

機関番号：15301

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2009～2010

課題番号：21760080

研究課題名 (和文) ソフトマテリアルのマルチスケールメカニカルモデルの構築

研究課題名 (英文) Multiscale modeling of mechanical behavior of soft materials

研究代表者

内田 真 (UCHIDA MAKOTO)

岡山大学・大学院自然科学研究科・助教

研究者番号：90432624

研究成果の概要 (和文) : 工学的だけでなく、環境的にも着目を浴びているソフトマテリアルの力学特性を予測するためには、材料の不均一変形を高精度に把握することが重要である。本研究では、デジタル画像から材料に生じた不均一変形を精密に評価できる手法を開発し、変形場の発展を定量的に評価した。また、材料の階層構造を忠実に表現したマルチスケールモデルを用いた数値解析より、ミクロスケールの不均一変形が材料の力学特性に及ぼす影響を明らかにした。

研究成果の概要 (英文) : In order to predict the mechanical properties of soft materials, an accurate determination of non-uniform deformation of the materials is indispensable. In the present study, an accurate method to evaluate the non-uniform deformation in the material from digitalized images was developed and evolution of deformation field was evaluated quantitatively. Furthermore, the effect of microscopic non-uniform deformation behavior on the mechanical properties of material was investigated by numerical simulation using a multiscale mechanical model based on the material hierarchy.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	2,300,000	690,000	2,990,000
2010年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			0
年度			
年度			
総計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究分野：材料力学，固体力学，計算力学

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：ソフトマテリアル，マルチスケール，計算力学，有限要素法，デジタル画像関連法，不均一変形

1. 研究開始当初の背景

高分子材料やゲル、液晶、生体材料などに代表されるソフトマテリアルは、生産、利用、リサイクルの一環におけるエネルギー負荷が低く、21世紀はソフトマテリアルの時代と言われている。これまでに化学・生物系の学問を専門とする研究者によって数多くの機能材料が創成されており、様々な分野でその特性を発揮している。ソフトマテリアルの中でも比較的硬質なプラスチックに関しては、強度部材として広く適用されており、その力学特性に関する研究が盛んに行われている。

ソフトマテリアルと、金属材料などのハードマテリアルでは、強度、延性などの基礎的な力学特性は大きく異なっていることから、ソフトマテリアルに適した力学特性の評価技術の確立が重要な課題である。特にプラスチックなど、塑性変形過程で負の加工硬化率を示す材料では、塑性下降中に極めて強い不均一変形が発展するため、材料が均一に変形することを仮定して構築された従来の力学試験法では、材料の力学特性評価が困難となる。また、これらの材料は一般的に複雑な階層構造を有していることから、数値解析による変形挙動予測の精度を高めるためには、材料の構成関係に対して、ミクロスケールの不均一変形の影響を反映させることが重要である。

2. 研究の目的

本研究では、ソフトマテリアルの力学特性を忠実に予測可能な力学モデルを構築するために、次に示す実験・解析のそれぞれの研究目的を設定する。

(1) **実験的アプローチ**：デジタル画像相関法に基づいた高精度な変形場評価技術を開発することにより、材料が変形するときの不均一なひずみ場を定量的に評価する。材料表面

の変形中の連続デジタル画像から局所領域の変位を座標の高次の関数として取得することにより、ひずみやひずみ勾配を精度良く、かつ迅速に取得できるアプリケーションを開発する。開発したアプリケーションを用いて、単軸引張変形を与えたときの高分子材料のくびれ伝ば過程をデジタル画像として記録し、不均一変形場の発展を定量的に評価する。本評価手法は、局所領域におけるひずみ分布を用いることで、局所的な真応力を得ることが可能となる。得られた真応力と真ひずみの関係から、材料の局所領域の真応力-真ひずみ関係を評価し、材料の構成関係を非接触かつ高精度に評価する手法を構築する。

(2) **解析的アプローチ**：微視および巨視スケールの、異なる階層における不均一変形を同時に表現可能なマルチスケールモデルを構築することにより、微視スケールの不均一変形が、巨視スケールの力学特性に及ぼす影響を評価する。ただし、異なる2つのスケールで不均一変形を同時に解析するためには、莫大な計算コストを必要とするため、接線係数法を用いて従来の解析手法を更新し、効率的なアプリケーションを構築する。

3. 研究の方法

(1) **高精度デジタル画像相関法**：材料に生じた局所的な変形を評価する手法として、デジタル画像相関法が広く普及している。同手法は、異なる2つの時間、あるいは場所で取得された対象物のデジタル画像を用い、その輝度分布の相関値を求めて同一点を評価する手法である。対象物が2画像間で変形している場合は、輝度分布の変形を同時に評価しなければならないため、もし変位を評価したい点 (POI, Point Of Interest) の周りの輝度分布

が劇的に変化している場合、測定精度が低下する。本研究で対象としているソフトマテリアルは、変形場が不均一になりやすいこと、ならびに局所的に極めて大きなひずみ増分が生じることから、従来のデジタル画像相関法では大変形に至るまでの変位場の高精度な取得が困難であった。そこで本研究では、変位評価点のネットワークを導入し、変位評価点の変位ベクトルとその周囲の輝度分布の変形テンソルを異なる計算過程で求めることが可能なNetDICを開発し、上記の問題点を克服した。一般に、輝度分布を比較する領域 (ROI, Region Of Interest) における変位ベクトル場 $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ は次式のように表される。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}(\mathbf{x}_p) + \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\xi}), \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{U}(\mathbf{x}_p)$ はPOIの変位ベクトル、 $\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\xi})$ はROIの変形により生じる局所変位ベクトル、 $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_p$ である。NetDICでは、局所変位ベクトル $\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\xi})$ を、POI周囲に存在する変位評価点の変位を用いて、次式に示すような変位関数にフィッティングする。

$$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{n=1}^{NF} \left(\sum_{m=0}^n \mathbf{a}_i \xi_1^{n-m} \xi_2^m \right), \quad (2)$$

ここで、 \mathbf{a}_i は最小2乗法により評価される係数ベクトル、 $i = n(n+1)/2 + m$ である。NFはROIの変形を表す関数の精度を表すものであり、NFが大きくなるほどROIの変形を高精度に表すことができるが、フィッティングの際に必要な参照点数NRも増加する。本研究では、 $NF = 6$, $NR = 60$ として変位場評価を実施した。

(2) 高分子材料の構成式：ゴム、非晶性高分子材料、結晶性高分子材料などの各種高分子材料は、その微視スケールに存在する分子鎖の構造によって変形機構が大きく異なる。本研究では、非アフィン分子鎖網目理論、結晶塑性理論を必要に応じて組み合わせることにより、各種高分子材料の変形解析を実施することが可能となる。しかしながら、ブレ

ンド材や結晶性高分子材料などの複雑な階層構造を有する材料では、マイクロメカニクスや均質化法などのマルチスケールモデルを用いた数値解析が必須となる。さらに、2つの階層における不均一変形を同時に解析するためには、莫大な計算コストが必要となるため、従来の構成式を高効率な形式に改める必要がある。本研究では、接線係数法を用いることにより、計算効率の大幅な向上を可能とした。

接線係数法を用いた場合、時間間隔 Δt に対するせん断ひずみ増分 $\Delta\gamma^{\Pi}$ が、パラメーター θ を用いた線形補間により表される。

$$\Delta\gamma^{\Pi} = \{(1-\theta)\dot{\gamma}^{\Pi}(t) + \theta\dot{\gamma}^{\Pi}(t + \Delta t)\} \Delta t, \quad (3)$$

ここで、 θ は時間積分パラメーター、 Π は結晶相・非晶相のいずれかを表す記号である。結晶相の非弾性変形は、分子鎖間のすべりによって生じる。時刻 $t + \Delta t$ のときの α すべり系のせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{C(\alpha)}$ は Taylor 展開によって次式のように近似できる。

$$\dot{\gamma}^{C(\alpha)}(t + \Delta t) = \dot{\gamma}^{C(\alpha)}(t) + \frac{\partial \dot{\gamma}^{C(\alpha)}(t)}{\partial \tau^{(\alpha)}} \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t. \quad (4)$$

式(4)を式(3)に代入し、結晶相の構成式を書き改めると、接線係数法を導入した構成式は次式のようになる。

$$\overset{\vee}{S}_{ij}^C = \left(\bar{D}_{ijkl}^C - \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{C(\alpha)} \Omega_{kl}^{C(\alpha)} \right) d_{kl}^C - \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{C(\alpha)} \dot{\Gamma}^{C(\alpha)}. \quad (5)$$

$$\bar{D}_{ijkl}^C = D_{ijkl}^C + \lambda_0 c_i c_j c_k c_l,$$

$$R_{ij}^{C(\alpha)} = D_{ijkl}^C P_{kl}^{(\alpha)} + W_{ik}^{(\alpha)} \sigma_{kj}^C - \sigma_{ik}^C W_{kj}^{(\alpha)},$$

$$\Omega_{ij}^{C(\alpha)} = \sum_{(\beta)} M_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{C(\beta)} \theta \Delta t P_{ij}^{(\beta)} \bar{D}_{ijkl}^C / m^C \tau^{(\beta)},$$

$$\dot{\Gamma}^{C(\alpha)} = \sum_{(\beta)} M_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{C(\beta)},$$

$$M_{\alpha\beta}^{-1} = \delta_{\alpha\beta} + \dot{\gamma}^{C(\alpha)} \theta \Delta t P_{ij}^{(\alpha)} R_{ij}^{C(\beta)} / m^C \tau^{(\alpha)}.$$

ここで、 $\overset{\vee}{S}_{ij}^C$ はKirchhoff応力のJaumann速度、 d_{ij}^C は変形速度テンソル、 D_{ijkl}^C は異方性を呈する弾性係数テンソル、 λ_0 はペナルティ定数、 c_i は分子鎖方向の単位ベクトル、 $P_{ij}^{(\alpha)}$ および $W_{ij}^{(\alpha)}$ は、すべり方向とすべり面法線方向の単位ベクトルのテンソル積から得られるテン

ソルの対称および反対称成分， m^c はひずみ速度感度指数をそれぞれ示している。

一方，時刻 $t + \Delta t$ において非晶相に生じるせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^A$ は Taylor 展開により次式のように表される。

$$\dot{\gamma}^A(t + \Delta t) = \dot{\gamma}^A(t) + \frac{\partial \dot{\gamma}^A(t)}{\partial \tau^*} \dot{\tau}^* \Delta t + \frac{\partial \dot{\gamma}^A(t)}{\partial \tilde{s}} \dot{\tilde{s}} \Delta t. \quad (6)$$

ただし，温度は一定としている。結晶相の場合と同様に，式(6)を式(3)に代入すると，非晶相の構成式は次式となる。

$$\overset{\vee}{S}_{ij}^A = (D_{ijkl}^A - R_{ij}^A \Omega_{kl}^A) d_{kl} - R_{ij}^A \dot{\Gamma}^A. \quad (7)$$

$$R_{ij}^A = \sqrt{2} G^A \hat{\sigma}'_{ij} / \tau^*$$

$$\Omega_{ij}^A = \dot{\Gamma}^A \theta \Delta t \left\{ \left(\frac{R_{ij}^A}{\sqrt{2}} - \frac{\sigma_{mn}^* \mathcal{R}_{mnij}}{2\tau^*} \right) \psi_{, \tau^*} - K^A \alpha_p \delta_{ij} \psi_{, \tilde{s}} \right\}$$

$$\psi = -(A \tilde{s} / T) \{ 1 - (\tau^* / \tilde{s})^{5/6} \}$$

$$\dot{\Gamma}^A = \dot{\gamma}^A(t) / (1 - \dot{\gamma}^A(t) \xi \theta \Delta t)$$

$$\xi = h(1 - s/s_{ss}) \psi_{, \tilde{s}} - \sqrt{2} G^A \psi_{, \tau^*}.$$

ここで， D_{ijkl}^A は等方弾性係数テンソル， G^A はせん断弾性係数， τ^* は相当せん断応力， $\sigma_{ij}^{* \prime}$ は駆動応力の偏差成分， α_p は圧力係数， K^A は体積弾性率， \tilde{s} はせん断強さ， A および s_{ss} は材料定数をそれぞれ表している。以上の構成式 (5) および (7) を各相の構成式として用いることで，比較的大きな時間ステップを設定した場合でも安定した弾粘塑性変形解析が可能となる。

4. 研究成果

(1) 結晶性高分子材料のくびれ伝ば過程におけるひずみ場の評価：3 (1) で述べた新たなデジタル画像相関法を用いて，材料に不均一な変形を与えたときのひずみ場を定量的に評価した。材料としては，ソフトマテリアルの中でも強度と変形能に優れる結晶性高分子材料の，高密度ポリエチレン (HDPE) およびポリプロピレン (PP) を用いた。両材料から作成した厚さ1mmのダンベル型試験片に対

し，2種類の引張り速度で単軸引張試験を実施し，異なる変形段階で取得した試験片ゲージ領域のデジタル画像からひずみ場を得た。

引張り変形を与えたときの公称応力ひずみ関係を図2に，各変形段階(1)~(6)のときのひずみ速度の分布の進展を図3に示す。図2より，材料は最大公称応力に達した後，くびれの発生・伝ばに伴って公称応力の低下，および一定応力下でのひずみ増加が確認された。また，各変形段階のひずみ速度分布より，変形の進行に伴って一部分のみに変形が集中するようになり，さらなる引張りに伴い，変形領域が周囲の領域へ緩やかに伝ばしていることが分かる。このように，本研究で提案した手法を用いることで，材料に生じる不均一変形を非接触かつ高精度に測定できることが示された。

本評価手法では，デジタル画像内に存在する任意点でのひずみ場を評価することができるため，試験片任意断面の真ひずみと真ひずみ速度，ならびに真応力を見積もることができる。図4は各条件で得られた公称応力ひずみ関係，ならびに各変形段階のひずみ，ひずみ速度から，試験片ゲージ部の任意断面で得られた真ひずみ，真ひずみ速度，および真応力の関係を一つの図にプロットしたものである。縦軸は真ひずみ速度で基準化した真応力，横軸は真ひずみをそれぞれ表している。図より，材料内に生じた変形場が大きく異なる場合でも，材料の真ひずみ，真ひずみ速度，真応力の関係は，材料に依存する一つの曲線で表されることがわかる。この結果から，本手法は，真応力や真ひずみを高精度に測定するための特別な装置を用いることなく，材料の構成関係を得ることを可能にした。これらの情報は，有限要素法などの数値解析手法を用いて材料の力学特性を予測する際に極めて有効となる。ただしこの結果は，材料に生じる不均一変形の発展が従来の応力・ひずみなどの寸法に依

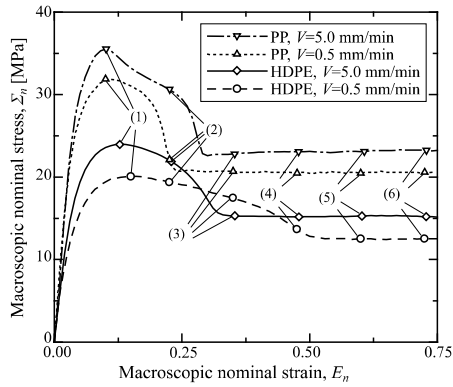


Fig. 2 Relationships between nominal stress and strain.

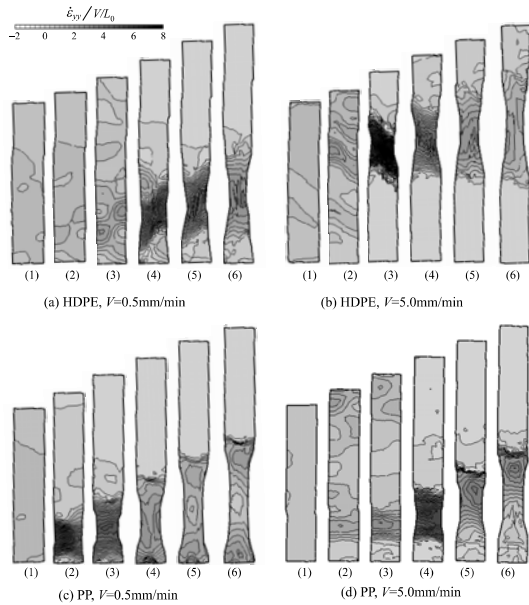


Fig. 3 Distribution of normalized strain rate in the loading direction.

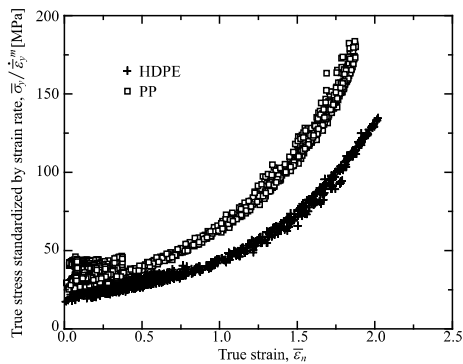


Fig. 4 Relationships between true stress standardized by strain rate and true strain.

存しない物理量の関係式では予測することが難しいことを示唆している。今後、材料の不
均一変形の進展を律する構成関係の定式化が
ソフトマテリアルのメカニカルモデルの高精

度化につながると考えられる。この研究により得られた成果は、学術講演にて公表すると共にInternational Journal of Plasticityに投稿中である。

(2) 微視的な不均一変形が巨視的な不均一変形に及ぼす影響の評価：3 (2) で述べた構成式を用いて、微視的な不均一構造を有する高分子材料の引張変形解析を行い、微視的な不均一変形が、巨視的な不均一変形に及ぼす影響を評価した。微視的な不均一構造としては、キャビテーションやクレージングなどが存在する微視構造を想定した空孔モデル、あるいは分子鎖やその絡み合いの粗密による強度不均一性を有する微視構造を想定した強度不均一モデルを設定した。空孔モデルでは空孔の分布状態や体積分率、強度不均一モデルでは強度分布の標準偏差を変化させて解析を実施した。

図5、および6に、強度不均一モデルに単軸引張変形を与えたときの公称応力-公称ひずみ関係、および巨視・微視構造における相当ひずみ速度の分布をそれぞれ示す。初期降伏以降、巨視構造にくびれが発生して公称応力が低下し、その後のくびれが伝ばする過程では公称応力が一定のまま変形が進行する。一方、微視的な強度不均一性のばらつきが大きくなるのに伴って、降伏応力が低下するとともに、降伏応力以降の公称応力の減少が緩やかになっている。また、図6の相当ひずみ速度の分布図を見ると、標準偏差が小さい場合は微視領域に不均一変形が生じる引張変形段階は場所によって大きく異なっているのに対し、標準偏差が大きい場合は場所が違ってもひずみ速度が類似した分布を示している。また、その結果、標準偏差が大きくなることにより巨視構造のくびれが緩やかなものとなっていることがわかる。この結果は、微視的な不均一変形を生じやすくすることで、巨視的な不

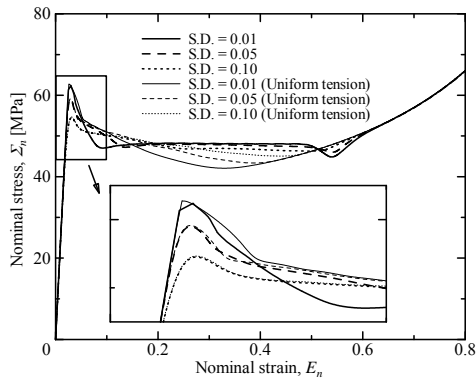


Fig. 5 Relationships between nominal stress and strain for the *HS model*.

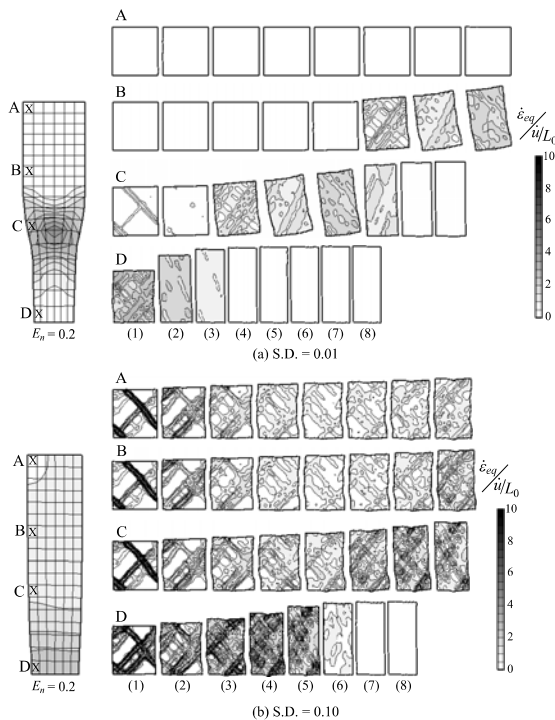


Fig. 6 Equivalent strain rate distribution for the representative microstructure of the *HS model*; (1) $E_n = 0.05$, (2) 0.10, (3) 0.15, (4) 0.20, (5) 0.25, (6) 0.30, (7) 0.35 and (8) 0.40.

均一変形を抑制できることを示すものであり、微視的な材料設計によって巨視的な力学特性を制御することが可能であることを示唆している。本研究により得られた研究成果は、国内外の講演会にて公表するとともに、*Journal of Multiscale Modelling*に投稿し、掲載が決定している。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 (計3件)

① Makoto Uchida and Naoya Tada, Multiscale computational evaluation of elasto-viscoplastic deformation behavior of amorphous polymer containing microscopic heterogeneity during uniaxial tensile test, *Journal of Multiscale Modelling*, 査読有, 2011, 印刷中.

② Makoto Uchida and Naoya Tada, The Effect of Heterogeneity of Microstructure on the Micro- to Macroscopic Non-uniform Elasto-viscoplastic Deformation Behavior of Polymeric Material, *Finite Plasticity and Visco-plasticity of Conventional and Emerging Materials*, Editors: Akhtar S. Khan & Babak Farrokh, 2010, pp.298-300, NEAT Press.

〔学会発表〕 (計4件)

① 内田真, 多田直哉, 引張試験中における塑性変形場の発展が結晶性高分子材料の応力ひずみ関係に及ぼす影響, 日本機械学会第23回計算力学講演会, 2010年9月23日, 北見工業大学.

② 内田真, 多田直哉, 非晶性高分子材料の微視的な不均一性がくびれ伝ば挙動に及ぼす影響, 日本材料学会第59期学術講演会, 2010年5月23日, 北海道大学.

6. 研究組織

(1)研究代表者

内田 真 (UCHIDA MAKOTO)
 岡山大学・大学院自然科学研究科・助教
 研究者番号：90432624