

非周期ミクロ構造を有する複合材料の 代理均質化モデルによるマルチスケール解析

Surrogate Constitution-based Multi-scale Analysis Method for Nonperiodic Microstructures

中村明莉¹⁾ 山中耀介²⁾ 新宅勇一³⁾ 森口周二⁴⁾ 寺田賢二郎⁵⁾

Akari Nakamura, Yosuke Yamanaka, Yuichi Shintaku, Shuji Moriguchi and Kenjiro Terada

¹⁾東北大学 工学研究科 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: akari.nakamura.q5@dc.tohoku.ac.jp)

²⁾修(工) 東北大学 工学研究科 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: yosuke.yamanaka.s7@dc.tohoku.ac.jp)

³⁾博(工) 筑波大学 システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: shintaku@kz.tsukuba.ac.jp)

⁴⁾博(工) 東北大学 災害科学国際研究所 准教授 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: s_mori@irides.tohoku.ac.jp)

⁵⁾博(工) 東北大学 災害科学国際研究所 教授 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: tei@irides.tohoku.ac.jp)

We propose a method for decoupled multiscale analysis of elastoplastic composites with arbitrary microstructures by combining “Numerical Material Test (NMT) allowing nonperiodic distributions of constituent materials” and a method of creating surrogate homogenized constitutive law. First, a constitutive database is constructed of the macroscopic stress-strain responses that are obtained by a series of NMTs with minimal kinematic constraint for nonperiodic microstructures. Next, by using the response database for training, we create a surrogate model of the macroscopic constitutive law whose hyperparameters are identified by optimization methods with cross-validation. Finally, we carry out a numerical simulation in which a macrostructure with the created surrogate model is subjected to tensile loading and subsequent unloading, and discuss the capability of the proposed method.

Key Words : *computational homogenization, multi-scale analysis, minimal kinematical constraint, nonperiodic microstructures, numerical material testing*

1. はじめに

繊維強化プラスチックに代表される複合材料は、そのミクロスケールでの構成材料やその分布特性を制御することで所望のマクロスケールの物性が得られることから、様々な業界で活用されている。均質化法に基づくマルチスケール解析は、複合材料における構成材料分布の幾何学的周期性を仮定したミクロ情報からマクロ物性の特徴付けを行ったうえでマクロ構造の力学挙動を評価するために行われ、一般に分離型のアプローチが採用される。従来の分離型マルチスケール解析では、ミクロ構造に対して数値材料試験 (Numerical Material Test: NMT) [1] を行うことで、仮定したマクロ構成則のパラメータを決定し、マクロ構造の解析を実施する。しかしながら、複合材料の多くは、図1に示す一方GFRPのようにミクロ構造内部で強化材分布にばらつきや非周期性が見られ、周期性の仮定の可否やマクロ物性のばらつきへの影響などの議論が盛んに行われている。また、非線形問題では分離型マルチスケール解析におけるマクロ構成則の同定が実用上の課題として認識されている。そこで本研究では、新宅ら [2] が提案した“ミクロ構造の非周期性を許容する NMT”と山中ら [3] が提案した“代理均質化構成則”の構築法を組み合わせ、任意のミクロ構造を有する弾塑性複合材料の分離型マルチスケール解析手法を提案する。

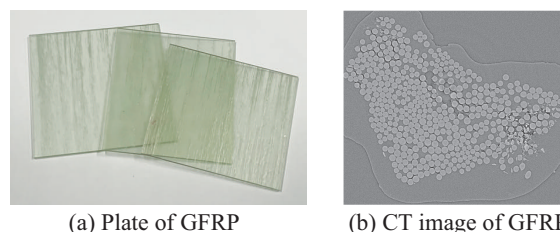


図-1 ガラス繊維強化樹脂 (Glass Fiber Reinforced Plastics, GFRP)

2. 均質化法に基づく数値材料試験

本節では、均質化法に基づくマルチスケール問題について概説する。まず、従来のミクロ構造に周期性を仮定する均質化法について述べ、境界条件に最小運動学的制約 (minimal kinematic constraint) [4] を課す定式化について述べる。

(1) ミクロ構造の周期性を仮定したツースケール問題

非均質体 Ω^ϵ を構成する周期的なミクロ領域 (ユニットセル) を ϵY と表し、等価な均質体の領域 (マクロ領域) を Ω と表す。ここで、 ϵ はマクロ領域に対するミクロ領域の大きさを表すパラメータである。マクロ領域 Ω に導入したマクロ座標系 $\mathbf{x} \in \Omega$ に対応して、この

ϵ を用いて関連付けられるミクロ座標系

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \quad (1)$$

を導入する。これらの座標系 \mathbf{x}, \mathbf{y} にそれぞれ分布するマクロ、ミクロ変数を用いてユニットセル内の運動を記述する。マクロ変位、マクロ応力、マクロひずみをマクロ座標系に依存する変数として、それぞれ $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}), \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}), \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x})$ と表し、ミクロ変位、ミクロ擾乱変位、ミクロ応力、ミクロひずみをミクロ座標系の独立変数として、それぞれ $\mathbf{u}, \mathbf{u}^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ と表す。なお、ここで \mathbf{x} はマクロ物質点を特定するためのパラメータと見なされる。これらの変数を用いて、ミクロ構造に周期境界条件を課す場合の2スケール境界値問題の支配方程式は以下の式で表される。

マクロ境界値問題 (2)

$$\begin{cases} \nabla_x \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) + \tilde{\mathbf{b}} = 0 & \text{in } \Omega \\ \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle & \text{in } \Omega \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) = \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \\ \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{u}} & \text{on } \partial\Omega_u \\ \tilde{\mathbf{t}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{t}} & \text{on } \partial\Omega_\sigma \end{cases}$$

ミクロ境界値問題 (3)

$$\begin{cases} \nabla_y \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 & \text{in } Y \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) & \text{in } Y \\ \mathbf{u} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} + \mathbf{u}^* & \text{in } Y \\ \mathbf{u}^*(\mathbf{x}, \mathbf{y})|_{\partial Y_{+k}} - \mathbf{u}^*(\mathbf{x}, \mathbf{y})|_{\partial Y_{-k}} = \mathbf{0} & \text{in } Y \quad \dots (*) \end{cases}$$

ここで、 $\tilde{\mathbf{b}}$ は物体力であり、 $\bar{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{t}}$ はそれぞれディリクレ境界 $\partial\Omega_u$ とノイマン境界 $\partial\Omega_\sigma$ における変位と荷重ベクトルである。また、ミクロ応力 $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は任意のミクロ材料構成則を用いて計算される。

$\langle \bullet \rangle$ はミクロ領域 Y における体積平均であり、

$$\langle \bullet \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_Y \bullet dY \quad (4)$$

で定義される。また、 $\nabla_x^{(s)}(\bullet)$ は、 $\nabla_x(\bullet)$ の対称成分であり、次のように定義した。

$$\nabla_x^{(s)}(\bullet) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \bullet}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \bullet}{\partial x} \right)^\top \right] \quad (5)$$

(2) 周期境界条件の緩和

本項では、新宅ら [2] が提案した非周期性を許容する NMT について説明する。

まず、マクロひずみ $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x})$ はミクロひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ の体積平均から、次式のように求めることができる。

$$\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) &= \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \\ &= \langle \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \\ &= \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \langle \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

このマクロひずみが式 (2)₃ のマクロひずみと整合するための必要条件は次式で表される。

$$\langle \nabla_y^{(s)} \mathbf{u} \rangle = 0 \quad (7)$$

新宅らは、周期境界条件 (*) に代わって式 (7) をミクロ境界値問題の制約条件として用いることを提案した。ただし、式 (7) のみを制約条件とする場合、ミクロ構造の剛体運動が考慮されておらず、2スケール境界値問題の解が不定となるため、その並進運動と剛体回転を抑えるために次式のような制約条件を加える必要がある。

$$\langle \mathbf{u}^* \rangle = 0 \quad (\text{並進運動に関する制約条件}), \quad (8)$$

$$\langle \nabla_y^{(a)} \mathbf{u}^* \rangle = 0 \quad (\text{剛体回転に関する制約条件}), \quad (9)$$

ここで、 $\nabla_y^{(a)}(\bullet)$ は次式で定義される $\nabla_x(\bullet)$ の反対称成分である。

$$\nabla_y^{(a)}(\bullet) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \bullet}{\partial y} \right) - \left(\frac{\partial \bullet}{\partial y} \right)^\top \right] \quad (10)$$

ここで、式 (7) および (9) を満足する必要十分条件は、

$$\langle \nabla_y \mathbf{u}^* \rangle = 0 \quad (11)$$

である。したがって、2スケール境界値問題は以下のように書き改められる。

マクロ境界値問題 (12)

$$\begin{cases} \nabla_x \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) + \tilde{\mathbf{b}} = 0 & \text{in } \Omega \\ \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle & \text{in } \Omega \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) = \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \\ \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{u}} & \text{on } \partial\Omega_u \\ \tilde{\mathbf{t}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{t}} & \text{on } \partial\Omega_\sigma \end{cases}$$

ミクロ境界値問題 (13)

$$\begin{cases} \nabla_y \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 & \text{in } Y \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) & \text{in } Y \\ \mathbf{u} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} + \mathbf{u}^* & \text{in } Y \\ \langle \mathbf{u}^* \rangle = 0 & \text{in } Y \\ \langle \nabla_y \mathbf{u}^* \rangle = 0 & \text{in } Y \end{cases}$$

(3) 最小運動学的制約つき2スケール問題

新宅らは最小運動学的制約条件 (8) と (11) の下での2スケール最適化問題を次のように定義した。

$$\{\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{u}^*\} = \arg \inf_{\tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{V}}} \inf_{\mathbf{w}^* \in \mathcal{V}} \mathcal{F}(\tilde{\mathbf{v}}; \mathbf{w}^*) \quad (14)$$

$$\mathcal{F}(\tilde{\mathbf{v}}; \mathbf{w}^*) = \int_\Omega \langle \mathcal{W} \rangle \Omega - \int_{\partial\Omega_\sigma} \bar{\mathbf{t}} \cdot \tilde{\mathbf{v}} d\Omega - \int_\Omega \tilde{\mathbf{b}} \cdot \tilde{\mathbf{v}} d\Omega \quad (15)$$

$$\mathcal{W}(\nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{v}} + \nabla_y^{(s)} \mathbf{w}^*) = \frac{1}{2} (\nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{v}} + \nabla_y^{(s)} \mathbf{w}^*) : \mathbb{C} : (\nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{v}} + \nabla_y^{(s)} \mathbf{w}^*) \quad (16)$$

$$\mathcal{V} := \{\mathbf{w}^*(\bullet, \mathbf{y}) \mid \text{Eqs. (8) and (11)}\} \quad (17)$$

$$\tilde{\mathcal{V}} := \{\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) \mid \tilde{\mathbf{v}} = \bar{\mathbf{u}} \text{ on } \partial\Omega_u\} \quad (18)$$

この制約付きミクロ-マクロ最適化問題について、式 (11) に対応する Lagrange の未定乗数 $\lambda \in \mathbb{R}^{N^{\text{dim}} \times N^{\text{dim}}}$ を導入して、次の Lagrange 関数を定義する。

$$\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{v}}^*, \lambda; \mathbf{v}) = \mathcal{F}(\tilde{\mathbf{v}}; \mathbf{w}^*) + \int_\Omega \lambda : \langle \nabla_y \mathbf{w}^* \rangle d\Omega \quad (19)$$

ここで, $\lambda_{ij} \in L_2(\Omega; \mathbb{R})$ である. このとき, 制約付き最適化問題を解くことと, Lagrange 関数の停留値を求めることは同義である. したがって, 各変数についての $\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{v}}, \lambda; \mathbf{v})$ の停留を取ることで次式のような支配方程式が導出される.

$$\begin{aligned} D\mathcal{L}[\delta \mathbf{v}^*] &= 0 \\ \rightarrow \int_{\Omega} \langle \boldsymbol{\sigma} : \nabla_y^{(s)} \delta \mathbf{u}^* \rangle d\Omega + \int_{\Omega} \lambda : \langle \nabla_y \delta \mathbf{u}^* \rangle d\Omega &= 0, \\ \forall \delta \mathbf{u}^* \in \mathcal{V} \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} D\mathcal{L}[\delta \tilde{\mathbf{v}}] &= 0 \\ \rightarrow \int_{\Omega} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} d\Omega - \int_{\partial\Omega_{cr}} \tilde{\mathbf{t}} \cdot \delta \tilde{\mathbf{u}} d\Omega - \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{b}} \cdot \delta \tilde{\mathbf{u}} d\Omega &= 0, \\ \forall \delta \tilde{\mathbf{u}} \in \tilde{\mathcal{V}}_0 \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} D\mathcal{L}[\delta \lambda] &= 0 \\ \rightarrow \int_{\Omega} \delta \lambda : \langle \nabla_y \mathbf{u}^* \rangle d\Omega &= 0, \quad \forall \delta \lambda \in L_2(\Omega; \mathbb{R}) \end{aligned} \quad (22)$$

ここに, $\tilde{\mathcal{V}}_0 := \{\delta \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \mid \delta \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \text{ on } \partial\Omega_u\}$ である.

3. RBF 補間に基づく代理均質化モデル

本節では, 山中ら [3] が提案した RBF 補間を用いたマクロ構成則の代理均質化モデルについて説明する.

(1) 数値材料試験によるマクロ応力-ひずみ関係の取得

従来の分離型マルチスケール解析において, NMT より得られたマクロ応力-マクロひずみ関係からマクロ構成則の関数形を仮定し, 最適化アルゴリズムなどを用いてパラメータを同定している. この際, 山中らは次のようなマクロ応力とマクロ変形を表す変数の組を取得することを提案した.

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{f}) \quad (23)$$

$$\mathbf{f} = \begin{Bmatrix} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{acc}} \end{Bmatrix} \quad (24)$$

ここで, $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ と $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ は, それぞれ Voigt 表記のマクロ応力とマクロひずみであり, $\boldsymbol{\phi} \in \mathbb{R}^{N_o}$ はマクロ構成則を代理するベクトル値関数, $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{N_i}$ は説明変数ベクトルである. 説明変数の一つである $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{acc}}$ は, 弾塑性材料の履歴依存性を考慮するために導入されたマクロ累積ひずみであり, その成分は次式のように定義される.

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{\text{acc}} = \int_0^t \dot{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_j \left\{ H(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{\text{max}}) + H(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{\text{min}} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j) \right\} ds \quad (25)$$

ここに, $\dot{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_j$ は擬似時間 t に関するマクロひずみ速度であり, $H(\bullet)$ はヘビサイド関数である. また, $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{\text{max}}, \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{\text{min}}$ はそれぞれ荷重経路の最大ひずみと最小ひずみであり, 次式のように定義した.

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{\text{min}} = \min_{s \in [0, t]} \{ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j(s) \mid s \in [0, t] \} \quad (26)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{\text{max}} = \max_{s \in [0, t]} \{ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j(s) \mid s \in [0, t] \} \quad (27)$$

時間増分を Δt とすると, 擬似時刻 t_{n+1} は Δt を用いて次のように表すことができる.

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t \quad (28)$$

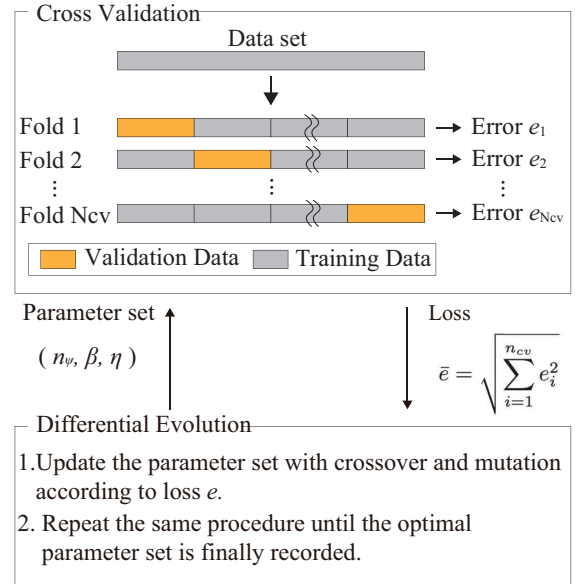


図-2 パラメータ最適化

このとき, マクロ累積ひずみはマクロひずみ増分 $\Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j = \Delta t \dot{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_j$ を用いて次のように表される.

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,n+1}^{\text{acc}} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,n}^{\text{acc}} + \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j \left\{ H(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,n+1} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,n}^{\text{max}}) + H(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,n}^{\text{min}} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,n+1}) \right\} \quad (29)$$

ここで, \bullet_n, \bullet_{n+1} はそれぞれ擬似時刻 t_n, t_{n+1} における値である.

(2) RBF 補間

RBF 補間とは, データ点 \mathbf{f} に対する応答 $\boldsymbol{\phi}$ を放射基底関数 (radial basis function, RBF) で補間する方法である. 既知のデータ点 $\mathbf{f}_{(i)}$ における応答 $\boldsymbol{\phi}_{(i)}$ を次のように定義する.

$$\boldsymbol{\phi}_{(i)} = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{f}_{(i)}) = \{ \phi_{(i)1} \quad \phi_{(i)2} \quad \phi_{(i)N_o} \}^T \quad (30)$$

また, 任意の入力 \mathbf{f} と $\mathbf{f}_{(i)}$ の距離をユークリッドノルムを用いて次のように定義する.

$$r_{(i)}(\mathbf{f}) := \|\mathbf{f} - \mathbf{f}_{(i)}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{N_i} (f_j - f_{(i)j})^2} \quad (31)$$

放射基底関数 ψ は距離 r を独立変数とするスカラー値関数であり, 山中らは ψ をパラメータ n_ψ の値によって識別される次の関数で定義した.

$$\psi(r_{(i)}(\mathbf{f})) = \begin{cases} n_\psi = 1: & \left\{ 1 + \left(\frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \right)^2 \right\}^{1/2} \\ n_\psi = 2: & 1 + \frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \\ n_\psi = 3: & \left\{ 1 + \left(\frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \right)^2 \right\}^{-1/2} \\ n_\psi = 4: & \left\{ 1 + \frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \right\} \\ n_\psi = 5: & \exp \left\{ - \left(\frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \right)^2 \right\} \end{cases} \quad (32)$$

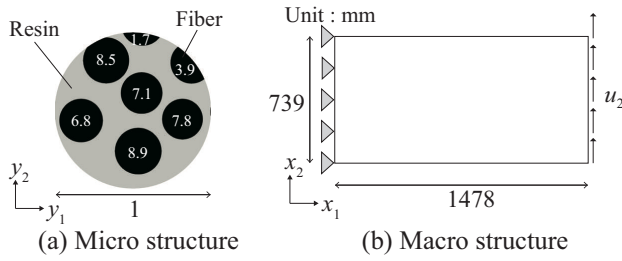


図-3 ミクロ構造とマクロ構造

ここで、 β はハイパーパラメータである。

この放射基底関数を用いて、マクロ構成則を代理するベクトル値関数 ϕ を次のように定義する。

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_c} \omega_{(i)} \psi(r_{(i)}(f)) \quad (33)$$

ここで、 N_c は補間データの数である。また、 $\omega_{(i)} \in \mathbb{R}^{N_o}$ は重み係数であり、線形方程式

$$W = \Psi^{-1} \cdot P \quad (34)$$

の解として得ることができる。ここで、 P 、 W はそれぞれ次のように定義される応答行列と重み係数行列である。

$$P = \{\phi_{(1)} \quad \dots \quad \phi_{(N_c)}\}^T \in \mathbb{R}^{N_c \times N_o} \quad (35)$$

$$W = \{\omega_{(1)} \quad \dots \quad \omega_{(N_c)}\}^T \in \mathbb{R}^{N_c \times N_o} \quad (36)$$

また、 Ψ はカーネル関数であり、次式で定義される。

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi(r_{(1)}(f_{(1)})) & \dots & \psi(r_{(N_c)}(f_{(1)})) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi(r_{(1)}(f_{(N_c)})) & \dots & \psi(r_{(N_c)}(f_{(N_c)})) \end{bmatrix} \quad (37)$$

ここで、式 (33) の代理モデル ϕ は放射基底関数と重みの線型結合であることから、 f に関して連続である。しかし、式 (34) の重みを用いた場合、応答局面に局所的な振動が見られることが知られている。そこで山中らは、応答局面の振動を抑制するために正則化パラメータ η を用いてカーネル関数を次のように置き換えている。

$$\Psi \approx \Psi + \eta I \quad (38)$$

代理モデルの応答が適切な値となるためには、教師データに応じて n_ψ 、 β 、 η の値を適切に定める必要がある。これらの値は理論的に決定不可能であるため、図 2 に示す差分進化 [5] と交差検証 [6] のアルゴリズムを用いて次式の誤差を最小化するようにパラメータを最適化する。

$$\bar{e} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n_{cv}} e_i^2} \quad (39)$$

$$e_i = \sqrt{\sum_{i_o=1}^{N_o} \sum_{i_t=1}^{N_t} \frac{(\phi_{i_o}(f_{(i_t)}) - \phi_{(i),i_o})^2}{N_t}} \quad (i = 1, \dots, n_{cv}) \quad (40)$$

なお、 $n_{cv} \in \mathbb{N}$ は差分検証におけるデータ分割数、 $N_t \in \mathbb{N}$ は教師データを分割して作成した検証用データの数である。

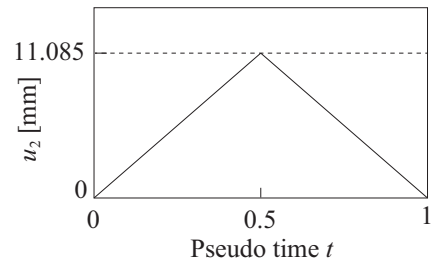


図-4 マクロ構造に与える強制変位

4. 数値計算例

本節では図 3 (a) に示す非周期性を有するミクロ構造の代表体積要素モデル（以下、RVE モデル）に対して、第 2 節で述べたミクロ構造の非周期性を許容する NMT を実施し、代理均質化モデルを作成する。ここで、図中の各繊維部分に示す数字は、それぞれの体積分率である。その後、図 3 (b) に示すマクロ構造に対して、図 4 の強制変位を与えて解析を行うことで提案手法の性能を例示する。

(1) RVE モデル

RVE モデルは、図 5 (a) に示す GFRP の CT(Computed Tomography) 画像の円部分を切り出して作成した。本研究では、樹脂と繊維の変形は十分に小さいものとする。微小変形理論を採用する。樹脂は von Mises の降伏基準に非線形硬化則を加えた弾塑性モデルで表現し、繊維には炭素繊維を仮定して等方性の線形弾性体とした。それぞれの材料モデルの具体形を以下に示す。

材料モデル

樹脂

$$\text{Cauchy 応力} \quad \sigma = \mathbb{C} : (\varepsilon - \varepsilon^p)$$

$$\text{降伏関数} \quad \phi_y(\sigma, \alpha) = \sqrt{J_2(\sigma(s))} - \sigma_y(\alpha)$$

$$\text{硬化関数} \quad \sigma_y(\alpha) = \sigma_{y0} + H_y \alpha + R_y \{1 - \exp(-\beta \alpha)\}$$

$$\text{流れ則} \quad \dot{\varepsilon}^p = \gamma N$$

$$\text{硬化則} \quad \dot{\alpha} = \gamma$$

$$\text{流れベクトル} \quad N = \frac{\partial \phi}{\partial \sigma}$$

$$\text{Kuhn-Tucker 条件} \quad \gamma \geq 0, \phi \leq 0, \gamma \phi = 0$$

炭素繊維

$$\text{Cauchy 応力} \quad \sigma = \mathbb{C} : \varepsilon$$

材料パラメータを表 1 に示す。なお、樹脂の材料パラメータは山本らが同定した値 [7] を使用した。

(2) オフライン計算

RVE モデルに対して様々なパターンのマクロひずみを与えて非周期性を許容する NMT[2] を行い、式 (35) の説明変数行列 P を作成する。その後、ハイパーパラメータを最適化して重み係数を求めることで、代理均質化モデルを作成する。

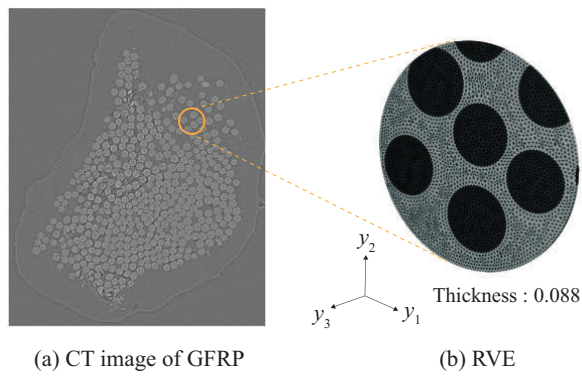


図-5 RVE モデルの作成

表-1 材料パラメータ

Material parameter (Matrix)		Value
Young's modulus	$E[\text{MPa}]$	2.3×10^5
Poisson's ratio	$\gamma[-]$	0.20
Initial yield strength	$\sigma_{y0}[\text{MPa}]$	19.306
Linear hardening modulus	$H_y[\text{MPa}]$	2.466
Non-linear hardening modulus	$R_y[\text{MPa}]$	24.68
Exponential hardening parameter	$\beta[-]$	60.7
Material parameter (Fiber)		Value
Young's modulus	$E[\text{MPa}]$	3.9×10^3
Poisson's ratio	$\gamma[-]$	0.35

説明変数行列 \mathbf{P} を作成するために、様々なマクロひずみの負荷除荷経路を用意する。その際、載荷するマクロひずみ比率 $(\frac{\tilde{\epsilon}_{11}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{\tilde{\epsilon}_{22}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{\tilde{\epsilon}_{12}}{\|\tilde{\epsilon}\|})$ を 110 パターン用意し、各パターンごとにマクロひずみのノルム $\|\tilde{\epsilon}\|$ の最大値を 0.1% から 1% まで 0.1% 刻みで変化させて 10 種類の載荷履歴を設定する。よって、合計 1100 経路のマクロひずみを用意し、NMT を行う。また、データ点 f は各マクロひずみ比率ごとに 131 点取得しており、教師データ点 f の数は合計 $110 \times 131 = 14,400$ である。得られた教師データを全て用いてパラメータ n_ψ, β, η を最適化し、代理均質化モデルを作成する。以下に、最適化により得られたハイパーパラメータを示す。

$$\begin{pmatrix} n_\psi \\ \beta \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 9.981 \times 10^{-3} \\ 9.349 \times 10^{-6} \end{pmatrix}$$

(3) 代理均質化モデルの精度検証

得られた代理均質化モデルの精度検証のため、教師データと異なるマクロひずみ履歴を 1190 種作成して代理モデルに与え、対応する NMT の結果と比較すると、代理モデルの平均絶対誤差率は以下のように算出された。

$$\text{Error} = \frac{1}{N_v} \sum_{i=1}^{N_v} \frac{\|\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{surr}} - \tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}\|}{\|\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}\|} = 0.1093[\%] \quad (41)$$

ここで、 N_v は検証に用いたデータ数であり、今回は 15,589 個使用した。また、 $\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}$ 、 $\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{surr}}$ はそれぞれデータ点 (i) における NMT 結果と代理モデルの応答として

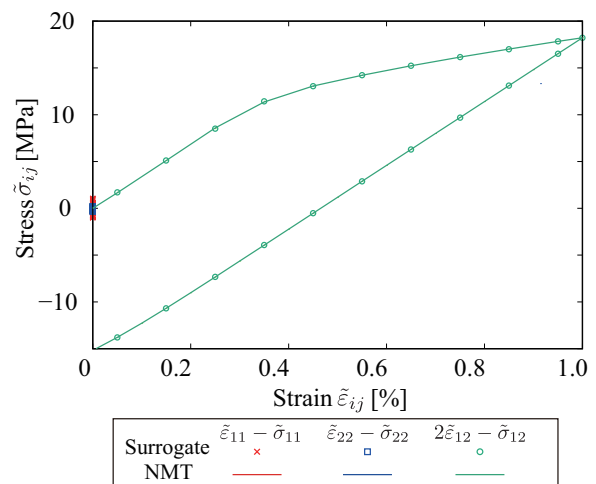


図-6 代理モデルの応答の検証

得られたマクロ応力であり、 $\|\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}\|$ はデータ点 (i) が存在する経路の $\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}$ のノルムの平均値である。

比較検証の一例として、RVE モデルに対してマクロひずみ $\tilde{\epsilon} = [0 \ 0 \ 0 \ 0.01 \ 0 \ 0]$ を増分的に負荷し、その後マクロひずみが 0 になるように除荷する NMT により得られたマクロ応力-マクロひずみ曲線と、同じマクロひずみ履歴を与えた際の代理均質化モデルの応答の比較を図 6 に示す。図より、代理モデルと NMT の結果が概ね一致していることが確認でき、作成した代理均質化モデルは NMT と同等のマクロ応力-マクロひずみ応答を表現可能であるといえる。

(4) オンライン計算

作成した代理均質化モデルを用いて、図 3(b) に示す梁状のマクロ構造の有限要素解析を行う。境界条件として、左端の変位を固定し、右端の y_2 軸方向に図 4 に示す強制変位を与える。解析には図 7(a) に示す 8 節点四角形要素からなるメッシュを用いる。また、比較対象として図 7(b), (c) に示す炭素繊維をランダムに配置したメッシュを 6 節点三角形要素を用いて 2 種類作成し、直接解析を実施する。ここで、直接解析とはミクロ構造の非均質性を直接マクロ構造に反映させて行う解析のことである。

図 9 は右端の強制変位が最大となったときの最大主応力図を示している。図より、いずれの解析ケースにおいても応力が左下に集中していることを確認できる。また、図 8 は各ケースにおける自由端の鉛直方向の荷重-変位曲線を示している。まずグラフから、Direct analysis 1 と 2 の結果が概ね一致しており、直接解析の結果がミクロ構造の寸法に対して収束していることが確認できる。また、代理均質化モデルを使用した解析結果は直接解析と比べて、曲線の傾き、最大値ともに直接解析よりも小さいことが確認できる。このような挙動を示す原因は代理均質化モデルの RBF 補間の精度ではなく、代理均質化モデルを作成するための学習データの特徴が関与していると考えられる。本研究では、学習データを作成する際の NMT において非周期性を許容する制約条件を採用したが、新宅らはこの手法を用いて弾性体の

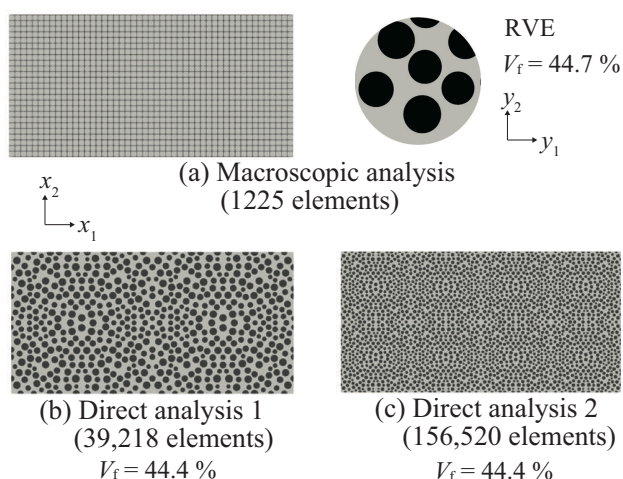


図-7 解析メッシュ

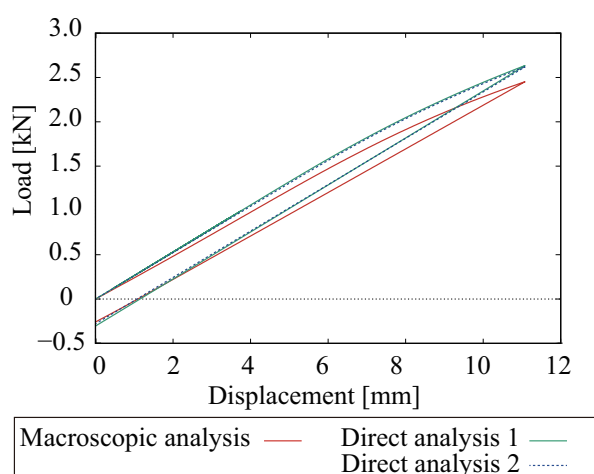


図-8 モデル右端の荷重-変位曲線

複合材料の NMT を実施した結果，得られるマクロ弾性係数が周期境界条件を課した場合よりも 0.8% から 6% 程度小さくなることを報告している [2]．実際，代理モデルの結果は強制変位最大時において Direct analysis 2 の値よりも 7% 小さく，新宅らの結果と同様の傾向が見られる．このような特徴を有する NMT 結果を学習データとして使用したことで，作成した代理均質化モデルに剛性の低下が反映され，荷重-変位曲線が直接解析を下回ったと考えられる．したがって，代理均質化モデルと直接解析の結果の誤差を抑制するためには，制約条件そのものを改良する必要があるが，これらは今後の課題としたい．

5. 結論

本研究では，弾塑性材料からなる非周期的なマイクロ構造を有する複合材料の代理均質化モデルを用いたマルチスケール解析手法を提案した．具体的には，まず繊維強化樹脂の CT スキャン画像から非周期性を有する RVE モデルを作成し，様々なマクロひずみを与えて非周期性を許容する NMT を行った．次に，得られたマクロ応力-マクロひずみ関係のデータに RBF 補間を

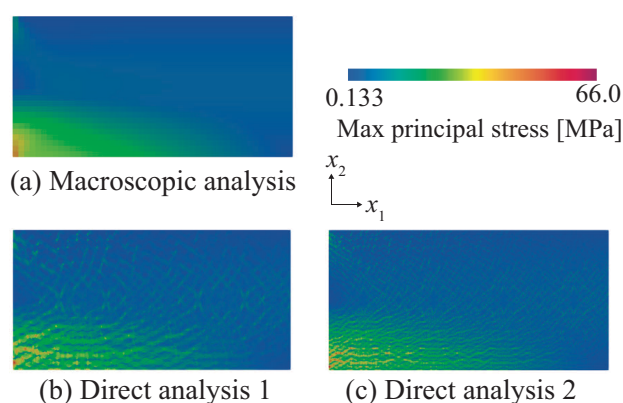


図-9 強制変位が最大のときの最大主応力分布

適用し，代理均質化モデルを構築した．そして，代理均質化モデルの精度検証を行ったあと，マクロ問題として梁の荷重/除荷解析を行い本手法の妥当性を検討した．その結果，代理均質化モデルは NMT の結果と同等のマクロ応力-マクロひずみ応答を表現可能であることが確認できた．一方で，代理均質化モデルを用いたマクロ解析の荷重変位曲線は直接解析の結果を下回ることが確認された．この原因としては本研究で採用した NMT の境界条件が影響していると考えられるため，今後はその解決策を講じる．

参考文献

- [1] 山本晃司寺田賢二郎. 数値材料試験-有限要素法によるマルチスケール解析-. 丸善出版株式会社, Tokyo, 2021.
- [2] 寺田 賢二郎新宅 勇一. 非周期性を許容する均質化法に基づく数値材料試験(ミクロ擾乱変位およびマクロひずみを未知変数とした定式化). 日本機械学会論文集, Vol. 88, No. 909, pp. 22-00049-22-00049, 2022.
- [3] Yosuke Yamanaka, Seishiro Matsubara, Norio Hiramaya, Shuji Moriguchi, and Kenjiro Terada. Surrogate modeling for the homogenization of elastoplastic composites based on rbf interpolation. [Preprint](#).
- [4] S. D. Mesarovic and J. Padbidri. Minimal kinematic boundary conditions for simulations of disordered microstructures. *Philosophical Magazine*, Vol. 85, No. 1, pp. 65-78, 2005. Cited By :69.
- [5] M. STONE. Cross-validators choice and assessment of statistical predictions. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, Vol. 36, No. 2, pp. 111-147, 1974.
- [6] R. Storn and K. Price. Differential evolution - a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of Global Optimization*, Vol. 11, No. 4, pp. 341-359, 1997. Cited By :19885.
- [7] 寺田 賢二郎山本 晃司. 数値材料試験データに基づく異方性 hill 定数の同定. 日本機械学会論文集, Vol. 82, No. 840, pp. 16-00056-16-00056, 2016.