

樹脂部品の衝撃破壊シミュレーションのための 微視損傷モデルの開発

Development of Microscopic Damage Model for Impact Failure Simulation of Polymeric Components

前 博 行*
Hiroyuki MAE

岸 本 喜久雄**
Kikuo KISHIMOTO

要 旨

ミクロスケールの材料パラメータに基づき、部品レベルでの衝撃大変形解析をおこなうため、クレイズ密度依存型軟化則を現象論的に提案する。そのため、ミクロスケールでの実験と粗視化分子動力学を用いて、クレイズ生成、成長、フィブリル破断をモデリングする。そして、本軟化則を導入することで志澤らのモデルを改良し、部品レベルでの衝撃大変形解析をおこなう。最後に、部品レベルでの実験と解析結果を比較し、本手法の有効性を示す。

ABSTRACT

For simulating the final failure of the component made by polymeric materials based on the microscopic material properties, the craze density-based softening law was proposed phenomenologically. The microscopic experiment was conducted while the craze nucleation, growth and fibril failure were simulated with the coarse grained molecular dynamics model. The impact failure test was also conducted on the actual automotive part. The deceleration time history and damage zone development were compared with those obtained by the finite element (FE) analysis. As a result, the usefulness of the constitutive equations with microscopic material properties was validated.

1. まえがき

近年、環境、安全への取り組みから、自動車部品に対する要求性能が多様化、高度化してきている。従来、自動車部品は、各種材料グレードから最良の材料を選択し、設計されてきた。しかしながら今後も、商品性能、安全性能、コストなどのさらなる両立が要求され、既存の材料の選択から、製品における必要特性を発現する新しい素材への研究ニーズが高まることが予測される。それら新素材の組成開発にあたっては、衝撃破壊メカニズムの把握とともに、数値計算技術の向上は不可欠となる。

室内衝撃や歩行者衝突において重要な部品であるインストルメントパネル、ドアライニング、バンパフェース等はポリプロピレン等の樹脂材料で作成されており、それらの衝撃性能は材料組成によって大きく支配されることが知られる⁽¹⁾。

これら樹脂材料部品の衝撃大変形特性を解析するためには、ガラス状樹脂において観察されるミクロボイドとフィブリルからなるクレイズという微視損傷を考慮した材料構成則が必要となる。ミクロスケールでのシミュレーション

によるクレイズの研究は過去数多くおこなわれてきた^{(2)・(6)}。クレイズの成長開始は高分子の鎖長によって影響を受けることが明らかにされ^{(2)・(3)}、ガラス状態の樹脂の巨視的破壊エネルギーは、クレイズの弾性特性と破壊応力というミクロレベルの物理量によって求められることが明らかにされた⁽⁴⁾。また、クレイズの発生メカニズムを分子鎖の絡み合いを用いて表現する^{(5)・(6)}など、クレイズのメカニズムはミクロスケールでのシミュレーションによって、明らかにされつつある。

一方、樹脂材料のガラス状態における降伏後の挙動予測を目的としたマクロスケールでのシミュレーションによるクレイズの研究も盛んにおこなわれてきた^{(7)・(9)}が、これらの材料構成則はクレイズ生成を予測することに限られ、クレイズの成長とせん断帯との両現象を取り扱うことはできなかった。それらを予測可能とする材料構成則の研究は志澤らによっておこなわれ、クレイズとせん断帯の両現象を取り扱える材料構成則が提案されている^{(10)・(13)}。この材料構成則(志澤らのモデル)はひずみ速度硬化則、クレイズ生成則、クレイズ成長則から構成されており、ポリプロピレンや

* 四輪開発センター

** 東京工業大学

ポリカーボネートの静的引張実験結果と比較し、ミクロスケールでは良い一致を示したが、自動車の衝突時に発生する中、高ひずみ速度における変形と破壊に関する検証がなされていない。また、材料組成レベルから部品レベルまでを解析するためには、ミクロ、マクロを連結した材料モデリングや解析手法を構築する必要がある。

そこで、本研究では、部品レベルでの衝撃大変形解析をミクロスケールの材料パラメータを含んだ状態でおこなうため、クレイズ密度依存型の軟化則を現象論モデルとして提案する。そのため、ミクロスケールでの実験と粗視化分子動力学を用いて、クレイズ生成、成長、フィブリル破断による最終破壊をモデリングし、軟化則を現象論的に提案する。そして、本軟化則を導入することで上述の志澤らのモデルを改良し、部品レベルの解析で使用可能な材料構成則を提案する。最後に、部品レベルでの実験と解析結果を示し、本手法の有効性を示す。

2. 実験手法

2.1. 試験片および供試材料

本研究で用いた熱可塑性結晶性樹脂であるポリプロピレンは、自動車の内、外装部品として多用されており、特に衝撃荷重が負荷される部品においては、エラストマをブレンドすることで強化されている。そのため、上記材料は高ひずみ速度域まで延性的な挙動を示す^{(14), (15)}。衝撃部品における破壊挙動を評価するため、本研究では、エラストマブレンドポリプロピレンを供試材料として選択した。材料試験片形状を Fig. 1 に示す。本試験片は破壊力学試験片であり、ASTM D5045-93 に準拠した形状である。試験片はバンパフェースから切出し加工されたものである。予き裂長さは0.2mm とし、鋭いカッターナイフで切込み加工を施して作成した。

2.2. 実験装置および方法

2.2.1. 環境型 SEM 内引張試験について

ミクロスケールにおけるクレイズの大変形、破壊挙動を

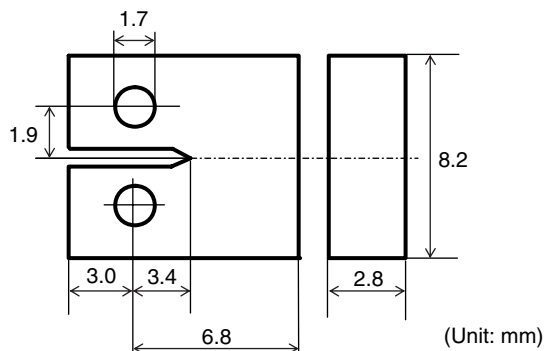


Fig. 1 Schematic illustration of compact tension test specimen

測定するため、環境型SEM内において引張試験をおこなった。環境型 SEM (FEI 社製 Quanta600F) のチャンバ内に微小引張ステージ (Deben 社製 M5000) を装着し、破壊力学試験片を引張変形させた。環境型 SEM 内での引張ステージと試験片装着時の概観写真を Fig. 2 に示す。引張速度は0.5, 4.0 mm/min であり、環境温度は23℃とした。引張荷重中、クレイズ発生箇所における変形をビデオカメラにて撮影し、同時にチャックでの荷重を測定した。試験後、ビデオ画像から、巨視的なき裂が進展を開始するまで、き裂先端位置におけるフィブリルの伸びを測定した (Fig. 3)。

2.2.2. バンパフェース衝撃試験について

自動車部品レベルの試験として、振り子試験装置を用いて、バンパフェースの破壊試験をおこなった。本実験の概観写真を Fig. 4 に示す。バンパフェースは鉄製のジグに固定されており、三角柱形状のインパクトを 2.8m/sec でバンパフェースの中心位置より約40%オフセットさせた位置に衝突させた。その際にインパクトの減速度を測定し、バンパフェース裏側に設置した高速度カメラによって、クレイズ損傷ならびに破壊の進展状況を撮影した。

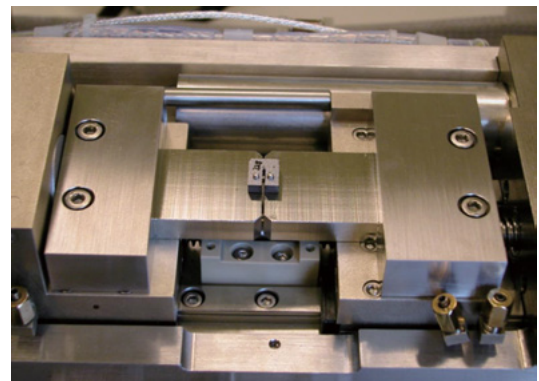


Fig. 2 Photograph of tensile stage and specimen in ESEM

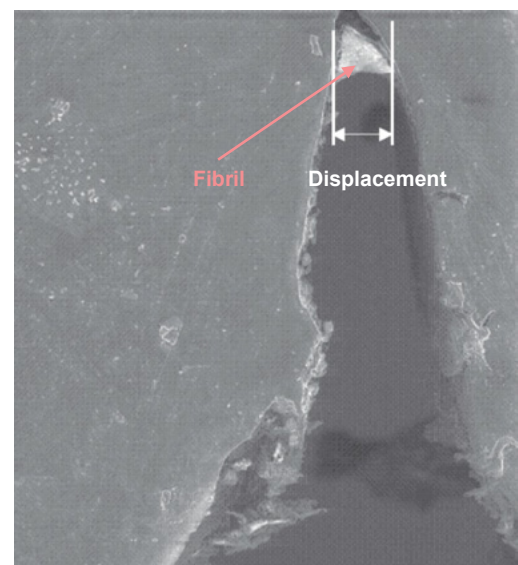


Fig. 3 Photograph of crack tip during tensile test

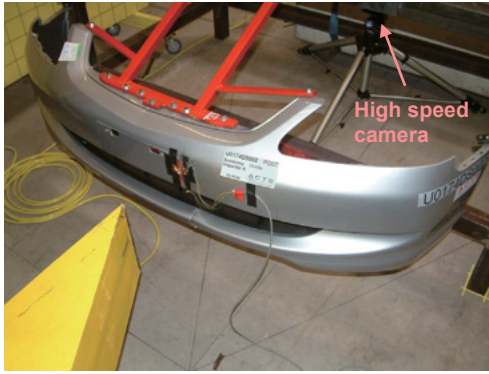


Fig. 4 Photograph of bumper face impact test

3. 粗視化分子動力学モデル

本章では、クレイズをミクロスケールでモデリングするために用いた粗視化分子動力学モデルを以下に示す。

3.1. ポテンシャル関数

クレイズの生成、成長をミクロスケールでモデリングするため、粗視化分子動力学を用いた。解析ソルバーはパブリックドメインの統合シミュレータである OCTA⁽¹⁷⁾を用いた。本解析では、ビーズ、スプリングモデルを用いてモデリングをおこなない、ビーズ間に働く van der Waals 力は式(1)に示される Lennard-Jones (LJ) ポテンシャルを用いる。

$$U_{nonbond}(r_{ij}) = 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_0}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

ここで、 r_{ij} は LJ 球体の直径であり、 ϵ_{ij} は相互作用力の強さを示す。また、ビーズ間に働く共有結合力は、式(2)に示す単純な調和ポテンシャル関数を用いる。

$$U_{bond}(r) = \frac{1}{2} k (r - r_0)^2 \quad (2)$$

ここで、 k はバネ定数、 r_0 は初期の釣り合い状態におけるバネの結合長さである。

3.2. ポリプロピレンのバルクモデル

Fig. 5 に粗視化分子動力学の計算モデルを示す。モデル形状は $14.1 \times 14.1 \times 50.0 \mu\text{m}$ の直方体であり、総ビーズ数は 10000 個であり、ビーズ 1 個に約 77 層のラメラ構造が含まれることに相当する。また、バネの色はそれぞれの分子鎖を意味する。構造緩和後の結合長さは $1 \mu\text{m}$ とし、分子鎖形状は直鎖を仮定した。よって、本解析モデルでの鎖一本がフィブリルの束に相当することになる。引張方向の境界条件は Staggered の反射条件を用い、その他の方向は周期反射条件としている。初期の構造緩和計算は、ポテンシャルを自動的にスケールリングすることでおこなわれ⁽¹⁶⁾、計算ステップ数は 50000 回である。ここで、非結合間ポテンシ

ル関数の相互作用の強さ ϵ_{ij} や結合間ポテンシャルのバネ定数 k は、環境型 SEM 内引張荷重変位関係がシミュレーション結果と良い一致を示すように、決定する。

4. 結果および考察

4.1. 環境型 SEM 内引張試験結果

破壊力学試験で得られた荷重とフィブリルの変位関係を Fig. 6 に示す。引張速度が大きくなるほど、最大荷重が大きくなることがわかった。また、引張負荷中のき裂先端位置でのクレイズ生成写真を Fig. 7 に示す。フィブリルが引張負荷方向に配向し、破断している様子が示されている。

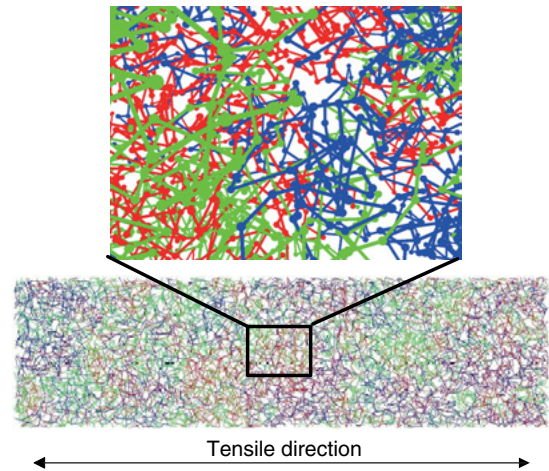


Fig. 5 Coarse molecular dynamics model

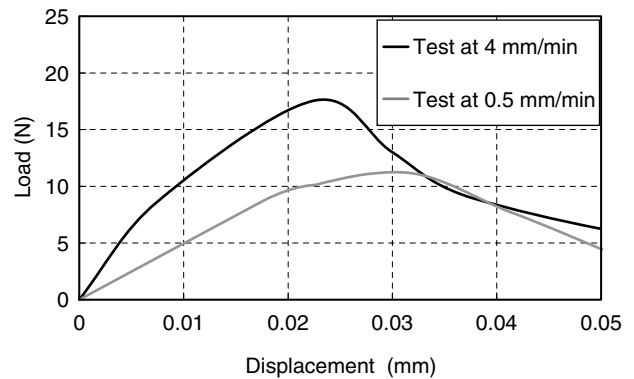


Fig. 6 Load displacement histories of crack tip

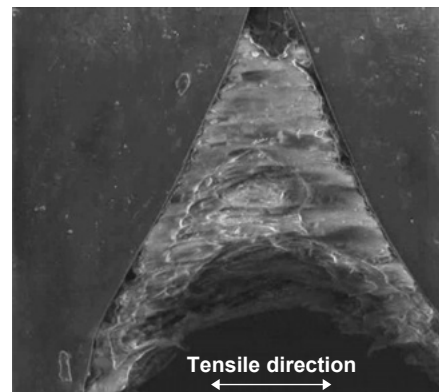


Fig. 7 Photograph of crack tip during tensile loading

4.2. 粗視化分子動力学シミュレーション結果

結合間ポテンシャル関数のバネ定数は、荷重変位関係の勾配に対して感度が強く、非結合間ポテンシャル関数の相互作用力と結合間ポテンシャル関数の両方が荷重変位関係の最大値に対して感度が強いことがパラメータ解析によって明らかにされている⁽¹⁸⁾。この結果を用いて、本解析でのポテンシャル関数のパラメータを決定し、シミュレーションをおこなった結果を Fig. 8 に示し、最終破断時の変形図を Fig. 9 に示す。最大荷重到達後、フィブリルが配向し、分子鎖が解かれ破断していくことによって、荷重が低下していくことが実験とシミュレーションで確認された。この軟化挙動を有限要素モデルでの軟化則として盛り込むことで、マイクロパラメータを考慮したモデリングが可能になると考えられる。

4.3. クレイズ密度依存型軟化則と弾粘塑性材料構成則

上述の粗視化分子動力学と環境型 SEM 内引張試験結果

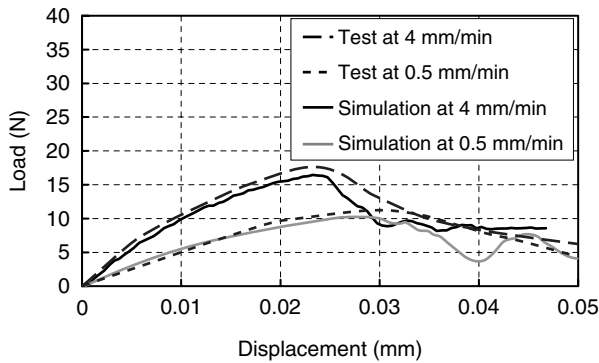


Fig. 8 Load displacement histories of bulk model



Fig. 9 Simulated deformation of crack tip in coarse molecular dynamics model

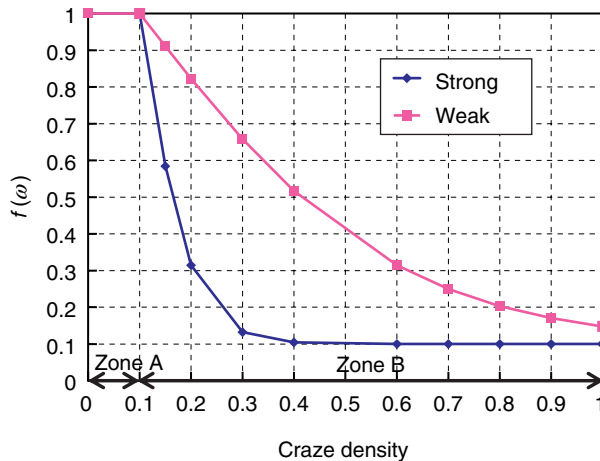


Fig. 10 Schematic explanation of softening factor and craze density

から、マイクロ領域における破壊メカニズムはクレイズ内のフィブリルの連続的な破断によって支配されることが確認された。この現象をマクロスケールでの有限要素シミュレーションにおいて考慮するため、クレイズ密度に依存した軟化則を提案する。Fig. 10に本軟化則の概念図を模式的に示す。クレイズの生成と成長の過程を Zone A と Zone B に分け、Zone A をマイクロ損傷域、Zone B をマクロ損傷域とする。Zone A では、本軟化則は機能せず、志澤らのモデルをそのまま利用する。一方で、クレイズが成長し、Zone B に達すると、軟化則が機能し、改良型流れ応力によって計算が実行される。また、軟化度合いを係数として変更することで、顕著な軟化挙動と鈍感な軟化挙動を表現することが可能となる。

上記の概念を具体化するため、志澤らにより提案されている、クレイズの生成、成長を考慮した構成則を用いて、本研究において修正した流れ応力式と軟化則を以下に示す。

$$\overset{\nabla}{T} = C^v : D - \dot{\bar{\epsilon}}^p (\cos \delta) P' - \dot{\omega} T / (1 - \omega) \quad (3)$$

ここで、 T は Cauchy 応力、 $(\overset{\nabla}{\cdot})$ は Jaumann 速度であり、 D は変形速度、 $\dot{\bar{\epsilon}}^p$ は相当塑性ひずみ速度、 ω はクレイズ密度、 $\dot{\omega}$ はクレイズ速度であり、 C^v 、 P' 、 $\cos \delta$ は参考文献中に定義されている^{(10)・(13)}のでここでは省略する。また、クレイズ速度は次式で示され、

$$\dot{\omega} = A(1 - \omega) \left(\dot{\bar{\epsilon}}_m^p + B \cdot D_1 \dot{\bar{\epsilon}}^p \cdot 0.5 [1 + \tanh\{-D_2(\bar{\epsilon}^p - \epsilon_c)\}] \right) \cdot \dot{\bar{\epsilon}}^p \quad (4)$$

A 、 B 、 D_1 、 D_2 は材料定数となる。また、 $\dot{\bar{\epsilon}}_m^p$ は平均塑性垂直ひずみ速度であり以下の式で定義される。

$$\dot{\bar{\epsilon}}_m^p = d\{(q_1 \omega) \cosh((q_2 \omega + q_3) \sigma_m / \sigma_y)\} / dt \quad (5)$$

ここで、 σ_m は静水圧応力、 σ_y は降伏応力であり、 q_1 、 q_3 は材料定数である。式(4)の第一項はクレイズの発展を示し、第二項はクレイズの生成と成長を意味する。 ϵ_c はクレイズ成長停止ひずみである。クレイズの発生判定には、静水圧応力クライテリアを用いた以下の式を用いる。

$$\sigma_b \geq A_1 + (B_1/3 \sigma_m) \quad \sigma_b = \sigma_1 - \nu \sigma_2 - \nu \sigma_3 \quad (6)$$

ここで、 σ_b はフィブリルの配向に必要な応力を示し、 σ_i は主応力であり、 A_1 と B_1 は材料定数である。ひずみ硬化則には、式(7)、(8)に示される通り、ひずみ速度依存係数 m を用いた指数硬化型の式を用いており、流れ応力 g は樹脂で引張試験時に観察される第二降伏以降での再配向による応力上昇を表現できる式になっている。

$$\dot{\bar{\epsilon}}^p = \dot{\bar{\epsilon}}_r \left| \frac{\bar{\sigma}}{g(\bar{\epsilon}^p)} \right|^{1/m} \quad (7)$$

$$g(\bar{\epsilon}^p) = \sigma_r \{ \tanh(k_1 \bar{\epsilon}^p) + k_2 + H_e(\bar{\epsilon}^p - \epsilon_r) k_3 (\exp \bar{\epsilon}^p - \exp \epsilon_r) \} \quad (8)$$

ここで、 $\dot{\varepsilon}_r$ は参照ひずみ速度、 σ_r は参照応力、 ε_r は参照ひずみを表す。 k_1 ・ k_3 は材料定数である。 $He(x)$ は式(9)に示されるステップ関数である。

$$H_e(x) = \begin{cases} 1 & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \quad (9)$$

本研究では、式(10)、(11)に示される流れ応力式を用いる。クレイズによる破壊は数百から数千本の分子鎖が連続的に破断していく現象であり、これを現象論的に表現したクレイズ密度依存型軟化則と流れ応力とで表現することで、クレイズの成長に起因する最終破壊をマイクロパラメータを用いてシミュレートすることが可能となる。

$$g(\bar{\varepsilon}^p) = \sigma_r \{ \tanh(k_1 \bar{\varepsilon}^p) + k_2 + H_e(\bar{\varepsilon}^p - \varepsilon_r) k_3 (\exp \bar{\varepsilon}^p - \exp \varepsilon_r) \} \times f(\omega) \quad (10)$$

$$f(\omega) = 1 - \tanh((\omega - w_2)w_3) \quad (11)$$

ここで、 w_2 は軟化式が適用開始されるクレイズ密度であり、 w_3 は軟化の強さを表すパラメータである。本軟化則を式(11)の右辺と乗算したものを流れ応力 $g(\bar{\varepsilon}^p)$ として用いる。有限要素解析は、汎用陽解法ソルバー RADIOSS Ver.4.4においてユーザーサブルーチンとして材料則を組み込むことで、計算をおこなっている。Fig. 11にバンパフェース衝撃試験の有限要素モデルを示す。なお、バンパフェースモデルはシェル要素を用いてモデル化されている。

4.4. バンパフェース衝撃実験と計算結果

本材料構成則における簡便な材料定数決定手法は既に提案され、本部品における材料定数は同定済みである⁽¹⁹⁾。本有限要素解析のための材料定数を Table 1 に示す。

Fig. 12にバンパフェース衝撃実験における減速度の測定結果と計算結果を示す。高速度カメラの映像から20msecにてクレイズが発生し、40msecにてき裂が発生するのが観察された。従来のひずみによる破断判定による計算結果は、実験値よりも早い時間で破断し、減速度を低く示した。一方、本材料構成則では、クレイズの発生およびき裂進展とともに実験結果と良い一致を示した。

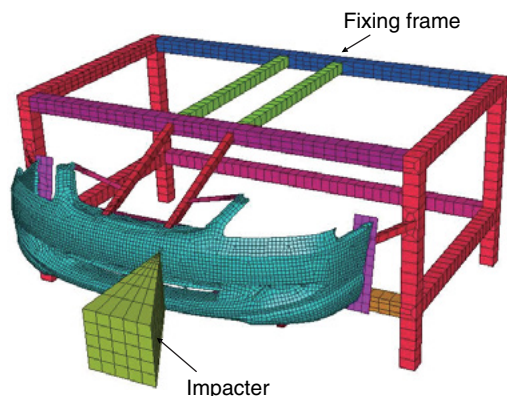


Fig. 11 Finite element model of bumper face

Table 1 Material parameters

A	0.383	σ_r	100.55 (MPa)
B	1.226	σ_y	17.432 (MPa)
A_1	19.82 (MPa)	k_1	44.795
B_1	41766.5 (MPa ²)	k_2	0.863
D_1	0.999	k_3	1.243
D_2	100.541	q_1	0.0001177
ε_c	1.087	q_2	12.44
m	0.069	q_3	2.908
$\dot{\varepsilon}_r$	1	w_2	0.22425
ε_r	0.0001	w_3	4.0968

Fig. 13は40, 60, 80msecにおけるバンパフェースの変形写真を示す。これらはFig. 4に示されるように、バンパフェース裏面に置かれた高速度カメラによって撮影された。40msecにおいてき裂が進展を開始し、インパクトのバンパ

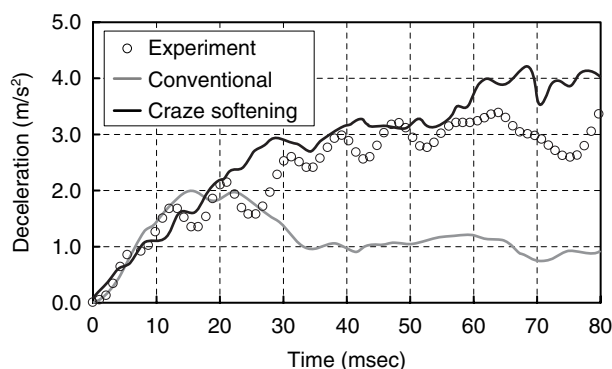


Fig. 12 Deceleration time histories of bumper face test

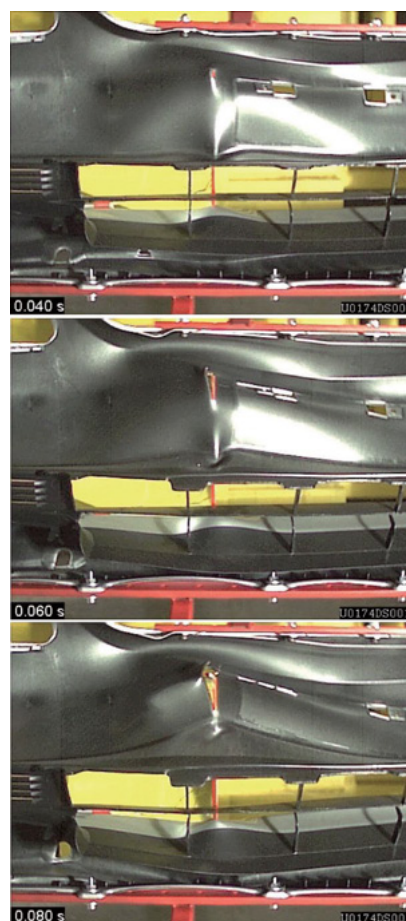


Fig. 13 Deformation of bumper face

フェースへの侵入にともない、き裂がさらに進展していくことが観察された。また、き裂先端位置における白化はクレイズによるものであり、本実験で観察された破壊形態がクレイズ支配によるものであることが明らかになった。40, 60, 80msecにおけるバンパフェースのクレイズ密度分布を伴う変形図を Fig. 14 に示す。40msecにおいて、き裂が発生、進展を開始している状態が実験と同様の傾向を示している。また、き裂先端位置におけるクレイズ密度分布やインパクト衝突位置近傍でのクレイズ密度分布においても、実験と計算とで傾向が一致した。これにより、減速度と変形形態との両方において、本解析手法の有用性が確認された。また、材料のミクロスケールにおける材料パラメータを用いて、マクロスケールにおける大変形、衝撃破壊挙動を解析することが可能となった。

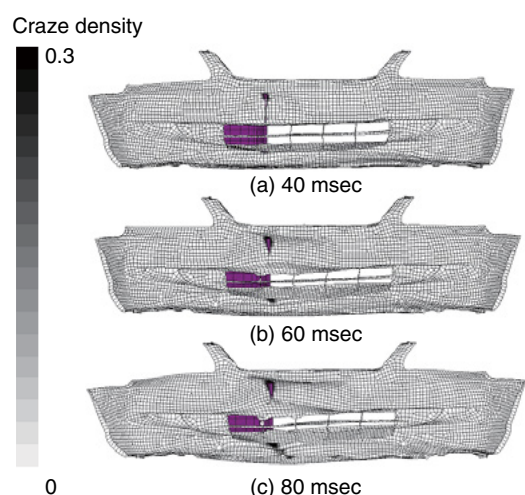


Fig. 14 Simulated deformation and craze density distribution of bumper face

5. まとめ

部品レベルでの衝撃大変形解析をミクロスケールの材料パラメータを考慮しておこなうため、ミクロスケールでの実験と粗視化分子動力学モデルを用いて、クレイズ生成、成長、フィブリル破断をモデリングし、最終破断を考慮した軟化則を現象論的に提案した。そして、本軟化則を導入することで志澤らのモデルを改良し、部品レベルでの衝撃大変形解析に適用した。その結果、部品レベルでの実験と解析結果が良い一致を示し、本手法の有効性が確認された。

参考文献

- (1) Keuerleber, M., Eyerer, P.: High-Speed Tensile Testing of Polymers and its Application to an Instrument Panel, Roell Amsler Symposium(2002)
- (2) Baljon, A. R. C., Robbins, M. O.: Energy Dissipation During Rupture of Adhesive Bonds, Science, Vol.271, p.482-484(1996)
- (3) Baljon, A. R. C., Robbins, M. O.: Simulation of Crazeing in Polymer Glasses: Effect of Chain Length and Surface Tension, Macromolecules, Vol.34, No.12, p.4200-4209 (2001)
- (4) Rottler, J., Barsky, S., Robbins, M. O.: Cracks and Crazes: On calculating the Macroscopic Fracture Energy of Glassy Polymers from Molecular Simulations, Phys. Rev. Lett. Vol.89, No.14, p.148304-1-148301-4(2002)
- (5) Rottler, J., Robbins, M. O.: Jamming under Tension in Polymer Crazes, Phys. Rev. Lett. Vol.89, No.19, p.195501-1-195501-4(2002)
- (6) Rottler, J., Robbins, M. O.: Growth, Microstructure and Failure of Crazes in Glassy Polymers, Phys. Rev. E., Vol.68, No.1, p.011801-1-011801-18(2003)
- (7) Boyce, M. C., Parks, D. M., Argon, A. S.: Large Inelastic Deformation of Glassy Polymers. Part I: Rate Dependent Constitutive Model, Mech. Mater., Vol.7, No.1, p.15-33 (1988)
- (8) Arruda, E. M., Boyce, M. C.: Evolution of Plastic Anisotropy in Amorphous Polymers During Finite Straining, Int. J. Plast., Vol.9, No.6, p.697-720(1993)
- (9) Wu, P. D., Van der Giessen, E.: On Improved Network Models for Rubber Elasticity and Their Applications to Orientation Hardening in Glassy Polymers, J. Mech. Phys. Solids, Vol.41, No.3, p.427-456(1993)
- (10) 村上大介, 小林誠一, 鳥垣俊和, 志澤一之: ポリマの粘塑性大変形挙動に関する熱, 力学的モデリングとシミュレーション(第1報, ひずみ速度依存性に由来する構成式の非共軸性), 日本機械学会論文集A編, Vol.68, No.668, p.674-681(2002)
- (11) 村上大介, 小林誠一, 鳥垣俊和, 志澤一之: ポリマの粘塑性大変形挙動に関する熱, 力学的モデリングとシミュレーション(第2報, 流れ則に基づく尖り点モデルとそのFEM解析), 日本機械学会論文集A編, Vol.68, No.668, p.682-689(2002)
- (12) 小林誠一, 富井大介, 志澤一之: クレイズの進展, 消滅を考慮したポリマの破断予測モデルおよび大変形シミュレーション, 日本機械学会論文集A編, Vol.70, No.694, p.810-817(2004)
- (13) 中垣望, 海老原誠, 小林誠一, 志澤一之: 非晶性ポリマに対する軟化形硬化則およびクレイズの伝ば, 成長停止モデルを用いた破断予測シミュレーション, 日本機械学会第17回計算力学講演会講演論文集, p.129-130 (2004)
- (14) 前博行, 高田賢治, 高橋順一, 山本敏治: 樹脂材料の常温での非線形・ひずみ速度依存性挙動について: 実

- 験結果の考察, Honda R&D Technical Review, Vol. 16,
No.1, p.165-172
- (15) Mae, H.: Fracture simulation of elastomer blended
polypropylene based on elastoviscoplastic constitutive
equation with craze and tensile softening law, J. Phys.
IV, Vol.134, p.1215-1223(2006)
- (16) COGNAC User's Manual Version 4.2.4(2005)
- (17) <http://octa.jp>
- (18) Mae, H.: Analysis on Mechanical Behavior of
Polypropylene by Coarse-Grained Molecular Dynamics
Model, Proceedings of the 13th International Conference
on Deformation, Yield and Fracture of Polymers, p.497-
500(2006)
- (19) Mae, H., Kishimoto, K.: Modeling and Simulation of
Impact Failure Characteristic of Polypropylene by
Elastoviscoplastic Constitutive Law, J. Solid Mechanics
and Materials Engineering, Vol.1, No.1, p.35-46(2007)

■ 著 者 ■



前 博 行



岸本喜久雄