日本機械学会論文集(A編)
69巻683号(2003-7)

論文 No. 02-0408

カルマンフィルタおよび多重仮説検定を用いた応答曲面近似式の高精度化手法の提案*

廣畑賢治*1, 向井稔*1, 川村法靖*1
川上崇*1, 于強*2, 白鳥正樹*2

Proposal of Updating Method for the Response Surface Approximation Based on Kalman Filter and Multiplex Hypothetical Official Approval

Kenji HIROHATA*3, Minoru MUKAI, Noriyasu KAWAMURA, Takashi KAWAKAMI, Qiang YU and Masaki SHIRATORI

*3 Mechanical Systems Laboratory, Corporate Research & Development Center, Toshiba Corporation, 1 Komukai, Toshiba-cho, Saiwai-ku, Kawasaki-shi, Kanagawa, 212-8582 Japan

Response surface methodology has been used in the optimum design and reliability design. However, the response surface approximation may have uncertainty in the case when the reasonable interactive terms are not taken into account. In this paper, a new updating method for the response surface approximation is proposed. This method is based on Kalman filter and multiplex hypothetical official approval. The response surface approximation with uncertainty can be updated using a new method. From the application to examples, it is indicated that in the case that some response surface approximations for design space were stored and many sampling data from these approximations can be generated easily, the information of the design variables such as interaction among variables can be extracted and the reasonable response surface models can be identified by applying various response surface models with many interactive terms actively.

Key Words: Optimum Design, Structural Reliability, Probabilistic Method, Computer Aided Design, Knowledge Engineering, Response Surface Methodology, Statistical Treatment, Structural Analysis

1. 緒言

近年, 設計最適化分野や品質工学分野の近似解法として応答曲面法(1)~(3)が, その理論の平易さと近似手法としての利便性から広く利用されている. CAE (Computer Aided Engineering)を利用した解析の計算コストが無視し得ない場合, 各数値実験を, 応答曲面近似式上での計算で代替することで, 高速に最適化あるいは信頼性予測を行うものである. しかしながら, 非線形性などを伴う複雑かつ広域の設計空間においては, 比較的単純な近似式(例えば低次の主効果項のみの近似式)によって現象を精度良く記述することが困難な場合が多い. また, 応答曲面近似式の構築にあたって, あらかじめ各設計変数間の相互作用に関する情報が確認されている場合以外には, 各変数の相互作用項の導入についての有効な指針は少ない. このような場合, 不適切な相互作用項を考慮すれば, 冗長性が強い(汎化誤差が大きい)近似モデルとなるため注意を要する. 著者らは, 設計空間を領域分割することにより高精度な応答曲面近似式を各領域について作成し, 信頼性解析に活用してきた(4). しかしながら, 設計空間データが複数の領域において応答曲面近似式として蓄積されるに従い, 設計空間情報の未知の部分に対して, 積極的に新たな相互作用項を含んだ形の応答曲面モデル(RSM : Response Surface Model)で表現し, 能動的に相互作用に関する情報抽出を行い, 応答曲面近似式を高精度化するための方法論を構築することが重要であると考えられる. 多峰性解空間に対し高精度な応答曲面近似式を作成する手法として, 宮田ら(5)は応答曲面モデルの項選択の基準として情報量基準(AIC)を使用し, 逐次選択法により項を段階的に導入する方法を提案しているが, 応答曲面近似式の高精度化あるいは合理性の算定についての実用に則した手法に関する研究は, まだ少ないと思われる.

本報では, 状態量推定アルゴリズムのカルマンフィルタとベイズの定理に基づく多重仮説検定(6)~(9)を用いて, 種々の応答曲面モデルを, 設計空間における部分空間の応答曲面近似式より算出されたサンプリング点をもとに, 逐次, 更新・算定する方法を試みた. 本手法を, はりのたわみ問題と半導体パッケージにおける構造信頼性問題に試適用することにより, 有効性を

* 原稿受付 2002年4月4日.
*1 正員, (株)東芝研究開発センター(〠212-8582 川崎市幸区小向東芝町1).
*2 正員, 横浜国立大学工学部(〠240-8501 横浜市保土ケ谷区常盤台79-5).
E-mail : kenji.hirohata@toshiba.co.jp

検討した．

2. 応答曲面近似式の高精度化手法のながれ

本研究で提案する応答曲面近似式の高精度化手法のながれを以下に示す．本高精度化手法では，設計空間における部分空間の応答曲面近似式(図1参照)をもとに算出したサンプリング点を観測値(サンプリングデータ)として，カルマンフィルタにより各応答曲面近似式を更新しつつ，多重仮説検定による適合確率を指標に，多項式ベースの各種の応答曲面モデルを逐次算定する．本手法は大きく分けて，STEP 0 部分空間の応答曲面近似式の作成，STEP 1 各種の応答曲面モデルの想定，STEP 2 カルマンフィルタアルゴリズムによる応答曲面近似式の更新，STEP 3 ベイズの定理に基づく多重仮説検定による応答曲面モデルの算定，の各ステップより構成される(図2参照)．以下の節ではそれぞれのステップについて説明する．

2・1 部分空間の応答曲面近似式の作成 設計空間が適切に領域分割され，部分空間において精度良く応答曲面近似式が作成されている状態を初期状態として想定する(図1参照)．柏村らは，構造解析に実験計画法を導入し，Chebyshev の直交多項式を用いた応答曲面法を構築している．本研究では，まず柏村らにより提案された応答曲面法[1][2]や従来より行われている最小二乗法を用いて，設計空間における部分空間の応答曲面近似式を作成した．

2・2 各種の応答曲面モデルの想定 応答曲面モデルとしては，取扱いが容易で統計的手法の適用が可能な多項式を用いる．ここで，各項には変数変換を行うことで線形化可能な非線形関数も用いることも可能である．例えば，対数関数，べき乗関数，指数関数などである[10]．非線形性を伴う複雑な現象においても，多項式を形成する各項を適切に選ぶことにより，係数に関して線形一次式の応答曲面モデルとして近似的に表現できる場合が多いと考えられる．しかしながら，各項の選択の仕方は多数存在するため，ある次数以下と限った場合においても，想定可能な応答曲面モデルは極めて多く存在する．そのため，より高精度な応答曲面近似式あるいはより広い領域における応答曲面近似式を構築するには，想定される多数の応答曲面モデルを，効率的に算定できる実用に則した方法が必要である．一般に，応答曲面近似式は，式(1)のように表現される．ただし，Y は応答値，X_i は多項式の各項(基底)を示しており，X_i は各設計変数 $\boldsymbol{u}$ や $\boldsymbol{u}$ のべき乗だけではなく各変数 $\boldsymbol{u}$ の組合せ(例えば $u_1 \cdot u_2$ など)や変数変換により作成された多変数関数(例えば $u_1^2 \cdot \log(u_2)/u_3$ など)などの相互作用項であっても良い．

$$Y = a_1 + \sum_{i=2}^{r} a_i X_{i-1} \cdots\cdots (1)$$

ここで，式(1)の r は項数，a は未知パラメータ(係数)を意味している．

前述のとおり，本研究では，応答曲面近似式の更新に，部分空間の応答曲面近似式をベースに算出したサンプリング点を観測値として用いる．逐次更新のステップ k において，観測値 $(Y_1, \cdots, Y_m)_k$ が得られた場合，式(2)の観測方程式を構成できる．ただし γ_k はガウス性の白色雑音を示している．

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_m \end{bmatrix}_k = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1(r-1)} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2(r-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_{m1} & X_{m2} & \cdots & X_{m(r-1)} \end{bmatrix}_k \times \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_r \end{bmatrix}_k + \gamma_k$$

$$Y(k) = M(k) \cdot a(k) + \gamma(k) \cdots\cdots (2)$$

パラメータ $\boldsymbol{a}(k) = (a_1, a_2, \cdots, a_r)_k$ を状態量とおくと，

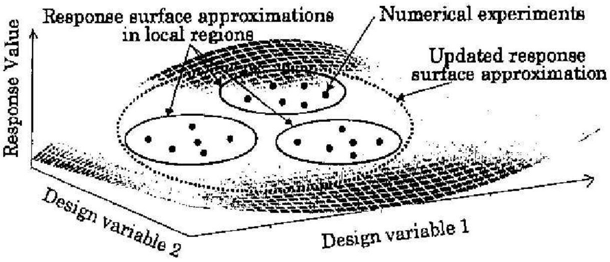

Fig. 1 Response surface approximation (ex. Two variables)

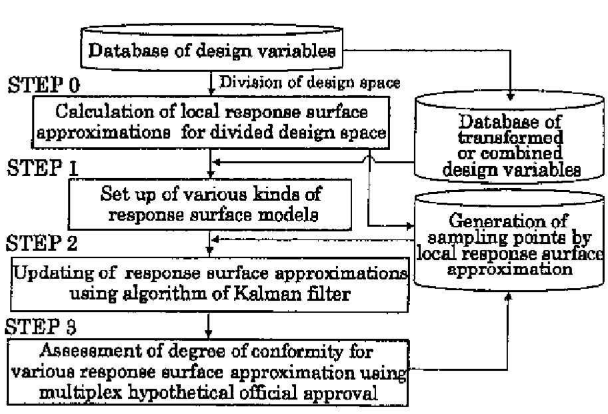

Fig. 2 Flow of the updating method for the response surface approximation

式(3)の状態方程式が得られる．

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_r \end{bmatrix}_k = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_r \end{bmatrix}_{k-1}$$

$$a(k)=I\cdot a(k-1) \quad \cdots\cdots (3)$$

ただし，I は単位行列を示している．

応答曲面近似式の係数ベクトル(状態量)の推定にはベイズの推定に基づく統計的推定法を用いる．すなわち，係数ベクトル $\boldsymbol{a}$ の事前分布を $f(\boldsymbol{a})$ とするとき，サンプリング点 (Y_k, M_k) が得られたという条件のもとで，係数ベクトル $\boldsymbol{a}$ が生じる確率分布 $f(\boldsymbol{a}|\boldsymbol{Y}_k)$ をベイズ理論を用いて推定することを考える［式(4)参照］．

$$f(a_k|Y_k)=\frac{f(Y_k|a_k)f(a_k|Y_{k-1})}{\int_{-\infty}^{\infty} f(Y_k|a_k)f(a_k|Y_{k-1})da_k} \quad \cdots (4)$$

$$f(a_k|Y_{k-1})=\int_{-\infty}^{\infty} f(a_k|a_{k-1})f(a_{k-1}|Y_{k-1})da_{k-1} \quad \cdots\cdots (5)$$

式(4)および式(5)は，ベイズの公式，観測方程式，状態方程式より導くことが可能である[11]．このとき，a_k の期待値は，有効推定(最小分散推定値)としての性質をもつ．状態量の期待値と分散を代数方程式により効率良く求めるアルゴリズムとして，カルマンフィルタのアルゴリズム[11][12]を用いる．

2·3 カルマンフィルタによる応答曲面近似式の更新　カルマンフィルタ[11][12]は最小二乗推定法の一つであり，$f(\boldsymbol{a}|\boldsymbol{Y}_{k-1})$ および $f(\boldsymbol{a}|\boldsymbol{Y}_k)$ の平均値ベクトルと共分散行列を式(6)から式(11)に示す代数方程式によって求めるアルゴリズムである．現象(システム)内の不確定量と観測(サンプリングデータ)の不確定量を含む状態方程式［式(6)参照］と観測方程式(式(7)参照］により，対象とする現象を表現できる場合を考える．

$$a(k)=F\cdot a(k-1)+w(k-1) \quad \cdots\cdots (6)$$

$$Y(k)=M\cdot a(k)+\gamma(k) \quad \cdots\cdots (7)$$

このとき，ステップ k における状態量 $a(k)$ の推定値は式(8)，カルマンゲイン $K(k)$ は式(9)，誤差共分散行列 $P_1(k)$ は式(10)により算出される．

$$\bar{a}(k)=\bar{a}(k-1)+K(k)\cdot[Y(k)-M\cdot\bar{a}(k-1)] \quad \cdots\cdots (8)$$

$$K(k)=P_1(k)\cdot M^T[M\cdot P_1(k)\cdot M^T+R(k)]^{-1} \quad \cdots\cdots (9)$$

$$P_1(k)=F\cdot P(k-1)\cdot F^T+Q(k-1) \quad \cdots\cdots (10)$$

$$P(k)=P_1(k-1)-K(k)\cdot M\cdot P_1(k) \quad \cdots\cdots (11)$$

ここで，式(8)の $\bar{}$ は推定値を示している．また，$\boldsymbol{a}(k)$：r 次元状態ベクトル，$\boldsymbol{Y}(k)$：m 次元観測ベクトル，$\boldsymbol{F}$：$r\times r$ 次元駆動行列，$\boldsymbol{M}$：$m\times r$ 次元観測行列，$\boldsymbol{w}(k)$：システム雑音(r 次元ガウス性の白色雑音ベクトル)，$\gamma(k)$：観測雑音(m 次元ガウス性の白色雑音ベクトル)，k：観測ステップ番号，であり，$\boldsymbol{F}$ と $\boldsymbol{M}$ の行列はモデル化により決定される．ただし，$\boldsymbol{R}(k)$ と $\boldsymbol{Q}(k)$ は $\boldsymbol{w}(k)$ と $\gamma(k)$ を用いて式(12)，(13)により定義される．

$$R(k)=E[\gamma(k)r^T(k)] \quad \cdots\cdots (12)$$

$$Q(k)=E[w(k)w^T(k)] \quad \cdots\cdots (13)$$

式(6)から式(11)に示すアルゴリズムにより，観測値であるサンプリングデータ $Y(k)$ が得られるごとに，状態量 $\boldsymbol{a}(k)$ の推定値が求められる．ここで式(2)を式(6)の観測方程式，式(3)を式(7)の状態方程式と考えることにより，多項式ベースの応答曲面近似式の係数ベクトル $\boldsymbol{a}(k)$ の推定に用いることができる．ただし，応答曲面近似式の係数ベクトル $\boldsymbol{a}(k)$ は定常状態のため式(6)において，$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{I}$，$\boldsymbol{w}(k)=0$ と仮定する．初期の状態推定ベクトルの誤差共分散行列を仮定することにより，サンプリングデータ $\boldsymbol{Y}(k)$ が得られるごとに，カルマンフィルタのアルゴリズムを用いて，多項式の係数 $(a_1, a_2, \cdots, a_r)_k$ の推定値［式(8)参照］を求め，応答曲面近似式を更新することが可能である．

2·4 ベイズの定理を用いた多重仮設検定　ベイズの定理を用いた多重仮設検定法は，プラントなどの異常兆候判定法として福田・清水らにより提案・適用され有効性が示されている[6][7][9]．本研究では，ベイズの定理を用いた多重仮設検定法を応答曲面モデルの適合判定に適用する．本手法により，応答曲面近似式が更新されるごとに多重仮説検定を行い，各応答曲面モデルの有意性を算定できる．

ベイズの定理は式(14)のように定式化されている．

$$P(E_i|A)=\frac{P(A|E_i)\cdot P(E_i)}{P(A)} = \frac{P(A|E_i)\cdot P(E_i)}{\sum_{j=1}^{n} P(A|E_j)\cdot P(E_j)} \quad \cdots\cdots (14)$$

$P(E_i)$：事象 E_i の事前確率

$P(E_i|A)$：事象 E_i の事後確率(事象 A のもとで特定の事象 E_i が生起する確率)

$P(A|E_j)$：事象 E_j のもとで事象 A の起こる確率

n：応答曲面モデルの数

この式から，事象 A という条件下で特定の E_i が生起するたびに，事象 E_i の事後確率 $P(E_i|A)$ を更新すると，逐次的に正しい確率に漸近していく．ベイズの定理を多重仮説検定に応用し，カルマンフィルタのアル

ゴリズムにより更新された応答曲面近似式の残差(観測値と推定値の差)から，観測システムの状態を逐次的に推定できる．カルマンフィルタから算出される残差は，状態方程式と観測方程式から記述されるモデルが対象とする現象と一致している場合，平均0の正規分布に従う．応答曲面モデル i に対するカルマンフィルタから出力される残差 $\gamma_i(k)$ は，平均0，共分散 $\boldsymbol{V}_i(k)$ の正規分布 $N(0, \boldsymbol{V}_i(k))$ に従うから，その確率密度関数は，式(15)のように表現できる．

$$N(\gamma_i(k);\ 0,\ V_i(k))=\frac{1}{(2\pi)^{m/2}(\det\ V_i(k))^{1/2}}\times\exp\left(-\frac{1}{2}\gamma_i^T(k)\,V_i^{-1}(k)\,\gamma_i(k)\right)\cdots\cdots\cdots\cdots(15)$$

ここで，共分散 $V_i(k)$ は式(16)により表される．

$$V_i(k)\delta_{jk}=E(\gamma_i^T(k)\gamma_i(j)),\ \gamma_i(k)=Y(k)-M_i\cdot\bar{a}_i(k-1)\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(16)$$

ただし，m は $\gamma(k)$ の次元，δ_{jk} はクロネッカーのデルタ，T は転置を示している．式(15)から得られる確率は，式(14)の $P(A|E_i)$ に相当する．それゆえ事後確率 $p_i(k)$ $(=P(E_i|A))$ は式(17)のように表現できる．

$$p_i(k)=\frac{N(\gamma_i(k);\ 0,\ V_i(k))\cdot p_i(k-1)}{\sum_{j=1}^{n}N(\gamma_j(k);\ 0,\ V_j(k))\cdot p_j(k-1)}\cdots(17)$$

ここでいう多重仮説検定とは，検定対象となるシステムに対していくつかのモデルを仮定し，観測中のシステムがどれに該当するかを確率論的に判定する方法で，以下の手順で行う．

1. 応答曲面モデル1，応答曲面モデル2，…，応答曲面モデル n を設定する．
2. 「仮説 H_i：観測中のシステムは応答曲面モデル i $(i=1, 2,\cdots, n)$ に適合する」をたてる．この事象を E_i とする．
3. 「仮説は正しい T(True)として，その仮説が H_1, H_2, …, H_n である確率 $P(E_1|T)$, $P(E_2|T)$, …, $P(E_n|T)$ を計算する．

新たなデータが入るたびに1～3の計算を繰返し，最大かつあらかじめ設定しておいたしきい値を超える仮説を採択する．これにより，適合確率を指標に各種応答曲面モデルを逐次算定することが可能となる．

3. 適　用　例

以下の二つの適用例を通じて，2章で提案した応答曲面モデルの高精度化手法の有効性を検討する．まず，3・1節において，各設計変数の物理的関係が理論式から明らかな，はりのたわみ問題により検証した後，3・2節において，半導体パッケージの構造信頼性問題へ応用した結果を示す．

3・1 はりのたわみ問題への適用例　先端に集中荷重を受ける片持ばりの先端でのたわみ δ は，断面が長方形の場合，はりの長さ：L，幅：B，厚さ：H，弾性率：E，荷重：P とすると，式(18)の理論式により表される．

$$\delta=\frac{4PL^3}{EBH^3}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(18)$$

各設計変数の相互作用に関する情報が，事前に明らかでない場合において，従来より行われている実験計画法に基づく応答曲面法(直交表L18により数値実験点を作成しChebyshev直交多項式近似)により，たわみ δ に関する近似式を作成した結果を式(19)に示す．ただし各変数に関する設計空間は表1に示す．また，直交多項式近似を作成する過程で分散分析を行った結果を表2に示す．

従来法による応答曲面近似式：

$$\delta=6.43+0.018\,9L+0.000\,007\,89L^2-0.852B+0.019\,1B^2-0.252H+0.000\,599H^2+0.000\,002\,05E-0.000\,000\,001\,03E^2+0.491P-0.009\,43P^2\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(19)$$

表2の分散分析結果からも明らかなように，各変数間の相互作用に関する情報が不明な場合において，直交表に基づく応答曲面法を用いると誤差(53%)が大きくなる場合がある．このような問題に対し，2章で提案した手法を適用した結果を以下に示す．ただし，本手法はCAEをベースにした利用を念頭に置いており，数値実験に内在する誤差を模擬するために，理論式から算出した値にガウス性の雑音(平均：0.0，標準偏差：0.3)を付加した数値実験点を用いた．

3・1・1 部分空間における応答曲面近似式　本適

Table 1　Ranges of variables about general RSM

Variable	Range	Level
L (mm)	100～300	3
B (mm)	10～30	3
H (mm)	10～30	3
E (GPa)	10～30	3
P (N)	30～90	3

Table 2　Analysis of variance (L 18)

Variable	Dimension	Degree of Freedom	Variance	F ratio	Effective ratio
L	1	1	5.81E+01	5.32E+00	20.6%
	2	1	2.49E-02	2.28E-03	0.00%
B	1	1	8.88E+00	8.13E-01	0.00%
	2	1	1.47E+01	1.34E+00	1.64%
H	1	1	6.25E+01	5.72E+00	22.5%
	2	1	1.43E-02	1.31E-03	0.00%
E	1	1	1.82E+00	1.67E-01	0.00%
	2	1	4.21E-02	3.86E-03	0.00%
P	1	1	1.57E+01	1.44E+00	2.09%
	2	1	3.55E+00	3.26E-01	0.00%
Error		7	9.07E+00		53.1%
Total		17			100.0%

F(0.05) = 6.607891 F(0.01) = 16.25817

用例では，設計空間内を部分空間に分割することで高精度に作成した三つの応答曲面近似式をベースにサンプリング点を算出する．各部分空間の範囲を表 3 に示す．各々の三つの領域において，直交表 L 18 により数値実験点を作成し，Chebyshev の直交多項式により近似式を作成した．部分空間における応答曲面近似式を式(20)～(22)に示す．設計空間を狭い領域に分割しているため，分散分析の結果，それぞれ 2%程度の誤差で，高精度に作成できていることが確認できた．

部分空間における応答曲面近似式 1(Local RSM 1)：

$$\begin{aligned}\delta=&14.4+0.027\,6L+0.000\,259L^2-1.37B\\&+0.057\,9B^2-0.551H+0.011\,8H^2\\&-0.000\,558E+0.000\,000\,021\,4E^2\\&+0.399P-0.012\,9P^2\end{aligned}\quad\cdots\cdots(20)$$

部分空間における応答曲面近似式 2(Local RSM 2)：

$$\begin{aligned}\delta=&8.52-0.009\,31L+0.000\,045\,4L^2-0.420B\\&+0.009\,78B^2-0.184H+0.002\,39H^2\\&-0.000\,185E+0.000\,000\,003\,94E^2\\&+0.113P-0.002\,00P^2\end{aligned}\quad\cdots\cdots(21)$$

部分空間における応答曲面近似式 3(Local RSM 3)：

$$\begin{aligned}\delta=&6.06-0.004\,60L+0.000\,015\,2L^2-0.201B\\&+0.003\,24B^2-0.090\,9H+0.000\,841H^2\\&-0.000\,091\,5E+0.000\,000\,001\,35E^2\\&+0.052\,4P-0.000\,643P^2\end{aligned}\quad\cdots\cdots(22)$$

3･1･2　各種の応答曲面モデルの想定　本適用例では，多項式の応答曲面モデルの各項［式(2)の X_i］を，(1) 各設計変数，(2) 各設計変数の 2 乗，(3) 各設計変数の 3 乗，(4) 各設計変数の逆数，(5) 各設計変数の 2 乗の逆数，(6) 各設計変数の 3 乗の逆数，(7) 各設計変数の対数，(8) 各設計変数の対数の逆数，(9) 1.0，の 9 種類について，総当たりの積算の組合せにより想定した(定数項を除いた項数が 1 項の場合：9^5=59 049 とおり)．また，応答曲面モデルの項数は，所定の近似精度(最大誤差：±5%)を確保できるまで，少ない項数から順次増やしていく方式とした(本適用例の場合は定数項を除いた項数が 1 項で打切り)．

従来より，線形回帰モデルの適合性の比較において，自由度調整済み決定係数[10]や，Rissanen の MDL (Minimum Description Length)や赤池の AIC (Akaike's Information Criterion)などの情報量基準[12][13]が用いられている．自由度調整済み決定係数(R^2_{adjust})は，回帰モデルの良否算定用の決定係数であり，単位自由度当たりの残差を比較可能なように調整されている．0.0～1.0 の間の値をとり，値が 1.0 に近づくほど良いモデルと算定できる．また，情報量基準は，近似誤差が小さくかつモデル自由度の小さいモデルを簡便に比較するために利用されており，小さいほど良いモデルと算定される．

参考のため，上記の全応答曲面モデルについて，直交表 L 18 の数値実験点に対する自由度調整済み決定係数や情報量基準(AIC, MDL)を算出した．上位 10 モデル(RSM 1～RSM 10)について，表 4 に結果を示す．いずれの指標を用いても同じ応答曲面モデルが上位 10 個において抽出されている．しかしながら，今回のように応答曲面モデルの各項において変数変換を行っている場合，表 4 からもわかるとおり，限定されたサンプリング点に対する近似誤差と，回帰モデルの自由度を考慮するのみでは，有意な差かどうかの判断が困難な場合もある．

3･1･3　応答曲面モデルの更新・算定　3･1･2 項の全応答曲面モデルに対し，カルマンフィルタにより，式(6)～(13)に従って各項の係数の推定値を逐次求めた．ここで，部分空間において構築した応答曲面近似式により算出したサンプリング点と，設計空間における実験計画法より得たサンプリング点を，カルマンフィルタに対するサンプリングデータとして逐次与えた．また，各応答曲面近似式を更新しつつ，多重仮説検定による適合確率を指標に，逐次，各応答曲面モデ

Table 3　Ranges of variables about local RSM

Variable	Range of Local RSM1	Range of Local RSM2	Range of Local RSM3
L (mm)	100～120	190～210	280～300
B (mm)	10～12	19～21	28～30
H (mm)	10～12	19～21	28～30
E (GPa)	10～12	19～21	28～30
P (N)	30～36	57～63	84～90

Table 4　General index of RSM assessment

Index	RSM1	RSM2	RSM3	RSM4	RSM5	RSM6	RSM7	RSM8	RSM9	RSM10
R^2_{adjust}	0.865	0.864	0.851	0.851	0.848	0.847	0.846	0.842	0.841	0.839
AIC	7.34	7.79	10.4	10.4	11.2	11.2	11.2	12.0	12.8	12.8
MDL	5.25	5.48	6.78	6.78	7.20	7.20	7.20	7.60	8.00	8.00

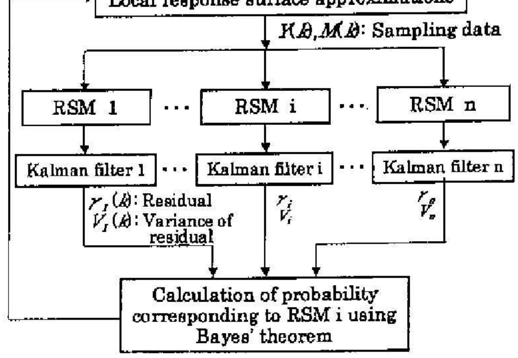

Fig. 3　Flow of method for assessment of RSM

ルを算定した(図3参照).

ただし，本適用例では，設計空間におけるL 18の実験計画法より得られたサンプリング点18データと，部分空間(表3参照)において一様乱数を発生させることにより得た18データ(三つの部分空間の各応答曲面近似式から6データずつ算出)を合わせた合計36データを逐次，カルマンフィルタの各ステップにおいて新たに算出することによりサンプリングデータ(観測値)として与えた．ただし，応答曲面モデルの初期の係数と分散は，実験計画法L 18の数値実験点に対する最小二乗法およびその信頼区間データにより設定した．

各応答曲面モデルがカルマンフィルタの各ステップにおいて更新されるごとに多重仮説検定を行い，各モデルの適合確率の変化を求めた結果を図4に示す(ただし，初期ステップにおいて最大誤差が±50%程度以内の100モデルについてのみ表示)．横軸には，カルマンフィルタのステップ数，縦軸には，多重仮説検定による各モデルの適合確率を示している．また，図中の a_1, a_2 は応答曲面近似式の係数を示している．この結果から，式(23)の応答曲面モデル(参考：表4中のRSM 2)が今回探索した範囲(3・1・2項の59 049とおりの応答曲面モデル)では最も適合度が高いことが明らかになった．ただし，式(23)は適合確率変化が定常に落ち着いた50ステップ時の更新結果を示している．

$$\delta=3.57\cdot\frac{PL^3}{EBH^3}-0.201 \qquad (23)$$

カルマンフィルタと多重仮説検定を用いることで，ノイズを含むサンプリングデータから，はりのたわみに関する理論式と同じ相互作用項を有するモデルを抽出できることが確認できた．

本手法は，想定される応答曲面モデル数が極めて多く存在する場合，あるいはモデル算定に必要なサンプリングデータ数が事前に不明な場合においても，サンプリングデータを逐次算出しながら推定の更新および算定を行うため，応答曲面モデル算定の自動化に適していると考えられる．

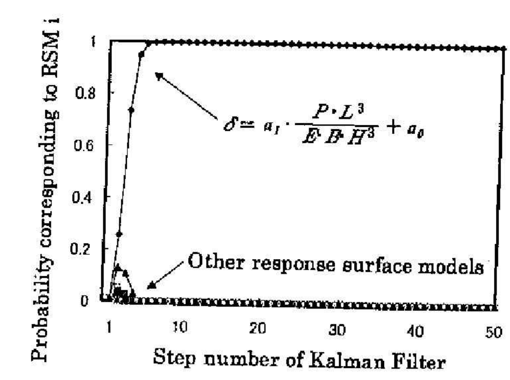

Fig. 4　Probability variation corresponding to RSM i

3・2　半導体パッケージの構造信頼性問題への適用例　近年，携帯型情報機器の軽薄短小化が加速し，CPUなどの搭載部品に対する小型化の要求がいちだんと高まっている．こうした背景のもと，小型化が可能でかつ高周波対応などの電気特性に優れるフリップチップBGAパッケージの実装が行われている．通常，半導体パッケージは信頼性を保証するために，温度サイクル試験(TCT)をクリアする必要があるが，半導体パッケージとマザーボードの線膨張率差に起因して，構造強度上最も弱いはんだバンプ接合部にひずみが集中する傾向にある．このため，はんだ接合部の熱疲労寿命評価に関して多くの研究がなされており，応力シミュレーション技術[15]を利用した強度設計が行われている．本適用例では，セラミックのインタポーザを用いたフリップチップBGAパッケージ(FC-BGA)におけるはんだ接合部の強度信頼性設計をモチーフとした(表5，図5参照)．

ただし，はんだバンプ(0.5 mm角の立法体)は外周から1.0 mmピッチの配列とし，インタポーザ寸法とバンプ数に応じて列数(外側から配列)を設定した．各設計変数に関する設計空間を表6に示す．

ただし L：インタポーザ寸法(正方形の一辺長さ)，N_P：1/4領域のはんだバンプ数(ピン数)，α_B：マザーボード線膨張率，ΔT：TCT温度範囲(ただし，上限温度は125°Cで固定，下限温度は−25〜−65°Cの間で設定，保持時間は0.5 hで固定)である．これら4変数を設計変数，半導体パッケージの長期信頼性に関わ

Table 5　Material properties

	Young's Modulus	Coefficient of thermal expansion
Ceramic interposer	270GPa	7.2ppm/°C
Mother board	20GPa	17ppm/°C
Chip	170GPa	3.5ppm/°C
Underfill resin	11GPa	25ppm/°C

Table 6　Ranges of variables about general RSM

Variable	Range	Level
L (mm)	30 〜50	3
N_p(1/4 region)	75〜250	3
α_B (ppm)	12.5〜20.5	3
ΔT(°C)	150 〜190	3

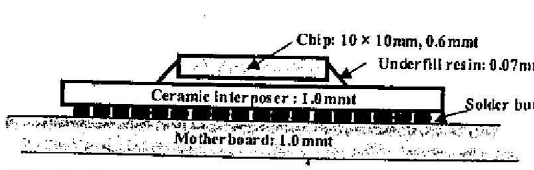

Fig. 5　FC-BGA Package using ceramic interposer

るはんだバンプの非弾性ひずみ範囲($\Delta\varepsilon_{in}$)を構造応答として，設計空間における適切な近似解空間を構築する過程で，多くの応答曲面モデルを算定することにより，各設計変数間の相互作用情報を抽出することを試みた．ここで，はんだバンプに生じる非弾性ひずみ範囲は，共晶はんだの非弾性特性を考慮し，弾クリープ解析[15]により算出した(最も厳しいコーナ部のはんだバンプ内の平均ひずみを抽出)．3･1節と同様に，従来より行われている実験計画法に基づく応答曲面近似式(L 18)を作成した結果［式(24)参照］．分散分析における誤差が9%程度(表7参照)，最大誤差が±20%程度となり，信頼性解析を行うには十分な精度を確保できないことが明らかになった．

従来法による応答曲面近似式：

$$\begin{aligned}\Delta\varepsilon_{in} = & -0.477-0.001\,48L+0.000\,029\,6L^2\\ & -0.000\,103N_p-0.000\,000\,009\,92N_p^2\\ & +0.004\,42\alpha_B+0.000\,021\,1\alpha_B^2\\ & +0.005\,27\Delta T-0.000\,015\,0\Delta T^2 \quad\cdots\cdots\cdots(24)\end{aligned}$$

3･2･1　部分空間における応答曲面近似式　設計空間における実験計画法により得たサンプリング点のみでは，精度の良い応答曲面近似式を作成できない場合においても，いくつかの変数のみ可変で他の変数は固定した部分空間の近似式を高精度に作成することは容易である場合が多い．このような部分空間におけるいくつかの高精度な近似式をベースに算出可能な多くのサンプリング点を活用し，モデルの冗長性を排除できる可能性がある．本適用例では，事前に，ピン数 N_P に関する近似式2個(他の変数は固定値)およびマザーボード線膨張率 α_B に関する近似式1個(他の変数は固定値)の合計三つの近似式を，それぞれ5個の数値実験点に対する最小二乗法により部分空間において高精度(最大誤差：±3%)に作成された状態を設定した．応答曲面近似式の設計空間と得られた近似式をそれぞれ表8と式(25)～(27)に示す．

部分空間における応答曲面近似式1(Local RSM 1)：

$$\Delta\varepsilon_{in}=0.038\,6-0.000\,179N_P+0.000\,000\,372N_P^2 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots(25)$$

部分空間における応答曲面近似式2(Local RSM 2)：

$$\Delta\varepsilon_{in}=0.064\,8-0.000\,210N_P+0.000\,000\,236N_P^2 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots(26)$$

部分空間における応答曲面近似式3(Local RSM 3)：

$$\Delta\varepsilon_{in}=-0.040\,8+0.003\,18\alpha_B+0.000\,061\,6\alpha_B^2 \quad\cdots\cdots\cdots\cdots(27)$$

3･2･2　各種の応答曲面モデルの想定　本適用例では，3･1･2項と同様に，応答曲面モデルの各項を，(1)各設計変数，(2)各設計変数の2乗，(3)各設計変数の3乗，(4)各設計変数の逆数，(5)各設計変数の2乗の逆数，(6)各設計変数の3乗の逆数，(7)各設計変数の対数，(8)各設計変数の対数の逆数，(9)1.0，の9種類について，総当たりの積算の組合せにより想定した(定数項を除いた項数が1項の場合：9^4=6 561とおり，2項の場合：$9^4\times9^4$=43 046 721とおり)．また，応答曲面モデルの項数は，所定の近似精度(最大誤差：±5%)を確保できるまで，少ない項数から順次増やしていく方式とした(本適用例の場合は定数項を除いた項数が2項で打切り)．参考のため，初期の数値実験点(18データ)に対する自由度調整済み決定係数，情報量基準(AIC，MDL)の値を，上位10モデル(RSM 1～RSM 10)について表9に示す．本適用例でも，限定されたサンプリング点に対し従来の指標を用いるのみでは，各モデルの有意差の判定が困難であることがわかる．また，決定係数の値からわかるように，近似誤差が極めて小さくなっている．しかしながら，近似モデルの冗長性のため，対象とする設計空間内の未知データに対する誤差(汎化誤差)が大きくなっている可能性もあり，冗長性に関する判定が必要である．

3･2･3　応答曲面近似式の更新・算定　3･1･3項と同様に，部分空間において構築した応答曲面近似式により算出したサンプリング点と，設計空間における実験計画法(DOE)より得たサンプリング点を観測データとして，カルマンフィルタによりパラメータ $\boldsymbol{a}_k$

Table 7　Analysis of variance (L 18)

Variable	Dimension	Degree of Freedom	Variance	F ratio	Effective ratio
L	1	1	9.54E-04	1.80E+01	11.4%
	2	1	3.52E-05	6.63E-01	0.00%
N_p	1	1	1.25E-03	2.37E+01	15.2%
	2	1	3.35E-08	6.32E-04	0.00%
α_B	1	1	5.03E-03	9.50E+01	62.8%
	2	1	4.56E-07	8.60E-03	0.00%
ΔT	1	1	1.16E-04	2.18E+00	0.79%
	2	1	1.45E-04	2.73E+00	1.16%
Error		9	4.31E-05		8.68%
Total		17			100.0%
	F(0.05) = 5.591447, F(0.01) = 12.24638				

Table 8　Ranges of variables about local RSM

Variable	Range of Local RSM1	Range of Local RSM2	Range of Local RSM3
L (mm)	30 (Fix)	50 (Fix)	40 (Fix)
N_p (1/4 region)	75～250	75～250	150 (Fix)
α_B (ppm)	16.5 (Fix)	16.5 (Fix)	12.5～20.5
ΔT (℃)	170 (Fix)	170 (Fix)	170 (Fix)

Table 9　General index of RSM assessment

Index	RSM1	RSM2	RSM3	RSM4	RSM5	RSM6	RSM7	RSM8	RSM9	RSM10
R^2_{adjust}	0.997	0.997	0.997	0.996	0.996	0.996	0.996	0.996	0.995	0.991
AIC	21.9	21.9	21.9	21.8	21.8	21.8	21.8	21.8	21.8	21.7
MDL	13.3	13.3	13.3	13.3	13.3	13.3	13.3	13.3	13.3	13.2

の推定値を求め，各応答曲面近似式を更新しつつ，多重仮説検定により，逐次，各応答曲面モデルを算定することを試みた．

本適用例でも，設計空間におけるL18の実験計画法より得られたサンプリング点18データと，部分設計空間において一様乱数を発生させることにより得た18データ(三つの部分空間の各応答曲面近似式から6データずつ算出)を合わせた合計36データを逐次，各ステップにおいて新たに算出することにより，カルマンフィルタのサンプリングデータとして与えた．

各応答曲面モデルがカルマンフィルタの各ステップにおいて更新されるごとに多重仮説検定を行い，各モデルの適合確率の変化を求めた結果を図6に示す．ただし，初期ステップにおいて誤差が極めて大きいモデルは削除し，上位100モデル(最大誤差が±50%程度以内)についてのみ表示している．また，図中の a_1, a_2, a_3 は応答曲面近似式の係数を示している．この結果から，式(28)に示す応答曲面モデル(参考：表9掲載以外のRSM)が今回探索した範囲では最も適合度が高いことが判明した．ただし，式(28)は適合確率変化が定常に落ち着いた50ステップ時の更新結果を示している．

$$\Delta\varepsilon_{in}=L\cdot\Delta T\cdot\left(0.000\,003\,57\cdot\frac{\alpha_B}{\log N_P}-0.000\,006\,05\right)-0.008\,27 \quad (28)$$

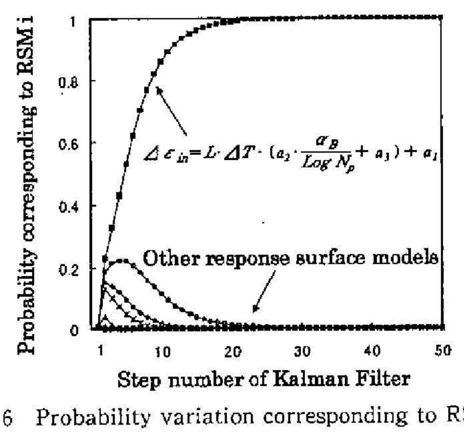

Fig. 6　Probability variation corresponding to RSM i

本適用例の場合，ピン数(N_P)が少なくはんだバンプの剛性が無視できる場合には，コーナ部のはんだバンプにおけるひずみ範囲は $L\cdot\Delta T\cdot(\alpha_B-\alpha_P)$ に近似的に比例する(ここで α_P はパッケージの線膨張率を示している)．今回得られた応答曲面モデルは，マザーボードの線膨張率にピン数に応じた修正係数が掛けられた形になっている．対象とする設計空間内では，ピン数が増えるに従い，パッケージとマザーボードの線膨張率差の影響がはんだバンプの剛性により小さくなることが，縮約された近似モデルからわかる．

本適用例では，設計空間に対する未知データ(近似モデルの更新に用いていない数値実験点)に対する誤差(汎化誤差)の検証を行った．まず，実験計画法(直交表L81)に基づく検証用の数値実験点を，応力シミュレーションにより新たに算出した．次に，本手法適用前後の二つの応答曲面近似式の式(24)と式(28)から得られたデータと比較した．81個の未知データに対する残差の比較結果を図7，8それぞれに示す．本手法適用後の近似式では，適用前に比べて分散推定値が1/10になっていることより，汎化誤差が小さくなっていることが確認できた．

4. 結　　言

ベイズ理論に基づく状態量推定アルゴリズムのカルマンフィルタおよび多重仮説検定を用いて，応答曲面近似式を高精度化することを試みた．はりのたわみ問題と半導体パッケージにおける構造信頼性問題に試適用することにより，応答曲面近似式を効率的に更新できること，また，多重仮説検定により新たな相互作用項を含んだ複数の応答曲面モデルを，適合確率を指標に算定できることを示した．これにより，応答曲面近似式を高精度化しつつ，対象とする設計空間内における各変数の相互作用項に関する情報を抽出できる可能性を示した．

本報で提案した手法は，設計空間データが複数の領域において応答曲面近似式として蓄積されるに従い，

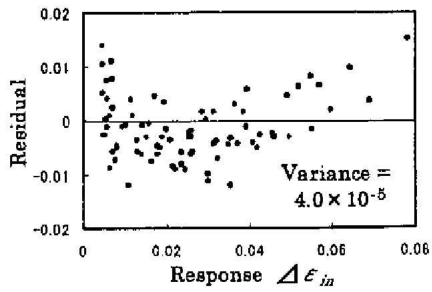

Fig. 7　Residual of initial response surface model (L 18)

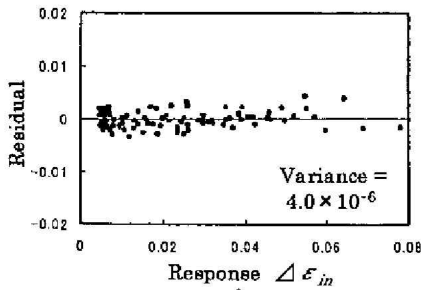

Fig. 8　Residual of updated response surface model

能動的に相互作用項に関する情報抽出を行い，応答曲面近似式を高精度化するための探索的かつ検証的方法といえる．得られる結果は，部分空間の応答曲面近似式の数や範囲，探索する基底の種類にも依存するため，今後，さまざまな事例を通じて，適用性や適用限界を見極めていく必要があると考えられる．

最後に，本研究を実施するにあたり有益なご助言をいただいた(株)東芝研究開発センター・菊入信孝氏，横浜国立大学・清水久二教授，福田隆文助手に感謝する．

文　　献

(1) 柏村孝義・白鳥正樹・于強，機論，63-607, A (1997), 624-629.

(2) 柏村孝義・白鳥正樹・于強，実験計画法による非線形問題の最適化，(1998), 8-22, 朝倉書店.

(3) Myers, R. H. and Montgomery, D. C., *Response Surface Methodology : Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, (1995), 208-278, John Wiley & Sons.

(4) 廣畑賢治・川上崇・向井稔・川村法靖・于強・白鳥正樹，機論，67-660, A (2001), 1297-1304.

(5) 宮田悟志・工藤啓治，計算工学講演会論文集，6-2 (2001), 695-698.

(6) 福田隆文・清水久二，安全工学，28-4 (1989), 211-216.

(7) 清水久二，設備安全工学ー新しい検査・監視技術ー，(1989), 107-143, 裳華房.

(8) Watanabe, K., Patton, R., ほか2名編，*Fault Diagnosis in Dynamic Systems*, (1989), 411-438, Prentice Hall.

(9) 福田隆文・ほか2名，機論，59-560, C (1993), 982-988.

(10) 譚章，応答曲面法による非線形問題の最適設計入門 (2.応答曲面法)，日本機械学会講習会教材，99-73 (1999), 11-23.

(11) 星谷勝・斉藤悦郎，データ解析と応用，(1991), 13-38, 鹿島出版会.

(12) 片山徹，応用カルマンフィルタ，(1983), 83-107, 朝倉書店.

(13) 坂元慶行・石黒真木夫・北川源四郎，情報量統計学，(1982), 42-64, 共立出版.

(14) 韓太舜・小林欣吾，情報と符号化の数理，(1994), 249-275, 岩波書店.

(15) Mukai, M., ほか4名，*JSME Int. J.*, 41-2, A (1998), 260-266.

日本機械学会論文集

TRANSACTIONS OF THE JAPAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS

A編

平成15年7月

July 2003

第683号

第69巻

日本機械学会