

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 13 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25286100

研究課題名(和文) 格子不整合構造の階層性に着目した変形体の健全性評価のための計算固体力学理論の確立

研究課題名(英文) Computational solid mechanics for structural integrity of deformable bodies based on hierarchy of lattice defects

研究代表者

中谷 彰宏 (Nakatani, Akihiro)

大阪大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：50252606

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 6,700,000円

研究成果の概要(和文)：物質にはしばしばスケールに応じた階層的な構造を見出すことができますが、同様に規則正しい格子配列を乱す格子不整合構造にも階層性を見出すことができます。本研究課題では、変形する物体の構造健全性評価に応用可能な計算固体力学理論についての基礎的研究を実施し、様々なスケールの幾何学的な形態と力学的な特性との間の関係を理論定式化と計算機シミュレーションによって明らかにしました。

研究成果の概要(英文)：While we often find some hierarchical structure in materials, we also find some hierarchical character in lattice defect structure which violate the regular lattice arrangement. In this project, we have conducted the fundamental study of the theory for computational solid mechanics which can be applied to evaluation of structural integrity of deformable bodies. We have clarified the relationship between the geometric morphology and mechanical property in different scales by using theoretical formulations and computational simulations.

研究分野：変形体の力学

キーワード：変形体の力学 計算力学 材料力学 格子欠陥 シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

構造敏感性を有する材料の健全性を予測可能にする創造的な計算力学的方法論の実現には、基礎理論やアルゴリズムが想定外の結果を発見できる能力を有しており、かつ、現象のモデリングに対して先験的な知識を必要としない方法論の構築が望まれる。同時に、信頼性の保証や誤差評価が可能で、解析者が目標として設定する強度をできるだけ精度良くかつ効率的に獲得できるようにアダプティブに自ら適切な方法論を作り出していく理論体系の構築が望まれる。そのような研究はまだ始まったばかりである。

2. 研究の目的

多様な要求を実現するために、本研究課題では、格子不整合構造の階層性に着目した変形体の健全性評価のための計算固体力学理論を構築することを目的として研究を行う。

3. 研究の方法

格子の不整合構造の階層性に注目した変形体の健全性評価に注目し、ミクロ問題を基本問題とし、粗視化モデルによって情報圧縮をはかり、関心量に対する精度を維持しつつ解析を単純化する方法論を議論する。ここでは、代理問題(近似問題)を定式化し解くためのマルチスケール解析法を以下の例について検討する。

(1) 切り紙モデルの面内変形のマイクロポラー理論による粗視化モデリングとシミュレーション(図1に一例を示す)。

(2) 方程式フリー法(equation-free method)による定式化とシミュレーション

(3) 結合の離散性に着目したマルチスケール計算破壊力学。

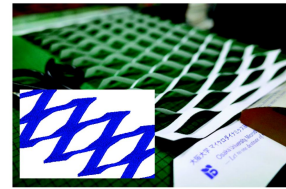
(4) 原子集合モデル, 格子欠陥集合モデル(原子空孔・転位などの狭義の格子欠陥だけでなく、き裂、界面、さらには、材料全体の变形を意味する広義の格子欠陥)、連続体モデルの多段階層マルチスケール解析。

(5) ナノカーボン構造に対して格子不整合を有する構造の原子シミュレーションと、転位論に基づく粗視化モデルを用いた半理論解との比較。

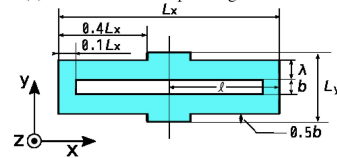
4. 研究成果

(1) 内部構造を陽に考慮した古典弾性論による解を求める問題を基本問題とし、マイクロポラー理論による粗視化モデリングによって既述した代理問題の精度を検討し、目標指向型モデリング(Goals)手法を実現するための基礎的な知見を獲得した。具体的に切り紙モデルの曲げ変形についてマイクロポラー理論による粗視化モデルを提案した。また、強い幾何非線形性を伴う現象へ応用の礎として、ミクロに多数のき裂を有する構造体の面外変形への分岐現象を解明すること

ができた。



(a) Schematics of simple kirigami structure



(b) Unit of analysis model

図1 切り紙構造と単位構造モデル

(2) 原子集合モデルの初期値・境界値問題を基本問題とし、格子不整合構造の集合モデルの時間発展で現象を記述する代理問題との比較を行った。さらに変形体のミクロな構造変化とマクロな不安定性との相関を調べるために、方程式フリー法(equation-free method)によるナノコラム(柱)の圧縮変形解析を行った(図2)。関連して、一連の研究に関連する粗視化モデリングの方法論として繰り込み群の方法検討し、具体的に、ミクロな一般化積層欠陥エネルギーから、マクロなせん断変形に対する駆動力と臨界せん断応力を評価し、方法論の妥当性を考察した。

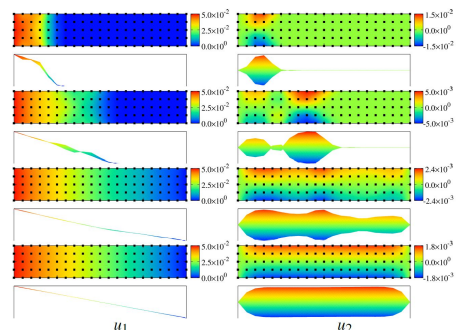
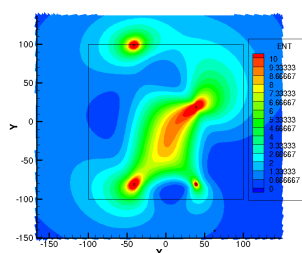


図2 方程式フリー法による圧縮負荷による変位分布

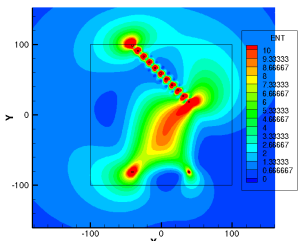
(3) 結合の離散性に着目したマルチスケール計算破壊力学に関する研究を行い、き裂先端のミクロ構造変化によるエネルギー散逸を含む広義の表面エネルギーを表現する凝着域(cohesive zone)モデルを構築した。具体的には構造に固有の離散性と階層性(枝分かれ構造)による見掛け上のFPZの寸法や強度の変化を解析し、微視構造がマクロ特性に与える影響を調べた。また原子集合モデル、格子欠陥集合モデル、一般化連続体モデルの多段階層に対して、破壊力学とのアナロジーから、構造の時間発展に関するエネルギー解放率に相当する駆動力の表現を導くことに成功した。さらに、摩擦や損傷、すなわち、エネルギー散逸を伴う現象に応用した。具体的には損傷力学に基づいた凝集域(Cohesive Zone)モデルの定式化を行い、多層構造の層

間剥離を伴う変形挙動と力学特性、き裂面に摩擦を伴う破壊現象を解析した。

(4) 微視的な原子構造の力学解析から巨視的な特性を解明する方法を一般化し、原子集合モデル、格子欠陥集合モデル(原子空孔・転位などの狭義の格子欠陥だけでなく、き裂界面、さらには、材料全体の変形を意味する広義の格子欠陥)、連続体モデルの多段階層に対して、破壊力学とのアナロジーから、Configurational Forceの表現を拡張した。粗視化モデルによる現象の解析と、モデリング誤差について検討を行った(図3に結果の一例を示す)。



(a) Disclination dipole



(b) Dislocation array

図3 回位双極子と転位列近傍のひずみエネルギー分布の等価性

(5) ナノカーボン構造に対して格子不整合を有する構造の原子シミュレーションと、転位論に基づく粗視化モデルを用いた半理論解との比較を行った。関連して、多層構造の層間剥離を伴う変形挙動と力学特性を解析するとともに、曲率を考慮した、セル・オートマトン法に基づく新しい手法を提案し、長柱の座屈、エラストイカ問題の解析により精度を確認し、その方法を多層構造体の変形に応用した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 5 件)

X.-W. Lei, Akihiro Nakatani, Local equilibrium configurations and minimum energy path of carbon nanotubes with Stone-Wales defects and their related pentagon-heptagon lattice defects. Computational Materials Science, Vol. 133 (2017), pp. 194-199. (査読有り)

中谷彰宏, 雷 霄雯, シンクロ型LPSO構造の新展開—ミルフィーユ構造の変形機構と力学特性—, 金属, 第86巻, 第6号 (2016), pp. 486-492.

X.-W. Lei, A. Nakatani, Analysis of kink deformation and delamination behavior in layered ceramics, Journal of the European Ceramic Society, Vol. 36 (2016), pp. 2311-2317. (査読有り)

Y. Doi and A. Nakatani, Structure and stability of discrete breather in zigzag and armchair carbon nanotubes, Letters on Materials, Vol. 6 (2016), pp. 49-53. (査読有り)

X.-W. Lei, A. Nakatani, A deformation mechanism for ridge-shaped kink structure in layered solids, The American Society of Mechanical Engineers (ASME) Journal of Applied Mechanics, Vol. 82 (2015), pp. 071016-1-6. (査読有り)

[学会発表](計 100 件)

X.-W. Lei, A. Nakatani, Complex energy landscapes of carbon nanotubes with defects, 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2016), Canada, Aug. 2016.

A. Nakatani, X.-W. Lei, Analysis of criterion for kink banding in layered solids, 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2016), Canada, Aug. 2016.

A. Nakatani, X.-W. Lei, Simulation of buckling and delamination in layered solids using cohesive particle model, The 12th World Congress on Computational Mechanics and The 6th AsiaPacific Congress on Computational Mechanics (WCCM XII & APCOM VI), Korea, Jul. 2016.

野呂優太, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, ひずみエネルギーの解放により駆動されるセル・オートマトンを用いた変形パターン解析, 日本機械学会関西支部第92期定時総会講演会大阪大学, 2017. 3. 13-14.

中谷彰宏, LEI Xiao-Wen, 松永慎太郎, 土井祐介, 引張荷重下のキリガミ構造体の面外変形の分岐解析, 日本機械学会M&M2016材料力学カンファレンス, 名古屋大学, 2016. 10. 8-10.

中谷彰宏, LEI Xiao-Wen, 小川隆樹, 微視的局所不安定変形で記述されるマルチスケール力学特性, 日本機械学会第29回計算力学講演会(CMD2016), 名古屋大学, 2016. 9. 22-24.

石丸知英, 原田悠之介, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 二次元カットパターン構造の一般化連続体力学に基づく解析, マルチスケール材料力学シンポジウム(第21回分子動力学シンポジウム・第9回マイクロマテリアルシンポジウム), 富山大学, 2016. 5. 27.

A. Nakatani, X.-W. Lei, Analysis of kink deformation in layered structures using lattice defect model, Modelling and Simulation Meet Innovation in Ceramics Technology, Italy, Jul. 2015.

A. Nakatani, X.-W. Lei, Deformation of ridge-shape kink structure as material

instability, 9th European Solid Mechanics Conference, Spain, Jul. 2015.

X.-W. Lei, A. Nakatani, A continuum mechanics analysis of lattice defects in carbon nanotube, 9th European Solid Mechanics Conference, Spain, Jul. 2015.

T. Ishimaru, A. Nakatani, Effect of distribution between stress and couple stress on Saint-Venant's decay rates for micropolar elastic solids in pure bending, 6th International Conference on Computational Methods (ICCM2015), New Zealand, Jul. 2015.

中谷彰宏, LEI Xiao-Wen, 回位双極子を用いたキンク変形理論と応力解析, 日本機械学会 2015 年度年次大会, 北海道大学工学部, 2015. 9. 13-16

中谷彰宏, LEI Xiao-Wen, 回位理論によるキンク変形の形成機構, 日本機械学会第 28 回計算力学講演会 (CMD2015), 横浜国立大学, 2015. 10. 10-12.

A. Nakatani and X.-W. Lei, Lattice defect model of kink deformation and configurational force, In Proc. of the 5th International Conference on Computational Methods (ICCM2014), 517 (2014).

X. Wang, A. Nakatani, Cohesive zone analysis of crack propagation on a hierarchical structured interface, 13th International Conference of Fracture (ICF13), S08-11.

X.-W. Lei, A. Nakatani, An Extended Finite Element Analysis on Evolution of Disclination Structure, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics (APCOM & ISCM 2013), 1733.

X. Wang, A. Nakatani, Fracture Toughness of Discrete Structure and Hierarchical Ramification Structure, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics (APCOM & ISCM 2013), 1735.

LEI Xiao-Wen, 中谷彰宏, ディスクリネーションの一般化力に関する検討, 日本機械学会第26回計算力学講演会, 佐賀大学本庄キャンパス, 2013. 11. 3.

宮外佳範, 土井祐介, 中谷彰宏, 方程式フリー法を用いた長柱の波動伝ばと変形挙動に関する解析, 日本材料学会第18回分子動力学シンポジウム, 東京都, 2013. 5. 17.

〔図書〕(計 1 件)

渋谷陽二, 中谷彰宏, 材料力学, コロナ (2017).

6. 研究組織

(1)研究代表者

中谷 彰宏 (NAKATANI AKIHIRO)
大阪大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号：50252606

(2)研究協力者

土井 祐介 (DOI YUSUKE)
大阪大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号：10403172

雷 霄雯 (LEI XIAOWEN)
福井大学・学術研究院工学系部門・講師
研究者番号：50726148