

平成21年5月18日現在

研究種目：基盤研究（B）
 研究期間：2007～2008
 課題番号：19360044
 研究課題名（和文） 凝着域モデルとフェーズフィールド法を融合したマルチスケール計算破壊力学の確立
 研究課題名（英文） Development of Multiscale Computational Fracture Mechanics by Using Cohesive Zone Model and Phasefield Method
 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

研究成果の概要：破壊は貯えられたエネルギーの解放プロセスととらえることができます。本課題では、破壊現象を引き起こす駆動力がエネルギーバランスから導かれるという視点から凝着域モデルを一般化し、その駆動力により起こる現象を時系列として得るためのフェーズフィールド法に代表される発展方程式の解法とを融合することによって、マイクロ解析からマクロ解析までを関連づけるマルチスケール計算破壊力学の構築に向けた基礎研究を実施しました。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	3,200,000	960,000	4,160,000
2008年度	3,300,000	990,000	4,290,000
年度			
年度			
年度			
総計	6,500,000	1,950,000	8,450,000

研究分野：変形体力学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎 ・ 工学基礎

キーワード：ナノ多結晶体、計算力学、転位、分子動力学法、非線形局在モード、水素拡散、き裂進展、破壊力学

1. 研究開始当初の背景

新材料の急速な進歩とともに機能発現と構造健全性の保障を両立するための「ものづくりの方法論」の確立が望まれている。従来から、材料の持つ固有の性質としての特性データベースと、実働時の負荷により人工物の各部位生じた内力を予測する構造解析結果との比較を基準とした構造健全性評価が行われ成功を収めているが、今後、新材料の開発に伴う材料の強度評価に迅速に対応することに加えて構造健全性設計を機能設計の段階で同時に進めていくためには、破壊プロセス領域(Fracture Process Zone; FPZ)の内部構造変化(時間発展)を陽に扱う破壊力学が必要であると考えられる。ナノメートルレ

ベルの組織を有する材料の破壊問題では、き裂進展や FPZ 内部構造変化とそれを取り囲む周囲力学場の変化とは互いに相互作用することになるから、必然的にマルチスケール手法の導入が不可欠である。一方、超微小材料の破壊問題も、その理想強度の評価という研究段階を越えて、超微小材料を基本要素として構成される構造物全体の実装時の境界条件下での健全性評価に関する研究が必要な時期を迎えており、マルチスケール手法の導入が必要となりつつある。

2. 研究の目的

本研究課題は、超微小材料そのものの破壊から、超微小材料を構成要素とするマクロ構

造やナノ構造材料のマクロ試料の破壊までをシームレスに取り扱う凝着域モデルとフェーズフィールド法を融合した新しいマルチスケール計算破壊力学理論の構築とその実証を目的としている。

3. 研究の方法

凝着域モデルはき裂進展によるエネルギーの解放という従来のオーソドックスな破壊力学の考え方を基礎にしているが、破壊現象を引き起こす駆動力がエネルギーバランスから導かれるという視点から一般化することができる。本研究では、そのエネルギーを ad hoc 的に表現するのではなく、マクロな力学環境と相互作用する開放系としての FPZ 内の構造変化に起因するものとして表現する。まず理論定式化のための定性的な知見を得ることを目的として、原子間結合の切断から、局所の塑性変形を伴うもの、非線形振動モードによるエネルギーの局在などミクロに起こるさまざまなエネルギー保存・散逸の形態について、解析法の確立とともに探究する。一方、このようなエネルギーを秩序変数で書き下すことにより変形体の境界値問題の時間発展を解析するためのフェーズフィールド法の定式化と破壊問題への適用可能性を調べる。さらに、これらの結果を体系化するための方程式フリー法によるマルチスケール計算力学理論について展望する。

4. 研究成果

(1) 原子レベルからの破壊のミクロシミュレーション

① 一次元鎖の破壊のスケール依存性に関する分子動力学シミュレーション

一次元鎖のミクロな結合力と変位の関係は、マクロに仮定される凝着則と定性的に一致した特徴を有し、図1に示すように安定と不安定の二つの釣り合い位置を有している。一定のひずみ速度下での引張破壊シミュレーションを実施し、鎖の自由度 n (寸法) と破壊パターンおよび、マクロな凝着則を評価する。破断後の質点の相対座標が示すパターン (図2) および、荷重変位曲線 (図3) などが示すスケール依存性を検討した結果、このような破壊現象にはミクロ・マクロの境界のようなものが存在し、ここで仮定した条件下では $n=2^{11}$ 付近にあることがわかる。

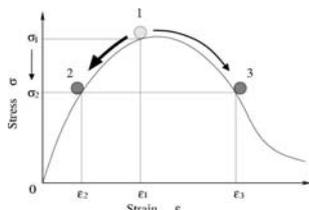
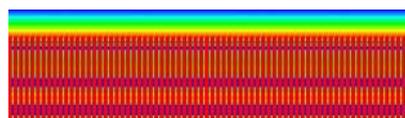
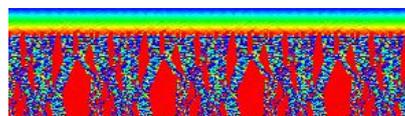


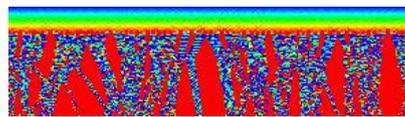
図1 原子間結合力と変位の関係に現れる安定と不安定の二つの釣り合い位置



(a) $n=2$

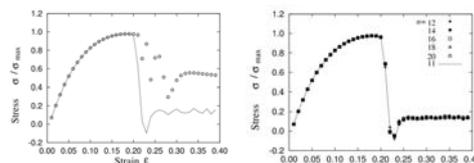


(b) $n=2^5$



(c) $n=2^{14}$

図2 一次元鎖の破壊のスケール依存性



(a) $n=2$

(b) $n=2^{11}$ から 2^{20}

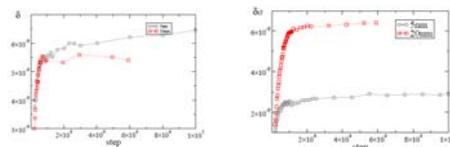
図3 一次元鎖の引張変形での荷重変位曲線 (実線はともに $n=2^{11}$)

② ナノ多結晶体の破壊の分子動力学シミュレーション

図4に示すようなき裂を有する A1 ナノ多結晶体モデルを作成し、き裂進展問題に対する分子動力学シミュレーションを実施し、モード I, II 型混合モードでのき裂近傍の変形機構を考察した。解析は仮想的にき裂先端を移動させて、小規模降伏の仮定の下で、線形弾性解に基づく変位境界条件で行う。図5はモード I でのき裂開口変位とき裂進展量の時間発展を示している。これらのき裂先端形状の時間発展とともに、き裂先端近傍に形成される FPZ 内の原子配置データから共通隣接解析により格子欠陥の構造を調べることにより、破壊現象を記述する幾何学的パラメータを構成できる。これらの幾何学的パラメータと力学パラメータとの関係を記述することにより凝着則の構成が可能となる。



図4 き裂を有するナノ多結晶体モデル



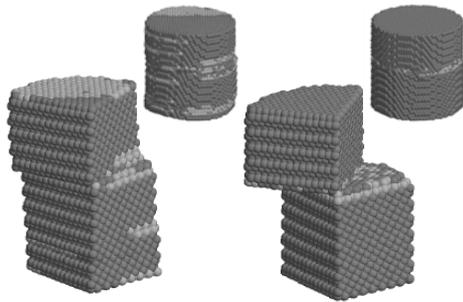
(a) き裂先端開口変位

(b) き裂進展量

図5 き裂を有するナノ多結晶体モデル

② ナノ細線のねじり破壊の分子動力学シミュレーション

Al, Cu ナノ多結晶体からなるナノ細線のねじり変形問題に対する分子動力学シミュレーションを実施し、ひずみ速度の違いによってあらわれる変形の局所化について検討している。図2は変形のスナップショットを示している。弾性変形の後には、断面のいたるところで円柱表面から、らせん転位が導入され、変形初期にはマクロ的には一様な変形が生じる。その後、特定のすべり面に変形が局在化しねじり破壊が進行する。同時に、その他のすべり面では回復が起こり欠陥構造は消す。図5に示すように、破壊の進行している領域では、すべりによる発熱（ポテンシャルエネルギーが解放され運動エネルギーに転化する）が生じ系全体に伝ばしていく。このようなエネルギー散逸を考慮した一般化界面エネルギーの基礎データは巨視的な凝着域の構成則を表現するための重要な基礎データを与える。



(a) 15000 step (b) 30000 step
図6 ねじり破壊と欠陥構造

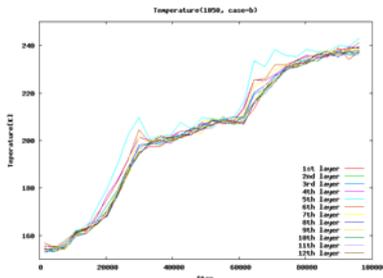


図7 ねじり変形下の断面温度の分布

(2) 凝着域モデルを用いたき裂進展に関するメゾスコピックシミュレーション

金属セラミック界面のき裂進展問題について凝着域モデルと離散転位塑性論を用いたメゾスコピックシミュレーションを実施し、凝着域モデルの有効性を確認する。図8は転位源や転位の障害となる欠陥の密度が異なる10の条件について応力拡大係数の公称値とき裂進展量の関係を示したものである。図から、同一の凝着則を仮定していてもき裂先端近傍に形成される塑性域（転位構造）によって見かけ上の強度が大きく変化する

ことがわかる。最も見かけ上の強度が大きくなった case8 について変形、転位構造と応力分布を図9に示す。図から、強度増加はき裂先端近傍から発生した転位の堆積による背応力の影響でき裂先端の応力場が遮蔽された効果によるものであることがわかる。凝着則の表現とともに、それを用いた境界値問題の解析の重要性を示唆する知見である。

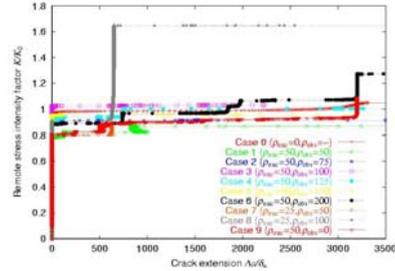
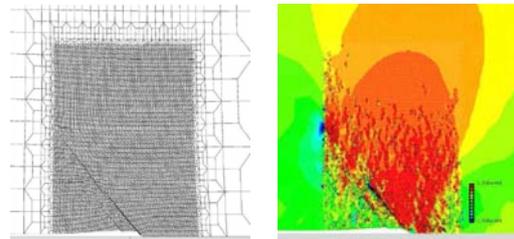


図8 凝着域モデルと離散転位塑性論を用いたき裂進展シミュレーションにおける応力拡大係数の公称値とき裂進展量の関係



(a) 変形 (b) 転位構造と応力分布

図9 凝着域モデルと離散転位塑性論を用いたき裂進展解析により得られる変形、転位構造および応力分布(case8)

(3) 格子欠陥および非線形局在モードとそのエネルギー論

① Ni 中の水素拡散に関する分子動力学解析

水素と結晶構造との連成系のエネルギー論を展開し、水素とき裂進展の関係をj知することは、長年問題となっている水素ぜい化などの現象の理解や対処戦略に重要であるだけでなく、将来、環境との化学的相互作用を伴う系における見かけ上の強度変化や凝着則の変化を定量化するための知見を得るために有用であると考えられる。ここでは水素の拡散現象について分子動力学解析を行う。図10に示すように、拡散係数の温度依存性からNi 中の水素の拡散の素過程のエネルギー障壁はほぼ一定であり、その大きさをNudged Elastic Band (NEB) 法により評価した結果と、よく対応することがわかっている。この検討に加え、欠陥の周囲の水素原子の拡散過程についての考察を目的として、ポテンシャルこう配場を等価な一定外力の作用場に置き換えた解析を実施し、水素原子の拡散過程について調べ、拡散理論の妥当性を確認している。

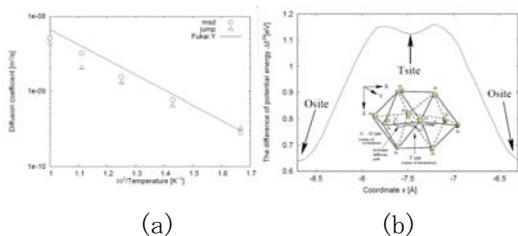


図 10 Ni 中の水素拡散: (a) 拡散係数の温度依存性 (b) 素過程に対するエネルギー障壁

② 2次元結晶構造中の離散ブリーザーの存在と安定性

離散ブリーザー (非線形局在モード) によるエネルギーの局所的な貯蔵と破壊に伴う解放について考察し、古典的な弾性エネルギーの解放と表面エネルギーに基礎を置く破壊力学理論を拡張する体系の構築のための基礎的検討を行う。ここではグラフェンシートに励起される離散ブリーザーに対して、図 11 に示すように原子間ポテンシャルからの力場を用いた周期解探索のための計算力学手法を提案している。図 12 は提案手法を用いて発見した理論解の一つである。図 13 に示すように実際のグラフェンシートの分子動力学シミュレーションでは理論解で予測された局在化した振動モードが励起されて現れていることが確認できる。き裂先端場のような非線形性が強い領域ではこのような局在構造が励起されてエネルギーの一部が非線形局在モードとして局在化している可能性があり、その発生や消滅のメカニズムの理解が破壊のメカニズムを理解する上で重要となる可能性がある。

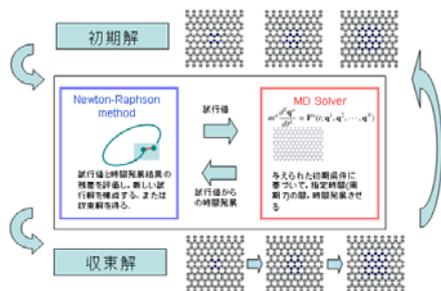


図 11 原子間ポテンシャルからの力場を用いた周期解探索手法の概念図

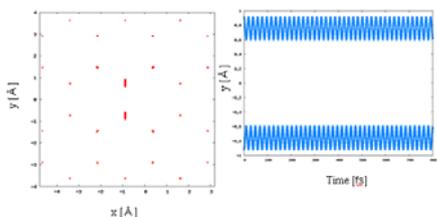


図 12 グラフェンシートの離散ブリーザーの数値計算による理論解

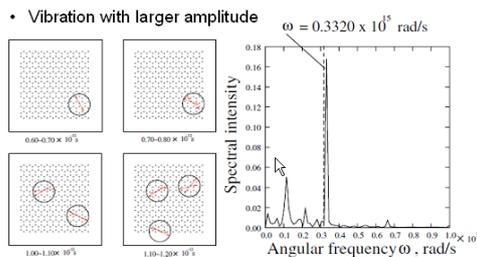
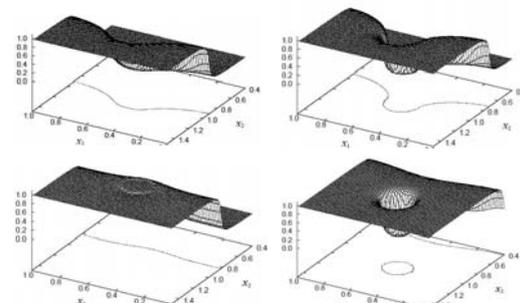


図 13 グラフェンシートの分子動力学解析で現れる非線形局在モード

(4) フェーズフィールド法による変形体の解析に関する研究

フェーズフィールド法によるき裂成長モデルについての定式化を行い、凝着域モデルとの対応について考察している。同法は秩序パラメータの時間発展としてオイラー的に追跡するため、き裂成長に伴う要素の変形やトポロジ的な変化に対応した再分割といった煩雑さを避けることができると考えられる。図 14 は介在物を横切る転位線の運動に関する解析結果を示している。介在物を通過する際の抵抗係数の違いにより切断とループ形成といったメカニズムの違いが現れ、時間発展解析の重要性を示唆する知見である。また同様の手法を弾性膜体のトポロジー変化・弾性体と流体の混合体モデルにも適用し解法の有効性を確認している。



(a) 介在物の切断 (b) 転位ループ形成

図 14 介在物のすべりに対する抵抗の違いによる破壊の有無

(5) マルチスケール解析の体系的な枠組み構築に関する研究

① 方程式フリー法に関する基礎的検討
 ミクロとマクロが強く連成する破壊現象を扱うための階層化を考えたマルチスケール解析のための新しいプラットフォームが必要性からマルチスケール・マルチフィジックス系の理論の定式化と解析について検討している。その一例として、変形体力学解析のための方程式フリー法 (図 15 に概略を示す) を一次元鎖の圧縮問題に適用する。図 1

6は解析結果の一例である。微視的変形については継続した検討が必要であるが、十分時間が経過したときの巨視的な一様変形は参照した分子動力学解析の結果とよく対応している。

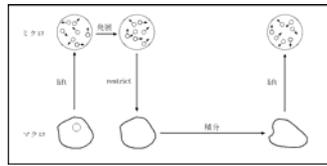


図 15 方程式フリー法の概略

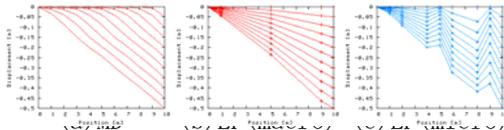


図 16 方程式フリー法による一次元鎖の圧縮問題の解析 (MD との比較)

② 拡張有限要素法による格子欠陥ダイナミクス

モデルの階層性の中で非保存運動 (外部と物質のやりとりがある開放系) を考えた理論の定式化を行い、そのひとつとして、拡張有限要素法を援用した高次欠陥動力学モデルの有用性について検討を行っている。図 17 は提案手法を用いて転位と高次欠陥で現される粒界と孤立転位との相互作用場を解析した例である。材料特性を時間発展する境界値問題の解として理解するべきであるとする本研究課題の意義を示す一例である。

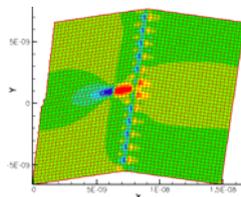


図 17 拡張有限要素法による転位と粒界の相互作用の解析

以上のような研究成果からマルチスケール計算破壊力学の実現が、機能設計の段階から構造健全性評価を採り入れた新しい計算機援用材料設計手法の創出が社会貢献だけでなく構造健全性評価学に関連する新しい学問分野の開拓につながると期待される。

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 35 件)

① Y. Doi, K. Yoshimura, and A. Nakatani Modulational instability of zone boundary mode and band edge modes in nonlinear

diatomic lattices, Phys. Rev. E, 査読有, 79 (2009), pp.026603.

② Y. Doi and K. Yoshimura, Translational Asymmetry controlled lattice and numerical method for moving discrete breather in four particle system, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 78(3) (2009), pp.034401.

③ 國分康朗・土井祐介・中谷彰宏, 流体との相互作用を考慮した微小膜構造体の変形シミュレーション日本機械学会講演論文集 (関西支部第 84 期定時総会講演会), 査読無, No.094-1(13) (2009), p.12.

④ Y. Kinoshita, Y. Yamayose, Y. Doi, A. Nakatani, and T. Kitamura, Selective excitations of intrinsic localized modes of atomic scales in carbon nanotubes, Phys. Rev. B, 査読有, 77 (2008), pp.24307.

⑤ 政家利彦・土井祐介・中谷彰宏, 分子動力学法による Ni 結晶中の水素拡散挙動とその素過程の解析, 材料, 査読有, 57(8) (2008), pp.774-779.

⑥ 土井祐介・中谷彰宏, 1 次元格子系における移動型非線形局在モードの衝突のダイナミクス, 信学技報, 査読無, 108(336) (2008), 1-5.

⑦ 中谷彰宏, 機械工学年鑑 (3. 計算力学, 3.2 計算固体力学), 日本機械学会誌, 査読無, 111(1077) (2008), pp.646-647.

⑧ 中谷彰宏, ミクロ・メゾシミュレーションによる結晶粒微細化機構に関する検討, 日本機械学会講演資料集 (2008 年度年次大会 9), 査読無 (招待), No.08-1 (2008), pp.181-182.

⑨ A. Nakatani and T. Shimokawa, Microstructural evolution in crystalline metal induced by plastic deformation-Atomistic study of grain subdivision in tension, torsion and rolling-, Solid Mechanics and its Applications, 査読有, 144, (2007), pp.25-35.

⑩ Y. Yamayose, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani and T. Kitamura Excitation of intrinsic localized modes in a graphene sheet Europhysics Letters, 査読有, 80 (2007), 40008.

⑪ Y. Kinoshita, Y. Yamayose, Y. Doi, A. Nakatani and T. Kitamura, Selective excitations of intrinsic localized modes of atomic scales in carbon nanotubes, Physical Review, B, 査読有, 77 (2008), pp024307.

⑫ A. Nakatani and A. Sakashita, Study on biphasic material model and mechanical analysis of knee joint cartilage, Journal of Physics: Conference Series, 査読有,

96(1) (2008), 012180.

- ⑬ 占部千由・中谷彰宏, 多結晶構造の破壊ダイナミクスのシミュレーション日本機械学会講演論文集(第21回計算力学講演会), 査読無, No. 8-33 (2008), pp. 428-429.
- ⑭ 椋代雄太郎・中谷彰宏, 回位構造単位モデルを用いた粒界エネルギーの評価, 日本機械学会講演論文集(第21回計算力学講演会), 査読無, No. 8-33 (2008), pp. 167-168.
- ⑮ 松下和裕・土井祐介・中谷彰宏, マルチスケール解析の体系的な枠組み構築の研究, 日本機械学会講演論文集(関西支部第83期定時総会講演会), 査読無, No. 84-1(6) (2008), p. 23.
- ⑯ 正島康行・中谷彰宏, トポロジカル欠陥に起因する膜の動的安定性に関する研究, 日本機械学会講演論文集(関西支部第83期定時総会講演会), No. 84-1(6) (2008), p. 26.
- ⑰ 椋代雄太郎・下川智嗣・中谷彰宏, 転位と粒界の相互作用による応力場の解析(離散転位モデルと準連続体モデルの比較), 日本機械学会講演論文集(第20回計算力学講演会), 査読無, No. 07-36 (2007), pp. 245-246.
- ⑱ 土井祐介・中谷彰宏, 2次元FPU格子系でのIntrinsic Localized Modeの構造の解析, 京都大学数理解析研究所講究録, 査読無, 1543 (2007), pp. 227-235.
- ⑲ 中谷彰宏・椋代雄太郎・土井祐介, X-FEMを用いた粒界と転位の相互作用の解析日本機械学会講演論文集(2007年度年次大会), 査読無, No. 07-1 (2007), pp. 19-20.
- ⑳ 土井祐介・中谷彰宏, 2次元格子系における非線形エネルギー局在と不均一構造の相互作用の解析計算工学講演会論文集, 査読無, 12(1) (2007), pp. 433-434.

[学会発表] (計10件)

- ① A. Nakatani and Y. Shobatake, Study on Deformation of Vesicle Membrane based on Evolution of Topological Defects, XXII International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2008), August 24-29, 2008, Adelaide, Australia.
- ② T. Ogawa and A. Nakatani, Molecular Dynamics Study of Temporal Evolution of Defect Structures in Fcc Metal Nanowire under Torsional Loading, International Symposium on Structures under Earthquake, Impact, and Blast Loading (IB'08), October 10-11, 2008, Suita.
- ③ A. Nakatani and Y. Mukudai, A Multiscale Modeling of Grain Boundary Characteristics in Aluminum (keynote), International Symposium on Giant Straining Process for Advanced Materials (GSAM-2008), November 21-24, 2008,

Fukuoka.

- ④ C. Urabe, T. Ogawa, and A. Nakatani, Molecular dynamics study of ductile fracture near crack tip field in nanocrystalline aluminum, International Symposium on Giant Straining Process for Advanced Materials (GSAM-2008), November 21-24, 2008, Fukuoka.
- ⑤ T. Ogawa and A. Nakatani, Molecular dynamics study of defect structures in fcc nanowire under torsional loading, International Symposium on Giant Straining Process for Advanced Materials (GSAM-2008), November 21-24, 2008, Fukuoka.
- ⑥ 中谷彰宏・下川智嗣・椋代雄太郎, 転位モデルによる粒界と転位の相互作用場の解析, 日本金属学会2008年春季大会, 2008年3月28日, 東京.
- ⑦ Y. Mukudai, T. Shimokawa and A. Nakatani, A comparison of discrete-dislocation and quasicontinuum analysis of dislocation-grain boundary interactions, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics in conjunction with Eleventh International Conference on Enhancement and Promotion of Computational Methods in Engineering and Science (APCOM'07-EPMESC XI), December 3-6, 2007, Kyoto.
- ⑧ Y. Kinoshita, Y. Yamayose, Y. Doi, A. Nakatani, and T. Kitamura, Selective excitations of intrinsic localized modes of atomic scales in carbon nanotubes, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics in conjunction with Eleventh International Conference on Enhancement and Promotion of Computational Methods in Engineering and Science (APCOM'07-EPMESC XI), December 3-6, 2007, Kyoto.
- ⑨ A. Nakatani and Y. Mukudai, Elasticity analysis of stress field near dislocation in inhomogeneous material 9th US National Congress on Computational Mechanics (USNCCM9), July 23-26, 2007, San Francisco, CA, USA.
- ⑩ A. Nakatani, Microdynamics simulation in deformable body mechanics (invited), XXXV International Summer School-Conference Advanced Problems in Mechanics 2007 (APM2007) June 20-28, 2007, Saint-Petersburg, Russia.

[図書] (計2件)

- ① 中谷彰宏(矢川元基・宮崎則幸編, 分担), 朝倉書店, 計算力学ハンドブック,

(2007), 総 680 ページ, pp. 117-129.

② 中谷彰宏 (日本機械学会編, 分担), 日本機械学会, 機械工学便覧 基礎編 α6 計算力学 -Computational Mechanics-, (2007), 総 214 ページ, pp. 74-76.

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) 研究分担者

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

(3) 連携研究者