

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 17 日現在

機関番号：32612
研究種目：若手研究
研究期間：2019～2021
課題番号：19K14845
研究課題名(和文) ミクロ・メソダイナミクス相互連成による強弾性構成モデルの開発とSOFCへの展開

研究課題名(英文) Development of a Ferroelastic Constitutive Model Using Micro-Mesodynamics Coupling and Its Application to SOFC

研究代表者
村松 真由 (Muramatsu, Mayu)
慶應義塾大学・理工学部(矢上)・講師

研究者番号：20609036
交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：固体酸化燃料電池(SOFC)の空気極となるランタンストロンチウムコバルトフェライト(LSCF)の微視組織の発展を考慮し、SOFCにおける強弾性現象を表現可能な数理モデルを開発するために、分子動力学解析を採用して解析手法・モデルを構築するとともに数値解析を実施した。ペロブスカイト構造LSCFの変形過程では、帯状組織発達の際に立方晶から菱面体晶への変化に伴う激しい原子の拡散と反応が起こり、原子の挙動と帯状組織の発達それぞれが強弾性における応力の非線形性を誘起していると考えられる。本研究では、この問題に対して、分子動力学-力学現象要素解析を実行した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、弾性エネルギーを考慮したエネルギー汎関数からフェーズフィールドモデルを導出した。強弾性モデルに基づき単結晶の強弾性解析を行いラメラ構造やヘリンボーン構造など観察される構造が数値解析的にも得られることがわかった。さらに分子動力学シミュレーションを実施し、フェーズフィールドモデルに適合する手法を開発した。また、有限要素解析より分子動力学シミュレーションのモデルに強制変位を与える手法も開発した。得られた分子動力学-有限要素連成シミュレーションの結果積分点毎に分子モデルに異なる変形を与えることが可能となり、一度に一つの要素が受ける変形に関して複数の変形のテストケースを試すことが可能となった。

研究成果の概要(英文)：In order to develop a mathematical model that can represent the ferroelastic phenomena in SOFCs considering the microstructural evolution of lanthanum strontium cobalt ferrite (LSCF), which is used as the air electrode of solid oxide fuel cells (SOFCs), molecular dynamics analysis was employed to construct an analytical method and model, and numerical analysis was conducted. The numerical analysis was carried out. In the deformation process of perovskite LSCFs, intense atom diffusion and reactions accompanying the change from cubic to rhombohedral crystals occur during the development of the band structure, and it is considered that the atom behavior and band structure development respectively induce the stress nonlinearity in ferroelasticity. In this study, molecular dynamics-mechanics elemental analysis is applied to this problem.

研究分野：固体力学

キーワード：SOFC FEM MD

1. 研究開始当初の背景

エネルギー利用の低炭素化に向けて、固体酸化物燃料電池(以降 SOFC と略称)が注目されている。米国の EERE FCTO や欧州の FCH JU2 など国家的な SOFC 推進プロジェクトは乱立しており、今後国際競争は激化していくと考えられている。日本では 2011 年世界に先駆けて家庭用 SOFC(エネファーム)が販売され、商用化が開始された。今後は、2020 年には 140 万台、2030 年には 530 万台の家庭用 SOFC を導入、燃料電池自動車に至っては世界最速の普及を果たすという目標が掲げられているが [日本再興戦略 2013]、生産性の大幅向上、性能の向上、耐久性の向上など解決しなくてはならない問題は山積している。特に長期使用時の耐久性低下が解決されていないことから、未だ家庭用燃料電池普及台数は 25 万台にとどまっており、SOFC 長期健全性確保は喫緊の課題である [内閣府未来投資戦略 2018]。

2. 研究の目的

SOFC 構成材は強弾性と呼ばれる特異な力学特性を有することが近年明らかとなり、次世代 SOFC には強弾性を考慮した設計が必須と考えられている。しかしながら、現状強弾性を数値的に表現可能な構成モデルは存在せず、現象を解明するには至っていない。本研究では、ミクロスケールの原子の振る舞い(原子ダイナミクス)とメソスケールの材料組織の発展(材料ダイナミクス)とをオンタイムで同時に考慮可能な解析手法を開発することで、強弾性構成モデルを構築する。得られたモデルによる数値解析から強弾性の非線形性が発現する機構を解き明かすとともに、新たな SOFC 設計指針を打ち立てる。

3. 研究の方法

本研究では、新たにミクロ-メソ構成モデル相互連成手法を開発する。得られた構成モデルを熱・電気化学-力学 SOFC 解析技術へと導入する。その際、ミクロ-メソ連成相互作用に基づいて強弾性現象を調査し、応力-ひずみ関係における非線形性の発現機構を明らかにする。さらに、SOFC シミュレータによる数値解析と実機 SOFC による実験から数値解析の検証を行うとともに長寿命 SOFC の設計指針を提案する。

4. 研究成果

本研究では、MD シミュレーションと FEM によるシミュレーションの連成計算手法を導入し、連続体スケールにおいてナノ多結晶金属での双晶の発生が延性に及ぼす影響について検討した。MD シミュレーションでは原子間ポテンシャルから原子の位置、速度を決定した。原子間ポテンシャルには多体項にて積層欠陥や空孔を考慮できることから Mishin らにより提案された原子挿入法ポテンシャルを用いた。MD と FEM を連成させる際に村島らが提案した手法を用いた。原子配置変化と連続体の変形とを関連づける際に結晶固体に適用可能である Cauchy-Born Rule (CBR) を用いた。

さらに本研究では、新たにミクロ-メソ構成モデル相互連成を実施した。分子動力学シミュレーションには LAMMPS を使い、有限要素解析では手製のハウスコードを使用した。CBR に基づいて、有限要素解析における変形こう配が分子動力学シミュレーションのシミュレーションボッ

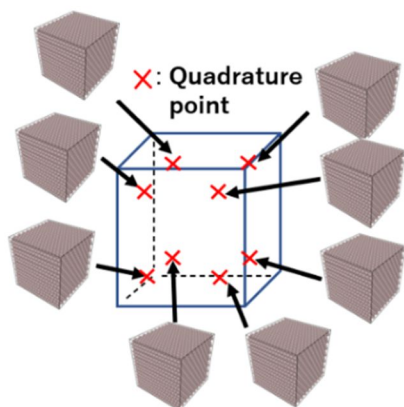


図 1. FEM-MD 連成解析。8 積分点要素を用いて計算を行う。

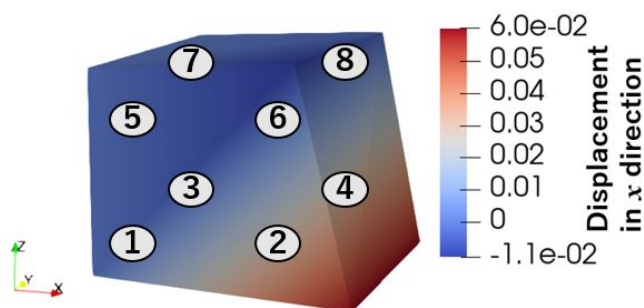


図 2. FEM における不均一変形。8 積分点それぞれで異なる MD の挙動が得られる。

クスの変形に反映されるアルゴリズムを用いた。得られた数値解析手法より、いくつかのテスト

を実施した(図 1,2) . 特に不均一変形においては,有限要素の積分点に存在する分子動力学のシミュレーションボックスがマクロスケールでの変形に依存して異なる変形状態が与えられ,異なるミクロスケール構造となる様子が観察された .

今後はさらに計算規模を大きくすることが課題である(図 3) .

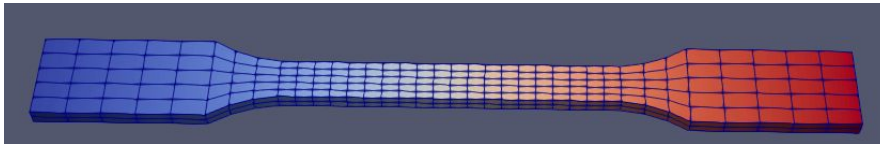


図 3. 360 要素のダンベル試験片 . 今後はこの 1/8 対称モデルの各積分点で 163 万原子の MD 計算を実施する .

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Muramatsu, M. and Shizawa, K.	4. 巻 10
2. 論文標題 Development of Phase-field Model Based on Balance Laws and Thermodynamic Discussion	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 095325, 1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0021881	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Muramatsu, M. and Shizawa, K.	4. 巻 9
2. 論文標題 Discrete Conservation Laws Based on Micropolar Theory Considering Lattice-Scale-Director During Phase Transformation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 1, 15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5100774	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 韓霽珂, 西紳之介, 高田賢治, 村松真由, 大宮正毅, 小川賢介, 生出佳, 小林卓哉, 村田真伸, 森口周二, 寺田賢二郎	4. 巻 2020
2. 論文標題 可変正則化パラメータを用いた phase-field 延性破壊モデル	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本計算工学会論文集	6. 最初と最後の頁 1, 15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11421/jsces.2020.20200005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 0件/うち国際学会 3件）

1. 発表者名 Satake, K., Okada, K., Muramatsu, M.
2. 発表標題 Phase-field Crack Analysis Using Estimation of Transition Zone of Crackby Molecular Dynamics Simulation
3. 学会等名 3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (COMPSAFE2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Satake, K., Okada, K., Muramatsu, M.
2. 発表標題 Estimation of transition zone in phase-field crack model based on molecular dynamics
3. 学会等名 14th World Congress in Computational Mechanics and ECCOMAS (WCCM2020) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐竹寛, 岡田清志郎, 村松真由
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる損傷幅を用いた Phase-field Crackシミュレーション
3. 学会等名 第25回計算工学講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Sato, M., Muramatsu, M., Shinnosuke Nishi, Terada, K., Kawada, T.
2. 発表標題 Multi-scale analysis of plate-shaped solid oxide fuel cell based on substitution approach
3. 学会等名 Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 村松真由, 寺田賢二郎
2. 発表標題 変形場と損傷パラメータ場の連成シミュレーション
3. 学会等名 第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤維美, 村松眞由, 西紳之介, 寺田賢二郎, 川田達也
2. 発表標題 非弾性複合板の代替アプローチを用いた非定常熱応力解析
3. 学会等名 第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤維美, 村松眞由, 西紳之介, 寺田賢二郎, 川田達也
2. 発表標題 代替アプローチを使用した平板型固体酸化物形燃料電池のマルチスケール解析
3. 学会等名 第32回日本機械学会計算力学講演会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

https://muramatsu.mech.keio.ac.jp/

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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------