

USNCCM14 のご案内 (再掲載)

吉村 忍 JACM 会長 (東京大学)

14th U.S. National Congress on Computational Mechanics (USNCCM14)が2017年7月17日(日)~20日(土)にカナダ, モントリオール市 (Palais des Congrès de Montréal) で開催されます.

詳細は会議の詳細はWEBページ:

<http://14.usnccm.org>

に掲載されております.

JACM 総会ならびに 2017 JACM Awards 授賞式を USNCCM14期間中に開催致します. JACM会員の皆様におかれては本会議に奮ってご参加の程お願いいたします.

JACM 関連研究室の紹介 (その 10)

今回は, 早稲田大学創造理工学専攻総合機械工学科流体構造連成系応用力学研究室を紹介致します.

早稲田大学創造理工学専攻 総合機械工学科 流体構造連成系応用力学研究室

滝沢 研二 (早稲田大学)

本研究室[1]は, 私が, 2011 年に早稲田大学に着任し, スタートしました. 当時は, 学生は2名ととても小さな研究室でしたが, 現在は, 博士課程6名, 修士課程11名, 学部生26名で, 総勢44名と非常に大きくなりました.

所属する総合機械工学科は, 伝統ある早稲田大学の機械系2学部の一つで, 学部生は一学年170名程度, 大学院は一学年100名以上と大きな学科です. そのため, 企業で活躍する卒業生も数が多く, 大学と産業の共同研究がとても盛んです.

私は, 2007年~2011年のおおよそ3年半ライス大学で, Tezduyar 教授のグループに所属し, 研究を実施してきました. Team for Advanced Flow Simulation and Modeling (T*AFSM) [2] は, Tezduyar 教授の発足させた研究グループで, 現在は, ライス大学と早稲田大学のグループとして活動しています. ライス大学の学生の受け入れや, 早稲田大学の学生がライス大学で研究するなど学生の交流も盛んです.

早稲田のグループである我々の研究室は, 前述の通り人数が多いため, 研究室は広々としているわけではありませんが, ディスプレイが広く使えるように工夫しています. また, 壁は一面ホワイトボード (写真1参照) になっていて, いつでもディスカッションが出来るように工夫しています.

研究は, 流体構造連成に関わる数値解析手法の考案やそれらを用いた数値計算をベースに行っています. 計算法は, space-time (ST) 法を中心としたもので, その特徴を活かした計算手法の提案も多くあります. また, 計算対象となる

分野としては, 次の4つがあります. 1つ目が, 宇宙工学分野で, 宇宙船用パラシュート開発が代表的な研究です. 2つ目は, バイオテクノロジー分野では主に心血管系の疾患や測定のプロトタイプ開発が目標です. 3つ目は, 自動車工学で, 4つ目が流体機械です.

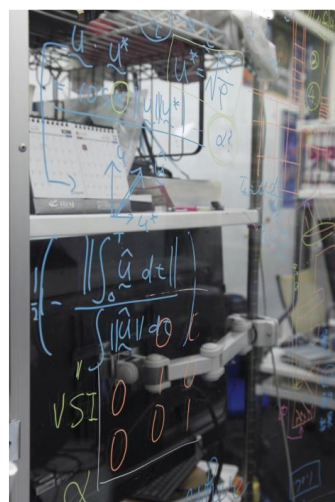
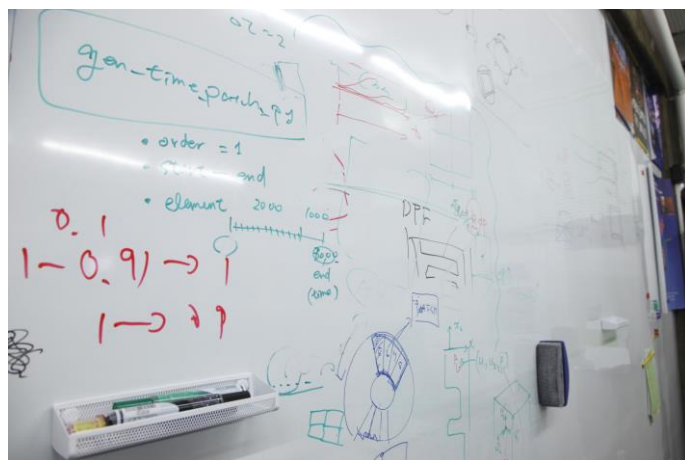


写真1 研究室の様子

パラシュートの研究は、非圧縮性流体から圧縮性流体へと、そのスコープを広げています。パラシュート表面の空気透過性は圧縮性流体でも生じる現象で、このような状態のモデリングを含め、非圧縮性流体の場合とは異なるモデルが必要です。

心血管系の研究は、学術的なものからデバイスの開発という幅の広い研究対象があります。また、心臓弁の開閉や、その際生じる壁面せん断応力の高精度解析など、特徴的な研究があります。

早稲田大学には次世代自動車機構[3]があり自動車に関する研究が盛んです。本研究室も、機構の一員として自動車工学を対象とした研究が数多くあります。例えば、排気管の流れの解析はその一つで、ディーゼルエンジンから排出される粒子を放出しないためのフィルター内部の流れやその粒子の詰まりについての研究などがあります。また、特徴ある研究として、タイヤと路面の接触を考慮した流体解析を行っています。

流体機械分野では、ポンプに異物が混入した場合の振る舞いや、流体軸受など対象としています。早稲田大学にあるもう一つの機械分野の学科である機械科学・航空学科が

あります。機械科学・航空学科の宮川研究室[4]は、流体機械の実験、解析そして設計を専門とする研究室で、これまでに多くの共同研究をさせていただいています。共同研究を通して、コマーシャルソフトでは解析できない難しい課題はどういうものかを学び、そして、そのような解析のための新たな計算技術の開発にも力を入れています。

近年では数学分野との協働も盛んに行っています。CREST の数学領域での活動や、早稲田大学内では、スーパーグローバル大学創成支援の数物系科学拠点[5]の一員として活動しています。

このように、数値解析を深く、そして計算対象は広く、研究を実施しています。修士課程や博士課程に興味がある方は是非ご連絡ください。

[1] <http://www.jp.tafsm.org/>

[2] <http://www.tafms.org/>

[3] <http://www.waseda.jp/nextgv/>

[4] <http://www.miyagawa.mech.waseda.ac.jp/>

[5] <https://www.waseda.jp/inst/sgu/unit/physics-and-mathematics/>

計算力学関連書籍の紹介

白崎 実 (横浜国立大学)

「粒子法 基礎と応用 矢川元基・酒井譲」

本書は2016年11月に発行された、計算力学分野では比較的新しい解析手法とされる粒子法、特にSPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法を中心に解説した書籍です。「本書は、熟練した研究者を読者として想定したものではなく、粒子法がどのようなものかをとりあえず知りたいという研究者や技術者を念頭に置いて書かれた入門書です」という、序文にある一文が書籍の位置づけを的確に表していて、その言葉どおり、全体を通して分かりやすい説明がなされています。

本書の構成は、次のようになっています。

- 1 粒子法とは
- 2 差分法と粒子法
- 3 粒子法の理論 (その1)
- 4 粒子法の理論 (その2)
- 5 固体解析の実際
- 6 流体解析の実際
- 7 粒子法の展開
- 8 結び

まず、「1 粒子法とは」では、粒子法が開発された目的やその歴史、いくつかの粒子法の分類などが述べられています。また、粒子法の特徴の一つであるメッシュレス性について、有限差分法や有限要素法の知識がない人にも分かるように解説され、最後に粒子法が適用されている幅広い現象 (解析対象) について述べられています。「2 差分法と粒子法」では、タイトルのとおり、差分法と比較しながら、共通する考え方、大きく異なる点、粒子法ならではの特徴などについて述べられています。特に、粒子法における粒子モデルの考え方については丁寧に解説されています。「3

粒子法の理論 (その1)」では、粒子法において基本となる、影響半径、重み付き補間、近傍粒子の物理量の重ね合わせにより中心粒子の物理量を求める手順について、「4 粒子法の理論 (その2)」では、粒子法での空間微分、具体的には1階空間微分であるベクトル場、テンソル場の発散、スカラー場の勾配、そして2階空間微分であるラプラシアン近似方法について述べられています。なお、これら空間微分の数学的な面をやや難しいと考える読者がいることを想定してか、付録に関連事項の記述がありますが、本書の主目的ではないことからごく簡素なものにとどめられています。完全である必要はありませんが、これら空間微分についての数学的、物理的な理解はある程度必要でしょう。「5 固体解析の実際」、「6 流体解析の実際」では、固体解析、流体解析のそれぞれについて粒子法でのプログラムの作成の考え方や解析に用いるデータ、例題について、基本的な部分から解説されており、次の「7 粒子法の展開」では、粒子法の特徴を生かした先進的な解析事例を含め、文字通り粒子法の今後の展開や可能性について言及されています。

本会会員であれば、本書はあるいは物足りなさを感じるかもしれませんが、全体的な概要、基本となる考え方、具体的な手順といったところをざっと把握することができるコンパクトな一冊となっており、卒論や修論で初めて粒子法に関連するテーマに着手する学生や、粒子法を業務に利用してみたいと考えている技術者などにとっては、「取っ掛かり」あるいは「最初の一步」として、比較的短い時間で読み終えることが出来る本書は最適です。必要に応じて、次のレベルの書籍、あるいは論文を読むというようにステップアップしていけばよいと考えれば、著者らのねらいどおり、本書は入門者向けの良書となっていると言えるでしょう。

JACM 関連若手研究者の紹介（その 5）

JACM に関連する若手研究者の方々を順次紹介しています。その第 4 回として、前年度に The JACM Award for Young Investigators in Computational Mechanics を受賞された 3 名の先生方、田原大輔先生（龍谷大学）、大西有希先生（東京工業大学）、内田真先生（大阪市立大学）を紹介します。

骨・歯の計算バイオメカニクス

田原 大輔（龍谷大学）

この度は、The JACM Young Investigator Award をいただき、また、ニュースレターへの寄稿の機会を与えていただき、深く感謝申し上げます。私は、龍谷大学理工学部機械システム工学科（滋賀県大津市）の力学系グループに所属しており、骨・歯を対象とした計算バイオメカニクスの研究を中心に進めています。

この分野に足を踏み入れたのは、金沢大学での学生時に指導教員の坂本二郎先生から「骨の個別別力学解析手法の開発」を研究テーマとして与えられた時からです（当時の研究室は大きく、同じ研究室の尾田十八先生、山崎光悦先生からも熱いご指導を受けました）。骨の非均質な材料特性分布を計算に反映するため、当時登場した ADVENTURE の骨解析用への改変を試みていました。途中、企業での勤務を経て博士課程修了後は、科学技術振興機構、理化学研究所の研究者として京都大学にて勤務させていただき、安達泰治先生（京都大学）、高野直樹先生（慶応義塾大学）に計算力学的視野を広げていただきました。その後、現在の研究室が 2009 年に立ち上がって以来、生体組織のかたち（構造）と力学的役割（機能）の関連および、その機能的適応のメカニズムを明らかにすること、得られた知見を機械構造物の適応化や設計技術の創造、医療応用へ展開することを目指し、実験も併用して十数名の学生と研究に取り組んでいます。

生体組織の構造・機能はマクロからミクロのスケールに渡り階層性を持つため、各スケールあるいはスケールを超えた計算が盛んです。また、非均質性、異方性、不連続性を持ち、再構築することから、生体組織の挙動には「個体差」と「個体内分布」に起因する不確かさやばらつきが含まれます。以下では、骨・歯のマルチスケールシミュレーションと、特性の不確かさを反映する計算手法の一例を紹介します。

研究室では、骨粗鬆症等の骨折リスク予測を目的とした力学的評価手法の確立を目指して、X 線 CT により撮像した骨の構造をイメージベースモデリングにより構築し、有限要素法（FEM）や均質化法を用いた計算、骨リモデリングシミュレーションを行っています。骨は、外側が緻密で高剛性の皮質骨、内部が多孔質の微細な骨梁ネットワークから成る海綿骨で構成され、力学環境に応じ、骨吸収と骨形成の繰り返しにより構造を機能的に変化させます。この吸収・形成のバランスが崩れて吸収が進行すると骨粗鬆症となり、脆弱な骨構造が破壊（骨折）に至ります。このような骨に対し、医療用の低解像度 CT を基にした計算、高解像度の μ CT を基にした計算アプローチを研究中です。

まず、低解像度 CT を基にしたマクロスケールの計算で

は、ミクロの骨梁を捉えることができないため、骨の外形状を抽出し、内部は外形状を埋める連続体としてモデル化します。また、各部位の骨梁構造に等価な CT の白黒の濃淡値を基にヤング率を決定します。この手法を用いると、例えば図 1 のように、骨粗鬆症椎体の投薬治療における経時的な解析を行うことができ、現状の骨密度量評価のみでは十分説明できない骨強度の変化の評価が可能となりました（D. Tawara et al., JBSE, 2011）。

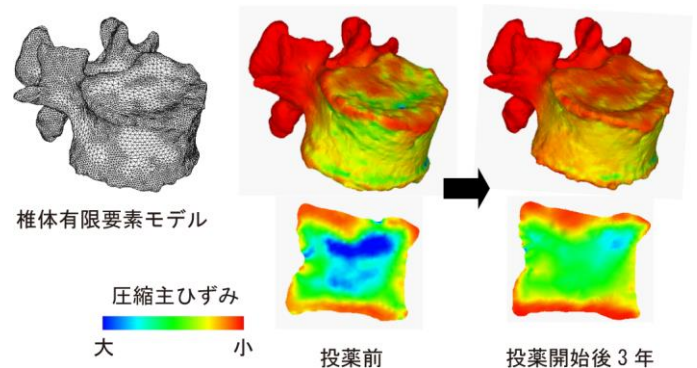


図 1 骨粗鬆症椎体の有限要素モデル(左)と、投薬前・投薬開始 3 年後の全体(上)・縦断面(下)の圧縮主ひずみ分布

次に、骨梁構造を詳細に抽出できる高解像度 μ CT を用いると、例えば健康骨と骨粗鬆症骨の椎体断体を示した図 2 のように、板状・棒状骨梁の存在やそれらの連結の粗密等、特徴的な形態を捉えることができます。これらのミクロな骨に均質化法を適用すると、板状の骨梁は、いずれの方向もその剛性が棒状の骨梁より高く、荷重支持に寄与していることがわかりました。また、骨粗鬆症骨の剛性は健康骨より著しく低い一方で、日常的に自重が作用する体軸方向の荷重支持機能は最低限維持していることも見えてきました（田原ほか、臨床バイオメカニクス, 2008）。

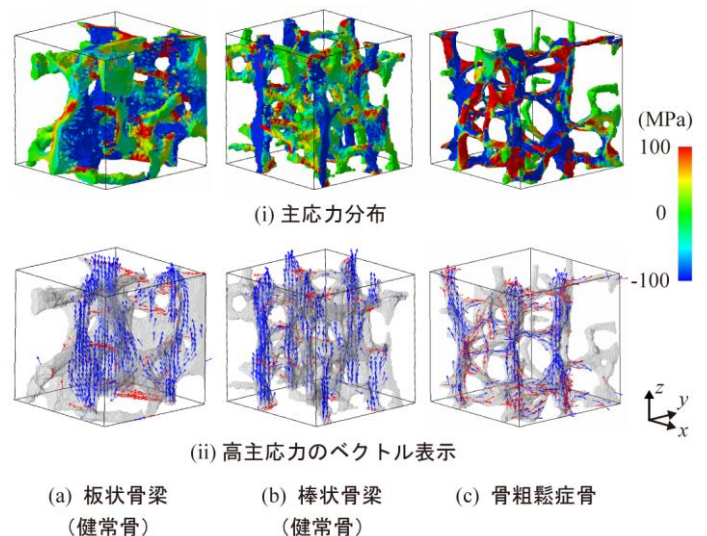


図 2 板状・棒状骨梁(健康骨)と骨粗鬆症骨の主応力分布

骨梁のリモデリングシミュレーションでは、海綿骨内の応力不均一性に基づく骨形成・骨吸収をモデル化し、モデ

ル形状を逐次変化させながら骨梁の形態変化を表現する手法を用いています。骨梁の局所における応力不均一性が閾値を超えると骨形成・骨吸収を繰り返すルールを定め、骨梁の形態変化を計算します。この手法により、例えば図3のように、将来的な骨粗鬆症の進行を予測することができます。骨梁間のネットワークの連続性の消失により応力の分散が十分に達成できず、骨折を発生させるような高い応力が発生しています (D. Tawara, K. Nagura, Comp. Meth. Biomech. Biomed. Eng., 2017)。

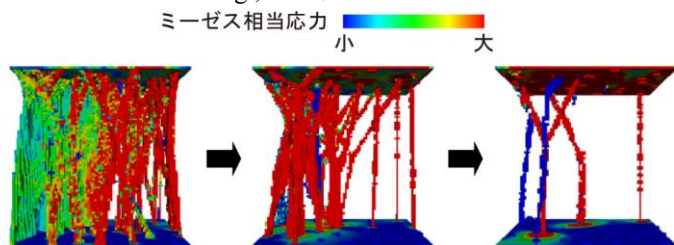


図3 将来的な骨粗鬆症の進行予測

さらに、生体組織の個体差と個体内分布に起因する不確かさ・ばらつきのモデリングを応用し、口腔インプラント手術シミュレータを開発しています。ドリリング手術は歯科医の技量不足による偶発症を伴うため、その成功は術者の力覚に依存します。ドリリング特性は海綿骨の形態等により決定される骨質と関連し個体差を持つため、医師が体験し得る範囲の力覚データの構築が必要です。このため、下顎骨のドリリング荷重を算出し、それにばらつきを与える確率的マルチスケール計算手法を開発しました。図4のような複数のモデルの解析結果をシミュレータ上に搭載して歯科大学の実習教育へ展開しており、熟練医から若手医師へ伝承が難しい力覚の共有や、繰り返しの練習、手術事故の失敗体験が可能となりました (D. Tawara et al., Int. J. Appl. Mech., 2016)。

この他にも、歩行中の筋力を推定する筋骨格シミュレーション、サポート下着開発のための臀部・脂肪等のモデリング、実骨の特性に近い模擬骨開発のためのマイクロ構造設計に関する力学解析等、医学、歯学、看護学分野の研究者、企業と出会う機会を得て、通訳に苦労しながらも楽しく研究に励んでいます。実験室には、複数台の引張試験機や疲労試験機、X線μCT装置、基本的な細胞実験環境等があります。計算と実験を有機的に使い、生体組織の力学的な挙動のメカニズムの理解や関連デバイスの開発にマルチスケールから迫るべく、奮闘中です。

結びに、興味が尽きないこの分野へ導いていただいた坂本二郎先生には、改めて御礼を申し上げます。プログラミングに明け暮れるのみでほぼ成果もなく、悶々とした大学院修士課程の前半を過ごした私が研究の世界を志したのは、修士課程修了前に発表の機会を与えていただいた国際会議にて、国内外の研究者から多くのアドバイスと励ましをいただいた喜び、楽しそうな計算バイオメカニクスの世界の雰囲気、先生の生き生きとした姿が強烈な刺激になったからです。医学と関連するテーマに向き合ったことも異分野の相互理解の大切さを学ぶ貴重な機会となり、研究の視点・興味を拡げることに繋がっています。また、研究員時代以降もご指導をいただいている安達泰治先生、高野直樹先生の研究に対する姿勢と柔軟・多様でかつ的確な方法から学んだ経験、各チームにおける同僚の若手研究者らとの充実した日々から得たパワーが今日の原動力となっており、感謝申し上げます。他にも多くの先生方と諸先輩

方、学友の方々に育てていただいていることを有難く感じています。今後も背伸びせず、日々精進して参ります。JACM 会員の皆様には、今後ともご指導、ご鞭撻を賜りますよう、何卒よろしくお願い申し上げます。

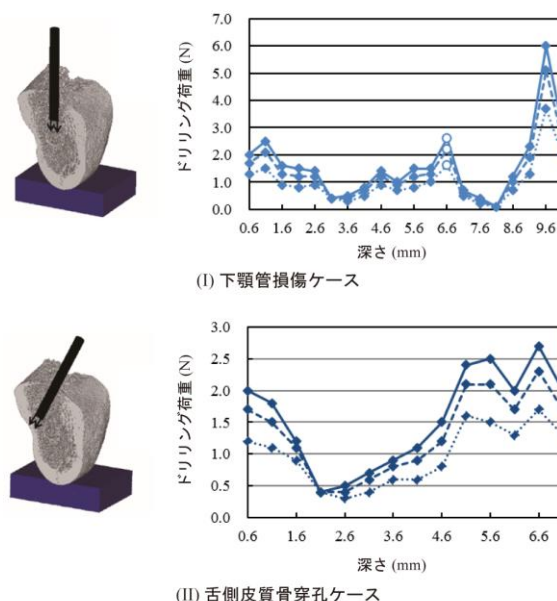


図4 ばらつきを考慮して算出したドリリング荷重特性

四面体を用いた平滑化有限要素法による高精度大変形解析

大西 有希 (東京工業大学)

はじめに

平滑化有限要素法(Smoothed Finite Element Method: S-FEM)[1]は FEM の新たな定式化として研究が進んでいる今注目の手法です。古典的な FEM よりも高精度であることが知られており、特に四面体要素でしかメッシュ分割が出来ない複雑形状の固体力学解析では既存手法を遥かに凌ぐ精度を有しています。本記事では、手前味噌ではありますが、私の開発した現時点で世界最高精度の四面体定式化であると考えられる「F-barES-FEM-T4」[2,3]について簡単に紹介致します。

S-FEM 概要

S-FEM はその名の通り歪み平滑化手法の1つで、古典的な FEM とメッシュフリー法の間、やや FEM 寄りの手法です。要素の概念が陽に登場するものの、歪みの評価は要素単体では行わず複数の要素をまたいで(平滑化して)行われます。どの場所でどの様に歪みを平滑化するかによって種々の S-FEM が考案されています。

まず、4 節点四面体(T4)要素に対する基本的な S-FEM 定式化として NS-FEM-T4, ES-FEM-T4, FS-FEM-T4 の3種類があります。NS-FEM-T4 は節点で歪みを平滑化する方法で、せん断/体積ロッキングを起こさないメリットと疑似低エネルギーモードを持つデメリットがあります。ES-FEM-T4 と FS-FEM-T4 は要素の辺または面でそれぞれ歪みを平滑化する方法で、せん断ロッキングを起こさないメリットと体積ロッキングを起こすデメリットがあります。なお、FS-FEM-T4 は ES-FEM-T4 と比べてやや計算量が少

ないものの精度が悪いため、あまり優位性はありません。微圧縮性が現れない大変形問題であれば、ES-FEM-T4 は古典的な 10 節点四面体(T10)2 次要素と同等以上の精度と安定性を持つことが知られています。

次に、微圧縮性が現れる問題に対して提案されている手法に Selective ES/NS-FEM-T4[5]があります。いわゆる選択的低減積分(Selective Reduced Integration)要素と同様の考え方で、ES-FEM-T4 に応力の偏差成分を、NS-FEM-T4 に応力の静水圧成分を担当させ、両者を合算する手法です。これによりせん断／体積ロッキングを起こさず疑似低エネルギーモードも持たない解が得られます。ただし、圧力チェッカーボーディング(振動)、コーナーロッキング、材料構成則の制約などの問題が基本的な S-FEM と同様に残ってしまう[4]ため、完全な解決法ではありません。

F-barES-FEM-T4 の定式化概要

F-barES-FEM-T4 は ES-FEM-T4 に歪みの等積成分を、NS-FEM-T4 に歪みの体積成分を担当させ、両者を F-bar 法を用いて合成する手法です。加えて、NS-FEM-T4 による歪み平滑化を繰り返し適用することでより強力な圧力振動の抑制も図っています。基本的な定式化のアイデアはたったこれだけです。

純粋な変位型 FEM の一種なので、混合型変分原理の様な難解な数学は一切登場しません。静的縮約も不要ですので動的陽解法にも使用できます。それでいて圧力振動、せん断／体積／コーナーロッキング、および材料構成則の制約の問題を全て解決できます。

解析例

図 5 はゴム材料を模した初期ポアソン比が 0.499 の neo-Hook 超弾性体の円柱押込解析の結果を示しています。従来法として現在最も一般に使用されている ABAQUS の 4 節点四面体ハイブリッド要素(C3D4H)および 10 節点四面体 2 次修正ハイブリッド要素(C3D10MH)の結果と比較しています。(古典的な 4 節点四面体要素(C3D4)や 10 節点四面体 2 次要素(C3D10)は微圧縮性解析において余りに精度が悪いため、比較対象としていません。) C3D4H は比較的大きな変形まで解析できるものの、圧力振動、せん断／コーナーロッキングのために不自然な圧力分布および変形を呈しています。C3D10MH は圧力振動やロッキングは無いものの、中間節点の影響で比較的小さな変形で解析が収束困難に陥ります。他方、F-barES-FEM-T4 は全ての問題をクリアした高精度な変形と圧力分布を与えています。

微圧縮性が現れるのはゴムの様な弾性体だけに限りません。金属や樹脂も大きな塑性変形を受けた際には微圧縮性が現れます。図 6 はポアソン比 0.3、ヤング率 1 GPa、降伏応力 1 MPa、塑性係数 0.1 GPa (一定)の弾塑性角棒のせん断解析の結果を示しています。塑性係数がヤング率を大きく下回る程に塑性変形が進むと、塑性進行時のポアソン比は 0.5 に近づき微圧縮性状態となります。従って、ゴム材料の時と同様、C3D4H では圧力振動が発生しますが F-barES-FEM-T4 では綺麗な圧力分布が得られています。

静解析だけでなく動解析、特に動的陽解法にも S-FEM は適用可能です。図 7 は耳が鉄、体がゴムで出来たウサギの両耳に初速度を与える動解析の結果を示しています。ハイブリッド要素は動的陽解法には適用出来ない為、C3D4H ではなく C3D4 との比較を行っている点にご注意ください。C3D4 は何の工夫もない定歪み要素ですので圧力振動やせん断／体積ロッキングなどあらゆる誤差を含み、低精度で硬い解を与えています。F-barES-FEM-T4 は解析初期段階

(上段)で耳から体へと伝播する圧力波を正しく捉えています。また、一定時間経過後(下段)において耳の付け根まわりに耳が振られる挙動、および首まわりに頭が振られる挙動も表現出来ています。

おわりに

F-barES-FEM-T4 は四面体でしかメッシュ分割が出来ない複雑形状の超弾性体／弾塑性体／粘弾性体などの変形問題に対して現時点で最高精度の解を与える手法です。日本ではまだ S-FEM の研究が下火ですが研究者は少しずつ増えてきており、今後は国内でもより多くの方が S-FEM を研究・利用する様になると思います。特に大規模高速化と得意とされる先生方にご協力頂き、S-FEM の唯一の課題である「バンド幅が増大するため同一メッシュ解析での計算量が多い」問題の軽減に取り組んで頂けると大変ありがたく思います。

文献

- [1] G. R. Liu et al., "Smoothed Finite Element Methods", CRC Press.
- [2] 飯田綾也ほか, "4 節点四面体要素を用いた F-bar 援用の平滑化有限要素法による微圧縮性材料の大変形動的陽解法", 日本計算工学論文集, p. 20170001, 2017.
- [3] Y. Onishi et al., "F-bar aided edge-based smoothed finite element method using tetrahedral elements for finite deformation analysis of nearly incompressible solids", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 109, No. 11, pp. 1582-1606, 2017.
- [4] Y. Onishi et al., "Performance Evaluation of the Selective Smoothed Finite Element Methods using Tetrahedral Elements with Deviatoric/Hydrostatic Split in Large Deformation Analysis", Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol. 63, pp. 55-65, 2015.
- [5] Y. Onishi et al., "A locking-free selective smoothed finite element method using tetrahedral and triangular elements with adaptive mesh rezoning for large deformation problems", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 99, No. 5, pp. 354-371, 2014.

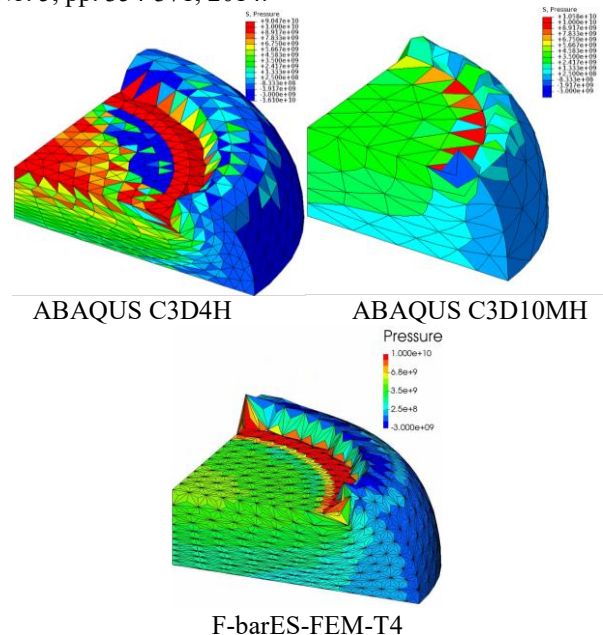
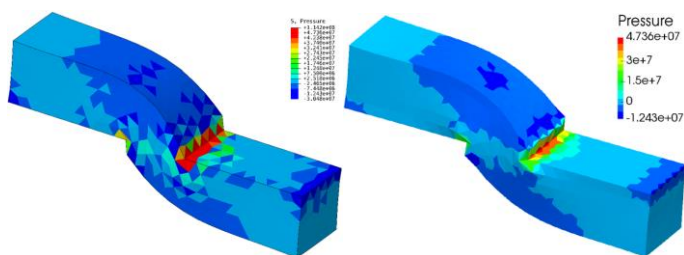


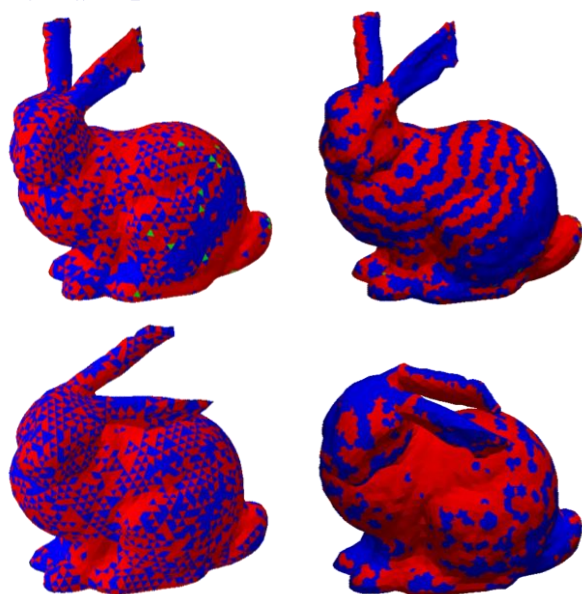
図5 超弾性円柱の押込解析結果。コンターは圧力分布を表す。ゴムの微圧縮のため、C3D4H には圧力チェッカーボード(振動)やコーナーロッキングが生じ、C3D10MH は中間節点のせいで早期収束が生じている。他方、F-barES-FEM-T4 は綺麗な圧力分布を示しておりロッキングも生じていない。



ABAQUS C3D4H

F-barES-FEM-T4

図6 弾塑性角柱のせん断解析結果. コンターは圧力分布を表す. 弾塑性問題は微圧縮性が現れる問題であるため, 解析結果はゴムと同様の傾向を示している.



ABAQUS/Explicit C3D4

F-barES-FEM-T4

図7 超弾性ウサギの陽解法動解析結果. コンターは圧力符号分布を表す. 動的陽解法にはハイブリッド要素が適用できないため, C3D4 との比較を行っている. C3D4 では圧力振動と体積ロッキングのため終始低精度で硬い解しか得られない. 他方, F-barES-FEM-T4 は解析初期 (上段) の圧力波の伝播を正しく捉えており, また一定時間後 (下段) における柔らかいゴムの挙動も正しく解いている.

計算力学に関する研究

内田 真 (大阪市立大学)

この度は, The JACM Young Investigator Award という名誉ある賞を頂き, 大変光栄に存じます. 今回, 受賞をきっかけに JACM メールマガジンにて研究紹介の場を与えていただきましたので, この場をお借りしてこれまでの研究と, これから進めていこうと考えている研究を紹介させていただきます.

学生時代に, 神戸大学にて富田佳宏教授のご指導のもと, 樹脂材料, 特に結晶性高分子材料の力学モデルの構築に関する研究を始めたのがきっかけで計算力学の研究に携わることになりました. 特に結晶性高分子材料は, 図8に示しますように, nm~mm オーダーに至る各階層において分子鎖が複雑な階層性を有しており, その階層構造に基づいて材料の力学特性をモデル化するために, 大変形均質化有限要素法を用いたマルチスケールモデルの構築を進めてまいりました. 学位取得にあたり, 大変形理論, 結晶塑性理論, 分子鎖網目理論, 均質化法などの連続体力学を基礎とした理論体系や, 2スケール問題への拡張, 連立方程式

ソルバの改良などを通じたプログラミングのノウハウを学習でき, 現在の研究を進めるうえで重要な礎を築くことができました.

学位論文では, 分子鎖スケールのミクロスケール (図8における右側の階層) と, その高次構造である球晶が存在するメゾスケール (図8における中央の階層) の連成が実現できたことで, 巨視的に均質な変形下での力学応答や, 多数の球晶が集合した組織の変形解析, 軟質粒子を充填した際の界面領域における結晶状態の影響の評価などが可能となりました. しかしながらこれらの解析は大きくても μm オーダーの構造を対象としていたため, どのようにして試験片レベルのマクロスケール (図8における左側の階層) も含めた3スケールモデリングを実現したいとの思いがあり, 学位取得後も同研究を一つの軸として継続してまいりました. 2010年ごろ, 結晶性高分子材料の微視領域を形成する結晶相と非晶相の積層構造の変形を表現するために, 各相の構成式, 体積平均化則, 界面に作用する応力のつり合い, 界面を介した変形拘束を連立させ, 各相の変形と積層体の変形を関係づける変形の階層間の変換則を導出し, 積層材料の2階層構成式を定式化しました.

さらに, 同式を大変形に拡張することで, 結晶性高分子材料のミクロスケールとメゾスケールを, 均質化法を用いることなく接続することを可能にしました. これにより, 球晶が存在するメゾスケールと試験片レベルのマクロスケールを均質化法によって接続することが可能となり, マイクロ・メゾ・マクロスケールを連成して解析することが可能なトリプルスケールモデルを構築することができました. これにより, 樹脂材料で頻繁に観測されるくびれなどの変形集中も数値解析により予測できるようになりました.

話は少し変わりますが, 学位取得後, 岡山大学の応用固体力学研究室にて, 多田直哉教授と清水一郎教授とともに実験力学を主体とした研究を開始しました. 特に集中して取り組んだのが, デジタル画像相関法 (DIC) を用いた変位場測定に関する研究でした. 小型のデジタルカメラだけを頼りに, ポリエチレンとポリプロピレンのくびれ伝播過程におけるひずみ集中を定量的に評価するために, 画像処理技術を学習しながら DIC ソフトを少しずつ改良していきながら作成していきました. いくつかのバージョンを経て, 最新のものでは3次元の変位場評価もできるようになりました. また現在では, DIC と FEM をカップリングすることで, 試験片表面の応力場を定量化する手法の構築も進めています. 作成したソフトで樹脂材料の不均一変形を評価すると, 不均一変形の発展の材料による違いや速度依存性などをはじめとして, これまでに構築してきたマルチスケールモデルだけでは予測できない, かなり複雑な挙動を示すことがわかってきました. デジタル画像相関法による変形場評価を始めたころから, マルチスケールモデリングとともに, 材料の不均一変形を正確に予測するためにはどうしたらよいのかを深く考えるようになってきました.

結晶性高分子材料のトリプルスケールモデリングの構築に取り組んでいた2010年の秋頃, パリにてマルチスケールの学会に参加した際, ヨーロッパを中心に, 2次均質化法を用いた多数の数値解析が実施されていることを知りました. 当時は2次均質化法については全くと言って良いほど知識はなかったのですが, 同手法では, 巨視的なひずみこう配による微視的なエネルギー変化を取り入れる

ことで、微視構造の寸法依存性を導入することができることを知り、材料の不均一変形の評価に関するための大きなヒントを得ました。そこからは古くから実施されている、ひずみこう配を含むような非局所理論や 2 次均質化法を学習しながら、材料の不均一変形を予測するための理論体系について考察しているところです。

これまでの非局所理論では、金属材料、特に結晶構造を有する材料において、材料の非弾性変形のもととなる転位の運動を基礎とした微小なスケールの寸法依存性モデルが数多く提案されています。しかしながら、DIC で計測できるような比較的大きなスケールでも、その不均一変形は材料の巨視的な応力ひずみ関係だけでは予測が困難です。現在取り組んでいるテーマは、任意の材料に対して、実験により不均一変形を定量的に評価し、それをモデルによって正確に予測する手法を確立することです。特に、巨視的なスケールに対して、材料が有する微視的不均質構造の相対的なスケールが大きくなるほど、材料の不均一変形が連続体モデルで予測されるものから離れていきます。これは、

材料の微視的な強度や加工硬化の度合い分布が巨視的な変形場の発生と進展を大きく左右することに関連していると考えられます。したがって、このような材料の微視的な強度や加工硬化の分布状態をどのように材料パラメータとして構成式内に含めるかが重要なカギになってくると考えています。これらの取り組みは、不均一変形の進展の結果として生じる材料の損傷・破壊を、材料の微視構造と関連させて予測するうえで重要な知見を与えるものであると確信しています。

今後も計算力学と実験力学のバランスを取りながら材料の変形挙動をより正確に予測するためのモデルの構築を目指していきたくと考えています。これまでの研究を進めるに当たり、在籍した研究室や学会等を通じて多くの先生方、企業の方々からご指導いただきましたことを心よりお礼申し上げます。これからも、皆様から貴重なご意見を頂けましたら大変幸いに存じます。今後ともどうかよろしくお願い申し上げます。

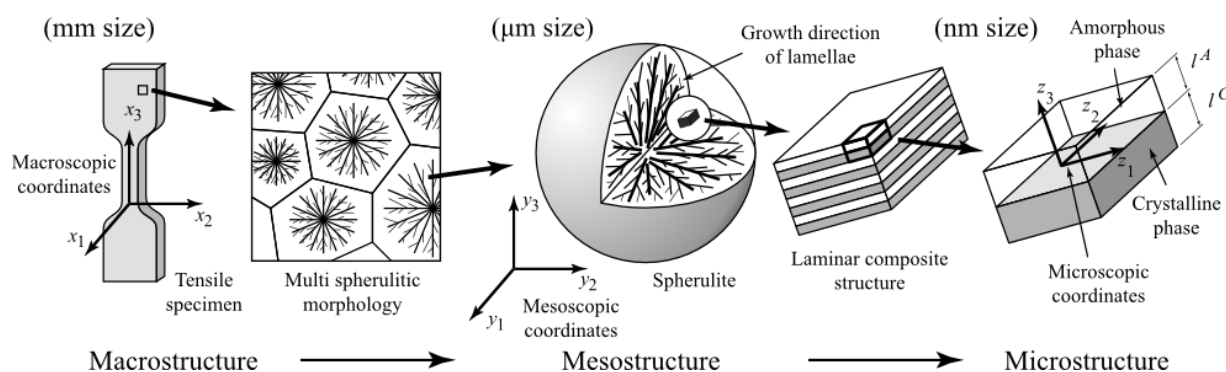


図8 結晶性高分子材料の階層構造

編集責任者

西脇 眞二 (京都大学)

山田 崇恭 (京都大学)