

ズームイン方式による材料破壊問題の マルチスケール解析システムの開発

(その2: 数値計算例)

Development of a System of Multiscale Material Failure Analysis by Zoom-in Approach
(Part 2: Numerical examples)

都井 裕*・李 廷権*・李 帝明*
渡辺 隆之**・酒井 新吉**・顧 文偉**・源 聡**

Yutaka TOI, Jeoung-Gwen LEE, Jae-Myung LEE,
Takayuki WATANABE, Shinkichi SAKAI, Wen-Wei GU, Satoshi MINAMOTO

1. はじめに

本研究では、連続体損傷力学に基づく有限要素解析法によるマクロスケール解析、計算不連続体力学モデルを用いたメソ力学解析法によるメソスケール解析、経験的原子間ポテンシャルを用いた分子動力学法によるミクロスケール解析をひずみ・変位によるインターフェースを介して有機的に結合した、ズームイン方式のマルチスケール材料破壊解析システムを開発した。前報(その1)では、システムと解析法の概要を述べた。本報(その2)では、開発システムの動作確認を主目的に実施した、脆性固体および延性固体に対する簡単な数値計算例を紹介する。

2. 脆性固体の解析

2.1 マクロスケール解析

マクロスケール解析のモデルは、図1に示すノッチ付き試験片¹⁾であり、総節点数は10875、総要素数は8324である。YZ面に一様せん断開口荷重を受ける。対称性から1/4モデルを用いている。セラミックスなどに代表される脆性固体を想定し、以下のような材料定数を仮定した¹⁾。ヤング率： $E_u = 372$ Gpa, ポアソン比： $\nu_u = 0.23$, 損傷発生限界ひずみ： $\epsilon_{pd} = 2.46 \times 10^{-5}$, 損傷パラメータ： $S = 0.2$ MPa, $s = 0.85$ 。図2に変形図および相当塑性ひずみの分布を示す。変形量は10倍に拡大して表示している。図3にノッチ部の損傷分布を示す。損傷はノッチ底部近傍に集中化している。

2.2 メソスケール解析

マクロスケール解析の結果を受けて、損傷が最も進展している部位であるノッチ底部の外表面の着目点(マクロス

ケール解析における要素番号5370の積分点番号5)について、メソスケール解析を行った。解析対象とする着目点の近傍モデルとして、図4(a)に示すような3375要素より成る立方体状(辺長1)のメソスケール解析モデルを用いた。隣接結晶粒は図4(b)に示すように6種類のばねにより結合されている。マクロスケール解析から得られたひずみ履歴をマクロ・メソインターフェースにより変形量に変換し、メソスケール解析モデルの境界条件(強制変位)として付与し解析を行った。

メソスケール解析モデルにおけるばね定数などの入力データは、試計算により決定した。すなわち、マクロヤング率およびポアソン比がマクロスケールモデルの物性値と一致するように、またマイクロクラックが発生するマイクロクラッキング限界相対変位 δ_c は、マクロひずみが損傷限界ひずみに達する時点における結晶粒間の最大相対変位の値となるように、以下のように決定した。垂直ばね定数： $k_n = 1.0$, せん断ばね定数： $k_s = 0.133$, 入力ヤング率： $E_{meso} = 655.6$ GPa, マイクロクラッキング限界相対変位： $\delta_c = 0.45 \times 10^{-5}$ 。図5にポロノイ多角形の中心点である母点のうち、母点3(0.7, 0.2, 0.5)を通るx軸と垂直なスライス面のマイクロクラック分布を示す。多数のマイクロクラックがランダムに分布しており、マクロスケール解析の結果を裏付けるように、局部的に損傷がかなり進んでいることがわかる。

2.3 ミクロスケール解析

メソスケール解析から得られた着目点のひずみデータを規定変位として立方体状の格子モデルの六面に与え、ミクロスケール解析を行った。用いたひずみ入力は $(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z, \gamma_{yz}, \gamma_{zx}, \gamma_{xy}) = (-0.55 \times 10^{-3}, -0.13 \times 10^{-4}, 0.14 \times 10^{-4}, 0.14 \times 10^{-3}, 0.14 \times 10^{-2}, -0.17 \times 10^{-3})$ である。解析対象格子は一辺が1~10 nm程度(原子数数百~一万個程度)

*東京大学生産技術研究所 人間・社会部門
**CRC総合研究所

Macroscale analysis

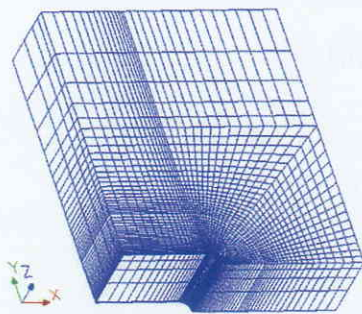


Fig. 1 Finite element model for a notched specimen

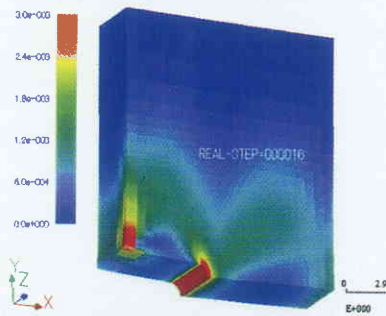


Fig. 2 Deformation and equivalent strain

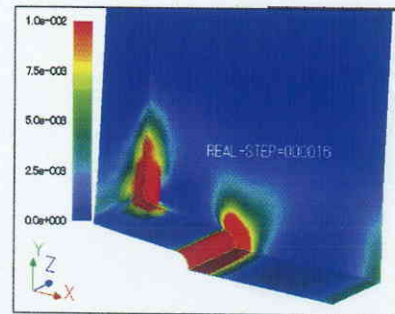
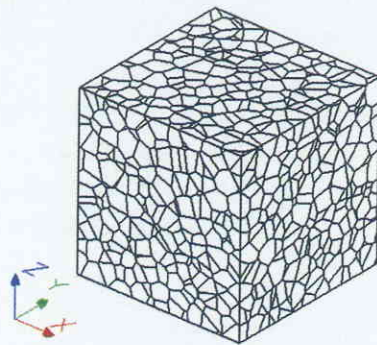
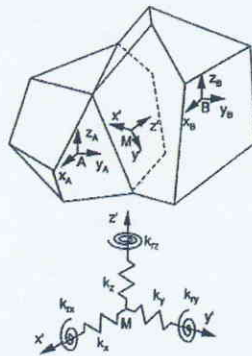


Fig. 3 Damage distribution near the notch

Mesoscale analysis



(a) 3-d polycrystalline model



(b) 3-d mesomechanics model

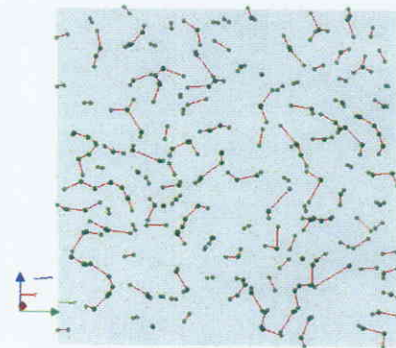


Fig. 5 Microcrack distribution on the cross-section normal to X-axis

Fig. 4 Mesoscale analysis model for brittle solids

Microscale analysis



Fig. 6 Molecular dynamics model

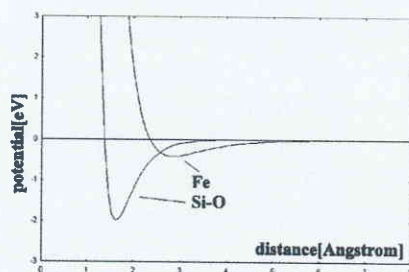
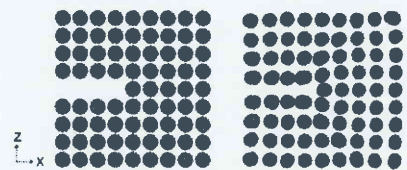
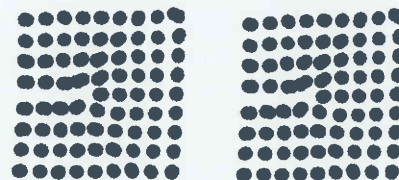


Fig. 7 Potential curves



(a) Initial state

(b) Equilibrium state



(c) Fe-potential

(d) Si-O potential

Fig. 8 Deformation of fcc with initial defects

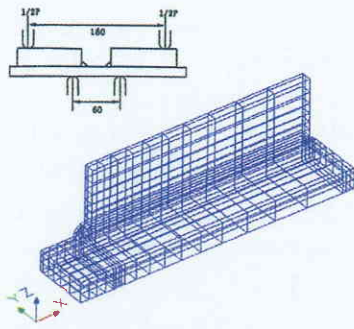


Fig. 9 Finite element model for a stiffened plate under 4-point bending

Macroscale analysis

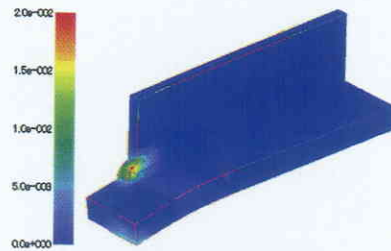


Fig. 10 Distribution of equivalent plastic strain

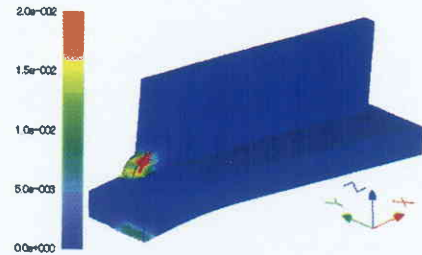
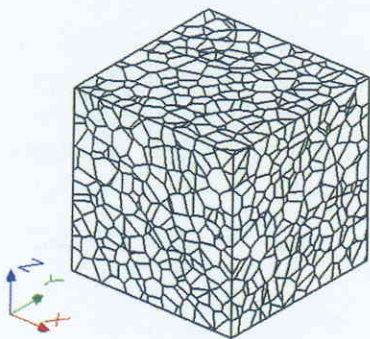
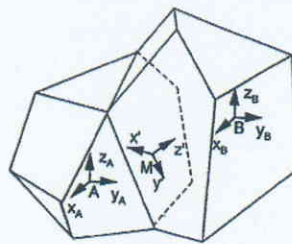


Fig. 11 Distribution of damage

Mesoscale analysis



(a) 3-d polycrystalline model



(b) 3-d mesomechanics model

Fig. 12 Mesoscale analysis model for ductile solids

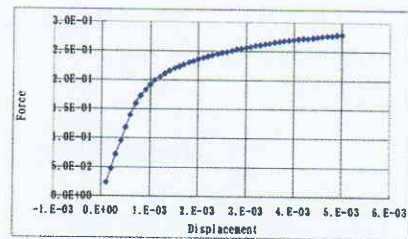


Fig. 13 Force-displacement curve under uniaxial tension

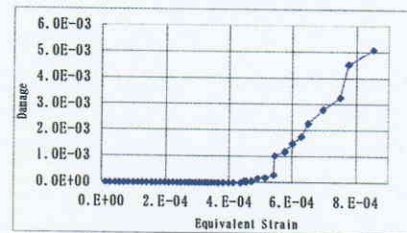


Fig. 14 Damage evolution

Microscale analysis

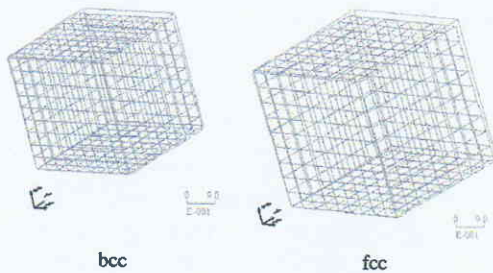


Fig. 15 Deformation (Fe)

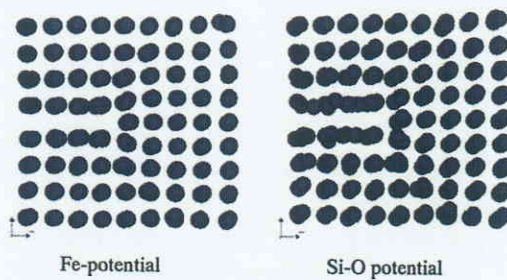


Fig. 16 Deformation of fcc with initial defects

であり、単純格子 (sc)、体心立方格子 (bcc)、面心立方格子 (fcc) および欠陥を含む面心立方格子の4種類を選択できる。結晶格子は、最近接原子がポテンシャルの平衡点に位置するように配置する。格子模式図を図6に示す。

脆性固体を想定し、原子間ポテンシャルとして Si-O 間の Morse 型ポテンシャルを用いて、欠陥を含む面心格子 (fcc) に対する計算を行った。用いるポテンシャルによる解の相違を見るため、Fe に対する Morse 型ポテンシャル (実験値と照合された値)²⁾ を想定した計算も同時に実施した。両者のポテンシャル曲線を図7に示す。なお、カットオフ距離は単位格子長さの2.5倍、温度は500°Kと仮定した。

図8(a)に結晶のz軸方向中央部、x軸方向左半分に欠陥を含むfcc格子を示す。原子数は347個である。この格子に対して原子を自由状態として平衡計算を行うと、図8(b)のように転位と似た様相を示す。図8(c)と図8(d)は、規定変位を与えたときの格子変形に関する計算結果である。原子間ポテンシャルを変えても、原子の変位に大きな相違は見られない。

3. 延性固体の解析

3.1 マクロスケール解析

延性固体に対する数値例として、スティフナ付き平板の4点曲げ解析³⁾を行った。問題の対称性により図9に示すような1/4モデルを用いた。仮定した材料定数は以下のとおりである³⁾。ヤング率： $E_u=178.4$ GPa, ポアソン比： $\nu_u=0.3$, 降伏応力： $\sigma_y=223.4$ MPa, 粘塑性パラメータ： $K=181$ MPa, $N=30$, $k=90$ Mpa, 等方硬化パラメータ： $Q_1=650$ MPa, $Q_2=140$ MPa, $b=37$, 損傷パラメータ： $S=0.2$ MPa, $s=0.85$, $\epsilon_{pd}=10^{-10}$ 。図10に相当塑性ひずみの分布を示す。図11に損傷量の分布を示す。相当塑性ひずみおよび損傷量が溶接ビード部に集中していることがわかる。

3.2 メソスケール解析

マクロスケール解析における溶接ビード部の着目点を対象としたメソスケール解析には図12(a)に示す3375要素の立方体状多結晶モデル(辺長1)を用いた。図12(b)のメソ力学モデルにおいて、以下の材料定数を用いる。垂直ばね定数： $k_n=1.0$, せん断ばね定数： $k_s=0.0095$, 入力ヤング率： $E_{meso}=442.5$ GPa, 降伏後ヤング率： $E_{plastic}=0.01$, E_{meso} 単軸引張りによる荷重・変位関係を図13に示す。弾塑性的挙動を示していることがわかる。マクロスケール解析のひずみ履歴を変位に変換し強制変位境界条件として入力した。図14ではメソスケール解析による損傷の進展を示す。応力の増加に伴い、メソスケールモデルにおける損傷量が最初は緩やかに続いて急激に進展していく様子が見られる。

3.3 ミクロスケール解析

メソスケール解析から得られたひずみデータを規定変位として立方体状の格子モデルの六面に与え、ミクロスケール解析を行った。用いたひずみ入力を以下に示す。 $(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z, \gamma_{yz}, \gamma_{zx}, \gamma_{xy}) = (0.33 \times 10^{-3}, -0.69 \times 10^{-3}, -0.13 \times 10^{-3}, -0.49 \times 10^{-3}, -0.10 \times 10^{-3}, 0.46 \times 10^{-4})$ 。完全格子に対する計算と、欠陥を含む面心格子 (fcc) に対する計算を行った。完全格子に対しては、Fe 原子の Morse 型ポテンシャル (実験値と照合された値) を用いた²⁾。欠陥を含む面心格子 (fcc) については、用いるポテンシャルによる解の相違を見るため、Fe と Si-O 間を想定した計算を行った。なおカットオフ半径は単位格子長さの2.5倍、温度は500°Kとした。

図15に結晶の変形の様子を示す。bcc と fcc の完全格子を仮定した結果であり、Fe のポテンシャルを用いている。原子数はbccでは1729個、fccでは3430個である。ひずみ量が小さいために変位を強調して表示している。立方体の六面にメソスケール解析から得られる規定変位を与えているので、bcc と fcc の変形後の様子は同様となる。

図16に欠陥を含む格子を変形させた結果を示す。Fe の場合に比べて Si-O 間のポテンシャルを用いた方が欠陥付近において配列の乱れが大きい。これは Fe の方が大きな変形を起こしても格子の乱れが小さい、すなわち延性的であることを意味する。このように側面に規定変位を与えても内部に欠陥などを有する場合、原子の動きは用いるポテンシャルに大きく影響されることがわかる。

4. ま と め

(その1)で概要を説明した、ズームイン方式のマルチスケール材料破壊解析システムを脆性固体および延性固体の破壊解析に適用した。

本マルチスケール解析システムに関わる今後の課題として、各スケールにおける解析モデルの機能強化、スケール間の連携強化などを上げることができる。これらの改善により、本マルチスケール解析システムの有用性が一層向上するものと期待される。

(2001年6月19日受理)

参 考 文 献

- 1) 都井 裕, 諸 正信: マイクロクラッキング脆性固体に対する改良された計算損傷力学モデル, 日本機械学会論文集 (A編), 59巻, 563号, (1993), pp.1642-1649.
- 2) 北川 浩, 北村隆行, 澁谷陽二, 中谷彰宏: 初心者のための分子動力学, 養賢堂, (1997).
- 3) 都井 裕, 李 帝明: 溶融亜鉛めっき時の構造部材の三次元損傷解析, 日本機械学会論文集 (A編), 66巻, 643号, (2000), pp.618-625.