動車産業の二酸化炭素の排出削減目標である年率4%程度で規制が強化され続けた場合、2030年には60g/kmに達すると試算されており、これは燃費に換算すると38km/L程度に相当

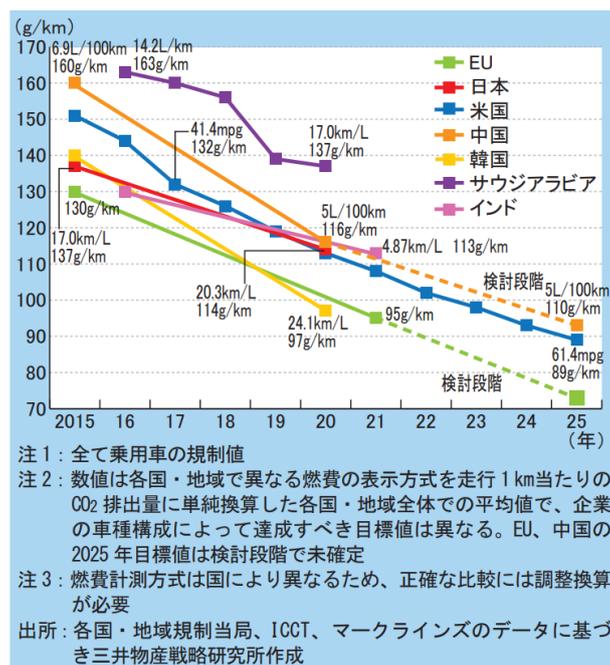


Fig. 1.1 Trends in fuel efficiency regulations for automobiles in each country and region. Cited from reference [10].

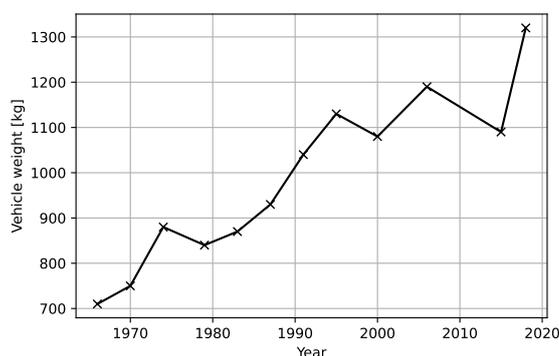


Fig. 1.2 Toyota Corolla weight trends. Data obtained from Toyota website.

し、厳しい環境規制の水準であることがわかる。このような現状に対応するため、自動車に使用する材料の削減、軽量化による燃料効率の向上が取り組まれており、自動車部品単位での軽量化が取り組まれている。一方、安全装備の強化や電動化に伴う重量増加要因が存在している。図 1.2 に、トヨタ カローラの車体重量の変化を示すが、様々な軽量化が取り組まれているにもかかわらず、車体重量は増加傾向にあり、自動車の軽量化による燃料効率の向上が困難な課題である。

環境負荷の増大と同時に、吸音材の使用量の増加に伴い、製品のコストの増加も問題となる。一般的に、広い周波数帯域にわたって高い吸音性能を得るには、吸音材の厚さを増加させる必要がある。吸音材の厚みと吸音率の関係は音波の波長により説明され、周波数の低い音波を対象にするほど多くの吸音材の体積が必要となる。吸音材の体積が増加すると、原材料の使用量による製品コストの増加に加え、吸音材を積載するための製品の構造変更が必要となる可能性があり、開発コストが増大する懸念があ

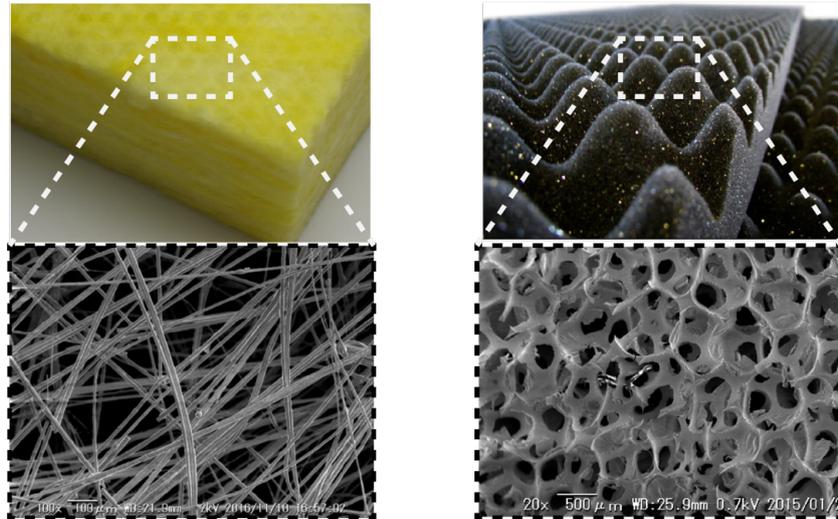


Fig. 1.3 Microstructure of porous materials. The left side shows glass fiber and the right side shows urethane foam sound-absorbing material. The upper side shows the macrostructure of the porous sound absorber, and the lower side shows the microstructure.

る。また、吸音材の品質や音響特性は製造工程でばらつきが生じるため、要求される音響特性を満足するために過剰設計になる可能性がある。過剰設計は、製品があらゆる条件下で意図したとおりに動作することを保証するために、必要以上の性能で製品を設計することを指し、過剰な開発コストや材料を製品に使用することになり、最終的に製品の競争力が低下する恐れがある。その一方で、製造工程でばらつきや使用環境の変化を考慮せず製品を開発した場合、所望の音響性能が得られず、製品の不具合が生じるリスクがある。Crosslandら [11], Kellerら [12], Zhaoら [13], Molchoら [14] の報告では、製品の最終的な総コストの 70–80 % は製品開発の初期段階で決定することが示されており、開発の初期段階で音響特性の不確実性を正しく評価、管理することで、製品コストの増加を抑制することができることが示唆された。

以上の背景より、騒音の抑制と環境負荷および製品コストの低減が両立する多孔質型吸音材の開発が求められている。

1.2 多孔質型吸音材の音響特性の予測と不確実性

多孔質型吸音材の音響特性は、多孔質材の微視構造に強く影響を受ける。図 1.3 にグラスファイバー吸音材と発泡ウレタン吸音材を示す。図左はグラスファイバー吸音材、図右は発泡ウレタン吸音材を示しており、図下は走査型電子顕微鏡で観察した微視構造である。図 1.3 の微視構造より、多孔質材は μm オーダーの微小な流路とそれを構成する固体骨格からなることが確認できる。このような多孔質材に音波が入射すると、多孔質材内部の空気が振動し、流体の粘性、熱伝導および固体の振動減衰の影響により、音波のエネルギーが熱へと散逸し、吸音特性を示す。すなわち、多孔質型吸音材の音響特性はその微視構造に強く依存しており、吸音現象を理解するには微視構造の詳細な解析が不可欠である。

多孔質型吸音材の音響特性を予測するため、音響管を用いた垂直入射吸音率 (JIS A 1405) や残響室によるランダム入射吸音率 (JIS A 1409) により実験的に評価されるとともに、多孔質材料の動特性を

解析する数値計算モデルが過去研究されてきた。先述した通り、多孔質材料は流体相と固体相からなる二相材料であり、吸音減少は微小空間内で生じるマルチスケール・マルチフィジックスの現象であるため、多孔質材料の複雑な微視構造を直接的に離散化し、支配方程式を解くことは困難である。そのため、これまでに多孔質材料の等価物性を求める数値計算モデルが提案されてきた。Delany と Bazley[15] および Miki[16][17] は経験則に基づいた等価物性の計算方法を提案し、Biot[18][19]、Allard ら [20]、Atalla ら [21] は微小円筒管の理論解に基づく等価物性の数値計算モデルを提案した。これらの数値計算モデルは、多孔質型吸音材の微視構造を代表するパラメータを実験的に同定し、多孔質材の等価物性を求めている。このような実験的な工程を含む数値計算モデルを開発初期段階で適用するには、多くの時間的、製造のコストが必要となるため、その利用が限定的となっている。

この課題を解決するため、多孔質材料に均質化法を適用することで、微視構造に基づいて等価特性を求めるボトムアップ型のマルチスケール解析が提案されている。Terada ら [22] は、多孔質材の固体相と流体相を連成系として取り扱い定式化しており、Aulialt ら [23] は多孔質体の固体相が剛壁の場合についてマクロな透水係数を導き、実験的に検証した。Burrige ら [24] は、多孔質吸音材のミクロスケールでの平衡式と構成式からマクロスケールの等価特性値を導き、Biot パラメータと比較した。Yamamoto ら [25] は、流体相の粘性と熱散逸、および固体相の減衰を考慮した漸近展開法に基づく均質化法を多孔質型吸音材に適用し、等価物性を求めた。これらのマルチスケール解析は、固体相と流体相の基本的な材料物性のみを用いて微視構造から吸音率を求めることができるため、実験によるパラメータの同定が必要な Biot らのモデルと比較して、材料設計の初期段階での利用が容易である。しかし、均質化法に基づくマルチスケール解析では、周期的な微視構造を仮定しているため、実際の材料で確認される微視構造の不確かさを考慮することが困難である。

このような微視構造の不確かさは、製造条件や材料品質などに起因するものであり、これらの微視構造の不確かさの影響に関する研究が報告されている。Umberto ら [26] は、天然素材の垂直入射吸音率を測定し、天然素材で生じるばらつきの影響により、吸音率が Delany-Bazley モデルや Biot モデルなど数値計算モデルの結果と一致しないことを示した。Gwon ら [27] は、発泡ウレタン材の製造工程において触媒と発泡剤を変化させ、それによって生じる気泡構造の変化が吸音挙動に及ぼす影響を示した。Doutres ら [28] は、発泡ウレタン材の Johnson-Champoux-Allard モデルの非音響パラメータに対する微視構造パラメータのグローバル感度解析を行い、ケルビンセルのストラット長の変動が音響特性に強く影響することを示した。Trinh ら [29] は、製造上の制約がある場合の発泡多孔構造体の吸音率の感度を解析し、発泡体の微視構造が吸音特性に強く影響を与えることを示した。Perrot ら [30] は、三次元マイクロコンピュータ断層撮影法を用いて発泡ウレタンの微視構造を取得し、微視構造パラメータの不確かさが音響パラメータに与える影響を定量的に示した。また、Lee ら [31] は発泡ウレタン材のトポロジック的特徴を考慮して、吸音特性の不確かさを定量的に評価した研究を報告した。これらの先行研究より、多孔質型吸音材は微視構造の不確かさが音響特性へ伝播し、不確実性を示すことが明らかにされている。

1.3 本論文の目的と構成

以上の背景より、多孔質型吸音材の不確実性を製品開発の初期段階で定量的に評価することで、環境負荷や製品のコストの低減に貢献できると考えられる。そのため、本論文では、多孔質型吸音材の不確実性を定量化するため、マルチスケール解析を援用した確率論的解析手法を提案する。確率論的手法として、モンテカルロ法 (Monte Carlo method, MC) による吸音率の確率分布の予測手法を示し、より効率的な予測手法として、摂動法とベイズ的機械学習手法を提案している。図 1.4 に本論文の構成を示す。また、以下に各章の概要を示す。

第2章では、多孔質型吸音材の不確かさを実験的に検証した結果を示す。自動車の吸音材として用いられている繊維系吸音材と発泡ウレタン材を対象として、微視構造と吸音率の確率分布を取得する。第3章では、多孔質型吸音材料の数値計算モデルを示し、漸近展開法に基づく均質化法によるマルチスケール解析を定式化する。第4章では、多孔質材料の不確実性とその評価手法の基礎事項を示し、MCによる吸音率の解析結果とその収束性について議論する。また、サロゲートモデルを構築することで、効率的に吸音率の確率分布を近似した結果を示す。第5章では、摂動法に基づく確率分布の近似法を定式化し、MCの結果と比較した結果を示す。また、第2章で実験的に取得した微視構造に基づき均質化法の微視構造モデルを構築し、吸音率の確率分布を実験値と比較する。第6章では、摂動法では近似が困難な非線形問題を高精度に予測するため、ベイズ的機械学習を定式化し、吸音率の確率分布を効率的かつ高精度に近似した結果を示す。最後に第7章で、本論文の総括と今後の展望を記述する。

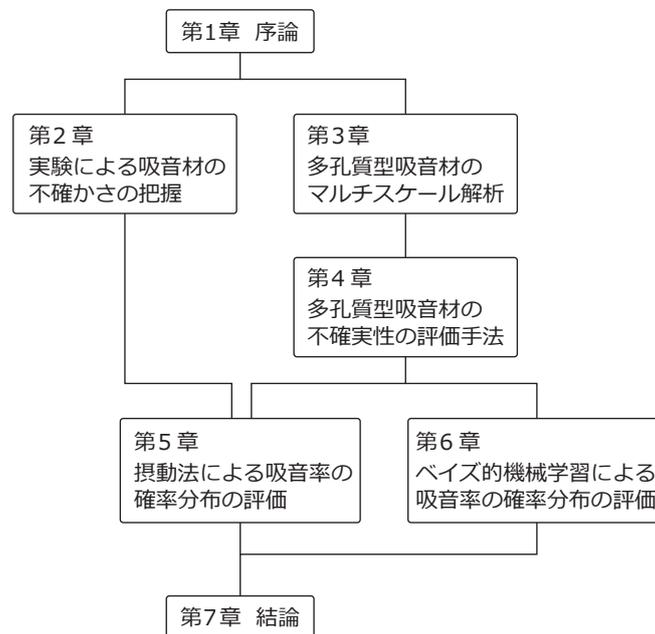


Fig. 1.4 Structural overview of the thesis.

第2章

実験による吸音材の不確かさの把握

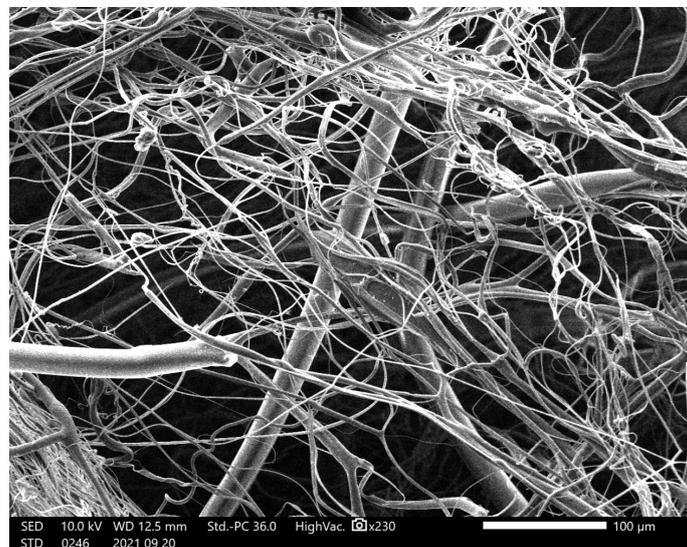


Fig. 2.1 The microstructure of the fiber-type porous sound absorbing material. The image is obtained by scanning electron microscopy (SEM).

本章では、多孔質型吸音材の不確かさを実験的に把握した結果を示す。多孔質型吸音材の微視構造には、製造工程に起因する不確かさが存在しており、それらが製品の音響特性に影響を与えることで、所望の音響性能を得られず、製品開発において開発コストが増大するリスクとなる。Crossland ら [11], Keller ら [12], Zhao ら [13], Molcho ら [14] の報告では、製品の最終的な総コストの 70–80 % は製品開発の初期段階で決定することが示されており、開発初期段階で不確か性を分析、評価および管理することが、製品コストの低減につながると示唆されている。

そこで、多孔質型吸音材の吸音率のばらつきを実験的に取得することで、音響特性の不確か性を定量的に評価する。さらに、吸音率のばらつきの要因として考えられる多孔質型吸音材の微視構造を観察し、微視構造の代表的なパラメータの確率分布を取得する。

2.1 実験方法

多孔質吸音材の吸音率と微視構造の不確かさをそれぞれ実験的に測定することで、多孔質吸音材に存在する不確か性を定量的に評価する。吸音率の不確か性は、同一種類の多孔質型吸音材の試験体を複数個切り出し、それぞれの垂直入射吸音率を測定する。測定した吸音率の確率分布を評価し、平均値および標準偏差を計算する。微視構造の不確か性では、走査型電子顕微鏡 (Scanning Electron Microscope, SEM) を用いて多孔質型吸音材の微視構造を観察し、画像処理ソフトウェアで繊維径やセルサイズなどの微視的な特徴を計測する。得られた特徴量の確率分布から、微視的な特徴量の確率分布を推定する。

2.1.1 垂直入射吸音率

垂直入射吸音率は、材料に音波が垂直な角度で入射したときその材料が音を吸収する能力を示す指標であり、入射する音のエネルギーに対する材料に吸収される音のエネルギーの比率として定義される。実験的に垂直入射吸音率を測定する方法として、JIS A 1405-2「音響管による吸音率及びインピーダンスの測定」で定められた2マイクロホンによる方法を採用した。音響管は図2.2に示す Brüel&Kjær製のTYPE 4206Tを用いた。試験体の直径は、音響管の内径に合わせて $\phi 29$ mmとして、500-6400 Hzの周波数域で吸音率を測定した。音響管の一端には、音響加振するためのスピーカーが設置されており、多孔質型吸音材の背後空気層は0 mmとした。マイクロホンはPCB製1/2 inchマイクロホン378B02、FFTアナライザはOROS OR34Jを用いた。



Fig. 2.2 Impedance tube for measuring sound absorption coefficient of $\phi 29$ at normal incidence of 500-6400 Hz using Brüel&Kjær Type 4206T.

マイクロホン間の振幅及び位相の不一致を最小限にするため、2マイクロホン法と呼ばれる系統交換による繰り返し手法を用いた。マイクロホンの配置をIおよびIIとして、伝達関数 H_{12}^I および H_{12}^{II} を計測する。 H_{12}^I および H_{21}^I より、次式によりマイクロホンのミスマッチを補正した伝達関数を求める。

$$H_{12} = (H_{12}^I \cdot H_{12}^{II})^{1/2} = |H_{12}| e^{j\phi} \quad (2.1)$$

続いて、吸音率の計算方法を導出する。音響管の一端から音響加振された際の入射波と反射波の音圧は、それぞれ p_i と p_r として次式で表される。

$$p_i = \hat{p}_i e^{jkd} \quad (2.2)$$

$$p_r = \hat{p}_r e^{-jkd} \quad (2.3)$$

ここで、 \hat{p} は $d = 0$ における音圧である。このとき、二つのマイクロホンでの音圧 p_1 と p_2 は次式で表される。

$$p_1 = \hat{p}_I e^{jkx_1} + \hat{p}_R e^{-jkx_1} \quad (2.4)$$

$$p_2 = \hat{p}_I e^{jkx_2} + \hat{p}_R e^{-jkx_2} \quad (2.5)$$

式 2.4 および式 2.5 より、入射波と反射波の伝達関数 H_i および H_r は次式で表される。

$$H_r = \frac{p_{2r}}{p_{1r}} = e^{-jk(d_1 - d_2)} = e^{jks} \quad (2.6)$$

$$H_I = \frac{p_{2i}}{p_{1i}} = e^{-jk(d_1 - d_2)} = e^{-jks} \quad (2.7)$$

ここで、 $s = d_1 - d_2$ であり、二つのマイクロホンの距離である。式 2.1 および式 2.6、式 2.7 より、反射率 r は次式で求められる。

$$r = \frac{H_{12} - H_I}{H_R - H_{12}} e^{2jkx_1} \quad (2.8)$$

式 2.8 より、垂直入射吸音率 α は次式で与えられる。

$$\alpha = 1 - |r|^2 \quad (2.9)$$

2.1.2 流れ抵抗

流れ抵抗は多孔質体の空隙における空気の透過抵抗を表す。流れ抵抗は Biot のパラメータの一つとしても知られており、多孔質材料の吸遮音特性を表す重要な指標の一つである。グラスウールなどの繊維系の多孔質材料では、Delany-Buzley-Miki モデルを用いて流れ抵抗から推定した音響インピーダンスが実測値と良い一致を示すため、特に繊維系吸音材の音響特性の有用な指標として利用されている。本論文での流れ抵抗の測定には、図 2.3 に示す測定装置を用いて、ISO 9053 に準拠する直接法で計測した。

2.1.3 微視構造の計測

多孔質型吸音材の μm オーダーの流路と固体相を観察するため JEOL 製の走査型電子顕微鏡 (SEM) JSM-IT200 を用いた。SEM で撮像した画像は画像処理ソフトウェアの ImageJ を用いて繊維径やセル径などの微視特徴量を取得した。ImageJ は米国国立衛生研究所が顕微鏡画像の処理、解析を目的として開発したソフトウェアであり、オープンソースソフトウェアとして公開されている [32]。



Fig. 2.3 Instrument for measuring flow resistance of porous materials.

2.1.4 試験体

試験体として繊維系吸音材と発泡ウレタン吸音材の2種類を用いて、それぞれの吸音率と微視構造を分析した。以下に各試験体の詳細を示す。

繊維系吸音材

繊維系吸音材の試験体として、ポリエステル繊維とポリプロピレン繊維からなる繊維素材を用いた。この素材は、自動車のドアトリムやヘッドライナーの吸音材として採用されており、繊維材の表面部分を不織布で包んだ三層構造となっている。繊維材はダイから押し出された樹脂に高温のガスを吹き付けてポリマーを製造する方法であるメルトブロー法で成形されており、繊維径が $25\ \mu\text{m}$ 程度の太いポリエステル繊維と、 $5\ \mu\text{m}$ 程度の細いポリプロピレン繊維が混合されている。本論文では、中綿部の微視構造の確率分布を評価するため、表面の不織布を除いた中綿部のみを試験体とした。

シート状の吸音材から $\phi 29\ \text{mm}$ のカッターを用いて30個の試験体を切り出し、垂直入射吸音率を測定した。このとき、吸音材を切断する際に断面が潰れて空隙などの微細構造が変化しないように、水に浸漬して凍結した状態で試験体を切断した。図2.4に実験で使用したサンプルを示す。

発泡ウレタン吸音材

発泡ウレタン材は軽量で機械的強度に優れており、成型も容易であるため、吸音材以外にも梱包やクッション材など幅広い用途で使用されている。発泡ウレタン材は、工業的にはポリウレタンと発泡剤を混合して反応させることで微小な空隙を多数持つ発泡材料として製造される。ポリウレタンは、図2.5のように、イソシアネートと水酸基などの活性水素をもつ化合物との重付加反応により合成される高分子材料であり、温和な反応条件で合成されるため工業的に広く利用されている。

このとき、発泡剤、難燃剤、離型剤などの他の添加物を加えることで、発泡ウレタン材の製品が得られる。図2.6に示すように、イソシアネートは水と反応して二酸化炭素を発生させるため、発泡剤としては一般的に水が用いられる。微細空隙構造は、発泡剤の量、反応温度、原料、その他添加剤に依存して変化し、これらは音響特性や機械的強度に強く影響する。吸音材として使用される発泡ウレタン材は、気孔が相互に連通した連続気孔構造となっており、高い吸音特性が得られるよう製造されている。本論文では、連通孔構造をもつ図2.7の軟質ウレタンフォームを試験体として、その微視構造と吸音特性を取得した。試験体は繊維系吸音材と同様に、シート状の吸音材から $\phi 29$ のカッターを用いて30個の試験体を切り出した。



Fig. 2.4 Samples of fiber-based sound absorbing materials for sound absorption coefficient and microstructure analysis.

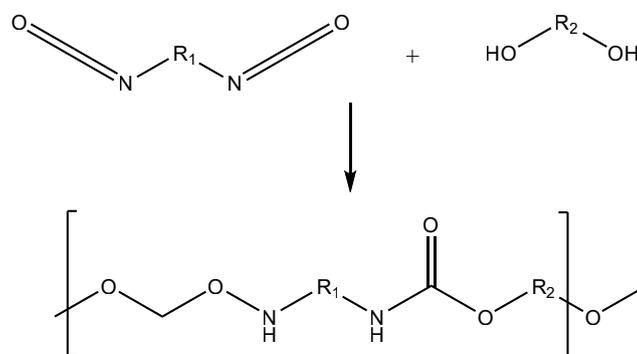


Fig. 2.5 The general reaction process for the synthesis of polyurethane.

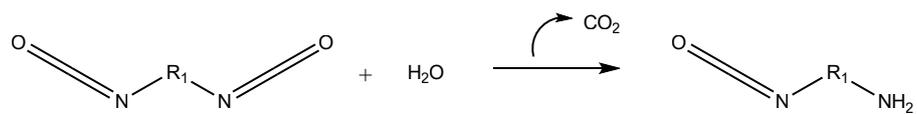


Fig. 2.6 The foaming process that occurs when water and isocyanate are reacted.



Fig. 2.7 Experimental samples of polyurethane foam.

2.2 実験結果

2.2.1 繊維系吸音材の吸音率の測定結果

繊維系吸音材の垂直入射吸音率を測定した結果を図 2.8 に示す。灰色の点線は 30 個の試験体それぞれの垂直入射吸音率、赤色の実線は測定結果の平均値を表す。また、赤色で塗りつぶした領域は平均値 ± 標準偏差を示す。図 2.8 より、吸音率には最大で約 0.2 の差があり、同一製品から切り出した多孔質型吸音材においても、吸音率の結果にばらつきが存在することが明らかとなった。また、吸音率の測定時の系統誤差や偶然誤差については、マイクロホンの校正や系統交換による補正を行うことで、各周波数においてその影響は約 0.02 以下であることを確認した。この結果は図 2.8 で得られた吸音率のばらつきより十分に小さい値であることから、このような吸音率のばらつきは、各試験体の微視構造の不確かさに起因していると考えられる。なお、図 2.8 の 500–700 Hz の周波数域では、小さなピークが複数現れ吸音率が安定しない様子が確認できるが、これは試験体の垂直方向の弾性振動の影響だと考えられる。この弾性振動の影響は、各測定結果を平均化することで、その影響が小さくなることが、図 2.8 の平均値から確認できる。

続いて、吸音率の確率分布を確認するため、1000–6000 Hz の周波数域の 1000 Hz 毎の吸音率のヒストグラムを図 2.9 に示す。図中の各周波数における吸音率の確率分布では、1000 Hz と 2000 Hz のヒストグラムで中心付近のデータが多く、裾広がり傾向にあり、正規分布に近い確率分布を示している。一方、3000 Hz と 4000 Hz のヒストグラムでは、データが一様に分布しており、正規分布ではない確率分布に従っている可能性がある。また、5000 Hz と 6000 Hz では、吸音率の高い方にデータが偏る傾向がみられ、正規分布とは異なる確率分布を示していることが示唆された。これらの結果より、微視構造のランダム性に起因する吸音率の確率分布は必ずしも正規分布に従わず、特に吸音率が 1 に近い値を示す周波数域では、吸音率が高い方向に歪んだ確率分布を示す傾向がみられた。高い吸音率にデータが偏る理由は、吸音率の定義域が $0 \leq \alpha \leq 1$ であるため、高い吸音率を示す周波数域では、その定義域の最大値近傍にデータが集中する傾向があるためと考えられる。したがって、分厚い吸音材など、広い周波数域で吸音率が 1 に近い値を示す場合などでは、吸音率の確率分布を正規分布として仮定できない可能

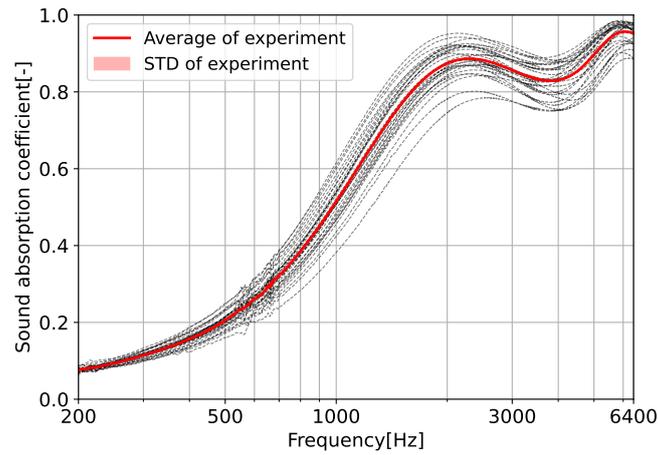


Fig. 2.8 The results of the sound absorption coefficients for 30 samples of fiber-based sound absorbing materials. Each sample's sound absorption coefficient is represented by the gray line, while the red line indicates the expected value of all measurements.

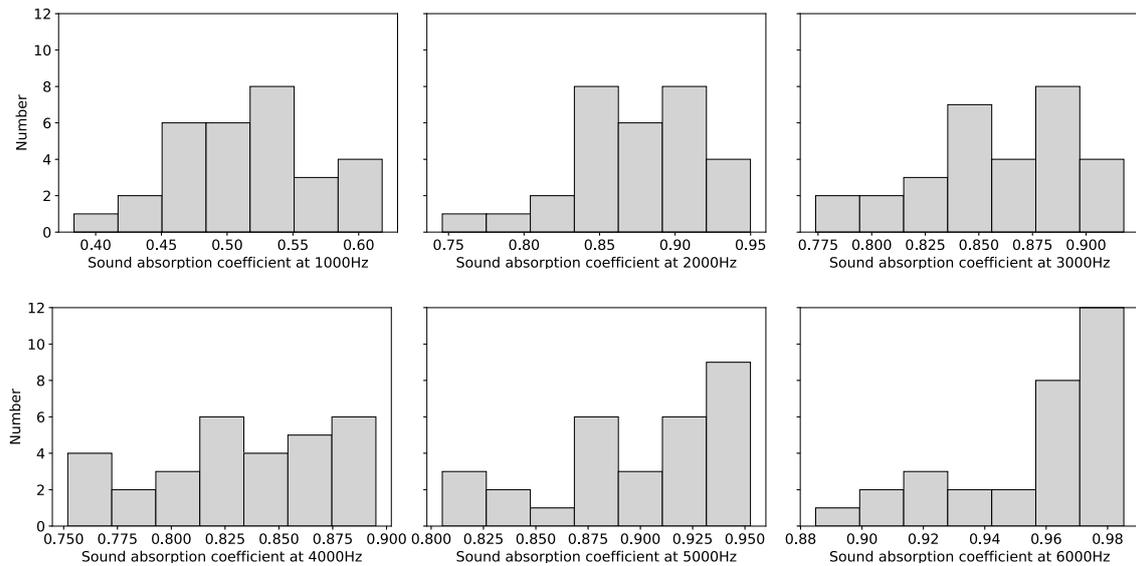


Fig. 2.9 Histogram displays the distribution of sound absorption coefficients for 30 samples of fiber-based sound absorbing materials at various frequencies.

性がある。

2.2.2 単一切断正規分布による近似

正規分布で仮定することが困難な吸音率の確率分布に対して、正規分布の条件付確率分布による近似を検討する。吸音率の条件付確率密度関数を $Q(Y | Y \leq 1.0)$ とすると、正規分布の片側が切断された正規分布は次式で表される。

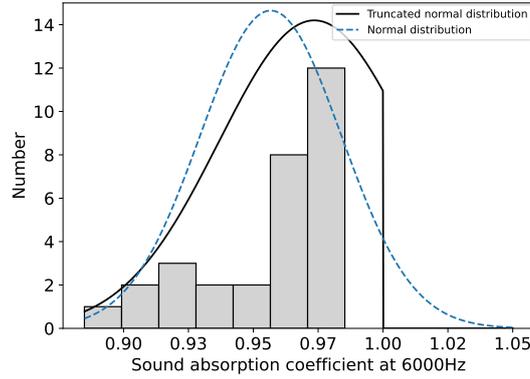


Fig. 2.10 The results of fitting the measured sound absorption coefficient at 6000Hz using the truncated normal distribution (represented by the black solid line). The blue dotted line shows the result of fitting with the normal distribution.

$$Q(Y | Y \leq 1.0) = \frac{Q(Y)}{\int_{-\infty}^{1.0} Q(Y) dY} \quad (2.10)$$

確率密度関数 (Probability Density Function, PDF) は積分すると 1 となるため、正規分布の累積分布関数 $F(Y)$ を用いると次式で表される。

$$Q(Y) = \frac{1}{1 - F\left(\frac{1-\mu}{\sigma}\right)} \frac{y}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(Y-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.11)$$

ここで、 μ は取得した微視構造のパラメータの期待値、 σ は標準偏差を表す。式 2.11 は単一切断正規分布と呼ばれる。このとき、式 2.11 の期待値は次式で表される。

$$\mathbb{E}[Q(Y)] = \mu + \sigma \frac{1}{1 - F\left(\frac{1-\mu}{\sigma}\right)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(1-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.12)$$

また、分散は次式で表される。

$$\mathbb{V}[Q(Y)] = \sigma^2 + \sigma^2 \frac{1-\mu}{\sigma} \frac{F\left(\frac{1-\mu}{\sigma}\right)}{1 - F\left(\frac{1-\mu}{\sigma}\right)} - \sigma^2 \left(\frac{F\left(\frac{1-\mu}{\sigma}\right)}{1 - F\left(\frac{1-\mu}{\sigma}\right)} \right)^2 \quad (2.13)$$

式 2.12 および式 2.13 より、6000 Hz における吸音率の測定結果を単一切断正規分布でフィッティングした結果を図 2.10 に示す。図 2.10 の黒色の実線は単一切断正規分布の PDF、青色の点線は正規分布の PDF を示す。正規分布では吸音率が 1.0 以上の値を示しているが、単一切断正規分布では吸音率 1.0 で確率分布が切断されている様子が確認できる。また、正規分布と比較して単一切断正規分布では期待値と分散が大きい値を示していることが確認された。したがって、高い吸音率における確率分布は、正規分布ではなく単一切断正規分布で近似することにより、妥当な確率分布予測できると考えられる。本論文で取り扱う試験体の吸音率の確率分布は、正規分布を仮定しても大きく差が生じることはないが、より吸音率の高い試験体を取り扱う場合には、本項で示したような条件付確率分布を使用することが妥当であると考えられる。

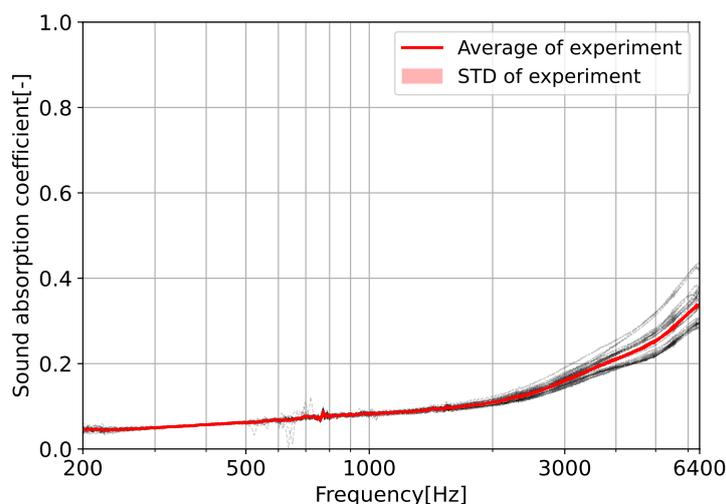


Fig. 2.11 The sound absorption coefficients of 30 different samples of polyurethane foam sound absorbing materials. Each sample's sound absorption coefficient is represented by the gray line, while the red line indicates the expected value of all measurements.

2.2.3 発泡ウレタン材の吸音率の測定結果

5枚のウレタンシートからそれぞれ6サンプルを試験体として切り出し、計30サンプルの垂直入射吸音率を測定した。吸音率の測定結果を図2.11に示す。灰色の点線は各サンプルの垂直入射吸音率、赤色の実線は測定結果の平均値を示している。また、赤色で塗りつぶした領域は平均値±標準偏差を示す。図2.11より、2000 Hz以下の周波数域では吸音率のばらつきは比較的小さく、それ以上の周波数域では吸音率のばらつきが大きくなっていることが確認された。なお、500–800 Hzの周波数域で吸音率が安定しないことが確認されるが、これは繊維系吸音材と同様に、試験体の縦弾性振動の影響と考えられる。

続いて、1000 Hz毎の吸音率のヒストグラムを図2.12に示す。1000 Hzのヒストグラムでは、データが中心に集まり裾広がり傾向にあり、正規分布に近い確率分布を示している。一方、2000 Hz以上のヒストグラムでは、吸音率が低い方にデータが偏っており、正規分布ではない歪んだ確率分布が確認された。これは繊維系吸音材とは異なる傾向を示しており、吸音率が低い場合でも確率分布が歪む可能性がある。本論文では測定サンプル数が30であるため、正確な確率分布を推定することは困難であるが、このような確率分布の歪みは、吸音率と微視構造の変動の関係が強い非線形性があることや、微視構造の変動が非正規分布を示すことに起因している可能性がある。

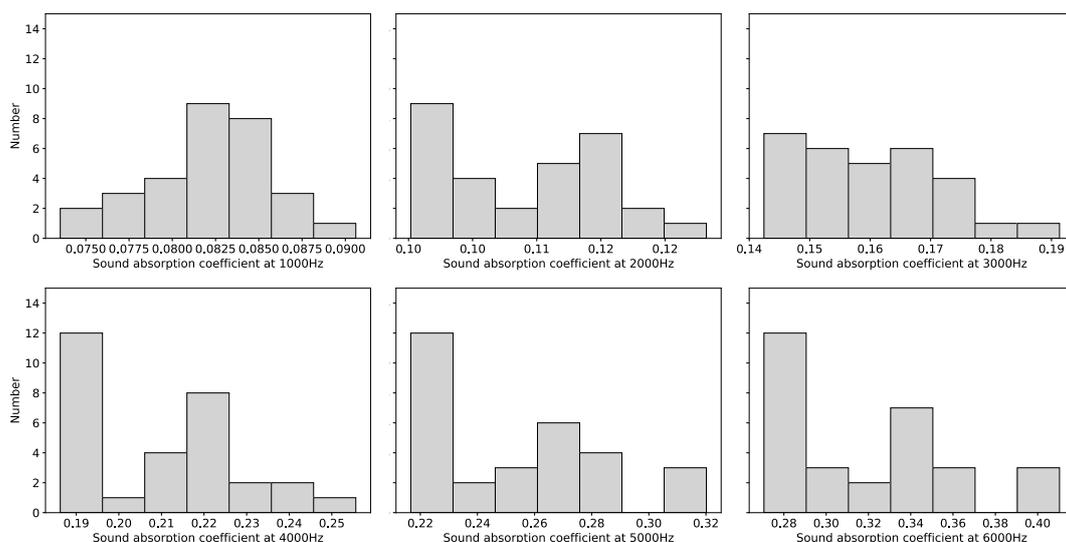


Fig. 2.12 Histogram of sound absorption coefficient for polyurethane foam samples.

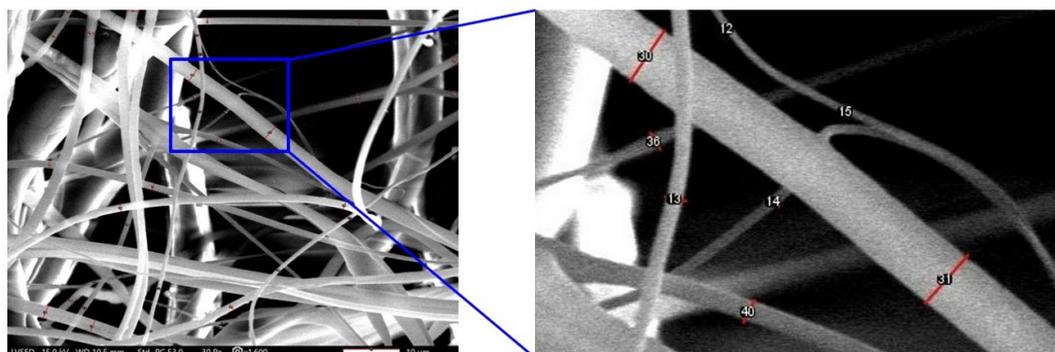


Fig. 2.13 The microstructure of fiber-based porous materials captured through SEM.

2.2.4 繊維系吸音材の微視構造の測定結果

繊維系吸音材の微視構造の不確かさを定量的に評価するため、空隙率と微視構造の代表的なパラメータの統計量を求めた。空隙率は、吸音率測定用に切り出した各サンプルの見掛け密度と真密度から算出した。微視構造の特徴量として、繊維径、繊維間距離、層間距離を選択し、微視構造のSEM画像から取得した。図2.13にSEMで撮像した繊維系吸音材の微視構造を示す。微視構造は太さの異なる2種類の繊維が重なり合っており、その空間内には繊維の粗密が確認された。繊維径は、繊維が円柱状であると仮定した場合の繊維の直径方向の長さとして定義した。繊維間距離は、繊維同士の水平方向の距離を計測した値であり、層間距離は音波の入射方向の繊維層の距離を表す。

図2.14に(a)空隙率、(b)繊維径、(c)繊維間距離および(d)層間距離のデータのヒストグラムを示す。ヒストグラムのデータ数は(a)(c)(d)は60データ、(b)は123データである。図2.14より、(a)から(d)のいずれの微視構造パラメータも平均値を中心とした釣り鐘型の分布を示している。なお、図

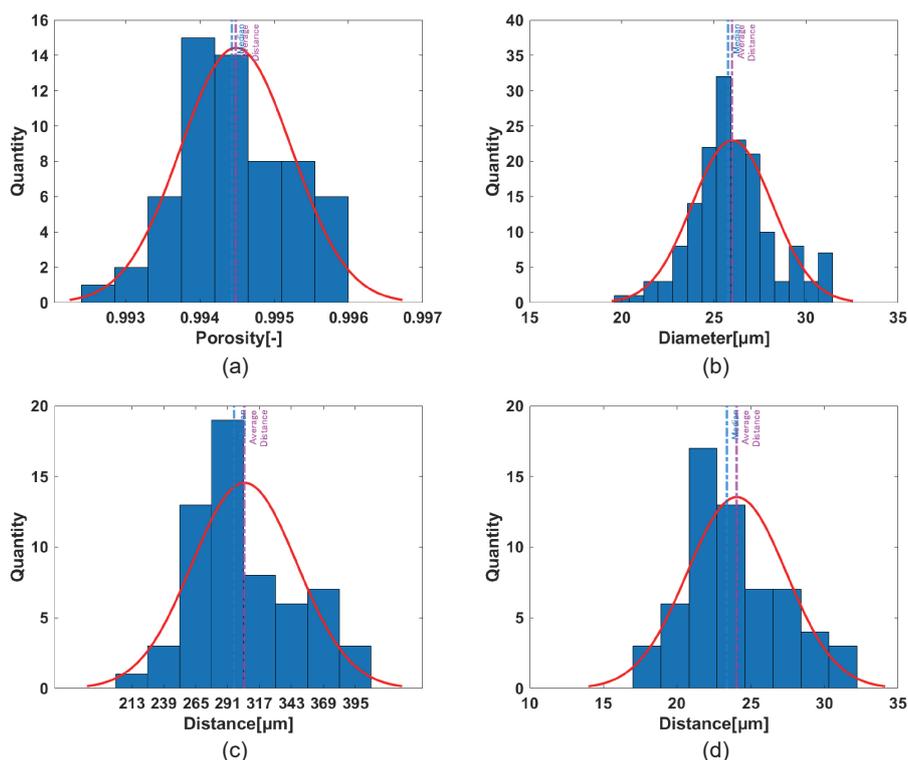


Fig. 2.14 Histogram of various microstructure features in fiber-based porous material samples. (a) shows the porosity, (b) shows the diameter of fibers, (c) shows the fiber distance, and (d) shows the interstitial distance.

2.14の赤色の線はヒストグラムのデータから求めた期待値と分散をもつ正規分布のPDFである。

2.2.5 繊維系吸音材の微視構造の確率分布

2.2.4項で取得した微視構造のパラメータが正規分布に従うか否かを判断するため、Quantile-Quantile(Q-Q)プロットおよび統計的検定により正規性を確認する。Q-Qプロットは正規分布の分位数に対し、サンプルデータの分位数をプロットしたグラフであり、実験データが正規分布に従っていれば直線上にデータがプロットされる。Q-Qプロットでは、標本を昇順に並べ替え、累積分布関数を求める。続いて、標本データを等しい大きさのグループに分割して、標本データの分位数を計算する。さらに、正規分布の累積分布関数の逆数により理論分位を計算し、標本データの分位数とプロットする。微視構造のパラメータのQ-Qプロットを図2.15に示す。図2.15の赤色の線は基準線となる対角線であり、分位数と理論分位数が等しくなる線を表している。微視構造パラメータの(a)から(d)いずれにおいても、基準対角線に対して若干の偏差は存在するものの、総じて直線上にプロットされていることが確認された。この結果より、各微視構造パラメータの分布は正規分布から大きく逸脱する分布ではなく、正規分布に準じた確率分布を示すと推察される。

続いて、統計的検定により正規性を判定する。正規分布への適合度を検定する代表的な方法として、Shapiro-Wilk検定、Kolmogorov-Smirnov検定、Anderson-Darling検定、カイ二乗検定などがある。これらは、実験データが正規分布の母集団からサンプリングされたという帰無仮説を検定す

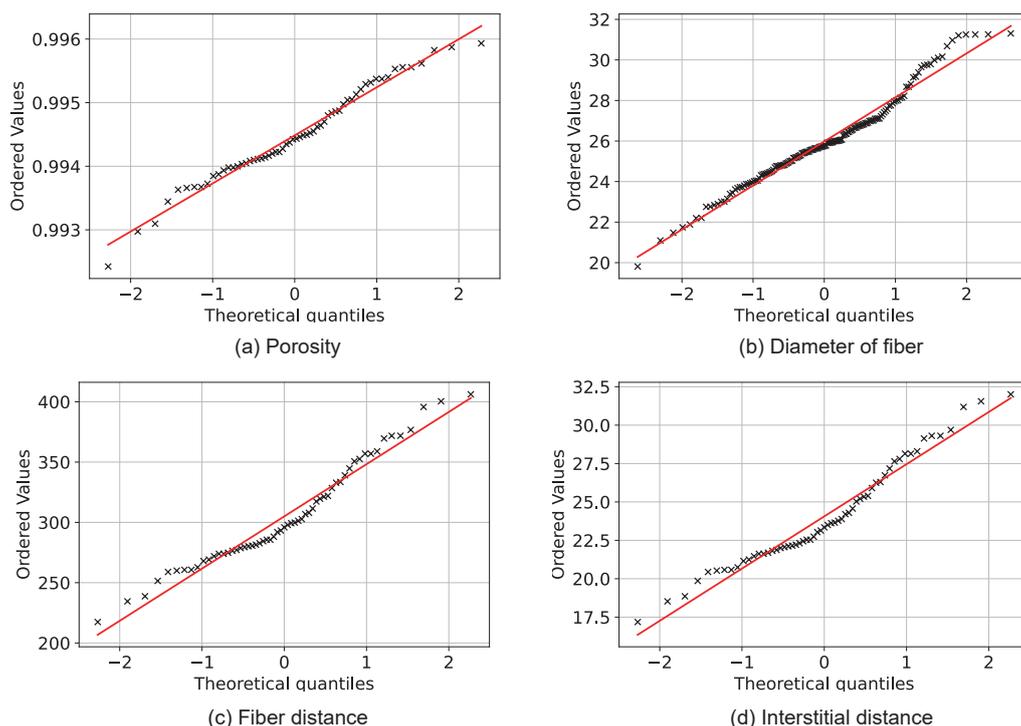


Fig. 2.15 Quantile-Quantile plot of porous microstructure parameters compared to normal distribution.

る。各手法は標本サイズや標本の分布に応じて使い分けするか、複数の検定を用いて正規性を確認する。Shapiro-Wilk 検定は正規性の検定で一般的に用いられており、検定統計量 W が 1 に近い場合、実験データは正規分布に従う可能性が高いことを示す検定手法である。標本数が数十から数百程度の中程度のデータ数に適しており、歪度が比較的小さいデータに適した方法であるが、大規模なデータでは正しい検定結果が得られない可能性がある。Kolmogorov-Smirnov 検定は、標本数が数百から数千以上の中程度もしくは大規模データに適した検定方法であり、検定統計量 D が小さい場合、データは正規分布である可能性が高いことを示す。Anderson-Darling 検定は、Kolmogorov-Smirnov 検定を改良した検定方法であり、標本数が 30 以下程度の小規模データによく適合する検定方法である。カイ二乗検定による適合度の検定は、実験データが正規分布などの PDF と一致するかどうかを検定する方法である。本論文で取得した標本数は、図 2.14 の (a)(c)(d) は 60 データ、(b) は 123 データであり、中規模の標本数に該当するため、本論文では Shapiro-Wilk 検定と Kolmogorov-Smirnov 検定により微視構造のパラメータの分布の正規性を検定した結果を示す。

Shapiro-Wilk 検定では、標本を X_1, \dots, X_n とすると、検定統計量 W は次式で表される。

$$W = \frac{(\sum_{i=1}^n a_i X_{(i)})^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} \quad (2.14)$$

ここで、 a_i は定数であり、標準正規分布からサンプリングされた独立同分布の確率変数の順序統計量の期待値 \mathbf{m} と分散共分散行列 \mathbf{V} を用いて次式で表される。

Table 2.1 Summary of Shapiro-Wilk test for normality: W statistic and p-values for testing normal distribution hypothesis.

Parameters	W	p-values
(a) Porosity	0.97995	0.43791
(b) Diameter of fiber	0.97636	0.00815
(c) Fiber distance	0.95936	0.04669
(d) Interstitial distance	0.95936	0.04668

$$(a_1, \dots, a_n) = \frac{\mathbf{m}^T \mathbf{V}^{-1}}{(\mathbf{m}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{V}^{-1} \mathbf{m})^{1/2}} \quad (2.15)$$

式 2.14 および式 2.15 より, W は順序統計量の期待値からの偏差の二乗和と, データの平均値からの偏差の二乗和の比を表していることがわかる. すなわち, W の値が 1 に近いほど順序統計量は正規性のもとで期待値と一致し, 0 に近いほど順序統計量は正規性のもとで期待値と一致せず, データが正規分布に従わないことを示す.

実験で取得した微視構造パラメータの統計量 W および p 値を表 2.1 に示す. (a)~(d) いずれの微視パラメータにおいても W は 0.95 以上の値を示し, 1 に近い値であることが確認された. 式 2.14 および式 2.15 より, これらの微視パラメータは正規性のもとで期待値とよく一致することが示された. Shapiro-Wilk 検定における p 値は, 標本から得られた W と, 正規性の帰無仮説の下での検定統計量の分布を比較することによって計算される. (a) の p 値は 0.43791 であり, 有意水準 5% のもとで有意差がなく, 帰無仮説が棄却されない. したがって, 実験データは正規分布と異なるとはいえない, と判断される. これは, 統計的仮説検定では, 帰無仮説が棄却されない場合, 帰無仮説が棄却されず, 誤っているとは言えないことを意味し, この標本が正規分布に従っていると言い切ることはできないことに注意する必要がある. (b)~(d) の p 値 0.05 以下であり, 有意水準 5% のもとで帰無仮説が棄却され, 標本は正規母集団からサンプリングされていないと判断される.

次に, Kolmogorov-Smirnov 検定により微視パラメータの正規性を検定した結果を示す. Kolmogorov-Smirnov 検定は, ノンパラメトリックな統計検定手法であり, データの累積分布関数に基づいて, 標本の累積分布関数と正規分布の累積分布関数との間の最大差を求める方法である. Kolmogorov-Smirnov 検定では, 標本を昇順に並び替え, 累積分布関数 $S(X)$ を求める.

$$S(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \bar{X}_i(X) \quad \bar{X}_i(x) = \begin{cases} 1 & (X_i \leq x) \\ 0 & (X_i > x) \end{cases} \quad (2.16)$$

$S(X)$ と正規分布の累積分布関数 $F(X)$ より, 統計量 D を求める.

$$D = \max |F(X) - S(X)| \quad (2.17)$$

式 2.17 より, D は 0 と 1 の間の値を取り, 標本の範囲内の任意の点における $S(X)$ と $F(X)$ の間の最大偏差を表すことがわかる. 微視構造パラメータの $S(X)$ と $F(X)$ を比較した結果を図 2.16 に示す. 黒色の線で示した正規分布の $F(X)$ に対し, $S(X)$ の差が最大となる点の偏差が D となる. $S(X)$ と

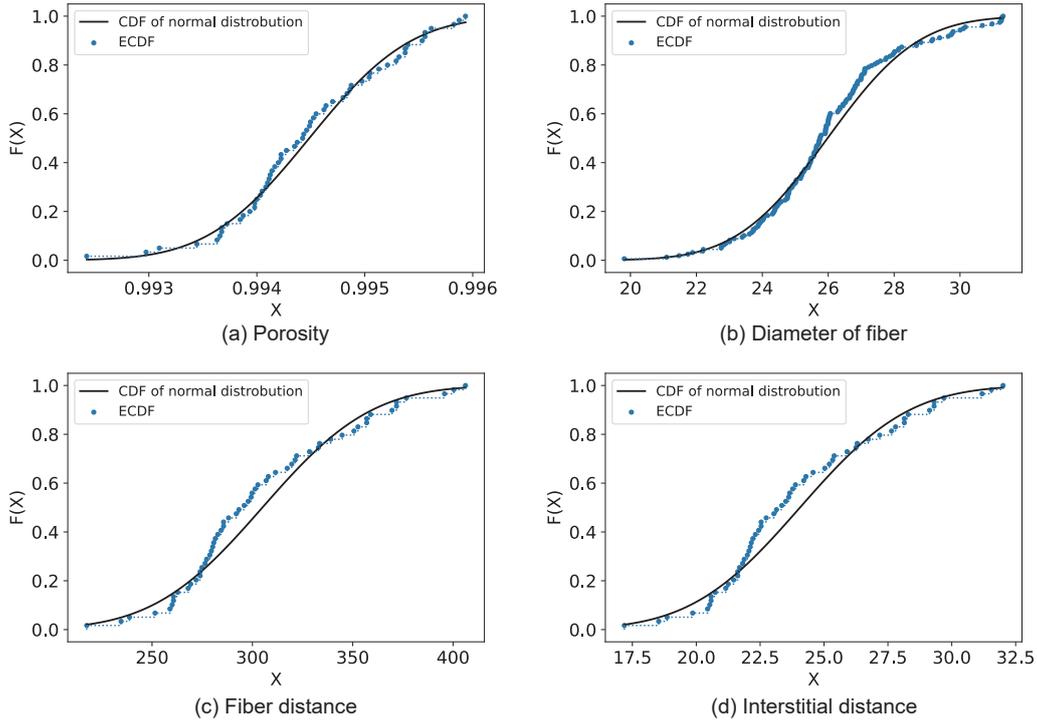


Fig. 2.16 Comparison of the empirical cumulative distribution function $S(X)$ with the cumulative distribution function of the normal distribution $F(X)$. The statistic D represents the maximum deviation of $S(X)$ and $F(X)$.

Table 2.2 Summary of Kolmogorov-Smirnov test for normality: D statistic and p-values for testing normal distribution hypothesis.

Parameters	D	p-values
(a) Porosity	0.07142	0.89800
(b) Diameter of fiber	0.11536	0.38300
(c) Fiber distance	0.08522	0.19013
(d) Interstitial distance	0.08522	0.19013

$F(X)$ の最大の偏差を D として, $K(D)$ を Kolmogorov-Smirnov 累積分布関数することで, 次式で p 値を計算する.

$$p = 1 - K(D) \quad (2.18)$$

なお, 帰無仮説は Shapiro-Wilk 検定と同様である. 式 2.17 および式 2.18 より求めた D および p 値の結果を表 2.2 に示す. 表 2.2 より, 微視構造パラメータの (a) から (d) いずれにおいても, D が小さな値を示し, $F(X)$ との最大偏差が小さいことが示された. また, p 値はいずれも 0.05 以上の値を示しており, 有意水準 5% のもとで有意差がなく, 帰無仮説が採択される. したがって, Kolmogorov-Smirnov 検定では, 実験データは正規分布と一致しているという帰無仮説を棄却できない, と判断される.

以下に微視構造のパラメータの正規性の検定結果をまとめる. 2.2.4 で (a) 空隙率, (b) 繊維径, (c) 織

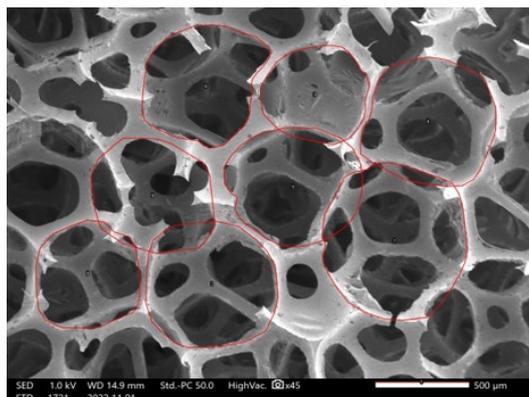


Fig. 2.17 The microstructure of polyurethane foam porous materials, which was captured through SEM.

縦間距離および (d) 層間距離の微視構造パラメータのデータを標本として、試験体の重量と SEM データより取得した。これらの標本に対し、Q-Q プロット、Shapiro-Wilk 検定、および Kolmogorov-Smirnov 検定により正規分布に従うか否かを判断した。このとき、標本の正規性は標本数と検証方法に強く依存するため、微細構造パラメータの正規性を検証するために複数の方法を使用した。Q-Q プロットでは、標本は総じて基準対角線上にプロットされており、正規分布に近い分布を示すことが確認された。有意水準を 5 % としたとき、Shapiro-Wilk 検定では (a) 空孔率が正規分布に従うことが示され、Kolmogorov-Smirnov 検定ではすべての微視構造パラメータが正規分布に従うことが示された。以上より、検定結果の有意性に差はあるものの、これらの結果を総合的に判断し、本論文で得られた微視構造パラメータは正規分布に従うと仮定できると判断した。

2.2.6 発泡ウレタン材の微視構造の測定結果

発泡ウレタン吸音材の微視構造として、連通孔のセルサイズを測定した。図 2.17 に SEM で撮像した発泡ウレタン吸音材の微視構造を示す。発泡工程により生じたガスにより微小な空隙が生じており、各空隙が相互に開口した連通孔構造が観察された。図 2.17 の赤枠部で示すように、SEM 画像で確認された空隙の面積を測定し、それが真円と仮定して骨格部の長径を求めた。

図 2.17 に、150 箇所計測したセルサイズのヒストグラムを図 2.18 に示す。セルサイズの平均値は $704.4 \mu\text{m}$ 、標準偏差は $68.91 \mu\text{m}$ であり、平均値近傍に多くのデータが存在する釣り鐘型の分布を示した。赤色の線はヒストグラムのデータから求めた期待値と分散を示す正規分布の PDF であり、ヒストグラムの分布と概ね一致を示していることが確認された。

2.2.7 発泡ウレタン材の微視構造の確率分布

2.2.5 と同様に、Q-Q プロット、Shapiro-Wilk 検定、Kolmogorov-Smirnov 検定により、標本の正規性を確認した。図 2.19 にセルサイズの Q-Q プロットを示す。分布の尾部に相当する両端部分において基準対角線からの若干の乖離が見られるものの、標本は概ね基準対角線にプロットされており、正規分布に準じた確率分布を示すと考えられる。

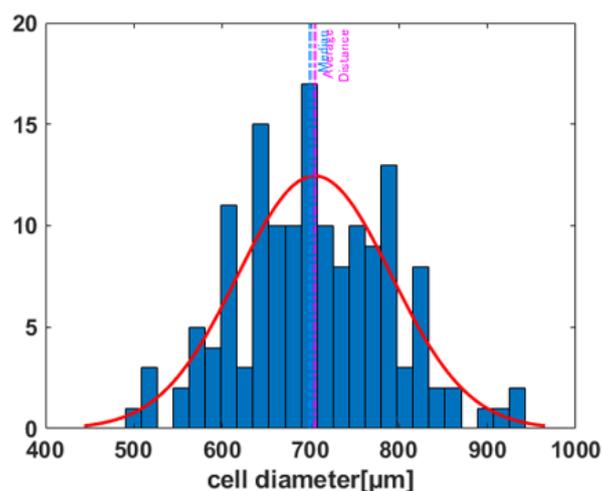


Fig. 2.18 The microstructure of polyurethane foam porous materials, which was captured through SEM.

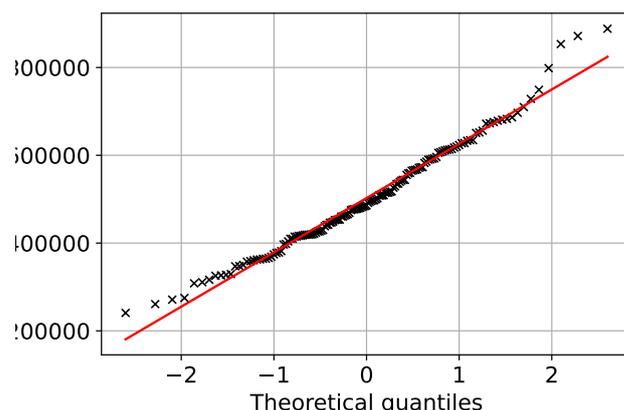


Fig. 2.19 Quantile-Quantile plot of polyurethane foam microstructure parameters compared to normal distribution.

続いて、Shapiro-Wilk 検定、Kolmogorov-Smirnov 検定の結果を表 2.3 に示す。また、図 2.20 に累積正規分布関数と正規分布の累積分布関数の比較結果を示す。表 2.3 より、統計量は Shapiro-Wilk 検定の W は 1 に近く、Kolmogorov-Smirnov 検定の D は 0 に近いことが示され、正規分布に近い確率分布を示すことが示唆された。一方、5% 信頼区間とした場合の p 値では、Shapiro-Wilk 検定では有意差があり、Kolmogorov-Smirnov 検定では有意差がない結果が得られた。すなわち、Shapiro-Wilk 検定では正規分布に従っていない、Kolmogorov-Smirnov 検定では正規分布に従っていると判定された。

以上の結果より、本論文では、発泡ウレタン材のセルサイズも繊維系吸音材と同様に、正規分布に従う確率変数として扱う。なお、これらの結果はすべての多孔質材の微視構造パラメータを正規分布として扱えることを示しているわけではなく、吸音材の種類や微視構造のパラメータの選択に応じて適切な確率分布を選択する必要がある。

Table 2.3 Summary of test for normality: statistics are W and D and p-values for testing normal distribution hypothesis.

Test method	Statistics	p-values
Shapiro-Wilk test	0.97991	0.02797
Kolmogorov-Smirnov test	0.06217	0.59015

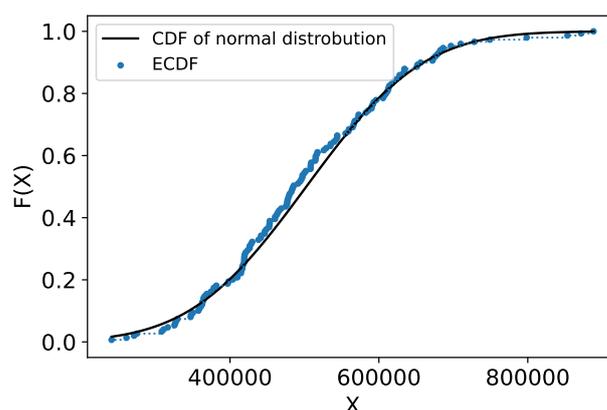


Fig. 2.20 Comparison of the empirical cumulative distribution function $S(X)$ with the cumulative distribution function of the normal distribution $F(X)$ of polyurethane foam. The statistic D represents the maximum deviation of $S(X)$ and $F(X)$.

2.3 まとめ

本章では、繊維系吸音材と発泡ウレタン吸音材を対象として、吸音率と微視構造の不確実性を実験的に取得した。30 サンプルの繊維型吸音材の吸音率を測定した結果、最大で約 0.2 のばらつきがあることを明らかとした。各周波数の吸音率の確率分布をヒストグラムで確認すると、吸音率の低い周波数域ではばらつきが小さく、正規分布に近い分布を示していた。一方、吸音率が高くなる高周波数域では、吸音率が高い方向にデータが集中し、歪んだ分布を示すことが確認された。また、微視構造パラメータの分布を取得し、ヒストグラム、Q-Q プロット、Shapiro-Wilk 検定、および Kolmogorov-Smirnov 検定により分布の正規性を判定した。その結果、本論文で取得したすべての繊維系吸音材の微視パラメータは、正規分布に従うと仮定できると判断した。

発泡ウレタン吸音材では、吸音率は高周波数域で最大で 0.1 程度のばらつきを示すことが明らかとなった。各周波数の吸音率の確率分布をヒストグラムで確認すると、繊維系吸音材と同様に、吸音率の低い周波数域ではばらつきが小さく、正規分布に近い分布を示していた。一方、高周波数域では繊維系吸音材とは異なる傾向が確認され、吸音率が低い方向にデータが集中し、歪んだ分布を示すことが明らかとなった。微視構造パラメータとしてセルサイズを選択し、繊維系吸音材と同様に分布の正規性を判定した。その結果、発泡ウレタン吸音材のセルサイズは正規分布に従うと仮定できると判断した。

以上より、同一種類の多孔質型吸音材においても、吸音率は不確かな値を示し、確率的な振る舞いを

示すことを明らかにした。吸音率の不確か性は多孔質型吸音材の微視構造に起因すると考えられ、それらの微視構造が不確か性を示すことを明らかにした。このような吸音率の不確か性は、所望の音響特性が得られないリスクとなり得るため、次章以降ではこれらの吸音率の不確かさを定量的に評価する数値計算手法を定式化する。

第3章

多孔質型吸音材のマルチスケール解析

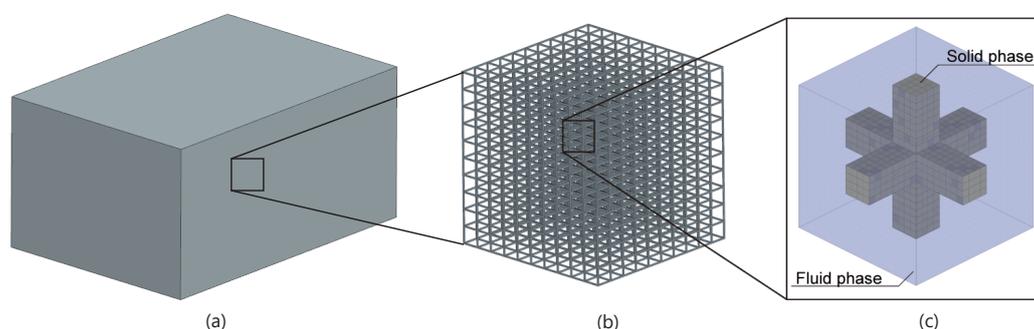


Fig. 3.1 A schematic view of the unit cell of a poroelastic material in multiscale analysis. (a) presents the macro structure, (b) shows the meso structure, and (c) shows the unit cell of the porous material.

製品開発において、数値計算技術は製品設計上の決定を下すうえで重要な役割を果たしている。数値計算を用いることで、実際の製品を試作することなく、様々な動作環境課での製品の性能を予測することが可能となり、さらに、最適化計算を援用することで、軽量化やコスト削減に貢献できる。また、故障モードの特定や環境要因が製品に与える影響を評価することで、製品の潜在的なリスクや問題を特定することができる。吸音材においても、これまでにさまざまな数値計算技術が提案されており、吸音材を用いた製品開発で活用されている。

本章では、多孔質型吸音材の音響性能を予測する数値計算手法の先行研究を示す。多孔質型吸音材の数値計算手法としては、実験的なパラメータに基づいて多孔質材の等価物性を同定する手法と、微視構造から数値計算で等価物性を同定するマルチスケール解析手法に大別される。図 3.2 にそれぞれの手法の概要を示す。図 3.2 の左のフローは実験的に同定したパラメータを用いた方法であり、代表的な方法として Biot のモデルがある。図 3.2 の右のフローは、多孔質型吸音材の微視構造を図 3.1 のように周期構造を仮定してモデル化し、均質化法により等価物性を算出するマルチスケール解析手法である。マルチスケール解析では実験的なパラメータの同定が不要であり、微視構造から音響特性を直接的に予測することが可能であるため、本論文での数値計算手法として採用した。

本章では、最初に音波の伝播を表す波動方程式を示し、実験的なパラメータの同定を伴う多孔質型吸音材の数値計算手法を定式化する。続いて、本論文で採用した漸近展開法に基づく均質化法について定

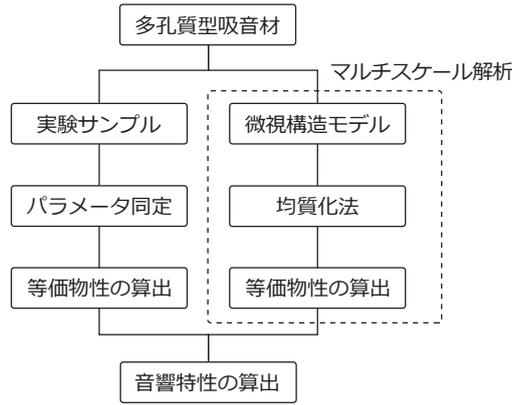


Fig. 3.2 Numerical simulation method for porous sound absorbers.

式化し，マルチスケール解析における多孔質型吸音材の解析手法を説明する．

3.1 基礎事項

本節では，音波の伝播を表す波動方程式と，多孔質型吸音の吸音率の定義を示す．

3.1.1 音波の伝播

音波は媒質中を伝播する縦波であり，流体の保存式から導かれる波動方程式で表される．微小直方体における流体の運動方程式と連続の式はそれぞれ式 3.1 および式 3.2 で表される．

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p = -\left(\frac{\partial p}{\partial x}, \frac{\partial p}{\partial y}, \frac{\partial p}{\partial z} \right)^T \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = -\frac{1}{K} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.2)$$

ここで， p は音圧， t は時間， \mathbf{v} は粒子速度ベクトル， ∇ はラプラシアンである．式 3.1 および式 3.2 より，波動方程式は式 3.3 で表される．

$$\nabla^2 p - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = 0 \quad (3.3)$$

ここで， $c = \sqrt{K/\rho}$ は音速である．

定常状態では両辺を t でフーリエ変換することで，式 3.4 の Helmholtz 方程式が得られる．

$$\nabla^2 p(\mathbf{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} p(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (3.4)$$

ここで， \mathbf{r} は空間の座標ベクトル， ω は角周波数である．

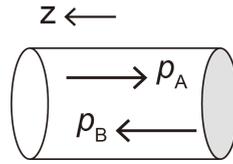


Fig. 3.3 Propagation of acoustic waves in a cylindrical tube with one open and one closed end.

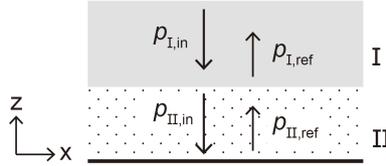


Fig. 3.4 Direction and definitions of acoustic wave incident. Acoustic wave reflected on the interface S between medium I and II, where medium I and medium II have different properties.

3.1.2 吸音率

図 3.3 に示した剛壁の円筒管内での音波の伝播を考える．管径以下の波長の音波は円筒管内では平面波と仮定できる．管内の音圧は，Helmholtz 方程式の解として次式で与えられる．

$$p = Ae^{jk^a z} + Be^{-jk^a z} \quad (3.5)$$

ここで， k^a は空気中を伝播する音の波数， j は虚数単位である．また，音響粒子速度は次式で与えられる．

$$u = \frac{-1}{\rho_0 c_0} \left(Ae^{jk^a z} - Be^{-jk^a z} \right) \quad (3.6)$$

ここで ρ_0 は空気の密度， c_0 は空気中の音速である． $\rho_0 c_0$ は空気の特徴インピーダンス Z_0 と呼ばれる．なお，複素振幅 A と B は管端の境界条件によって決定される．比音響インピーダンス Z は，ある位置における圧力と粒子速度の関係を表している．

$$Z = \frac{p}{u} \quad (3.7)$$

式 3.7 より， Z は圧力と粒子速度の位相差を示す複素数である．

図 3.4 のように，二つの媒質の界面 S に入射する平面波について，音波の一部は反射し，一部は隣接する媒質に入射する．入射波と反射波の比は，式 3.8 の反射係数 R で表される．

$$R = \frac{p_B}{p_A} \quad (3.8)$$

このとき，境界面 S で両媒質の圧力が同一であり，粒子速度の法線成分が S を介して連続であると境界条件を与えると， R は次式で表される．

$$R = \frac{Z_{II} - Z_I}{Z_{II} + Z_I} \quad (3.9)$$

ここで、 Z_I は媒質 I の特性インピーダンス、 Z_{II} は媒質 II の特性インピーダンスを表す。吸音率 α は、平面波の場合では音響エネルギーは波の振幅の二乗に比例するため、

$$\alpha = \frac{|A|^2 - |B|^2}{|A|^2} = 1 - |R|^2 \quad (3.10)$$

と表すことができる。したがって、多孔質吸音材の特性インピーダンス、すなわち多孔質材料の等価密度と等価弾性率を求めることで、多孔質材の吸音特性を予測することができる。

3.2 多孔質型吸音材の数値計算モデル

多孔質型吸音材は、数 μm から数百 μm オーダーの微小な流路をもち、音波が入射すると流路内の空気が振動し、音波が伝播する。このとき、壁面と空気との摩擦粘性、固体相への振動伝播、圧縮・膨張による熱伝導により、音波のエネルギーが散逸する。このように、吸音は多孔質材内部の流体の流れ、弾性振動、熱伝導が複雑に連成したマルチフィジックス現象の結果として生じる。本節では、多孔質型吸音材の等価特性を実験的なパラメータで同定し、吸音現象をモデル化した先行研究を示す。

3.2.1 Delany-Bazley-Miki モデル

Delany と Bazley[15] は固体相を伝搬する音波を無視できると仮定し、音波の伝播方向の静的空気流れ抵抗 σ を用いた特性インピーダンス Z_c と波数 k の経験式を次式で提案した。

$$Z_c = \rho_0 c_0 \left[1 + 9.08 \left(10^3 \frac{f}{\sigma} \right)^{-0.75} - j 11.9 \left(10^3 \frac{f}{\sigma} \right)^{-0.73} \right] \quad (3.11)$$

$$k = \frac{\omega}{c_0} \left[1 + 10.8 \left(10^3 \frac{f}{\sigma} \right)^{-0.70} - j 10.3 \left(10^3 \frac{f}{\sigma} \right)^{-0.59} \right] \quad (3.12)$$

ここで、 ρ_0 は空気の密度、 c_0 は音速、 j は虚数単位、 f は周波数、 ω は角周波数である。この経験式が有効な周波数域は σ を用いて以下で表される。

$$0.01 < \frac{f}{\sigma} < 1.00 \quad (3.13)$$

Miki[16][17] は Delany と Bazley のモデルでは特性インピーダンスの実部が負になることを示し、式 3.11 と式 3.12 を以下のように修正した。

$$Z_c = \rho_0 c_0 \left[1 + 5.50 \left(10^3 \frac{f}{\sigma} \right)^{-0.632} - j 8.43 \left(10^3 \frac{f}{\sigma} \right)^{-0.632} \right] \quad (3.14)$$

$$k = \frac{\omega}{c_0} \left[1 + 7.81 \left(10^3 \frac{f}{\sigma} \right)^{-0.618} - j 11.41 \left(10^3 \frac{f}{\sigma} \right)^{-0.618} \right] \quad (3.15)$$

式 3.14 および式 3.15 は Delany-Bazley-Miki モデルと呼ばれる。Delany-Bazley-Miki モデルは経験的な式であるものの、解析に必要なパラメータが σ のみであることから、固体相の運動を無視できる空孔率が 1 に近い繊維系吸音材料で現在も用いられている。

3.2.2 Biot のモデル

Johnson ら [33] は固体相の運動を無視し、音響エネルギーが等価な流体相のみを伝搬すると仮定して、多孔質材料の解析モデルを報告した。Biot[18][19], Allard ら [20], Atalla ら [21] は流体-音響パラメータと弾性多孔質材料の機械的パラメータを用いて、固体相と流体相の両方を伝搬する音波をモデル化した。Biot らのモデルは構成則や平衡方程式に基づく数値計算モデルであり、多孔質型吸音材の数値計算モデルとして広く用いられている。

添え字の s を固体相、 f を流体相として、固体相の変位を u_k^s 、流体相の固体相に対する相対変位 U_k^f とする。このとき、 σ_{kl}^s を固体相の応力、 σ_{kl}^f を流体相の応力として固体相と流体相の運動方程式は次式で表される。

$$-\bar{\rho}\omega^2 u_k^s - \phi\rho_0^f\omega^2 U_k^f = \frac{\partial\sigma_{kl}^s}{\partial x_l} + \frac{\partial\sigma_{kl}^f}{\partial x_l} \quad (3.16)$$

$$-\phi\rho_0^f\omega^2 u_k^s - \rho^{fc}\omega^2 U_k^f = \frac{\partial\sigma_{kl}^f}{\partial x_l} \quad (3.17)$$

ここで、 ϕ は多孔質材の空孔率、 p^f は流体相の圧力、 ω は角周波数、 δ_{kl} は Kronecker のデルタである。 ρ_0^f は流体相の密度、 $\bar{\rho}$ は多孔質材の平均質量密度であり、 ρ^s を固体相の質量密度として $\bar{\rho} = (1-\phi)\rho^s + \phi\rho_0^f$ である。 ρ^{fc} は流体相の等価密度であり、固体相と流体相の境界部の粘性を考慮して次式で表される。

$$\rho^{fc} = \rho_0^f\alpha_\infty \left[1 + \frac{\sigma\phi}{j\omega\rho_0^f\alpha_\infty} G(\omega) \right] \quad (3.18)$$

ν は流体相の動粘性係数、 α_∞ は迷路度、 σ は空気の流れ抵抗である。また、 $G(\omega)$ は経験的な関数であり、次式で表される。

$$G(\omega) = \sqrt{1 + \frac{4j\omega\nu}{\Lambda^2} \frac{\rho^{f2}\alpha_\infty^2}{\sigma^2\phi^2}} \quad (3.19)$$

Λ は粘性代表長さで、実効密度の高音域における挙動を表すパラメータである。多孔質体の細孔内部の非圧縮、非粘性の定常流れに対し、流体相の領域を Ω 、流体相と固体相の境界を Γ として、以下で定義される。

$$\Lambda = \frac{2 \int_{\Omega} U_k^2(\mathbf{r}) dV}{\int_{\Gamma} U_k^2(\mathbf{r}) dS} \quad (3.20)$$

固体相及び流体相の構成式はそれぞれ次式で与えられる。

$$\sigma_{kl}^s = [(P - 2N)\varepsilon_{mm}^s + Q\varepsilon_{mm}^f] \delta_{kl} + 2N\varepsilon_{kl}^s \quad (3.21)$$

$$\sigma^f = Q\varepsilon_{mm}^s + R\varepsilon_{mm}^f \quad (3.22)$$

このとき、 N は固体相のせん断剛性、 ε_{kl}^s は固体相のひずみ、 ε_{kl}^f は流体相のひずみである。また、 P 、 Q 、 R は次式で近似される。

$$P \simeq \frac{(1-\phi)^2}{\phi} K^f + K^s + \frac{4}{3}N \quad (3.23)$$

$$Q \simeq (1-\phi)K^f \quad (3.24)$$

$$R \simeq \phi K^f \quad (3.25)$$

K^s は固体相の体積弾性率、 K^f は流体相の等価体積弾性率であり、次式で表される。

$$K^f = \frac{\gamma P_0}{\gamma - (\gamma - 1) \left[1 + \frac{8\nu'}{j\omega\Lambda'^2} H(\omega) \right]^{-1}} \quad (3.26)$$

γ は比熱比、 P_0 は平衡状態の圧力、 ν' は温度拡散率である。また、 $H(\omega)$ は経験的な関数であり、次式で表される。

$$H(\omega) = \sqrt{1 + \frac{j\omega 4\rho_0 k'_0}{\nu' \phi^2 \Lambda'^2}} \quad (3.27)$$

k'_0 は熱浸透率、 Λ' は熱的代表長さである。 Λ' は複素体積弾性率の高音域における挙動を表すパラメータであり、以下で表される。

$$\Lambda' = \frac{2 \int_{\Omega} dV}{\int_{\Gamma} dS} \quad (3.28)$$

また、 k'_0 は実験的な計測が容易ではないため、 $k'_0 = \phi\Lambda'^2/8$ として置き換えた以下の式が Johnson-Champoux-Allard モデルとして知られている。

$$H(\omega) = \sqrt{1 + \frac{j\omega\Lambda'^2}{16\nu'}} \quad (3.29)$$

したがって、Biot のモデルでは、固体相は K^s 、 N 、 ρ^s 、流体相は ϕ 、 σ 、 α_{∞} 、 Λ 、 Λ'^2 の計 8 個を実験的に同定することで、多孔質材の等価密度と等価体積弾性を求めることができる。これらのパラメータは Biot パラメータと呼ばれる。なお、 $G(\omega)$ および $H(\omega)$ は円形断面形状を有する流路の理論解に近くなるよう定められた経験的な関数である。

以上より、Biot のモデルは運動量保存則、流体の連続の式、状態方程式に基づき定式化されており、多孔質材料に入射した音響波の伝搬を予測することができる物理モデルであることを示した。Biot パラメータを実験的に同定することで、多孔質材料内部の流体と固体の運動を考慮した音響特性を予測できるため、多孔質型吸音材の評価で広く用いられている。

3.3 マルチスケール解析

前節で示した数値計算手法では、パラメータを実験的に同定することで、多孔質型吸音材の音響特性を精度よく予測することができる。しかし、パラメータは実験的に同定するには試験体や実験設備の準備が必要であり、開発初期など試験体の作成が困難な状況では、その利用は限定的となる。そこで本節では、実験的なパラメータ同定を必要としない均質化法による多孔質吸音材のマルチスケール解析を示す。

Burridge ら [24] は、ミクロスケールでの流体相と固体相の構成式から等価物性を導出し、Biot のモデルでの物性値と比較した。Yamamoto ら [25] は、漸近展開に基づく均質化法を多孔質吸音材に適用し、流体の粘性や熱散逸による音エネルギーの減衰を考慮して等価物性を求めた。このような微視構造から音響特性を求める方法はボトムアップ型アプローチとも呼ばれ、任意の微視断面形状に適用でき、理論的に頑強な計算手法である。ここでは、Yamamoto ら [25] の方法に基づくマルチスケール解析を定式化する。

3.3.1 ミクロスケールの支配方程式

固体相と流体相から構成される多孔質材料において、固体相は等方性線形弾性体から構成されていると仮定する。添え字の s を固体相として、固体相の変位を u_k^s 、質量密度を ρ^s 、弾性テンソルを c_{klmn}^s 、応力を σ_{kl}^s 、ひずみを ε_{mn}^s とすると、支配方程式は式 3.30 で表される。

$$\begin{cases} -\rho^s \omega^2 u_k^s = \frac{\partial \sigma_{kl}^s}{\partial x_l} \\ \sigma_{kl}^s = c_{klmn}^s \varepsilon_{mn}^s \\ \varepsilon_{mn}^s = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_m^s}{\partial x_n} + \frac{\partial u_n^s}{\partial x_m} \right) \end{cases} \quad (3.30)$$

ここで ω は角振動数である。

次に、流体相が粘性係数 μ^f の圧縮性粘性流体で構成されていると仮定する。流体相の速度を v_k^f 、質量密度を ρ^f 、応力を σ_{mn}^f 、ひずみを ε_{mn}^f 、音圧を p^f とする。流体相の支配方程式は速度振幅が微小であると仮定して Navier-Stokes 方程式の移流項を無視して線形化すると、支配方程式は式 3.31 で表される。

$$\begin{cases} \rho^f j \omega v_k^f = \frac{\partial \sigma_{kl}^f}{\partial x_l} \\ \sigma_{kl}^f = -p^f \delta_{kl} + 2\mu^f \varepsilon_{kl}^f - \frac{2}{3}\mu^f \delta_{kl} \varepsilon_{kl}^f \\ \varepsilon_{kl}^f = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_k^f}{\partial x_l} + \frac{\partial v_l^f}{\partial x_k} \right) \end{cases} \quad (3.31)$$

ここで、 δ_{kl} は Kronecker のデルタを表す。

固体相の比熱が流体相と比べ十分に大きい場合、固体相の熱容量が流体相と比べ大きくなるため温度応答速度が遅くなる。そのため、流体相の温度変化に対する固体相の温度変化は十分に小さく、固体相

は一定温度で平衡状態の温度から変化しないと仮定した。平衡状態での流体相の温度を T^f と仮定し、熱流束を q_k^f 、定積比熱を C_v^f 、熱伝導率テンソルを κ_{kl}^f とすると、熱力学第一法則より次の支配方程式で表される。

$$\begin{cases} -\frac{\partial q_k^f}{\partial x_k} = j\omega\rho^f C_v^f \tau^f + (j\omega\rho^f R\tau^f - j\omega p^f) \\ q_k^f = -\kappa_{kl}^f \frac{\partial \tau^f}{\partial x_l} \end{cases} \quad (3.32)$$

ここで、 τ^f は流体相の温度の変動、 R は気体定数である。流体相に関する質量保存則と状態方程式は、流体相の質量密度の変動を δ^f 、平衡状態での圧力および温度を P^f および T^f とすると、式 3.33 で表される。

$$\begin{cases} \rho^f \frac{\partial v_k^f}{\partial x_k} + j\omega\delta^f = 0 \\ \frac{p^f}{P^f} = \frac{\delta^f}{\rho^f} + \frac{\tau^f}{T^f} \end{cases} \quad (3.33)$$

固体相と流体相の境界 Γ^{sf} における境界条件は、速度、境界垂直方向の応力、温度の連続性から次式で表される。

$$\begin{cases} j\omega u_k^s = v_k^f \\ \sigma_{kl}^s n_k^s + \sigma_{kl}^f n_k^f = 0 \\ \tau^f = 0 \end{cases} \quad (3.34)$$

ここで n_k^s および n_k^f は、固体相および流体相の境界 Γ^{sf} 上の外向き単位法線ベクトルである。

3.3.2 漸近展開

多孔質材料の微視構造が周期的に配置されていると仮定し、その単位領域（ユニットセル）を Y 、ユニットセルの大きさを \hat{l} とする。マクロスケールの代表長さ L は多孔質体における波長とし、ミクロスケールとマクロスケールの代表長さの比を $\varepsilon = \hat{l}/L$ とする。また、マクロスケールにおける空間変数を \mathbf{x}' 、ミクロスケールにおける空間変数を $\mathbf{y} = \mathbf{x}'/\varepsilon$ ($\varepsilon \ll 1$) とする。状態量 u_k^s 、 v_k^f 、 p^f 、 τ^f 、 δ^f に対して、式 3.35 の漸近展開形の解を仮定する [34]。

$$\begin{cases} u_k^s = u_k^{s(0)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon u_k^{s(1)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon^2 u_k^{s(2)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \dots \\ v_k^f = v_k^{f(0)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon v_k^{f(1)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon^2 v_k^{f(2)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \dots \\ p^f = p^{f(0)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon p^{f(1)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon^2 p^{f(2)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \dots \\ \tau^f = \tau^{f(0)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon \tau^{f(1)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon^2 \tau^{f(2)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \dots \\ \delta^f = \delta^{f(0)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon \delta^{f(1)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \varepsilon^2 \delta^{f(2)}(\mathbf{x}', \mathbf{y}) + \dots \end{cases} \quad (3.35)$$

ここで、右辺の全ての項は \mathbf{y} について周期的（ Y -periodic）である。

3.3.3 境界値問題

固体相の変位に関する Y -periodic な特性関数 $\chi_k^{mn}(\mathbf{y})$ について、固体相の関係式に Galerkin 法を適用すると、式 3.36 の境界値問題が得られる。

$$\int_Y \left(c_{klmn}^s - c_{klpq}^s \frac{\partial \chi_p^{mn}(\mathbf{y})}{\partial y_q} \right) \frac{\partial \delta u_k^s}{\partial y_l} dY = 0 \quad (3.36)$$

ここで、 δu_k^s は重み関数である。流体相の流れ場に関して、式 3.37 の境界値問題が得られる。

$$\begin{aligned} \int_Y \rho^f j \omega \xi_k^m(\mathbf{y}) \delta w_k^f dY + \int_Y \mu^f \frac{\partial \xi_k^m(\mathbf{y})}{\partial y_l} \frac{\partial \delta w_k^f}{\partial y_l} dY + \int_Y \frac{1}{3} \mu^f \frac{\partial \xi_k^m(\mathbf{y})}{\partial y_k} \frac{\partial \delta w_k^f}{\partial y_k} dY \\ - \int_Y \frac{\partial \xi_k^m(\mathbf{y})}{\partial y_k} \delta p^f dY - \int_Y \frac{\partial \delta w_k^f}{\partial y_k} \Pi^m(\mathbf{y}) dY = \int_Y \delta \xi_k^m(\mathbf{y}) dY \end{aligned} \quad (3.37)$$

ここで、 δw_k^f と δp^f は重み関数である。また、 $\xi_k^m(\mathbf{y})$ および $\Pi^m(\mathbf{y})$ は特性関数である。流体相の温度場に関して、流体相の温度 $\tau^{f(0)}$ の関係式より、式 3.38 の境界値問題が得られる。このとき、 Γ^{sf} において温度に関する特性関数 $\zeta(\mathbf{y}) = 0$ をみだす。

$$\int_Y \frac{1}{j \omega \rho^f C_p^f} \kappa_{kl}^f \frac{\partial \zeta(\mathbf{y})}{\partial y_l} \frac{\partial \delta \tau^f}{\partial y_k} dY + \int_Y \zeta(\mathbf{y}) \delta \tau^f dY = \int_Y \delta \tau^f dY \quad (3.38)$$

ここで、 C_p^f は定圧比熱、 $\delta \tau^f$ は重み関数である。

式 3.36~3.38 の境界値問題を解くことで、固体相と流体相の均質化特性を求める。ユニットセル Y における均質化弾性係数 c_{klmn}^H は式 3.39 となる。

$$c_{klmn}^H = \left\langle c_{klmn}^s - c_{klpq}^s \frac{\partial \chi_p^{mn}(\mathbf{y})}{\partial y_q} \right\rangle_Y \quad (3.39)$$

ここで、 $\langle \cdot \rangle_Y$ はユニットセル Y での体積平均を表す。ユニットセルの流体相について、 $\xi_n^m(\mathbf{y})$ の体積平均をとることで流体相の等価密度 ρ_{mn}^{fc} は式 3.40 で求まる。

$$\rho_{mn}^{fc} = \frac{1}{j \omega} \langle \xi_n^m(\mathbf{y}) \rangle_{Y^f}^{-1} \quad (3.40)$$

ここで、 $|Y^f|$ はユニットセルの流体相 Y^f の体積である。流体相の等価体積弾性率 K^f は、 Y^f において $\zeta(\mathbf{y})$ の体積平均をとり、式 3.41 で求まる。

$$K^f = \frac{\gamma^f P^f}{\gamma^f - (\gamma^f - 1) \langle \zeta(\mathbf{y}) \rangle_{Y^f}} \quad (3.41)$$

ここで、 γ^f は比熱比である。

3.3.4 マクロスケールの支配方程式

式 3.39~3.41 より, マクロスケールにおける固体相および流体相の支配方程式は式 3.42 および式 3.43 となる.

$$\frac{\partial \hat{\sigma}_{kl}^{s(0)}}{\partial x_l} + \bar{\rho} \omega^2 u_k^{s(0)} - \rho^f \omega^2 d_k^m u_m^{s(0)} - j\omega d_k^m \frac{\partial \psi^f(0)}{\partial x_m} + j\omega \varphi \frac{\partial \psi^f(0)}{\partial x_k} + j\omega k_{kl}^H \frac{\partial \psi^f(0)}{\partial x_l} = 0 \quad (3.42)$$

$$\frac{d_k^m}{\rho^f} \frac{\partial^2 \psi^f(0)}{\partial x_m \partial x_k} + \omega^2 \left(\theta^f + \frac{\varphi}{K^f} \right) \psi^f(0) - j\omega d_k^m \frac{\partial u_m^{s(0)}}{\partial x_k} + j\omega \varphi \frac{\partial u_k^{s(0)}}{\partial x_k} + j\omega \theta^{s,pq} \varepsilon_{pq}^{s(0)} = 0 \quad (3.43)$$

ここで, k_{kl}^H と $\theta^{s,pq}$ は固体相の均質化マクロ特性, θ^f と d_k^m は流体相のマクロ特性である. また, $\hat{\sigma}_{kl}^{s(0)}$ は流体相と連成していない固体相の応力, $\bar{\rho}$ は固体相の平均質量密度, φ は空孔率, ψ^f は $p^f = -j\omega\psi^f$ で表されるポテンシャルである.

これらのマクロ特性を図 3.5 に示す音響管を模擬した有限要素モデルの多孔質弾性体に与え, 式 3.44 の垂直入射吸音率 α を算出した.

$$\alpha = 1 - |R|^2, \quad R = \frac{e^{-jk^a(l_2-l_1)} - \frac{p_1}{p_2}}{\frac{p_1}{p_2} - e^{jk^a(l_2-l_1)}} e^{jk^a 2l_2} \quad (3.44)$$

ここで, k^a は空気中を伝播する音の波数, p_1 および p_2 はそれぞれ音響管内の多孔質材の表面から距離 l_1 および l_2 離れた点における音圧である.

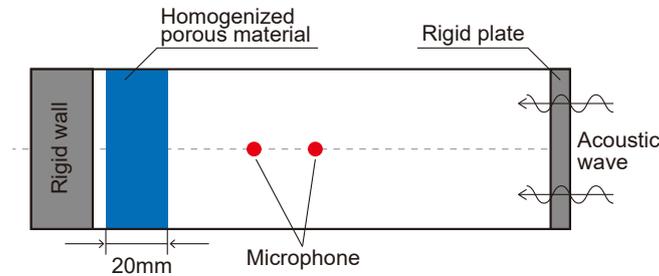


Fig. 3.5 Calculation model of sound absorption coefficient simulating impedance tube. The macroscopic properties of the porous material were obtained using the homogenization method and analyzed using the finite element method.

3.4 ユニットセルのモデル化

多孔質型吸音材のユニットセルの例を図 3.6 に示す. 図 3.6 の (a) はアルミ微粒子焼結材, (b) は発泡ウレタン材, (c) はセラミック材料であり, 左からマクロ構造, 微視構造, ユニットセルを表す. 図 3.6 では, 実際の多孔質型吸音材の微視構造を観察し, 微視構造の特徴が十分に含まれる周期的な単位構造をユニットセルとしてモデル化している. (a) はアルミ微粒子を焼結した構造であるため, 微小な

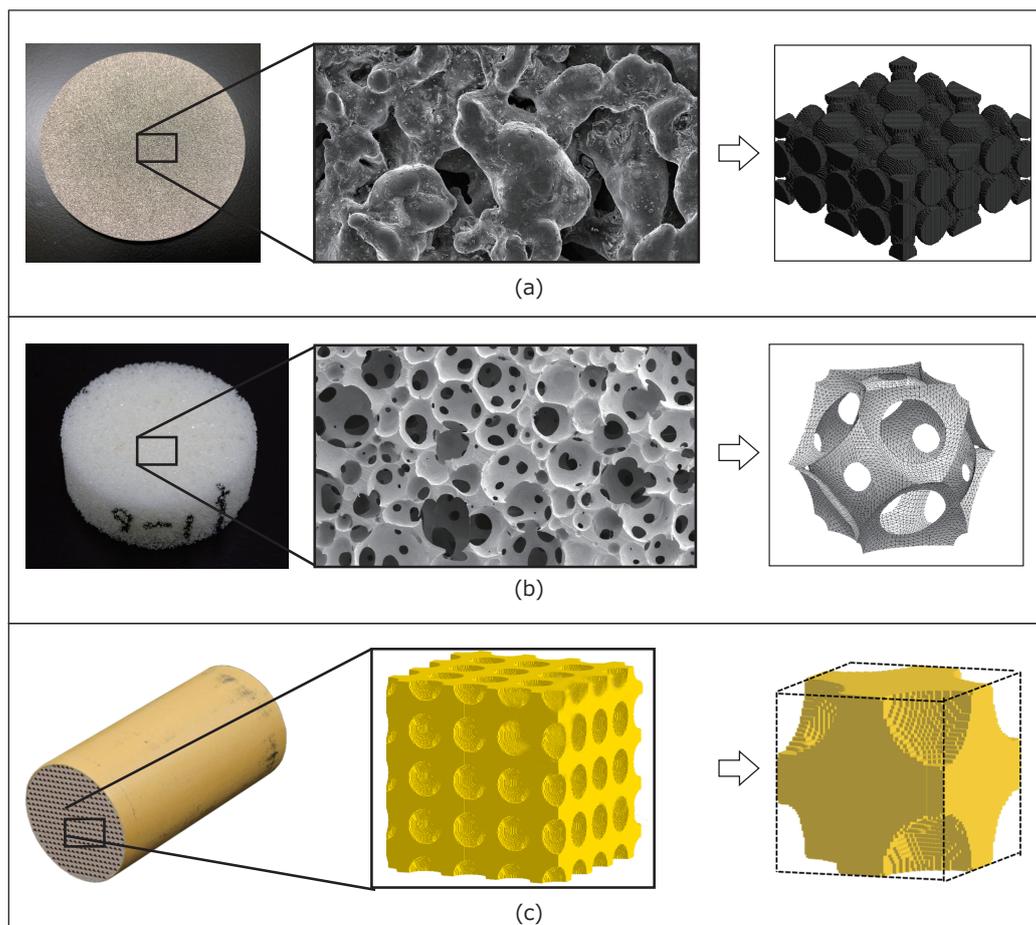


Fig. 3.6 Example of creating the unit cells for multiscale simulation from various porous sound absorbing materials. (a) shows sintered aluminum particles, (b) polyurethane foam, and (c) ceramic materials.

粒子が溶融し互いに接合した構造を模擬し、ユニットセルでモデル化している。このとき、粒子径や流路は SEM 画像より取得した値に基づいている。(b) は気泡によって生じた空隙をもつ微視構造であるため、Kelvin cell 構造によりユニットセルでモデル化している。(c) はセラミック材のフィルターを模擬しており、空孔径や流れ抵抗の測定結果に基づくユニットセルを構築している。このように、マルチスケール解析では多孔質型吸音材の微視構造に基づきユニットセルをモデル化することで、任意の微視断面構造をもつ吸音材の音響特性を予測することができる。

3.5 まとめ

本章では、音響解析の基礎事項を説明し、多孔質型吸音材の数値計算手法の先行研究を定式化したマルチスケール解析では、多孔質材料の微視構造に漸近展開法に基づく均質化法を適用し、ミクロスケールの等価特性を求める手法を定式化した。マルチスケール解析により、基本的な材料物性のみを用いて多孔質型吸音材の等価物性を決定できることを示した。また、マルチスケール解析のユニットセルの例

を示し、多孔質型吸音材の微視構造に基づいたモデル化により、任意の吸音材の音響特性を予測できることを示した。

第 4 章

多孔質型吸音材の不確実性の評価手法

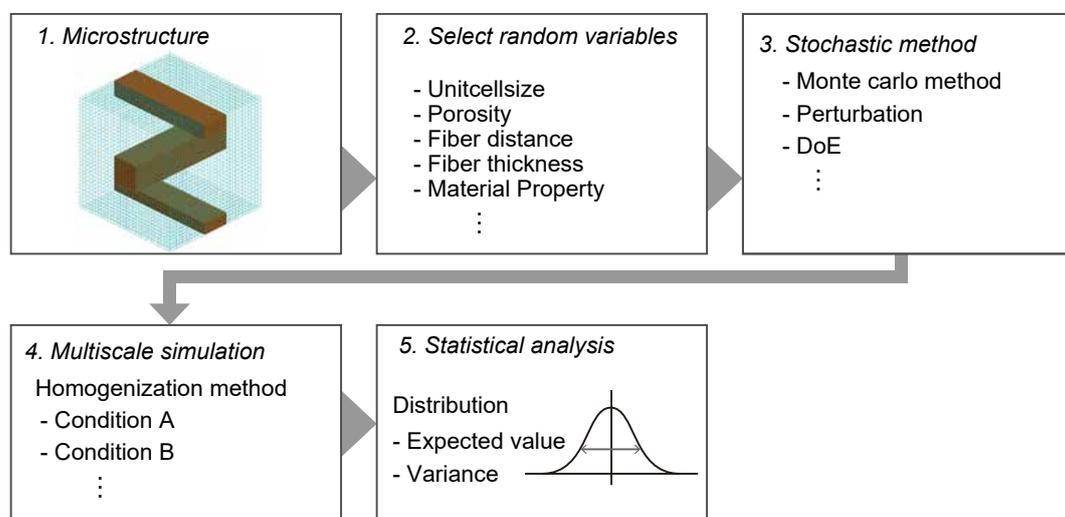


Fig. 4.1 Overview of uncertainty quantification in porous sound absorbing materials.

本章では、多孔質型吸音材の微視構造の不確実性を考慮してモデル化し、吸音率の不確実性を定量的に評価する。第 3 章で定式化した均質化法に基づくマルチスケール解析では、多孔質体は単位構造が周期的に配置した均質構造体と仮定した。しかし、現実の多孔質材料では製造条件の不確実性の影響により、その微視構造や材料物性も何らかの確率分布に従う不確実性を示す。このような不確実性は、多孔質型吸音材の評価指標である吸音率へ伝播する。本章では、図 4.1 に示すように、マルチスケール解析を援用して、多孔質材料の微視構造の不確実性をモデル化し、吸音率の不確実性を定量的に評価する。

4.1 不確実性の定量化

不確実性の定量化は UQ(Uncertainty Quantification) と呼ばれ、確率論と統計学を現実の現象と結び付け、不確実な要素を含むシステムの挙動やリスクを予測するために用いられる。工学における大半の問題には不確実性が存在しており、この不確実性は対象のシステムに影響を与えている。不確実性の要因としては、たとえば、製造公差に起因する部品の寸法、材料の特性の変動、センサーの誤差、製造環境および使用環境などが挙げられる。これらの不確実性は製品で発生する不具合のリスクとなり得る。

ため、製品設計ではこれらの影響を把握し、適切に管理することが重要である。

こうした背景の中、疲労解析や亀裂の進展など破壊力学分野を中心として、工学における UQ の研究が進められている。Grenyer ら [35] は、工学システムにおける不確実性について包括的に総説しており、ライフサイクルコストの予測と意思決定に必要な様々な UQ 手法をレビューした。Sankararaman ら [36] は、構造体の形状や材料特性、境界条件などの変動を考慮し、修正パリス則と代理モデルを用いて亀裂進展の不確実性を定量的に評価した。Pierce ら [37] は、ガラス繊維複合材の疲労寿命をニューラルネットワークでモデル化し、実験データの不確実性の影響を考慮して疲労寿命を予測した。Mahadeva ら [38] は、付加製造法でばらつきの少ない製造を実現する不確実性の定量化手法についてレビューした。

マルチスケール解析で不確実性に着目した研究としては、Guo ら、Sakata ら、Wen らの研究が挙げられる。Guo ら [39] はマルチスケールのロバスト最適化モデルについて定式化した。Sakata ら [40] は構成材料の弾性特性と強度の両方の微視的ランダム性を考慮し、複合材料中のマイクロ組織の破壊確率解析を報告した。Wen ら [41] は微視構造の幾何的変動を考慮した確率的均質化法を開発し、製造プロセスに対しロバストな特性をもつ材料開発手法を提案した。

以上の先行研究で示される通り、UQ は不確実性を数値計算に反映させ、製品のライフサイクルの予測や高い品質で製品を製造することを目的としている。UQ のプロセスは一般的に次のプロセスに従って進められる。

- (1) 評価指標の決定
- (2) 入力の不確実性の特定とモデル化
- (3) シミュレーションによる不確実な入力の伝搬
- (4) 不確実性が予測に与える影響の特定

(1) の評価指標はモデルの微分方程式もしくは代数方程式の解の関数で表される量であり、たとえば構造物の応力や温度、音圧などが該当する。(2) の入力の不確実性は、システムに入力される確率変数の選択が該当する。このとき、確率変数の確率分布やその基本的な統計量、および他の変数との相関などを決定する必要がある。また、不確実な変数が多く存在する場合、システム全体の確率的な挙動を計算するには多くのシミュレーション結果が必要となるため、適切に確率変数を選択する必要がある。このような確率変数の選択では、本論文の第5章で説明する摂動法のような局所感度解析が有効であり、システムに大きな影響を与える確率変数を選択することができる。(3) では、不確実性の定量化の計算方法を選択する。不確実性の定量化手法では計算精度と計算資源が相反する関係となっており、対象とする問題に応じて適切な手法を選択する必要がある。たとえば、本章で示す MC はあらゆる問題に対して頑健な手法であるが、多くの計算資源が必要となる。そのため、低頻度だが重大な事象が発生しうるシステムなどで用いられる事が多い。一方で、本論の第5章で説明する摂動法は、計算精度は限定されるが、迅速に近似結果を得ることができる。そのため、上述した確率変数の選択や、不確実性のおよぼす影響が大きくない問題に適した方法である。最後に、(4) は結果の分析でプロセスである。評価指標が不確実な入力によりどのように変化するかを統計量や感度により分析し、その影響を定量的に評価する。この結果から、実験データと比較して再評価、およびロバストなシステムを設計するための最適化計算を実行する。また、迅速に類似のシステムでの結果を得るため、サロゲートモデルなどを構築し

分析を実行する方法も考えられる。サロゲートモデルを用いた方法は本章の最後に説明する。本論文では、評価指標として吸音率を選択し、多孔質型吸音材の微視構造の不確実性が吸音率に与える影響をUQのプロセスに従い分析する。

4.2 多孔質型吸音材の不確実性

多孔質材料の吸音特性はその微視構造に支配されており、微視構造の不均一性は吸音率に直接的に影響を与える。多孔質材料の不均一性と吸音率とばらつきとの関係を調査した先行研究を以下に示す。Doutres ら [28] は発泡ウレタンの空孔率、迷路度などの吸音率に対する感度を分析し、微視的な構造のばらつきが吸音率へおよぼす影響を調査した。Trinh ら [29] は発泡多孔質材の薄膜含有量と吸音率の関係を調査し、ねらいの吸音特性をもつ多孔質材料の製造戦略を提案した。Perrot ら [30] は発泡ウレタンの微視構造を3次元マイクロコンピュータ断層撮影法で取得し、微視構造のパラメータの不確実性が音響パラメータに与える影響を定量的に示した。また、Gwon ら [27] は発泡ウレタン材料の製造工程に着目し、ゲル化触媒と発泡剤である水の添加量により微小セル構造に生じる不確実性と吸音率の変動を調査した。これらの文献で報告されているように、多孔質材料の微視構造のばらつきは吸音特性に無視できない影響を与えることが示されている。

このような先行研究の結果から、微視構造のばらつきをモデル化して音響特性を予測する研究が進められている。Lee ら [31] は発泡ウレタン材の微視構造のばらつきをトポロジー的特徴を考慮してモデル化し、吸音特性のばらつきを評価した。Lee らの手法では多孔質材料のランダム性をトポロジー的な特徴量としてとらえており、3次元的な微視構造の変動を定量的に評価しているが、この手法は連通孔をもつ発泡材料への適用に限定されている。そこで、本章ではマルチスケール解析を援用し、確率的手法を用いることで、任意の断面微視形状をもつ多孔質体でランダム性を考慮した解析手法を提案する。

4.3 不確実性評価の定式化

本節では、多孔質型吸音材の不確実性を分析するために必要な、確率的モデリングと不確実性の伝播に関する基礎事項を説明し、確率密度関数 (PDF) の解析解を導出する。

4.3.1 基本事項

確率変数はランダムな事象の結果によって値が決定される変数であり、離散型と連続型に大別される。離散型の確率変数はその値が離散値を示し、確率質量関数により確率分布が説明される。連続型確率変数はある範囲内の任意の値を示す変数であり、PDF によってその分布がモデル化される。PDF は確率変数が取り得る値として、確率密度を割り当てる。このとき、PDF 曲線の下領域は総確率を表し、積分すると1となる。PDF 以外の確率分布を説明する重要な関数として、累積分布関数 (Cumulative Distribution Function, CDF) がある。CDF は確率変数が任意の値の範囲を示す確率を示す関数であり、確率変数の範囲を値域とした PDF の積分として定義される。すなわち、CDF は $F_X(x) \in [0, 1]$ で定義され、 X が値 a と b の間にある確率を示す確率として、次式で表される。

$$F_X(b) - F_X(a) = P(a < X \leq b) \quad (4.1)$$

ここで、 $P()$ は PDF を表す。確率変数が多変数である場合、確率変数ベクトル $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_n)^T$ として、

$$F_X(\mathbf{b}) - F_X(\mathbf{a}) = P(\mathbf{a} < \mathbf{X} \leq \mathbf{b}) \quad (4.2)$$

である。PDF は確率変数が連続である場合、次の式で定義される。

$$P(X) = \frac{dF_X}{dx} \quad (4.3)$$

なお、確率変数が多変数である場合、結合 PDF として次式で定義される。

$$f(\mathbf{X}) = \frac{\partial^p F(\mathbf{X})}{\partial X_1 \partial X_2 \dots \partial X_p} \Big|_{\mathbf{X}} \quad (4.4)$$

式 4.3 より、CDF は次式で表される。

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x P(x') dx' \quad (4.5)$$

したがって、式 4.2 は次式となる。

$$P(a < X \leq b) = \int_a^b f(x) dx = F_X(b) - F_X(a) \quad (4.6)$$

このとき、CDF の定義より、

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1 \quad (4.7)$$

である。以上より、確率変数の PDF と CDF を用いることで、確率分布を完全に表すことができる。PDF は確率変数の各点における確率密度、CDF は確率変数が任意の値の範囲をとる累積確率を示す。

機械工学ではシステムの確率変数の確率分布をモデル化するため、いくつかの PDF が用いられる。正規分布は測定誤差、ノイズ、材料特性の不確かさ、ランダム振動による入力など、確率変数をモデル化する PDF としては最も一般的な確率分布である。対数正規分布は疲労寿命、材料強度および荷重など、正に歪んだ分布を持つ確率変数をモデル化する際に用いられる。ワイブル分布は機械部品の寿命や特定の荷重下での材料の寿命など、故障時間を表す確率変数をモデル化する場合に用いられており、ガンマ分布は機械部品の寿命や材料が吸収するエネルギーの総量など、独立した多数の小さな要因の総和を表す確率変数のモデル化に用いられる。他にも指数分布やベータ分布、三角分布などが使用され、確率変数や物理現象の特性に合わせた PDF を選択することで、確率変数を正しくモデル化することができる。

本論文では、多孔質材料の微視構造の変動を確率変数として考えており、これらは全て正規分布に従うと仮定する。 \mathbf{X} が正規分布に従うとき、その同時 PDF は次式で表される。

$$P(\mathbf{X}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^k |\Sigma|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})\right) \quad (4.8)$$

ここで、 $\boldsymbol{\mu}$ は確率変数の平均値ベクトルである。 Σ は分散共分散行列であり、標準偏差 σ を用いて次式で表される。

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \cdots & \sigma_{1k} & \cdots & \sigma_{1n} \\ \vdots & \ddots & & & \vdots \\ \sigma_{k1} & & \sigma_k^2 & & \sigma_{kn} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1} & \cdots & \sigma_{nk} & \cdots & \sigma_n^2 \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

なお、 X が μ および σ の正規分布に従うとき、 $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$ と表記する。

次に、確率変数の確率分布の形状を定量的に表す指標である統計モーメントを導出する。統計モーメントは確率分布の形状、位置、広がりなどを表すために用いられ、期待値、分散、歪度、尖度などがある。これらのモーメントを計算することで、正確な PDF を求めることができない場合においても、確率分布の特徴を把握することができる。

確率変数の期待値は一次モーメントとして知られており、確率分布の重心を示す。一次モーメントは次式で与えられる。

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] = \int f(\mathbf{X}) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \quad (4.10)$$

式 4.10 より、 $\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]$ は $P(\mathbf{X})$ を加重関数とした $f(\mathbf{X})$ の加重平均と考えることができる。

二次モーメントは分散として知られており、確率分布の広がりを表す指標である。二次モーメントは平均からの偏差の二乗の期待値として定義され、次式で表される。

$$\mathbb{V}[f(\mathbf{X})] = \mathbb{E}[f(\mathbf{X})^2] - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^2 \quad (4.11)$$

分散は確率変数とその期待値の二乗誤差と解釈することができる。したがって、分散が大きいと確率変数の値が広い範囲に分布していることを示し、小さいと値が平均に近いところに集中していることを示す。なお、標準偏差 σ は分散の平方根であり、

$$\sigma = \sqrt{\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]} \quad (4.12)$$

で表される。

さらに高次のモーメントとして、三次モーメントは次式で表される。

$$\text{Skew} = \frac{\mathbb{E}[f(\mathbf{X})^3]}{\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]^{3/2}} \quad (4.13)$$

式 4.13 は歪度とも呼ばれ、確率分布の非対称性を表す指標である。三次モーメントは平均からの偏差の三乗の期待値を標準偏差の三乗で除したものと定義される。歪度が正の場合は、平均の正の側の尾が負の側の尾よりも長いまたは太いことを示し、負の場合はその逆を示す。

四次モーメントは尖度として知られており、次式で表される。

$$\text{Kurt} = \frac{\mathbb{E}[f(\mathbf{X})^4]}{\sqrt{\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]^4}} - 3 \quad (4.14)$$

四次モーメントは確率分布の尖り度を表す尺度であり、平均値からの偏差の四乗の期待値を標準偏差の四乗で除したものと定義され、尖度が大きい分布はピーク値が高くなる。

以上の4つの統計モーメントは確率分布の性質を表すのによく用いられており、異なる分布を比較する場合においても有用な指標となる。ただし、これらの統計モーメントは確率分布の形状を完全に表しているわけでないことに留意する必要がある。なお、尖度より大きなモーメントは直感的な解釈が難しく、また一部の確率分布では存在しないため、一般的には用いられていない。

以上より、確率分布を完全に把握するためにはPDFやCDFを求めれば良いことを示した。また、これらの関数を求めることは困難である場合、統計モーメントを計算することで吸音率の確率分布の特徴を予測できることを示した。

4.3.2 確率分布の解析解

応答関数 $f(X)$ の逆関数を求めることができる場合、応答 Y のPDFである $Q(Y)$ は変数変換により解析的に求めることができる。 $P(X)$ および $Q(Y)$ について、以下の関係が成り立つと仮定する。

$$Q(y)dY = P(X)dX \quad (4.15)$$

これは、 $P(X)$ および $Q(Y)$ の積分が1であることに基づいている。式4.15より、 J をヤコビアンとして $Q(Y) = P(X)J = P(f^{-1}(Y))$ となる。したがって、 $f(X)$ に対する X の導関数と $f^{-1}(Y)$ を用いて $Q(Y)$ を求めることができる。

ここでは例として、 $f(X)$ が線形関数 $f(X) = y = aX + b$ 、 $P(X)$ が正規分布の解析解を求める。 Y の逆関数は $X = \frac{Y-b}{a}$ であることから、 $J = |\frac{1}{a}|$ より、

$$Q(Y) = P\left(\frac{Y-b}{a}\right) \frac{1}{a} = \frac{1}{a} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\left(\frac{Y-b}{a} - \mu\right)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.16)$$

となる。式4.16より、 $f(X)$ が線形関数で $P(X)$ が正規分布である場合、 $Q(Y)$ は $P(X)$ と同様に正規分布を示すことがわかる。また、式4.16より、 $f(X)$ が線形関数である場合では、任意の $P(X)$ が線形変換されたPDFが $Q(X)$ となる。

逆関数を求めることができる関数では、式4.15より $Q(Y)$ を求めることができるが、多くの場合ではこのような解析解を得ることが困難である。そのため、式4.10~4.14に示した統計モーメントを求めることで、 $Q(Y)$ の形状を定量的に表す。式4.17の逆関数が存在しない非線形二変数関数を例として、正規分布の $P(\mathbf{X})$ を与えた際のモーメントの解析解を求める。

$$f(\mathbf{X}) = 5x_1^2 + x_2^3 \quad (4.17)$$

$P(\mathbf{X})$ を平均0、標準偏差0.2の正規分布、すなわち $P(x_1) = P(x_2) = \mathcal{N}(0, 0.2)$ とすると、モーメントの解析解は表4.1となる。表4.1より、式4.17と多変量正規分布から求めた $Q(Y)$ の確率分布は歪度と尖度が正の大きな値を示している。これは、分布が正に大きく偏っており、正側には長い尾が、負側には短い尾があることを示している。また、尖度の値が大きいと、正規分布よりもピークが高く、尾が太いということを示している。

以上より、応答関数の逆関数が求まる場合、 $Q(Y)$ を解析的に導出することができる。逆関数を求めることができない場合においても、応答関数とPDFの積分より統計モーメントを求めることで、 $Q(Y)$ の特徴を示すことができる。多孔質型吸音材のマルチスケール解析では、微視パラメータを確率変数と

Table 4.1 Summary of descriptive statistics for probability distribution including the Expectation, Variance, Kurtosis, and Skewness. These statistics provide a comprehensive understanding of the shape, spread, and skewness of the distribution.

Moment	Analytical value
Expected value	1.00
Variance	2.12
Skewness	2.59
Kurtosis	10.8

して吸音率を予測する評価関数 $\alpha = f(\mathbf{X})$ は複雑であるため、逆関数を求めることができず、解析的に PDF を求めることができない。また、 $\alpha = f(\mathbf{X})$ が複雑である場合、PDF との積の積分を解析的に求めることが困難であるため、吸音率のモーメントを推定するためには近似計算が必要となる。

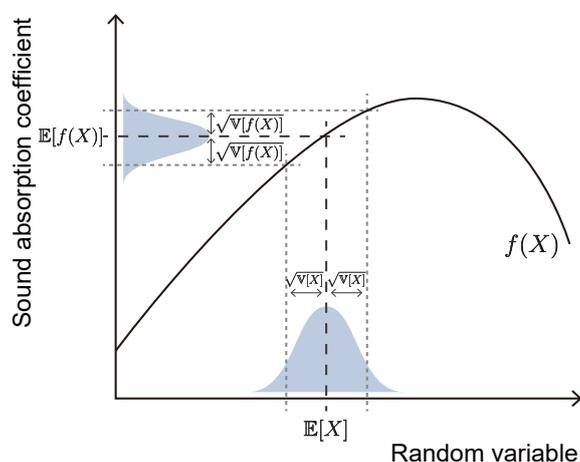


Fig. 4.2 The figure illustrates the propagation of randomness in the sound absorption coefficient, which is a critical factor in designing acoustic materials.

4.4 モンテカルロ法による吸音率の確率分布の予測

吸音率のモーメントを推定するためには、式 4.10 の積分を計算する必要がある。しかし、マルチスケール解析より求められる $f(\mathbf{X})$ は複雑であるため、吸音率のモーメントを求めるには積分の近似計算が必要となる。そこで、本節では、MC により積分を近似し、吸音率のモーメントを求める方法を示す。

MC は乱数を用いて数学的な問題を解決する計算アルゴリズムの総称である。Buffon の針として知られるランダムに投じた針の方向から円周率を求める方法が起源と言われており、20 世紀に計算機を使用した乱数のアルゴリズムとして Neumann らによってモンテカルロ法と命名された。それ以来、物理学、工学、金融、コンピュータサイエンスなど、多くの分野で用いられている。MC では確率変数を乱数として扱うことで、解を近似的に求める。すなわち、解の期待値が多数のランダムなサンプルの平均によって近似できるという考え方に基づいた手法である。MC は非決定論的手法であることから、特定

の解に限定されず、ランダムサンプリングに基づく可能な解の範囲を示すため汎用性が高く、単純な積分から、複雑な最適化および統計的推論まで幅広い問題に適用することができる。したがって、MCは閉形式の解を持たない問題や閉形式の解を求めることが困難な問題を解く際に用いられている。また、アルゴリズムが単純であるため、実装が容易である点も利点の一つとして挙げられる。一方、MCの解の質は使用する乱数の数に依存するが、望ましい精度を達成するために必要なサンプル数を事前に行うことが困難であり、計算コストを見積もることが難しい。目的とする精度に依存するが、一般的に十分な精度で近似するためには数百回以上の試行が必要になるため、1回の試行にかかる時間が長い問題では膨大な計算資源が必要となる。言い換えると、MCの計算精度は1回の試行にかかる時間に制限されると言える。本節では多孔質型吸音材の吸音率のモーメントを近似するためにMCを用いて、十分な精度を達成するために必要な試行回数について論じる。また、MCの計算コストの問題に対処するため、単純なMCより速い収束性が期待できる準モンテカルロ法 (qMC) について論じる。

式 4.10 は、 \mathbf{X} が n 次元の超立方体内において、 $P(\mathbf{X})$ で分布したときの関数の期待値とみなすことができる。したがって、式 4.10 で示した分布の期待値を、MC では $P(\mathbf{X})$ に従う独立な D 点の集合を用いて式 4.18 で近似する。

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] \approx \frac{1}{D} \sum f(\mathbf{X}) \quad (4.18)$$

確率変数が独立と仮定すると、分散は次式で表される。

$$\mathbb{V}[f(\mathbf{X})] \approx \frac{1}{D} ([\mathbb{E}[f(\mathbf{X})^2]] - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^2) \quad (4.19)$$

式 4.19 より、標準偏差は、

$$\sigma = \sqrt{\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]} \quad (4.20)$$

である。

MC で得られた解がサンプル数の増加とともに解析解を期待値とする分布に収束する理由は、中心極限定理と大数の法則により説明される。中心極限定理は、独立同分布の多数の確率変数の平均の分布は個々の変数の基底分布に関係なく、正規分布に近づくことを示した定理である。MC ではサンプル数が増えるに従い、推定解の分布が正規分布に近づき、分布の平均が解の真の期待値と等しくなることを意味する。大数の法則は、独立かつ同一分布の多数の確率変数の平均が、基礎となる分布の期待値に収束することを示した法則である。これらの中心極限定理と大数の法則より、MC ではサンプル数が増えるに従って推定解の平均が解の真の期待値に収束することが示される。

MC の収束性を確認するため、式 4.16 で示した理論解と MC の数値計算結果と比較する。応答関数は一次関数として $f(X) = 5x_1 + 10$ を与える。 $P(X)$ が $X \sim \mathcal{N}(0, 3)$ に従うと仮定すると、式 4.16 より期待値と分散の解析解はそれぞれ $\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] = 10$ 、 $\mathbb{V}[f(\mathbf{X})] = 225$ となる。図 4.3 に理論解との誤差の推移を示す。 D が増加するに従って期待値と分散が理論解へ収束している様子が確認できる。MC の結果では、 $D = 100,000$ において $\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] = 10.0178$ 、 $\mathbb{V}[f(\mathbf{X})] = 225.4546$ であり、期待値では約 0.18 %、分散では約 0.20 % の誤差となり、高い精度で $q(X)$ の期待値と分散を予測できている。

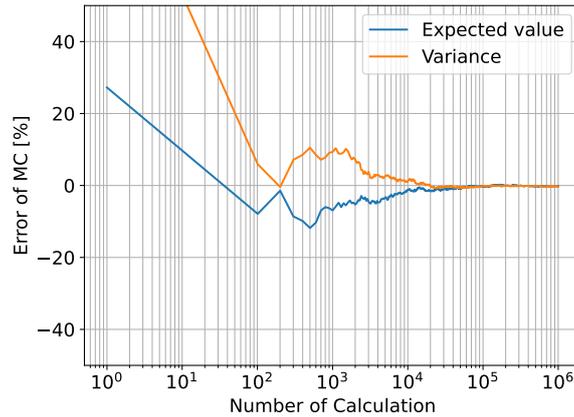


Fig. 4.3 Relative error between the expected value and the variance obtained by Monte Carlo simulation.

このような MC の収束性は、関数の被覆数とエントロピー数により説明される。関数の被覆数は、ある精度で関数を被覆するために必要な最小の点数を示す。言い換えれば、関数を有限個の点でどれだけ正しく近似できるかを表している。また、関数のエントロピー数は、与えられた精度の範囲内で関数を近似するために必要な最小点数と、精度が上がるにつれてこの点数が減衰する速度を表している。以上より、MC が解析解に収束するために必要な最小のサンプル数を決定される。一般に解析解と MC の推定値の誤差は、近似される関数の複雑さと問題の次元によって特徴づけられ、被積分関数が滑らかな関数である場合、次式で表される。

$$|\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]_D| < C \sqrt{\frac{\log \log(D)}{D}} \quad (4.21)$$

ここで、 $\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]_D$ はサンプル数 D で MC により推定された期待値、 C は対象の関数や確率分布に依存する定数である。すなわち、MC の推定誤差はサンプル数の増加とともに反復対数に従って減少していく。これは、MC の推定値の分散を解析することで証明することができる。MC の推定値の分散は、解析解の期待値と推定値の差の二乗の期待値として定義される。Chebyshev の不等式より次式が成り立つ。

$$\Pr(|\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]_D - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]|^2 \geq \text{error}\sigma) \leq \frac{\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]_D}{\text{error}^2} \quad (4.22)$$

ここで、 error は許容誤差、 $\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]_D$ は MC の推定値の分散である。式 4.22 より、サンプル数が増えれば MC の推定値の分散が減少し、不等式の右辺も減少することがわかる。これは、MC の推定値が解析解から error 以上乖離する確率が、サンプル数が増えるにつれて減少することを示している。ここで、中心極限定理より、推定値の分布が解析解を期待値として正規分布すると考えると、誤差の減少速度は $\mathcal{O}(1/\sqrt{D})$ で表される。以上より、MC で誤差を 1 桁減少させるにはサンプル数を 100 倍にする必要がある、MC の計算の効率が低いとは言い難いことがわかる。したがって、十分に高い予測精度で $Q(Y)$ を評価するには、応答関数 $f(X)$ を高速に評価できる問題に限定されることが示された。

4.4.1 準モンテカルロ法

MC の計算効率を改善する方法として、Low-discrepancy 列と呼ばれる無限配列を用いた quasi-MC(qMC) が知られている。Low-discrepancy 列は Discrepancy として表される分布の不規則性、すなわち、一様分布からのずれを表す尺度で評価された配列であり、単位区間で高い均一性を示す。Low-discrepancy 列はランダムな点列より均一に設計空間を充填されるよう設計されており、積分の収束性を改善することができる。一方、MC 法が非決定論的手法であるのに対し、QMC 法は決定論的であるため、汎用性は MC に劣ると考えられる。

はじめに、一次元無限点列の一様性について説明する。単位区間 $[0, 1]$ 内の無限点列の点集合を P_N として、任意の区間 $I = [\beta, \alpha]$ 、 $\beta < \alpha$ に対して、次式であれば無限点列は一様であると定義される。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\#(I; P_N)}{N} = |I| \quad (4.23)$$

ここで、 $|I|$ はルベーグ測度であり、 I の長さ $\alpha - \beta$ を表している。 $\#(I; P_N)$ は I に含まれる P_N 内の点を表す。有限点列の場合は式 4.23 の無限点列を有限点列に置き換えたもので、Discrepancy と呼ばれる。Discrepancy は式 4.24 で表される [42]。

$$D(P_N) = \sup_{\alpha, \beta \in [0, 1]} \left| \frac{\#([\beta, \alpha]; P_N)}{N} - |\alpha - \beta| \right| \quad (4.24)$$

また、 $\beta = 0$ に制限した場合は Star Discrepancy と呼ばれており、次式で表される。

$$D^*(P_N) = \sup_{\alpha \in [0, 1]} \left| \frac{\#([0, \alpha]; P_N)}{N} - \alpha \right| \quad (4.25)$$

式 4.24 と式 4.25 より、 $0 \leq D^*(P_N) \leq D(P_N) \leq 1$ となることがわかる。次に、 P_N の各点を値が小さい順に並び替えて $\{x_{(0)}, x_{(1)}, \dots, x_{(N-1)}\}$ とすると、式 4.25 は式 4.27 で表すことができる。

$$D^*(P_N) = \frac{1}{2N} + \max_{0 \leq n \leq N-1} \left| x_n - \frac{2n+1}{2N} \right| \quad (4.26)$$

したがって、 $D^*(P_N)$ は式 4.27 となる。

$$D^*(P_N) = \inf_{P_N} D^*(P_N) = \frac{1}{2N} \quad (4.27)$$

このとき、Star Discrepancy を最小にする点集合 P_N は式 4.28 で表される。

$$P_N = \left\{ \frac{2n+1}{2N} \mid n = 0, 1, \dots, N-1 \right\} \quad (4.28)$$

本論文では Low-discrepancy sequence として知られる van der Corput 列 [43] および van der Corput 列を多次元に拡張した Halton 列 [44] を扱う。2 以上の整数を \bar{z} および 0 以上の整数を \bar{n} として、 \bar{n} の \bar{z} 進数展開を、

$$\bar{n} = \bar{n}_0 + \bar{n}_1 \bar{z} + \bar{n}_2 \bar{z}^2 + \dots \quad (4.29)$$

とする。このとき、ほとんどすべての i に対して $\bar{n}_i = 0$ となることが知られている。基底逆関数 $\Phi_{\bar{z}}$ を次式で表す。

$$\Phi_{\bar{z}}(\bar{n}) = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{n}_i \bar{z}^{-(i+1)} \quad (4.30)$$

このときの一次元配列、すなわち $(\Phi_{\bar{z}}(\bar{n}))_{\bar{n}=0}^{\infty}$ を van der Corput 列と呼ぶ。なお、二次元以上の場合には $\bar{\mathbf{m}}_{\bar{n}} = (\Phi_{\bar{z}_1}(\bar{n}), \dots, \Phi_{\bar{z}_s}(\bar{n}))$ として与えられ、Halton 列と呼ばれる。

Halton 列の Discrepancy は、先頭 N 点からなる点集合 P_N において次式となる。

$$D(P_N) = C \left(\frac{(\log N)^{s-1}}{N} \right) \quad (4.31)$$

一様分布の Discrepancy は中心極限定理より $O(\sqrt{N})$ であるため、Halton 列の Discrepancy は一様分布より小さくなることがわかる。平均値の定理より、期待値以下の Discrepancy をもつ N 点集合が少なくとも一つは存在することが証明できるため、任意の P_N において van der Corput 列を生成することができる。なお、Low-discrepancy 列としては他にも Sobol' 列 [45]、Faure 列 [46]、一般化 Niederreiter 列 [47] など、Halton 列を改善した点列が提案されているが、本論文では van der Corput 列および van der Corput 列を多次元に拡張した Halton 列を用いる。

van der Corput 列と一様分布から値をサンプリングしたヒストグラムを図 4.4 に示す。なお、一様分布は確率変数 $\alpha_{\text{uni}} \leq X \leq \beta_{\text{uni}}$ において、式 4.32 の PDF で表される。

$$P(X) = \frac{1}{\beta_{\text{uni}} - \alpha_{\text{uni}}} \quad (4.32)$$

図 4.4 より、一様分布と比較して van der Corput 列では与えられた値域内で均等に分布していることが確認される。

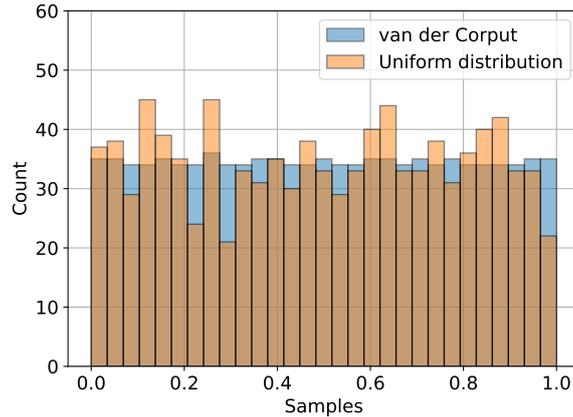


Fig. 4.4 Comparison of samples from van der Corput sequence and uniform distributions.

本論文における確率変数 X は正規分布に従うと仮定しているため、逆関数法により正規分布に従う van der Corput 列を作成する。 s 次元の一様分布空間 $[0, 1]^s$ において、サンプリングした乱数を ζ 、累積分布関数を $F(\zeta)$ とすると、

$$\eta = F^{-1}(\zeta) \quad (4.33)$$

が成り立つ。ここで、 η は $F(\zeta)$ から得られた乱数である。 $F(\zeta)$ は PDF $f(t)$ を用いて次式で表される。

$$F(x) = P(-\infty \leq X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(t)dt \quad (4.34)$$

$f(t)$ が正規分布である場合、 $F(x)$ は次式で表される。

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) \right) dt \quad (4.35)$$

以上より、 $F(x)$ の逆関数を求めることで、一様乱数から正規分布を求めることができる。ここで、正規分布の $F(x)$ を解析的に求めることは困難であるため、ニュートン法で近似した。 $F(x)^{-1}$ に Van der Corput 列 ζ を代入することで、正規分布の Low-discrepancy 列を得た。図 4.5 に von der Corput 列に基づく正規分布のヒストグラムを示す。サンプル数は 10,000 点であり、正規分布に従う von der Corput 列を生成されていることが分かる。

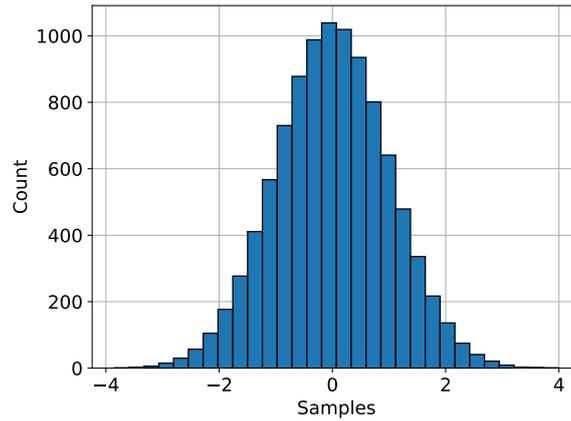


Fig. 4.5 Histogram of the normal distribution generated from low-discrepancy sequence using the inverse function method. The number of data points is 10,000.

図 4.3 と同様に、図 4.6 に $D = 100,000$ として qMC により期待値と分散を求め、 $X \sim \mathcal{N}(0, 3)$ における解析解との誤差収束の様子を MC と比較した。

図 4.6 より、qMC では試行回数 1000 回程度で理論値との誤差が極めて小さくなっていることが確認できる。このような qMC の収束性は、Koksma-Hlawka の定理により説明される。Koksma-Hlawka の定理では、qMC の誤差は、点集合の Discrepancy を積分関数の滑らかさに依存する有界変動に乗じた定数が境界となることを示しており、Star Discrepancy を用いて次式で表される。

$$|\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]_N| \leq V(f)D_s^*(P_N) \quad (4.36)$$

ここで、 $V(f)$ は Hardy-Krause の全変動である。Koksma-Hlawka の定理による誤差の上界は、点数 N が増加し、Star Discrepancy が減少すると qMC の誤差は 0 に収束することを示している。この収

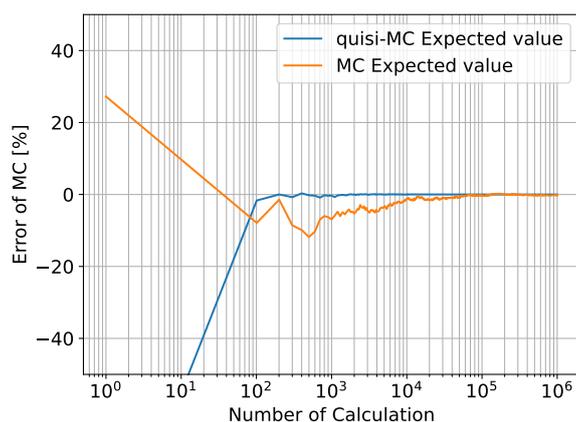


Fig. 4.6 The figure displays the relative error of the expected value obtained by Monte Carlo simulation with respect to the theoretical solution.

束性は、被積分関数が滑らかな関数である場合は、Star Discrepancy のべき乗で決定される。すなわち、収束性は Star Discrepancy に依存し、Halton 列の場合は式 4.31 に従う。これは、確率変数の数が少ない場合では、MC の $1/\sqrt{n}$ より収束が速いことを示している。一方、式 4.31 より、qMC は確率変数の数に応じて収束に必要なサンプル数が指数関数的に増大するため、高次元問題では効率的に確率分布を求めるのは困難になると考えられる。

4.4.2 解析条件

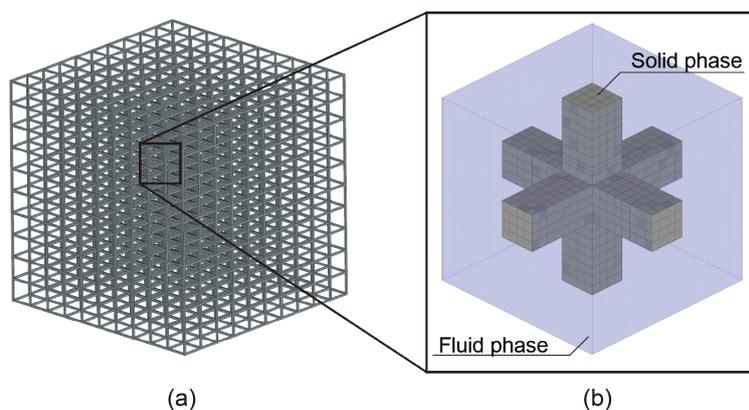


Fig. 4.7 The figure illustrates the microstructure models used in multiscale analysis and Monte Carlo simulation.

マルチスケール解析では、多孔質型吸音材を周期構造と仮定し、その単位構造を解析することで音響特性を求める。このとき、微視構造のパラメータが確率的な変動を有すると仮定して、MC および qMC により吸音率の確率分布を予測する。微視構造のパラメータを確率変数として扱い、それらが独立である場合、中心極限定理より、確率変数の母集団がどのような分布であったとしても、母平均と標本平均の誤差は近似的に正規分布に従うため、その複合的な効果を正規分布として近似できる。したがって、

Table 4.2 Material properties of solid phases in multiscale simulation.

	Young's modulus [GPa]	Poisson's ratio [-]	Mass density [kg/m ³]	Loss factor [-]
Solid phase	1.00	0.35	1000	0.100

Table 4.3 Material properties of fluid phases in multiscale simulation.

	Speed of sound [m/s]	Mass density [kg/m ³]	Viscosity coefficient [Pa s]	Thermal conductivity [W/m K]
Fluid phase	345.53	1.193	1.82×10^{-5}	0.0257

さまざまな微視構造の不確かさをもつ多孔質型吸音材において、構造全体で生じている微視構造の変動を、周期構造の変動として近似することができると考えられる。

このような近似に基づき、マルチスケール解析を援用し、MC および qMC を実行することで、吸音率のモーメントを求め確率分布を予測する。また、その収束速度を比較する。均質化法の微視構造モデルとして、図 4.7 に示す矩形の固体相を有するユニットセルを用いた。このユニットセルは数値計算の検証用に単純化したモデルであり、提案手法の妥当性を比較するために用いる。確率変数として、ユニットセルサイズと空孔率を選択した。ユニットセルサイズとは、図 4.7 の立方体のユニットセルの辺の長さを表し、ユニットセルサイズの変動に応じて微視構造が相似的に拡大・縮小する。また、ユニットセルの固体相の直径を基準として空孔率を変化させた。このとき、ユニットセルサイズと空孔率の変化は独立であり、それぞれ正規分布に従うと仮定した。固体相と流体その物性値は、それぞれ表 4.2 および表 4.3 の値を使用した。吸音率を計算する際の材料の厚さは 0.020 m、背後空気層は 0 m として、周波数範囲 50 ~ 6400 Hz において吸音率を求めた。

4.4.3 解析結果

MC で求めた吸音率の確率分布を図 4.8 に示す。MC の試行回数は 1000 回であり、期待値と標準偏差の変動が十分に小さくなった結果を図中に示している。図中の破線は期待値、点線は期待値 ± 標準偏差を表す。また、点線で囲まれた領域は、確率変数が与えられたときに、 $1\sigma = 68.3\%$ の確率で吸音率がこの範囲内に収まることを表している。3900 Hz 近傍の周波数域では吸音ピークが確認され、この周波数域で標準偏差が大きくなり、最大で約 ± 0.45 程度の値であった。

MC の収束性を確認するため、試行回数を変化させたときの各周波数の期待値と標準偏差の変化を図 4.9 および図 4.10 に示す。各周波数とも、試行回数が少ないときは期待値、標準偏差ともに変動が大きく、試行回数が増加するに従い値が収束していく様子が確認された。また、期待値と標準偏差のいずれにおいても、試行回数が 100 以下の場合、1000 回の結果との差が 10 % 以上であり、少ない試行回数では十分な信頼性が得られないことが確認された。一方、試行回数を 300 回まで増加させると、1000 回試行した結果と比較して 1.0 % 以下に変動が減少することが明らかとなった。誤差 1.0 % は、0 から 1.0 の値域で与えられる吸音率では最大 0.01 に相当し、十分に信頼できる予測値であると考えられる。

前節で述べたように、MC の収束速度は被積分関数により大きく異なるが、本論文で採用した比較的単純なユニットセルでは、少なくとも 300 回以上の試行により MC の結果が収束すると判断できる。以

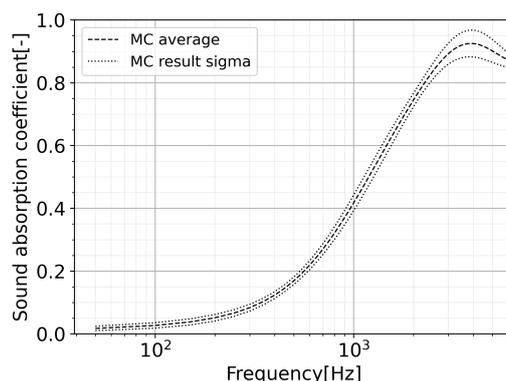


Fig. 4.8 Evaluation of expected value and standard deviation of sound absorption coefficient by Monte Carlo simulation.

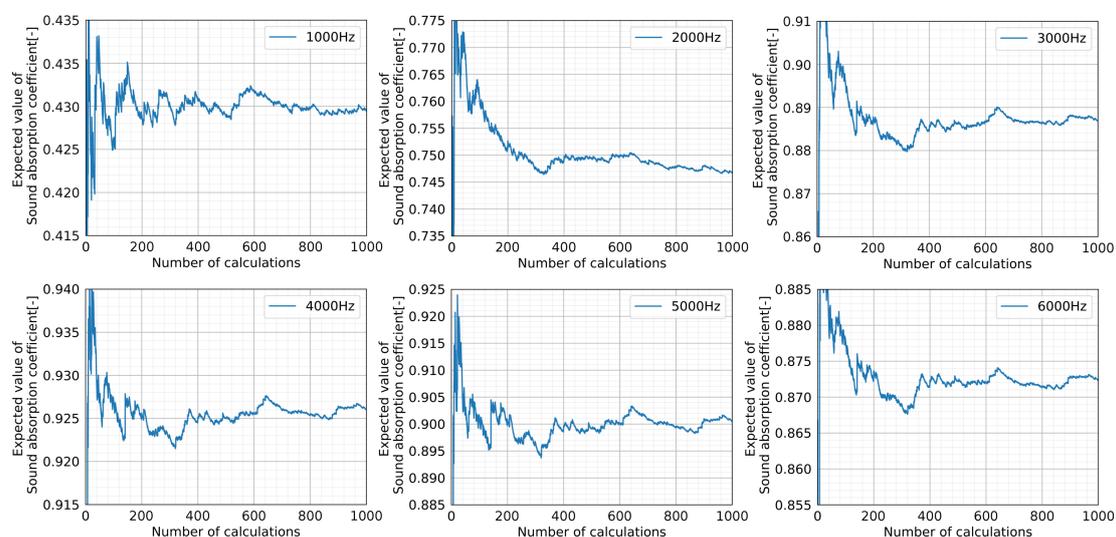


Fig. 4.9 Expected values of sound absorption coefficient with number of Monte Carlo calculations in rectangle unit cell. As a representative data, the results for unit cell size mean = $150 \mu\text{m}$, standard deviation = $10 \mu\text{m}$, porosity mean = 0.8, standard deviation = 0.05 are shown.

上より、吸音率の確率分布を十分な精度で予測するには、数百回以上の反復によるマルチスケール解析が必要であり、多くの計算資源が必要となることが明らかとなった。なお、MC では計算誤差が $1/\sqrt{D}$ に従い減少するため、誤差を 1 桁減少させるには試行回数を 100 倍にする必要がある。

続いて、MC に必要な計算資源を削減するため、qMC による期待値と標準偏差の収束性を確認した。qMC の試行回数を変化させたときの各周波数の期待値と標準偏差の変化を図 4.11 および図 4.12 に示す。図 4.9 および図 4.10 に示した MC の結果と比較すると、Halton 列を用いた qMC では、期待値と標準偏差ともに MC より高速に収束していることが確認された。図 4.11 より、qMC の試行回数が少ない期待値では、値が大きく変化するピーク値が確認された。これは、qMC が設計空間を一様にサンプリングするためであり、平均値から離れたところで大きな吸音特性を示す結果が PDF に従う確率で得られるためであると考えられる。このような変動は試行回数が増加するに従い収束し、試行回数が約

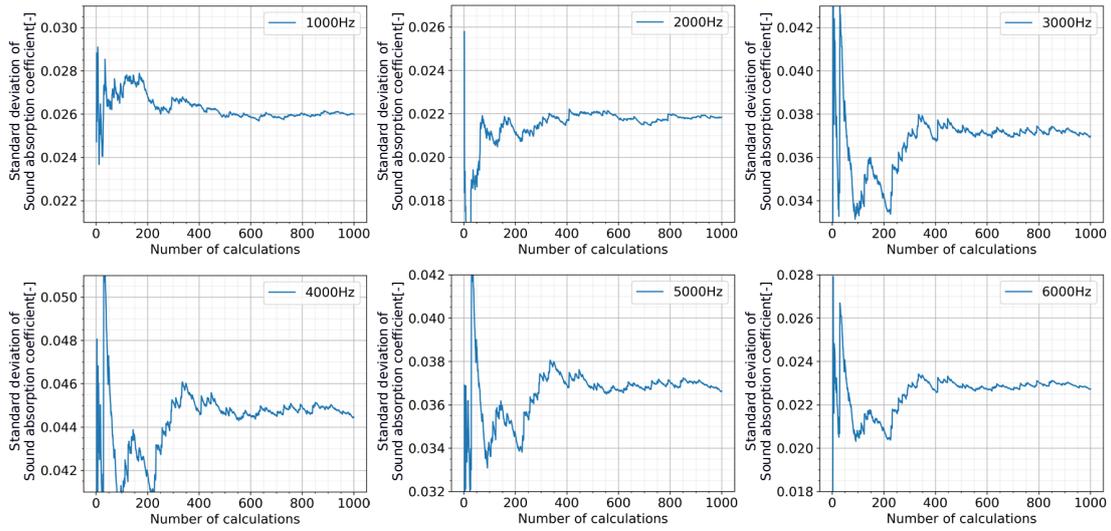


Fig. 4.10 Standard deviation of sound absorption coefficient with number of Monte Carlo calculations in rectangle unit cell. As a representative data, the results for unit cell size mean = $150 \mu\text{m}$, standard deviation = $10 \mu\text{m}$, porosity mean = 0.8, standard deviation = 0.05 are shown.

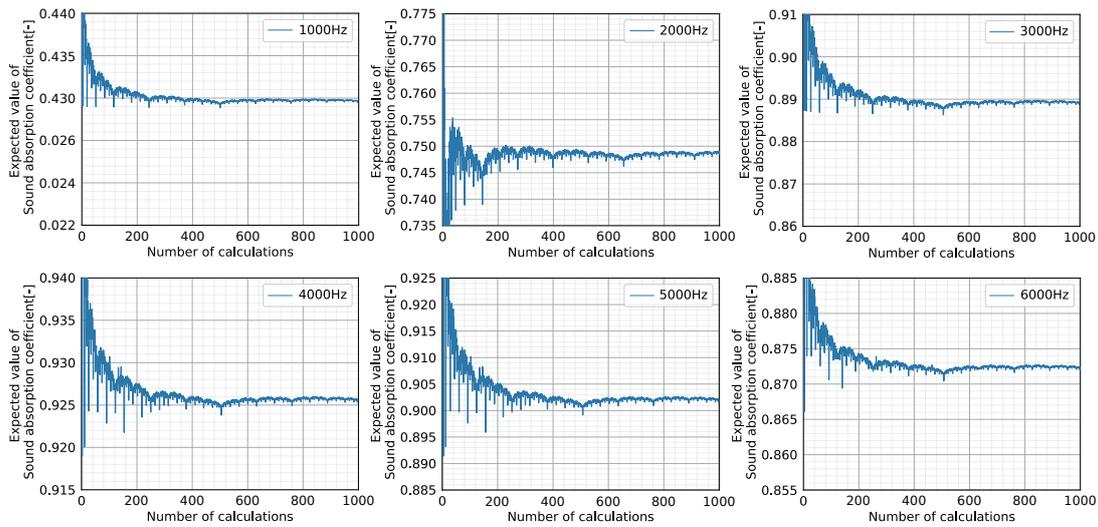


Fig. 4.11 Expected values of sound absorption coefficient with number of quasi-Monte Carlo calculations in rectangle unit cell. As a representative data, the results for unit cell size mean = $150 \mu\text{m}$, standard deviation = $10 \mu\text{m}$, porosity mean = 0.8, standard deviation = 0.05 are shown.

200 回まで増加すると、試行回数が 1000 回の結果と比較して差が 1.0 % 以下となっていることが確認された。標準偏差も同様の傾向を示しており、試行回数が 100~200 回で変動が 1.0 % 以下となっていることが確認できた。以上より、qMC は MC と比較して少ないマルチスケール解析の試行回数で吸音率のモーメントを予測できることが明らかとなった。ただし、qMC は MC と比較すると効率的な手法ではあるが、少なくとも 100 回程度のマルチスケール解析が必要であり、依然として相当量の計算資源

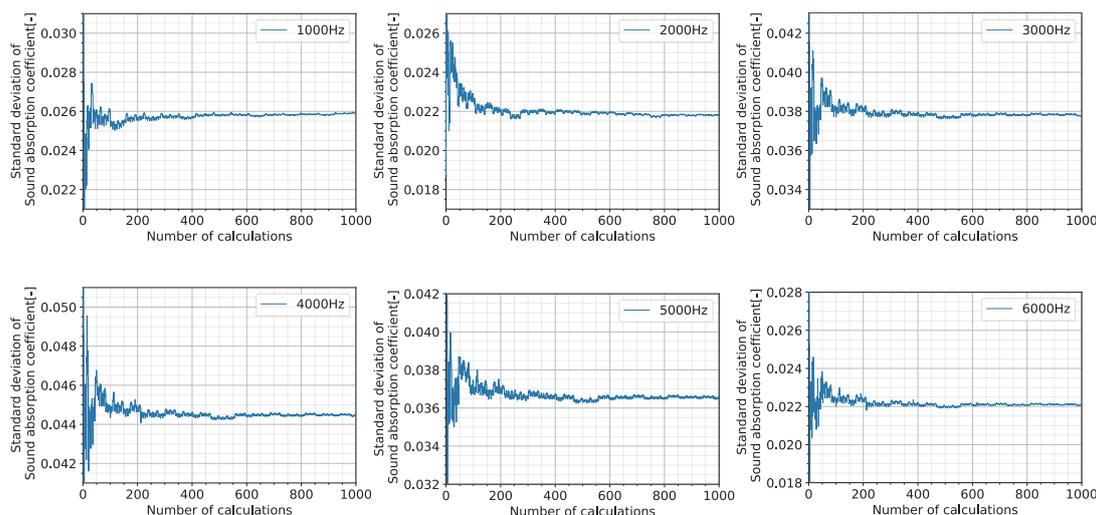


Fig. 4.12 Standard deviation of sound absorption coefficient with number of quasi-Monte Carlo calculations in rectangle unit cell. As a representative data, the results for unit cell size mean = $150 \mu\text{m}$, standard deviation = $10 \mu\text{m}$, porosity mean = 0.8, standard deviation = 0.05 are shown.

を必要とする。マルチスケール解析の計算時間はユニットセルの複雑さに依存するが、本節で用いた比較的単純なユニットセルを用いたとしても、1回の試行には2時間程度の計算時間が必要であるため、qMCで吸音率の確率分布を求めるには数百時間以上の計算時間が必要である。また、4.4.1項で示した通り、qMCの収束速度は確率変数の数に依存するため、高次元の問題ではMCより収束速度が遅くなる可能性がある。

4.5 サロゲートモデルによる吸音率の確率分布の予測

前節では、MCによる統計モーメントの近似方法を示し、収束性を改善したqMCを用いたとしても、十分な精度で近似するには少なくとも数百回以上のマルチスケール解析の計算が必要であることが明らかとなった。本節では、効率的に設計空間をサンプリングする方法である実験計画法について説明し、実験計画法で得られたデータからサロゲートモデルを構築することで、MCの計算資源を削減する方法を示す。

4.5.1 実験計画法

実験計画法は、対象の結果とそれに影響を与える要因の関係を調べるため、時間的、経済的制約を考慮してデータを取得して解析する手法の総称である。数値計算においては、与えられた要因（独立変数）の組み合わせをサンプルとして、それらを計算モデルに入力してその応答（従属変数）を解析する。このとき重要なのは、少数の代表サンプルを使って計算モデルの挙動を正しく推定することであり、実験計画が入力パラメータの設計空間全体をカバーできるよう選択する必要がある。実験計画法におけるサンプリング手法には、決定論的手法、確率的手法、適応的なサンプリング手法など、さまざまなアプローチが存在する。これらの手法で得られたサンプルの性質が、その後の解析効率と頑健性に影響を与

えるため、慎重にサンプリング手法を選択する必要がある。

設計空間全体を網羅する実験計画として最も単純な方法は、設計空間を分割し格子形状でサンプリングして空間を規則的に充填させる方法である。これは全因子計画とも呼ばれ、すべての領域が同じ密度のサンプルで規則的に網羅される。しかし、このような規則的なサンプリング手法では、設計空間の次元数 s に対して階乗の関係にあり、その計算量は $O(n^s)$ となる。そのため、 s が増加すると空間を網羅するのに必要なサンプルは指数関数的に増加し、膨大な数の計算や実験が必要となる。これは次元の呪い (The curse of dimensionality) とも呼ばれ、パラメータの推定や仮説検定が困難になる。

このような問題を回避するため、サンプルを効率的に生成する方法が研究されてきた。前節までに説明した MC は、確率的なサンプリング手法であり、想定された PDF に従いランダムにサンプルが生成される。また、Low-discrepancy 列を用いた qMC は、決定論的方法と確率論的方法を組み合わせた半ランダム計画であり、Discrepancy を指標として効率的にサンプルを取得している。

決定論的サンプリング法の代表的な方法としては、直交実験計画法がある。各設計変数間に相互作用が存在する場合、その影響を考慮して実験計画を作成するのが困難になるが、因子の数、水準数、相互作用の有無に応じて対応する直交表を選択することで、効率的にサンプルを取得できる。適切な直交表を用いることで、多数の組み合わせ実験と同等の結果を最小限の試行回数で得ることができることが知られている。直交表は取得すべきサンプルを明確に決定することができ、分析も容易であるため、製品開発で広く用いられている。

確率的なサンプリング手法としては Latin Hypercube Sampling (LHS) が広く用いられている。LHS は多次元分布からサンプルを生成するための統計的手法であり [48]、シミュレーションにおける実験計画法では一般的に用いられる方法である。LHS では各変数の定義域を等間隔に分割し、各間隔に一つのサンプルをランダムに配置することで、各変数の範囲全体にサンプルが均等に分散し、設計空間を均一にカバーすることができる。したがって、LHS は直行配列の特殊な場合と考えることができ、 s 次元空間の任意の軸への射影が一様分布となる特徴がある。

以上のような直交表や LHS は、サンプリング点全体を一度に生成するためワンショットサンプリングと呼ばれる。この方法は、実効すべき試行の変数の組み合わせが見通しよく得られるため、試行の計画が立てやすい利点がある。一方、得られた結果が収束基準を満たさない、もしくは十分な精度でデータ分析をできない場合などでは、追加の評価が必要になることがある。この場合、サンプルサイズを拡大する必要があるが、ワンショットサンプリングでは設計空間での分布特性を維持する必要があるため、追加のサンプリング点において厳しい制約が存在する。このような制約により、ワンショットサンプリングでサンプル数を追加する場合には、完全に新しい実験計画を作り直さなくてはならない可能性がある。このように、ワンショットサンプリングでは見通しよく試行計画を立てられる一方で、結果の再利用性やサンプリング点の選択に十分に注意を払うべきである。

ワンショットサンプリングと比較される方法として、適応的サンプリング手法がある。適応的サンプリング手法はワンショットサンプリング手法とは対照的に、試行の変数の組み合わせを一度に得ることはできず、現在あるデータに基づいて次のサンプリング点を選択することで、効率的に設計空間を探索する方法である。これは、ベイズの定理に基づいており、第6章で詳細に説明する。

4.5.2 層化抽出法

層化抽出法は設計空間をいくつかの領域に分割し、各領域のサンプル数を決定することで実験計画の空間充填性を向上させる手法である。一様分布から乱数を発生させ、この乱数点における逆 CDF を評価することで、任意の確率分布でサンプリングできる。層化抽出法では、標本数 N から始めて、 $[0, 1]$ の領域を M 個の階層 S_m に分割する。

$$S_m = \left[\frac{m-1}{M}, \frac{m}{M} \right], \quad m = 1, \dots, M \quad (4.37)$$

このとき、階層に一様に分布する $N_S = N/M$ 個の乱数を選択する。したがって、階層には N_S 個の一樣な確率変数 t_n が存在する。次に、確率変数 X から標本を得るため、 x_n を以下で評価する。

$$x_n = F_X(t_n) \quad (4.38)$$

以上より、層化抽出法は M 個の階層に対して、分位数 $[0, M^{-1}], [M^{-1}, 2M^{-1}], \dots, [(M-1)M^{-1}, 1]$ のそれぞれに少なくとも N/M 個のサンプルが存在することを保証するものである。つまり、分布の極値にはある程度の数のサンプルがあり、その間に均等な分布の尺度があることが保証されている。このような方法を用いることで、設計空間内を高い均一性でサンプルを取得することができ、サロゲートモデルを構築する際に欠損値が少なくなる。本論文では層化抽出法の一つである LHS によりサンプリング点を取得し、サロゲートモデルを構築する。

4.5.3 Latin Hypercube design

LHS は、任意のサンプル数が与えられたときに、設計空間を満たすサンプル列を選択する方法である。確率変数ベクトル \mathbf{X} において、 N 個のサンプルを生成するために $X = (X_1, \dots, X_p)$ を各 X_i のドメインとして N 個の区間で定義する。このとき、各区間は $N+1$ 個の辺で定義される。

$$\left\{ F_j^{-1}(0), F_j^{-1}\left(\frac{1}{N}\right), F_j^{-1}\left(\frac{2}{N}\right), \dots, F_j^{-1}\left(\frac{N-1}{N}\right), F_j^{-1}(N) \right\} \quad (4.39)$$

区間のどの組み合わせがサンプルを取得するかを選択するために、列が N の p 個の異なるランダムに選択された並べ替えである要素 π_{ij} をもつ $N \times p$ 行列の $\mathbf{\Pi}$ を定義する。 j 次元の i 番目のサンプルを生成するために、以下を求める。

$$x_{ij} = F_j^{-1}\left(\frac{1}{N}(\pi_{ij} - 1 + u_{ij})\right) \quad (4.40)$$

ここで、 u_{ij} は 0 から 1 の一様分布である。例として、 $p = 3$ 、 $N = 4$ の場合は $\mathbf{\Pi}$ は以下の行列となる。

$$\mathbf{\Pi} = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 3 & 3 & 1 \\ 2 & 2 & 3 \\ 1 & 4 & 4 \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

以上より、LHS を用いて確率変数をサンプリングし、その各点でマルチスケール解析により吸音率を評価した。

4.5.4 k-最近傍法

k-最近傍法 (k-NN) は、回帰問題と分類問題の両方に使用できる機械学習アルゴリズムの一種である [49]。本項では、k-NN による回帰モデル構築の特徴を説明し、その後確率変数から吸音率を推定する回帰モデルの構築方法を説明する。

回帰問題における k-NN は、与えられたサンプルの従属変数 (吸音率) を、その k 個の最近傍の値に基づいて予測する。すなわち、k-NN はサンプル点間の距離尺度を求めることで、回帰モデルを構築するノンパラメトリック回帰手法である。ノンパラメトリック回帰ではデータに対する回帰モデルを仮定せず、与えられたデータから従属変数を予測するため、複雑な非線形関係にあるデータにおいても、柔軟に回帰モデルを構築することができる特徴がある。また、k-NN はデータを与えられた段階ではモデルを構築することなく、予測段階まで計算が実行されない。そのため、一般的に機械学習で多くの計算資源が必要となる学習過程が k-NN では非常に高速であり、計算効率が高い。これは、Lazy learning とも呼ばれ、k-NN の大きな特徴の一つである。また、k-NN 回帰では予測値として与えられた値の k 個の最近傍値に基づいて従属変数を予測する。これは、予測値の近傍のデータにのみ予測値が影響されることを意味しており、設計空間全体のデータは不要である。さらに、機械学習の共通の特徴として、データを蓄積することで精度を向上させることができる。同一の微視構造モデル、微視構造パラメータであれば、データを蓄積することで回帰モデルの精度を向上させることができる。

以上の特徴より、本論文では k-NN をサロゲートモデルの回帰モデルとして選択した。ここからは LHD に基づいてサンプリングした結果から、吸音率を予測する k-NN 回帰モデルを定式化する。LHD で求めたサンプリング点 x_i と x_j 間の距離 D は、加重ユークリッド距離を用いて、以下で表される。

$$d(x_i, x_j) = \sqrt{\sum_{n=1}^N w_n (x_{i,n} - x_{j,n})^2} \quad (4.42)$$

ここで、 $x_{i,n}$ と $x_{j,n}$ はそれぞれ x_i と x_j の n 番目の特徴量を表している。また、 $w_n = 1/d(x_i, x_j)^2$ は n 番目の特徴量に割り当てる重みである。 w_n を用いると、吸音率 $f(\mathbf{X})$ は次式で近似される。

$$f(\mathbf{X}) \approx \frac{\sum_{i=1}^k w_i f(x_i)}{\sum_{i=1}^k w_i} \quad (4.43)$$

このとき、 w_n は入力データセット点と新しい点との距離の逆数によって決定される。具体的には、 x が未知の点である場合、その補間値は以下の式で求める。

$$\alpha(x) \approx \begin{cases} \sum_{i=1}^n \frac{\|x-x_i\|^{-p}}{\sum_{j=1}^n \|x-x_j\|^{-p}} \cdot \alpha_{x_i} & \text{if } x \neq x_j \\ \alpha_{x_i} & \text{if } x = x_i \end{cases} \quad (4.44)$$

ここで、距離 $\|x-x_i\|$ を $p(p > 0)$ のべき乗とすることで、新しい点 x_k に近いデータ点の重みが徐々に大きくなっていく。このような k-NN モデルによる予測の概要を図 4.13 に示す。図のように予測したい確率変数の値が与えられると、近傍データの距離より重みが計算され、それらの値から予測値が計算される。

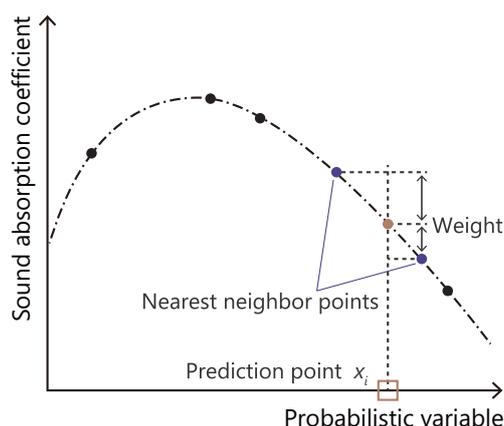


Fig. 4.13 The figure presents a schematic diagram of the interpolation of prediction points using a k-nearest neighbor regression model.

以上の k-NN 回帰モデルを用いることで、任意の確率変数の値を与えると吸音率の予測値が迅速に得られる。これを用いることで、MC の試行の計算資源を大幅に削減することができる。

4.5.5 k-最近傍法による吸音率の確率分布の予測

LHS および式 4.43 により $f(X)$ の k-NN 回帰モデルを構築し、これをサロゲートモデルとする。LHS のサンプル数は 50 として、マルチスケール解析で吸音率を取得した。得られた確率変数と吸音率のデータセットを用いて、式 4.43 で $f(X)$ 近似しサロゲートモデルを得た。サロゲートモデルを用いて $N = 10,000$ の MC を実行し、式 4.18 および式 4.19 より吸音率の確率分布の期待値と分散を求めた。確率変数としてはユニットセルサイズを選択し、期待値は 100, 150 μm 、標準偏差は 10, 30, 50 μm の正規分布に従うと仮定した。また、固体相と流体その物性値は、それぞれ表 4.2 および表 4.3 の値を使用した。吸音率を計算する際の材料の厚さは 0.020 m、背後空気層は 0 m として、周波数範囲 50 ~ 6400 Hz において吸音率を求めた。

サロゲートモデルを用いて MC を実行して求めた吸音率の確率分布と、MC で求めた吸音率の確率分布を比較した結果を図 4.14 に示す。図 4.14 より、k-NN によるサロゲートモデルを用いた方法の結果は、MC の吸音率の確率分布の傾向と良く一致していることが明らかとなった。しかし、図 4.14 の期待値 100 μm 、標準偏差 50 μm などのサロゲートモデルの結果を見ると、期待値と標準偏差が周波数域で細かく振動するような結果が確認された。これは、LHS の 50 サンプルではサロゲートモデルの設計空間が十分に密ではなく、 $\|x - x_i\|$ が大きいため式 4.44 の予測精度が低下した結果と考えられる。一方、前述した通り、吸音率のモーメントは精度良く予測できているため、k-NN のサロゲートモデルは確率分布の統計量を求めるために用いることができることが明らかとなった。

最後に、サロゲートモデルを用いた MC と、マルチスケール解析から直接的に MC で確率分布を求める方法の計算時間を、本論文での計算例に基づき比較する。サロゲートモデルを構築するため、LHS に基づく 50 点のサンプルを用いた。マルチスケール解析には、CPU Intel Xeon (E5-2680 \times 2)、メモリ (PC4-2133P-R) 256GB を用いて、有限要素解析では 4 コアの並列計算を実行した。このとき、マ

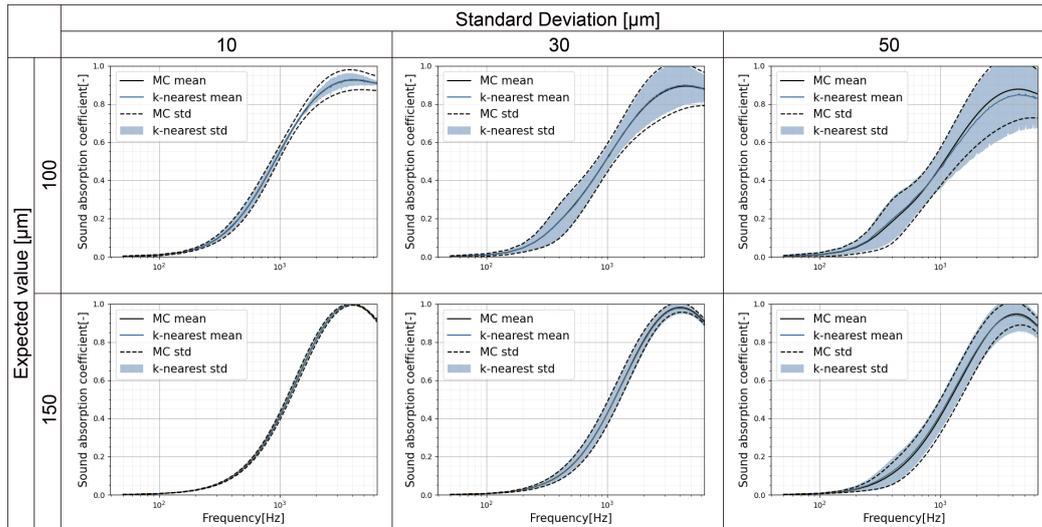


Fig. 4.14 Probability distribution of sound absorption coefficient using surrogate model by k-nearest neighbor regression in Monte Carlo simulation.

マルチスケール解析により吸音率を求めるには、1 サンプルあたり約 2 時間の計算時間が必要であった。したがって、50 サンプルの解析結果を得るには、約 100 時間程度の計算時間を見積ることができる。一方、構築したサロゲートモデルを用いて 1 Hz 刻みの周波数域で $D = 10,000$ の MC を計算を実行すると、計算時間は約 10 分であった。このように短い計算時間で MC を実行できるのは、式 4.43 で示される通り、k-NN による回帰モデルでは吸音率を代数的に求めているためである。サロゲートモデルを用いない場合、本節で示した例では試行回数 300 回の MC で約 600 時間の計算時間が必要であった。以上より、本節で提案した LHD と k-NN 回帰を用いることで、吸音率の確率分布を求めるのに必要な計算時間を 84% ほど削減できることを明らかにした。

4.6 まとめ

本章では多孔質型吸音材で生じる不確実性を確率理論に基づきモデル化し、マルチスケール解析を援用して微視構造のランダム性を考慮したによる吸音率のモーメントの予測結果を示した。応答関数が単純な場合、応答の PDF は解析的に求めることができるが、マルチスケール解析で得られる複雑な応答関数では PDF およびモーメントを解析的に求めることが困難であることを示した。これを近似する方法として MC を説明し、その収束性について議論した。MC はどのような問題にも適用できる頑健な手法である一方、十分に収束した結果を得るためには多くの応答関数の結果が必要であり、マルチスケール解析を適用するには、多くの計算資源が必要となることを示した。

このような計算資源の問題を解決するため、準 MC およびサロゲートモデルにより統計モーメントを近似した。準 MC は MC の収束性を改善するために Low-discrepancy 列を用いており、準 MC により収束性が改善することを示した。また、確率空間で効率的にサンプルを取得するサンプリング手法を示し、層化抽出法の LHD により取得したデータセットを用いて、k-NN による回帰によりサロゲートモデルを構築した。構築したサロゲートモデルを用いることで高速な MC の評価が可能となり、その結果

は MC のみで求めた結果と同等の結果が得られることを示した。

以上より，本章では吸音率の確率分布の基本的な近似手法を示したが，いずれの手法においても，マルチスケール解析で吸音率を少なくとも数十から数百回以上評価する必要がある，吸音率の確率分布を迅速に推定することは困難である．次章以降ではこれらの課題に対する解決法を示す。

第 5 章

摂動法による吸音率の確率分布の評価

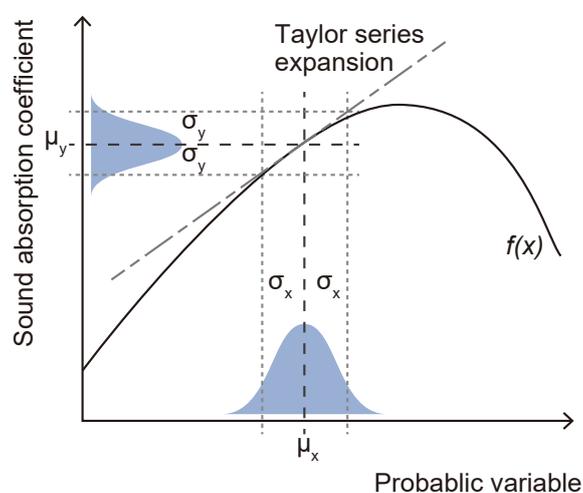


Fig. 5.1 Schematic diagram of the perturbation method for approximating probability distribution of sound absorption coefficient.

前章では吸音率の不確実性をモデル化し、MC とサロゲートモデルによる吸音率の確率分布の予測手法を示した。このとき、MC やサロゲートモデルでは試行回数により予測精度が決定するため、高精度に不確実性を定量化するには多くの繰返し計算が必要となることを示した。したがって、1 回の試行に多くの時間がかかる場合、膨大な計算資源が必要となり、実用的な計算時間で不確実性を定量化することは困難であることを示した。このような課題を解決するため、本章では摂動法による効率的な吸音率のモーメント予測手法を定式化する。

5.1 摂動法の概要

摂動法は複雑な非線形方程式や、閉じた形式の解が明らかではない複雑な境界条件での近似解を求める解析手法である。摂動法では最小限の評価結果を用いて、小さな変動を示すパラメータに関して級数展開することで近似解を取得する。級数展開した結果に基づき、対象の評価指標の確率分布のモーメントを近似的に求め、システムの平均的な性能が不確実性の影響でどの程度変化するかを評価する。し

かし、摂動法は少数のサンプルから分布全体へ外挿するため、MCのような確率分布から直接的にサンプリングする手法と比較して、対象とする問題に応じて確率分布の予測の信頼性が変化する。一方、サンプリングに基づく手法と比較し、はるかに高速に確率分布を近似でき、不確実性の影響を迅速に解析することができる。本章では、摂動法を用いた確率分布の予測手法を定式化し、吸音率のモーメントの予測結果をMCと比較することで、吸音率の不確実性を効率的に定量化できることを示す。また、摂動法を用いる際の仮定や近似についての留意点を説明し、摂動法を用いた手法の限界について述べる。さらに、第2章で測定した実験結果に基づき実材料の微視構造をモデル化し、摂動法で解析した結果と実験結果を比較する。

5.2 摂動法の定式化

十分なサンプル数の $f(\mathbf{X})$ を取得できる場合、MCは高精度に吸音率のモーメントを計算することができ、ほとんどの問題に適用できる頑健な確率分布の評価手法である。しかし、多くの場合では多数の $f(\mathbf{X})$ を求めるには、多くの計算資源や時間を費やす必要がある。第3章のマルチスケール解析を用いて、1サンプルの $f(\mathbf{X})$ を評価するには、数時間以上の評価時間を費やす必要があり、これは微視構造が複雑になるほど増大する。本論文の手法を製品開発へ応用する場合、計算時間やCPU、メモリなどの計算資源の制限下で、より効率的に確率分布を求める方法が望まれる。そこで、本節では迅速に吸音率の確率分布を近似できる摂動法による吸音率の予測手法を定式化し、得られた結果をMCと比較して手法の妥当性を評価する。なお、式導出過程の詳細はAppendix Aに記述した。

摂動法による吸音率の確率分布の近似方法の概要を図5.1に示す。確率変数が微小変動と仮定できる場合、 $f(\mathbf{X})$ をテイラー級数展開で近似し、式4.10および式4.11の統計モーメントを計算して $f(\mathbf{X})$ の確率分布を予測する。 $f(\mathbf{X})$ が十分に微分可能であるとき、 $f(\mathbf{X})$ は \mathbf{X} の平均値 $\bar{\mathbf{X}}$ におけるテイラー級数展開として式5.1で近似される [50]。

$$f(\mathbf{X}) \approx f(\bar{\mathbf{X}}) + \sum_{k=1}^n \left. \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}^k} \right|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \left. \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \right|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) + \dots \quad (5.1)$$

式5.1より、 \mathbf{X} の微小な摂動では、テイラー級数展開により吸音率の変動を近似できることがわかる。

式5.1の二次項まで考慮し、式4.10より、 \mathbf{X} の期待値は次式で近似される。

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] \approx \int_{-\infty}^{\infty} \left(f(\bar{\mathbf{X}}) + \sum_{k=1}^n \left. \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}^k} \right|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \left. \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \right|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) \right)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \quad (5.2)$$

式5.2を展開すると、テイラー級数展開の二次項まで考慮すると、期待値は次式で表される。

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] \approx f(\bar{\mathbf{X}}) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \right|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \quad (5.3)$$

また、式5.1の一次項まで考慮すると次式となる。

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] \approx f(\bar{\mathbf{X}}) \quad (5.4)$$

続いて、 $f(\mathbf{X})$ の分散を求める。式 4.11 で定義された分散に、式 5.1 の二次項までを代入すると次式で表される。

$$\mathbb{V}[f(\mathbf{X})] \approx \left(f(\bar{\mathbf{X}}) + \sum_{k=1}^n \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^2 \right)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})] \quad (5.5)$$

ここで、テイラー級数展開の二乗項を $f(\mathbf{X})^2$ として、次式のように展開する。

$$\begin{aligned} f(\mathbf{X})^2 &= f(\bar{\mathbf{X}})^2 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) \right)^2 + \frac{1}{4} \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^2 \right) + 2f(\bar{\mathbf{X}}) \\ &\quad \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) \right) + f(\bar{\mathbf{X}}) \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^2 \right) + \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) \right) \\ &\quad \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^2 \right) \end{aligned} \quad (5.6)$$

式 5.5 および式 A.13 より、次式が導かれる。

$$\begin{aligned} \mathbb{V}[f(\mathbf{X})] &\approx f(\bar{\mathbf{X}})^2 + \sum_{k=1}^n \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{1}{4} \sum_{k=1}^n \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \\ &\quad \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &\quad + \sum_{k=1}^n \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{X} P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \quad (5.7) \end{aligned}$$

テイラー級数展開の一次項のみを考慮すると式 5.8 となる。

$$\mathbb{V}[f(\mathbf{X})] \approx f(\bar{\mathbf{X}})^2 + \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \quad (5.8)$$

同様に、二次項まで考慮すると式 5.9 となる。

$$\begin{aligned} \mathbb{V}[f(\mathbf{X})] &\approx f(\bar{\mathbf{X}})^2 + \sum_{k=1}^n \left(\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \right)^2 + f(\bar{\mathbf{X}}) \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \right) \mathbb{V}[\bar{\mathbf{X}}] + \sum_{k=1}^n \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \\ &\quad (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^3 + \frac{(\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^4 - 1}{4} \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{X}^2} \Big|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \sigma_x^4 - \mu_f^2 \end{aligned} \quad (5.9)$$

以上より、 $f(\mathbf{X})$ の微分係数を求めれば、吸音率の期待値と分散を近似されることが示された。微分係数は式 5.10 に示す差分 Δ_k を用いた中央差分法で近似した。

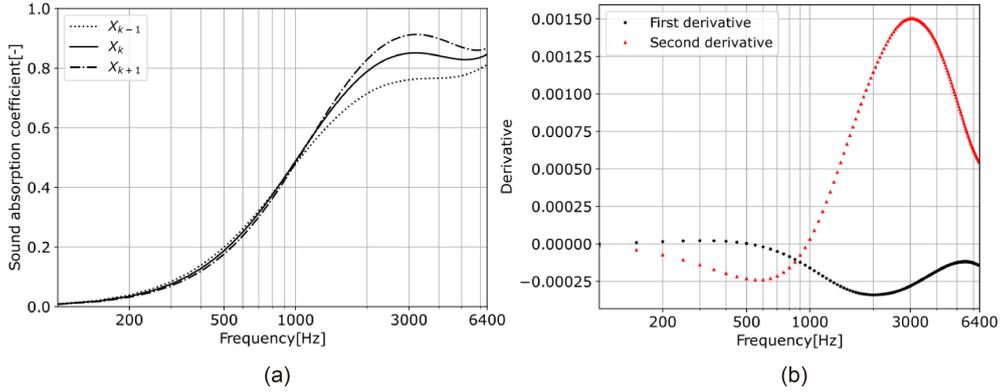


Fig. 5.2 Approximation of the first derivative using the central difference method.

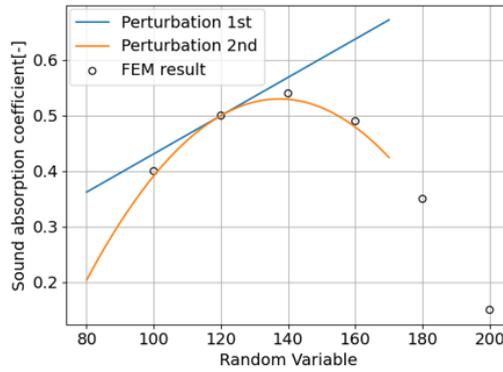


Fig. 5.3 Approximation of response functions using Taylor series expansion. The random variable is the unit cell size, and the variation of sound absorption coefficient at 2000 Hz is shown.

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial f}{\partial X_k} \right|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \approx \frac{f(\bar{\mathbf{X}} + \Delta_k \bar{e}_k) - f(\bar{\mathbf{X}} - \Delta_k \bar{e}_k)}{2\Delta_k} \\ \left. \frac{\partial^2 f}{\partial X_k^2} \right|_{\mathbf{X}=\bar{\mathbf{X}}} \approx \frac{f(\bar{\mathbf{X}} + \Delta_k \bar{e}_k) + f(\bar{\mathbf{X}} - \Delta_k \bar{e}_k) - 2f(\bar{\mathbf{X}})}{\Delta_k^2} \end{cases} \quad (5.10)$$

ここで、 \bar{e}_k は $\bar{e}_k = (0, 0, \dots, 1, \dots, 0)^T$ で表される k 番目で 1 を示すベクトルである。このとき、式 5.10 では誤差が Δ_k の二次に比例する。

図 5.2 に吸音率の解析結果から式 5.10 で導関数を求めた結果を示す。図 5.2 の (a) は吸音率、(b) は (a) から求めた導関数の値である。また、図 5.3 に導関数で $f(\mathbf{X})$ を近似した例を示す。ここでは、確率変数をユニットセルサイズとして、120 μm を中心として、2000 Hz における $f(\mathbf{X})$ を式 5.1 で近似した。

以上より、摂動法による確率分布の近似は局所微分係数による局所感度解析を応用した手法であり、各確率変数に摂動が与えられた際の吸音率の変動を定量評価する方法と考えることができる。そのため、確率空間全体での確率変数のグローバルな感度を分析することは摂動法では困難であり、また各変数間の相互作用、すなわち共分散を無視している仮定のもとで成り立っている手法である。このような

Table 5.1 The parameters of the norm probability density function assumed for the random variables in grid shape microstructure.

Random variable	Standard deviation	Expected value
		100
Unit cell size [μm]	10	150
		200
		0.75
Porosity [-]	0.05	0.80
		0.85

仮定に基づき、各確率変数が取りうる変動が小さいと仮定できる場合には迅速に結果を得ることができる近似手法である。また、吸音率の確率分布を直接的に求める以外にも、詳細な分析を実施する前に摂動法で感度の小さいパラメータを選択することで、効率的に確率分布を評価できる。一方、製造上のばらつきが大きく確率変数の分散が大きい場合や、確率変数の感度が大きい場合には近似結果の信頼性に欠ける点に留意する必要がある。

5.3 解析条件

図 5.4 に示す微視構造のユニットセルを用いて、摂動法と MC で吸音率の確率分布を計算した。これらの微視構造のユニットセルは、数値計算の妥当性を確認するための簡易モデルである。図 5.4(a) は格子形状の固体相をもつ多孔質体の構造、(b) は (a) を構成するユニットセルを示す。また、図 5.4(c) は繊維状の固体相が互いに直行して積層された多孔質体の構造、(d) は (c) を構成するユニットセルを示す。ここで、(b) および (c) の灰色の領域は固体相、青色の領域は流体相を示す。

これらのユニットセルに対して、確率変数としてユニットセルサイズと空孔率を選択した。これらの変数が変動した場合の多孔質構造の変化を図 5.5 に模式的に示す。図 5.5 の (a) および (b) の中央はユニットセルサイズと空孔率が期待値を示している状態、左図はユニットセルサイズが縮小した状態、右図は空孔率が減少した状態の微視構造を表している。これらは、それぞれの変動は独立と考えることができ、確率変数の共分散は 0 と仮定している。このとき、それぞれの確率変数は正規分布を仮定した。表 5.1 に格子形状、表 5.2 に繊維形状の微視構造における確率変数の期待値と標準偏差を示す。また、マルチスケール解析で与える固体相および流体の物性値は第 4 章の表 4.2 および表 4.3 の値を使用した。なお、計算する周波数域は 50–6400 Hz である。

5.4 解析結果

図 5.4(a)(b) に示した格子型ユニットセルにおいて、マルチスケール解析と摂動法および MC で求めた吸音率の確率分布を図 5.6 に示す。図 5.6 の黒色の破線は MC で求めた吸音率の期待値、点線は期待値 \pm 標準偏差の結果を表す。また、青色の実線は摂動法で求めた吸音率の期待値、青色で塗りつぶした領域は期待値 \pm 標準偏差の領域を表す。ユニットセルサイズと空孔率をそれぞれ変動させ、表 5.1 に示した計 9 種類の確率変数の組み合わせで解析した結果を示している。図 5.6 より、摂動法で近似した

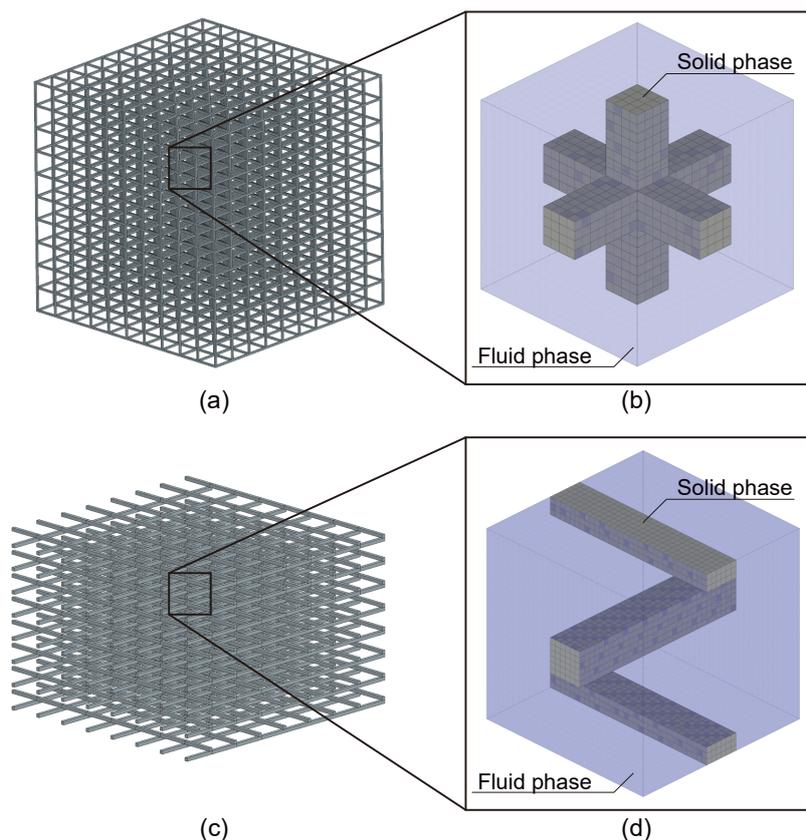


Fig. 5.4 Unit cell models used in the multiscale analysis to calculate the probability distribution of sound absorption coefficient. (a) is the lattice-based unit cell with the rectangular solid phase, and (b) is the unit cell with the shape imitating a fiber porous materials.

Table 5.2 The parameters of the normal probability density function assumed for the random variables in fiber microstructure.

Random variable	Standard deviation	Expected value
Unit cell size [μm]	10	50
		75
		100
Porosity [-]	0.05	0.75
		0.80
		0.85

吸音率の期待値は MC の期待値とおおむね一致していた。標準偏差は一部で乖離が確認され、たとえばユニットセルサイズが $200 \mu\text{m}$ 、空孔率が 0.80 では 3500 Hz 近傍の吸音ピークで摂動法の標準偏差が MC と比較して小さいことがわかる。これは、摂動法では局所的な導関数を用いて応答関数を近似しているためであり、周波数の変動が顕著に現れるピーク値では摂動法では十分な精度で近似できない可能性があることを示している。また、図 5.6 のユニットセルサイズが $200 \mu\text{m}$ の各結果など、吸音率が

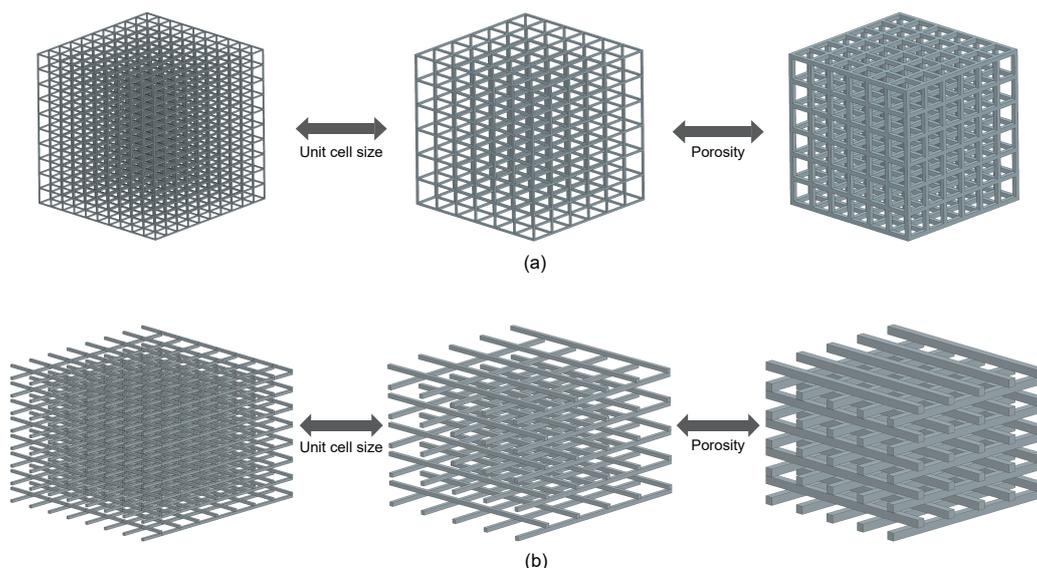


Fig. 5.5 The randomness of the microstructure when fluctuating the random variables. Assuming that these variations are stochastically mixed, a probability distribution of the sound absorption coefficient is obtained.

1.0に近い値を示す条件では期待値 + 標準偏差の値が1.0を超えている周波数域が存在する。吸音率の定義より、吸音率の定義域は $0 \leq \alpha \leq 1.0$ であるが、確率分布を考慮した場合、計算上1.0を超える結果が示されている。これは、吸音率の確率分布として正規分布を仮定しているため、吸音率の期待値に標準偏差の値が対称に足されるためである。

続いて、図5.4(c)(d)のユニットセルにおいて、マルチスケール解析と摂動法およびMCで求めた吸音率の確率分布を図5.7に示す。図5.7では、図5.6のように単一の吸音ピークを示すのではなく、1000 Hz近傍で極値を示して高周波数域に向けて吸音率が上昇する傾向があることがわかる。このような吸音特性においても、摂動法とMCの期待値と分散の結果はおおむね一致していた。しかし、1000 Hzの標準偏差を比較すると、摂動法では確率分布の分散が小さく評価されていることがわかる。これは先述した通り、確率変数の変動により極大値の周波数が変化することで導関数がゼロに近い値を取るためであると考えられる。

図5.6および図5.7で示した摂動法とMCの吸音率の確率分布を比較するため変動係数を求めた。変動係数は式5.11で表されるように、確率分布の標準偏差を分布の平均値で正規化した値であり、確率分布の相対的なばらつきを表す指標である。

$$C.V. = \frac{\sigma_f}{\langle f(x) \rangle} \quad (5.11)$$

図5.8に図5.6の摂動法とMCの変動係数を示す。また、図5.9に図5.7の変動係数を示す。なお、吸音率の期待値がゼロに近い値を示す低周波数域では、式5.11より変動係数が極めて大きな値を示すため、図5.8および図5.9では150 Hz以上の変動係数を示した。図5.8より、摂動法とMCの変動係数はよく一致しており、摂動法とMCで求めた確率分布には高い相関関係があることが確認された。な

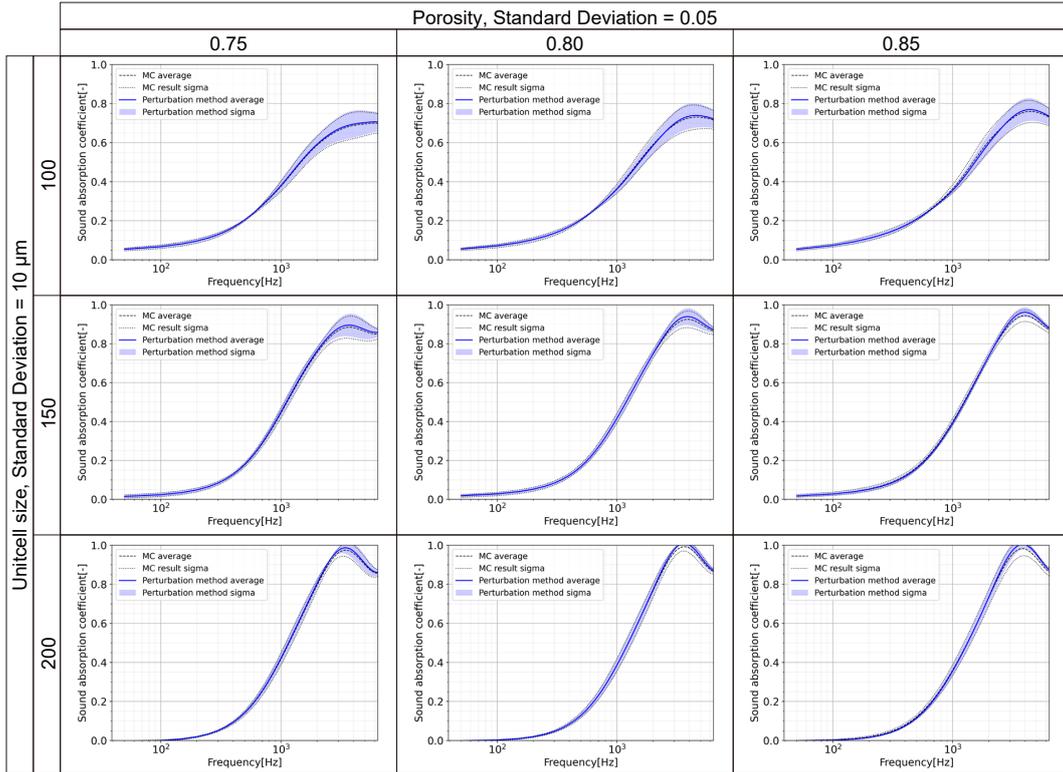


Fig. 5.6 Comparison of sound absorption probability distributions predicted by MC and perturbation results in the lattice-based shape homogeneous body. The black dashed line and the solid blue line represent the expected values. The black dotted line and the blue region represent the standard deviation of the sound absorption coefficient.

お、一部の周波数域、例えば図 5.8 のユニットセルサイズが $100 \mu\text{m}$ 、空孔率が 0.75 の 550 Hz などの周波数域では、摂動法の変動係数の値が 0 に近い値を示し、MC の結果と乖離している。これは、差分法で求めた導関数の値が 0 に近い値を示した結果、分散が小さい値を示したためと考えられる。一方で、MC では乱数により多点でサンプリングしているため、このような極小点が現れないと考えられる。

最後に、摂動法と MC で求めた吸音率の確率分布の類似度を直接的に比較するため、Kullback-Leibler(KL) 情報量 $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ を計算した。MC で求めた吸音率の確率分布を \hat{P} 、その PDF を $\hat{p}(\mathbf{X})$ 、摂動法で求めた吸音率の確率分布を \hat{Q} 、その PDF を $\hat{q}(\mathbf{X})$ とすると、 $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ は式 5.12 で表される。

$$KL(\hat{P}|\hat{Q}) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{p}(\mathbf{X}) \ln \frac{\hat{p}(\mathbf{X})}{\hat{q}(\mathbf{X})} d\mathbf{X} \quad (5.12)$$

$KL(\hat{P}|\hat{Q})$ は正の実数であり、PDF $\hat{p}(\mathbf{X})$ と $\hat{q}(\mathbf{X})$ が同一であれば 0 を示す。ここで、 $\hat{p}(\mathbf{X})$ および $\hat{q}(\mathbf{X})$ は正規分布と仮定した。

図 5.10 および図 5.11 に摂動法と MC の PDF で計算した $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ の結果を示す。変動係数と同様に $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ も 150 Hz 以上の結果を示している。図 5.10 より、格子型のユニットセルでは摂動法で分散が極めて小さく評価されていた点で $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ の鋭いピークが見られるが、その他の周波数域におい

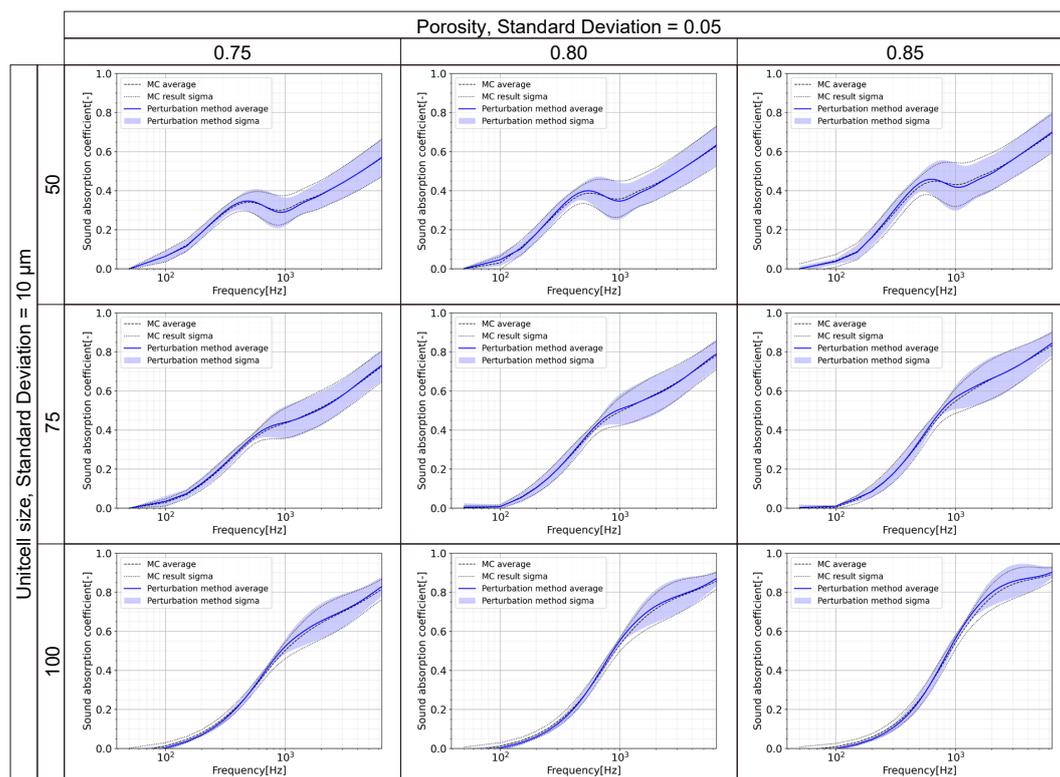


Fig. 5.7 Comparison of probability distributions predicted by MC and perturbation method results in the fiber-based porous materials.

では $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ は低い値を示していることがわかる。また、図 5.11 より、繊維状のユニットセルでは格子型と比較してすべての周波数域で $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ が低い値を示しており、吸音ピークなど摂動法で分散が低く評価されやすい周波数においても、格子型ユニットセルより $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ は小さい結果となった。

以上の結果より、摂動法を用いることで、確率変数の変動が小さい場合には吸音率の確率分布を迅速に計算できることが示された。このときのマルチスケール解析の計算回数は、確率変数の数を n として $2n + 1$ 回であり、MC と比べ極めて少ない計算資源で確率分布を近似できる。一方で、摂動法は局所導関数に基づいた方法であるため、MC の結果と大きく乖離するケースが存在した。このような条件では、差分計算方法を改善することで、導関数を精度良く計算する必要がある。差分法の改善方法として、Thapha ら [40] および Paudel [42] が提案した摂動法における高精度な差分近似法などが挙げられ、これらの手法を用いることで近似精度が向上する可能性がある。

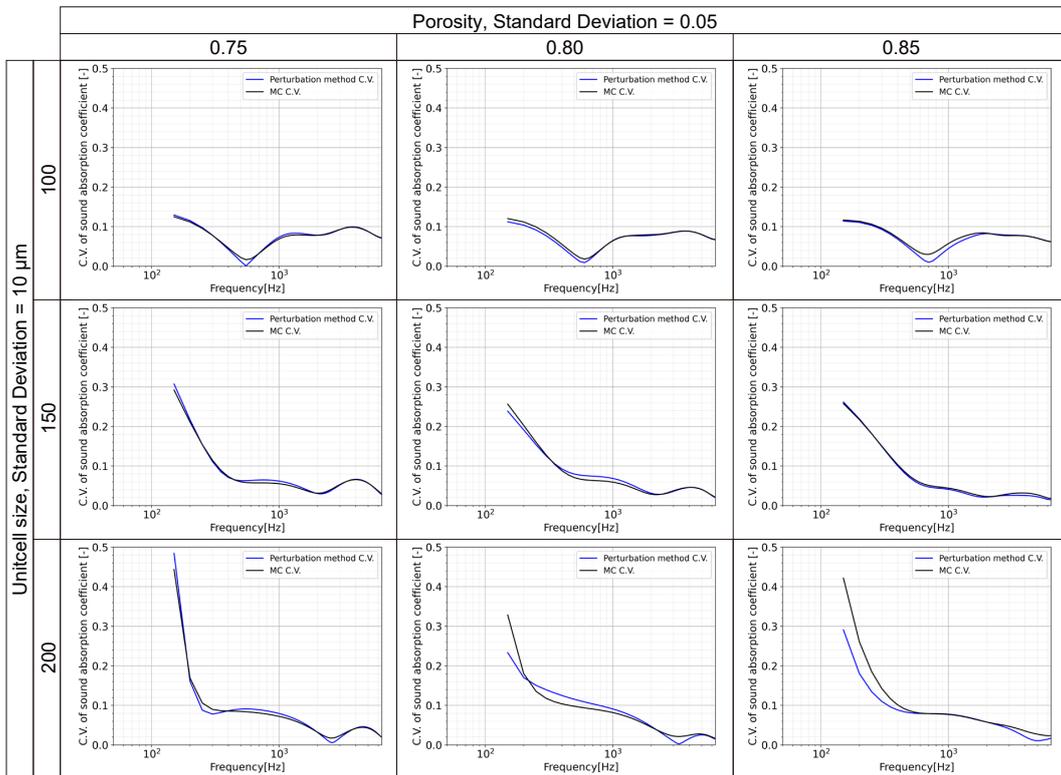


Fig. 5.8 C.V. values of sound absorption coefficient obtained by the perturbation method and the MC in the lattice shaped homogeneous body.

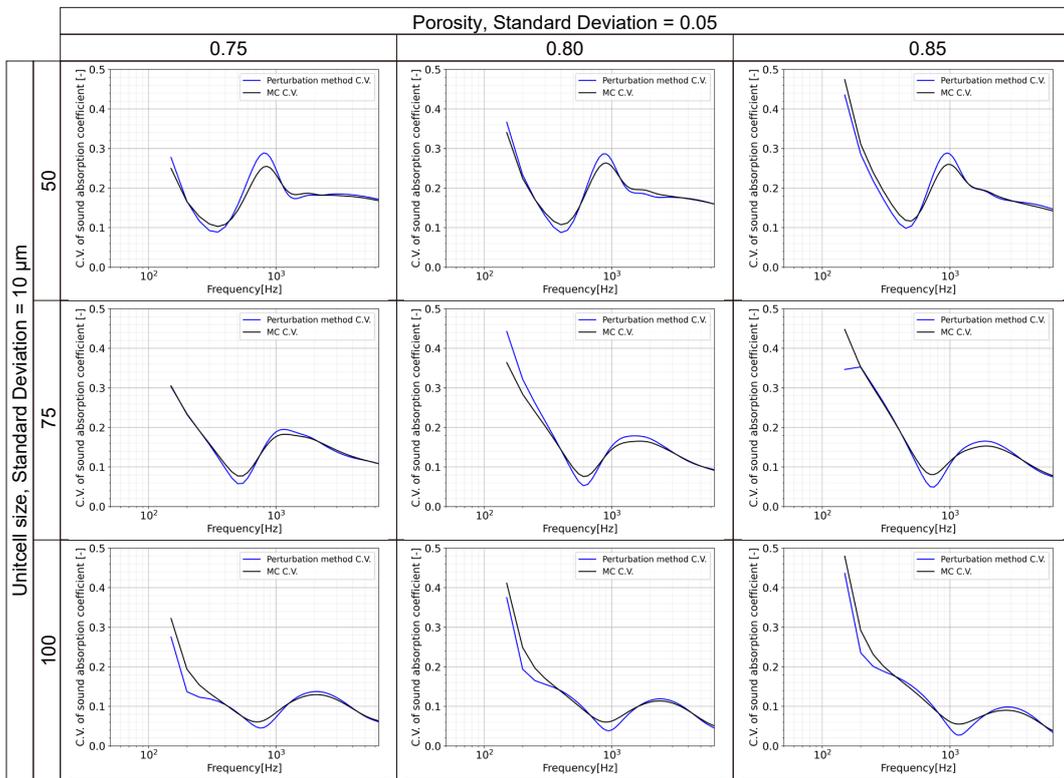


Fig. 5.9 C.V. values of sound absorption coefficient obtained by the perturbation method and the MC in the fiber porous homogeneous body.

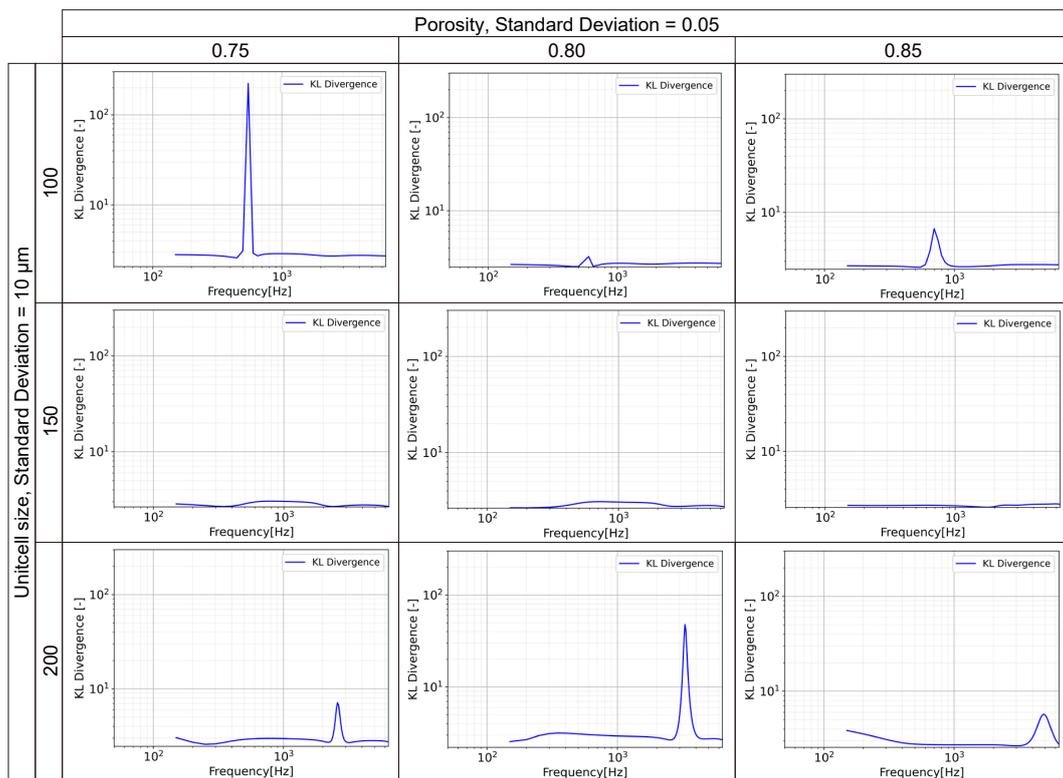


Fig. 5.10 Kullback-Leibler divergence of sound absorption coefficient obtained by perturbation method and Monte Carlo simulation in lattice-shaped homogeneous body.

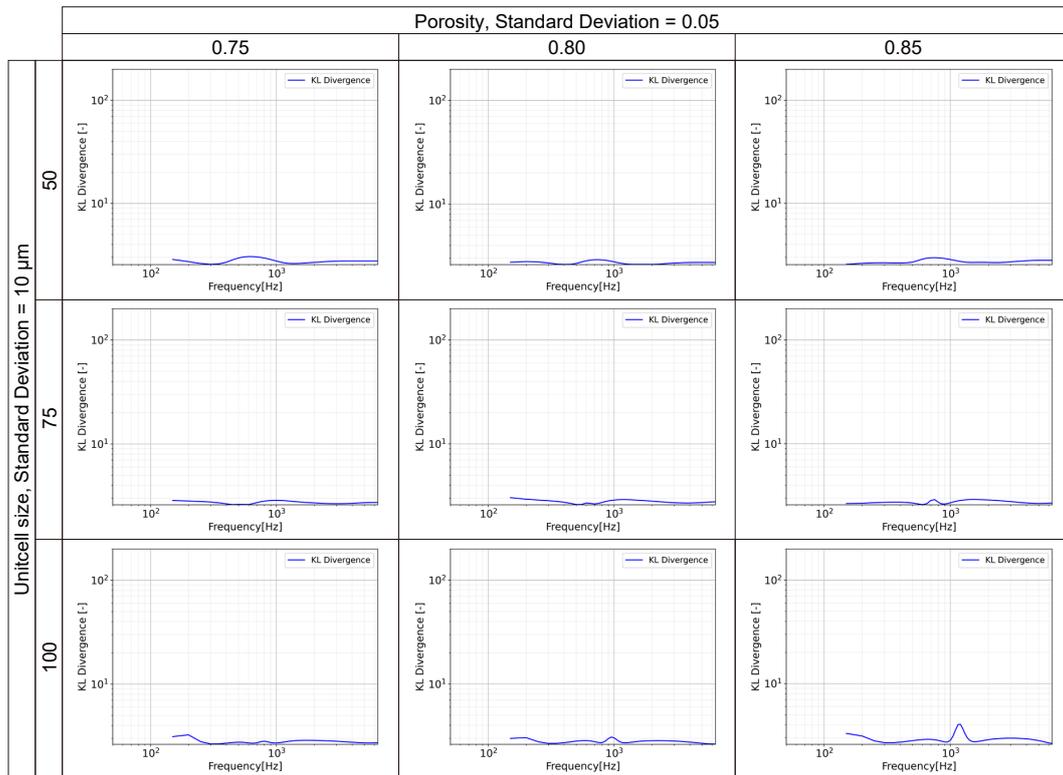


Fig. 5.11 Kullback-Leibler divergence of sound absorption coefficient obtained by perturbation method and Monte Carlo simulation in the fiber porous homogeneous body.

5.5 実験結果に基づく微視構造モデルの構築

5.4 では簡易的なユニットセルモデルで吸音率の確率分布を予測したが、本節では、第2章で実験的に求めた微視構造の統計量に基づいてユニットセルを構築する。

5.5.1 繊維系吸音材の解析モデル

図 2.13 で示した通り、繊維系吸音材の試験体は2種類の太さの繊維が混合されているため、均質化法の微視構造モデルとして図 5.12 に示すユニットセルを仮定した。ユニットセルは、太い繊維と細い繊維を模擬した固体相を有し、各固体相は互いに接触しておらず、固体相が直交して積み重なった基本構造を示している。第2章で示した繊維間距離は、図 5.12 に示すように同一層内での繊維同士の距離とし、層間距離は各層間の距離としてモデル化した。また、太い繊維と細い繊維の混合比は実験で取得した空孔率と一致するよう調整した。

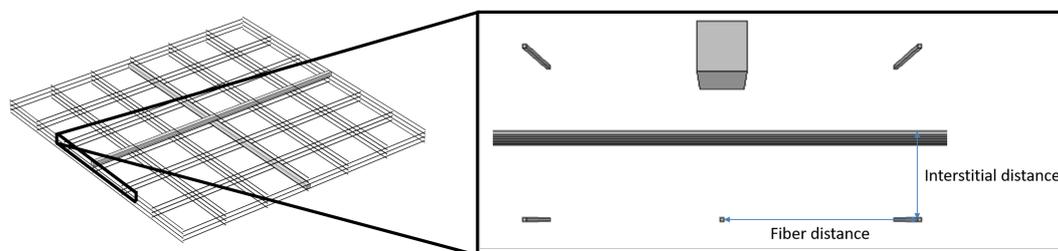


Fig. 5.12 The base model of the unit cell used in multiscale analysis and comparison with experimental results.

次に、微視構造パラメータの感度を分析した。微視構造のパラメータ数が増加するに伴い、吸音率のモーメントの近似には多くの計算資源が必要となるため、吸音率に対する感度の低い確率変数を同定し、それを定数として扱う。細い繊維の繊維径を実測値に基づいた確率分布で変動させ、摂動法により吸音率を求めた結果を図 5.13 に示す。図 5.13 より、細い繊維径が変動した場合の吸音率の変化は 1σ で 0.01 以下であり、繊維径の感度が極めて小さいことが明らかとなった。このような吸音率に対する感度が小さい確率変数を除くことで、効率的に吸音率の確率分布を推定することができる。本論文では、図 5.13 の結果より、細い繊維の繊維径は確率変数として扱わず、定数として扱う。

続いて、実験結果の平均挙動と一致する微視構造モデルを構築するため、微視構造パラメータを変動させた3種類のユニットセルを作成し、吸音率と流れ抵抗をマルチスケール解析で求め実測値と比較する。図 5.14 に検証に用いた3種類のユニットセルを示す。TYPE1 では、図 5.14(a) に示すように、繊維を模擬した固体相を x 方向に6本、 y 方向に6本配置し、互いが接触せず積み重なった構造をもつ。TYPE1 をベースモデルとして、微視構造パラメータを変化させた TYPE2, TYPE3 のユニットセルを作成した。TYPE2 は TYPE1 の x 方向の固体相を削減したモデルであり、図 5.14(b) に示す構造をもつ。TYPE3 は、図 5.14(c) に示すように、固体相を中央方向に近づけ、固体相を束ねたようなモデルを作成した。これは、SEM で観察された繊維の粗密の再現を狙ったものである。これらのモデルは、いずれも中央部に直交する太い繊維を含んでおり、繊維間距離は $300 \mu\text{m}$ で統一している。

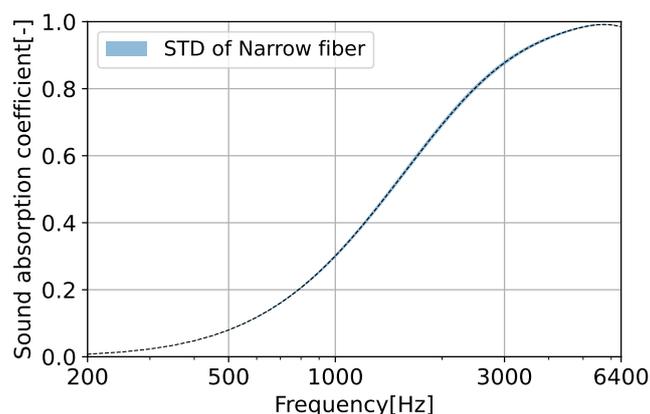


Fig. 5.13 The effect of fine fiber diameter on sound absorption coefficient.

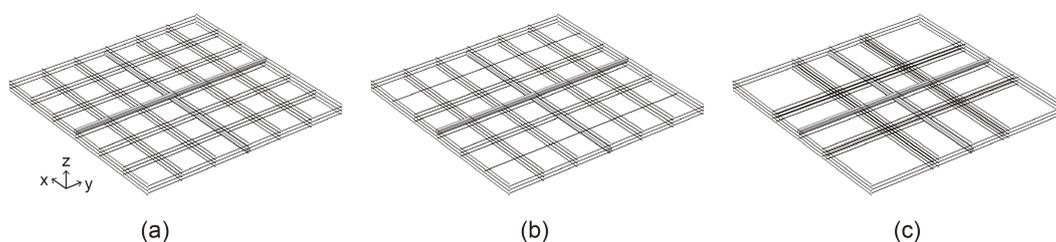


Fig. 5.14 The search for unit cells with values close to the experimental results. (a) shows TYPE1, (b) shows TYPE2, (c) shows TYPE3.

図 5.15 に流れ抵抗の実測値と解析結果の比較を示す。ここで、実測値のエラーバーは平均値 ± 標準偏差を表す。図 5.15 より、TYPE1 と 2 は流れ抵抗が実測値より高く、TYPE3 は実測値と同程度の値を示していることがわかる。図 5.15 に示された流れ抵抗の実測値と解析結果に有意な差があるか確かめるため、t 検定を実施した。t 検定では、母集団の平均値 μ が特定の値 μ_0 と等しいかどうかの帰無仮説を検定する際に用いられる。標準偏差を σ 、標本サイズを n として、次式で検定統計量 \bar{t} を計算する。

$$\bar{t} = \frac{\bar{x} - \mu_0}{\sigma/\sqrt{n}} \quad (5.13)$$

式 5.13 より、各ユニットセルの流れ抵抗の検定統計量を計算すると、それぞれ TYPE1 は 18.1, TYPE2 は 16.4, TYPE3 は 2.41 となった。有意水準を 0.05 とすると、自由度 29 の t 分布の有意域は ± 1.67 から ± 2.45 となる。したがって、TYPE1 と TYPE2 は実験値の流れ抵抗と有意に差があり、TYPE3 は有意な差がないことがわかる。

流れ抵抗の差が生じた理由を考察するため、図 5.16 に各ユニットセル内の流速分布を示す。図 5.16 より、TYPE1 と TYPE2 では繊維が均一な間隔で配置されているため、ユニットセル内部の流速の均一性が高いことが確認できる。一方、TYPE3 は中央部に固体相が集中しているため、流路面積が大きい領域で流速が大きくなり、微視構造モデル内で流速勾配が生じていることがわかる。このような固体相が疎な領域では流れ抵抗が低くなるため、TYPE1, TYPE2 と比較して低い流れ抵抗の値を示したと考えられる。実験の試験体においても、繊維が疎な領域と密な領域が存在していることから、TYPE3

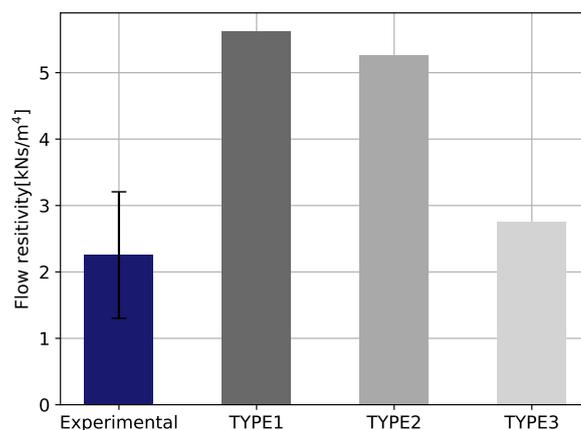


Fig. 5.15 The multiscale analysis result of flow resistivity using the unit cell shown in Fig. 5.14.

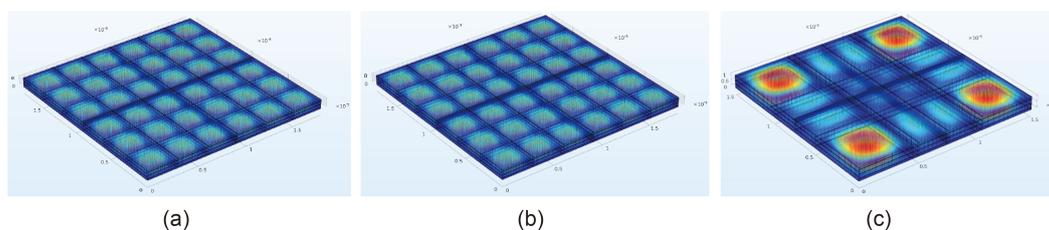


Fig. 5.16 Flow velocity contour plot of inside the unit cell of Fig. 5.14.

のユニットセル内の流速分布は実際の吸音材を流速分布を模擬できており、実験値と近い流れ抵抗を示したと考えられる。

続いて、図 5.17 に実測と解析で求めた吸音率の比較結果を示す。黒色の実線は 30 サンプルで実測した吸音率の平均値、灰色で塗りつぶした領域は実測値の平均値 ± 標準偏差の領域を示す。TYPE1 および TYPE2 は、吸音ピークが存在する 1500 Hz 以上の周波数域で、実測の平均値と類似した吸音特性を示している。一方、1500 Hz 以下の低い周波数域では実測値との乖離が確認された。流れ抵抗が実測値と類似していた TYPE3 では、1500 Hz 以下の低い周波数域で実測の平均値と近い吸音特性を示した。しかし、TYPE3 の 2000 Hz 近傍に存在する吸音ピークは、実測結果の平均値と比較すると低い値を示しており、乖離が確認された。

流れ抵抗が実測値と類似していた TYPE3 をベースモデルとして、繊維間距離を変動させた際の流れ抵抗と吸音率を求め、実測値の平均値と近い吸音率を示すユニットセルを構築する。ベースモデルの繊維間距離は 300 μm であり、これを TYPE3-1 と定義した。繊維間距離を変動させ、250 μm のモデルを TYPE3-2、200 μm のモデルを TYPE3-3 として、マルチスケール解析を実行した。マルチスケール解析で得られた流れ抵抗を比較した結果を図 5.18 に示す。図 5.18 より、TYPE3-2 および TYPE3-3 では繊維間距離がベースモデルより小さくなったため、それにもなう粘性抵抗の増加の影響で、流れ抵抗は高い値を示した。

図 5.19 にこれらのユニットセルの吸音率の計算結果を示す。図 5.19 より、繊維間距離が短くなる

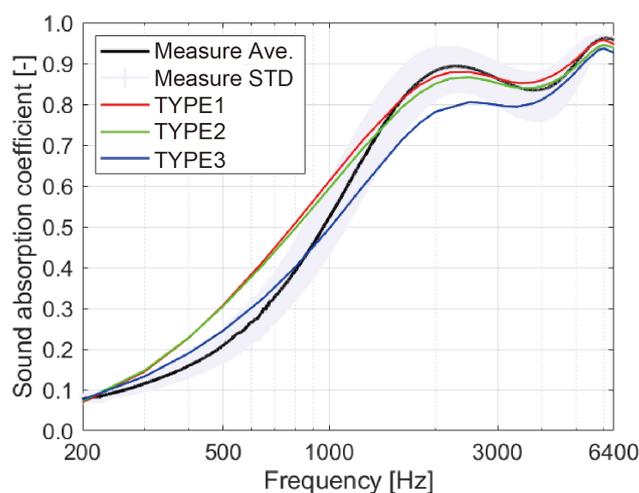


Fig. 5.17 Sound absorption coefficient calculated from the unit cell model based on actual measurements. (a) shows TYPE3-1, (b) shows TYPE3-2, (c) shows TYPE3-3.

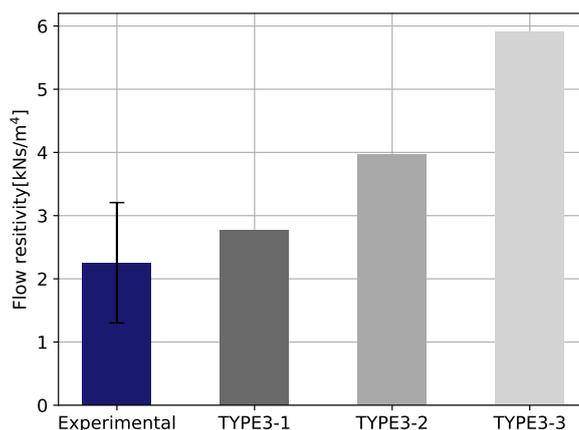


Fig. 5.18 The flow resistivity results obtained from the TYPE3 study.

ことによる流れ抵抗の上昇の影響で、全ての周波数域で吸音率が高い値を示すことが明らかとなった。TYPE3-2では、実測値の吸音率の平均値と比較して若干の差は存在するものの、すべての周波数域で実測値の吸音率の平均値 ± 標準偏差の範囲内の吸音率を示している。TYPE3-3は、TYPE3-2よりさらに高い吸音率を示しており、全ての周波数域で実測値の平均値より高い値を示した。以上の結果より、摂動法のベースモデルとして TYPE3-2 を採用した。

5.5.2 発泡ウレタン材の解析モデル

発泡ウレタン材のユニットセルモデルとして、Kelvin cell 構造を採用した。発泡によって形成される多くの構造は、Plateau の法則と呼ばれる法則に支配されており、与えられた体積に対しての最小の表

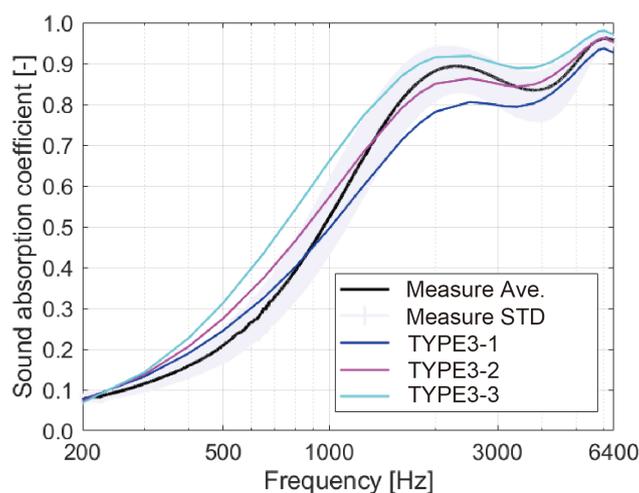


Fig. 5.19 Sound absorption coefficient results for TYPE3-1 to TYPE3-3 of the unit cell model. The solid black line indicates the expected value of the sound absorption coefficient obtained experimentally, and the area filled with light blue indicates the expected value \pm standard deviation obtained experimentally.

面積、界面の一定の平均曲率など、気泡や泡の一般的な構造を定義している。Plateauの法則を満たすものとして Kelvin cell 構造が知られており、発泡体の基本構造を表現するモデルとして用いられている。Kelvin cell 構造は、図 5.20 に示すように、8 個の六角形と 6 個の四角形からなる 14 面体で構成されており、体心立方格子のポロノイセルを基本にした多面体である。他にも、Weaire-Phelan 構造など Plateau の法則を満たす発泡体構造が知られているが、Kelvin cell 構造は一種のみで空間を充填することができるため、均質化法のユニットセルとして適している。そこで、本論文では、図 5.20 の右図に示すように、Kelvin cell モデルの骨格部分を固体相として、発泡ウレタン吸音材のユニットセルをモデル化した。なお、実際の発泡ウレタン吸音材では、固体振動の減衰の影響を向上させるため、Kelvin cell 構造同士の境界面に薄膜を形成させることがあるが、図 5.20 に示した通り、本論文の試験体として用いた発泡ウレタン材には薄膜が存在しないため、ユニットセルにおいても薄膜をモデル化していない。Kelvin cell の直径は実験で取得したセルサイズとし、セルサイズが平均値 $704.4 \mu\text{m}$ 、標準偏差 $68.91 \mu\text{m}$ の正規分布に従う確率変数とした。音響管を模擬した吸音率の計算では、吸音材の厚さは試験体と同一の 10 mm とした。

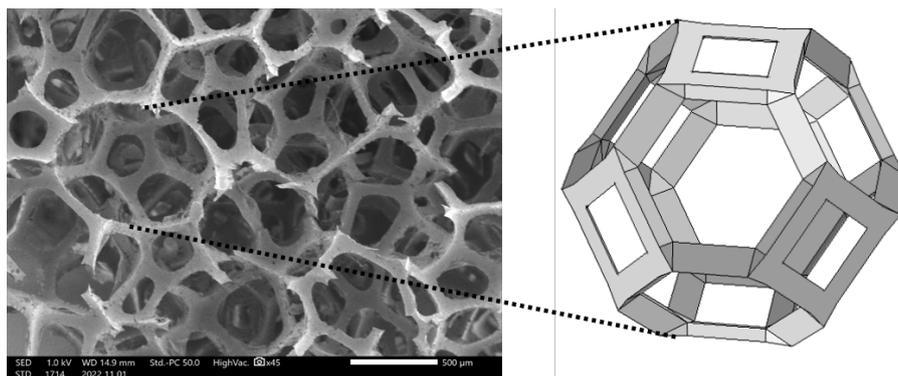


Fig. 5.20 Kelvin cell unit cell model for polyurethane foam microstructure.

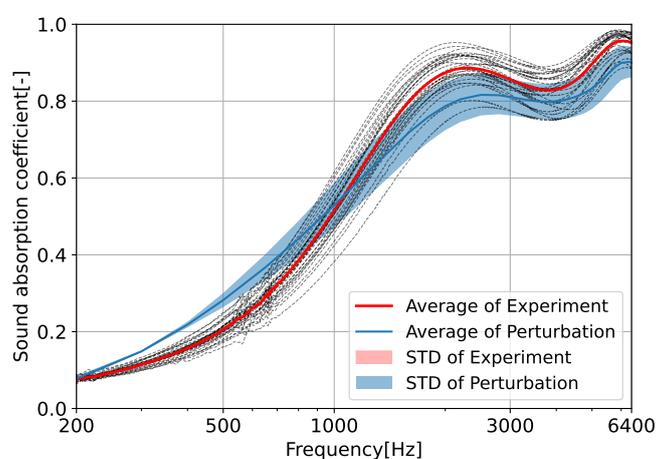


Fig. 5.21 Probability distribution of sound absorption coefficient obtained by perturbation method using TYPE3-3 Unit cell and comparison with experimental results.

5.6 実験結果と解析結果の比較

前節で構築した微視構造モデルを用いて、摂動法により吸音率のモーメントを求め、実験値と比較した結果を示す。

5.6.1 繊維系吸音材

繊維系吸音材において、摂動法と実験結果の吸音率の確率分布を比較した結果を図 5.21 に示す。図中の青色の点線は摂動法で求めた吸音率の期待値、青色で塗りつぶした領域は摂動法で求めた期待値 ± 標準偏差を表す。赤色の実線は実験値から計算した期待値を表し、赤色で塗りつぶした領域は期待値 ± 標準偏差を表す。図 5.21 より、微視構造モデルの影響により吸音率の期待値に最大 0.7 程度の差異が存在することが確認された。標準偏差を比較すると、実験値と摂動法で近い値を示していることがわかる。

実験値と摂動法で求めた標準偏差を比較した結果が図 5.22 である。赤色の実線は実験結果、青色の

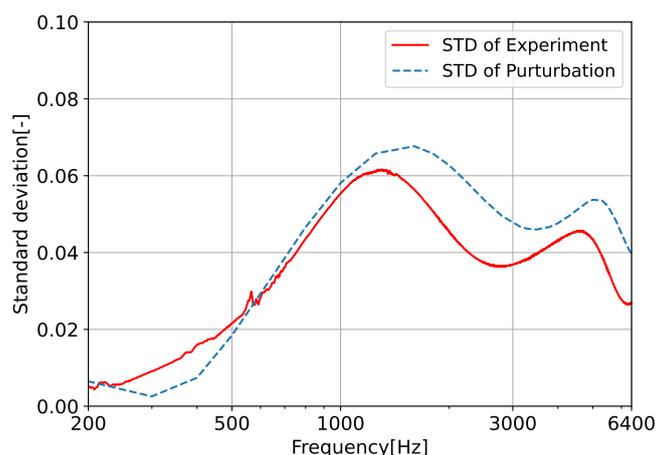


Fig. 5.22 Comparison of standard deviations obtained from experimental results and perturbation method.

点線は摂動法で求めた標準偏差の値を示す。図 5.22 より、200 Hz から 500 Hz の周波数域では摂動法の標準偏差が低く、1000 Hz 以上では標準偏差が大きく評価される傾向にあり、2500 Hz の周波数域で最大 0.015 程度の差が確認された。以上の結果より、実験結果と摂動法の標準偏差はわずかな差はあるものの、各周波数領域での傾向は類似しており、実際の材料で生じる吸音率のばらつきを摂動法で表現できていると考えられる。

実験と摂動法で求めた確率分布を比較するため、KL 情報量を計算し、その結果を図 5.23 に示す。図 5.23 に見られるように、KL 情報量は 300 Hz を中心とした 500 Hz 以下の周波数域で高い値を示し、1000 Hz 以降の周波数域では低い値を示している。これは、実験と摂動法で期待値に差異が存在するものの、標準偏差の差が小さいため、KL 情報量は小さな値を示したと解釈できる。なお、300 Hz で KL 情報量のピークが確認できるが、これは摂動法において標準偏差が小さく評価される周波数域であり、期待値も実測値と差が大きい周波数域であるため、KL 情報量は大きな値を示したと考えられる。このような低周波数域は吸音率が低く、変動が小さい傾向にあるため、数値計算と実測値での差が生じやすい周波数域と考えられる。

以上より、繊維系吸音材の吸音率のモーメントを摂動法で推定し、実験値と比較した結果、期待値では差異はあるものの類似の傾向を示し、標準偏差は近い結果を示すことが明らかとなった。期待値の差異は、ユニットセルが試験体の微視構造を十分に表現できていないためであると考えられ、ユニットセルのさらなる検討により、より実測値に近い結果が得られると期待される。標準偏差は実測値と解析値の間で近い値を示していることから、図 2.8 の実測値で確認される吸音率の不確かさは、摂動法で確率変数として定義している太い繊維の直径、繊維間距離、層間距離のばらつきによって説明できると考えられる。結論として、本論文で用いた繊維系吸音材と類似の吸音材においては、摂動法は吸音率の確率分布の予測に用いることができると結論づけられる。

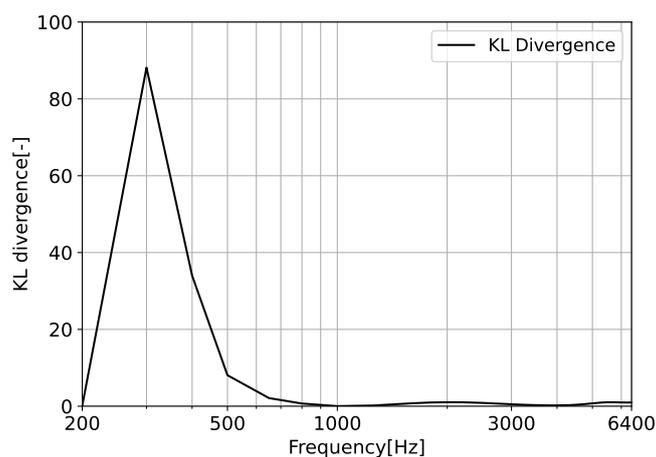


Fig. 5.23 KL divergence results obtained from the experimental results and perturbation method in the fiber-type porous material.

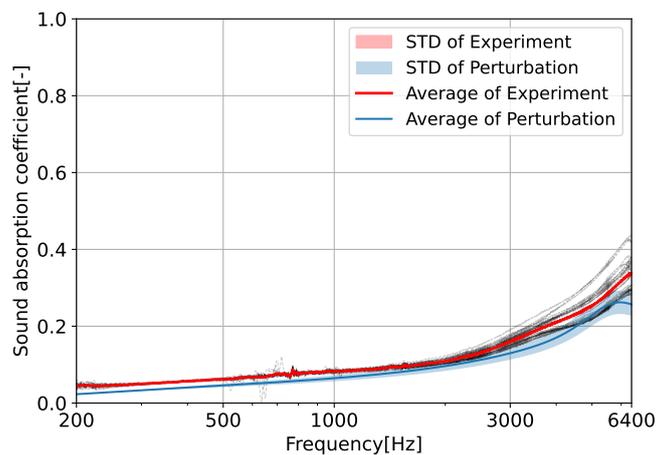


Fig. 5.24 Probability distribution of sound absorption coefficient obtained by perturbation method using Kelvin cell model and comparison with experimental results.

5.6.2 発泡ウレタン材

発泡ウレタン吸音材において、摂動法と実験結果の吸音率の確率分布を比較した結果を図 5.24 に示す。黒色の実線は摂動法で求めた吸音率の期待値、青色で塗りつぶした領域は期待値 \pm 標準偏差を表す。赤色の実線は実験結果の期待値、薄赤色は 30 サンプルの標準偏差を表す。図 5.24 より、実測結果、解析結果ともに、周波数が高くなるにつれて吸音率が高くなる傾向が確認された。また、摂動法の期待値は 6000 Hz 付近に吸音ピークを示したが、実測値では 6400 Hz までの周波数域で吸音ピークを示さなかった。さらに、すべての周波数域で摂動法の期待値は実測値より低く、6400 Hz で最大約 0.09 の差が確認された。このような差は、繊維系吸音材と同様に、ユニットセルが実際の材料を十分に表現できていないために生じたと考えられる。Kelvin cell により発泡構造の骨格を正しくモデル化できている

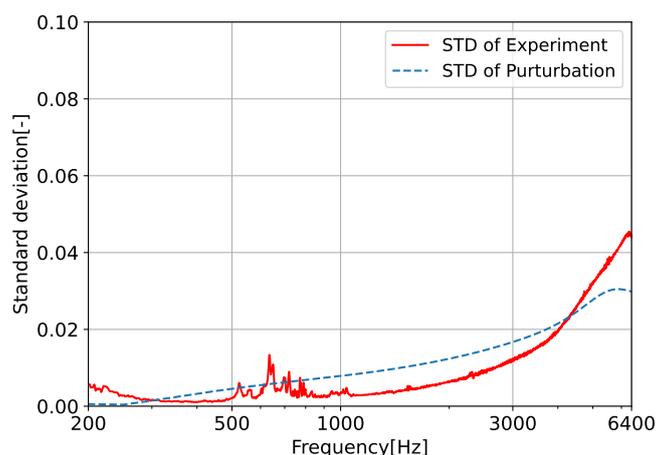


Fig. 5.25 Comparison of standard deviations obtained from experimental results and perturbation method in the polyurethane foam.

と仮定すると、試験体を任意の位置で切断した断面画像をもとに SEM で撮像し、画像解析で取得したセルサイズから誤差が生じたものと考えられる。SEM 画像では切断面が単位セルの中心でない場合があり、正確なセルサイズを求めることが困難であった。このような測定誤差の結果、実際の発泡ウレタン材と構築したユニットセルの間に差が生じたと考えられる。これらの問題を解決するためには、3次元マイクロコンピュータ断層撮影などを用いて、3次元の微細構造情報を得ることが望ましいと考えられる。

続いて、実験値と摂動法で求めた標準偏差を比較した結果を図 5.25 に示す。赤色の実線は実験結果、青色の点線は摂動法で求めた標準偏差の値を表す。図 5.25 より、2500Hz 以下の周波数領域では実験結果のばらつきが小さく、2500Hz 以上の周波数領域では標準偏差が大きくなっていることがわかる。一方、摂動法では、周波数が高くなるに従い、標準偏差が線形的に大きくなっていることが確認された。したがって、周波数が高くなるにつれて標準偏差が大きくなる傾向は実験結果と解析結果の間で一致しているが、その変化の仕方に若干の違いがある。なお、実験結果において、500 Hz から 800 Hz までの周波数域で標準偏差が変動しているのは、試験体の縦振動の影響と考えられる。

最後に、KL 情報量の計算結果を図 5.26 に示す。図 5.26 より、KL 情報量は 500 Hz 以下の周波数域で大きな値を示し、それ以上の周波数域では低い値を示していることが確認された。これは、吸音率が低い値を示している領域では KL 情報量の感度が高く、実験値と解析値の低周波数域での期待値と標準偏差の差が明確に表れているためと考えられる。一方、500 Hz 以上の周波数域では、KL 情報量の値が低く、摂動法で得られた確率分布が実験結果と類似していると考えられる。

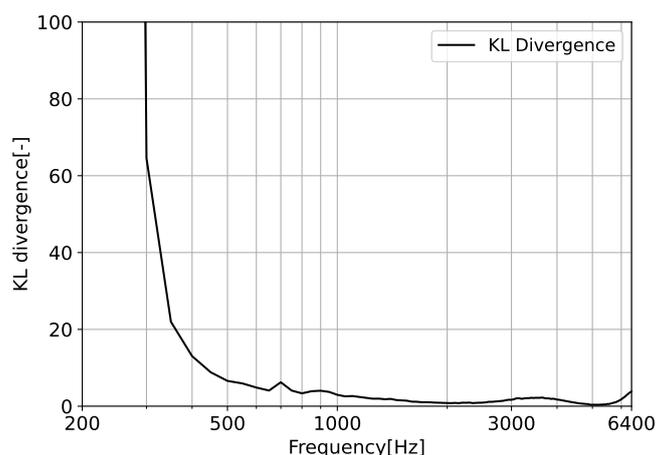


Fig. 5.26 KL divergence results obtained from the experimental results and perturbation method in the polyurethane foam.

5.7 まとめ

本章では、摂動法により吸音率のモーメントを近似する方法を示し、摂動法で得られた結果をMCの結果と比較した。摂動法は局所微分に基づいて吸音率のモーメントを効率的に近似し、MCでは少なくとも300回程度のマルチスケール解析を必要とするのに対し、摂動法では N 個の確率変数に対して $2N + 1$ 回で吸音率のモーメントを決定できることを示した。これにより、摂動法はMCの1/100程度の計算量で多孔質吸音材の不確実性を高速に評価できる手法であることが示された。また、摂動法とMCで得られたモーメントを比較する事により、確率変数の分散が小さい場合は、MCと同等の結果が得られることを明らかにし、効率的な摂動法の優位性を示した。一方、非線形性が強い問題や、差分法では局所微分が正確に計算できない場合、摂動法とMCの結果と差が生じる可能性があることを明らかにした。

また、第3章で示した実験結果と摂動法で得られた吸音率の確率分布を比較をし、摂動法を用いることで実際の材料で生じている吸音率の不確かさを予測できることを示した。繊維系の吸音材では、摂動法で得られた期待値が実験値と差異を示したが、吸音特性の傾向は同一である。また、標準偏差は実測値と解析値でよく一致しており、実際の材料の吸音率の不確かさは、本論文で仮定した確率変数で予測できることが示された。さらに、発泡ウレタン材では、吸音率の期待値および標準偏差のどちらも実測値との間に差が見られたが、その傾向は一致していた。吸音率が高くなる高周波数域では、KL情報量は低い値を示し、発泡ウレタン材の吸音率の確率分布を近似できることが示された。一方、吸収材料によらず、吸収率の不確かさをより高精度に予測するためには、実際の材料を正確に表現する微細構造モデルの構築が必要であると考えられる。

結論として、本章で提案した摂動法による吸収率の不確実性の定量化手法は、扱う問題の非線形性や確率変数の独立性などの制限はあるものの、効率的に吸音率の確率分布を推定できる。

第6章

ベイズ的機械学習による吸音率の確率分布の評価

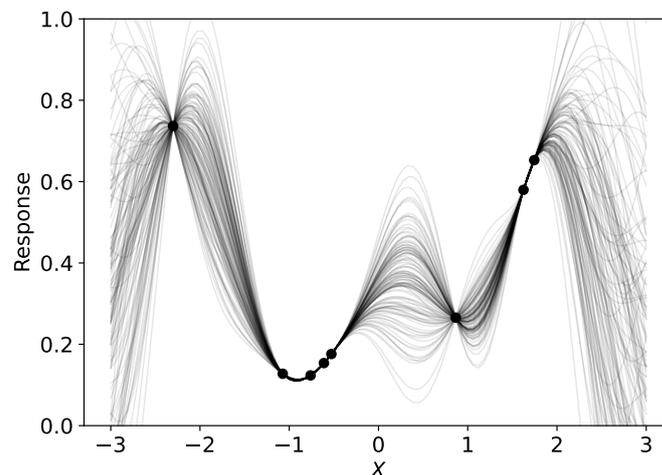


Fig. 6.1 Sampling result of the posterior distribution by Gaussian process regression.

前章までに、MC、サロゲートモデルおよび摂動法に基づく吸音率の確率分布の近似手法を定式化し、それぞれの特徴と適用例を示した。これらの手法の特徴として、MCは頑健な計算手法であるが、高い精度で確率分布を推定するには多くの計算資源が必要となる。LHSとk-NNでサロゲートモデルを構築することで、MCより効率的に吸音率の確率分布を求めたが、モデルやサンプル数の選択方法、および近似精度に課題が残ることを示した。また、摂動法は迅速に吸音率の確率分布が得られるが、適用できる問題に制限があることを示した。

本章では、機械学習モデルとベイズの定理に基づく適応的サンプリング手法により、効率的かつ高精度に吸音率の確率分布を予測する。

6.1 機械学習とベイズ推論

近年の計算機の発展や利用できるデータ数の増加にともない、工学、医療、心理学、言語学、金融、生命情報学など多くの分野で機械学習の基礎研究や応用研究が急速に進められている。機械学習の定義は研究分野や研究者の間で一貫していないが、本論文では工学やデータサイエンスの分野で一般的に用いられる定義として、与えられたデータの構造や規則を抽出し、それに基づき未知の現象を予測したり、適切な判断を行うための計算技術の総称、を採用する。与えられたデータからその構造や規則を抽出する過程は学習と呼ばれ、従来の統計モデルや物理モデルでは扱うことが困難な多次元、多量のデータで表される現象を扱うことができる。

機械学習で扱う問題は主に回帰と分類に大別される。回帰は与えられたデータに基づき関数を構築し、未知の入力が与えられた際の応答を予測する問題である。すなわち、 N 次元の入力 $x \in \mathbb{R}^N$ が与えられたとき、その連続的な出力 $y \in \mathbb{R}$ を予測する関数 $y = f(x)$ を求める問題が回帰問題である。図6.1に示したガウス過程回帰 (GPR) やニューラルネットワークは $y = f(x)$ をデータから自動的に推定することができるため、このような問題に広く用いられている。分類は画像認識などに代表される問題であり、 x が与えられた際に離散的な出力 y をとる確率を計算する。分類問題ではクラスタリングや次元削減などの手法が広く用いられている。本論文では確率変数に対する吸音率を機械学習により回帰モデルを構築し、吸音率の不確実性をモデル化する。

適応的サンプリング手法では、試行に必要な変数の組み合わせが得られない一方、過去の評価結果から得られた情報に基づいてサンプリングパターンを繰り返し改良し、効率的かつ効果的にパラメータ空間をサンプリングすることができる。このように、得られたデータに基づいて仮説の確率を更新する方法としてベイズ理論が知られている。

あるデータを取得した時に、そのデータを統計的に記述するには、データの不確実性を確率で表現する頻度論に基づく考え方と、パラメータや仮説の不確実性を確率で表現するベイズ論に基づく考え方がある [53]。頻度論では、取得したデータが母集団から発生する確率を議論する。すなわち、母集団とそのパラメータに関する帰無仮説を立て、取得したデータが偶然発生したのか否かを判断することで、データの統計的性質を表現している。これは、多数の試行における事象の長期的な頻度としての確率の考え方である。このとき、データが変数として扱われ、パラメータは仮定のもとで一定値を示すと考え、観測されたデータに基づいて、これらの未知の確率を推定する。一方、ベイズ理論では、確率を各々の仮説に対する信頼度合いを表す尺度としてとらえる。この考え方では、確率は主観的なものとして扱われ、新しいデータに照らし合わせて確率を更新することができる。したがって、観測されたデータに基づいて仮説の確率を更新し、各々の仮説に対する信念の度合いをより正確に表現することが目的となる。すなわち、ある事象のパラメータについての事前の知識に基づいて、その事象の確率を表す考え方である。頻度論とベイズ理論の重要な違いは、ベイズ理論では事前情報を考慮することが可能である。つまり、ベイズ分析では仮説の事前確率はデータを観測する前の仮説に対する信頼性を表しており、新しいデータが利用可能になると更新される。そのため、ベイズ理論では不確実性をモデル化するための自然な方法であると考えられる。ベイズ理論では、事後分布は観測されたデータが与えられたときのパラメータの不確実性を表し、システムの挙動について確率的な予測をすることができる。以上より、頻

度論はデータに基づいて未知の確率を推定する方法である一方、ベイズ論は事前情報に基づき、不確実性をモデル化するより柔軟な手法であると。

ベイズ理論は新しいデータに基づいて仮説の確率を更新するが、これは条件付き確率として表される。これは、ベイズの定理として知られている。パラメータ \mathbf{w} を考えたとき、 \mathbf{w} の確率分布を推定する問題を考える。 \mathbf{w} に対してあらかじめもっている仮説を事前確率 $p(\mathbf{w})$ とすると、データ $\mathcal{D} = \{y_1, \dots, y_n\}$ の影響は条件付き確率 $p(\mathcal{D}|\mathbf{w})$ として表すことができる。このとき、 $p(\mathbf{w} | \mathcal{D})$ はベイズの定理として知られる式 6.1 で表される [42][43]。

$$p(\mathbf{w} | \mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D} | \mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(\mathcal{D})} \quad (6.1)$$

式 6.1 は、 \mathcal{D} を観測した後の不確実性を条件付き確率として $f(\mathbf{w} | \mathcal{D})$ で評価できることを表している。ここで、 $f(\mathbf{w} | \mathcal{D})$ は事後確率と呼ばれる。 $p(\mathcal{D} | \mathbf{w})$ は尤度関数と呼ばれ、 \mathbf{w} を定数にした場合に \mathcal{D} がどの程度発生するかを表している。つまり、ベイズの定理は新しいデータ \mathcal{D} に基づいて仮説 \mathbf{w} の確率を更新する。事前確率はデータを観測する前の仮説に対する信頼度を表し、尤度は観測したデータと仮説の適合性を表している。また、事後確率は観測されたデータが与えられたときの仮説の確率の更新された推定値を表しており、観測されたデータからパラメータの不確実性を測定する指標となる。なお、式 6.1 の $p(\mathcal{D})$ は規格化項であり、式 6.1 の両辺を \mathbf{w} で積分すると事前分布と $p(\mathcal{D} | \mathbf{w})$ で表すことができる。

$$p(\mathcal{D}) = \int p(\mathcal{D} | \mathbf{w})p(\mathbf{w})d\mathbf{w} \quad (6.2)$$

\mathcal{D} が同一の正規分布 $P(\mathbf{X})$ に従う場合、 \mathbf{X} が同時に観測する確率が尤度関数であり、次式で表される。

$$p(\mathcal{D} | \mathbf{w}) = \prod_{i=1}^n P(\mathbf{X}) \quad (6.3)$$

ここで、尤度関数は数値計算の安定性の理由から、対数尤度関数が良く用いられる。これは、多くのパラメータを持つ複雑なモデルでは、尤度関数のが非常に小さくなる可能性があるためであり、このような場合、コンピュータでの計算で数値が不安定となりうる可能性がある。そのため、尤度の対数をとることで尤度関数をより数値的に安定させている。対数をとった対数尤度は次式で表される。

$$\ln p(\mathcal{D} | \mathbf{w}) = \sum \ln P(\mathbf{X}) \quad (6.4)$$

以上より、ベイズ理論では事前確率に基づき不確実性をモデル化することができる。ベイズの定理により、観測されたデータに基づいて仮説に対する信頼性を更新することができるため、吸音率の不確実性の定量化に応用することができる。

6.2 ガウス過程回帰

GPR は、複雑なシステムのモデリングと予測するために、時系列予測、関数近似、空間補間など幅広い分野で広く用いられている回帰手法であり、本論文では確率変数と吸音率をモデル化するために使用する。GPR は非線形性の強い問題に対しても適用することができる柔軟な機械学習手法の一つであ

り、入力と出力の関係を関数上の分布である GPR としてモデル化する。少数の観測データ点に基づいて予測を行うことができるため、利用可能なデータ数が限られている状況で有用である。

本節では、最初に基礎的な線形回帰モデルを導出し、その応用として GPR について説明する。線形回帰モデルは、従属変数と独立変数との関係をモデル化するため広く用いられており、変数間の関係がパラメータの線形結合として表現できると仮定している。重み \mathbf{w} と基底関数 $\phi(\mathbf{X})$ とすると、線形回帰モデルは次のように表される。

$$y = \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{X}) \quad (6.5)$$

式 6.5 より、線形回帰モデルは基底関数の線形結合として表されている。基底関数の選択では、モデルの複雑さとデータへの適合性のバランスをとることが重要である。単純な基底関数を選択すると適合度の低いモデルになり、複雑な基底関数では過剰適合する可能性があり、モデルの汎化性能が低下する可能性がある。ここでは、基底関数として正規分布のカーネルである式 6.6 を考える。

$$\phi(\mathbf{X}) = \exp\left(-\frac{(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})^2}{\sigma^2}\right) \quad (6.6)$$

ここで、 $\boldsymbol{\mu}$ は正規分布の中心位置であり、式 6.6 は動径基底関数と呼ばれる。動径基底関数では中心からの距離が大きくなるに従い関数の値が小さくなり、異なる位置を中心とした動径基底関数の集合を用いることで非線形関数を近似することができる。基底関数として他にも様々な関数が考えられるが、動径基底関数は関数微分の滑らかさなどの好ましい性質をもつため、広く用いられている。式 6.6 を用いると、式 6.5 は式 6.7 となる。

$$y = \mathbf{w}^T \exp\left(-\frac{(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})^2}{\sigma^2}\right) \quad (6.7)$$

式 6.7 は \mathbf{w} を決定することで正規分布の重ね合わせにより任意の関数形を表現できる。したがって、非線形性を示す関数に対しても、このような基底関数の線形結合により回帰モデルを構築することができる。

しかし、式 6.7 では変数 \mathbf{X} の次元が増大すると、求める \mathbf{w} は指数関数的に増大する。GPR ではこれを解決するため、 \mathbf{w} についての期待値をとり積分消去することで周辺化する。式 6.5 は計画行列 Φ を用いると、次式で表される。

$$\mathbf{y} = \Phi \mathbf{w} \quad (6.8)$$

なお、 Φ は式 6.9 で表される。

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_0(\mathbf{x}_1) & \phi_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_H(\mathbf{x}_1) \\ \phi_0(\mathbf{x}_2) & \phi_1(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi_H(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & & & \vdots \\ \phi_0(\mathbf{x}_N) & \phi_1(\mathbf{x}_N) & \cdots & \phi_H(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

ここで、 \mathbf{w} が正規分布 $\mathcal{N}(0, \lambda^2 \mathbf{I})$ から生成されると仮定すると、 \mathbf{y} も正規分布に従う。このときの \mathbf{y} の期待値は $\mathbb{E}[y] = \Phi \mathbb{E}[\mathbf{w}]$ であるため 0 である。また、共分散行列 \mathbf{K} は式 6.10 であらわされる。

$$\mathbf{K} = \lambda^2 \Phi \Phi^T \quad (6.10)$$

ここで、 λ は分散である。以上より、 \mathbf{y} は多変量正規分布 $\mathcal{N}(0, \lambda^2 \Phi \Phi^T)$ に従う。このとき、周辺化により \mathbf{w} が消去されているため、サンプル数 N のみに依存する \mathbf{K} で \mathbf{y} を計算することができる。

共分散行列を $K_{nn'} = \lambda^2 \phi(\mathbf{x}_n)^T \phi(\mathbf{x}_{n'})$ と表記すると、 λ は定数であるため $\phi(\mathbf{x}_n)^T \phi(\mathbf{x}_{n'})$ を求めればよい。ここで、 $\phi(\mathbf{x}_n)^T \phi(\mathbf{x}_{n'})$ を与えるカーネル関数 $k(\mathbf{X}_n, \mathbf{X}_{n'})$ を考える。

$$k(\mathbf{X}_n, \mathbf{X}_{n'}) = \phi(\mathbf{X}_n)^T \phi(\mathbf{X}_{n'}) \quad (6.11)$$

式 6.11 を求めることで、計画行列を直接的に計算することなく \mathbf{K} を計算することができる [53][54][55]。式 6.12 にガウスカーネルを示す [54]。

$$k(\mathbf{X}^{(m)}, \mathbf{X}^{(m')}) = \theta_0 \exp\left(-\theta_1 \|\mathbf{X}^{(m)} - \mathbf{X}^{(m')}\|^2\right) \quad (6.12)$$

このとき、 $\|\cdot\|^2$ はベクトルのノルムである。また、 $\Theta = [\theta_0, \theta_1]^T$ は式 6.12 のハイパーパラメータである。式 6.13 に指数カーネルを示す。

$$k(\mathbf{X}^{(m)}, \mathbf{X}^{(m')}) = \theta_0^2 \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{X}^{(m)} - \mathbf{X}^{(m')})^T \Lambda (\mathbf{X}^{(m)} - \mathbf{X}^{(m')})\right) \quad (6.13)$$

ここで、対角行列を $\text{diag}()$ として、 $\Lambda = \text{diag}([\theta_1^2, \dots, \theta_n^2])$ である。 θ_0 および $\{\theta_k\}_{k=1}^n$ より、式 6.13 のハイパーパラメータとして $\Theta = [\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_d]^T$ を定義する。

式 6.12 および式 6.13 のカーネル関数を使用して、一次元の GPR からサンプリングした例を図 6.2 に示す。図 6.2 の (a) は式 6.12 のガウスカーネル、(b) は式 6.13 の指数カーネルを用いてサンプリングした結果である。GPR の事後期待値はカーネル関数の重み付き和となるため、GPR より得られる事後分布も異なる。(a) のガウスカーネルは (b) の指数カーネルと比較するとなめらかな関数がサンプリングされていることがわかる。カーネルは対象とする問題に応じて選択するが、本論文では式 6.13 を採用した。

続いて、カーネル関数の適切なハイパーパラメータを決定する方法を説明する。GPR において、ハイパーパラメータは与えられたデータセットから学習される。本論文では適切なハイパーパラメータを得るため、対数尤度関数を最大化する Θ を求めた。対数尤度関数は式 6.14 で表される。

$$\log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \Theta) \propto -\log |\mathbf{K}_\Theta| - \mathbf{y}^T \mathbf{K}_\Theta^{-1} \mathbf{y} + \text{Const.} \quad (6.14)$$

ここで、 $L = \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \Theta)$ として、 θ に対する微分は式 6.15 となる。

$$\frac{\partial L}{\partial \Theta} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{K}_\Theta} \frac{\partial \mathbf{K}_\Theta}{\partial \Theta} = -\text{tr}(\mathbf{K}_\Theta^{-1} \frac{\partial \mathbf{K}_\Theta}{\partial \Theta}) + (\mathbf{K}_\Theta^{-1} \mathbf{y})^T \frac{\partial \mathbf{K}_\Theta}{\partial \Theta} (\mathbf{K}_\Theta^{-1} \mathbf{y}) \quad (6.15)$$

式 6.15 より、対数尤度の勾配を求めることができるため、 L を最大化する Θ を勾配法で求めることにより最適なハイパーパラメータを得ることができる。

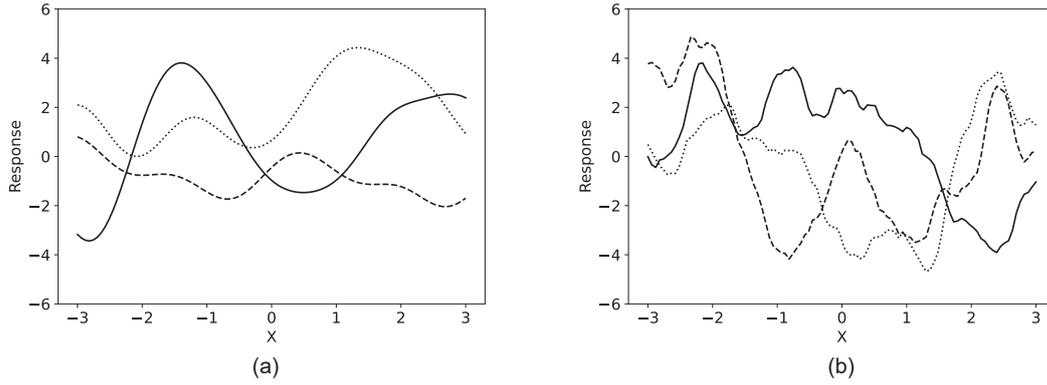


Fig. 6.2 Comparison of Kernel functions. (a) Gaussian kernel, (b) exponential kernel.

本論文ではハイパーパラメータの最適化方法として、準ニュートン法の解法の一つである記憶制限 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno 法 (L-BFGS 法) を用いた [57]. 目的関数を $-L$ として、この目的関数の最小化問題を考える. ニュートン法では Θ_k におけるヘッセ行列 $\mathbf{H}_k = \nabla^2 L(\Theta_k)$ を正定値行列と仮定すると、 L のテイラー展開の二次項までを最小化する δ は次式で与えられる [57].

$$\delta = -\mathbf{H}_k^{-1} \nabla L(\Theta_k) \quad (6.16)$$

したがって、 θ_k を次式のように更新することで、対数尤度を増加させることができる.

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \mathbf{H}_k^{-1} \nabla L(\Theta_k) \quad (6.17)$$

すなわち、 θ_k における探索方向を式 6.16 とすることで、 L を最大化する Θ を求めることができる. このとき、ニュートン法では \mathbf{H}_k^{-1} を計算するため $k \times k$ 行列を保持し、行列を更新するため $O(n^2)$ の計算量が必要となる.

これを解決する効率的なアルゴリズムとして L-BFGS 法が提案されている [46]. L-BFGS 法では \mathbf{H}_k^{-1} を近似する正定値行列 \mathbf{B}_k 、および勾配 $\mathbf{g}_k = \nabla L(\Theta_k)$ を考える. ここで、 L のテイラー展開の 1 次項において、ヘッセ行列は次式で表される.

$$\mathbf{H}_k = \frac{\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k}{\Theta_n - \Theta_{n-1}} \quad (6.18)$$

この関係が \mathbf{B}_k でも成り立つとすると、 $\mathbf{s}_k = \Theta_n - \Theta_{n-1}$ および $\mathbf{y}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k$ として、 \mathbf{B}_k を次式で更新する.

$$\mathbf{B}_{k+1} = \left[\mathbf{I} - \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^T}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k} \right] \mathbf{H}_k \left[\mathbf{I} - \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k} \right] + \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k} \quad (6.19)$$

このとき、 $\mathbf{V}_k = \mathbf{I} - \rho_k \mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^T$ および $\xi_k = 1/\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k$ とおくと、式 6.19 は次式のように展開される.

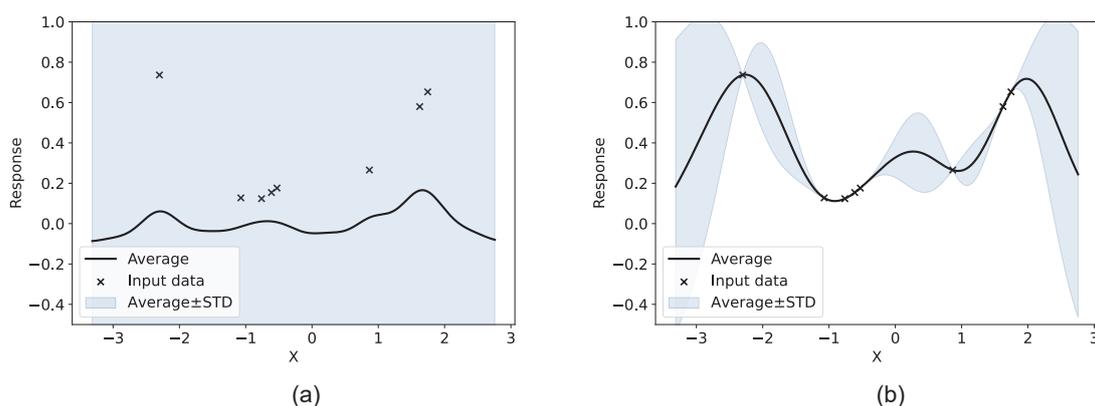


Fig. 6.3 Optimization results for the hyperparameters of the kernel functions in Gaussian process regression. (a) Before parameter optimization, (b) after optimization by L-BFGS method.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{B}_{k+1} &= (\mathbf{V}_k^T \cdots \mathbf{V}_0^T) \mathbf{H}_0 (\mathbf{V}_0 \cdots \mathbf{V}_k) \\
 &\quad + \xi_0 (\mathbf{V}_k^T \cdots \mathbf{V}_1^T) \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_0^T (\mathbf{V}_1 \cdots \mathbf{V}_k) \\
 &\quad + \xi_1 (\mathbf{V}_k^T \cdots \mathbf{V}_2^T) \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_1^T (\mathbf{V}_2 \cdots \mathbf{V}_k) \\
 &\quad \vdots \\
 &\quad + \xi_k \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T
 \end{aligned} \tag{6.20}$$

式 6.20 の更新式を用いるニュートン法は BFGS 法と呼ばれる。このとき、過去数ステップ分の Θ と \mathbf{g} のみを保持した式 6.20 の更新式を用いて、必要なメモリ領域を削減した方法は L-BFGS 法と呼ばれる [57].

$$\begin{aligned}
 \mathbf{B}_{k+1} &= (\mathbf{V}_k^T \cdots \mathbf{V}_{k-m}^T) \mathbf{H}_0 (\mathbf{V}_{k-m} \cdots \mathbf{V}_k) \\
 &\quad + \xi_0 (\mathbf{V}_k^T \cdots \mathbf{V}_{k-m+1}^T) \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_0^T (\mathbf{V}_{k-m+1} \cdots \mathbf{V}_k) \\
 &\quad + \xi_1 (\mathbf{V}_k^T \cdots \mathbf{V}_{k-m+2}^T) \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_1^T (\mathbf{V}_{k-m+2} \cdots \mathbf{V}_k) \\
 &\quad \vdots \\
 &\quad + \xi_k \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T
 \end{aligned} \tag{6.21}$$

図 6.3 に GPR の Θ を最適化した例を示す。図 6.3 (a) は最適化前の Θ を用いた GPR, (b) は L-BFGS 法で Θ を最適化した GPR を表す。(a) では回帰モデルの平均値が入力データと大きく乖離しており、また標準偏差の値も非常に大きくデータを十分に回帰できていないことが確認できる。一方、(b) では平均値は入力データをよく捉えており、データが存在する領域では標準偏差が小さな値を取り、データが疎な領域では標準偏差が大きな値を示すことが確認できる。

最後に、機械学習モデルとしての GPR の特長を以下にまとめる。一つ目の特徴として、前述した最適化手法を用いることで、GPR モデルのパラメータをデータから自動的に推定できる点が挙げられる。これにより、カーネル関数を選択するだけでモデルのパラメータを手動で計算する必要がなく、入力と

出力の間の基本的な関係が自動的に学習される。二つ目の特徴として、汎化性がある。汎化性は未知の入力に対して正確な予測を行うモデルの能力を表しており、GPRでは基礎的な関数をガウス過程によってモデル化することで汎化性を達成している。これは前述した通り、GPRは関数上の確率分布であり、平均関数と共分散関数によって特徴付けられる点に基づいている。平均関数はデータの全体的な傾向を捉えるために使用され、共分散関数は入力と出力の間の関係をモデル化するために使用されており、これらを用いることで未知データの予測値の不確実性を定量化することができる。未知データに対しても確からしい予測が可能となる。三つ目の特徴として、非線形のモデリングが挙げられる。機械学習の共通の問題として、非線形性のあるモデルへの対応が重要となる。GPRはカーネル関数に基づいて複雑な非線形関係を表現できる。

6.3 ベイズ的機械学習による吸音率の確率分布の近似

本節では、適応的サンプリング手法によりGPRを効率的に更新し、吸音率の期待値を精度よく予測する獲得関数を新たに定義し、その計算方法を示す。GPRは入力と出力を対応付ける基礎的な関数をガウス過程としてモデル化する手法であり、複雑な非線形関係をモデル化すると同時に、予測値の不確実性を定量的に表すことができる。しかし、入力されるデータが少ない場合、GPRの予測値の不確実性が大きくなり、予測精度が低下する。そこで、ベイズの定理に基づいた適応サンプリング手法をGPRに適用し、GPRモデルを更新することで吸音率の確率分布の予測精度を向上させる方法を提案する。なお、このような方法を本論文ではベイズ的機械学習手法と呼ぶ。

GPRモデルの更新には、ベイズの定理に基づいたベイズ最適化を用いる。ベイズ最適化はベイズ理論を利用した確率論的な最適化手法であり、現在のデータに基づいて次に取得するサンプリング点を効率的に探索することができる。このとき、局所解に陥らないよう探索と新規の領域の選択をバランスよくサンプリングする必要がある。これは、獲得関数と呼ばれる関数で定義されており、代表的な関数として以下が挙げられる [58]。

- Probability of Improvement(PI)
現在の最良値に対する改善期待値が最大になるよう、次のサンプルを選択する
- Expected Improvement(EI)
モデル中の不確実性を考慮し、最適値に対する改善期待値を最大化する
- Upper Confidence Bound(UCB)
現在の最適値に対する改善期待値の上限を最大化する
- Thompson Sampling(TS)
モデルの事後分布からサンプリングし、予測値が最大となるような次のサンプルを選択する

PIは現在の最良値を y^* として、次式で定義される。

$$PI(X) = P(f(X) > y^*) = \frac{\phi((y^* - \mu(x)))}{\sigma(x)} \quad (6.22)$$

このとき、 ϕ は標準正規分布の累積分布関数、 $\mu(X)$ は X におけるGPRの平均予測値、 $\sigma(x)$ は X におけるモデルの標準偏差である。同様に、EI、UCB、TSはそれぞれ次式で定義される。

$$\text{EI}(X) = \frac{\max(0, (\mu(X) - y^*)) + \sigma(x)\phi((\mu(x) - y^*))}{\sigma X} \quad (6.23)$$

$$\text{UCB}(X) = \mu(X) * \bar{\kappa}\sigma(X) \quad (6.24)$$

$$\text{TS}(X) = \max(f(X)|X p(X|\mathbf{D})) \quad (6.25)$$

ここで、 κ はハイパーパラメータである。これらの獲得関数は問題や要件に応じて選択する。本論文では、吸音率の期待値を精度よく近似することを目的としているため、GPR と PDF の積分した積分値の分散を吸音率期待値を確からしさとして考え、これを新たな獲得関数として定義する。本節では、新たに定義した獲得関数を定式化する。

ベイズ的機械学習による吸音率の確率分布の推定では、以下のプロセスを繰り返す。

- マルチスケール解析で初期データセットを取得
- GPR で回帰モデルを構築する
- GPR と確率変数の PDF の積を Bayesian 求積法で積分する
- 積分値の分散を求め、獲得関数を定義する
- 獲得関数を最小化する次のサンプリング点を求める
- 求めたサンプリング点でマルチスケール解析を実行し、データセットを更新する

上記のプロセスを図 6.5 にフローチャートで示す。以下、各プロセスの概要を示す。

ベイズ的機械学習の最初のプロセスとして、初期データセットの取得を取得する。確率変数として定義する多孔質材料の微視パラメータを決定し、PDF を定義する。本論文では、PDF は正規分布と仮定し、初期サンプリング点として図 6.4 に示す各確率変数の期待値および期待値 $\pm 1\sigma$ の値を選択した。初期サンプリング点はその後のベイズ最適化の収束性に影響を与えるため、計算量と精度のトレードオフ関係に基づいて、設計空間を極力充填するように選択するのが好ましい。MC や摂動法で計算した結果がある場合、それらを初期データとしても用いてもよい。選択した初期サンプリング点においてマルチスケール解析で吸音率を取得し、確率変数と吸音率の初期データセットを得る。次に、初期データセットを入力として、GPR により確率変数から吸音率を近似する回帰モデルを構築する。本論文では式 6.13 で示したカーネル関数を選択し、ハイパーパラメータは L-BFGS 法で最適化する。得られた GPR モデルは、サンプリング点数が少ない場合は共分散関数が大きくなるため、吸音率の確率分布の予測精度が低下すると考えられる。そこで、GPR モデルを改善するサンプリング点をベイズ最適化で求める。ベイズ最適化は前述した通り、事前分布から事後分布を推論するベイズの考え方に基づいた最適化手法である。ベイズ最適化で追加のサンプリング点を求めるため、GPR の近似モデルを Bayesian 求積法で積分する。GPR はガウス過程に従っているため、 $f(\mathbf{X})$ は多変量正規分布に従う平均関数と共分散関数により表される。したがって、その積分値も正規分布に従う確率分布を示す。積分値の確率分布における分散は、 $f(\mathbf{X})$ と確率変数の PDF の積の積分、すなわち吸音率の期待値の信頼性を表す指標であると考えることができる。そこで、この分散を獲得関数として定義し、ベイズ最適化により

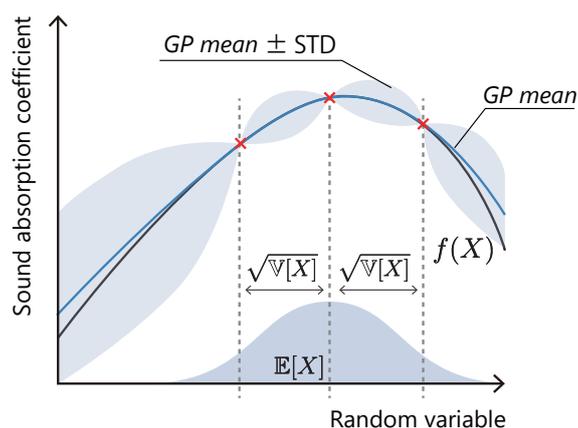


Fig. 6.4 Schematic diagram of Gaussian process regression in the Bayesian machine learning approach. At the red points, the sound absorption coefficient is calculated with the multiscale simulation and the response function is approximated by Gaussian process regression.

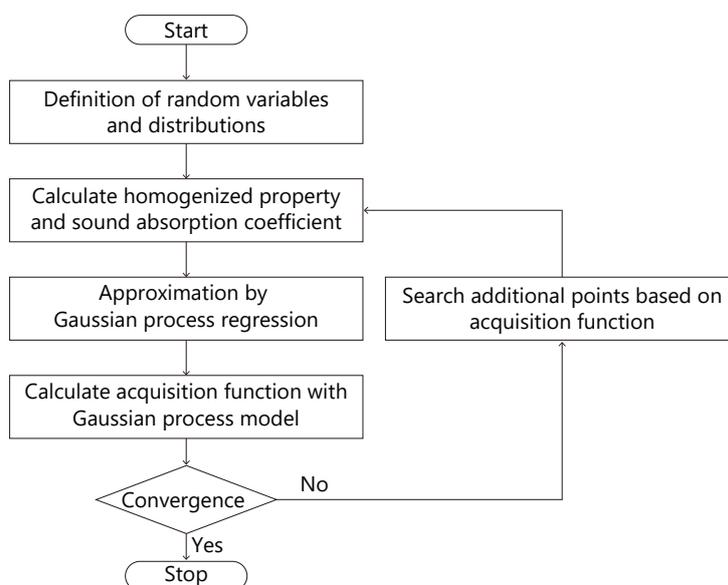


Fig. 6.5 The flowchart of the Bayesian machine learning method to predict distribution of sound absorption coefficient.

GPR モデルを改善する追加のサンプリング点を取得する。以上で得られた追加のサンプリング点においてマルチスケール解析を実行し、データセットを更新することで GPR モデルの精度を向上させる。これらの操作を獲得関数が十分に小さくなるまで繰り返すことで、高い精度を示す GPR モデルを構築し、その結果から吸音率のモーメントを推定する。

6.3.1 ガウス過程回帰による吸音率の近似

マルチスケール解析で得られたデータセットを用いて、吸音率を予測する GPR モデルを定式化する。 n 次元の確率変数 \mathbf{X} において、各確率変数にそれぞれ t 点のサンプリング点を与えて次の行列 \mathbf{X} で表す。

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} X_1^{(1)} & \cdots & X_n^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_1^{(t)} & \cdots & X_n^{(t)} \end{pmatrix} \quad (6.26)$$

式 6.26 を GPR の入力として、吸音率 f を予測する問題を考える。 f の同時分布は多変量正規分布に従うと仮定する。ここで、 f の同時分布の期待値を 0、共分散行列 \mathbf{K} を式 6.10 とすると、 f の事前分布は次の正規分布で表される。

$$f \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{K}) \quad (6.27)$$

共分散行列 \mathbf{K} の各成分 (m, m') は式 6.13 のカーネルで表される。

続いて、未知の \mathbf{X}^* における f^* を推定する。 \mathbf{f} に f^* を追加した $\mathbf{f}' = (f^{(1)}, \dots, f^{(t)}, f^*)$ を考えると、共分散行列 \mathbf{K}' は次式で表される。

$$\mathbf{K}' = \begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{k}_* \\ \mathbf{k}_*^T & k_{**} \end{pmatrix} \quad (6.28)$$

このとき、 \mathbf{k}_* および k_{**} はそれぞれ式 6.29 と式 6.30 である。

$$\mathbf{k}_* = \left(k(\mathbf{X}^*, \mathbf{X}^{(1)}), \dots, k(\mathbf{X}^*, \mathbf{X}^{(t)}) \right)^T \quad (6.29)$$

$$k_{**} = k(\mathbf{X}^*, \mathbf{X}^*) \quad (6.30)$$

式 6.28 より、 \mathbf{f}' の確率分布は式 6.31 となる。

$$\mathbf{f}' \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{K}') \quad (6.31)$$

この分布は f^* と f の同時分布であるため、 f^* の条件付確率は式 6.32 で表される。

$$p(f^* | \mathbf{X}^*) = \mathcal{N}(\mathbf{k}_*^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{f}, k_{**} - \mathbf{k}_*^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_*) \quad (6.32)$$

式 6.32 は GPR の事後分布であり、事後平均と事後共分散は式 6.33 および式 6.34 となる。

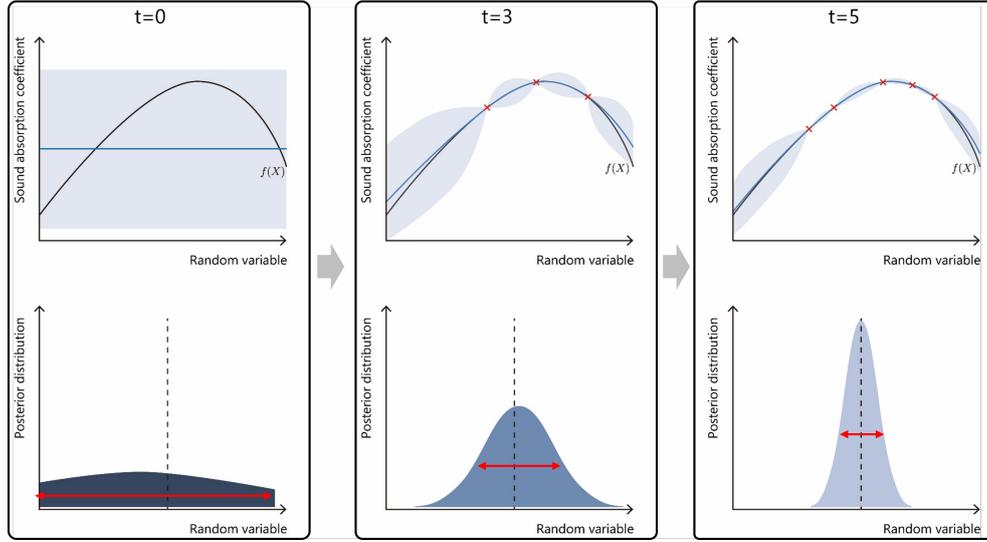


Fig. 6.6 Bayesian optimization with the variance of the integral of the Gaussian process regression as the acquisition function.

$$\mathbb{E}[f^* | \mathbf{X}^*] = \mathbf{k}_*^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} \quad (6.33)$$

$$\mathbb{V}[f^* | \mathbf{X}^*] = k_{**} - \mathbf{k}_*^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_* \quad (6.34)$$

以上より、与えられたデータセットに基づき平均関数と共分散関数を求めることで、GPR による吸音率の回帰モデルを構築することができる。

6.3.2 Bayesian 求積法

吸音率の統計モーメントを求めるため、GPR モデルと PDF の積分を計算する。GPR モデルと PDF の積分には Bayesian 求積法を用いて、積分値 I を求める。Bayesian 求積法は数値積分に対するバイズ的アプローチであり、積分値に対する GPR の事前分布を使用して、基礎となる関数をモデル化する。また、積分値の平均と分散は GPR の事前分布と観測データより推定される。図 6.6 に GPR の積分値の確率分布と、獲得関数に基づいたデータセットの更新の模式図を示す。

GPR では事後分布が多変量正規分布に従うと仮定しているため、その関数を積分した結果 I も正規分布を示す。したがって、式 4.10 の確率分布は式 6.32 より次式で表される [59]。

$$I[f^* | \mathbf{X}^*] \sim \mathcal{N} \left(\int \mathbb{E}[f^* | \mathbf{X}^*] P(\mathbf{X}^*) d\mathbf{X}^*, \iint \mathbb{V}[f^* | \mathbf{X}^*] P(\mathbf{X}^*) P(\mathbf{X}^{*'}) d\mathbf{X}^* d\mathbf{X}^{*'} \right) \quad (6.35)$$

式 6.35 より、 $I[f]$ の期待値と分散は式 6.36 および式 6.37 となる [59][60][61]。

$$\mathbb{E}[I[f^* | \mathbf{X}^*]] = \int \mathbb{E}[f^* | \mathbf{X}^*] P(\mathbf{X}^*) d\mathbf{X}^* = \int (\mathbf{K}_*^T \hat{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{F}^*) P(\mathbf{X}^{(t)}) d\mathbf{X}^{(t)} \quad (6.36)$$

$$\begin{aligned}\mathbb{V}[I[f^* | \mathbf{X}^*]] &= \iint \mathbb{V}[f^* | \mathbf{X}^*] P(\mathbf{X}^*) P(\mathbf{X}^{*'}) d\mathbf{X}^* d\mathbf{X}^{*'} \\ &= \iint (k_{**} - \mathbf{k}_*^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_*) P(\mathbf{X}^*) P(\mathbf{X}^{*'}) d\mathbf{X}^* d\mathbf{X}^{*'}\end{aligned}\quad (6.37)$$

式 6.36 および式 6.37 の複雑な式は一般的には解析解が得られない。しかし、 $P(\mathbf{X})$ が平均 $\boldsymbol{\xi}$ 、共分散行列 $\boldsymbol{\Xi}$ の正規分布に従う場合、式 6.36 および式 6.37 の閉形式は式 6.38 および式 6.39 に帰着する。

$$\mathbb{E}[I[f^* | \mathbf{X}^*]] = \mathbf{l}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{F}^* \quad (6.38)$$

$$\mathbb{V}[I[f^* | \mathbf{X}^*]] = \alpha^2 (\det(\mathbf{I} + 2\boldsymbol{\Xi}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}))^{-0.5} - \mathbf{l}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{l} \quad (6.39)$$

ここで、 $\mathbf{l} = l_1, \dots, l_n^T$ は次式で表される。

$$\begin{aligned}l_i &= \int_{\Omega_x} k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) N(\mathbf{x} | \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\Xi}) d\mathbf{x} \\ &= \alpha^2 \frac{\exp\left[-1/2 (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\xi})^T (\boldsymbol{\Lambda} + \boldsymbol{\Xi})^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\xi})\right]}{\sqrt{\det(\mathbf{I} + \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \mathbf{B})}}\end{aligned}\quad (6.40)$$

式 6.39 は式 4.10 の推定値のばらつきを表していると考えられる。したがって、式 6.37 が小さくなるサンプルを追加することで、近似精度を向上させることができる。これを評価するため、式 6.32 に t^* 点を追加したときの分散を $\mathbb{V}[I[f^{t*} | \mathbf{X}^{t*}]]$ として、式 6.37 との差を定義する。

$$\text{Acquisition} = -(\mathbb{V}[I[f^{t*} | \mathbf{X}^*]] - \mathbb{V}[I[f^{t*} | \mathbf{X}^{t*}]]) \quad (6.41)$$

式 6.41 を周波数域で積分したものを獲得関数と定義し、これが最小となる t^* 点を求める。このとき、 t^* 点を追加した式 6.41 は解析的に評価できるため、最小化問題の計算コストは小さくなる。得られた t^* 点をデータセットに追加し、マルチスケール解析で吸音率を求めることでデータセットを更新する。更新されたデータセットにより再び式 6.32 を求め、GPR モデルを更新する。以上の操作を式 6.41 が十分に小さくなるまで繰り返すことで、式 6.41 の近似精度を向上でき、最終的に得られる統計モーメントの予測精度を向上させることができる。

以上より、本節では微視構造の確率変数と吸音率の関係を GPR でモデル化する方法を説明し、GPR モデルと PDF の積分を Bayesian 求積法で求めた。また、この積分値の確率分布に着目し、積分値の分散を獲得関数として新たに定義し、適応的にサンプリング点を求めた。このような方法はベイズの定理の基づいており、現在あるデータを活用して吸音率の統計モーメントの精度を改善することができる。これらの一連の方法を本論文ではベイズ的機械学習手法と呼んでいる。次節ではベイズ的機械学習により多孔質型吸音材の統計モーメントを推定した結果を示す。

Table 6.1 The parameters of the normal probability density function assumed for the random variables.

	Random variables	Expected value	Standard deviation
(a)	Unit cell size[μm]	100	50.0
	Porosity[-]	0.85	0.10
(b)	Unit cell size[μm]	200	50.0
	Porosity[-]	0.70	0.10

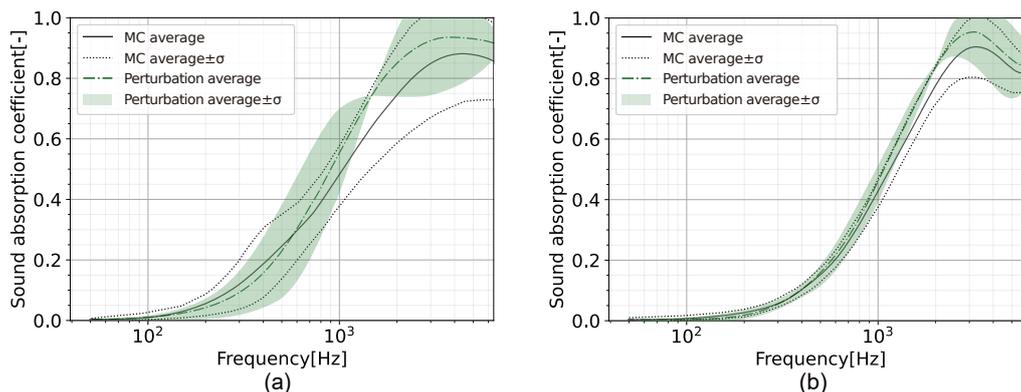


Fig. 6.7 The probability distribution of sound absorption coefficient by the Perturbation method.

6.4 解析条件

バイズ的機械学習手法を用いて、多孔質型吸音材料の微視構造の変動により生じる吸音率の確率分布を推定した結果を示す。マルチスケール解析の微視構造の簡易モデルとして、図 5.4 に示した (a),(b) 矩形型のユニットセル、(c),(d) の繊維状のユニットセルを用いた。確率変数は第 5 章と同様に図 5.5 に示した変動を考え、それぞれ独立な正規分布を仮定した。確率変数の PDF のパラメータを表 6.1 に示す。表 6.1 の標準偏差は表 5.2 の摂動法の検証と比較して大きな値を示している。このような変動が大きい場合、摂動法では吸音率の確率分布の近似が困難となる。摂動法とバイズ的機械学習手法を比較するため、表 6.1 の確率分布を用いて摂動法でモーメントを計算した結果を図 6.7 に示す。緑色の破線は摂動法で求めた期待値、緑色で塗りつぶした領域は摂動法で求めた期待値 \pm 標準偏差を表す。また、(a) は矩形型のユニットセル、(b) は繊維状のユニットセルの解析結果である。図 6.7 より、(a) では 1050 Hz 近傍、(b) では 2000 Hz で吸音率の分布が極めて小さくなっており、MC の結果と乖離が見られた。これは第 5 章で示した通り、摂動法では局所感度に基づき統計モーメントを予測しているが、これらの周波数域では導関数がゼロになる、もしくは非線形性の強い特性を示しており、導関数を正しく近似できていないためと考えられる。

図 6.8 に図 6.7 の KL 情報量を計算した結果を示す。図 6.7 で MC との乖離が確認された周波数域と同様に、図 6.8(a) では 1050 Hz 近傍、図 6.8(b) では 2000 Hz で KL 情報量のピークが確認された。したがって、これらの周波数域において MC で予測した確率分布と大きく乖離していることが示された。

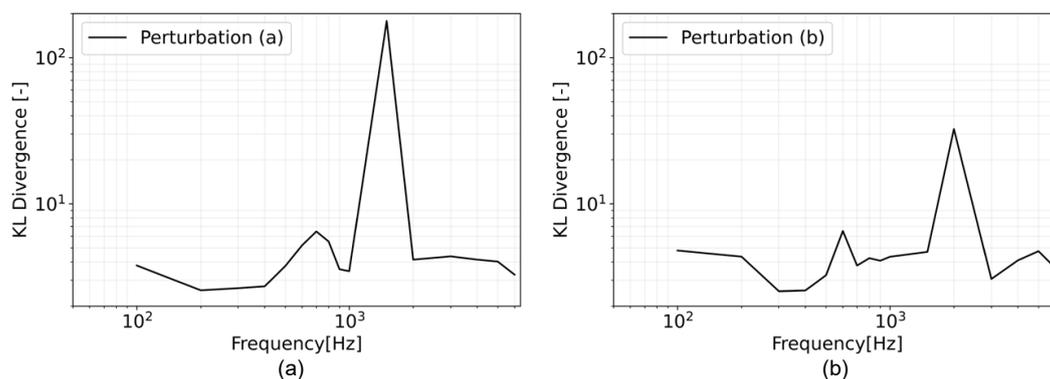


Fig. 6.8 The KL divergence result of sound absorption coefficient distribution obtained from the Perturbation method and MC.

以上に示したように、確率変数の変動が大きい問題では、摂動法を用いて吸音率のモーメントを予測することが困難である。次節では、このような摂動法では予測が困難な問題を対象として、ベイズ的機械学習により吸音率のモーメントを予測した結果を示す。

6.5 解析結果

図 6.8 で示した通り、摂動法では表 6.1 の PDF を示す確率変数では精度よく吸音率のモーメントを予測することが困難である。本節では、このような問題に対してベイズ的機械学習を適用し、吸音率のモーメントを求めた結果を示す。

ベイズ的機械学習はサンプリング点を適応的に追加するため、初期サンプリング点として $t = 3$ とした。確率変数はユニットセルサイズと空孔率であるため、 $n = 2$ となる。ベイズ的機械学習で求めた吸音率の期待値および標準偏差の結果を図 6.9 に示す。黒色の実線は MC で求めた吸音率の期待値、黒色の点線は MC で求めた期待値 \pm 標準偏差の値を表す。また橙色の実線はベイズ的機械学習で求めた期待値、橙色で塗りつぶした領域はベイズ的機械学習で求めた期待値 \pm 標準偏差の値を表す。

MC の結果とベイズ的機械学習の結果を比較すると、矩形形状の微視構造の図 6.9(a) では 500–900 Hz の周波数域ではベイズ的機械学習のばらつきが小さく評価されており、1000 Hz 以上の周波数域ではばらつきが大きく評価される傾向が確認された。これは、 $t = 3$ では $f(\mathbf{X})$ では吸音率と確率変数の関係をモデル化した GPR モデルを十分な精度で構築できておらず、推定された期待値および分散の精度が十分に高くないためであると考えられる。一方、繊維形状の微視構造の図 6.9(b) では、MC の結果とおおむね良い一致を示していることが確認された。摂動法においても (b) は吸音率の傾向として比較的良好一致を示していたが、2000 Hz 近傍の周波数に極小点が見られていた。このような極小点は、ベイズ的機械学習においても初期サンプル数が少ない場合には摂動法と同様に生じる可能性があるが、適応的なサンプリングを繰り返すことで、このような領域は改善されると考えられる。

次に、図 6.9 の近似精度を改善するため、式 6.41 を評価して適応的にサンプル点を追加した。追加したサンプル点でマルチスケール解析を実行し、データセットを更新し、GPR モデルを更新した。ここでは、 $t^* = 2$ として吸音率の確率分布を更新した。更新した GPR モデルに基づき、吸音率のモーメント

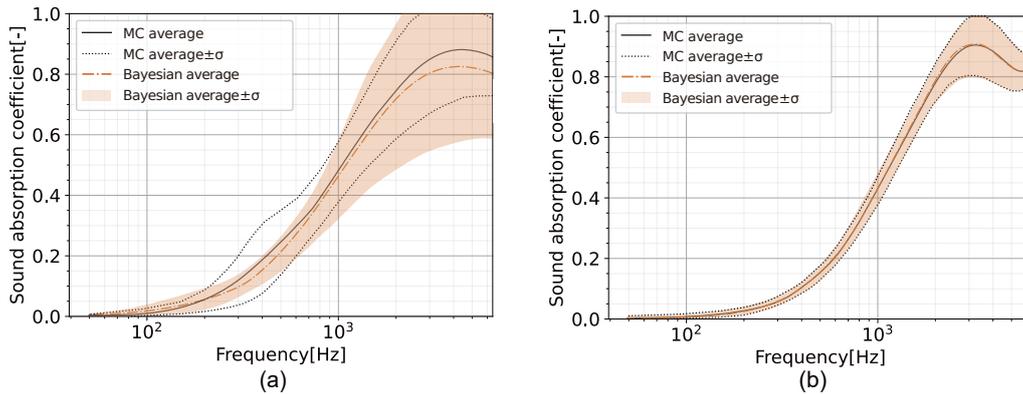


Fig. 6.9 Prediction of probability distribution of sound absorption coefficient by Bayesian machine learning method at the initial sampling points.

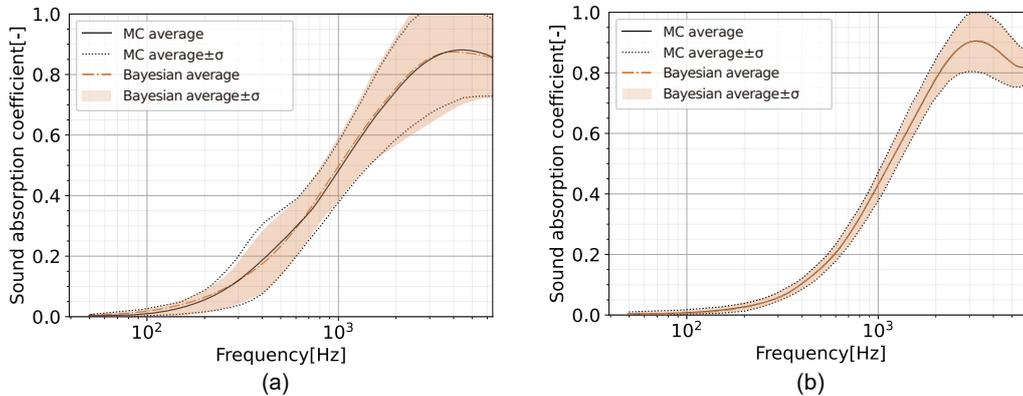


Fig. 6.10 Prediction of probability distribution of sound absorption coefficient by Bayesian machine learning method at the adaptive sampled points.

トを計算した結果を図 6.10 に示す。

図 6.10(a) より、適応的にサンプリング点を追加することで、モーメントの結果が MC の結果とよく一致していることが示された。なお、(a) の標準偏差では 400 Hz 近傍の周波数域で吸音率が增大している。これは、300–500 Hz で固体相の縦振動の影響と考えられる。固体相の縦振動は通常狭いピークとして吸音率に表れるが、ユニットセルの固体相が確率的に変動する場合、見かけの弾性率と密度が変化するため、これらの狭帯域の吸音ピークの周波数が変化すると考えられる。これらの狭帯域ピークから期待値および標準偏差を計算するため、図 6.10(a) の $\pm\sigma$ ではこれらの包絡線をとる形で鈍い吸音率の増大が表れたと考えられる。図 6.10(b) では、初期サンプリング点の図 6.9 において MC と若干の乖離が生じていた 2000 Hz 近傍において改善されていることが確認された。

最後に、摂動法とバイズ的機械学習で求めた吸音率の確率分布の $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ の比較結果を図 6.11 に示す。図 6.11 (a) より、摂動法の 1500 Hz の鋭いピークがバイズ的機械学習では消失していることが確認された。また、積分点が $t = 3$ の初期条件と $t^* = 2$ の点を追加した結果を比較すると、サンプリ

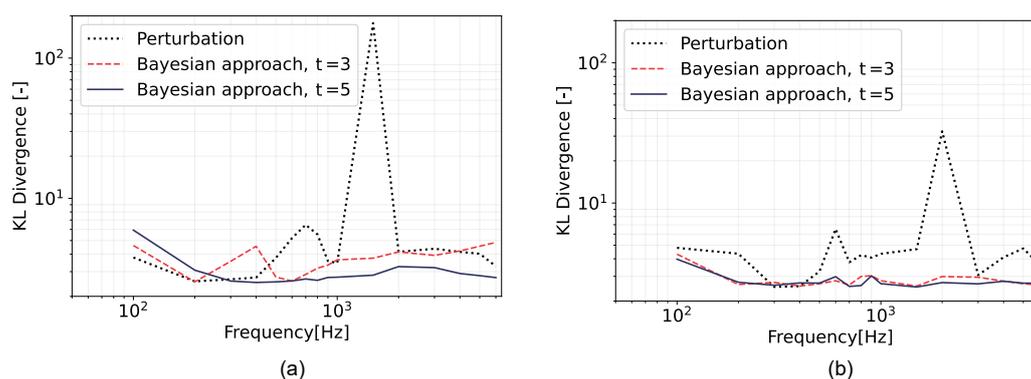


Fig. 6.11 Comparison of $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ obtained by Bayesian approach and perturbation method. The probability distribution of the criterion is the distribution obtained by the MC method.

ング点を追加することで $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ が改善することがわかる。なお、100 Hz では積分点 5 点の結果で悪化が見られるが、この周波数では吸音率の期待値と分散が極めて小さいため、わずかな分布の差異が $KL(\hat{P}|\hat{Q})$ として大きく表れたと考えられる。

以上より、本節ではベイズ的機械学習を用いることで、効率的かつ高精度に多孔質型吸音材の吸音率のモーメントを求めることができることを、摂動法と MC の結果と比較することで示した。摂動法では精度良く予測することが困難な問題に対しても、ベイズ的機械学習の適応的サンプリング手法により精度良く吸音率の統計モーメントが求められた。これは、摂動法では局所的な微分係数に基づいてモーメントを求めている一方で、ベイズ的機械学習では獲得関数に基づき GPR モデルの予測精度向上させる点を探索するためである。そのため、確率変数の変動が大きい問題や、吸音率に対して感度の大きな微視構造のパラメータを変動させる場合にベイズ的機械学習は有用な方法であると考えられる。

6.6 各種法の計算効率の比較

本節では、MC、摂動法およびベイズ的機械学習の計算量を比較する。MC、摂動法およびベイズ的機械学習のいずれの方法においても、モーメントの計算自体で必要となる計算資源は小さく、律速段階となるのは、マルチスケール解析の 1 回の試行で必要となる計算時間やメモリなどの計算資源である。そのため、本節では各手法で必要とするマルチスケール解析の試行回数と、1 回の試行に必要な計算資源について検証した結果を示す。

マルチスケール解析では、計算環境として CPU Intel Xeon (E5-2680 ×2)、メモリ (PC4-2133P-R) 256 GB を用い、有限要素解析は 4 コアの並列計算で実行した。均質化法における微視構造の解析モデルは六面体メッシュを用いて離散化した。節点数はランダムに変動する微視構造モデルによって変化し、節点数 3,375 から 39,304 の範囲で解析モデルを構築した。周波数はすべて 50 Hz から 6400 Hz の間を線形に分割した 128 点で計算を実行した。本論文で示した格子形微視構造と繊維型微視構造の計算時間を示した結果を図 6.12 に示す。図 6.12 より、微視構造モデルの節点数が増加するに従い、計算時間が二次関数的に増加していくことが確認された。39,304 節点の格子形微視構造の解析モデルでマル

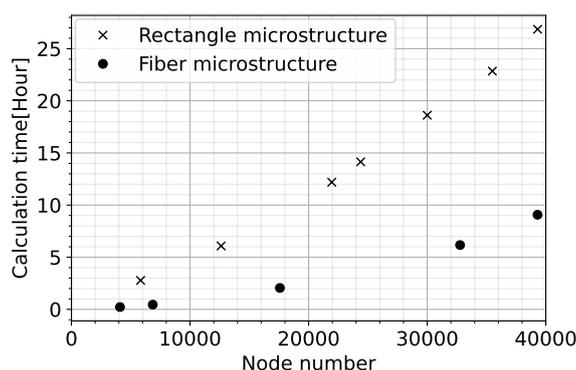


Fig. 6.12 Calculation time vs. number of nodes of the microstructure in homogenization method.

チスケール解析を実行した結果では、吸音率が得られるまでに必要な計算時間は約 27 時間であった。なお、このときのメモリの使用量は約 100 GB であった。また、格子形微視構造と繊維型微視構造の計算時間を比較すると、格子形微視構造のほうが計算時間が長い傾向にあった。これは、流体相と固体相の境界面での計算の影響と考えられ、境界面積の少ない繊維型微視構造では計算時間が短くなったと考えられる。したがって、流体相と固体相が入り組んだ複雑な微視構造モデルでは、より長い計算時間が必要になると推察される。

以上の結果より、複雑な流体相と固体相の境界面を有し、詳細に離散化した微視構造モデルでは非常に多くの計算時間が必要となることが示された。MC では $D = 300$ として、上記の節点数の範囲内で 300 種類の微視構造モデルをランダムに生成して計算を実行している。節点数に対する計算時間が二次関数に従うと考え、節点数 3,375 から 39,304 の範囲で一様にモデルが生成すると仮定すると、格子形微視構造と繊維型微視構造の計算時間の期待値はそれぞれ約 11.5 時間と 2.90 時間となる。したがって、MC を逐次的に実行した場合に必要な計算時間は、格子形微視構造では約 3450 時間、繊維型微視構造では約 855 時間と見積もることができる。これは日数に直すとそれぞれ約 144 日および 36 日間であり、一般的な計算環境では膨大な計算時間が必要になることがわかる。実際には、複数のコンピュータもしくは CPU を用いて並列計算を実行することで、より短い時間で計算を完了することは可能であるが、実用的な計算速度とは言い難い。

一方、摂動法では確率変数の数 n に対して $2n + 1$ 回の計算で確率分布を近似可能である。本論文では $n = 2$ であるため、総計算回数は 5 回となるため、上記の計算時間の期待値を用いると、格子形微視構造と繊維型微視構造の計算時間はそれぞれ、57.5 時間および 14.3 時間と見積もることができる。並列計算を併用することで十分に実用的な計算時間であると考えられる。また、バイズ的機械学習に基づく手法では、初期条件 $t = 3$, $t^* = 2$ で総計算回数は 10 回であった。こちらも上記の計算時間の期待値を用いると、格子形微視構造と繊維型微視構造の計算時間はそれぞれ、115 時間および 29.0 時間と見積もることができる。バイズ的機械学習における試行回数は、対象とする問題に応じて適応的に追加するサンプリング点 t^* が変動するが、本論文の例では MC と比較して約 97 % の計算時間を削減できた。なお、この計算時間は摂動法の約 2 倍程度であるが、複雑な問題に対応できる点や過去の計算結果を蓄積できる点を考慮すると、吸音率の確率分布の計算方法として十分に選択肢になると考えられる。

以上より、本論文で提案した摂動法とベイズ的機械学習を用いることで、MCと比較して大幅に少ない計算資源で精度良く吸音率の確率分布を近似できことを示した。より複雑な形状を詳細に離散化する場合にはこれら計算資源の課題が顕在化するため、摂動法やベイズ的機械学習を用いて効率的に計算する重要性が高まると考えられる。

6.7 まとめ

本章では、GPRとベイズ最適化による吸音率のモーメントの予測手法を提案した。機械学習手法のGPRとベイズの定理に基づいた適応的サンプリング手法を用いた手法を、本論文ではベイズ的機械学習と呼んでいる。適応的サンプリング手法に基づいたベイズ的機械学習手法は、効率的に設計空間を探索することができることを示した。これは、ベイズ統計学の考え方に基づき、現在のデータからパラメータを更新し、予測モデルが改善すると予測されるサンプリング点を求めているためである。本論文では、追加のサンプリング点を求めるため、GPRとPDFの積分から求められる正規分布の分散を新たに獲得関数と定義し、ベイズ最適化によりサンプリング点を適応的に求めた。このような方法は、乱数、Low-discrepancy列およびLHDなどのワンショットサンプリング手法と比較して、実験計画の見通しの面では劣るが、探索効率が高くなることをMCとの比較で示した。また、摂動法では予測が困難な問題に対しても、ベイズ的機械学習を用いることで吸音率のモーメントを効率的かつ高精度に求めることができることを示した。これは、摂動法では局所的な微分係数に基づいてモーメントを計算しているのに対し、ベイズ的機械学習ではGPRの予測精度が悪いと考えられる点を適応的に取得してモーメントを求めているため、有限差分法で正確に微分係数を計算できない領域に対しても精度の良い近似解を示すことができたと考えられる。また、各手法で必要となる計算資源を比較し、ベイズ的機械学習ではMCと比較して約97%、摂動法では約98%の計算時間を削減できることを示した。このように、対象とする問題に応じて適切な近似手法を用いることで、実用的な計算リソースで吸音率の確率分布を予測できることを示した。

第7章

結論

7.1 本論文の総括

以下に本論文の総括として、各章の概要と結論を記述する。

- 第1章では、自動車に求められる振動騒音性能の現状と、環境負荷低減の目標を本論文の背景として説明し、高い音響性能と環境負荷低減を両立できる多孔質型吸音材の開発の必要性を示した。さらに、多孔質型吸音材の数値解析に関する先行研究を示すとともに、本論文で採用したマルチスケール解析の優位性を示し、微視構造の不確かさを考慮する重要性について論じた。最後に、微視構造の不確かさをマルチスケール解析を援用して確率論でモデル化することで、多孔質型吸音材の吸音率の不確か性を定量的に評価できる数値計算手法の提案を本論文の目的として示した。
- 第2章では、多孔質型吸音材の不確か性を実験的に把握するため、繊維系吸音材と発泡ウレタン材を対象として、吸音率と微視構造のばらつきを実験的に取得した。どちらの吸音材においても、吸音率が確率的な分布を示すことを明らかとなり、多孔質型吸音材を使用した製品においても音響特性のばらつきが生じる可能性があることを示した。このような吸音率の不確か性は、多孔質型吸音材の微視構造の不確かさが伝播した結果であると推測されるため、微視構造のばらつきを評価した。その結果、繊維系吸音材および発泡ウレタン材の微視構造は確率的な分布を示しており、それらの確率分布はQ-Qプロットおよび正規性の検定より、正規分布に従っていると結論付けた。
- 第3章では、多孔質型吸音材の数値計算モデルの基礎事項について説明し、漸近展開法に基づく均質化法を用いたマルチスケール解析を導出した。均質化法によるマルチスケール解析では、BiotのモデルやJCAモデルで必要となる実験的なパラメータの同定が不要であり、基本的な材料物性値から直接的に等価物性を求めることができることを示した。このようなマルチスケール解析は、新規の多孔質材料開発の初期段階から活用できる数値計算手法であることを示した。
- 第4章では、不確か性の定量化についての基礎事項を説明し、多孔質型吸音材の微視構造の不確かさをモデル化した。多孔質材料の微視構造のパラメータを確率変数として扱い、吸音率の確率密度関数とモーメントを定式化することで、確率変数の変動が伝播することで生じる吸音率の不確か性を定量的に評価できることを示した。吸音率の確率分布の近似手法として、MC、qMC、層化抽出法とk最近傍法によるサロゲートモデルを構築した。十分な計算資源がある場合、MC

を用いることで、吸音率の確率分布を高い精度で近似できることを明らかにした。

- 第5章では、摂動法により吸音率の確率分布を定式化し、格子形状のユニットセルと繊維形状のユニットセルをもつ微視構造を対象として、吸音率の確率分布を評価した結果を示した。確率変数の変動が十分に小さく、各確率変数間の共分散を無視できると仮定すると、摂動法ではMCと比べ大幅に少ない計算資源で吸音率の確率分布を評価できることを明らかにした。一方、非線形性の強い問題や、差分法で局所的な微分係数の近似が精度よく求めることができない場合、摂動法の利用が制限されることを明らかにした。また、第3章で実験的に取得した微視構造の確率分布に基づいて微視構造モデルを構築し、摂動法により吸音率のモーメントを求めた。摂動法による数値計算結果と実験結果を比較すると、吸音率の期待値には差異が見られたが、標準偏差は同等の結果が得られた。この結果より、実験で確認された吸音率の不確実性は、微視構造の確率的な変動で説明できることを明らかにした。
- 第6章では、摂動法に比べて汎用性が高く、少ない計算資源で吸音率の確率分布を評価する手法として、ベイズ的機械学習を用いた手法を提案した。ベイズ的機械学習は、1. マルチスケール解析によるデータセットの作成、2. GPRによる回帰モデルの構築、3. 回帰モデルの積分、4. 追加サンプリング点の選択、を繰り返すことにより、高精度かつ効率的に吸音率の確率分布を評価できる手法であることを示した。GPRモデルと確率密度関数の積分ではBayesian求積法を用いており、積分計算を解析的に求めることができることを示した。また、積分値の分散を吸音率の期待値の不確かさとして考え、この分散を獲得関数として新たに定義して追加のサンプリング点をベイズ最適化で求める方法を示した。以上の方法により求めたモーメントを摂動法の結果と比較することで、摂動法では近似が困難な非線形性の強い問題に対しても、ベイズ的機械学習を用いることで高精度にモーメントを予測できることを明らかにした。また、MCの結果と比較すると、MCの1/10以下の計算資源で精度良く確率分布を近似できていることを明らかにした。

総括として、本論文では、多孔質型吸音材の確率的な数値計算手法として、微視構造の不確かさを考慮して吸音率の確率分布を予測する確率的なモデル化手法について論じ、マルチスケール解析を援用した数値計算手法を提案した。表7.1に、本論文で提案した手法の長所および短所をまとめた。また、表7.2の各手法の機能比較表を示した。MCを用いた近似は、第4章で示した通り、汎用性が高く、試行を十分に繰り返すことで、高い精度で近似結果が得られる。しかし、近似精度はマルチスケール解析の1回の試行時間に制限され、本論文で検証した微視構造モデルにおいては850時間以上の計算時間が必要であるため、多くの計算資源が必要となる。このような課題を解決するため、摂動法とベイズ的機械学習法を提案し、その計算効率と精度を検証した。摂動法は計算資源の点で有利であり、計算時間は14～57時間程度と、MCと比較し約98.5%の計算資源を削減できることを明らかにした。しかし、6.3節で示した通り、微視構造のパラメータの変動が大きい場合、応答の非線形性が強くなるため、近似精度が悪化する。ベイズ的機械学習では、汎用性と計算資源のバランスの点で優れている。6.4節に示した通り、摂動法では精度よく近似することが難しい問題においても、ベイズ的機械学習ではMCと一致する結果が得られた。このときの計算時間は約30～115時間であり、MCと比較し約97%の計算資源を削減できる。

以上より、本論文では、マルチスケール解析を援用し、任意の微細構造において不確実性を考慮した確率論的シミュレーション手法を提案した。これらの数値計算手法を用いることで、現実の材料で生じ

Table 7.1 Summarizing the advantages and disadvantages of the proposed methods.

手法	長所	短所
モンテカルロ法	- 高い汎用性 - 高い近似精度 - 単純な計算アルゴリズム	- 膨大な試行回数が必要 (100~300回以上)
摂動法	- 最小の試行回数 ($2N+1$ 回) - 試行に必要な確率変数の組み合わせが明確 (ワンショットサンプリング法) - 任意の確率密度関数で定式化可能	- 低い汎用性 (非線形性の強い問題で精度が悪化) - 確率変数の共分散を考慮できない
ベイズ的機械学習	- 高い汎用性 - 効率的な設計空間の探索 - 過去データの蓄積と活用	- 試行に必要な確率変数の組み合わせが不透明 (適応的サンプリング法) - 収束速度は対象の問題と初期点に依存 - 確率密度関数に制約あり

Table 7.2 Functional comparison table of proposed methods.

手法	計算コスト	汎用性	計算精度
モンテカルロ法	×	○	○
摂動法	○	×	△
ベイズ的機械学習	△	○	○

る不確実性の影響を数値計算で予測することができ、ばらつきの影響で生じる不具合のリスクや、ロバスト設計などで多孔質型吸音材の開発に貢献できると考えられる。

7.2 今後の展開と課題

最後に、今後の展開と課題を示す。

- 本論文の提案手法を用いることで、任意の微視構造で生じる不確かさが吸音率に与える影響を定量的に評価できる。今後の展開として、提案手法の製品開発への応用が考えられる。提案手法で求められる吸音率の分散を用いて、高い吸音特性を示し、かつ微視構造の変動によりその吸音特性が変化しにくい多孔質型吸音材をロバスト設計として求めることが期待される。このように設計された多孔質型吸音材は、製造工程での変動に対して頑健であるため、品質の改善やコスト削減が期待される。また、このような特性を有する多孔質型吸音材の微視構造を最適化計算によって創出することで、理想的な多孔質材料を設計することが可能になると考えられる。
- 吸音率の確率分布をより詳細に解析するため、高次の確率モーメント、もしくは確率密度関数を求める必要がある。モーメントは吸音率の確率分布の特徴を表す重要な特徴量であるが、本論文で求めた一次、二次モーメントは確率分布の重心と広がりのみを示した値であるため、確率分布の歪みや偏りを正確に表すことができていない。第2章で吸音率の確率分布が正規分布と乖離し

ているような分布が確認されたため、このような分布を数値計算でより正確に予測することを今後の課題とする。

- 本論文の微視構造の不確実性のモデル化では、周期構造を仮定した微視構造が、確率的に変動すると仮定している。これは、4.4.2項で示したように、各確率変数の母集団がどのような分布であったとしても、その誤差は正規分布に従う、という中心極限定理に基づいた仮定である。したがって、実在の材料に存在する確率変数を十分に含むユニットセルを使用することで、本論文の手法を適用できると考えられる。一方、大規模な空間的な変動を考慮する場合、ユニットセルが複雑になりすぎてしまい、マルチスケール解析の計算時間が大きくなる。このような空間的な変動を考慮するには、均質化法を確率理論で拡張したマルチスケール解析モデルを構築するなど、本研究の手法をより発展させた数値計算手法が必要になると考えられる。
- 本論文では、微視構造の確率変数として、空孔率や繊維径などを選択した。空孔率は試験体の重量から算出でき、繊維径はSEMで撮像した画像から精度よく取得することができる。一方、繊維間距離や発泡体のセルサイズなど、奥行き方向の情報が重要になるパラメータでは、SEMから取得した画像では精度よく標本を取得することができない。5.6節で示したように、マルチスケール解析で吸音率の不確かさを評価する場合、実験結果と解析結果の平均値が一致していることが重要となるが、これには実材料に則した微視構造モデルを構築することが重要である。したがって、マイクロコンピュータ断層撮影などの三次元構造を取得できる測定機器を用いて、微視構造を特徴づけるパラメータをより正確に取得する必要があると考えられる。

付録 A

Appendix

A.1 摂動法によるモーメント近似の定式化

第 4 章で求めた摂動法によるモーメント近似手法の式導出過程を示す。応答関数の期待値は確率密度関数と応答関数より，式 A.1 で表される。

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] = \int f(\mathbf{X})P(\mathbf{X})d\mathbf{X} \quad (\text{A.1})$$

$f(\mathbf{X})$ は平均値 $\bar{\mathbf{X}}$ でのテイラー級数展開により，式 A.2 で近似される。

$$f(\mathbf{X}) \approx f(\bar{\mathbf{X}}) + \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k) (X_l - \bar{X}_l) \quad (\text{A.2})$$

ここで， \bar{X}_k は X_k の一次モーメントであり，式 A.3 で表される。

$$\bar{X}_k = \int_{-\infty}^{\infty} X_k P(X_k) dX_k \quad (\text{A.3})$$

同様に， X_k の z 次の中心モーメントは次式で表される。

$$\bar{X}_k^{(z)} = \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^z P(X_k) dX_k \quad (\text{A.4})$$

式 A.3 より，二つの確率変数の X_k と X_l の結合中心モーメント \bar{X}_{kl} は式 A.5 となる。

$$\bar{X}_{kl} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) P(X_k, X_l) dX_k dX_l \quad (\text{A.5})$$

なお，確率変数を独立と仮定すると，結合 PDF は各確率変数の PDF の積として表すことができる。

A.1.1 期待値

本文中で示した二次項まで考慮した摂動法による期待値の導出を示す。式 A.1 および二次項まで考慮した式 A.2 より、摂動法による期待値は次式で表される。

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(\mathbf{X})] &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \left(f(\bar{\mathbf{X}}) + \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

式 A.6 を展開すると次式となる。

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(\mathbf{X})] &\approx f(\bar{\mathbf{X}}) \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \\ &\quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} &\approx f(\bar{\mathbf{X}}) \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \\ &\quad \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

式 A.8 の第一項の $\int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{X}) d\mathbf{X}$ は PDF の積分であるため、その値は 1 である。また、第二項の $\int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X}$ は $\bar{\mathbf{X}}$ でテイラー級数展開しているため、その値は 0 となる。以上より、摂動法による期待値は、二次項まで考慮した期待値は式 A.9 となる。

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] \approx f(\bar{\mathbf{X}}) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) P(X_k, X_l) dx_k dx_l \quad (\text{A.9})$$

A.1.2 分散

本文中で示した摂動法による分散の導出を示す。分散は期待値を用いて式 A.11 で表される。

$$\mathbb{V}[f(\mathbf{X})] = \mathbb{E}[f(\mathbf{X})^2] - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^2 \quad (\text{A.10})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f^2(\mathbf{X})P(\mathbf{X})d\mathbf{X} - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})] \quad (\text{A.11})$$

式 A.11 より、二次項まで考慮した式 A.2 を代入すると式 A.12 が得られる。

$$\begin{aligned} \mathbb{V}[f(\mathbf{X})] \approx & \int_{-\infty}^{\infty} \left[f(\bar{\mathbf{X}}) + \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \right. \\ & \left. (X_i - \bar{X}_i)(X_j - \bar{X}_j) \right]^2 P(\mathbf{X})d\mathbf{X} - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})] \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

ここで、テイラー級数展開の二乗項を、次式のように展開する。

$$\begin{aligned} f(\mathbf{X})^2 = & f(\bar{\mathbf{X}})^2 + \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right)^2 + \frac{1}{4} \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right)^2 + \\ & 2f(\bar{\mathbf{X}}) \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right) + f(\bar{\mathbf{X}}) \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) + \\ & \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right) \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

このとき、式 A.13 の第二項を次のように展開する。

$$\left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right)^2 = \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \quad (\text{A.14})$$

また、式 A.13 の第三項を次のように展開する。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right)^2 \\ = & \frac{1}{4} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_m \partial X_n} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l)(X_m - \bar{X}_m)(X_n - \bar{X}_n) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

以上を用いて、式 A.13 の各項を積分する。式 A.13 の第一項を積分すると次式となる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\bar{\mathbf{X}})^2 P(\mathbf{X})d\mathbf{X} = f(\bar{\mathbf{X}})^2 \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{X})d\mathbf{X} = f(\bar{\mathbf{X}})^2 \quad (\text{A.16})$$

同様に第二項から第六項をそれぞれ積分すると式 A.17 から A.21 となる。

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_k} \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_k} \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_m \partial X_n} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l)(X_m - \bar{X}_m)(X_n - \bar{X}_n) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_m \partial X_n} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l)(X_m - \bar{X}_m)(X_n - \bar{X}_n) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

$$2f(\bar{\mathbf{X}}) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} = 0 \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} f(\bar{\mathbf{X}}) \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &= f(\bar{\mathbf{X}}) \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_k \partial X_l} \int_{-\infty}^{\infty} \partial X_k \partial X_l (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right) \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &= \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right) \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_k \partial X_l} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

以上より、分散は式 A.22 となる。

$$\begin{aligned} \mathbb{V}[f(\mathbf{X})] &\approx f(\bar{\mathbf{X}})^2 + \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_k} \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_m \partial X_n} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l)(X_m - \bar{X}_m)(X_n - \bar{X}_n) \\ &P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + f(\bar{\mathbf{X}}) \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_k \partial X_l} \int_{-\infty}^{\infty} \partial X_k \partial X_l (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &+ \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{X})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right) \left(\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{X})}{\partial X_k \partial X_l} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

本論文では式 A.22 の第一項を考慮して分散を近似した。

A.1.3 歪度

本文中の分析では使用されていないが、より高次のモーメントの近似方法を摂動法で定式化する。歪度は三次モーメントであり、次式で表される。

$$\text{Skewness} = \frac{(\mathbb{E}[f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})])^3]}{\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]^3} \quad (\text{A.23})$$

ここで、 $\mathbb{E}[f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})])^3]$ は次のように展開される。

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})])^3] &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^3 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (f^3(\mathbf{X}) - 3f^2(\mathbf{X})\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] + 3f(\mathbf{X})\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^2 - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^3) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (f^3(\mathbf{X})P(\mathbf{X})d\mathbf{X} - 3f^2\mathbf{X} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{X})\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]P(\mathbf{X})d\mathbf{X} \\ &\quad + 3\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^2 \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{X})P(\mathbf{X})d\mathbf{X} - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^3 \int_{-\infty}^{\infty} P(\mathbf{X})d\mathbf{X}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (f^3(\mathbf{X})P(\mathbf{X})d\mathbf{X} - 3f^2\mathbf{X} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{X})\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]P(\mathbf{X})d\mathbf{X} + 2\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^2 \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

また、分散の累乗と期待値の間には以下の関係が成り立つ。

$$\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]^2 + \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^2 = \int_{-\infty}^{\infty} f^3(\mathbf{X})P(\mathbf{X})d\mathbf{X} \quad (\text{A.25})$$

式 A.24 および式 A.25 より、三次の中心モーメントは次式となる。

$$\mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})])^3] = \int_{-\infty}^{\infty} f^3(\mathbf{X})P(\mathbf{X})d\mathbf{X} - 3\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]^2 - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^3 \quad (\text{A.26})$$

テイラー級数展開の式 A.2 を式 A.26 に代入し、モーメントを近似する。

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} f^3(\mathbf{X})P(\mathbf{X})d\mathbf{X} - 3\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]^2 - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^3 \\ &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \left(f(\bar{\mathbf{X}}) + \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k) (X_l - \bar{X}_l) \right)^3 P(\mathbf{X})d\mathbf{X} \\ &\quad - 3\mathbb{E}[f(\mathbf{X})]\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]^2 - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^3 d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

式 A.27 ではテイラー級数展開した $f(\mathbf{X})$ の各項の和の 3 乗であるため、以下のように展開できる。

$$(a + b + c)^3 = a^3 + b^3 + c^3 + 3a^2b + 3a^2c + 3b^2a + 3b^2c + 3c^2a + 3c^2b + 6abc \quad (\text{A.28})$$

式 A.28 の各項をそれぞれ計算する。式 A.27 の式 A.28 の右辺第一項を求めると次式となる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^3(\mathbf{X})P(\mathbf{X})d\mathbf{X} = f^3(\mathbf{X}) \quad (\text{A.29})$$

式 A.27 の式 A.28 の右辺第二項を求めると次式となる.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right) P(\mathbf{X})d\mathbf{X} = f^3(\mathbf{X}) \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \int_{-\infty}^{\infty} (X_i - \bar{X}_i)^3 P(X_i)dX_i \quad (\text{A.30})$$

式 A.27 の式 A.28 の右辺第三項を求めると次式となる.

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k) (X_l - \bar{X}_l) \right)^3 P(\mathbf{X})d\mathbf{X} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \sum_{o=1}^N \sum_{p=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_m \partial X_n} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_o \partial X_p} \\ & \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l)(X_m - \bar{X}_m)(X_n - \bar{X}_n)(X_o - \bar{X}_o)(X_p - \bar{X}_p) P(\mathbf{X})d\mathbf{X} \\ &= \frac{1}{8} \left(6 \sum_{k=1}^{N-2} \sum_{l=k+1}^{N-1} \sum_{m=l+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_m^2} \right) (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 (X_m - \bar{X}_m)^2 \\ & + 12 \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{m=l+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l \partial X_m} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 (X_m - \bar{X}_m)^2 \\ & + 18 \sum_{k=1}^{N-2} \sum_{l=k+1}^{N-1} \sum_{m=l+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_m} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l \partial X_m} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 (X_m - \bar{X}_m)^2 \\ & + 12 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l \partial X_m} (X_k - \bar{X}_k)^3 (X_l - \bar{X}_l)^3 \\ & + \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \right)^3 (X_k - \bar{X}_k)^3 (X_l - \bar{X}_l)^3 \\ & + 3 \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \right)^2 (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^4 \\ & + 12 \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \right)^2 \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^4 \\ & + \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \right)^2 (X_k - \bar{X}_k)^6 \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

式 A.27 の式 A.28 の右辺第四項を求めると次式となる.

$$f^2(\bar{\mathbf{X}}) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right) P(\mathbf{X})f\mathbf{X} = 0 \quad (\text{A.32})$$

式 A.28 の式 A.28 の右辺第五項を求めると次式となる.

$$\frac{1}{2}f^2(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) P(\mathbf{X}) f \mathbf{X} = \frac{1}{2}f^2(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} (X_k - \bar{X}_k)^2 \quad (\text{A.33})$$

式 A.27 の式 A.28 の右辺第六項を求めると次式となる。

$$\begin{aligned} & f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) P(\mathbf{X}) f \mathbf{X} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_m \partial X_n} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l)(X_m - \bar{X}_m)(X_n - \bar{X}_n) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

式 A.27 の式 A.28 の右辺第七項を求めると次式となる。

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right)^2 \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &= \frac{1}{4} f(\mathbf{X}) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_m \partial X_n} \\ & \quad \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l)(X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \quad (\text{A.35}) \end{aligned}$$

式 A.27 の式 A.28 の右辺第八項を求めると次式となる。

$$\begin{aligned} & f(\bar{\mathbf{X}}) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k)(X_l - \bar{X}_l) \right)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ &= \frac{1}{2} f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\ & \quad + f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_k} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \quad (\text{A.36}) \\ & \quad + \frac{1}{4} f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \right)^2 (X_k - \bar{X}_k)^4 \end{aligned}$$

式 A.27 の式 A.28 の右辺第九項を求めると次式となる。

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \int_{\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k) (X_l - \bar{X}_l) \right)^2 (X_k - \bar{X}_k) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\
= & \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^3 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=k}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^3 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\
& + \sum_{k=1}^N \sum_{l=k}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \right)^2 (X_k - \bar{X}_k)^3 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\
& + \frac{1}{4} \sum_{k=1}^N \sum_{l=k}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \right)
\end{aligned} \tag{A.37}$$

式 A.27 の式 A.28 の右辺第十項を求めると次式となる.

$$\begin{aligned}
& f(\bar{\mathbf{X}}) \left(\sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} (X_k - \bar{X}_k) \right) \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} (X_k - \bar{X}_k) (X_l - \bar{X}_l) \right) \\
= & \frac{1}{2} f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^3 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X}
\end{aligned} \tag{A.38}$$

式 A.29 から式 A.38 を式 A.27 に代入し, それを式 A.26 に代入すると, 摂動法による三次モーメントの近似として次式が得られる.

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{X})])^3] \approx & \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \right)^3 \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^3 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\
& + f^3(\bar{\mathbf{X}}) + \frac{3}{2} f^2(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\
& + 3f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \right)^2 \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\
& + 3f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^3 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \\
& - 3\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] \mathbb{V}[f(\mathbf{X})]^2 \mathbb{E}[f(\mathbf{X})]^3 + \dots
\end{aligned} \tag{A.39}$$

式 A.39 の第一項まで考慮すると一次近似, 全項を考慮すると二次近似となる. これを式 A.23 に代入することで歪度を求めることができる. なお, 式 A.39 で省略した高次項は式 A.40 で表される.

$$\begin{aligned}
\text{Higher terms} = & \frac{3}{4} \sum_{k=1}^{N-2} \sum_{l=k+1}^{N-1} \sum_{m=l+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_m^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) \\
& (X_m - \bar{X}_m)^2 + P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^3 \\
& (X_l - \bar{X}_l)^3 P(\mathbf{X}) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{3}{8} \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \right)^2 \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^3 \\
& (X_l - \bar{X}_l)^4 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{1}{8} \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \right)^2 \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^6 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \\
& \left(\frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \right)^2 \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \left(\frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \right)^2 \\
& \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^4 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{N-1} f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \\
& \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{3}{4} \sum_{k=1}^{N-1} f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^{N-1} \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \right)^2 \\
& \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^4 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{3}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^3 \\
& (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{3}{4} \sum_{k=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \right)^2 \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^5 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \\
& \frac{3}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{m=l+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k^2} \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l \partial X_m} \right)^2 \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 \\
& (X_l - \bar{X}_l)^2 (X_m - \bar{X}_m)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{9}{4} \sum_{k=1}^{N-2} \sum_{l=k+1}^{N-1} \sum_{m=l+1}^N \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_m} \\
& \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l \partial X_m} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 (X_m - \bar{X}_m)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \\
& \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \right)^3 \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^3 (X_l - \bar{X}_l)^3 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{N-2} \sum_{l=1}^N \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \right)^2 \\
& \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^4 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + 6 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l} \\
& \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + 3f(\bar{\mathbf{X}}) \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \right)^2 \\
& \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + 3 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_l^2} \\
& \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^2 (X_l - \bar{X}_l)^3 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} + 3 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N \frac{\partial f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k} \left(\frac{\partial^2 f(\bar{\mathbf{X}})}{\partial X_k \partial X_l} \right)^2 \\
& \int_{\infty}^{\infty} (X_k - \bar{X}_k)^3 (X_l - \bar{X}_l)^2 P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \tag{A.40}
\end{aligned}$$

謝辞

本研究を遂行するにあたり、懇切丁寧なご指導、ご支援いただきました工学院大学大学院 山本 崇史教授に心より感謝の意を表します。本論文の執筆に際しまして、工学院大学大学院 立野 昌義 教授、鈴木 健司 教授、大石 久己 教授、神奈川大学大学院 山崎 徹 教授には、大変ご多用にも関わらず、副査を務めていただき、貴重なご指導を賜りました。深く感謝の意を表します。

また、このような研究の機会を与えていただき、常にご支援してくださったマーレジャパン株式会社 赤澤 正補 執行役員および製品開発部の皆様に厚く御礼申し上げます。

本論文の研究の遂行に当たり、工学院大学大学院 工学研究科機械工学専攻の高橋 秀俊さん、宮城 一輝さんをはじめとし、自動車音響振動研究室の皆様には、大変多くのご支援とご協力をいただきました。厚く感謝申し上げます。

最後に、最も身近で支えてもらった家族に感謝いたします。

参考文献

- [1] He, S., Miller, J., Peddi, V., Omell, B. and Gandham, M., Active Masking of Tonal Noise using Motor-Based Acoustic Generator to Improve EV Sound Quality, *SAE International Journal of Advances and Current Practices in Mobility*, Vol. 4, No. 2, pp. 348–354 (2022).
- [2] Qiu, Z., He, P., Kong, Z. and Huang, X., Evaluation of objective sound quality in electric drive system with multi-power levels and full-operational conditions, *SAE technical paper*, 2022-01-7057 (2022).
- [3] World Health Organization, *Environmental noise guidelines for the European region*, (2008).
- [4] Regulation No 51 of the Economic Commission for Europe of the United Nations (UNECE) — Uniform provisions concerning the approval of motor vehicles having at least four wheels with regard to their sound emissions [2018/798].
- [5] 環境省, 今後の自動車単体騒音低減対策のあり方について (第四次答申) (2022).
- [6] Assen, N and Bardow, A., Life cycle assessment of polyols for polyurethane production using CO₂ as feedstock: insights from an industrial case study, *Green Chemistry*, Vol. 16 (2014), pp. 3272–3280.
- [7] Myrun, E., Börjesson, P. and Ericsson, K., A case study on closed-loop recycling of co-polyester plates – Assessment of material quality and life-cycle energy and greenhouse gas performance, *Cleaner Environmental Systems*, Vol. 6 (2022), pp. 100091.
- [8] Nicholson, S., Rorrer, N., Carpenter, A. and Beckham, G., Manufacturing energy and greenhouse gas emissions associated with plastics consumption, *Joule*, Vol. 5, No. 3, No. 17 (2021), pp. 673–686.
- [9] 経済産業省, 2020年度第1回産業構造審議会産業技術環境分科会地球環境小委員会自動車・自動車部品・自動車車体ワーキンググループ.
- [10] 三井物産戦略研究所, 世界の燃費規制の進展と自動車産業の対応 (2017).
- [11] Crossland, R., Sims, J. and McMahon, C., An object-oriented modeling framework for representing uncertainty in early variant design, *Research in Engineering Design*, Vol. 14 (2003), pp. 173–182.
- [12] Griffin, M., Weck, O., Bounova, G. and Keller, R., Change Propagation Analysis in Complex Technical Systems, *Journal of Mechanical Design*, Vol. 131, No. 8 (2009).
- [13] Zhao, S., Oduncuoglu, A., Hisarciklilar, O. and Thomson, V., Quantification of cost and risk during product development, *Computers and Industrial Engineering*, Vol. 76 (2014), pp. 183–

- 192.
- [14] Molcho, G., Cristal, A. and Shpitalni, M., Part cost estimation at early design phase, *CIRP Annals*, Vol. 63, No. 1 (2014), pp. 153–156.
- [15] Delany, M. E. and Bazley, E. N., Acoustical properties of fibrous absorbent materials, *Applied Acoustics*, Vol. 3, No. 2 (1970), pp. 105–116.
- [16] Miki Y., Acoustical properties of porous materials - Modifications of Delany-Bazley models, *J. Acoust. Soc. Jpn (E)*. 11(1) (1990), pp. 19–24.
- [17] Miki Y., Acoustical properties of porous materials - Generalization of empirical models, *J. Acoust. Soc. Jpn (E)*. 11(1) (1990), pp. 25–28.
- [18] Biot, M. A., Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid. I. low-frequency range, *Journal of Acoustical Society of America*, Vol. 28, No. 2 (1956a), pp. 168–178.
- [19] Biot, M. A., Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid. II. low-frequency range, *Journal of Acoustical Society of America*, Vol. 28, No. 2 (1956b), pp. 179–191.
- [20] Allard, J. F. and Atalla, N., *Propagation of sound in porous media*, Wiley (2009), pp. 111–135.
- [21] Atalla, N., Panneton, R. and Debergue, P., A mixed displacement-pressure formulation for poroelastic materials, *Journal of Acoustical Society of America*, Vol. 104, No. 3 (1998), pp. 1444–1452.
- [22] Terada, K., Ito, T. and Kikuchi, N., Characterization of the mechanical behaviours of solid-fluid mixture by the homogenization method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 153 (1998), pp. 223–257.
- [23] Auriault, J. L., Borne, L. and Chambon, R., Dynamics of porous saturated media, checking of the generalized law of darcy, *Journal of Acoustical Society of America*, Vol. 77 (1985), pp. 1641–1650.
- [24] Burrige, R. and Keller, J. B., Poroelasticity equations derived from microstructure, *Journal of Acoustical Society of America*, Vol. 70 (1981), pp. 1140–1146.
- [25] Yamamoto, T., Maruyama, S., Terada, K., Izui, K. and Nishiwaki, S., A generalized macroscopic model for sound absorbing poroelastic media using a homogenization method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 200, No. 1 (2011), pp. 251–264.
- [26] Berardi, U. and Iannace, G., Acoustic characterization of natural fibers for sound absorption applications, *Building and Environment*, Vol. 94, No. 2 (2015), pp. 840–852.
- [27] Gwon, J., Kim, S. and Kim, J., Sound absorption behavior of flexible polyurethane foams with distinct cellular structures, *Materials and Design*, Vol. 89, No. 5 (2016), pp. 448–454.
- [28] Doutres, O., Ouisse, M., Atalla, N. and Ichchou, M., Impact of the irregular microgeometry of polyurethane foam on the macroscopic acoustic behavior predicted by a unit-cell model, *The Journal of the Acoustical Society of America*, Vol. 136, No. 4 (2014), pp. 1666–1681.
- [29] Trinh, V. H., Langlois, V., Guillemot, J., Perrot, C., Khidas, Y. and Pitis, O., Tuning membrane content of sound absorbing cellular foams: Fabrication, experimental evidence and

- multiscale numerical simulations, *Materials and Design*, Vol. 162, No. 15 (2019), pp. 345–361.
- [30] Perrot, C., Panneton, R. and Olny, X., Periodic unit cell reconstruction of porous media: application to open-cell aluminum foams, *Journal of Applied Physics*, Vol. 101, No. 113538 (2007), pp. 1–11.
- [31] Lee, H. R., Yang, S. S., Lee, J. W. and Kang, Y., J., Estimation and uncertainty analysis of fluid-acoustic parameters of porous materials using microstructural properties, *The Journal of the Acoustical Society of America*, Vol. 148, No. 1 (2020), pp. 308–323.
- [32] Schneider, C. A., Rasband, W. S. and Eliceiri, K. W., NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. *Nature Methods*, Vol. 9, No. 7 (2012), pp. 671–675.
- [33] Johnson, D. L., Koplik, J. and Dashen, R., Theory of dynamic permeability and tortuosity in fluid-saturated porous media, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 176 (1987), pp. 379–402.
- [34] Sanchez-Palencia, E., *Non-homogeneous media and vibration theory*, Springer, Vol. 127 (1980).
- [35] Grenyer, A., Erkoyuncu, J., Zhao, Y. and Roy, R., A systematic review of multivariate uncertainty quantification for engineering systems, *CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology*, Vol. 33 (2021), pp. 188–208.
- [36] Sankararaman, S., Ling, Y. and Mahadevan, S., Uncertainty quantification and model validation of fatigue crack growth prediction, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 78, No. 7 (2011), pp. 1487–1504.
- [37] Pierce, S., Worden, K. and Bezazi, A., Uncertainty analysis of a neural network used for fatigue lifetime prediction, *Mechanical Systems and Signal Processing*, Vol. 22, No. 6 (2008), pp. 1395–1411.
- [38] Mahadevan, S., Nath, P. and Hu, Z., Uncertainty Quantification for Additive Manufacturing Process Improvement: Recent Advances, *ASCE-ASME Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems, Part B: Mechanical Engineering*, Vol. 8, No. 1 (2022), pp. 010801.
- [39] Guo, X., Zhao, X., Zhang, W., Yan, J. and Sun, G., Multi-scale robust design and optimization considering load uncertainties, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 283, No. 1 (2015), pp. 994–1009.
- [40] Sakata, S. and Torigoe, I., A successive perturbation-based multiscale stochastic analysis method for composite materials, *Finite Elements in Analysis and Design*, Vol. 102–103, No. 15 (2015), pp. 74–84.
- [41] Wen, P., Kamiyo, K., Kurita, D. and Takano, N. 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, No.2016005 (2016), pp. 1–10.
- [42] Marsaglia, G. and Zaman, A., A new class of random number generators, *Annals of Applied Probability*, Vol. 1 (1991), pp. 462–280.
- [43] Corput, J. G., Verteilungsfunktionen, *I. Proc. Kon. Nederl. Akad. Wetensch.*, Vol. 38 (1935), pp. 813–821

- [44] Halton, J. H., On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multi-dimensional integrals, *Numerische Mathematik*, Vol. 2 (1960), pp. 84–90.
- [45] Sobol, I. E., On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, Vol. 7, No. 4 (1967), pp. 86–112.
- [46] Henri, F., Discrepances de suites associées à un système de numération (en dimension un), *Bulletin de la Société Mathématique de France*, Vol. 109 (1981), pp. 143–182.
- [47] Tezuka, S., Polynomial arithmetic analogue of Halton sequences, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, Vol. 3, No. 2 (1993), pp. 99–107.
- [48] Schobi, R., Kersaudy, P., Sudret, B. and Wiart, J., Combining polynomial chaos expansions and kriging, Tech. Rep. RSUQ-2014-001, Chair of Risk, Safety and Uncertainty Quantification (2014).
- [49] Altman, N., An Introduction to Kernel and Nearest-Neighbor Nonparametric Regression, *The American Statistician*, Vol. 46, No. 3 (1992), pp. 175–185.
- [50] Kriegesmann, B., Rolfes, R., Huhne, Tebmer, J. and Arbocz, J., Probabilistic design of axially compressed composite cylinders with geometric and loading imperfections, *International Journal of Structural Stability and Dynamics*, Vol. 10, No. 4 (2010), pp. 623–644.
- [51] Thapa, M., Mulani, S. and Walters, R., Polynomial Chaos Decomposition with Differentiation Operation, 17th AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference (2016).
- [52] Paudel, A., Gupta, S., Thapa, M., Mulani, S. and Walters, R., Higher-order Taylor series expansion for uncertainty quantification with efficient local sensitivity, *Aerospace Science and Technology*, Vol. 126 (2022), pp. 107574.
- [53] Bishop, C.M., *Pattern recognition and machine learning*, Springer-Verlag New York (2006).
- [54] Rasmussen, C. E. and Williams, C. K. I., *Gaussian processes for machine learning*, MIT press (2006), pp. 7–30.
- [55] Trevor Hastie, T., Tibshirani, R. and Friedman, J., *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction*, Second Edition, Springer-Verlag New York (2009).
- [56] Alvarez, M., Rosasco, L., and Lawrence, N., *Kernels for vector-valued functions*, Technical report MIT-CSAIL-TR-2011-033 (2011).
- [57] Nocedal, J. and Wright, S., *Numerical optimization*, Second Edition, Springer-Verlag New York (2006).
- [58] Frazier, P., *A tutorial on Bayesian optimization*, arXiv (2018).
- [59] Zhou, T. and Peng, Y., Adaptive bayesian quadrature statistical moments shifted generalized lognormal distribution structural reliability, *Reliability Engineering and System Safety*, Vol. 198, No. 106902 (2020), pp. 1–19.
- [60] Rasmussen, C. E. and Ghahramani, Z., *Bayesian Monte Carlo*, 16th Annual Neural Information Processing Systems Conference (2002).

- [61] O'Hagan, A., Some Bayesian Numerical Analysis. *Bayesian Statistics*, Oxford University Press (1992), pp. 345–365.

関連業績

関連学術論文

- [1] 小松 洋輔, 山本崇史, 桂 大詞, 山川 啓介, 遊川 秀幸, 立野 昌義, 摂動法を用いた確率的均質化法による多孔質吸音材の吸音特性予測手法, 日本機械学会論文集, 87 巻 903 号 (2021), pp. 21-00140.
- [2] 小松 洋輔, 山本崇史, ベイズ的アプローチに基づく多孔質吸音材の確率的マルチスケール解析, 日本機械学会論文集, 88 巻 916 号 (2022), pp. 21-00247.
- [3] Komatsu, Y. and Yamamoto, T., Prediction method of the probability distribution of acoustic porous materials using a stochastic multiscale simulation, Scientific Reports, 投稿中.

国際会議発表論文

- [1] Yosuke Komatsu, Takashi Yamamoto, Daiji Katsura, Keisuke Yamakawa, Hideyuki Yukawa and Masayoshi Tateno, Probabilistic Homogenization of sound absorption coefficient for porous materials based on surrogate model, 27th International Congress on Sound and Vibration, Online.
- [2] Yosuke Komatsu and Takashi Yamamoto, Stochastic homogenization analysis of porous sound absorbing materials under uncertainty, 28th International Congress on Sound and Vibration, Online.
- [3] Yosuke Komatsu and Takashi Yamamoto, Stochastic multiscale simulation of porous absorbing material based on adaptive Bayesian quadrature, 183rd Meeting on the Acoustical Society of America, Nashville, Tennessee.

口頭発表論文

- [1] 小松 洋輔, 山本 崇史, 桂 大詞, 山川 啓介, 遊川 秀幸, 立野 昌義, 確率的均質化法による多孔質吸音材のマルチスケール解析, 制振工学研究会 2020 年技術交流会, オンライン.
- [2] 小松 洋輔, 山本 崇史, 桂 大詞, 山川 啓介, 遊川 秀幸, 立野 昌義, 多孔質吸音材音響特性の確率的均質化解析, 日本音響学会 2021 年春季研究発表会, オンライン.
- [3] 小松 洋輔, 山本 崇史, 確率的均質化法による多孔質材料の音響特性の不確実性定量化, 日本機械学会 Dynamic & Design Conference, オンライン.
- [4] 小松 洋輔, 山本 崇史, ベイズ最適化を応用した吸音率の不確実性定量化手法の開発, 制振工学研究会 2021 年技術交流会, オンライン.

[5] 高橋 秀俊, 小松 洋輔, 山本 崇史, 山川 啓介, 桂 大詞, 遊川 秀幸, 摂動法による繊維系吸音材料の吸音性能にばらつき予測, 制振工学研究会 2021 年技術交流会, オンライン.

[6] 小松 洋輔, 山本 崇史, 適応サンプリング手法を用いた多孔質吸音材の不確実性評価手法, 日本機械学会 Dynamic & Design Conference, 秋田県立大学.

[7] 高橋 秀俊, 小松 洋輔, 山本 崇史, 山川 啓介, 桂 大詞, 遊川 秀幸, 摂動法を用いた繊維系吸音材料の微視構造ばらつきが吸音性能に与える影響予測, 日本機械学会 Dynamic & Design Conference, 秋田県立大学.

[8] 小松 洋輔, 山本 崇史, 制振工学研究会 2022 年技術交流会, オンライン, マルチスケールモデリングによる多孔質吸音材料の音響特性の不確実性分析手法の比較.

[9] 高橋 秀俊, 小松 洋輔, 山本 崇史, 山川 啓介, 桂 大詞, 遊川 秀幸, 摂動法を用いた多孔質吸音材の音響特性ばらつき予測, 制振工学研究会 2022 年技術交流会, オンライン.