

令和 6 年 6 月 3 日現在

機関番号：32680

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03356

研究課題名（和文）変分不等式を用いた破壊の数値モデルとその解析

研究課題名（英文）Study on variational inequality model of fracture

研究代表者

高石 武史（Takaishi, Takshi）

武蔵野大学・工学部・教授

研究者番号：00268666

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：フェーズフィールドき裂進展モデルを用い、2次元開口き裂進展について、変分不等式として FreeFEM の IPOPT パッケージを用いることで妥当な計算コストで数値シミュレーションができることを確認した。
また、外部接触条件も変分不等式としてモデル化し、圧縮による材料破壊に起因して起こるき裂については内部接触条件として unilateral contact condition を勾配流に適用したモデルを用いた数値シミュレーションを行うことで、裁断機における断裂の際の材料破壊においてブレードの間隔がある値より大きい場合にき裂断面形状が大きく変形することがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、開口モードと圧縮モードの両方に対応した変分不等式によるフェーズフィールドき裂進展/破壊数値モデルを構築し、数値シミュレーションによって現実の材料破壊現象が再現できるか検証した。材料の圧縮による破壊に伴う非現実的な変形を避けるためにモデルを修正し、変位や変位勾配に基づく拘束条件を用いたエネルギーの変分不等式を導出することで、モデルの有効性を確認した。
計算用のモデルではなく、数学的に解析可能なモデルを構築することで、その解の性質を明らかにする道筋をつけるのみならず、シンプルなモデル化を行うことで、さらなる拡張の可能性を見出すことが期待される。

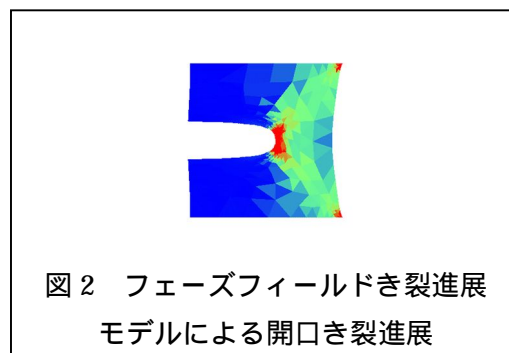
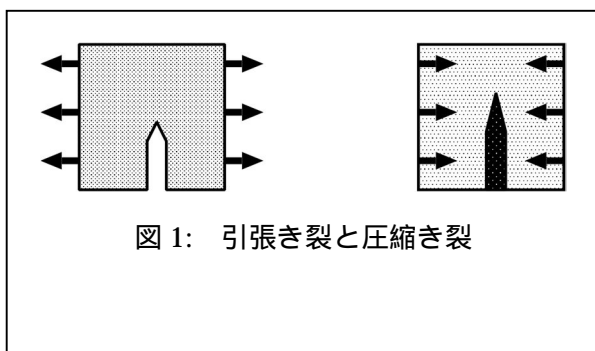
研究成果の概要（英文）：Using a phase-field crack propagation model, it was confirmed that numerical simulations of two-dimensional opening crack propagation can be performed at reasonable computational costs by using the IPOPT package in FreeFEM as a variational inequality. In addition, the external contact conditions were also modeled as variational inequalities, and for cracks that occur due to material failure due to compression, a numerical simulation was performed using a model in which the unilateral contact condition was applied to a gradient flow as the internal contact condition. It was found that when material failure occurs during a fracture in a cutting machine, the crack cross-section shape deforms significantly when the blade spacing is greater than a certain value.

研究分野：応用数学

キーワード：変分不等式 フェーズフィールド き裂進展 数値モデル 数値シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

材料の破壊や地震による地盤のき裂など、き裂進展や破壊にまつわる現象については古くから多くの研究が行われており、特に、開口型の破壊現象の数値モデルは幾多ある。その一方で、圧縮に起因する破壊については、圧縮に関する何らかのインデックスを導入したり、圧縮の場合にモデルを切り替えるなど、開口き裂とは性質の異なるモデル化が多く、圧縮と開口の混在する実際の問題に適用し破壊の様相を検討するにはまだ課題が多い (図 1)。



本研究の目的は、材料の圧縮における破壊がどのような様相で起こるかを解明するために、変分不等式を用いることで、非物理的な変数を導入することのないマクロスケール数値モデルを構築することと、数値シミュレーションによる圧縮破壊現象の解明のための基礎研究を行うことにある。

構造物の破壊などを引き起こすき裂の進展については、数値シミュレーションの発展とともに近年多くの研究がなされている。特にき裂の有無や損傷の度合いをフェーズフィールドと呼ばれる秩序変数で表すことによって、系全体のエネルギーの最小状態からき裂進展を研究するき裂進展フェーズフィールドモデルは、シンプルなモデルでありながら材料の不均一性等の複雑な設定を反映できることから、急速に研究が広まっている。この研究は Bourdin らのグループや、Karma らのグループによって始められたが、申請者は、木村とともに Bourdin らのモデルをより計算しやすい時間発展方程式に書き直すことで様々なき裂進展現象を調べられることを明らかにしてきた (図 2)。ところが、このモデルではき裂領域での弾性エネルギーを除外することから、開口モード等でのき裂進展は扱えるが、圧縮による破壊においては数値シミュレーションの際に変位がき裂面を交差してしまうなど不自然な状態を起こしてしまうため、モデルの改善が必要となる。

また、このモデルでき裂の不可逆性を前提としてエネルギーを最小化する方法として、Bourdin らや Xie らは変分不等式を用いたモデルが有効であることを数値シミュレーションで示している。一般に変分不等式での数値計算では大きな計算コストが必要となるが、申請者は IPOPT パッケージを利用することで、木村とともに導出したき裂進展方程式 (変位 $u(x, t)$ とフェーズフィールド $z(x, t)$ からなるフリーエネルギー $E(u, z)$ の変分より、フェーズフィールド $z(x, t)$ に対して得られた時間発展方程式) を、時間差分を行い不等式拘束条件のついたモデルとして、計算コスト的にも無理なく数値計算できることを確認している。

2. 研究の目的

本研究では、フェーズフィールドき裂進展モデルにおいて、材料の圧縮による破壊に伴う非現実的な材料変位を避けるために、変位や変位勾配に基づく拘束条件を用いたエネルギーの変分不等式を導出することで、これまで実現できなかった、開口モードと圧縮モードの両方に対応したフェーズフィールドき裂進展/破壊モデルを構築し、その有効性を確認することを目的とする。

本研究では、開口モードと圧縮モードの両方に対応した変分不等式によるフェーズフィールドき裂進展/破壊数理モデルを構築し、数値シミュレーションによって現実の材料破壊現象が再現できるか検証することである。計算用のモデルではなく、数学的に解析可能なモデルを構築することで、その解の性質を明らかにする道筋をつけるのみならず、シンプルなモデル化を行うことで、さらなる拡張の可能性を見出すことである。

3. 研究の方法

研究計画とその方法は次のとおりである。

1. 脆性破壊現象におけるエネルギー勾配流モデルと変分不等式モデルの比較 (2021 年度)

主としてき裂面を開口するような変位を与えるモード I き裂進展に注目し、既に提案したフェーズフィールドき裂進展モデルを変分不等式に書き直し、数値シミュレーションでき裂進展現象が表現できるか検証する。また、き裂面が接触している場合の摩擦のモデル化について、研究情報の収集を行い、検討する。

2. 圧縮による弾性体の脆性破壊現象をフェーズフィールドを用いた変分不等式でモデル化(2022-2023 年度)

圧縮による材料破壊に起因して起こるき裂に注目し、不等式による拘束条件を加えたエネルギーの変分不等式を導出し、数値シミュレーションでき裂進展現象が表現できるか検証する。圧縮破壊に関する変分不等式によるモデルを元に、2次元平板における破壊を計算する数値シミュレーションコードを開発し、動作を検証する。この際に、き裂/破壊面を挟んだ材料の変位が非現実的な結果とならずに計算できるか検証する。また、き裂面が接触している場合の摩擦のモデル化もを行い、圧縮破壊変分不等式モデルへの反映方法を検討する。

3. モデルを用いた数値シミュレーションで、圧縮破壊における材料破壊の分布と破壊様相の関係を解明 (2023 年度)

3次元の圧縮破壊モデルを導出し、数値シミュレーションで実験結果と比較し、検証する。

また、き裂面の摩擦を含んだモデル化も行い、検証する。さらに、圧縮破壊変分不等式モデルに、き裂面が接触している場合の摩擦のモデル化を反映させ、これらの条件を含む変分不等式モデルを構築する。また、このモデルを元に2次元平板における破壊を計算する数値シミュレーションコードを開発する。

4 . 研究成果

2021年度は、き裂面を開口するような変位を与えるモード I き裂進展に注目し、既に提案したフェーズフィールドき裂進展モデルを変分不等式に書き直し、数値シミュレーションでき裂進展現象が表現できるか検証した。2次元のき裂進展問題において、FreeFEM で IPOPT を用いることで変分不等式問題としてシミュレーションを実行する場合の結果と計算効率について従来の近似的方法と比較したところ、これまでの方法よりも低いエネルギー状態でのき裂進展が推移することがわかり、また、IPOPT を使うことで現実的なコストで数値計算可能であることが確認できた。さらに、この変分不等式を用いた脆性破壊に関する3次元き裂進展モデルのシミュレーションコードを作成し、動作を検証した。こちらについては動作の確認はできたものの、計算コストが非常に大きいことがわかり、計算コードの見直し等が必要であることがわかった。

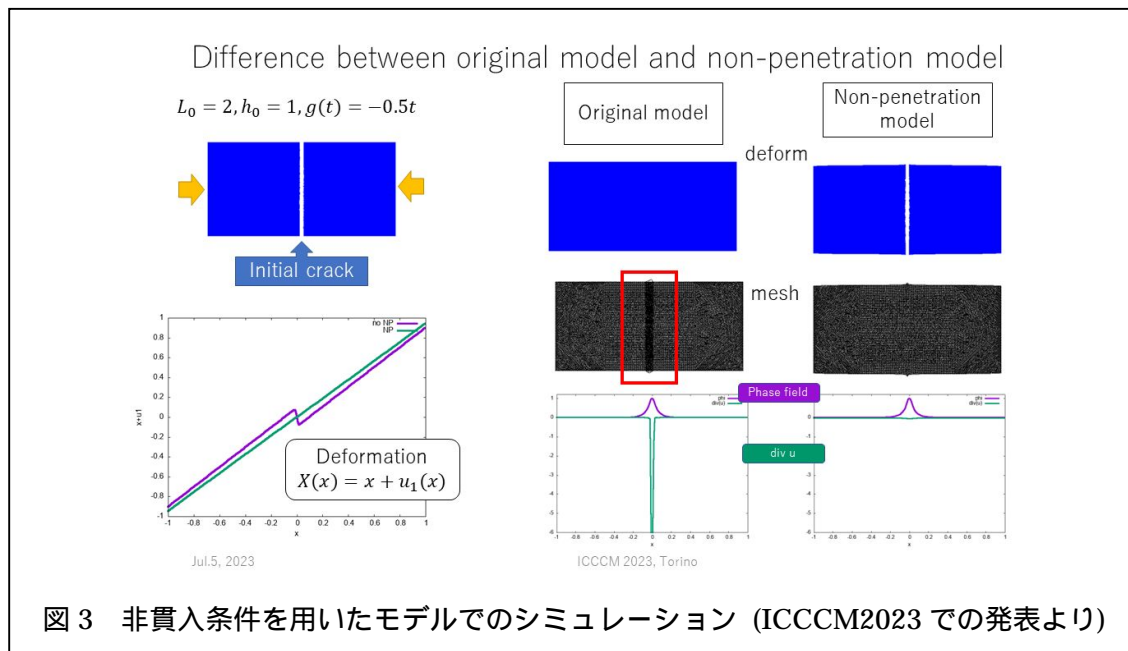
これらの結果を、日本応用数理学会 2021 年度年会において「FreeFEM を用いた変分不等式型き裂進展シミュレーション」として発表し、変分不等式問題としてシミュレーションを実行する場合の結果と計算効率、そしてその実用性について述べた。

また、き裂面が接触している場合の摩擦のモデル化について、研究情報の収集を行い、特に接触面の速度と摩擦のモデル化について検討した。この中で、変位に対する拘束条件のみでは数値シミュレーションが不安定になる可能性があるとの指摘も見つかかり、モデル化とともに数値シミュレーションの安定性も検討する必要があることがわかった。

2022 年度は、外部接触条件を拘束条件として持つき裂進展現象を、弾性体の変形において変分問題と拘束条件としてモデル化し、FreeFEM と IPOPT パッケージを用いてその数値シミュレーションコードを開発した。また、裁断機による断裂のように移動する外部拘束条件を持つ場合について、2次元のき裂進展現象のシミュレーションを行い、現実的な断裂を再現できる可能性があることがわかった。これらの結果を、日本応用数理学会 2022 年度年会において「外部接触条件を加えたフェーズフィールドき裂進展シミュレーション」として発表し、変分不等式問題としてシミュレーションを実行する場合の結果、そしてき裂進展の過程での変形によって破壊面同士が接触してしまうために、き裂形状を正確に把握するためには内部接触面の非貫入条件の設定が必要なことについて述べた。

そこで、圧縮による材料破壊に起因して起こるき裂に注目し、不等式による外部接触条件を含めた拘束条件を加えたエネルギーの変分不等式に加えて、内部接触条件については、Chambolle-Conti-Francfort による unilateral contact condition [1]を用いて、フェーズフィールドを利用した内部接触条件を課す方法を検討した。内部接触条件のモデル化については、Kimura-T-Alfat-Nakano-Tanaka [2] で導出された内部接触面の非貫入条件を課した勾配流モデルを用いた。また、このモデルを用いて、2次元平板におけるき裂進展において、き裂進展に伴う破壊面の接触による貫入を行わないように計算する数値シミュレーションコードを開発し、動作を検証した(図 3)。その結果、き裂/破壊面を挟んだ材料の変位が非現実的な結果とならずに計算できることがわかり、裁断における断裂についてパラメータを変えながら調べた。

2023 年度は、外部接触条件を拘束条件と内部接触面の非貫入条件を課した勾配流モデルを用いて、弾性体の変形において変分問題と拘束条件としてモデル化し、FreeFEM と IPOPT パッケージを用いてその数値シミュレーションコードを開発した。また、裁断機に



よる断裂のように移動する外部拘束条件を持つ場合について、さらに内部接触面の非貫入条件を課した 2 次元のき裂進展現象のシミュレーションを行い、ブレードの間隔がある値より大きい場合にき裂断面形状が大きく変形することがわかった。これらの結果を、国際会議 ICCCM2023 において発表した。また国際会議 ICIAM2023 においてミニシンポジウム "FreeFEM software package for finite element modeling of PDEs" をオーガナイズし、FreeFEM によってこのアルゴリズムをどのように再現したかについて発表し、この際に FreeFEM の開発者の一人である Pierre Jolivet 氏 (CNRS) を招き、効率的な数値計算について議論を行った。

接触面における摩擦のモデル化についても検討を行った。現象をできるだけ取り込もうとする転がりすべり接触による摩擦熱の発生について考慮したモデルも提案されているが、柏原らによって研究が進められている Tresca 摩擦条件下での線形動弾性体方程式を元にモデル化できないか調査を始め、検討している。

更に、モデル化にあたり、き裂進展の方程式に立ち戻り、1 次元平衡解の性質とフェーズフィールドモデルにおける時定数の物理的意味について検討を行った。前者については 1 次元複数き裂解のエネルギー比較から単一き裂解への遷移が予想されることを日本応用数理学会第 20 回研究部会連合発表会において発表した。後者については、時定数と粘弾性との関係性について現象・理論・シミュレーションで解析を行い、木村、田中らとプレプリントを発行した (雑誌掲載予定[3])。

また、これらの研究成果と FreeFEM を用いた手法については Web ページ [4] にて公開する予定である。

[1] A.Chambolle, S.Conti, G.A.Francfort, Approximation of a Brittle Fracture Energy with a Constraint of Non-interpenetration, Arch Rational Mech Anal (228), 867–889, 2018. <https://doi.org/10.1007/s00205-017-1207-z>

[2] M.Kimura, T.Takaishi, S.Alfat, T.Nakano, Y.Tanaka : Irreversible phase field models for crack growth in industrial applications: thermal stress, viscoelasticity, hydrogen embrittlement, SN Appl. Sci. (3), 781, 2021. <https://doi.org/10.1007/s42452-021-04593-6>

[3] M.Kimura, T.Takaishi, M.Tanaka, What is the physical origin of the gradient flow structure of variational fracture models?, accepted by Phil. Trans. A.

[4] <https://sites.google.com/site/ttkswweb/Research>

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Masato Kimura, Takeshi Takaishi, Yoshimi Tanaka	4. 巻 -
2. 論文標題 What is the physical origin of the gradient flow structure of variational fracture models?	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Phylosophical Transaction A	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 高石武史, 木村正人	4. 巻 28
2. 論文標題 境界接触条件と非貫入条件を反映したフェーズフィールドき裂進展シミュレーション	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 第28回計算工学講演会論文集	6. 最初と最後の頁 F-07-01
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 高石 武史
2. 発表標題 外部接触条件を加えたフェーズフィールドき裂進展シミュレーション
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高石武史
2. 発表標題 FreeFEM を用いた変分不等式型き裂進展シミュレーション
3. 学会等名 日本応用数理学会2021年度年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高石 武史, 木村 正人
2. 発表標題 境界接触条件と非貫入条件を反映したフェーズフィールドき裂進展シミュレーション
3. 学会等名 第28回計算工学講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takeshi Takaishi, Masato Kimura
2. 発表標題 Numerical simulation for contact problems in crack growth with phase field approach
3. 学会等名 ICCCM 2023 (International Conference on Computational Contact Mechanics) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takeshi Takaishi
2. 発表標題 Phase field crack growth simulation using IPOPT package
3. 学会等名 ICIAM 2023 Tokyo (10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 高石武史
2. 発表標題 き裂進展フェーズフィールドモデルにおける断面平衡解について
3. 学会等名 日本応用数理学会第20回研究部会連合発表会
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

国際会議ICIAM2023においてミニシンポジウム"FreeFEM software package for finite element modeling of PDEs"をオーガナイズし、この際に FreeFEMの開発者の一人であるPierre Jolivet氏 (CNRS)を招き、変分不等式などの効率的な数値計算について議論を行った。

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
---------	---------