応用力学論文集 Vol.8, pp.277-285　(2005 年 8 月)　土木学会

非線形均質化理論における2変数境界値問題のミクロ-マクロ非連成近似解法

Decoupled micro-macro analysis method for two-scale BVPs in nonlinear homogenization theory

渡邊育夢*, 寺田賢二郎**
Ikumu WATANABE, Kenjiro TERADA

*学生員　修士 (工学)　東北大学大学院工学研究科土木工学専攻　(〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06)
**正会員　Ph.D.　助教授　東北大学大学院工学研究科土木工学専攻　(〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06)

We propose a new procedure for approximately solving two-scale boundary value problems (BVPs) that can be derived in the framework of mathematical homogenization method for nonlinear heterogeneous solids. Although the micro- and the macroscopic BVPs are strongly coupled in the original algorithm for nonlinear two-scale BVPs, the proposed method enables us to decouple them without losing the distinct features of the two-scale BVP. That is, in this method, the solution for the macroscopic problem still reflects the mechanical behavior characterized for the microscopic one, and vise versa. We carry out representative numerical analyses for the structure with hyperelastic heterogeneous material and that with polycrystalline metal to demonstrate the capability and availability of the proposed method.

Key Words : *Micro-macro Analysis, Homogenization Method, Heterogeneous Media, Nonlinear problem*

1.　はじめに

数学的均質化法に基づくミクロ-マクロ連成解析手法によればミクロスケールの幾何形状や材料挙動を反映したマクロな構成関係の評価とマクロスケールの変形状態を反映したミクロスケールでの変形メカニズムを同時に考慮することが可能となる．このモデル化手法ではスケール間の数理的整合性が常に保たれることから，特に非均質材料の非線形挙動の解析に適しており，ミクロ-マクロ連成解析アルゴリズムの提案[1),2)]や適用例[3)~5)]がこれまで数多く報告されている．

均質化法によって導出される2変数境界値問題は有限要素法による解析が前提となるので，マクロ構造とともにミクロスケールの複雑でかつ任意の非均質性を比較的簡単に考慮することができる．しかしながら，マクロスケールとミクロスケールの双方の構造モデルを詳細な有限要素メッシュで数値解析を実行するとなると2変数境界値問題の数理構造を反映したアルゴリズムの都合で実用上の困難を伴う．すなわち，2変数境界値問題の数値解析ではマクロ構造モデルの全ての応力評価点においてミクロ解析が行なわれることから，マクロ構造モデルの有限要素数を増やすことは指数的に計算コストを増やすことになる．このため，ミクロ問題の解析を個別の CPU に割り当てる並列計算手法も提案されているが[6)]，必要とされるクラスター型計算機は一般的になったとはいえ，未だ実務上の汎用化までは期待できない．ミクロ-マクロ連成解析手法は様々な応用が期待される一方で，このような実用上の問題から多くの研究報告が単純なマクロ一様変形状態を仮定して，ミクロスケールにおける材料や構造特性を反映したマクロ的な材料挙動の定性的な調査に留まっているのが現状である[7)].

現実的な計算コストで同様の計算を実行するために，Fish らは均質化法の枠組みを利用して，ミクロスケールとマクロスケールを別々に解く手法を提案した[8)]．しかし，この手法は厳密に非線形なつりあい状態を評価できない可能性があることが指摘されている[1)]速度形の線形化つりあい式に対して直接漸近展開形の速度場を仮定した均質化法の定式化に基づいている．

そこで本研究では，非線形均質化理論から導かれる2変数境界値問題の数理構造とミクロ-マクロ連成解析アルゴリズムに基づくミクロ-マクロ非連成近似解法を提案する．そして，超弾性体からなる複合材料および非線形性の強い問題として弾塑性体である多結晶金属についての2変数境界値問題に対して提案手法を適用することで，その特徴と有用性を例示する．

2.　2変数境界値問題のミクロ-マクロ非連成近似解法

本節では幾何学的非線形を考慮した均質化法に基づく2変数境界値問題の支配方程式を示すとともに，非線形マルチスケール解析アルゴリズムにおいてスケール間で授受される変数を明示する．そして，その変数を介して，2変数境界値問題をスケールごとに別々に解析する近似解法を提案する．

2.1 2 変数境界値問題

two-scale 運動学により幾何学的非線形性を考慮した均質化法に基づくマルチスケールモデリング[2]では，現配置のミクロ領域 $\mathcal{Y} \subset \mathcal{R}^{n_{\dim}}$ とマクロ領域 $\mathcal{B} \subset \mathcal{R}^{n_{\dim}}$ において，釣り合い式がミクロおよびマクロスケールの位置ベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathcal{Y}$, $\boldsymbol{x} \in \mathcal{B}$ を変数として以下のように与えられる．

• ミクロ構造の境界値問題：

$$\int_{\mathcal{Y}} \boldsymbol{\tau}^0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) : \nabla_y \boldsymbol{\eta}^1 \frac{dy}{J_{\mathcal{Y}}} = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta}^1 \in \mathcal{V}_{\mathcal{Y}}^{\mathrm{per}} \tag{1}$$

$$\mathcal{V}_{\mathcal{Y}}^{\mathrm{per}} = \left\{ \boldsymbol{v} : \mathcal{Y} \mapsto \mathcal{R}^{n_{\dim}} \,\middle|\, v_i \in W^{1,p};\ \mathcal{Y}\text{-periodic} \right\}$$

$$\boldsymbol{\tau}^0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \ \text{[determined by constitutive equations]} \tag{2}$$

• マクロ構造の境界値問題：

$$\int_{\mathcal{B}} \tilde{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{x}) : \nabla_x \boldsymbol{\eta}^0 \frac{dx}{\tilde{J}} - g_{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{\eta}^0) = 0, \quad \forall \boldsymbol{\eta}^0 \in \mathcal{V}_{\mathcal{B}} \tag{3}$$

$$\mathcal{V}_{\mathcal{B}} = \left\{ \boldsymbol{v} : \mathcal{B} \mapsto \mathcal{R}^{n_{\dim}} \,\middle|\, v_i \in W^{1,p},\ \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \text{ on } \Gamma_u \right\}$$

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\|\mathcal{Y}\|} \int_{\mathcal{Y}} \boldsymbol{\tau}^0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\, dy \tag{4}$$

ここで，$J_{\mathcal{Y}}, \tilde{J}$ は $dy = J_{\mathcal{Y}} dY$, $dx = \tilde{J} dX$ で定義される各スケールにおける体積変化を表し，g_{ext} は外力項，$W^{1,p}$ は 1 階の導関数が p 乗可積分な空間 L_p に属す関数の空間である．また，$\boldsymbol{\eta}^1$ と $\boldsymbol{\eta}^0$，$\boldsymbol{\tau}^0$ と $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ は，それぞれミクロおよびマクロスケールにおける変分，Kirchhoff 応力である．各変数の添え字 (0 or 1) は two-scale 収束論[9]の漸近展開法における非均質性の代表長さのオーダーに対応するものである．

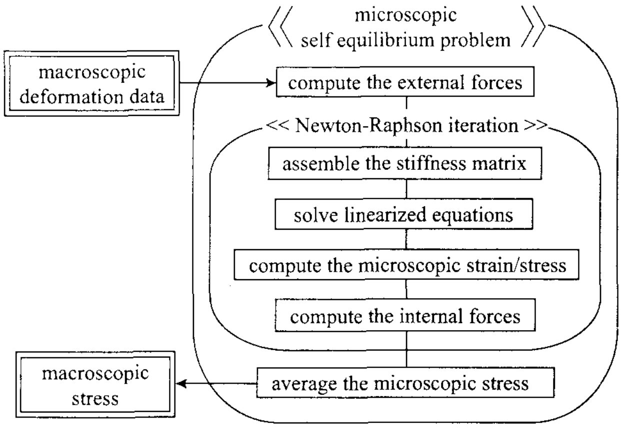
2.2 非線形マルチスケール解析アルゴリズム

ミクロスケールにおける実変位 $\boldsymbol{w}$ は線形変位 $\tilde{\boldsymbol{H}}\,\boldsymbol{Y}$ と周期的に分布するミクロ変位 $\boldsymbol{u}^1$ の和で表される．非線形問題を増分解法により解く場合，この実変位の増分はミクロ解析で求められる $\Delta\boldsymbol{u}^1$ とマクロスケールの変数であるマクロ変位勾配増分 $\Delta\tilde{\boldsymbol{H}}$ を含む項の和として次のように表される．

$$\Delta\boldsymbol{w} = \Delta\tilde{\boldsymbol{H}}\,\boldsymbol{Y} + \Delta\boldsymbol{u}^1 \tag{5}$$

ミクロ解析において，マクロ変位勾配増分 $\Delta\tilde{\boldsymbol{H}}$ は一般的な非線形変形解析における荷重増分に相当するもので，マクロ解析の解として得られるマクロ変数がミクロ解析のデータとして受け渡される．逆に，ミクロスケールからマクロスケールへ受け渡される変数は式 (4) で示したように応力である．すなわち，ミクロ-マクロ連成解析においてミクロ問題はマクロスケールの変形状態からマクロ応力を算出するマクロ構成モデルの役割を果たす．2 変数境界値問題におけるミクロ解析のフローチャートを図–1 に示す．

式 (4) に示したように，2 変数境界値問題の数値解析ではマクロ構造モデルの各応力評価点おいて，マクロ応力を計算するためにはミクロ境界値問題 (1), (2) を満たすミクロ応力を必要とする．したがって，マクロ構造中の物質点の数だけミクロ問題を解かなければならない．また非線形問題の場合，マクロ問題は Newton-Raphson 法などの反復解法を用いて増分的に解かれ，そのたびにミクロ問題を解くことになるため，計算コストは膨大になる．そこで，本論文ではミクロスケールとマクロスケールの境界値問題をスケール間の連成効果を保持しながら別々に解析し，2 変数境界値問題の近似解法を提案する．



図–1 ミクロ解析のフローチャート

2.3 ミクロ-マクロ非連成近似解法

前項で示したようにスケール間で授受される変数はマクロ変位勾配増分 $\Delta\tilde{\boldsymbol{H}}$ とマクロ応力 $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ である．ミクロ問題とマクロ問題について別々に解析を行なうためには，まずミクロ構造とその力学挙動に固有のマクロ均質化構成関係を適切な構成モデルで近似し，代替できればマクロ応答を得るためだけにマクロ構造内の全ての応力評価点でミクロ解析を行なわずに済む．しかもそのマクロ構成モデルは均質化理論から導かれた 2 変数境界値問題の枠組みにおいて近似されたものであるので，これを用いて得られるマクロ応答は各物質点におけるミクロ問題のデータをも近似するとみなして良い．したがって，ミクロ解析による評価を必要とするマクロスケールの物質点があれば，マクロ解析の終了後にマクロ変形データを用いて個別に行なえば良いことになる．以上をまとめると，提案手法では次の手順で数値計算を行なうことになる．

(1) 対象とするミクロ構造に対する数値実験とその結果に基づくマクロ均質化構成モデルの設定と材料パラメータの同定

(2) マクロ均質化構成モデルを用いた single-scale マクロ解析

(3) マクロ変形をデータとする single-scale ミクロ解析

以下では，各手順の説明を行なう．

(1) マクロ均質化構成モデルの設定と材料パラメータの同定

2 変数境界値問題で想定されるミクロ構造に対して数値実験を行い，マクロ均質化構成関係を近似する．ミクロ構造から得られる構成関係をデータベース化してマクロ構成モデルとして用いた研究も報告されている[10]．しかし，この方法では単純な条件下では 2 変数境界値問題の近似解析に適した構成関係を得ることができるものの，データベースの作成に労力を要する，変形 (応力) 履歴を考慮することができないなどの欠点を有する．ここでは，数値実験の結果を再現し得る適当な構成モデルを仮定し，その材料パラメータを同定する．これにより，種々の構成モデルに関する研究成果を反映することができる上，続く (2)(3) のプロセスを既存の汎用 CAE ソフトを用いて実行することができる．実用的には従来から同様の解析が行われてきたと考えられるが，非線形均質化理論から導かれた 2 変数境界値問題の枠組みではこれまで報告例はない．

まず，マクロ構造モデルを単一要素として two-scale 連成解析を行い，ミクロスケールにおける非均質性を反映した，マクロ応力-ひずみ曲線を算出する．これは材料試験に相当し，マクロ的な一軸引張・均等二軸引張・純せん断などの載荷パターンを想定してマクロ材料挙動をシミュレートする．ここでの two-scale 連成解析では単一要素に対するマクロ解析で可能なので，計算コストは主にミクロ解析に費やされる．

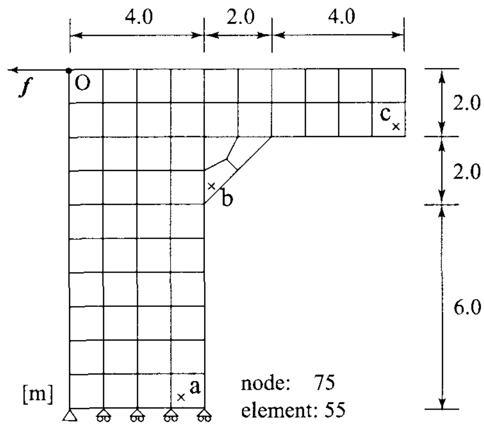
次に，得られたマクロ応答と同じ応答を得られるようなマクロ構成モデルの材料パラメータを最小二乗法に基づく応答曲面法などの最適化手法を用いて同定する．ここでは上記の数値実験でミクロスケールに設定した構成モデルとは独立に任意のマクロ構成モデルを適用することができる．

(2) single-scale マクロ解析

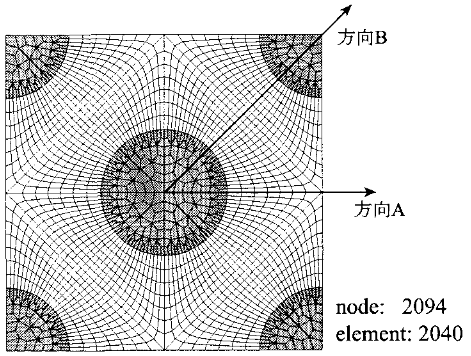
前項で述べたようにして設定されるマクロ構成モデルは two-scale 連成解析においてミクロ解析を通して得られる均質化構成関係を近似したものである．このマクロ構成モデルを用いた single-scale マクロ解析は two-scale 連成解析を行なわずに 2 変数境界値問題におけるマクロ問題の近似解を得ることができると期待される．ここで得られるマクロ変形はマクロ構造内の任意の点におけるミクロ構造の力学挙動評価を目的とする single-scale ミクロ解析のためのデータとして用いられる．

(3) single-scale ミクロ解析

前項の single-scale マクロ解析で得られた変形状態 $\Delta\tilde{\boldsymbol{H}}$ を用いて single-scale ミクロ解析を行なう．近似を重ねる形にはなるが，これによりマクロ構造中の関心のある点だけに着目して対応するミクロ構造の応答を評価することができる．



図–2 マクロ構造モデル



図–3 ミクロ構造モデル (超弾性体)

表–1 ミクロスケールの材料パラメータ

	母材	介在物
弾性定数 E [GPa]	20	200
ポアソン比 ν	0.3	0.3

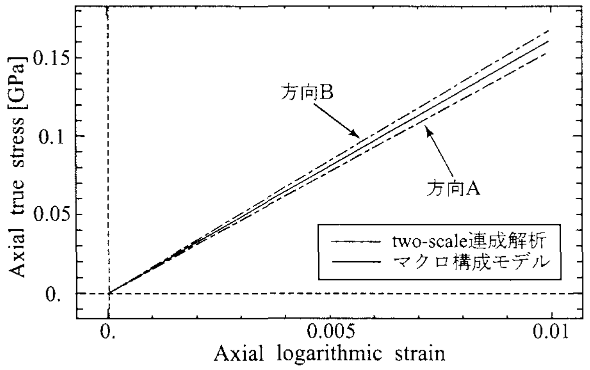
two-scale 連成解析が (マクロ構造モデルのメッシュ数)×(ミクロ解析に要する時間) のように計算コストが増加するのに対して，提案手法では各スケールを別々に，かつ知りたいマクロ物質点のみ対応するミクロ解析を行なうため，詳細なメッシュに対して現実的な計算時間で 2 変数境界値問題の解を近似することができる．

3. 超弾性体への適用

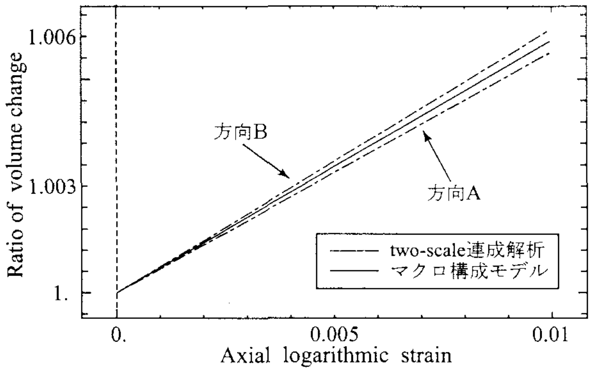
超弾性体からなる複合材料を解析対象として，提案するミクロ-マクロ非連成近似解法の適用例を示す．前節で提示した手続きに沿って解析を実行し，手法の有用性を示すとともに，two-scale 連成解析の結果との比較により簡単な精度検証を行なう．

3.1 解析モデル

数値解析では 2 次元平面ひずみ問題を想定し，図–2 に示すマクロ構造モデルを用いる．ミクロ構造モデルには図–3 のような母材中に球形の介在物の存在する 2



(a) 軸応力-軸ひずみ関係



(b) 体積変化率-軸ひずみ関係

図-4 マクロ構成モデルのパラメータ同定 (超弾性体)

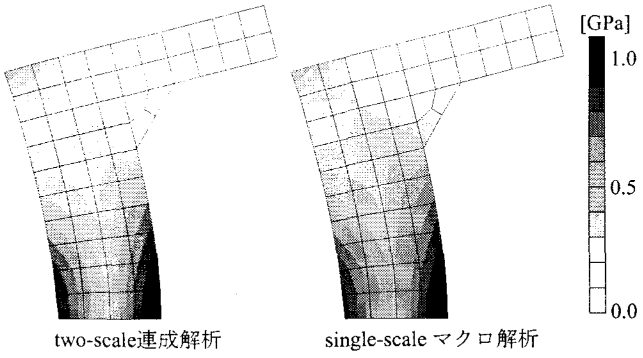


図-5 マクロスケール Mises 応力分布 (超弾性体)

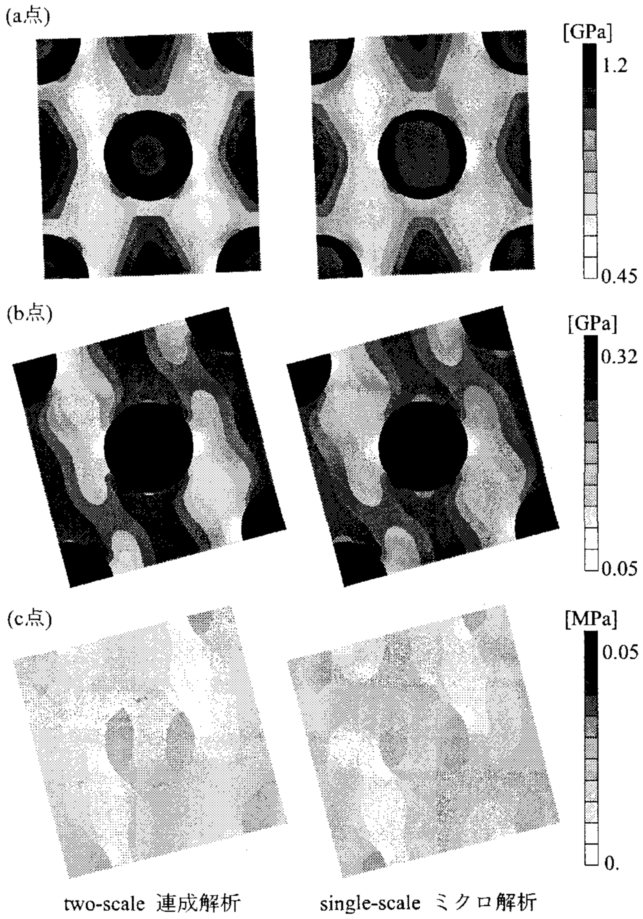


図-6 ミクロスケール Mises 応力分布 (超弾性体)

相材料を考える．両者の体積比は (介在物):(母材)= 1.0 : 2.98 である．各相は Neo-Hooken モデルで構成関係が表現されるような超弾性体と仮定し，材料パラメータを表-**1** で与える．このミクロ構造モデルは介在物の配置に依存して，図中に示した方向 A と方向 B でマクロ的な剛性が最小・最大になるような異方性を有する．

2 変数境界値問題の厳密なミクロ-マクロ連成挙動を考慮する two-scale 連成解析では，マクロ構造モデルの全応力評価点 (すなわち，ガウス積分点) にミクロ構造を対応させて数値解析を行なう[1]．以下では，これを本論文で提案する非連成近似解法を用いた近似解析を試みるが，ミクロ応答の検証を目的として two-scale 連成解析も併せて行う．図-**2** 中の a~c 点はそのミクロ応答を比較するために選んだサンプリング点である．

3.2 マクロ構成モデルの設定と材料パラメータの同定

マクロ解析に用いる構成モデルとしてミクロ問題と同様に Neo-Hooken モデルを仮定して，ミクロ構造に対する数値実験によりその材料パラメータを同定する．

ミクロ構造モデルにおいて，方向 A と方向 B に一軸引張変形を与えた際に得られるマクロ応答を図-**4** に示す．一般に，超弾性構成モデルでも材料パラメータが多数存在する非線形性の強い構成モデルの場合には得られたマクロ応答に対応する材料パラメータのカーブフィッティングを精度良く効率的に行なうために応答曲面法のような最適化手法を用いるべきである．しかし，ここでは，手法全体の枠組みを例示することが目的であるので，方向 A と方向 B の中間的な応答 (図中の実線) が得られるように試行錯誤的にカーブフィッティングを行い，マクロ構成モデルの材料パラメータを E = 14.8[GPa]，ν = 0.29 と設定した．

3.3 ミクロ-マクロ非連成解析

前項で設定したマクロ構成モデルを用いて single-scale マクロ解析を行なう．このプロセスは前節で示した手順 **(2)** に対応しており，マクロ変形状態を解析す

表-2 ミクロ解析の Mises 応力の最大値・最小値 (超弾性体)

	two-scale 連成解析		single-scale ミクロ解析	
[GPa]	Min	Max	Min	Max
a 点	0.616	1.26	0.583	1.213
b 点	0.112	0.342	0.106	0.334
c 点	7.66E-6	2.70E-5	7.22E-6	2.68E-5

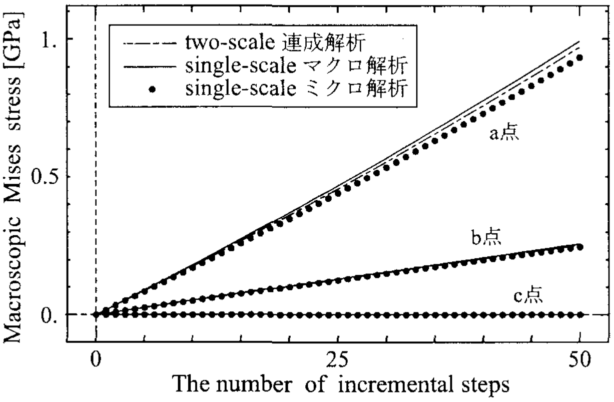


図-7 マクロ Mises 応力の比較

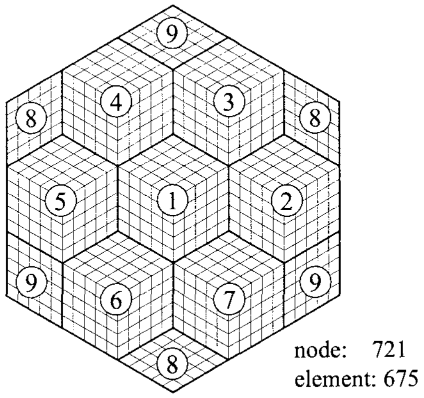


図-8 ミクロ多結晶体モデル

表-3 結晶粒の材料パラメータ

弾性定数	E [GPa]	200
ポアソン比	ν	0.3
降伏応力	$\tau_Y^{(\alpha)}$ [GPa]	0.1
自己硬化定数	$h_{\alpha\beta}$ ($\alpha = \beta$) [GPa]	2.0
潜在硬化定数	$h_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$) [GPa]	3.0

ると同時に図-2 中のサンプリング点におけるマクロ変位勾配増分を求める.

図-2 中の O 点の水平変位が 2.0m となったときのマクロ変形状態と Mises 応力分布を two-scale 連成解析の結果と合わせて図-5 に示す[1]. 図中の Mises 応力の最大値は two-scale 連成解析で 1.12 [GPa], single-scale マクロ解析で 1.15 [GPa] である. 両者の計算結果は多少の差異を含むものの定性的な傾向は一致している.

次に, single-scale マクロ解析において, 評価点 a~c のマクロ変形状態を取得し, このマクロ変形履歴を入力データとして single-scale ミクロ解析を行なう. 具体的には, 各評価点においてマクロ解析時に各荷重増分のマクロ変位勾配増分 $\Delta\tilde{\boldsymbol{H}}$ を記憶しておき, これを入力データとして増分的にミクロ構造に与えてミクロ境界値問題を解いて, ミクロ応答を求める.

図-5 のマクロ変形状態に対応するミクロ解析の変形状態と Mises 応力分布を図-6 に示す. このとき, 各点におけるミクロ構造内の Mises 応力の最大値・最小値を表-2 に示す. ミクロ応答も多少の誤差を含むが提案手法の方法論としての妥当性を主張するには十分な精度といえる.

また, 図-7 は増分計算中の点 a~c におけるマクロ Mises 応力の変化である. ここで, single-scale ミクロ解析では式 (4) で示すようにマクロ応力をミクロ応力の体積平均値で算出している. 各点において, 3 つの数値解析結果はほぼ同じ応答を示しており, 完全な整合性はないものの良好な近似精度であるといえる. これは図-5 と図-6 がほぼ同一の結果であることを反映している.

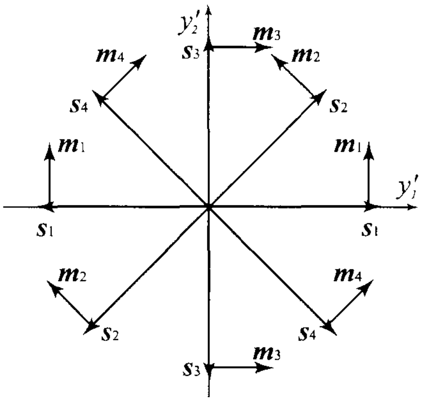
この適用例では, two-scale 連成解析で得られるマクロ構成モデルが異方性を示すにも関わらず, single-scale マクロ解析では等方なマクロ構成モデルを用いた. より適したマクロ構成モデルを用いることで, さらに信頼性の高い近似解析を行なうことが出来ると期待される.

最後に, 計算効率について考察する. 本適用例に関して, 計算に要した時間は従来の two-scale 連成解析では 66 CPU 時間であったのに対して, 提案手法では全てのプロセスに要した時間の合計でも 30 分ほどで終了した. さらに, single-scale ミクロ解析は複数の評価点の計算を同時に実行できるため, 計算時間はさらに短縮できる. なお, ここでの計算は Opteron 2.0 GHz の CPU を搭載した PC 上で NAGWare FORTRAN95 compiler ver.5.0 を用いて行なった.

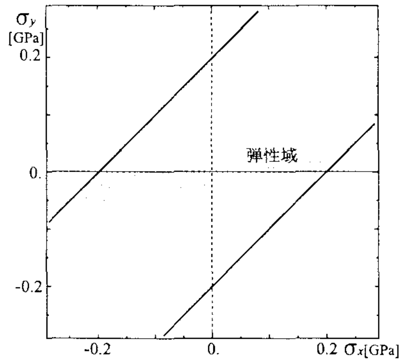
4. 多結晶金属での検証

代表的な弾塑性体である金属材料はミクロスケールに多結晶体からなる非均質構造を有する. この多結晶体をミクロ構造とする 2 変数境界値問題に対してミクロ-マクロ非連成近似解析を実行し, two-scale 連成解析の結果との比較により前節と同様の手法の例示・検証を行なう.

[1] Mises 応力を $\bar{\sigma} := \sqrt{\frac{3}{2}s_{ij}s_{ij}}$ と定義する. ここで, $s_{ij} = \sigma_{ij} - \delta_{ij}\sigma_m$ は Cauchy 応力の偏差成分, $\sigma_m = \frac{1}{3}\sigma_{pp}$ は平均 (圧力) 成分である.



(a) すべり系



(b) 降伏面

図–9 2 次元すべり系モデル

4.1 解析モデル

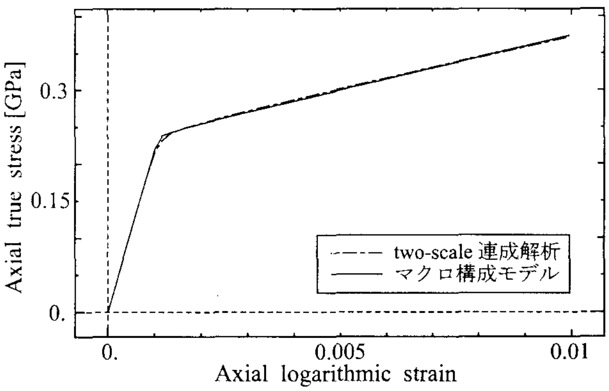
平面ひずみ問題を想定し，前節と同一のマクロ構造モデル (図–2) を用いる．ミクロ構造モデルは図–8 に示す 9 結晶粒からなる多結晶体とする．各結晶粒は結晶方位のみ異なる結晶体と考え，結晶塑性構成モデル (付録 I) により，塑性変形特性を与える．各粒の材料パラメータは表–3 とし，結晶方位は乱数で与える．また，超弾性構成モデルは Neo-Hooken モデルを用いる．

すべり系には図–9(a) を用いるが，このすべり系は同一平面内に全てのすべり系が存在するため，面外への塑性変形が生じない．よって，図–9(b) のように面内等方応力では塑性状態とならないことに注意が必要である．

4.2 マクロ構成モデルの設定と材料パラメータの同定

マクロ構成モデルは超弾性構成モデルとして Hencky モデル[11]，降伏条件として Mises の降伏条件で近似する．この降伏条件は金属材料の降伏条件として一般的に用いられるもので，偏差応力テンソルの第 2 不変量が限界値に達したときに降伏が起こるとし，塑性構成モデルに線形硬化則を採用すると，降伏関数は次式で定義される．

$$\phi(\tilde{\sigma}, \alpha) := \|\mathrm{dev}[\tilde{\sigma}]\| - \sqrt{\frac{3}{2}}(\sigma_Y + H\alpha) \qquad (6)$$



図–10 マクロ構成モデルのパラメータ同定 (多結晶体)

表–4 ミクロ解析の Mises 応力の最大値・最小値 (多結晶体)

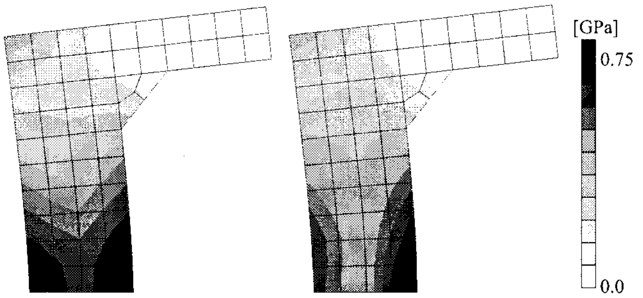
	two-scale 連成解析		single-scale ミクロ解析	
[GPa]	Min	Max	Min	Max
a 点	0.453	0.980	0.465	1.062
b 点	0.292	0.412	0.293	0.406
c 点	3.56E-5	3.56E-5	3.98E-5	3.98E-5

ここで，$\tilde{\sigma}$ はマクロ Cauchy 応力，α は塑性履歴パラメータ，σ_Y は降伏応力，H は硬化定数である．ミクロ構造モデル (図–8) は異方性を有する結晶粒の集合体であるので，代表体積要素中に多数の結晶粒を想定しなければ異方的なマクロ応答を示す可能性があるが，著者らの報告[12]では初期状態では 9 つ程度の結晶粒でもマクロ応答はほぼ等方となることが示しされているので，このような仮定でも差し支えないと考える．

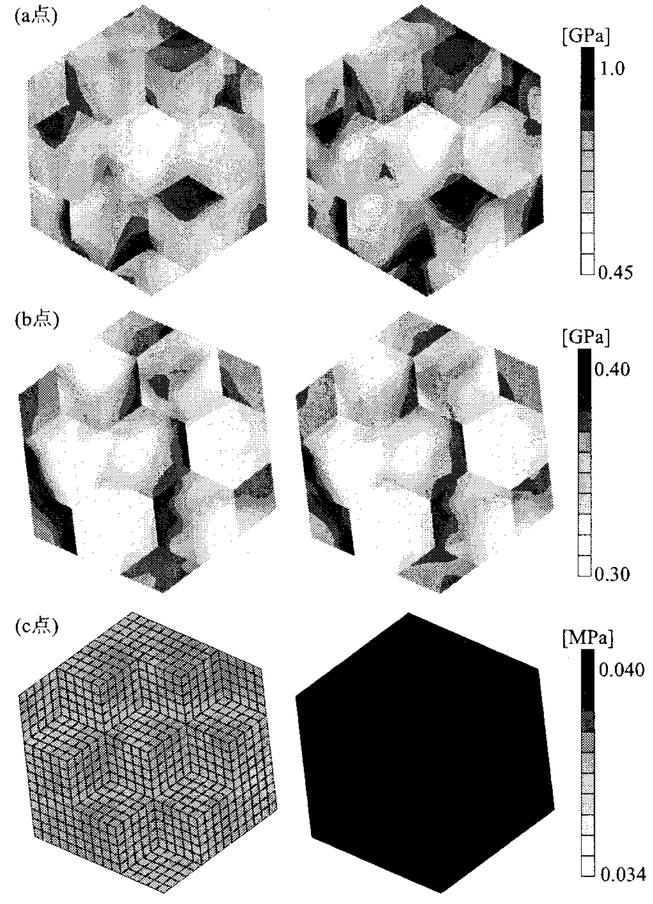
図–8 の水平・鉛直の 2 方向に一軸引張変形を与え，そのマクロ応答とほぼ同じ応答が得られるように試行錯誤的にマクロ構成モデルの材料パラメータを E = 200 [GPa]，ν = 0.3，σ_Y = 0.21 [GPa]，H = 12.[GPa] と同定した．

4.3 ミクロ-マクロ非連成解析

single-scale マクロ解析を行ない，O 点の水平変位が 1.0m となったときのマクロ構造の変形状態と Mises 応力分布を two-scale 連成解析の結果と合わせて図–11 に示す．両解析結果には定性的な一致が見られるものの，マクロ構造モデルの下端部において single-scale マクロ解析と比較して two-scale 連成解析では高い応力状態となっている．具体的には，マクロ Mises 応力の最大値は two-scale 連成解析では 0.820 [GPa]，single-scale マクロ解析では 0.739 [GPa] となり，比較的大きな差が生じている．これは，本来 two-scale 連成解析で得られるマクロ構成関係では塑性履歴および変形状態に応じて異なる塑性硬化特性を示すにも関わらず，本解析ではマクロ構成モデルの硬化特性を単純な線形等方硬化モデルで仮定したことが主な原因として考えられる．

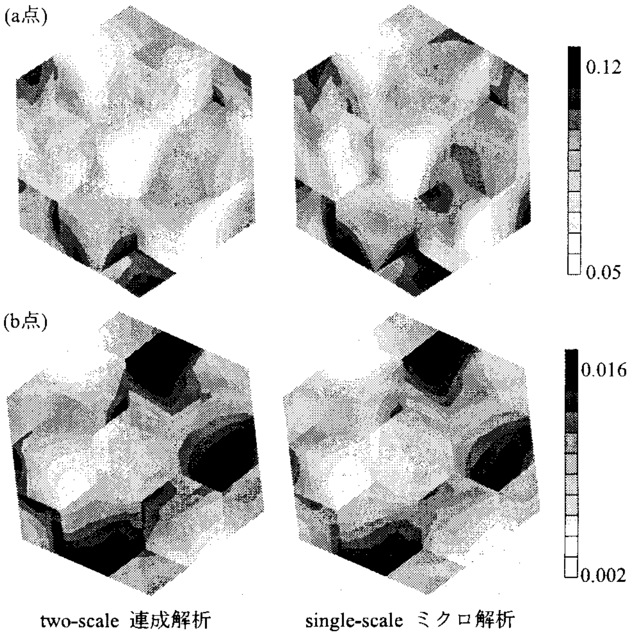


図–11 マクロスケール Mises 応力分布 (多結晶体)



図–12 ミクロスケール Mises 応力分布 (多結晶体)

次に，single-scale ミクロ解析を行ない，図–11 に示したマクロ変形状態に対応するミクロ解析の変形状態と Mises 応力分布を図–12 に示す．また，このときの各点におけるミクロ構造内の Mises 応力の最大値・最小値を表–4 に示す．c 点では塑性変形が生じていないため，均質変形となっている．さらに，a, b 点のミクロスケールの相当塑性ひずみ分布を図–13 に，このときの各点における相当塑性ひずみの最大値・最小値を表–5 に示す[2]．ミクロ応力の最大・最小値で比較すると，two-scale 連成解析と提案手法は小さい誤差であるのに対して，ミクロ相当塑性ひずみ分布では誤差の大きい領域が存在する．しかしながら，ミクロスケールの応答 (図–12 と図–13) を見る限り局所的には異なる値となっているものの定性的な傾向は一致しており，マクロ変形状態を反映したミクロスケールの力学挙動をある程度の確度で再現できているといえる．



図–13 ミクロスケール 相当塑性ひずみ分布 (多結晶体)

表–5 ミクロ解析の相当塑性ひずみの最大値・最小値

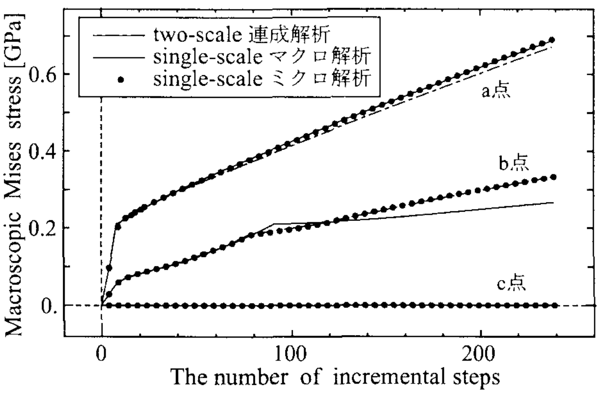
	two-scale 連成解析		single-scale ミクロ解析	
	Min	Max	Min	Max
a 点	0.0447	0.119	0.0493	0.133
b 点	0.0204	0.193	0.0159	0.0174

また，図–14 は増分計算中の点 a~c における Mises 応力の変化である．点 b について，single-scale マクロ解析結果だけが他の解析とは異なるマクロ応答を示している．single-scale ミクロ解析は single-scale マクロ解析の結果を受けて，行なったにも関わらず，ミクロ変数の体積平均として得られるマクロ応答は two-scale 連成解析とほぼ同じ結果を示している．

先に指摘したように，多結晶体の数値解析では two-scale 連成解析で得られるマクロ構成関係は変形状態によって塑性硬化特性が複雑に変化し得る上に，ミクロスケールでの変形履歴を反映して移動硬化も発現する．ミクロおよびマクロ応答の精度を上げるには two-scale 連成解析のマクロ構成関係を精度良く近似することが重要であり，これは今後の課題としたい．

最後に，本適用例についての計算時間は two-scale 連成解析では 410 CPU 時間ほどであったのに対して，提

[2] 相当塑性ひずみを $\epsilon^{p*} := \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{slip}}} \xi_t^{(\alpha)}$ と定義する．ここで，$\xi^{(\alpha)}$ は塑性履歴パラメータ (すべり系 α のすべり量) である．



図–14 マクロ Mises 応力の比較 (多結晶体)

案手法では全てのプロセスの合計でも 1 時間ほどで終了した．超弾性体の数値解析に比べて，増分を小さく取らなければならない上に，マクロ解析の収束計算で反復回数が多いため，計算コストが増えてしまい，両者の計算効率の差がさらに顕著に現れた．提案手法による以上の計算効率の改善は，非線形均質化法に基づくミクロ-マクロ解析が実用化に大きく近づいたことを意味する．

5. 結論

本論文では，two-scale 連成解析手法である均質化法に基づくマルチスケールモデリングの枠組みを利用し，(1) マクロ構成モデルの設定とその材料パラメータの同定，(2) single-scale マクロ解析，(3) single-scale ミクロ解析という手順を踏むことで計算コストを節約すると同時に two-scale 連成解析と同等のスケール間の連成効果を含む評価が可能なミクロ-マクロ非連成近似解法を提案した．超弾性体と多結晶体を対象として提案手法の適用例を示し，two-scale 連成解析の結果と比較したところ，局所的には差異が見られる領域があるもののミクロあるいはマクロ構造の全体的な応答は定性的には同一の傾向を再現できた．

提案手法を用いることで，これまで計算コストの問題で困難であったマクロスケールの変形状態に対応したミクロスケールの変形挙動の数値解析が可能になり，材料開発での CAE 技術の発展が期待される．また，本手法は手順 (1) の two-scale 連成解析で得られるマクロ構成関係をマクロ構成モデルの近似がその後の手順の精度を保障する上で特に重要であり，適切なマクロ構成モデルの設定とその材料パラメータをいかに同定するかが今後の課題である．

付録 I　結晶塑性構成モデル

結晶塑性構成モデル[13)]は，単結晶の塑性変形が Schmid 則に基づき，結晶格子に依存したすべりにより生じるものとして定式化される．いま，$n_{\rm slip}$ 個のすべり系を想定して，あるすべり系 α において基準配置におけるすべり方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{s}_0^{(\alpha)}$，すべり面の単位法線ベクトルを $\boldsymbol{m}_0^{(\alpha)}$ と定義する．塑性流れ中に結晶格子は変形せず，弾性変形のみで変形するという Lee の仮定[14)]から変形勾配の弾塑性乗算分解は $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^{\rm e}\boldsymbol{F}^{\rm p}$ と与えられ，弾性部分を用いて現配置におけるすべり系を規定する二つのベクトルは，変形後もそれらの直交性が成立することを考慮すると次式で表される．

$$\boldsymbol{s}_t^{(\alpha)} = \boldsymbol{F}^{\rm e}\boldsymbol{s}_0^{(\alpha)}, \quad \boldsymbol{m}_t^{(\alpha)} = \boldsymbol{F}^{\rm e-T}\boldsymbol{m}_0^{(\alpha)} \qquad \text{(I.1)}$$

速度非依存の構成モデルではすべり系 α の降伏関数は Kirchhoff 応力 $\boldsymbol{\tau}$，すべり方向ベクトル $\boldsymbol{s}_t^{(\alpha)}$，すべり面の法線ベクトル $\boldsymbol{m}_t^{(\alpha)}$ を用いて次のように定義できる．

$$\phi^{(\alpha)} := \|\boldsymbol{s}_t^{(\alpha)} \cdot (\boldsymbol{\tau}\boldsymbol{m}_t^{(\alpha)})\| - \tau_{\rm Y}^{(\alpha)} + q^{(\alpha)} \leq 0 \qquad \text{(I.2)}$$

ここで，$\tau_{\rm Y}^{(\alpha)}$ は降伏応力である．また，硬化則 $q^{(\alpha)}$ は次式で与える．

$$q^{(\alpha)} = -\sum_{\beta=1}^{n_{\rm slip}} h_{\alpha\beta}\xi^{(\beta)} \quad (\alpha = 1, 2, \cdots, n_{\rm slip}) \qquad \text{(I.3)}$$

ここで，$h_{\alpha\beta}$ は硬化定数で自己硬化 $(\alpha = \beta)$，潜在硬化 $(\alpha \neq \beta)$ の 2 種類を考える．この硬化則により，すべり系は互いに従属関係にある．

参考文献

1) Terada, K. and Kikuchi, N.: A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.190, pp.5427–5464, 2001.
2) Terada, K., Saiki, I., Matsui, K. and Yamakawa, Y.: Two-scale kinematics and linearization for simultaneous two-scale analysis of periodic heterogeneous solids at finite strain, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.192, pp.3531–3563, 2003.
3) 寺田賢二郎, 松井和己, 真野篤志: 均質化理論に基づく非線形力学挙動のミクロ・マクロ連成モデリング, 日本機械学会論文集 A 編, Vol.66, pp.516–523, 2000.
4) Kaneko, K., Terada, K., Kyoya, T. and Kishino, Y.: Global-local analysis of granular media in quasi-static equilibrium, *Int. J. Solids Struct.*, Vol. 40, No. 15, pp. 4043-4069, 2003.
5) 渡邊育夢, 寺田賢二郎, 松井和己, 秋山雅義, 根石豊: 多結晶金属のマルチスケール解析, 応用力学論文集, Vol.6, pp.239–246, 2003.
6) Matsui, K., Terada, K. and Yuge, K.: Parallelized two-scale analysis with a PC cluster for elastic-plastic heterogeneous media, *JSME Int. J., Series A*, Vol.44, pp. 584-593, 2001.
7) Watanabe, I., Terada, K. and Akiyama, M.: Two-scale analysis for deformation-induced anisotropy of polycrystalline metals, *Computational Materials Science*, Vol. 32, pp. 240–250, 2005.

8) Fish, S., Lee, K. and Raghavan, P.: Computational plasticity for composite structures based on mathematical homogenization: Theory and practice, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.,* Vol.148, pp.53–73, 1997.
9) Allaire, G.: Homogenization and two-scale convergence, *SIAM J. Math. Anal.,* Vol.23, pp.1482–1518, 1992.
10) Ghosh, S., Lee, K. and Raghavan, P.: A multi-level computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous materials, *Int. J. Solids Struct.,* Vol.38, pp.2335-2385, 2001.
11) Simo, J.C.: Numerical analysis and simulation of plasticity, in: P.G. Ciarlet, J.-L. Lions (Eds.), *Handbook of Numerical Analysis,* vol.VI, North-Holland, Amsterdam, 1998.
12) 渡邊育夢, 寺田賢二郎, 秋山雅義: 均質化法による多結晶金属の誘導異方性の評価, 日本機械学会論文集 A 編, Vol.70, pp.8–15, 2004.
13) Asaro, R. J.: Crystal plasticity, *J. Appl. Mech,* Vol.50, pp.921–934, 1983.
14) Lee, E. H. : Elastic-plastic deformation at finite strains, *J. Appl. Mech*, Vol.36, pp.1–6, 1969.

(2005 年 4 月 15 日 受付)