

熱力学的構成理論に基づく数値材料試験による マルチスケール解析

Multiscale analysis by using Numerical material testing
to identify potential based on thermodynamic constitutive theory

小嶋俊輝¹⁾, 新宅勇一²⁾, 寺田賢二郎³⁾
Toshiki Kojima, Yuichi Shintaku and Kenjiro Terada

¹⁾筑波大学大学院システム情報工学研究科 (305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: s1911105@u.tsukuba.ac.jp)

²⁾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)

³⁾東北大学災害科学国際研究所 (〒 980-0845 仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1)

In this study, we propose a multiscale analysis by using Numerical Material Tests (NMTs) to identify potential that represents energy dissipation due to plasticity in the framework of thermodynamic constitutive theory. Whereas the existing multi-scale analysis decoupled between boundary value problems in the micro- and macro-scale makes us assume a specific form as the material constitutive law in the macro-scale and identify the macroscopic material parameters from the macroscopic stress-strain curves, the proposed method allows us to assume not such a specific form but the existence of Helmholtz free energy and dissipation potential in the macro-scale. In the proposed NMT, Helmholtz free energy associated with plastic hardening in the macro-scale is determined by isogeometric analysis from the change of the macroscopic yield stress under some loading paths as the numerical solution of Poisson's equation to satisfy continuity of the macroscopic thermodynamic force. The capability of our proposed NMT is demonstrated throughout a simple numerical example.

Key Words : Multi-scale Analysis, Numerical Material Tests, Isogeometric Analysis

1. 緒言

繊維強化プラスチックに代表される複合材料は、微視 (ミクロ) 的にみれば非均質性を有しており、ミクロな構造的・幾何学的性質が巨視 (マクロ) 的な機械的性質を支配している。したがって、複合材料のミクロ構造における非均質性を反映して発現するマクロ材料特性を予測し、評価するための手法が求められる。そのため、マクロ構造を周期的に配置されたミクロ構造 (以下、ユニットセルと呼ぶ) と同一視することによって、仮想的に均質化したマクロ材料特性を求める均質化法に基づくマルチスケール解析に関する研究が盛んに行われている [1,2]。

均質化法に基づくマルチスケール解析にはミクロ解析とマクロ解析を連成して解く手法と連成せずに解く手法がある。連成型マルチスケール解析 [3,4] では、マクロ構造の各計算点に配置されたユニットセルについて、マクロ変形に対する自己つり合い状態を満たすミクロ応力を求める。そして、ミクロ応力の体積平均によって算出されたマクロ応力を用いてマクロ境界値問題を解くという手法であり、連成型マルチスケール解析は FE^2 と呼ばれている [5]。しかし、マクロ構造の各計算点ごとにミクロ境界値問題を解くため、莫大な計算コストを必要とし、実用的な問題への適用は非現実的である。

一方、計算コストを軽減させるための手法として非連成型マルチスケール解析が提案されている [6]。非連成型マルチスケール解析 [7] では、予めマクロ構成則を

仮定し、ユニットセルに対して数値材料試験を行うことで目的に応じたマクロ応力-マクロひずみ関係を取得し、マクロ材料構成則の材料パラメータを同定するという手法である。連成型マルチスケール解析のようにマクロ構造の各計算点においてミクロ構造解析を行う必要が無い場合、大幅に計算コストを削減することができる。しかし、非連成型マルチスケール解析の精度は仮定したマクロ構成則に大きく依存するため、実用的な問題への適用は、適切な既存のマクロ材料構成則を選択することができる場合に限る [8,9]。

連成型および非連成型マルチスケール解析の課題を解決する手法として、データ駆動型のマルチスケール解析が提案されている [10,11,12]。Ghavamian らが提案した Recurrent Neural Network (RNN) を用いた履歴依存性材料の代理均質化モデル [13] では、従来の FE^2 と比較して、解析における計算コストは抑えられると述べられている。しかし、RNN の学習には非常に大規模なデータセットが必要のために学習時間と解析時間がトレードオフの関係にあること、および非物理的な手法であるために、学習したデータの範囲外を補外することは難しいことなどの課題が残る。また、学習データの範囲外における材料挙動は、エネルギーの回復のように物理的制約を満たしていない可能性がある。

一方、材料構成則を求めるデータ駆動型の手法として、Flaschel らは、Efficient Unsupervised Constitutive Law Identification and Discovery (EUCLID) を提案している [14]。EUCLID は、応力データを必要とせず、1 回の試

験で得られる変位場と正味反力データのみを用いて、スパース推定による簡潔な塑性モデルの選択を行うことで、従来のデータ駆動型手法や機械学習手法よりも効率的に材料構成則の代替モデルが得られることを示している。しかし、RNN による代替モデルと同様に、学習したデータの範囲外を補外することは難しいため、1回の試験で得られる学習データを最大化するための試験片の形状や荷重条件の選択が課題となっている。また、EUCLID はミクロな材料特性をマクロな材料特性に反映させる手法ではないので、マルチスケール解析とは異なる位置づけである。

以上のことから、物理的な制約条件により材料挙動を正しく予測できること、および計算コストを抑えられるマルチスケール解析手法が求められている。一方、一般的な弾塑性モデルでは、連続体の不可逆過程によるエネルギーの散逸をポテンシャルを用いて規定する熱力学的構成理論に基づいている。これにより、エネルギーの回復のように非物理的な現象が発生することなく、物理的に正しい材料挙動を与える。

そこで、本研究では熱力学的構成理論に基づくポテンシャルを取得するための数値材料試験を提案する。マクロ材料構成則を仮定する従来の非連成型マルチスケール解析に対して、本研究では数値材料試験から得られたデータから硬化に関する熱力学的応力を直接抽出し、ポテンシャルを得るため、不要な仮定や近似を課さない。さらに、数値材料試験の試験条件は自由に与えられるため、材料挙動を特徴づけるために十分な試験を行うことができる。具体的には、数値材料試験から取得したマクロ応力-マクロひずみ関係から硬化に関する熱力学的応力を離散的な数値解として算出する。そして、硬化に関する Helmholtz の自由エネルギーがポアソン方程式を満たすと仮定し、ポアソン方程式に対して Isogeometric 解析 (Isogeometric Analysis : IGA) を実施することで連続的なポテンシャルを得る。

2. 熱力学的構成理論に基づく数値材料試験

(1) 弾性構成則

本節では、熱力学的構成理論に基づくマクロ材料構成則を仮定する。はじめに、変形は微小であり、マクロ全ひずみ \mathbf{E} は、

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^p \quad (1)$$

と加算分解できると仮定する。ここで、 \mathbf{E}^e はマクロ弾性ひずみ、 \mathbf{E}^p はマクロ塑性ひずみである。弾性挙動は線形かつ等方的であると仮定すると、弾性変形によるエネルギー Ψ^e は、

$$\Psi^e = \frac{1}{2} \mathbf{E}^e : \mathbb{C}^H : \mathbf{E}^e \quad (2)$$

と定義できる。ここで、 \mathbb{C}^H はマクロ均質化弾性係数である。式 (2) より、弾性構成則は、

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^H : \mathbf{E}^e \quad (3)$$

と表現される。ここで、 $\boldsymbol{\Sigma}$ はマクロ Cauchy 応力である。

(2) 熱力学的定式化

熱力学的構成理論に基づいて、Helmholtz の自由エネルギーは、

$$\psi(\mathbf{E}^e, \alpha) = \psi^e(\mathbf{E}^e) + \psi^p(\alpha) \quad (4)$$

と表現できると仮定する。ここで、 $\psi^e(\mathbf{E}^e)$ は弾性ひずみによる自由エネルギー、 $\psi^p(\alpha)$ は硬化に関する自由エネルギー、および α は硬化に関する内部変数である。式 (4) の時間微分は、

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi^e}{\partial \mathbf{E}^e} : \dot{\mathbf{E}}^e + \frac{\partial \psi^p}{\partial \alpha} : \dot{\alpha} \quad (5)$$

と表される。Clausius-Duhem の不等式は、

$$\mathcal{D} = \boldsymbol{\Sigma} : \dot{\mathbf{E}} - \rho(\dot{\psi} + \dot{T}s) + q \frac{\text{grad} T}{T} \geq 0 \quad (6)$$

と表される。ここで、 ρ は密度、 T は温度、 s はエントロピー、および q は熱流束である。式 (5) を代入すると、式 (6) は、

$$\begin{aligned} \mathcal{D} = & \left(\boldsymbol{\Sigma} - \rho \frac{\partial \psi^e}{\partial \mathbf{E}^e} \right) : \dot{\mathbf{E}}^e + \boldsymbol{\Sigma} : \dot{\mathbf{E}}^p - \rho \dot{T}s \\ & - \rho \frac{\partial \psi^p}{\partial \alpha} : \dot{\alpha} - q \frac{\text{grad} T}{T} \geq 0 \end{aligned} \quad (7)$$

と得られる。ここで、 $\rho \psi^e = \Psi^e$ とおき、均一温度場を仮定すると、式 (7) は、

$$\mathcal{D} = \boldsymbol{\Sigma} : \dot{\mathbf{E}}^p - \mathbf{A} : \dot{\alpha} \geq 0 \quad (8)$$

と得られる。ここで、 \mathbf{A} は、

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{N^{\text{dim}} \times N^{\text{dim}}} \mathbf{A}^{(i)} \equiv \sum_{i=1}^{N^{\text{dim}} \times N^{\text{dim}}} \rho \frac{\partial \psi^p}{\partial \alpha^{(i)}} \quad (9)$$

と定義される硬化に関する熱力学的応力である。ここで、上付き文字 (i) は変形方向、および N^{dim} は空間次元を表す。マクロ降伏関数を $\Phi^{p(i)}(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{A}^{(i)})$ ($i = 1, 2, \dots, N^{\text{dim}} \times N^{\text{dim}}$) とすると、 \mathcal{D} を最大化する最適化問題は、

$$\text{maximize } \mathcal{D} = \boldsymbol{\Sigma} : \dot{\mathbf{E}}^p - \mathbf{A} : \dot{\alpha} \quad (10)$$

$$\text{subject to } \Phi^{p(i)}(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{A}^{(i)}) \leq 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N^{\text{dim}} \times N^{\text{dim}}) \quad (11)$$

と表される。式 (10) および式 (11) で与えられる最適化問題を解くために、未定乗数 $\lambda^{p(i)}$ を用いて、ラグラン

ジュ関数は,

$$\mathcal{L}(\Sigma, A) = \Sigma : \dot{E}^p - A : \dot{\alpha} - \sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} \lambda^{p(i)} \Phi^{p(i)}(\Sigma, A^{(i)}) \quad (12)$$

と得られる。ラグランジュの未定乗数法を用いると、解くべき方程式は,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Sigma} = \dot{E}^p - \sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} \lambda^{p(i)} \frac{\partial \Phi^{p(i)}}{\partial \Sigma} = \mathbf{0} \quad (13)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A} = -\dot{\alpha} - \sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} \lambda^{p(i)} \frac{\partial \Phi^{p(i)}}{\partial A} = \mathbf{0} \quad (14)$$

$$\Phi^{p(i)} \leq 0, \lambda^{p(i)} \geq 0, \Phi^{p(i)} \lambda^{p(i)} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N^{\dim} \times N^{\dim}) \quad (15)$$

と得られる。マクロ降伏関数は,

$$\Phi^{p(i)} = \Sigma_{eq}^{(i)} - \Sigma_y^{(i)}(\alpha^{(i)}) \quad (16)$$

と表現する。ここで、 $\Sigma_{eq}^{(i)}$ はマクロ相当応力である。また、マクロ降伏応力 $\Sigma_y^{(i)}(\alpha^{(i)})$ は、 α と共役な力の変数であるため、 $\Sigma_y^{(i)}(\alpha^{(i)}) = \Sigma_{y0}^{(i)} + A^{(i)}$ である。したがって、式 (13) および (14) より、 \dot{E}^p および $\dot{\alpha}$ は,

$$\dot{E}^p = \sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} \lambda^{p(i)} N^{(i)} \quad (17)$$

$$\dot{\alpha} = \sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} \lambda^{p(i)} H^{(i)} \quad (18)$$

として得られる。ここで、 $N^{(i)}$ および $H^{(i)}$ は,

$$N = \sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} N^{(i)} \equiv \sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} \frac{\partial \Phi^{p(i)}}{\partial \Sigma} \quad (19)$$

$$H = \sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} H^{(i)} \equiv \sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} \frac{\partial \Phi^{p(i)}}{\partial A} \quad (20)$$

と定義される流れベクトルである。

(3) 硬化に関する熱力学的応力の連続式

式 (9) はフーリエの法則に類似していることから、硬化に関する内部変数 α に対して連続な A を得るために、 A に関する連続の式は,

$$\sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} \frac{\partial A^{(i)}}{\partial \alpha^{(i)}} = 0 \quad (21)$$

と仮定できる。式 (21) に式 (9) を代入することにより、硬化に関する自由エネルギー ψ^p に関するポアソン方程

式は,

$$\sum_{i=1}^{N^{\dim} \times N^{\dim}} \frac{\partial^2 \psi^p}{\partial \alpha^{(i)2}} = 0 \quad (22)$$

と得られる。以上により、硬化に関する Helmholtz の自由エネルギーを Isogeometric 解析で求める。

3. 数値解析例

(1) 解析条件

解析に用いた一方向強化材 FE モデルの概観と幾何条件を図 1, 2 および表 1 にそれぞれ示す。図 1 は、図 2 に示す周期的なミクロ構造を代表するユニットセルである。本数値解析において繊維は等方弾性体を採用し、母材は Mises モデルを採用した弾塑性体を仮定する。ミクロモデルの材料構成則および材料パラメータを表 2 および 3 にそれぞれ示す。仮想的な弾性体および仮想的な弾塑性体に対して、単軸引張のモードは y_1 方向 (Mode 1)、 y_2 方向 (Mode 2) および y_3 方向 (Mode 3) の 3 種類、純せん断のモードは y_{12} 方向 (Mode 4)、 y_{23} 方向 (Mode 5) および y_{31} 方向 (Mode 6) の 3 種類の合計 6 種類の変形モードについて、対応するマクロひずみ成分を 1.0%、他の成分はゼロに保持するような数値材料試験 [7] を行った。マクロひずみが 1.0% であるため、均質化弾性係数の各成分は、各変形モードの試験から得られるマクロ応力成分を 100 倍した値である。

(2) 解析結果

各モード試験から得られたマクロ塑性ひずみのノルムとマクロ降伏応力との関係を図 3 に示す。図 3 の (a) において Mode1 と Mode2 のグラフが定性的に等しいことや、(b) において Mode5 と Mode6 のグラフが一致していることから、 y_3 軸に対する径方向には等方的に変形することが確認できる。さらに図 3 の (a) において Mode1 の初期降伏応力が大きいことから、繊維配向方向は剛性が高まり異方性が表れていると考えられる。

図 3 より取得した離散的な硬化に関する熱力学的応力を境界条件として式 (22) を Isogeometric 解析によって解くことで、連続的な硬化に関する自由エネルギー ψ^p を再構築した。図 4 の (a) から (t) は、六次元空間で得られた ψ^p を三次元空間で可視化したものである。

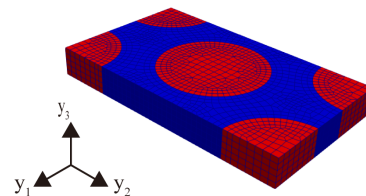


Fig.1 FE model

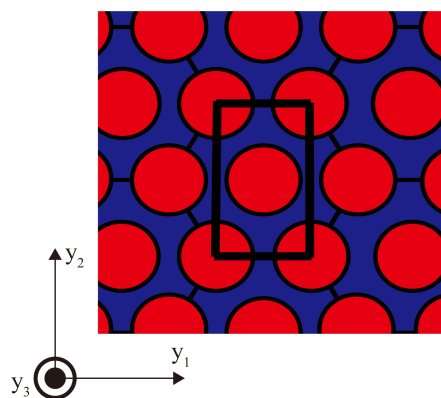


Fig.2 Unit cell

Table.1 Geometrical information

Geometry		Value
Fiber radius	[mm]	0.371
Fiber volume fraction	[%]	50.0

Table.2 Microscopic constitutive models

Plastic**von Mises elastoplastic model**

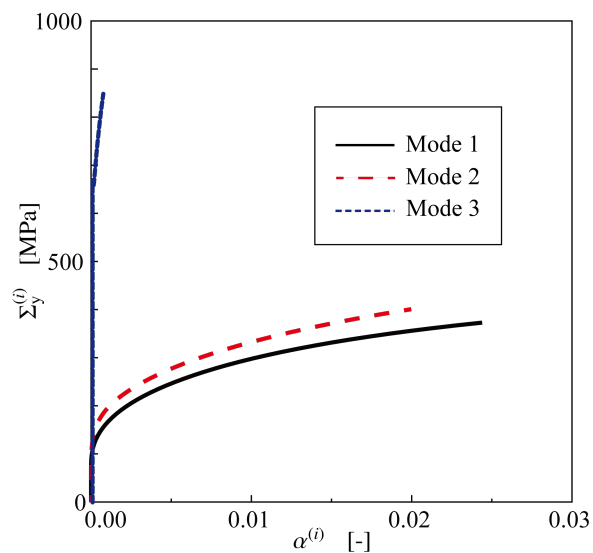
1. Cauchy stress	$\sigma = \mathbb{C} : \varepsilon^e = \mathbb{C} : (\varepsilon - \varepsilon^p)$
2. Yield function	$\phi^p = \sqrt{J_2(\sigma)} - \sigma_y(\alpha)$
3. Flow rule	$\dot{\varepsilon}^p = \dot{\gamma}^p N, N = \frac{\partial \phi^p}{\partial \sigma}$
4. Hardening model	$\sigma_y(\alpha) = \sigma_{y0} + H_y \alpha + R_y \{1 - \exp(-r\alpha)\}$
5. Hardenig Laws	$\dot{\alpha} = \dot{\gamma}^p$
6. Kuhn-Tucker condition	$\dot{\gamma}^p \geq 0, \phi^p \leq 0, \dot{\gamma}^p \phi^p = 0$

Fiber**Linear elastic model**

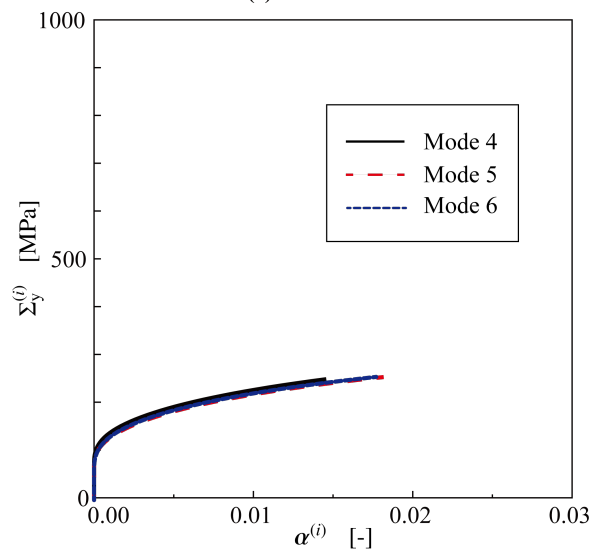
1. Cauchy stress	$\sigma = \mathbb{C} : \varepsilon^e$
------------------	---------------------------------------

Table.3 Material parameters

Material parameters of plastic		Value
Young's modulus	$E[\text{MPa}]$	2.4470×10^4
Poisson's ratio	$\nu[-]$	0.3000
Initial yield stress	$\sigma_{y0}[\text{MPa}]$	100.00
	$H_y[\text{MPa}]$	308.77
Hardening modulus	$R_y[\text{MPa}]$	330.13
	$r_y[-]$	360.37
Material parameters of fiber		Value
Young's modulus	$E[\text{MPa}]$	2.0600×10^5
Poisson's ratio	$\nu[-]$	0.3000



(a) Uniaxial tensile



(b) Shear

Fig.3 change of yield stress obtained by NMT

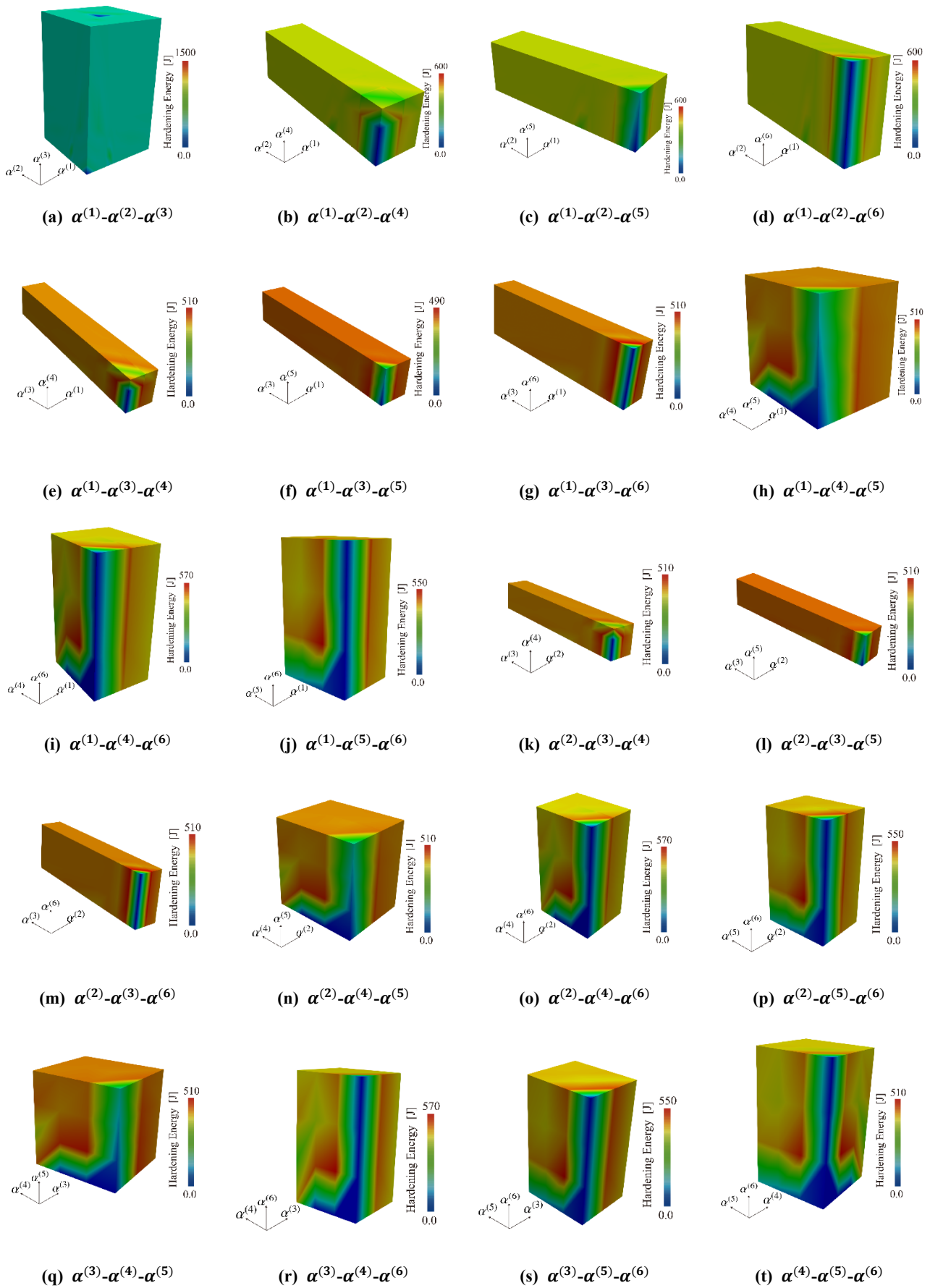


Fig.4 Helmholtz free energy associated with plastic hardening

4. 結言

本研究では、非均質性を有するミクロ構造に対して均質化法に基づくマルチスケール解析を行うことで、マクロ構造における硬化に関する Helmholtz の自由エネルギーを取得するための数値材料試験を行った。

具体的には、ユニットセルを仮想的な弾性体としてみなした場合と仮想的な弾塑性体としてみなした場合のそれぞれについて数値材料試験を行う。そして、同じモード試験の応力の差分から塑性ひずみを求め、マクロ降伏応力を計算することで塑性ひずみと硬化に関するマクロ応力との関係を得る。最後に、硬化に関する Helmholtz の自由エネルギーがポアソン方程式を満たすと仮定し、IGA による補間を行うことで、硬化に関するポテンシャルを再構築できることを例示した。今後は、得られた硬化に関する Helmholtz の自由エネルギーを用いてマクロ解析を行うことで提案手法の妥当性を示す。

参考文献

- [1] P.Kanouté, D.P.Boso, J.L.Chaboche, and B.A.Schrefler. Multiscale methods for composites: A review. *Archives of Computational Methods in Engineering*, Vol. 16, No. 1, pp. 31–75, 2009.
- [2] K.Matouš, M.G.D.Geers, V.G.Kouznetsova, and A.Gillman. A review of predictive nonlinear theories for multiscale modeling of heterogeneous materials. *Journal of Computational Physics*, Vol. 330, pp. 192–220, 2017.
- [3] K.Terada and N.Kikuchi. A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190, No. 40-41, pp. 5427–5464, 2001.
- [4] K.Terada, I.Saiki, K.Matsui, and Y.Yamakawa. Two-scale kinematics and linearization for simultaneous two-scale analysis of periodic heterogeneous solids at finite strain. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 192, No. 31-32, pp. 3531–3563, 2003.
- [5] F.Feyel. A multilevel finite element method (fe2) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 192, No. 28-30, pp. 3233–3244, 2003.
- [6] Robert Fleischhauer, Tom Thomas, Junji Kato, Kenjiro Terada, and Michael Kaliske. Finite thermoelastic decoupled two-scale analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 121, No. 3, pp. 355–392, 2020.
- [7] K.Terada, J.Kato, N.Hirayama, T.Inugai, and K.Yamamoto. A method of two-scale analysis with micro-macro decoupling scheme: Application to hyperelastic composite materials. *Computational Mechanics*, Vol. 52, No. 5, pp. 1199–1219, 2013.
- [8] Risa Saito, Yosuke Yamanaka, Seishiro Matsubara, Tomonaga Okabe, Shuji Moriguchi, and Kenjiro Terada. A decoupling scheme for two-scale finite thermoviscoelasticity with thermal and cure-induced deformations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 122, No. 4, pp. 1133–1166, 2021.
- [9] 山本晃司, 石橋慶輝, 染宮聖人, 平山紀夫, 寺田賢二郎. 繊維強化熱可塑性樹脂の異方性粘弾性構成則における緩和特性と弾性率の温度依存性に関する数値解析的検討. *日本機械学会論文集*, Vol. 85, No. 874, pp. 19–00058–19–00058, 2019.
- [10] J.Yvonnet and Q.-C.He. The reduced model multi-scale method (r3m) for the non-linear homogenization of hyperelastic media at finite strains. *Journal of Computational Physics*, Vol. 223, No. 1, pp. 341–368, 2007.
- [11] Zeliang Liu, M.A. Bessa, and Wing Kam Liu. Self-consistent clustering analysis: An efficient multiscale scheme for inelastic heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 306, pp. 319–341, 2016.
- [12] M.A.Bessa, R.Bostanabad, Z.Liu, A.Hu, Daniel W.Apley, C.Brinson, W.Chen, and Wing Kam Liu. A framework for data-driven analysis of materials under uncertainty: Countering the curse of dimensionality. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 320, pp. 633–667, 2017.
- [13] F.Ghavamian and A.Simone. Accelerating multiscale finite element simulations of historydependent materials using a recurrent neural network. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 357, 2019.
- [14] Moritz Flaschel, Siddhant Kumar, and Laura De Lorenzis. Discovering plasticity models without stress data. *Computational Materials*, 2022.
- [15] R.Hill. Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 11, No. 5, pp. 357–372, 1963.
- [16] R.Hill. On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain. *Proc. R. Soc. London Ser. A-math. Phys. Eng. Sci.*, Vol. 326, No. 1565, pp. 131–147, 1972.
- [17] J.Mandel. Plasticité Classique Et Viscoplasticité. *CISM Lecture Notes*, No. 97, Springer, Udine, 1971.