

令和 2 年 6 月 11 日現在

機関番号：11301

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2018～2019

課題番号：18H05881・19K21062

研究課題名(和文) 時空間マルチスケール解析理論による温度・変形場のマイクロ・マクロ非定常性の連関

研究課題名(英文) Space-time homogenization for fully thermo-mechanical coupled problems

研究代表者

松原 成志朗 (Matsubara, Seishiro)

東北大学・工学研究科・助教

研究者番号：40823638

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、外的負荷を受ける繊維強化熱可塑性樹脂(FRTP)を対象として、マイクロ構造内におけるマイクロ変形場とマイクロ温度場の非定常性を考慮した熱・機械強連成マルチスケール解析手法(時空間マルチスケール解析手法)を構築した。そして、いくつかの解析例題を通して擾乱温度場がマイクロ温度場の非定常性に関係し、それがユニットセルのサイズを伴ってマクロな非定常性に影響を与えることを例証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本手法によってはじめて複合材料のマイクロ構造に内在するマイクロな非定常性を考慮したマクロ構造の熱・機械連成挙動を評価することが可能となった。また、本手法は熱力学、および変分理論に完全に整合した論理体系を有する。このため、固体力学と非定常拡散の連成問題はもちろんのこと、化学反応を考慮したより一般性のあるマルチフィジックス問題への拡張も可能となる。さらに、フェーズフィールド法との親和性も高く、界面移動なども考慮したマルチフィジックス問題にも拡張が可能であると考えられる。したがって、本研究成果は、次世代のマルチスケール・マルチフィジックス計算力学の新基軸となるポテンシャルを有していると主張できる。

研究成果の概要(英文)：In this study, we proposed a method of thermo-mechanical coupled two-scale analysis (space-time multi-scale analysis) taken into account microscopic unsteadiness of deformation and temperature fields in order to simulate thermo-mechanical coupled behaviors of fiber-reinforced thermoplastics (FRTP). As a result, we illustrated that the fluctuation temperature is related to the microscopic unsteadiness of the microscopic temperature field and reflected in the macroscopic unsteadiness along with the unit-cell size.

研究分野：計算力学

キーワード：繊維強化熱可塑性樹脂 熱・機械強連成解析 マルチスケール解析 サイズ効果

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

外的負荷を受ける繊維強化熱可塑性樹脂 (FRTP) は、母材である熱可塑性樹脂の物性¹⁾を反映した温度依存の粘塑性流動を発現する。また、粘塑性流動に伴う熱可塑性樹脂のエネルギー散逸を熱源とする伝熱現象が、FRTP 内部の温度場を変化させる²⁾。このような一連の現象は、変形場と温度場が連成していることを示唆するが、FRTP のように内部に非均質性を有する複合材料においては、その様相はより複雑化する。具体的には、外的負荷を受ける FRTP の微視 (ミクロ) 構造内部では、母材と繊維材の界面近傍で変形が卓越し、局所的に大きな自己発熱が発生する。また、構成材料の伝熱特性の違いから、ミクロ温度場は非一様に時間変化する。同時に、母材物性の温度依存性により、力学特性の非一様な分布も経時変化する。

このようなミクロ的に非定常変化する変形場と温度場の実験的な観察は極めて困難であり、計算力学理論を駆使した数値的な予測評価手法が必要となる。ところが、これまで有効とされてきた数学的均質化法に基づくマルチスケール解析手法³⁾は、ミクロ構造単位 (ユニットセル) を無限に小さくした際の収束解を理論の前提としており、その結果、ミクロ構造内における物理現象は常に定常状態として扱われる。したがって、従来理論ではミクロ構造内における非一様な変形場と温度場の経時変化を考慮することができないため、古典的な数学的均質化法とは異なるアプローチで手法を構築しなければならない。

2. 研究の目的

本研究では、FRTP のミクロ構造内におけるミクロな非定常性を考慮した変形場と温度場の経時変化とともに、これが反映された巨視的 (マクロ) な熱・機械連成現象を数値的に予測するための時空間マルチスケール解析手法を構築する。

3. 研究の方法

本研究では、まず母材・繊維材ともに伝熱特性のみ有しているものと繊維材を超弾性、母材をポリカーボネート (PC) とした 2 種類の一方向強化材モデルを例として、ユニットセルモデルに対する熱・機械強連成均質化解析を実施した。そして、ミクロ構造内の非定常な熱・機械連成挙動の様相とこれらが反映されたマクロな材料特性の数値的な現象観察を行った。ポリカーボネートの材料挙動を再現しうる構成モデルは我々が独自に開発したものとし、熱・機械強連成解析手法には、増分型変分法⁴⁾を採用した。また、観察対象とするマクロスケールの挙動として、マクロ Cauchy 応力・マクロ温度場に加えて、マクロ熱慣性とマクロ自己発熱も考慮した。

続いて、得られた数値的な観察結果をもとに理論的な検討を行い、当初の目的であった時空間マルチスケール解析手法を構築した。具体的には、まず拡張 Hill-Mandel 条件⁵⁾を参照して、熱・機械的安定状態にある実寸のユニットセルが内部に蓄える全エネルギー変化率の体積平均が、対応するマクロ構造の物質点が内部に蓄える全エネルギー変化率に等しいとする仮定を設けた。そして、エネルギー変化率の停留問題について、その最適性条件としての Euler-Lagrange 方程式を求めることで、両スケールにおける熱・機械連成挙動のモデル化を行った。加えて、提案した解析手法を数値計算プログラムに実装するために、接線均質化³⁾による完全陰的更新アルゴリズムも構築した。

4. 研究成果

(1) 熱・機械強連成均質化解析によるマルチスケール非定常性に関する現象観察

① 熱・機械強連成均質化解析

慣例的な均質化法では、ユニットセルを周期的に配置することで形成される非均質体を非均質性が平滑化されたマクロ構造とユニットセルに分離して考え、その物理的相関関係を解析することによって非均質体の現象を評価する。ここで、いまユニットセルのみに注目するとき、ミクロな熱・機械連成挙動は、対応するマクロ物質点での状態変数を入力

【図-1: (I)】とするミクロ熱・機械連成問題を解くこと【図-1: (II)】によって評価される。ここで、古典的な数学的均質化法では、ミクロ熱伝導方程式に現れるミクロ非定常項は常にゼロであるが、本研究ではあえて考慮していることに注意する。一方で、対応するマクロ非定常性とマクロ自己発熱は、ミク

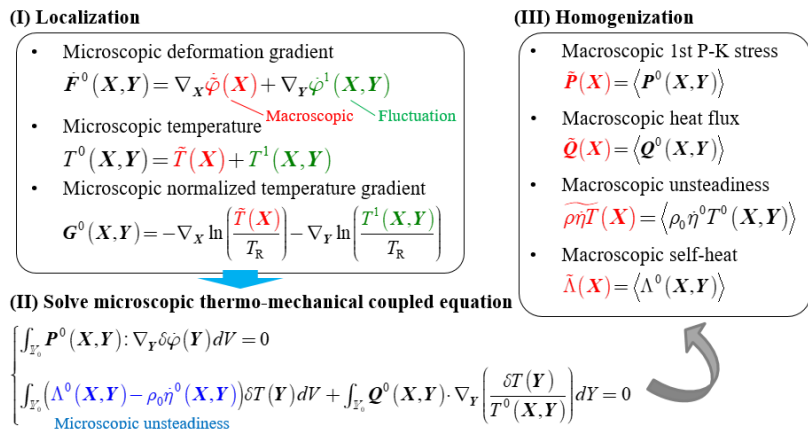


図-1 熱・機械強連成均質化解析の概要

ロ変数の体積平均によって均質化されること【図-1：(III)】で得られ、これにより、ミクロスケールの非定常な現象がマクロスケールにおける非定常な現象を特徴づけることになる。

② FRTP の非定常熱伝導問題

熱・機械連成問題においては、温度場の非定常な変化が現象の経時変化を強く特徴づけるため、本研究では、まず非定常熱伝導問題に絞って現象観察を試みた。例題として、 $\langle \alpha \rangle$ ：最初の100秒間でマクロ温度勾配を線形的に上昇させたのち一定に保つ例題と $\langle \beta \rangle$ ：最初から一定の温度勾配を与え続けるが、検討するユニットセルモデルを寸法別に3種類用意する例題の2種類を設定した。一方向強化材を模擬したユニットセルモデルを採用し、母材と繊維材の伝熱特性は、それぞれ実際のPCとガラス繊維のものを用いた。

問題 $\langle \alpha \rangle$ と $\langle \beta \rangle$ に対応する解析結果をそれぞれ図-2、図-3に示す。まず、図-2を見るとマクロ温度勾配の上昇に伴って、マクロ非定常性やミクロ温度場の非一様な分布状態が大きくなるのが観察できる。一方で、マクロ温度勾配を一定に保つとミクロ温度場の分布状態は一樣となっていく、対応するマクロ非定常性も0に収束していく。このことから、マクロ非定常性の大きさは、ミクロ温度場の分布状態に関係し、両者はエントロピー速度を定量指標としてつながることがわかる。次に、図-3を見ると小さなサイズのユニットセルほどミクロ温度場の分布状態は一樣であり、対応するマクロ非定常性も小さくなるのがわかる。つまり、ミクロ非定常性を考慮した場合には、両スケールの温度場はユニットセルの寸法に依存するため、いわゆる2次均質化法⑥を駆使した理論構築が必要であることがわかる。また、ユニットセルサイズの縮小に対してマクロ非定常性は小さくなる様子を観察することができる。つまり、ユニットセルサイズが実寸に近いほど、サイズ変化に対するマクロ非定常性の変化は対数軸で見て微小であるが、サイズが無限小に近くなるほどサイズ変化に伴うマクロ非定常性の変化は、対数軸で見て大きくなるのがわかる。

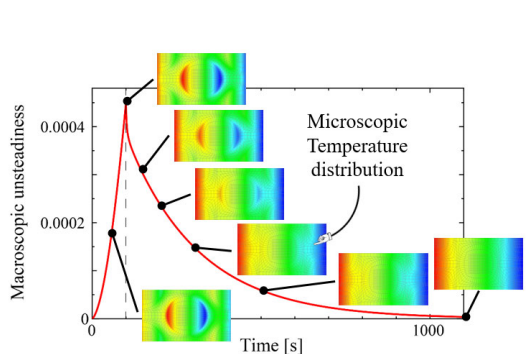


図-2 問題 $\langle \alpha \rangle$ に対するマクロ非定常性とミクロ温度場の時刻歴変化

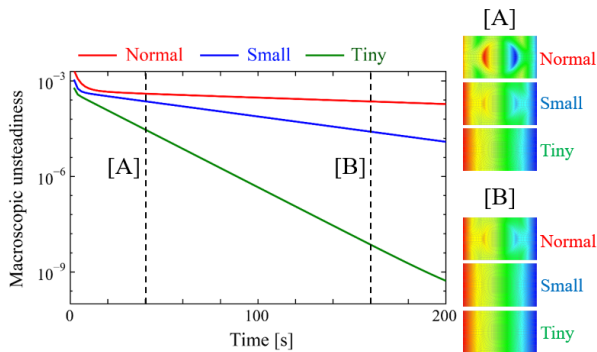


図-3 問題 $\langle \beta \rangle$ に対するマクロ非定常性とミクロ温度場の時刻歴変化

③ FRTP の熱・機械連成問題

次に、繊維材を超弾性、母材をポリカーボネート (PC) とした一方向強化材モデルの引張変形に対する熱・機械連成現象を観察した。図-4にマクロ非定常性とマクロ自己発熱の時刻歴変化、および各時刻に対応するミクロ温度場の分布状態を示す。まず図中[A]は、塑性降伏前の状態に対応する。つまり、非弾性変形による自己発熱はゼロであるが、断熱膨張による効果でマクロ非定常性は僅かに負の値を示し、対応するミクロ温度場も非一様な分布を有している。次に、図中[B]では熱可塑性樹脂の流動性が極大となるに伴って、最大のエネルギー散逸が観測される。しかし、図中[C]や[D]の変形状態では熱可塑性樹脂のひずみ硬化によって弾性が支配的となり、マクロな非定常性、およびマクロ自己発熱は徐々に減少して一定値に収束する。一方で、ユニットセル内部のミクロ温度場は、[B]から[D]にかけて常に非一様な分布状態となっているが、これは対応するマクロ非定常性が常にある一定の値を有することに起因する。さらに、全体を通してマクロ非定常性とマクロ自己発熱の時刻歴変化

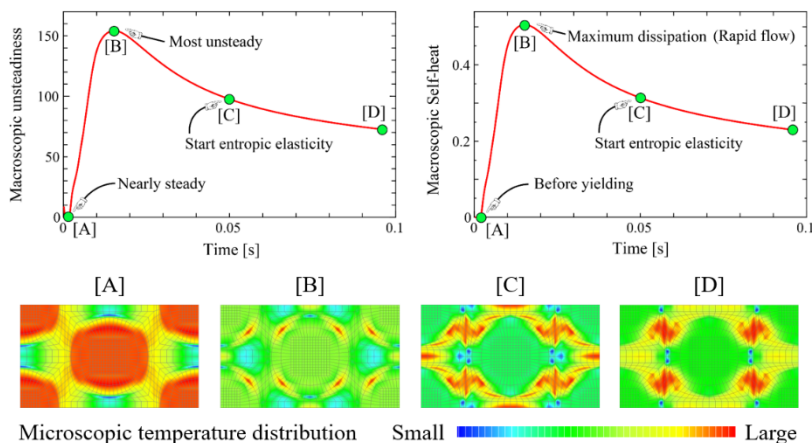


図-4 マクロ非定常性 (左上) とマクロ自己発熱 (右上) の時刻歴変化、および各時刻に対応するミクロ温度場

は相似形となっていることが観察される。このことから、自己発熱が卓越する問題では、マクロ非定常性は、マクロ自己発熱によって特徴づけられることがわかる。

(2) 時空間マルチスケール解析手法

① 解析手法の概要

続いて、(1)にて得られた複合材料の熱・機械連成挙動に関する現象観察の結果をもとに理論的な検討を行い、図-5 に示す時空間マルチスケール解析手法を構築した。本手法は、単位時間あたりにユニットセル内部に蓄積される全エネルギーの体積平均が、対応するマクロな物質点内部に蓄積される単位時間あたりの全エネルギー変化率に等しいとする関係を理論の出発点としている。したがって、古典的な数学的均質化法とは異なり、ミクロな状態変数はユニットセルのサイズに依存する。そして、これは(1)・②で得られた考察点を反映したものである。また、本手法で特徴的な点は、両スケールの非定常性を特徴づけるエントロピー変化に加えてマクロ熱流束もユニットセルのサイズに依存することである。これは、ユニットセルのサイズが大きくなるほど、ユニットセルの空間で正規化した伝熱の度合いが小さくなることを反映した結果であると考えられる。

一方で、本手法では、両スケールの熱・機械連成問題が全エネルギー変化率の停留問題として規定されている。このことから、本手法は熱力学、および変分理論に整合していると解釈でき、陰的更新計算や誤差算出などの点で有限要素解析上の利点を有した手法である。

✓ Microscopic energy minimization problem

$$\inf_{\tilde{u}_{n+1}^0, \tilde{T}_{n+1}^0} \sup_{\tilde{\psi}_{n+1}^0, \tilde{\chi}_{n+1}^0} \left[\int_{\mathbb{Z}_0} \left\{ \tilde{\rho}_0^0 (\tilde{\psi}_{n+1}^0 - \tilde{\psi}_n^0) + \tilde{\rho}_0^0 (\tilde{T}_{n+1}^0 - \tilde{T}_n^0) \tilde{\eta}_n^0 - \Delta t \tilde{\chi}_{n+1}^0 \right\} dY \right]$$



Localization

$$\tilde{F}_{n+1} \quad \tilde{G}_{n+1}$$



Homogenization

$$\tilde{P}_{n+1} \quad \tilde{Q}_{n+1}(Y) \quad \tilde{\rho}_0 \tilde{\eta}_{n+1}(Y)$$

✓ Macroscopic energy minimization problem

$$\inf_{\tilde{u}_{n+1}^0, \tilde{T}_{n+1}^0} \sup_{\tilde{\psi}_{n+1}^0, \tilde{\chi}_{n+1}^0} \left[\int_{\mathbb{Z}_0} \left\{ \tilde{\rho}_0 (\tilde{\psi}_{n+1} - \tilde{\psi}_n) + \tilde{\rho}_0 (\tilde{T}_{n+1} - \tilde{T}_n) \tilde{\eta}_n - \Delta t \tilde{\chi}_{n+1} \right\} dV - \mathcal{G}_{n+1}(\mathbf{u}_{n+1}^0, \tilde{T}_{n+1}^0) \right]$$

図-5 時空間マルチスケール解析手法の概要

② 非定常熱伝導問題

本研究では、時空間マルチスケール解析手法の基本的な性能を確認するために、内部温度が100°Cの矩形のマクロ構造の境界面を0°Cに固定した際の非定常熱伝導解析を行った。ユニットセルには、均質体、および一方向強化材を採用し、サイズ効果を確認するために、Case4を実寸倍として1/10ずつ縮小したユニットセルモデルを計4種類設定した。図-6と図-7にそれぞれ均質体と非均質体のユニットセルの場合におけるマクロ温度場の時刻歴変化を示す。まず、図-6を見ると、本手法は、ユニットセルのサイズ依存性を考慮しているにもかかわらず、すべてが同一の結果となっている。これは、擾乱温度場が常にゼロであるため、ミクロ非定常性は発現しないことに起因していると考えられる。そしてこの事実は、本手法が連続体の古典的な熱伝導問題の論理を踏襲していることを示しており、古典理論からの論理的整合性は保証されていると結論付けることが可能である。一方で、図-7を見ると、ユニットセルのサイズ効果が明確に現れていることが確認できる。特に、図-3 でみた現象と同様にユニットセルのサイズが小さくなるほどマクロ伝熱過程は急激に遅れをとる。このようなユニットセルサイズに依存してマクロ熱伝導が変化する現象は、本手法でのみ再現可能であり、今後、様々な物理問題への適用を模索していく予定である。

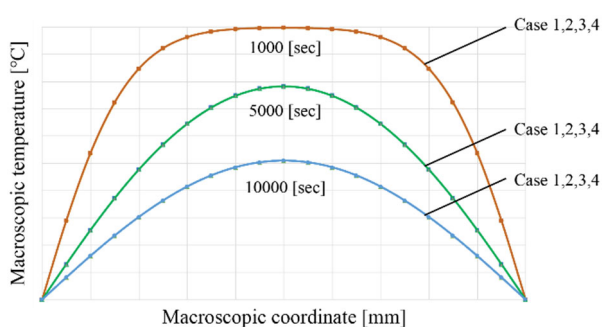


図-6 均質体の場合におけるマクロ温度場の時刻歴変化

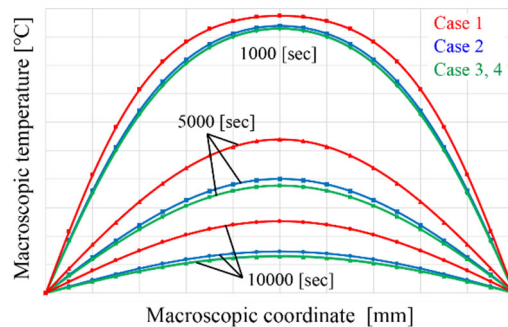


図-7 非均質体の場合におけるマクロ温度場の時刻歴変化

参考文献

- 1) M. C. Boyce, D. M. Parks, A. S. Argon, Large inelastic deformation of glassy polymers. parti: Rate dependent constitutive model, *Mech. Mater.* 7, 15–33 (1988).
- 2) S. Mortazavian, A. Fatemi S. R. Mellott, A. Khosrovaneh, Effect of cycling frequency and self - heating on fatigue behavior of reinforced and unreinforced thermoplastic polymers, *Polymer Engrg. Sci.*, 55(10), 2355-2367 (2015).
- 3) 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”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 192(31), 3531-3563 (2003).
- 4) Q. Yang, L. Stainier and M. Ortiz, A variational formulation of the coupled thermo-mechanical boundary-value problem for general dissipative solids, *J. Mech. Phys. Solids*, 54, 401-424 (2005)
- 5) E. A. de Souza Neto, P. J. Blanco, P. J. Sanchez and R. A. Feijoo, An RVE-based multiscale theory of solids with micro-scale inertia and body force effects, *Mech. Mater.*, 80, 136-144 (2015).
- 6) V. Kouznetsova, M. G. D. Geers and W. A. M. Brekelmans, Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme, *Int. J. Numer. Mech. Engrg.*, 54, 1235-1260 (2002)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

| | |
|--|-----------------|
| 1. 著者名 Seishiro Matsubara, Kenjiro Terada, Ryusei Maeda, Takaya Kobayashi, Masanobu Murata, Takuya Sumiyama, Kenji Furuichi, Chisato Nonomura | 4. 巻 - |
| 2. 論文標題 Viscoelastic-viscoplastic combined constitutive model for glassy amorphous polymers under loading/unloading/no-load states | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Engineering Computations | 6. 最初と最後の頁 - |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1108/EC-05-2019-0197 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

| |
|---|
| 1. 発表者名 松原成志朗 |
| 2. 発表標題 一般化収束論に基づく非正常熱伝導・固体力学連成マルチスケール解析 |
| 3. 学会等名 日本機械学会 第31回計算力学講演会 |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Seishiro Matsubara |
| 2. 発表標題 A variational framework for thermo-mechanical coupled two-scale boundary value problems |
| 3. 学会等名 COMPLAS2019（国際学会） |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Seishiro Matsubara |
| 2. 発表標題 Thermo-mechanical coupled Gradient-enhanced Two-scale Variational updates for Thermo-hyperelastic Composites |
| 3. 学会等名 APCOM2019（国際学会） |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 松原成志朗 |
| 2. 発表標題 2変数境界値問題に対する増分エネルギー汎関数の最小化アプローチ |
| 3. 学会等名 第24回計算工学講演会 |
| 4. 発表年 2019年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| | 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|--|---------------------------|-----------------------|----|
|--|---------------------------|-----------------------|----|