

機械学習による超弾性構成則の構築

Construction of Hyperelastic Constitutive Laws by Machine Learning

○学 原坂 尚希^{*1} , 正 荒井 皓一郎^{*2}

正 渡邊 浩志^{*3} , 正 和田 義孝^{*1}

Naoki HARASAKA^{*1} , Koichiro ARAI^{*2},

Hiroshi WATANABE^{*3} , Yoshitaka WADA^{*1},

^{*1} 近畿大学 Kindai University

^{*2} Hexagon

^{*3} 株式会社テクスパイア Techspire Co., Ltd.

Rubber is used in various industrial products and has become an indispensable material in modern society. In the constitutive laws of rubber, low-order models are insufficiently accurate, while the pursuit of high accuracy results in models containing high-order polynomials, which not only makes physical interpretation difficult but also increases the cost of parameter identification from experimental data. In this study, we construct a constitutive law for rubber using machine learning for the purpose of seamless use of constitutive laws from experimental results. Data is generated using the simulation software Marc, which is then used as training data for machine learning. Specifically, we will construct two types of predictors. Predictor 1, which takes stress and strain as inputs and outputs equivalent C_{01} and C_{10} with reference to the Mooney model, and Predictor 2, which takes C_{01} , C_{10} , elongation ratio, and strain invariants as inputs and predicts strain energy W , to achieve both accuracy and interpretability. The effectiveness of the proposed method is discussed.

Key Words : Rubber, Constitutive law, Mooney model, Machine learning, Hyperelasticity

1. 緒 言

ゴム材料は、その優れた振動減衰特性から免振装置や防振装置などに広く利用されている。このような装置を用いた構造物の設計には、超弾性や粘弾性構成則を用いた非線形有限要素法解析が用いられる。しかしながら、これらの構成則を使用するには、材料試験と材料モデルの選択、パラメータフィッティングなどの多くの工数が必要となる。また、最適なモデルの選定には専門知識や経験が求められるため、実際の現場の技術者が解析を行う際の障壁となっている。

一方で、近年では機械学習の工学的応用が盛んに研究されており、材料構成則についても適用が検討されている⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾。機械学習は非線形関係を高度精度に予測できる能力をもち、さらに正則化やデータ拡張など、過学習の抑制や予測精度の向上に有効な手法が豊富に存在するため、回帰問題においても有効な手段である。この特性により、超弾性材料のような非線形な応力ひずみ関係を高度精度に予測することが可能である。よって機械学習を活用することで、モデル選定を行わない材料モデルを獲得できる可能性があり、構成則の構築における従来の障壁であったモデルの選定を取り除く手段として期待される。

そこで本研究では、機械学習を用いた高精度な材料構成則の獲得を目指した基礎検討を行った。本論文では、既存の材料構成則の挙動を機械学習を用いて高精度に再現・予測するために、転位学習の適用可能性について検討し、学習に必要なデータセットについて検証を行った結果を示す。

2. データセットと機械学習モデル

2・1 データセットの準備

機械学習に用いる訓練データと検証データは、汎用非線形有限要素法解析ソフトウェアである Marc で計算した結果を使用した⁽⁴⁾。ここでは、超弾性構成則として Mooney モデル(2 項モデル)を用いた。Mooney モデル(2 項モデル)のひずみエネルギー関数 W は以下の式で定義される。

$$W = C_{10}(I_1 - 3) + C_{01}(I_2 - 3) \quad (1)$$

ここで、 C_{10}, C_{01} は材料パラメータであり、実験挙動を再現できるパラメータを同定して使用する必要がある。 C_{10}, C_{01} はゴム材料が取りうる範囲を想定して適当にパラメータを振ることで学習用データセットとした。経験的に C_{10} は C_{01} の約 4 から 5 倍ということがわかっており、その範囲を考慮して C_{10}, C_{01} の組み合わせを決定した。図 1 に生成した C_{10}, C_{01} の分布を示す。決定した C_{10}, C_{01} を材料パラメータとして入力し、均等二軸引張・平面せん断・単軸引張の 3 つの実験を模擬した有限要素法解析を行った。図 2 に均等二軸引張、平面せん断、単軸引張解析の変形図を示す。

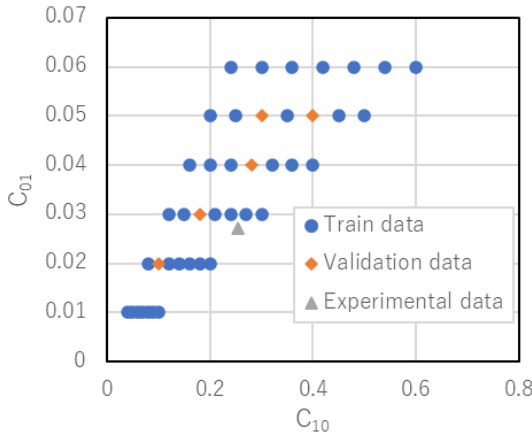


Fig.1 Distribution of C_{10} and C_{01}

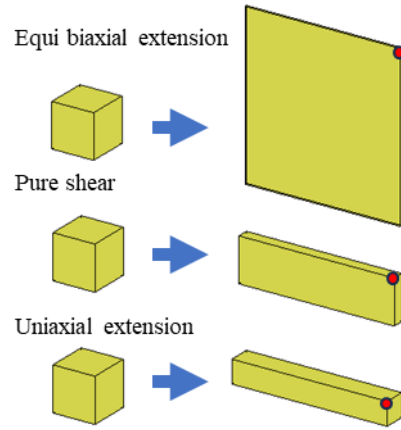


Fig.2 Block deformation under biaxial, shear, and uniaxial loading

図 1 は合計 42 パターンの C_{10}, C_{01} の組み合わせであり、青色の 37 点が訓練データ、オレンジ色の 5 点が検証データである。灰色で示したものは実験データであり、 C_{10} は C_{01} の約 4 から 5 倍という範囲を抑えつつ、実験データを内包する形でデータセットを作成した。検証データは三角形領域の上方から下方にかけて満遍なく配置しており、これは三角形領域内における予測精度の傾向を確認することを目的としている。図 2 で解析対象は一辺が 1mm の立方体であり、一つの六面体一次要素で構成される。赤の点はデータの物理量の取得点であり、最大、中間、最小主応力、最大、中間、最小主ひずみを取得した。これらから伸長比である λ とひずみ不変量である I を計算した。伸長比は最大、中間、最小主ひずみから計算され、元の長さに対しどれだけ伸びたかを表す比率であり、 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ となる。ひずみ不変量は $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ から計算され I_1, I_2 となり長さ変化、面積変化を表す量である。これらを機械学習に用いる入力因子として学習させる。

2・2 機械学習モデル

図 3 に今回用いたニューラルネットワークの構造を示す。Predictor 1 では入力因子を均等二軸、平面せん断、単軸の最大、中間、最小主応力、主ひずみとし、Mooney モデル (2 項モデル) の C_{10}, C_{01} を潜在変数として予測する。Predictor 2 では $C_{10}, C_{01}, \lambda, I$ を入力因子として、ひずみエネルギー W を予測する。現段階では両予測モデルを独立に学習させているが、最終的にはこれらを統合し、Predictor 1 で予測した C_{10}, C_{01} を入力因子として、Predictor 2 で W を予測する統合モデルの構築を目指す。Predictor 1 の予測精度が十分に確保された場合には、その重みを固定し、Predictor 2 の学習に活用することで転移学習の技術を取り入れた構成を想定している。

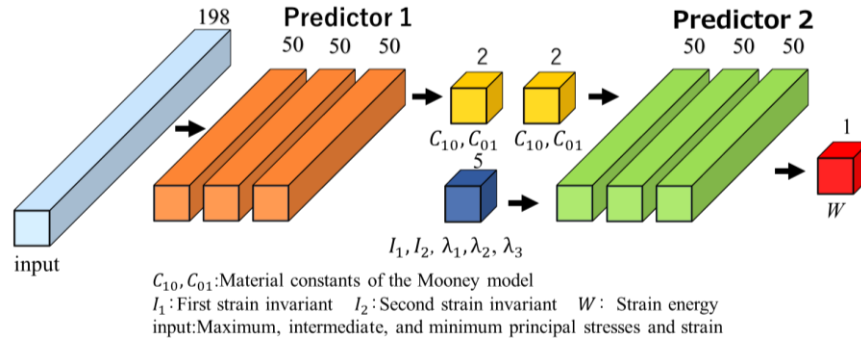


Fig.3 Structural diagram of a neural network

3. 結 果

Predictor 1 の予測結果を図 4 に示す。最小誤差は 0.004%，最大誤差は 0.93%で予測できた。 C_{10} に関しては中央付近の誤差が 1%未満で抑えられた一方，外側に近い点で 1%に近い誤差が生じた。これは学習モデルが補完しやすい領域とそうでない領域が存在するためであると考えられる。 C_{10} は最大誤差と最小誤差で約 1%の差があったのに対し， C_{01} は精度のばらつきが小さかった。この違いは C_{10} の値の種類が多く， C_{01} より汎化的に学習できていたためであると考えられる。Predictor 2 の予測結果を図 5 に示す。Predictor 2 の予測結果は最大差 0.358MJ/m³，平均絶対誤差 0.0676 MJ/m³であった。最大差，MAE が最も大きくなったのは， W の最大値が 5 点の検証データ中最大の点であった。これは MAE，最大差が出力の大きい値に対して敏感であるためと考えられる。よって W が小さい範囲において十分に評価ができていないため，別の誤差指標を導入する必要がある。また W を λ で偏微分することによって応力が求められる。単軸，平面せん断は式 (2)，均等二軸は式 (3) を使い，応力を導出し，その結果を図 6 に示す。

$$t = \lambda \frac{\partial W}{\partial \lambda} \quad (2)$$

$$t = \frac{1}{2} \lambda \frac{\partial W}{\partial \lambda} \quad (3)$$

応力の予測は最大差 2.22 MPa，平均絶対誤差 0.248 MPa となった。応力は W よりも誤差が大きい傾向にあった。これは応力が W を微分することによって求められる量であり， W のわずかな誤差が傾きとして強調されやすいためと考えられる。よって， W の誤差が小さくても，応力では誤差が増幅されている可能性があるため， W の評価だけでなく，応力の評価も行うことが重要である。

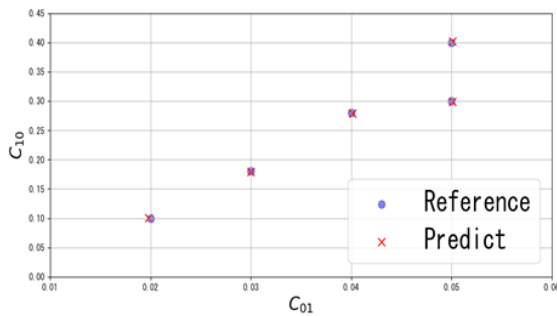


Fig.4 Prediction results for C_{10} and C_{01}

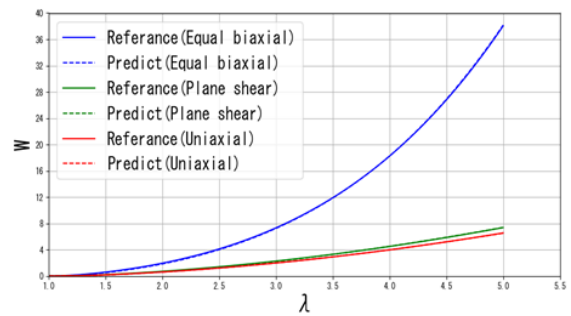


Fig.5 Predicted strain energy results

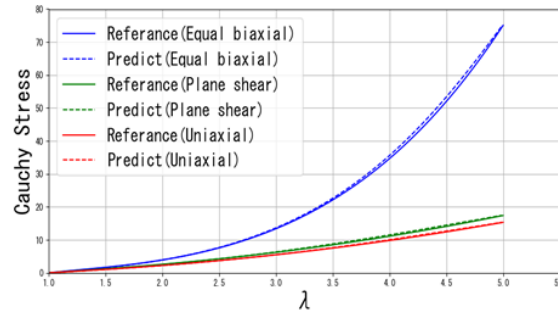


Fig.6 Predicted stress results obtained by partial differentiation of W with respect to λ

4. 考 察

C_{10}, C_{01} はニューラルネットワークの構成上、潜在変数としての役割を果たしている．同時に C_{10}, C_{01} は解釈性があるパラメータであるため、ブラックボックス化する傾向がある機械学習において、説明性の向上が期待できる．本研究では、最終的に Predictor 1 の学習した重みを再利用するため、この点から転移学習の枠組みが適用可能であることが示された．従来の構成則では高精度のものは5以上のパラメータを含む．しかし、機械学習を用いた構成則モデルでは非線形問題に対する性能の高さから、わずか2つの潜在変数であっても高精度な予測が可能であると考えられる．データセットに関しては設定した C_{10}, C_{01} の範囲内では予測精度において十分と判断される．しかし、今後より広範囲な C_{10}, C_{01} の分布が必要とされる場合にはデータセットの追加が必要である．

W の最大差、MAEによる誤差は1 MJ/m³未満であり、グラフ上でも予測と真値がほぼ一致しているため、良好な結果となった．しかし、応力は誤差が1MPaを超える場合もあるため、さらなる高精度化が望まれる．加えてゴム製品は、使用時のひずみが10%程度までであることが多いため、このひずみ範囲の予測精度は重要である．現状、この範囲での精度評価を十分に行えていないため、今後の課題として必要に応じてデータ拡張等の手法により精度向上を図る必要がある．

5. 結 言

汎用非線形有限要素法解析ソフトウェア Marc で利用できる Mooney モデル (2 項モデル) の計算結果を用い、材料構成則の代替モデル構築を試みた．ひずみエネルギー W は良好な結果を示した．Predictor 1 の重みを固定するため、転移学習の枠組みを利用できることが確認された．より広範囲な C_{10}, C_{01} の分布が必要とされる場合にはデータセットの追加が必要である．ひずみエネルギー W の予測においてひずみが小さい10%未満の精度向上が課題である．今後は Mooney モデル (2 項モデル) ベースの Predictor 1 を活用し、高精度なモデルへ適用範囲を検討する．

文 献

- (1) Masi, F., Stefanou, I., Vannucci, P., and Maffi-Berthier, V., “Thermodynamics-Based Artificial Neural Networks for Constitutive Modeling,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 147 (2021), Article No. 104277.
- (2) Dornheim, J., Morand, L., Nallani, H.J., and Helm, D., “Neural Networks for Constitutive Modeling: From Universal Function Approximators to Advanced Models and the Integration of Physics,” *Archives of Computational Methods in Engineering*, Vol. 31, (2024), pp. 1097–1127.
- (3) Masi, F., and Einav, I., “Neural Integration for Constitutive Equations Using Small Data”, *Transactions of the ASME, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 420 (2024), Article No. 116698.
- (4) MSC Software Corporation, Marc® 2024.2 Volume A: Theory and User Information, Hexagon, 2024.