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*

寺田 賢二郎^{*1}, 松井 和己^{*2}, 真野 篤志^{*2}Micro-Macro Modeling of Nonlinear Mechanical Behaviors
based on the Homogenization TheoryKenjiro TERADA^{*3}, Kazumi MATSUI and Atsushi MANO^{*3} Tohoku University, Dept. of Human-Social Information Sciences,
Aza-Aoba 06, Aramaki, Aoba-ku, Sendai, Miyagi, 980-8579 Japan

A multiscale modeling method based on the mathematical theory of homogenization is introduced for studying the micro-macro coupled mechanical behaviors. After describing a general nature of two-scale boundary value problem for nonlinear elasticity in terms of the generalized variational principle, the multiscale mathematical modeling for several microscopically defined mechanical behaviors are provided by using the generalized convergence theorems in the homogenization theory. With some numerical examples for each modeling, the mathematical structure of this modeling is interpreted in mechanics' points of view. That is, the macrostructure refers its material response to the corresponding microscopic mechanical behavior which defines microscopic boundary value problem. Due to the generality of this modeling method and the numerical algorithm, the micro-macro coupling effects of heterogeneous media can be analyzed to clarify the highly complex mechanisms in nonlinear or inelastic responses.

Key Words: Homogenization Theory, Multiscale Modeling, Nonlinear Problems, Heterogeneous Media, Composite Materials

1. 緒 言

応用数学の一分野として発達した均質化理論⁽¹⁾は、複合材/非均質体の力学挙動の Global-Local 的なモデル化手法として工学分野に紹介され、多くの応用が図られてきた⁽²⁾⁻⁽⁵⁾。しかし、その多くは線形力学理論の枠内でミクロおよびマクロの2変数表示を用いた漸近展開法に基づく定式化が用いられ、非線形均質化理論ならびにその数理的なマルチスケール構造が真の意味で認識・活用されているとは言い難い。著者らはこの点に着目し、非均質弾塑性体のマルチスケール問題について、一般化収束論および一般化変分原理を用いた定式化および解析アルゴリズムを示し、その数値解についての議論を行った^{(6),(7)}。この中で、均質化理論に基づく非線形マルチスケール解析においては、 Γ -収束や Two-scale-収束といった一般化収束論が重要な役割を担っており、速度型のつり合い方程式と漸近展開法に基づく定式化の論理的な不備が指摘された。実際、本来の均質化理論は、これらの微分方程式の、あるいは変分形式の演算子の収束論を基調とするもので、非線形方程式の性質を失うこ

となしに Global-Local 解析を実現するためには、このような定式化とアルゴリズムによるのが正当なアプローチであるといえる。

本研究では、非線形均質化理論に基づく一般化アルゴリズム⁽⁶⁾の有する数理構造を利用して、ミクロスケール内で定義された力学モデルと、そこから得られるマクロ力学応答の対応について議論する。まず、数学的均質化理論のマルチスケールモデリング手法としての特徴を整理して、その方法論において本質的な2変数 (Two-scale) 境界値問題を定義する。また、いくつかの材料挙動についての一般化変分原理に基づく均質化法の定式化を通し、マルチスケール数理構造に対して力学的な解釈を与え、ミクロスケールの力学モデルに起因するマクロスケールで観察される非線形材料挙動について考察する。利用するアルゴリズムは一般性を有することから、提示するマルチスケールモデリングに対する考え方はある種の材料非線形/非弾性力学現象について、そのメカニズムの解明の一助となり得るものである。

2. 一般化変分原理と均質化理論

2.1 非均質体の支配方程式 複数の構成材料からなる非均質体の静的なつり合い問題を考える。この構

* 原稿受付 1999年6月15日。

^{*1} 正員, 東北大学大学院情報科学研究科(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉06)。^{*2} 東北大学大学院。

E-mail: tei@civil.tohoku.ac.jp

造全体は、実数全体を $\mathcal{R}$ で表したときの n_{dim} 次元領域 $\Omega^\varepsilon \subset \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ を占め、代表長さ ε を有する基本周期構造領域（ユニットセル）の幾何形状によってその非均質性が定義されるものとする。すなわち、構造物全体はユニットセル領域 εY を繰り返し配置することによって再成され、その力学的な挙動はユニットセルについて規定される物理的条件によって完全に記述することができる。したがって、構造全体の挙動は、ユニットセル内の材料の配置および物性に支配されるとともにその大きさ ε にも影響を受ける。このユニットセル構造への依存性を明記するために、以下の定式化では変位、Cauchy 応力、全ひずみをそれぞれ $u^\varepsilon(\mathbf{x})$, $\sigma^\varepsilon(\mathbf{x})$, $\varepsilon^\varepsilon(\mathbf{x})$ などと表し、各変数に添え字 ε を用いることにする。ここで、領域 Ω^ε には座標系 $\mathbf{x} \in \Omega^\varepsilon$ を導入している。さらに、このユニットセルは構造全体に対して非常に小さいものと仮定し、構造全体を「マクロ構造」、ユニットセルを「ミクロ構造」と呼び区別することにする。

本節では、この非均質体の材料挙動としては、凸なエネルギー関数を $\mathcal{W}(\varepsilon)$ とする一般的な非線形弾性体を考える。境界値問題の解 $(u^\varepsilon, \sigma^\varepsilon, \varepsilon^\varepsilon) \in (\mathcal{U}^\varepsilon, \mathcal{S}^\varepsilon, \mathcal{S}^\varepsilon)$ は次の変分方程式で支配される。

$$\int_{\Omega^\varepsilon} \nabla \eta^f : \sigma^\varepsilon dv = \int_{\Omega^\varepsilon} \rho^\varepsilon b \cdot \eta^f dv + \int_{\Gamma_\sigma} T \cdot \eta^f ds \quad \forall \eta^f \in \mathcal{V}^\varepsilon \quad (1)$$

$$\int_{\Omega^\varepsilon} \tau^f : (\nabla^{(s)} u^\varepsilon - \varepsilon^\varepsilon) dv = 0 \quad \forall \tau^f \in \mathcal{S}^\varepsilon \quad (2)$$

$$\int_{\Omega^\varepsilon} \gamma^f : \left(\frac{\partial \mathcal{W}^\varepsilon}{\partial \varepsilon^\varepsilon} - \sigma^\varepsilon \right) dv = 0 \quad \forall \gamma^f \in \mathcal{S}^\varepsilon \quad (3)$$

ここで、 $\rho^\varepsilon b$ は ρ^ε を密度とした単位体積あたりの物体力、 T は境界 Γ_σ 上に与えられる表面力、 $\nabla^{(s)}$ は2階テンソルの対称成分を作る演算子である。また、境界 Γ_u 上で拘束される変位および応力、微小ひずみについての各許容関数の空間は、

$$\mathcal{U}^\varepsilon := \left\{ v^\varepsilon(\mathbf{x}) \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid v_i^\varepsilon \in H^1(\Omega^\varepsilon), v^\varepsilon = g \text{ on } \Gamma_u \right\} \quad (4)$$

$$\mathcal{V}^\varepsilon := \left\{ \eta^f(\mathbf{x}) \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid \eta_i^\varepsilon \in H^1(\Omega^\varepsilon), \eta^f = 0 \text{ on } \Gamma_u \right\} \quad (5)$$

$$\mathcal{S}^\varepsilon := \left\{ \tau^f(\mathbf{x}) \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \times \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid \tau_{ij}^\varepsilon \in L^2(\Omega^\varepsilon) \right\} \quad (6)$$

などと定義される。ここで、 L^2 は2乗可積分空間、 H^1 は一階の微分までが L^2 に属する空間とした。

Fig. 1 Homogenization process with a periodically arranged cell (unit cell) as ε goes to zero.

2.2 ミクロおよびマクロスケールの導入 一般的な均質化理論の表記に従って、微視的な非均質性が観察できないマクロスケール $\mathbf{x} \in \Omega$ と、ミクロ構造内の非均質性を測る尺度であるミクロスケール $\mathbf{y} \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ を導入する。ここで、これらのスケールはミクロ構造の大きさを表すパラメータ ε を介して、 $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$ のように関連づけられている¹⁾。こうして、ミクロ構造の大きさに依存しない物体の領域全体 Ω にはスケール $\mathbf{x}$ 、非均質性の定義される領域 $\varepsilon \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ 内で分布する場の変数にはスケール $\mathbf{y}$ を用いることで、2つの異なるスケールによって支配方程式を記述できることになる。以下では、このようなミクロとマクロの2つのスケールに対する依存性を明示するために、変位、真応力およびひずみをそれぞれ $u(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $\sigma(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ などと書くことにする。

ミクロスケールの代表体積（ユニットセル）の領域を Y で表すと構造全体の領域 Ω^ε は便宜的に

$$\Omega^\varepsilon := \{ \mathbf{y} \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid \mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon \} = \Omega \times \varepsilon Y \quad (7)$$

と表される。このような設定のもとで、領域 Y においては変位、応力、ひずみなどの各変数はスケール $\mathbf{y}$ について周期的 (Y -periodic) であると仮定する。

以上のようにミクロおよびマクロスケールを導入して、考えている非均質体のマクロ挙動を支配する方程式を数学的に導く手続きは均質化 (homogenization⁸⁾) と呼ばれている (図1参照)。数学的には $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限をとることに対応するが、この操作に伴う微分演算子あるいは変分形式の収束性は、一般化収束論と呼ば

れ一種の関数解析学の枠組みで議論されている⁽⁹⁾。しかし、これまで紹介されてきた多くの均質化法の定式化は、マイクロ-マクロ変数を用いた漸近展開形の解の存在を仮定するものであり、非線形問題に対する直接的な応用は形式的なものに過ぎない。文献(6)では、静的な問題について速度型の支配方程式に漸近展開法を適用することによって非線形方程式の本質的な性質が失われ、一般性を有する解析アルゴリズムも得られないことが示されている。本研究では、そこでの議論を参照するとともに、Two-scale 収束理論⁽¹⁰⁾に基づく定式化を利用する。

2.3 Two-scale 境界値問題 変分方程式 (1)~(3) について $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限をとると、Two-scale 収束論の定理により各変数の極限が次のように与えられる。⁽¹⁰⁾

$$\begin{cases} u^\varepsilon(x) \rightarrow u^0(x) \\ \sigma^\varepsilon(x) \rightarrow \sigma^0(x, y) \\ \varepsilon^\varepsilon(x) \rightarrow \nabla_x^{(s)} u^0(x) + \nabla_y^{(s)} u^1(x, y) \end{cases} \quad \cdots \quad (8)$$

ここで、 $\nabla_x^{(s)}$, $\nabla_y^{(s)}$ における下付添字は、それぞれマクロ、ミクロスケールについての微分が取られることを示している。また、各許容関数についても同様の極限が存在することが知られている。ここではこのような数学的な結論のみを与えて定式化に利用するが、詳細は文献(10)を参照されたい。

こうして、元の変分方程式からマイクロおよびマクロスケールの変分方程式が分離され、「Two-scale 境界値問題」と呼ばれる支配方程式群が導かれる⁽¹⁾。式(1)に対応するミクロスケールの方程式（マイクロ方程式）は、

$$\int_Y \nabla_y \eta^1 : \sigma^0(x, y) dy = 0 \quad \forall \eta^1 \in \mathcal{W}_{\text{per}} \quad \cdots \quad (9)$$

で与えられ、マイクロ応力 σ^0 が領域 Ω のほとんど至る所で (a.e.) 自己つり合い状態にあることを表す。同様に、式(2), (3)に対応するマイクロ方程式は、それぞれ

$$\int_Y \gamma^0 : \left(\frac{\partial W^0}{\partial \varepsilon^0} - \sigma^0 \right) dy = 0 \quad \forall \gamma^0 \in S^0 \quad \text{a.e. in } \Omega \quad \cdots \quad (10)$$

$$\int_Y \tau^0 : (\nabla_x^{(s)} u^0 + \nabla_y^{(s)} u^1 - \varepsilon^0) dy = 0 \quad \forall \tau^0 \in S^0 \quad \text{a.e. in } \Omega \quad (11)$$

で与えられる。ここで、

$$\mathcal{W}_{\text{per}} := \{ w(\bullet, y) \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid w_i \in H^1(Y) ; Y\text{-periodic} \} \quad \cdots \quad (12)$$

であり、以降では一意性を要請するための拘束として $\int_Y w(\bullet, y) dy = 0$ を付加した $\tilde{\mathcal{W}}_{\text{per}}$ を許容関数空間として

用いる。また、 S^0 は式(6)の変数を $\tau_{ij}^0(x, y)$ に置き換えて $L^2(\Omega \times Y)$ に属するとしたものである。

一方、マクロスケールの変分方程式は、独立変数である変位、応力、ひずみの組 $(u^0(x), \Sigma(x), E(x)) \in (\mathcal{U}, S, S)$ についての次式で与えられる。

$$\int_\Omega \nabla_x \eta^0 : \Sigma(x) dx = \int_\Omega \rho^H b \cdot \eta^0 dx + \int_{\Gamma_\sigma} T \cdot \eta^0 ds \quad \forall \eta^0 \in \mathcal{V} \quad \cdots \quad (13)$$

$$\int_\Omega \Gamma : \left(\left[\frac{1}{|Y|} \int_Y \frac{\partial W}{\partial \varepsilon^0} dy \right] - \Sigma(x) \right) dx = 0 \quad \forall \Gamma \in S \quad \cdots \quad (14)$$

$$\int_\Omega T : (\nabla_x^{(s)} u^0(x) - E(x)) dx = 0 \quad \forall T \in S \quad \cdots \quad (15)$$

ここで、 $\rho^H = (1/|Y|) \int_Y \rho(x, y) dy$ および、

$$\Sigma(x) = \frac{1}{|Y|} \int_Y \sigma^0(x, y) dy \quad \cdots \quad (16)$$

$$E(x) = \frac{1}{|Y|} \int_Y \varepsilon^0(x, y) dy \quad \cdots \quad (17)$$

とおいた。また、 $\mathcal{U}$ は式(4)で与えられる集合と同型の

$$\mathcal{U} := \{ v^0(x) \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid v_i^0 \in H^1(\Omega^\varepsilon), v^0 = g \text{ on } \Gamma_u \} \quad \cdots \quad (18)$$

で与えられ、変位、応力およびひずみテンソルの許容関数は、それぞれ、

$$\mathcal{V} := \{ \eta(x) \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid \eta_{ij} \in H^1(\Omega), \eta = 0 \text{ on } \Gamma_u \} \quad \cdots \quad (19)$$

$$S = \{ T(x) \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \times \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid T_{ij} \in L^2(\Omega), T = 1/|Y| \int_Y \tau^0(x, y) dy; \tau^0 \in S^0 \} \cdots \quad (20)$$

に属するものとした。また、式(11)から Y 内の変位は、

$$w = E \cdot y + u^1 \quad \cdots \quad (21)$$

で与えられることが示される⁽¹¹⁾。

このようにして、Two-scale 境界値問題は次のように与えられる。

2変数 (Two-scale) 境界値問題： 各 x について変分方程式(9)~(11)を満足するようなマイクロ状態変数の組 $\{u^1(x, y), \varepsilon^0(x, y), \sigma^0(x, y)\}$ を求め、同時にそれらの領域 Y での体積平均量を含むマクロ変数の組 $\{u^0(x), \Sigma(x), E(x)\}$ が変分方程式(13)~(15)を満たすように定めよ。

すなわち、ほとんど至る所でミクロ構造問題を解き、その解をマクロ構造体の各物質点での材料応答と捉えた解析を行うことになる。

3. マルチスケールモデリング

前節で与えたTwo-scale境界値問題の有する数理解構は、様々な材料挙動に適用される一般性を有する。すなわち、ミクロ領域で定義される材料挙動として、塑性変形や脆性的な破壊を伴う場合には、その運動あるいは状態変数についての拘束を考慮することで変分原理に組み込むことが可能である。ここでは、まず線形弾性体を例にとって Two-scale 境界値問題の解析アルゴリズムを提示し、その数理的側面を考察する。次に、ミクロ（微視あるいは局所）的な破断や接触を伴うマクロ非線形挙動および、弾塑性複合材料についての解析例を示すことで、よく知られた非線形性に対してミクロ-マクロ連成力学挙動としての解釈を与える。

3.1 線形弾性体 最も単純な材料挙動である線形弾性のみを示す非均質材料については、漸近展開理論に基づく定式化が可能であるが、ここでは解析アルゴリズムを通して Two-scale 境界値問題のミクロ-マクロ連成構造を考察する。

線形弾性問題においてエネルギー関数は、弾性テンソル $\mathbf{a}^e$ を用いて

$$W^e(\boldsymbol{\varepsilon}) := \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^e : \mathbf{a}^e : \boldsymbol{\varepsilon}^e \dots\dots\dots (22)$$

で与えられるので、式 (3) に対応する変分形式は、

$$\int_{\Omega^e} \boldsymbol{\gamma}^e : (\mathbf{a}^e : \boldsymbol{\varepsilon}^e - \boldsymbol{\sigma}^e) dv = 0 \quad \forall \boldsymbol{\gamma}^e \in S^e \dots\dots (23)$$

となる。これは、領域 Ω^e のほとんど至るところで構成関係 $\boldsymbol{\sigma}^e = \mathbf{a}^e : \boldsymbol{\varepsilon}^e$ が満たされることを意味し、式 (10) に対応するミクロ変分形式は、

Fig. 2 Successive-iteration process for solving the two-scale boundary value problem.

$$\int_Y \boldsymbol{\gamma}^0 : (\mathbf{a}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \boldsymbol{\varepsilon}^e(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \boldsymbol{\sigma}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y})) dy = 0$$

$$\forall \boldsymbol{\gamma}^0 \in S^0 \text{ a.e. in } \Omega \dots\dots (24)$$

で与えられる。したがって、この材料挙動に対する Two-scale 問題を改めて変位法で書き下すと、ミクロおよびマクロ問題はそれぞれ、

$$\int_Y \nabla_y \boldsymbol{\eta}^1 : \mathbf{a}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dy$$

$$= - \left[\int_Y \nabla_y \boldsymbol{\eta}^1 : \mathbf{a}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dy \right] : \mathbf{E}(\mathbf{x}) \quad \forall \boldsymbol{\eta}^1 \in \tilde{W}_{\text{per}} \quad (25)$$

$$\int_{\Omega} \nabla_x \boldsymbol{\eta}^0 : \left[\frac{1}{|Y|} \int_Y \mathbf{a} dy \right] : \nabla_x^{(s)} \mathbf{u}^0 dx$$

$$= - \int_{\Omega} \nabla_x \boldsymbol{\eta}^0 : \left[\frac{1}{|Y|} \int_Y \mathbf{a} : \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}^1 dy \right] dx$$

$$+ \int_{\Omega} \rho^H \mathbf{b} : \boldsymbol{\eta}^0 dx + \int_{\Gamma_n} \mathbf{T} : \boldsymbol{\eta}^0 ds \quad \forall \boldsymbol{\eta}^0 \in V \quad (26)$$

のようになる。ミクロ境界値問題 (25) はマクロひずみ $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ を与えられて Y-periodic な変位 $\mathbf{u}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ を未知とし、マクロ問題 (26) はミクロ変形 $\nabla_y^{(s)} \mathbf{u}^1$ をデータとしてマクロ変位 $\mathbf{u}^0(\mathbf{x})$ を求めるものである。後で示すように応答の線形性によって各スケールの変数は分離できるが、このようなミクロ-マクロ連成構造を有する Two-scale 問題についての解の存在と唯一性は数学的にも確かめられている⁽¹⁾。

実際、ミクロあるいはマクロのいずれかの解を初期値とした逐次的反復 (successive iteration) によって一意的に解を定めることが可能である。図 2(a) は、この反復アルゴリズムを模式的に示しており、平面ひずみ状態の線形弾性問題について計算を行うと図 2(b) に示す収束傾向を得る。模式図中、 F は外力、 F_{int} は内力、 $\mathbf{a}^M$ は剛性 (式 (26) 左辺の被積分項参照) のセル内体積平均を表し、変位 $\mathbf{u}$ の修正量 $\delta \mathbf{u}$ が逐次的に求められる。また、図 2 中 "perturbed force" とは式 (26) の右辺第一項を指しており、最終的 (残差が 10^{-6} のオーダー) な値で正規化してある。この結果から分かるとおり、このままでは非常に遅い (一次の) 収束性しか得られず、実用的には使いものにならない。このアルゴリズムを一種の SOR 法のように修正することも可能であるが、依然として収束は遅く、適切なパラメータの値は各構成材料の剛性比にも依存するため、実用計算にはより効率的なアルゴリズムが必要とされる。

更なる効率化は、マクロ物性、すなわち均質化弾性係数を求めることで実現されることは明らかである。実際、変形性能の線形性により、ミクロ変分方程式 (25) における未知数 $\mathbf{u}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は、データとなるマクロひずみの各成分 $E_{kh}(\mathbf{x})$ ($k, h=1-2$ or 3) について、

Fig. 3 Microscopically contacting/fracturing media.

$$u^l(x, y) = -\chi^{kh}(y)E_{kh}(x) \quad (27)$$

と分解することができる⁽¹⁾. ここで, $\chi^{kh}(y)$ は特性変位と呼ばれる Y -periodic な関数である. したがって, 解くべき方程式は, 次のようなマクロ変形のデータに依存しない形式になる.

$$\int_Y \nabla_y \eta^l : a(y) : (I^{kh} - \chi^{kh}(y)) dy = 0 \quad \forall \eta^l \in \tilde{W}_{\text{per}} \quad (28)$$

ただし,

$$I_{ij}^{kh} := \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jh} + \delta_{ih} \delta_{jk}) \quad (29)$$

と定義しており, トレースは下付添え字について取られる. こうして, マクロ物性 (均質化弾性係数) は, 式 (27) をマクロ変分形式 (26) に代入し, $\Xi_{ijkh} := \partial \chi_i^{kh} / \partial y_j$ および $J_{ijkh} := I_{ij}^{kh}$ とおくことで

$$a^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y a(y) : (J - \Xi^F) dy \quad (30)$$

と導かれる.

しかしながら, このマクロ物性を求めることは最も効率的に解くための手続きに過ぎず, Two-scale 境界値問題に本質的なものではない. すなわち, この問題はあくまでマイクロおよびマクロの各支配方程式の連成問題として捉えられるべきであり, 相互の変数の役割を十分に理解する必要がある. 本小節で提示したアルゴリズムと解析はこのことを主張するために挙げたもので, 以下では, これらの考察を踏まえ, 非線形マルチスケール構造についてさらに詳しく議論する.

3.2 微視的接触・破断を含む非線形挙動⁽¹¹⁾ 構造内に亀裂がある程度の周期性を保って無数存在する場合 (図 3(a) 参照), ミクロスケールでの運動/変形は亀裂面 F^ε において片側の拘束を受ける. すなわち, 亀裂の幅を g とすると, もとの変分形式に対する変位は幾何学的に

$$[n_i^F u_i^\varepsilon] \leq g \quad \text{on } F^\varepsilon \quad (31)$$

なる条件を科せられ, 許容関数として次の凸集合に含まれることになる.

$$\mathcal{K}_F^\varepsilon = \{u^\varepsilon \mid u^\varepsilon \in \mathcal{V}^\varepsilon; [n_i^F u_i^\varepsilon] \leq g \text{ a.e. on } F^\varepsilon\} \quad (32)$$

ここで, n^F は図 3(b) に示すように亀裂を局所的な領域 a と b に分割した際の a から b へ向く法線ベクトルとする. また, $[\phi]$ は変数 ϕ の不連続量を表しており, 法線ベクトル n^F を有する亀裂面をはさんで与えられる値 ϕ_a と ϕ_b の差 $\phi_a - \phi_b$ である. 式 (31) は等号が成立するときに接触, 不等号のときは開口を表す. ここで, 亀裂面は滑らかで摩擦はなく, 垂直な接触力 σ_N のみが作用するものとする,

$$\sigma_{ij}^F n_j^F|_a = \sigma_N|_a n_i^F; \quad \sigma_{ij}^F n_j^F|_b = -\sigma_N|_b n_i^F; \quad \cdots \quad (33)$$

$$\sigma_N \leq 0 \quad \text{on } F^\varepsilon$$

なる条件が得られる. したがって, 材料挙動として弾性を仮定した場合の静的つり合い問題は, 片側拘束条件のもとでの最小化問題となり, 対応する境界値問題は変分不等式

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^\varepsilon} \nabla v^\varepsilon : a^\varepsilon : \nabla (v^\varepsilon - u^\varepsilon) dv \\ & \geq \int_{\Omega^\varepsilon} \rho^\varepsilon b \cdot (v^\varepsilon - u^\varepsilon) dv \\ & + \int_{\Gamma_\sigma} T \cdot (v^\varepsilon - u^\varepsilon) ds \quad \forall v^\varepsilon \in K_F^\varepsilon \quad \cdots \quad (34) \end{aligned}$$

によって支配される^{(1), (11)}.

次に, 一般化収束論における定理を用いて $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限における Two-scale 問題を導くと, マクロ問題は前節と同型であるが, ミクロ問題は微視的な接触の条件を反映して,

$$\begin{aligned} & \int_Y \nabla_y (v^l - u^l) : a(x, y) : (E(x) + \nabla_y^{(s)} u^l) dy \geq 0 \\ & \quad \forall v^l \in \tilde{\mathcal{K}}_F^{\text{per}} \quad (35) \end{aligned}$$

のようになる. ここで,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{K}}_F^{\text{per}} = \{ & u^\varepsilon \mid u^\varepsilon \in \tilde{W}_{\text{per}}; [n_i^F u_i^\varepsilon] \leq 0 \\ & \text{a.e. on } F\} \quad \cdots \quad (36) \end{aligned}$$

である. したがって, Two-scale 境界値問題におけるマクロ問題には, 接触という拘束が陽な形では入らないが, マクロ構造体の各点では式 (35) の解の影響が反映される. すなわち, Y 内に在る亀裂 F の運動に起因するミクロ構造体の非線形な応答は, マクロ物質点における材料挙動を規定することになる. このことは, ミクロスケールにおいて定義された「構造」の挙動がマクロスケールでの「材料」の挙動として認識されることを意味しており, 均質化理論により導かれたマルチ

Fig. 4 Load-displacement curve for microscopic *contacting* under uniaxial macroscopic tension and compression in y_1 -direction (Macrostructure: $1\text{ m} \times 1\text{ m} \times 1\text{ m}$ region is uniformly loaded by 10 MN in x_1 -direction.)

スケール問題に対する力学的な解釈を与えている。

このミクロ構造とマクロ物性の関係を例示するため、もとの問題 (35) について漸次的な荷重を想定する。いま、平面ひずみを仮定して、Young 率 37.5 GPa 、Poisson 比 0.16 の単一材料からなるユニットセル内 (1 辺の長さ 1) の中央部に、長さ 0.6 、亀裂幅 $g=0.1$ の 1 亀裂が y_1 軸に垂直に在る場合を考える。図 4 は、そのときの荷重-変位関係を示すものである。計算においては、マクロ的な引張・圧縮をマクロ的に引張と圧縮を x_1 軸に平行に連続的に作用させ、接触による拘束は *penalty* 法によって処理した。この図から、漸増荷重に対してと、漸減荷重に対してでは全く異なるマクロ力学応答が得られ、マクロ的には非弾性的な挙動を示すことが分かる。このように、ミクロスケールでの構造解析の結果は、マクロスケールでの荷重-変位関係を与えることになり、構成関係そのものと捉えられることが分かる。

次に、ミクロ構造内の接触による拘束をはずし、代わりにある面に沿って微視的な破断が起こる場合を想定する。いま、ミクロ構造内の応力がある値に達したときに破断が起き、面が生成されるものと仮定すると、マクロ的には上の結果と全く逆の応答が得られるはずである。ただし、今の仮定では幾何学的な拘束ではないので方程式系に変化はない。すなわち、許容集合 (12) に片側拘束が含まれないので、解くべき支配方程式は変分方程式になる。

あらかじめ先の亀裂と同じ位置と大きさを指定された破断面において、作用する応力ベクトルが $T_x=3.774\text{ MPa}$ になったときに破断を生ずると仮定し、マクロ的に引張と圧縮を x_1 軸に平行にかつ連続的に作用させた。

Fig. 5 Load-displacement curve for microscopic *fracturing* under uniaxial macroscopic tension and compression in y_1 -direction (the macroscopic model is the same as that for Fig.4.)

図 5 にはその荷重-変位関係を示すが、ミクロ的な破断という現象によってエネルギーの散逸が生じ、結果としてマクロ的に非弾性の挙動を示すことになる。

以上のように、ミクロスケールで定義された材料は弾性の挙動を示していても、ミクロ構造内で接触や破断を伴う場合には、マクロ的な非弾性の力学応答が得られる。このマクロ応答は、各物質点で与えられる材料挙動にほかならないが、そこでのミクロ問題における幾何学的／運動学的な条件に起因するものである。

3.3 弾塑性複合材料 本節の最後のマルチスケールモデリングの対象として弾塑性複合材料を考え、同様の考察を行う⁽⁶⁾。非均質性を規定するミクロ構造内の構成材料は、von Mises の降伏条件に従い、等方硬化かつ関連流れ則に従うものとする。このとき支配方程式には、塑性ひずみ ϵ^p 、塑性乗数 (consistency パラメータ) λ^p および塑性硬化変数 q^p が新たに加わる。また、ユニットセル内の弾性応答については前小節と同様に線形を仮定する。荷重パラメータ ζ が経時的な変化を表し、時刻 t_n までの変数の値がすべて既知とすると、次の時刻 t_{n+1} において満たされるべき変分形式は以下のようなになる。⁽¹²⁾

$$\int_{\Omega^\epsilon} \nabla \eta^f : \sigma_{n+1}^\epsilon dv = \int_{\Omega^\epsilon} \rho^\epsilon b_{n+1} \cdot \eta^f dv + \zeta_{n+1} \int_{\Gamma_\sigma} T \cdot \eta^f ds \quad \forall \eta^f \in V^\epsilon \quad \cdots (37)$$

$$\int_{\Omega^\epsilon} \tau^f : (\nabla^{(s)} u_{n+1}^\epsilon - \epsilon_{n+1}^\epsilon) dv = 0 \quad \forall \tau^f \in S^\epsilon \quad (38)$$

$$\int_{\Omega^\epsilon} \gamma^f : \left[(a^\epsilon : \epsilon - \sigma_{n+1}^\epsilon) + a^\epsilon : \left(\epsilon_{n+1}^{pe} - \epsilon_n^{pe} - \Delta \gamma^f \frac{\partial f^\epsilon}{\partial \sigma} \right) \right] dv = 0 \quad \cdots (39)$$

$$\int_{\Omega'} \left[\gamma^e : a^e : \left(\epsilon_{n+1}^{pe} - \epsilon_n^{pe} - \Delta \gamma^e \frac{\partial f_{n+1}^e}{\partial \sigma^e} \right) \right] dv = 0$$

$$\forall \gamma^e \in S^e \quad \dots (40)$$

$$\int_{\Omega'} \left[p^e \left[\frac{1}{H^e} (q_{n+1}^e - q_n^e) + \Delta \gamma^e \frac{\partial f_{n+1}^e}{\partial q^e} \right] \right] dv = 0$$

$$\forall p^e \in V_q^e \quad \dots (41)$$

$$\int_{\Omega'} \lambda^e f_{n+1}^e dv = 0 \quad \forall \lambda^e \in \mathcal{K}_p^e \quad \dots (42)$$

ここで、 $\Delta \gamma^e$ は $[t_n, t_{n+1}]$ 間の増分であり、 f^e は $\text{dev} \sigma^e$ を σ^e の偏差成分、 σ_Y を初期降伏応力として

$$f(\sigma^e, \alpha^e) := \|\text{dev} \sigma^e\| - \left(H \alpha^e + \sqrt{\frac{2}{3}} \sigma_Y \right) \leq 0 \quad (43)$$

で与えられる降伏関数である。ただし、 α^e を q^e に共役な変数（今の場合、相当塑性ひずみ）、 H^e を塑性硬化係数として、

$$H^e(\alpha^e) = \frac{1}{2} H^e \alpha^{e2} \quad \dots (44)$$

$$q^e = - \frac{\partial H^e(\alpha^e)}{\partial \alpha^e} := - \nabla H^e(\alpha^e) \quad \dots (45)$$

などと定義した。また、各変分方程式における新たな許容関数空間として、変数 λ^e 、 q^e に対してそれぞれ

$$\mathcal{V}_q^e := \{ q^e(x) \in \mathcal{R} \mid q^e \in L^2(\Omega^e) \} \quad \dots (46)$$

$$\mathcal{K}_p^e := \{ \gamma^e \in \mathcal{R} \mid \gamma^e \in L^2(\Omega^e); \gamma^e \geq 0 \} \quad \dots (47)$$

を与えた。このような変分法の枠組みは文献 (12) 等に詳しい。

前の例と同様にして、一般化収束の理論⁽¹⁰⁾を用いると、マイクロ方程式が

$$\int_Y \nabla_y \eta^l : \sigma_{n+1}^0(x, y) dy = 0 \quad \forall \eta^l \in \mathcal{W}_{\text{per}} \quad \dots (48)$$

$$\int_Y \gamma^0 : (a^e : \epsilon_{n+1}^0 - \sigma_{n+1}^0) dy = 0$$

$$\forall \gamma^0 \in S^0 \quad \text{a.e. in } \Omega \quad \dots (49)$$

$$\int_Y \tau^0 : (\nabla_x^{(s)} u_{n+1}^0 + \nabla_y^{(s)} u_{n+1}^1 - \epsilon_{n+1}^0) dy = 0$$

$$\forall \tau^0 \in S^0 \quad \text{a.e. in } \Omega \quad \dots (50)$$

$$\epsilon_{n+1}^{p0} = \epsilon_n^{p0} + \Delta \gamma^0 \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \sigma^0} \quad \text{a.e. in } \Omega \times Y \quad \dots (51)$$

$$q_{n+1}^0 = q_n^0 - \Delta \gamma^0 H \frac{\partial f_{n+1}}{\partial q^0} \quad \text{a.e. in } \Omega \times Y \quad \dots (52)$$

$$\Delta \gamma^0 \geq 0, f_{n+1} \geq 0, \Delta \gamma^0 f_{n+1} = 0$$

$$\text{a.e. in } \Omega \times Y \quad \dots (53)$$

のように与えられるのに対して、マクロ方程式は次のようになり、形式的には前小節で得られたものと同様の変分形式になる。⁽⁶⁾

$$\int_{\Omega} \nabla_x \eta^0 : \Sigma_{n+1}(x) dx = \int_{\Omega} \rho^H b_{n+1} \cdot \eta^0 dx$$

$$+ \int_{\Gamma_a} T_{n+1} \cdot \eta^0 ds \quad \forall \eta^0 \in \mathcal{V} \quad \dots (54)$$

$$\int_{\Omega} \Gamma : \left(\left[\frac{1}{|Y|} \int_Y a(x, y) : \epsilon^0 dy \right] - \Sigma_{n+1}(x) \right) dx = 0$$

$$\forall \Gamma \in S \quad (55)$$

$$\int_{\Omega} T : (\nabla_x^{(s)} u_{n+1}^0(x) - E_{n+1}(x)) dx = 0 \quad \forall T \in S \quad (56)$$

また、式 (55) や (56) は実質的にはマクロ応力／ひずみはマイクロ応力／ひずみのユニットセル内での体積平均であることを表しているに過ぎず、塑性に関する変数 $\epsilon_{n+1}^{p0}, q_{n+1}^0, \Delta \gamma^0$ についての平均量は定義出来るもののマクロ方程式内には陽な形では現れない。

こうして、解くべき Two-scale 問題は、

弾塑性体のマルチスケール問題：式 (48)~(53) を満足するような、状態変数

$$\{ u_{n+1}^1, \epsilon_{n+1}^0, \sigma_{n+1}^0, \epsilon_{n+1}^{p0}, q_{n+1}^0, \Delta \gamma^0 \} \quad \dots (57)$$

を求め、それらの体積平均量を含む変数の組

$$\{ u_{n+1}^0, \Sigma_{n+1}, E_{n+1} \} \quad \dots (58)$$

が式 (54)~(56) を満たすように定めよ。

のようになり、マルチスケールモデリングという観点からは前出の材料挙動に対するものと本質的な違いは認められない。相違点は、マイクロ構造内で定義される材料挙動、幾何学的あるいは運動学的な条件だけであり、提示した方法論の一般性が認められよう。

図 6 には、提示した定式／アルゴリズム⁽⁶⁾によって単純な一軸引張／圧縮（サイクリック载荷）の解析を先のマイクロ接触／破断の場合と同様に行ったときのマクロ荷重－変位関係を示す。また、図 7 は、図 6 中の A および B 点の载荷状態におけるユニットセル内の Mises 応力の分布であるが、マクロ的には外荷重が作用していないにも関わらず、自己つり合い状態（式 (48) 参照）の応力分布が得られている。このように、ミクロスケールで定義された弾塑性挙動がマクロスケールの応答にも反映され、構成材料には線形な等方硬化を仮定したにも関わらず、マクロ的には異方硬化的な挙動が再現されている。この例では、提示したミクロ

Fig. 6 Load-displacement curve. Unit cell model: phase 1 (39.9% volume fraction) never yields; Young's modulus 37.9 GPa, Poisson's ratio 0.21, phase 2 reveals plastic deformation; Young's modulus 68.9 GPa, Poisson's ratio 0.33, initial yield stress $\sigma_y=24$ MPa, hardening modulus $H=10$ GPa. Point P refers to Fig. 4.

Fig. 7 von-Mises stress distribution within a unit cell in the loading states A and B in Fig. 6.

マクロ連成解析法の、非均質弾塑性体の機構解明に対する適用性が示唆されている。

3.4 指針 本節での実際の解析では、マクロ構造の各サンプリング点においてマイクロ構造解析を行っている。我々が実験などから定めようとする非均質弾塑性体の構成関係はマイクロ解析に置き換えられるが、その数値解析に際する膨大な計算資源の消費は避けられない⁽⁷⁾。したがって、実用的な計算を考える場合には、数値実験的にマクロ構成関係を求めるか、あるいはマイクロ解析を複数のCPUに割り当てる並列処理などをして、効率化を図るべきであろう。最後に、ここでの定式化およびその数値解析アルゴリズムは、文献(6)で初めて紹介されたものであるが、本節での考察は様々な材料挙動に共通に内在するマルチスケール構造を明示しており、これらの統一的な取り扱いが可能であることを示唆している。

4. 結 言

マイクロ-マクロスケールを用いた漸近展開法を利用した均質化法は、線形問題に対しての多くの工学手応用

を可能にし、数理的かつ物理的にも妥当な結論を導いている。しかし、そのシステムティックな定式化の過程が、偏微分方程式あるいは記述される支配方程式の本質的な部分を見えにくくしていることは確かである。特に、計算力学あるいは工学分野で紹介された定式化が直感的に理解しやすい手法ではあるが、非線形問題においてそのアプローチを盲目的に拡張することは避けなければならない。

本論文で示したマイクロ-マクロ連成作用のモデル化には、数学的均質化理論における一般化収束の概念を利用している。そうして得られた非線形力学挙動は、ミクロスケールの構造的な非線形性がマクロスケールでは材料非線形挙動として現れたものである。解析計算に示した例に限らず、提示した均質化理論に基づくマルチスケールモデリングによって説明可能な現象は多岐にわたり、非均質性に起因する未解明な機構が対象と成りうるものと考えている。

文 献

- (1) Sanchez-Palencia, E., *Non-homogeneous Media and Vibration Theory*, Lecture Notes in Physics 127, Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- (2) Guedes, J.M. and Kikuchi, N., Preprocessing and post-processing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.* **83**(1990), 143-198.
- (3) 寺田賢二郎, 弓削康平, 菊池昇: 均質化法を用いた複合材料の弾塑性解析 (第1報, 定式化), 日本機械学会論文集, **61**-509, A(1995), 2199-2205.
- (4) 寺田賢二郎, 弓削康平, 菊池昇: 均質化法を用いた複合材料の弾塑性解析 (第2報, 数値解析), 日本機械学会論文集, **62**-601, A(1996), 2072-2079.
- (5) Terada, K., Ito, T. and Kikuchi, N., Characterization of the mechanical behaviors of solid-fluid mixture by the homogenization method, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, **153**(1998), 223-257.
- (6) 寺田賢二郎, 菊池昇: 非均質弾塑性体のマルチスケール解析のための一般化アルゴリズム, 土木学会論文集, **63**/I-49, (1999), 217-229.
- (7) 寺田賢二郎, 松井和己: 弾塑性体に対するマルチスケール構造解析の数値解, 日本計算工学会論文集, **1**(1999).
- (8) Babuska, I.: Homogenization and its application. Mathematical and computational problems, *Numerical solution of partial differential equations III*, Academic Press, New York, (1976), 89-115.
- (9) Tartar, L.: Incompressible fluid flow in a porous medium - convergence of the homogenization process, appendix of (1), Springer, Berlin, 1980.
- (10) Allaire, G.: Homogenization and two-scale convergence, *SIAM J. Math. Anal.*, **23**(1992), 1482-1518.
- (11) 寺田賢二郎, 京谷孝史: 無数の亀裂を有する物体のマルチスケール応力変形解析法, 土木学会論文集, **61**/I-47, (1999), 23-33.
- (12) Simo, J.C. and Hughes, T.J.R.: *Computational Inelasticity*, Springer-Verlag, New York, 1998.