

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年6月7日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2010～2012

課題番号：22360050

研究課題名（和文）

目標指向型モデリングと方程式フリー法に基礎をおく計算固体力学理論の確立

研究課題名（英文） Development of Computational Solid Mechanics Theory
based on Goal-Oriented Modeling and Equation Free Method

研究代表者

中谷 彰宏 (NAKATANI AKIHIRO)

大阪大学・工学研究科・教授

研究者番号：50252606

研究成果の概要（和文）：未来の材料や構造を設計したり、その性質をコンピューターシミュレーションによって事前に予測するためには、前提となるさまざまな仮定や近似をできるだけ用いずに構築された基礎理論やアルゴリズムを用いるのが望ましいと考えられます。本研究課題では、解析する人の想定外の新しい発見を可能にする創造的な方法論の構築についての基礎研究を実施しました。

研究成果の概要（英文）：When we design new materials and structures as well as expect the new characteristics of them by using computer simulation techniques, fundamental theories and algorithms that are established without any assumption or approximation should be preferable to use. In this project, we have conducted the fundamental study of establishment of a creative methodology that can discover the results beyond expectations of analysts.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	2,700,000	810,000	3,510,000
2011年度	2,200,000	660,000	2,860,000
2012年度	2,000,000	600,000	2,600,000
年度			
年度			
総計	6,900,000	2,070,000	8,970,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：変形体の力学、計算力学、シミュレーション、方程式フリー法、連続体力学、分子動力学、目標指向型モデリング、格子欠陥

1. 研究開始当初の背景

安全安心社会の技術開発に果たす材料力学研究の役割が一層クローズアップされてきている。特に、機能面から活発に研究が推進されているナノ材料やバイオ材料をはじめとする新材料を多様な極限環境中で実用に耐える人工物として利用するには、これま

で以上に構造健全性を保障する方法論の確立が望まれる。このような問題では、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。マルチスケールモデリング手法における粗視化モデルの構築は、一種の情報圧縮

の過程であり、単なる近似手法の導入という意味にとどまらず、現象の本質を単純化・明確化・体系化するプロセスでもある。

このようなモデリングに対して、目標指向適応局所解(Goals) アルゴリズムでは、解析者が獲得したい情報(関心量)に含まれる誤差を最小にするという指針のもとに、代替問題(surrogate problem)を用いた近似法を用いてアダプティブなマルチスケールモデリングを半自動的にこなす指針を与える理論体系が与えられ、問題や解析の目的に応じて通常はあらかじめ解析者が主観的に設定しているモデリングをもアダプティブに生成できる可能性をもたらす。

一方、解析者が関心量をミクロな現象からマクロな支配方程式を発見する道筋や適切な粗視化モデルの選定を可能にする方法論として、方程式フリー(equation-free)モデリングがある。本手法はミクロな素過程によって時間発展が記述される系のマクロ挙動に対して理論的なアプローチが難しい場合のマルチスケール手法の一つとして、今後の発展が期待されている。

Goals アルゴリズムと、方程式フリーモデリングに基礎を置くマルチスケール理論に関する研究はまだ始まったばかりであり早急な実施が望まれる。

2. 研究の目的

未来材料の構造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、基礎となる理論やアルゴリズムが研究者の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解析者の先験的な知識を必要としない方法論の構築が望まれる。その一方で、実用的な解析法たるには計算結果の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。このような広い要求を実現するために、本研究課題では、方程式フリー法(equation-free method; EFM)に基づく発見的な方法論に目標指向適応局所解(goal oriented adaptive local solutions; Goals) によるモデリング誤差評価の考え方を適用することにより、目標指向型の精度保証を行いつつシミュレーションの持つ新発見性を有する学術研究の方法論としての計算固体力学理論を構築することを目的としている。

3. 研究の方法

ミクロ問題として、原子集合体モデル、マクロ問題として、格子欠陥集合体モデル・連続体モデルを考えて、これらの連成に基礎をおくマルチスケールモデルについて検討す

る。そのための基礎として、以下の問題の設定・定式化・解析を行う。

- (1)高次格子欠陥を用いた非弾性変形解析理論に関する研究
- (2)古典弾性理論とマイクロポーラー弾性理論によるはりのたわみ問題の解析と Goals アルゴリズムによる誤差評価に関する研究
- (3)方程式フリー法による変形体のモデリング(図1)
- (4)結合界面の微視構造の階層性と離散性に注目した破壊力学解析

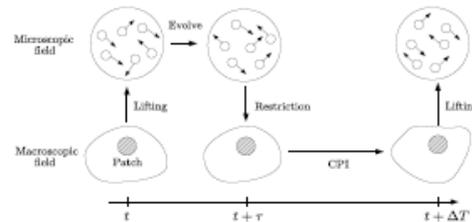


図1 方程式フリー法概念図

4. 研究成果

(1)高次格子欠陥を用いた非弾性変形解析理論に関する研究を実施した。具体的には転位・回位モデルを用いた非弾性変形のモデリングを行ない、変形の素過程となる微視的現象を駆動する一般化力をエネルギー論に基づいて定式化した。また、具体的な問題として、粒界と転位の相互作用、回位モデルを用いたキンク褶曲の表現が可能であることを明らかにした(図2)。

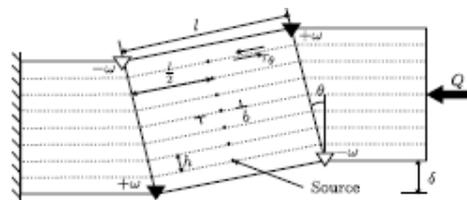


図2 キンク褶曲の回位4重極による表現

(2)内部構造を有するはりの曲げ変形に対して直接解析と古典弾性論解析、および、マイクロポーラー理論による解析結果を比較し(図3)、端部の変位とひずみエネルギーを関心量とした場合の目標指向型モデリングの有効性を示した。

(3)一次元格子動力学に関して、方程式フリー法を用いて運動量輸送と、エネルギー輸送の二つの典型的な問題の定式化を行った。原問題となる分子動力学解析の結果を参照系として、EFMによる粗視化モデルの妥当性を検討した。さらに、二次元問題へ理論を拡張し、せん断変形時の弾性波の伝ば解析が可能であることを明らかにするとともに、粘性効果の導入により静力学解析が可能になることを明らかにした(図4)。

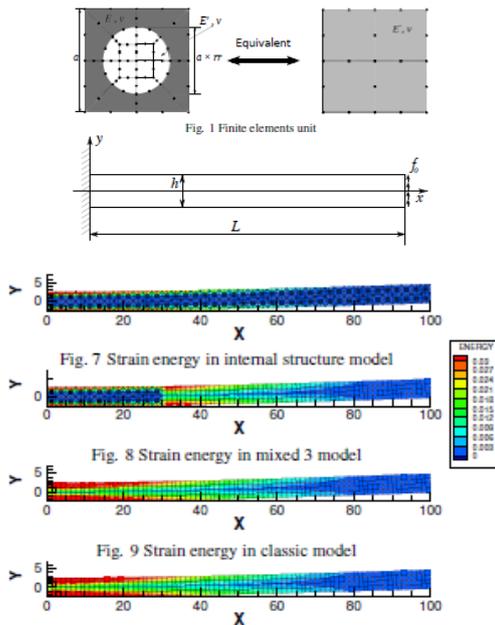
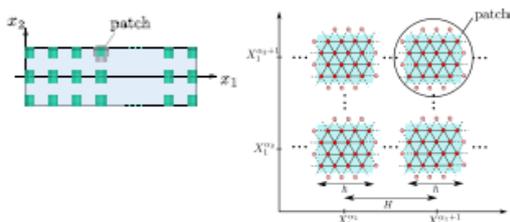
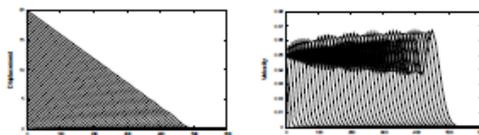


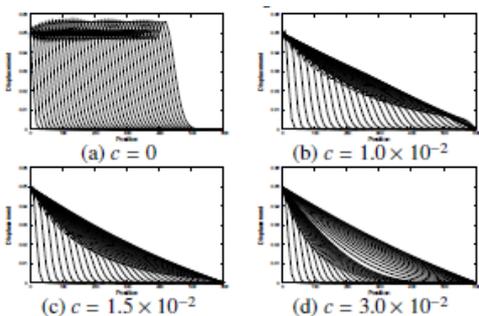
図3 内部構造を有するはりの問題と、マイクロポーラー弾性理論と古典弾性理論、内部構造を陽に考慮したモデルにより得られたひずみエネルギー分布の比較



(a) ミクロマクロの連成問題



(b)変位分布と速度分布の時間発展



(c)減衰を考慮したモデルによる静力学解析

図4 方程式フリーモデリングによる単軸引張変形解析

(4)結合界面の微視構造の階層性と離散性を

陽に考慮した解析モデルを作成し、微視構造の破断と弾性エネルギーの解放によりエネルギー解放率を評価し、見かけの破壊じん性が微視構造によってどのように変化するかを系統的に調べた (図5)。微視構造の離散性については量子化破壊力学により取扱いができることを示すとともに、Cohesive 則を導入し、階層構造を有する結合体モデルでは破壊プロセス領域の寸法が大きくなることによって破壊じん性が向上することを明らかにした。

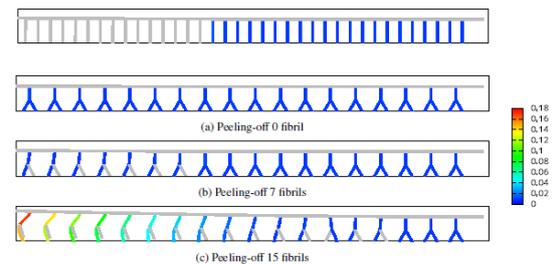


図5 結合界面の離散性と構造の階層性による特異なき裂進展パターンと破壊じん性に及ぼす影響の検討

以上のような研究成果から新しい理論の基礎を構築することができた。今後、ミクロ原子スケールから、メゾ格子欠陥スケール、マクロスケールまでを結びつけるマルチスケールモデルへの応用が期待される。引き続き、基礎理論の定式化を進めるとともに具体的な問題に対する適用可能性を示すことにより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6件)

① Y. Doi and A. Nakatani, Modulational Instability of Zone Boundary Mode and Band Edge Modes in Two-Dimensional Nonlinear Lattices, Journal of Physical Society of Japan, 査読有, Vol.81 (2012), 124402 (9pages) (DOI: 10.1143/JPSJ.81.124402)

② Y. Doi and A. Nakatani, Numerical study on unstable perturbation of intrinsic localized modes in graphene, Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, 査読有, Vol.6 (2012), 70-81 (DOI: 10.1299/jmmp.6.71)

③ Y. Doi and A. Nakatani, Intrinsic localized mode as in-plane vibration in two-dimensional Fermi-Pasta-Ulam lattices, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, 査読有, Vol.3 (2012), 67-76 (DOI: 10.1587/nolta.3.67)

- ④ A. Nakatani, Analysis of interaction between dislocation and grain boundary by using a lattice defect model, *Procedia Engineering*, 査読無、Vol.10 (2011), 1047-1052 (DOI: 10.1016/j.proeng.2011.04.173)
- ⑤ Y. Doi and A. Nakatani, Structure and stability of nonlinear vibration mode in graphene sheet, *Procedia Engineering*, 査読無、Vol.10 (2011), 3393-3398 (DOI: 10.1016/j.proeng.2011.04.559)
- ⑥ Y. Kobayashi, Y. Doi, and A. Nakatani, Strain dependence of formation mechanism of growth layer in molecular beam epitaxy of gallium nitride *Japanese Journal of Applied Physics*, 査読有、Vol.49 (2010), 115601(1-9)

〔学会発表〕(計 30 件)

- ① 中谷彰宏・秋田光広、マイクロ・メゾシミュレーションによる積層構造体のキンク変形機構の解明(基調講演)、日本金属学会春期大会、2013.3.27、東京都
- ② 王孝汝・土井祐介・中谷彰宏、微視的階層構造を有する界面の破壊力学に関する研究、日本機械学会関西学生会卒業研究発表講演会、2013.3.15、大阪市
- ③ 宮外佳範・土井祐介・中谷彰宏、方程式フリー法を用いた柱の不安定変形に関する解析、日本機械学会関西学生会卒業研究発表講演会、2013.3.15、大阪市
- ④ 石丸知英・土井祐介・中谷彰宏、内部構造を有する弾性体のマイクロボラ理論に基づく目標指向型モデリング、日本機械学会関西学生会卒業研究発表講演会、2013.3.15、大阪市
- ⑤ A. Nakatani, Analysis of kink-fold deformation in single slip model based on higher-order lattice defect theory, 4th International Conference on Computational Method (ICCM2012), 2012.11.25 ~ 2012.11.28, Gold Coast, Australia
- ⑥ A. Nakatani and M. Akita, Analysis of kink deformation by using discrete defect model ISAEM-2012/AMDI-3 (招待講演), 2012.11.5-11.8, Toyohashi
- ⑦ 中谷彰宏・秋田光広、回位場によるキンク変形のモデリング、軽金属学会第123回秋期大会、2012.11.10-11、習志野市
- ⑧ 中谷彰宏、離散格子欠陥モデルによる力学解析の基礎、日本材料学会塑性力学分科会(招待講演)、2012.8.30、横浜市
- ⑨ A. Nakatani, Analysis of kink-fold deformation based on disclination theory, International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2012), 2012.8.19-24, Beijing, China

- ⑩ 定秀悠介・土井祐介・中谷彰宏、階層構造を有する微視的弾性繊維モデルによる接着特性の解析、日本機械学会関西支部定時総会講演会、2012.3.16、吹田市
- ⑪ 神谷和典・土井祐介・中谷彰宏、離散結合体の界面破壊に関するシミュレーション、日本機械学会関西学生会卒業研究発表講演会、2012.3.15、吹田市
- ⑫ 中谷彰宏、ディスクリネーションモデルに基礎をおくキンク褶曲の変形論と力学解析、日本機械学会第24回計算力学講演会(CMD2011)、2011.10.8、岡山市
- ⑬ A. Nakatani, Plasticity of crystal rotation based on a disclination theory, 2011 World Congress on Advances in Structural Engineering and Mechanics (ASEM'11+), 2011.9.21, Seoul, South Korea
- ⑭ T. Ogawa, H. Liu and A. Nakatani, Application of multi-scale modeling to deformation of metal under uniaxial torsion, International Symposium on Disaster Simulation & Structural Safety in the Next Generation 2011 (DS'11), 2011.9.18, Suita, Osaka, Japan
- ⑮ 中谷彰宏、多結晶体モデルの離散転位塑性シミュレーション、日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス、2011.7.17、北九州市
- ⑯ 秋田光広・土井祐介・中谷彰宏、積層構造体のキンク褶曲の力学解析、日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス、2011.7.16、北九州市
- ⑰ 中西諒・土井祐介・中谷彰宏、音響レンズにより形成される弾性波の伝ば挙動のシミュレーション、日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス、2011.7.16、北九州市
- ⑱ 中谷彰宏、自由度の束縛の視点からみた素過程と粗視化、第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(基調講演)、2011.5.24、吹田市

〔図書〕(計 1 件)

- ① 中谷彰宏(日本機械学会編、分担)、丸善、機械実用便覧 改訂第7版、(2011)、総 1109 ページ、pp.13-25

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) 連携研究者

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