

平成 21 年 3 月 31 日現在

研究種目：基盤研究 (A)

研究期間：2006～2008

課題番号：18206088

研究課題名 (和文) 先端機能材料を用いた機械素子の計算モデリングに関する研究

研究課題名 (英文) Computational Modeling of Mechanical Devices Using Advanced Functional Materials

研究代表者

都井 裕 (TOI YUTAKA)

東京大学・生産技術研究所・教授

研究者番号：40133087

研究成果の概要：形状記憶合金、導電性高分子などの先端機能材料を用いたアクチュエータ素子などの機械素子の設計を合理的に行うためには、電磁界、熱伝導、金属相変態、電気化学反応などが連成した力学的挙動の計算予測が不可欠である。本研究では、各種の先端材料およびそれらを用いた機械素子に対する計算モデリングを総合的に推進した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	10,800,000	3,240,000	14,040,000
2007 年度	4,400,000	1,320,000	5,720,000
2008 年度	3,800,000	1,140,000	4,940,000
年度			
年度			
総計	19,000,000	5,700,000	24,700,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学 機械材料・材料力学

キーワード：連続体力学

1. 研究開始当初の背景

(1) 本研究の全体構想は、以下のとおりである。

形状記憶合金 (Shape Memory Alloy, SMA と略称)、強磁性形状記憶合金 (Ferromagnetic Shape Memory Alloy, FSMA と略称)、多孔質形状記憶合金 (Porous Shape Memory Alloy, PSMA と略称)、イオン導電性高分子複合材 (Ionic-conduction Polymer Metal Composites, IPMC と略称)、導電性高分子 (Conducting Polymer, CP と略称) などの先端機能材料を用いたアクチュエータ素子などの機械素子の設計を合理的に行うためには、電磁界、熱伝導、金属相変

態、電気化学反応などが連成した力学的挙動の計算予測が不可欠であるが、利用できる既存の研究成果は多くない。そこで各種の先端材料およびそれらを用いた機械素子に対する計算モデリングを総合的に推進することを全体構想とする。

(2) 国内外の関連研究動向、自らの研究実施状況を踏まえた、本研究の独創性・特色に関する位置付けは、以下のとおりである。

TiNi 系の形状記憶合金の構成式モデリングに対しては、Brinson, Auricchio と Taylor, Tokuda と Sittner, Sun と Li などによる研究が知られているが、アクチュエータ素子(コ

イルばね)の超弾性・大変形有限要素解析は、代表者らの最近の研究が先駆的である。FePd系などの強磁性形状記憶合金アクチュエータ素子の磁場・超弾性有限要素解析の試みは本研究以外に見られない。また多孔質形状記憶合金の材料モデリングに対しては、EntchevとLagoudas, Zhaoらの先駆的研究があるが、一般的構成式モデリングと機械素子解析への適用を試みるのが、本研究の特色である。

イオン導電性高分子については、IPMC (Ionic Polymer Metal Composite)の単純曲げ変形のモデリングがOguroら、PopovicとTaya, Tadokoroら、Nemat-NasserとWuなどにより試みられているが、電気化学・力学有限要素解析は代表者らの最近の研究が先駆的であり、アクチュエータ設計に適用可能な汎用的有限要素解析の試みは本研究以外に見当たらない。またポリピロールなどの導電性高分子の材料モデリング、材料開発に対しては、Della Santaら、Haraらの先駆的研究があるが、電気化学・力学連成挙動の有限要素モデリングは本研究の独創的な試みである。

(3) この研究課題の準備状況は、以下のとおりである。

形状記憶合金に対しては既に、NiTiの超弾性挙動と形状記憶挙動を対象として、既存の構成方程式を拡張した新しい構成式の定式化を提案した。さらに、はり、コイルばねなどの超弾性大変形挙動を対象とした有限要素解析の定式化を行い、はりに対する計算結果を文献による実験結果と比較検討することにより、その有用性を実証した。また、コイルばねに対する計算結果をワシントン大学より提供された実験結果と比較検討することにより、開発プログラムの妥当性を検証した。さらに、前述の特別研究員奨励費による研究課題「形状記憶合金デバイス設計のための計算力学システムの開発」において、強磁性形状記憶合金(FePd)コイルばねおよび形状記憶合金コンポジット(SMA・Fe)コイルばねの磁場・超弾性連成挙動のシミュレーションに取り組んでいる。

導電性高分子に対しては既に、Nafion膜を用いたIPMC材の1次元電気化学応答・力学連成挙動に対する有限要素モデリングと計算を行い、文献による数値解およびワシントン大学・知的材料システム研究センターより提供された実験結果と比較検討することにより、開発プログラムの妥当性を検証した。さらに、前述の特別研究員奨励費による研究課題「高分子アクチュエータの電気化学・力学挙動の計算モデリングに関する研究」において、Nafion膜の2次元電気化学・力学挙動の有限要素解析、Flemion膜の1次元電気化学・挙動の有限要素解析に取り組んでいる。

本申請における研究課題は、これらの萌芽

的研究を出発点として、より汎用的・実用的な計算力学システムを構築することを目的としている。従来および現在の研究における形状記憶合金および導電性高分子アクチュエータの有限要素解析は、いずれも他に例のない先進的な試みであり、それらの研究をさらに拡張・発展させた、各種の形状記憶合金系および導電性高分子系の材料および機械素子のマルチフィールド挙動に対する新しい計算モデリングと連成解析アルゴリズムを含む統合的計算力学システムの構築は世界初のプロジェクトと言ってよく、従来からの共同研究機関であるワシントン大学・知的材料システム研究センターのみならず、日米の複数の研究機関、企業等からその完成が待たれている。

2. 研究の目的

(1) 本研究課題の具体的な目的は、以下のとおりである。

形状記憶合金としてNiTi(ニチノール)、強磁性形状記憶合金としてFePd(鉄・パラジウム系)、多孔質形状記憶合金としてPorous NiTi、イオン導電性高分子としてNafionおよびFlemion、導電性高分子としてPPy(ポリピロール)などの注目度の高い先端材料を選択する。これらの先端材料のマルチフィールド下(電磁場、温度場、相変態場、電気化学反応場、力学場の連成下)における材料挙動のモデリング(構成式モデリング)、それらの先端材料を用いた機械素子設計に利用可能な有限要素連成解析アルゴリズムを構築する。多様な先端材料の構成方程式系を迅速かつ柔軟にインプリメントできるように各サブプログラム間の独立度が高いシステム設計とし、並列計算による計算効率向上も図る。

(2) 期間内に明らかにしようとする内容は、以下のとおりである。

形状記憶合金に対しては、NiTiの超弾性挙動、FePdの磁気・超弾性挙動、Porous NiTiの多孔質超弾性挙動を対象とした3次元構成式モデリングを行い、これらを用いた3次元機械素子の磁場・超弾性解析法を確立するとともに、機械素子設計を支援するための汎用的な計算システムのプロトタイプを開発する。導電性高分子に対しては、NafionおよびFlemionの2次元電気化学挙動、ポリピロールの2次元受動および能動応答挙動を対象とした計算モデリングを行い、これらを用いた3次元機械素子の電気化学・多孔質弾性解析法を確立するとともに、機械素子設計を支援するための汎用的な計算システムのプロトタイプを開発する。解析結果をワシントン大学・知的材料システム研究センターによる材

料およびアクチュエータ試作試験結果などと比較し、開発プログラムの信頼性と有用性を検証する。

(3) 当該分野における本研究(計画)の学術的な特色・独創的な点は、以下のとおりである。

本研究の学術的な特色・独創的な点は以下の2点である。すなわち、(1)現在開発途上にあり注目度の高い形状記憶合金系(FSMA および PSMA)と導電性高分子系(IPMC および CP)の代表的先端材料に対し、熱力学とマイクロメカニクスに基づく一般的な構成方程式モデリングを確立すること、(2)これらの先端材料を用いた機械素子の応答に対して、これまでほとんど試みられていない電磁場、温度場、相変態場、電気化学反応場、力学場の連成下のマルチフィールド有限要素解析法を確立することである。

3. 研究の方法

(1) 計算モデリングの基本概念の構築を、以下のように進める。

先端機能材料・機械素子の計算モデリングに対する基本概念を構築する。基本方針を以下に列挙する。多様な先端材料の構成式モデリングを迅速かつ柔軟にインプリメントするためのプラットフォームとして活用されることを念頭に、構成式モデリング部と機械素子解析部とを極力独立ルーチン化した計算システム設計とする。多様な先端材料への拡張発展性に配慮して一般性の高いモデリング、すなわち熱力学およびマイクロメカニクスに基礎を置く内部状態変数表示の構成式モデリングを行う。機械素子解析手法としては、弱連成解析(weakly-coupled analysis)法あるいはstaggard法に基づく3次元有限要素解析法とする。

(2) 形状記憶合金材料の計算モデリングを、以下のように進める。

形状記憶合金の材料挙動においては、超弾性挙動が支配的である。すなわち、オーステナイト変態終了温度 A_f 以上の温度において応力負荷および除荷した場合、変態前弾性負荷 マルテンサイト変態開始 マルテンサイト変態終了 変態後弾性負荷・除荷 逆変態(オーステナイト変態)開始 逆変態(オーステナイト変態終了) 変態前弾性除荷の経路を辿って、元の形状を回復する。温度がマルテンサイト変態開始温度 M_s 以上でオーステナイト変態開始温度 A_s 以下の場合には変形が全く回復しないが、除荷後に温度を A_f 以上に上げることにより、元の形状に回復し、これを形状記憶挙動と呼ぶ。形状記憶合金として NiTi(ニチノール)、強磁性形状記憶合

金として FePd(鉄・パラジウム系)、多孔質形状記憶合金として Porous NiTi を選択し、以下の材料挙動に対して、熱力学およびマイクロメカニクスに基礎を置く内部状態変数表示の構成式モデリングを行う。NiTi の超弾性挙動と形状記憶挙動を対象とした3次元構成式モデリング。FePd の磁気・超弾性挙動と形状記憶挙動を対象とした3次元構成式モデリング。Porous NiTi の多孔質超弾性挙動と形状記憶挙動を対象とした3次元構成式モデリング

材料定数の取得、構成式モデリングの実験的検証、設計へのフィードバックなどの実験的側面については、文献およびワシントン大学・知的材料システム研究センターの支援を受ける。

(3) 導電性高分子材料の計算モデリングを、以下のように進める。

導電性高分子の材料挙動においては、電気化学・力学連成挙動が支配的である。例えば Nafion 膜に白金電極をめっきした IPMC はりにおいては、電圧負荷により水と陽イオン(ナトリウムイオン)が陰極側に瞬時に移動し、陰極側が膨潤、陽極側が収縮する。その結果、はりは最初、陽極側に曲がるが(前進運動)、やがて自由水分子が陽極側に拡散することにより、はりの変形は徐々に回復する(後退運動)。Flemion 膜および PPy 膜においては、その反応機構は異なるが、いずれにしてもイオンの移動あるいは出入に伴う体積変化はアクチュエーションメカニズムとなっている。イオン導電性高分子として Nafion および Flemion、導電性高分子として PPy(ポリピロール)を選択し、以下の材料挙動に対して、電気化学、多孔質弾性論に基礎を置く、内部状態変数表示の計算モデリングを行う。Nafion の2次元電気化学・3次元力学挙動の材料計算モデリング。Flemion の2次元電気化学・3次元力学挙動の材料計算モデリング。PPy の2次元電気化学・3次元多孔質弾性挙動の材料計算モデリング。

材料定数の取得、構成式モデリングの実験的検証、設計へのフィードバックなどの実験的側面については、文献およびワシントン大学・知的材料システム研究センターの支援を受ける。

(4) 形状記憶合金デバイス(機械素子)の計算モデリングを、以下のように進める。

各種の形状記憶合金に対する構成式モデリングを、弱連成解析法に基づく Galerkin 型有限要素法にインプリメントすることにより、以下に示す3次元形状記憶合金デバイス設計を支援するための汎用的な計算システムのプロトタイプを開発する。NiTi コ

ンポジットデバイスの超弾性挙動と形状記憶挙動に対する 3 次元有限要素モデリング。

FePd デバイスの磁気・超弾性挙動と形状記憶挙動に対する 3 次元有限要素モデリング。

Porous NiTi デバイスの多孔質超弾性挙動と形状記憶挙動に対する 3 次元有限要素モデリング。

(5) 導電性高分子デバイス（機械素子）の計算モデリングを、以下のように進める。

各種の導電性高分子に対する構成式モデリングを、弱連成解析法に基づく Galerkin 型有限要素法にインプリメントすることにより、以下に示す 3 次元形状記憶合金デバイス設計を支援するための汎用的な計算システムのプロトタイプを開発する。Nafion デバイスの 2 次元電気化学・3 次元力学挙動の有限要素モデリング。Flemion デバイスの 2 次元電気化学・3 次元力学挙動の有限要素モデリング。PPy デバイスの 2 次元電気化学・3 次元多孔質弾性挙動の有限要素モデリング。

(6) 高速計算システムの構築と検証を、以下のように進める。

19 年度以降に実施する機械素子レベルの計算は 18 年度実施の材料レベルの計算と比較し、計算量が膨大となる。そこで 18 年度の購入備品である HP Itanium Server rx2620 (3 nodes) を Myrinet により高速ネットワーク結合して計算効率の飛躍的向上を図るとともに、大規模高速計算のための並列処理ソルバーを開発する。以上の過程を経て全体システムのプロトタイプを完成し、これを用いて利用可能な実験結果に対する大規模比較計算を行い、問題点を抽出する。抽出されたモデリング、計算アルゴリズムおよびプログラミング上の問題点を解消し、全体システムを完成する。本プログラムの利用者マニュアルを含む報告書を作成する。

(7) 経費と研究計画の関連性は、以下のとおりである。

プログラム開発および数値計算は購入設備備品のサーバシステム HP Itanium Server rx2620 (3 nodes) を用いて行う。本研究のような複数かつ複雑な連成場を伴うマルチフィールド有限要素解析システムの開発および搭載に際しては、一貫して同じハードウェア環境を用いること、高速並列計算の可能なハードウェア環境を整備することが、システム開発上もユーザーの作業性からも重要であり、そのための必要十分な機能を有する基盤ハードウェアとして本機を選択した。消耗品、旅費等の他の経費は、計算機用の消耗品、国内・国外の成果発表旅費、投稿料、別刷代、大学院生などへの謝金を含む。

4. 研究成果

(1) 以下の材料挙動に対して、熱力学およびマイクロメカニクスに基礎を置く内部状態変数表示の構成式モデリングを行った。

NiTi の超弾性挙動と形状記憶挙動を対象とした 3 次元構成式モデリング
FePd の磁気・超弾性挙動と形状記憶挙動を対象とした 3 次元構成式モデリング

Porous NiTi の多孔質超弾性挙動と形状記憶挙動を対象とした 3 次元構成式モデリング

(2) 以下の材料挙動に対して、電気化学、多孔質弾性論に基礎を置く、内部状態変数表示の計算モデリングを行った。

Nafion の 2 次元電気化学・3 次元力学挙動の材料計算モデリング

Flemion の 2 次元電気化学・3 次元力学挙動の材料計算モデリング

PPy の 2 次元電気化学・3 次元多孔質弾性挙動の材料計算モデリング

(3) 以下に示す 3 次元形状記憶合金デバイス設計を支援するための汎用的な計算システムのプロトタイプを開発した。

NiTi コンポジットデバイスの超弾性挙動と形状記憶挙動に対する 3 次元有限要素モデリング

FePd デバイスの磁気・超弾性挙動と形状記憶挙動に対する 3 次元有限要素モデリング

Porous NiTi デバイスの多孔質超弾性挙動と形状記憶挙動に対する 3 次元有限要素モデリング

(4) 以下に示す 3 次元形状記憶合金デバイス設計を支援するための汎用的な計算システムのプロトタイプを開発した。

Nafion デバイスの 2 次元電気化学・3 次元力学挙動の有限要素モデリング

Flemion デバイスの 2 次元電気化学・3 次元力学挙動の有限要素モデリング

PPy デバイスの 2 次元電気化学・3 次元多孔質弾性挙動の有限要素モデリング

(5) 本研究過程において、形状記憶合金系および導電性高分子系の先端材料に対する構成方程式モデリング、高精度のマルチフィールド有限要素解析手法、効率的な分散プログラミング・分散コンピューティングなどに関する多くの学術的資産が形成された。本研究により確立された材料および機械素子レベルの計算モデリング手法と解析プログラム

が多くの先端材料およびアクチュエータなどの機械素子開発者の利用に供されることにより、ロボティクス、MEMS などにおける先端材料・機械素子の設計・試作プロセスを合理化、迅速化することが可能となり、これらの早期実用化を促進することができる。さらに、これらの機械素子を応用した各種装置・機器の高機能化、多機能化を通じ、機械・生体工学、輸送機器工学、宇宙・海洋工学、医用工学・工業などに対する多大な貢献が期待され、日常生活の快適化、フロンティア拡大、環境調和などの観点から大きな社会貢献を成すことが予想される。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計12件)

Yutaka Toi, Dae-Gon Choi, Computational Modeling of Superelastic Behaviors of Shape Memory Alloy Devices Under Combined Stresses, Journal of Computational Science and Technology, Vol.2, No.4, pp.535-546, 2008, 有

Yutaka Toi, Woo-Sang Jung, Computational Modeling of Electrochemical - Poroelastic Bending Behaviors of Conducting Polymer (PPy) Membranes, Journal of Computational Science and Technology, Vol.2, No.4, pp.523-534, 2008, 有

Yutaka Toi, Dae-Gon Choi, Constitutive Modeling of Porous Shape Memory Alloys Considering Strain Rate Effect, Journal of Computational Science and Technology, Vol.2, No.4, pp.511-522, 2008, 有

Yutaka Toi, Woo-Sang Jung, Finite Element Modeling of Electrochemical - Poroelastic Behaviors of Conducting Polymer Films, Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol.2, No.7, pp. 865-876, 2008, 有

都井裕、鄭祐尚、導電性高分子(PPy)膜の電気化学・多孔質弾性曲げ挙動の計算モデリング、日本機械学会論文集(A)、第74巻、第740号、pp. 513-519、2008、有

都井裕、崔大坤、形状記憶合金素子の組合せ応力下における超弾性挙動の計算モデリング、日本機械学会論文集(A)、第74巻、第739号、pp. 391-398、2008、有

Yutaka Toi, Jong-Bin Lee, Minoru Taya, Magneto-Superelastic Analysis of Shape Memory Alloy Helical Spring Actuators Controlled by Magnetic Force,

Journal of Computational Science and Technology, Vol.2, No.1, pp.11-22, 2008, 有

Yutaka Toi, Woo-Sang Jung, Finite Element Modeling of Electrochemical - Poroelastic Behaviors of Conducting Polymers, Computers and Structures, Vol.85, Nos.19/20, pp.1453-1460, 2007, 有

都井裕、崔大坤、ひずみ速度の影響を考慮した多孔質形状記憶合金の構成式モデリング、日本機械学会論文集(A)、第73巻、第731号、pp. 753-760、2007、有

都井裕、李宗賓、田谷稔、磁気力により制御される形状記憶合金コイルばねアクチュエータの磁場・超弾性解析、日本機械学会論文集(A)、第72巻、第720号、pp. 1207-1214、2006、有

都井裕、鄭祐尚、導電性高分子膜の電気化学・多孔質弾性挙動の有限要素モデリング、日本機械学会論文集(A)、第72巻、第719号、pp. 1065-1071、2006、有

姜成洙、都井裕、フレミオンを用いたイオン導電性高分子アクチュエータの電気化学・力学挙動の有限要素解析、日本機械学会論文集(A)、第72巻、第716号、pp. 397-404、2006、有

[学会発表](計4件)

Dae-Gon Choi, Yutaka Toi, Finite Element Analysis of Three-Dimensional Superelastic Behaviors of Shape Memory Alloy Devices, Proceedings of International MultiConference of Engineers and Computer Scientists 2009 (The 2009 IAENG International Conference on Scientific Computing), pp. 2205-2210, 2009, 有

Woo-Sang Jung, Yutaka Toi, Finite Element Analysis of Ionic-Conducting Polymer Metal Composite Actuators Using Flemion, Proceedings of International MultiConference of Engineers and Computer Scientists 2009 (The 2009 IAENG International Conference on Scientific Computing), pp. 2123-2128, 2009, 有

Yutaka Toi, Jong-Bin Lee, Minoru Taya, Finite Element Analysis of Magneto-Superelastic Behavior of Shape Memory Alloy Composite Actuator, Proceedings of International MultiConference of Engineers and Computer Scientists 2008 (The 2008 IAENG International Conference on Scientific Computing), pp.1986-1990, 2008, 有

Woo-Sang Jung, Yutaka Toi, Finite Element Analysis of Electrochemical-Poroelastic Behaviors of Conducting Polymer (PPy) Films, Computational Methods in Engineering and Science (Proceedings of the EPMESC X, Sanya, China), pp.233, 2006, 有

〔図書〕(計1件)

都井裕、計算固体力学入門(材料と構造のモデリングとシミュレーション)、コロナ社、2008

6. 研究組織

(1) 研究代表者

都井 裕 (TOI YUTAKA)

東京大学・生産技術研究所・教授

研究者番号：40133087

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし