

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1: システムと理論の概要)

Development of a System of Multiscale Material Failure Analysis by Zoom-in Approach
(Part 1: Outline of the system and theory)

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

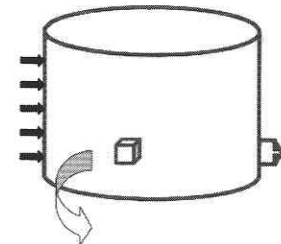
固体の損傷・破壊問題に対する「マルチスケール解析」の重要性は広く認識されている。原理的にはミクロスケールのモデルさえ確立すれば、メソスケールの材料、マクロスケールの構造物にもそれを適用すればよいことになるが、計算が非現実的に大規模となるため実行は困難である。また、ミクロスケールの計算結果を集積してメソスケールモデルを構成し、メソスケールの計算結果を集積してマクロスケールモデルを構成するような積分型のアプローチは部分的に用いられているが¹⁾、これを系統的に実施するにはやはり膨大な計算量が必要とされる。マルチスケール解析の方法論に関する本格的な議論はようやく始まろうとしているところであるが²⁾、現時点で要求されるのは「近似的ではあっても計算実行可能な」マルチスケール解析の方法論であろう。

この条件を満足する方法論としてここでは、「ズームイン方式によるマルチスケール解析法」を取り上げる。この方法では図1に示すように、まず対象固体のマクロスケール解析を行い、その一部分を取り出してメソスケール解析を行い、さらにその一部分を取り出してミクロスケール解析を行う。各スケールの計算を適正規模に抑えることにより、1 m (10^0 m) ~ 1 nm (10^{-9} m) スケールに渡る計算が現実的に可能となる。本研究では、ひずみと変位を媒介としたスケール間のインターフェースを作成し、この方式によるシステム化されたマルチスケール材料破壊解析コードを初めて開発した。なお他のマルチスケール解析法として、「サブドメイン方式によるマルチスケール解析法」が知られている。この方法では、解析領域を部分領域(サブドメ

イン)に分割し、各部分領域をマクロ・ミクロスケールのいずれかでモデル化する。この方法はハイブリッドモデル²⁾とも呼ばれており近年多くの研究が行われているが、分子動力学法によるミクロ解析の拡張版と位置付けられ、適用範囲は比較的小規模の領域に限定される。

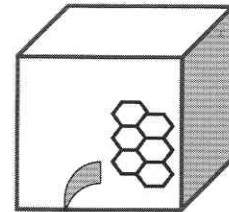
Macroscale (~mm)

Bulk structure
Continuum Damage
Mechanics



Mesoscale (~μm)

Constitutive element
Mesomechanics



Microscale (~nm)

Single grain
Molecular Dynamics

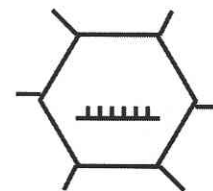


Fig. 1 Concept of multiscale material failure analysis

*東京大学生産技術研究所 人間・社会部門

**CRC 総合研究所

2. システム概要

本研究で開発した「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」の全体構成を図2に示す。本システムは、次の6つのサブプログラムから構成される。すなわち、連続体損傷力学に基づく有限要素法により弾塑性損傷解析を行うマクロスケール解析部、計算不連続体力学モデルを用いて延性・脆性多結晶体解析を行うメソスケール解析部、分子動力学法により原子・分子レベルのシミュレーションを行うミクロスケール解析部、マクロスケール解析結果をメソスケール解析部に受け渡すマクロ・メソスケール結合部、メソスケール解析結果をミクロスケール解析部に受け渡すメソ・ミクロスケール結合部、ソフトウェア全体を制御するコントロールプログラムである。本システムにおいては、ユーザ操作によりコントロールプログラムを介して、各解析部あるいは各サブプログラムをそれぞれ呼び出すことが可能であり、外部ポストプロセッサにより各解析部の解析結果を図化表示する。

3. 理論概要

3.1 マクロスケール解析

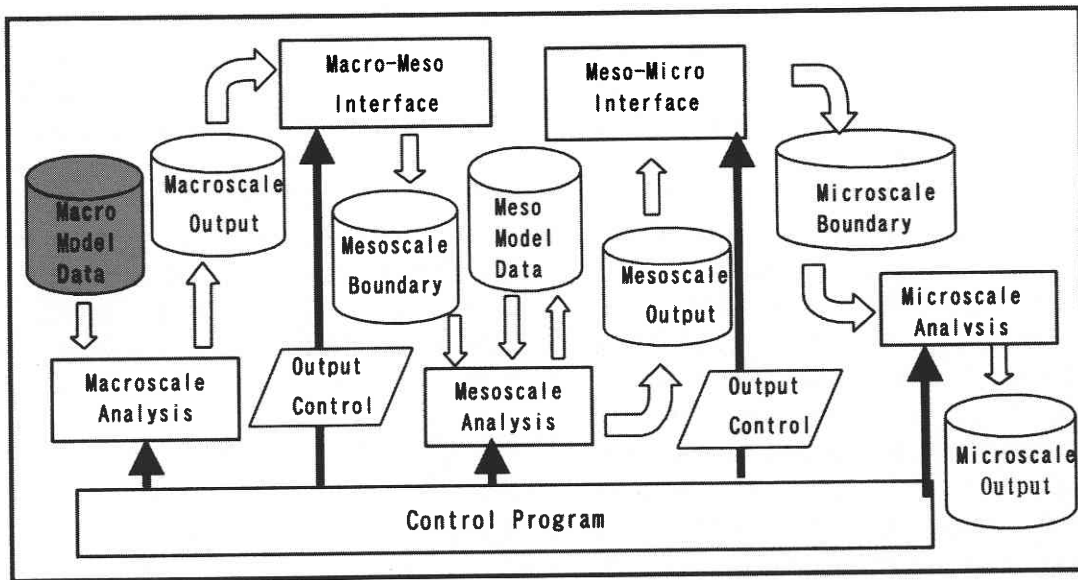
1958年、Kachanov³⁾によってクリープ固体に対する連

続性 (continuity) の概念が提案されたことに端を発する連続体損傷力学 (以下では損傷力学と略称) は、70年代および80年代の理論的發展を経て、破壊や損傷に関するさまざまな工学問題に適用されるようになった⁴⁻⁶⁾。損傷力学を適用することにより、塑性、クリープなどの材料非線形性のみならず、初期状態からマクロき裂の発生に至るあらゆる損傷状態を連続体力学の枠組における構成方程式により記述することができるならば、非線形有限要素法による構造解析と一体化した破壊解析が可能となる。このようなアプローチは局所的破壊解析法 (local approach to fracture) として知られており⁶⁾、本システムのマクロスケール解析部においては、これを用いている。

当初は、脆性、延性、クリープ、疲労などのそれぞれ異なるマクロ物理現象に対し、独立に損傷力学の適用が研究されたが、Lemaitre はこれらに一貫して適用可能な統合的な定式化による損傷則を与えている⁴⁾。本解析システムで用いた粘塑性構成式と損傷発展則は、次式により表される。

$$|\dot{\epsilon}^{vp}| = \frac{3}{2} \dot{p} \frac{\{\sigma^d\}}{\sigma_{eq}} \dots\dots\dots (1)$$

$$\dot{D} = \left(-\frac{Y}{S}\right)^S \dot{p} \dots\dots\dots (2)$$



Notes :
 Execution Control and Data Flow (arrow with bar)
 Data Flow (arrow)
 Input Data (cylinder with grid)
 Generated Data (cylinder)
 Analysis (rectangle)

Fig. 2 System for multiscale material failure analysis by zoom-in approach

研究速報

ここに、 $\{\dot{\epsilon}^{vp}\}$ は粘塑性ひずみ速度、 p は累積粘塑性ひずみ、 $\{\sigma^d\}$ は偏差応力、 σ_{eq} は Mises の相当応力、 D は損傷変数、 Y は弾性エネルギー解放率、 S と s は材料パラメータである。これらの関係式を増分形仮想仕事の原理において用いることにより、次式のような増分形要素剛性方程式が導かれる。

$$[k_0] \{\Delta u\} = \{\Delta f\} + \{\Delta f_{vp}\} + \{\Delta f_D\} \dots \dots \dots (3)$$

ここに、 $[k_0]$ は微小変形下の増分剛性マトリックス、 $\{\Delta u\}$ は節点変位増分ベクトル、 $\{\Delta f\}$ は外力増分ベクトル、 $\{\Delta f_{vp}\}$ は粘塑性ひずみ増分ベクトルによる見かけの外力増分ベクトル、 $\{\Delta f_D\}$ は損傷増分による見かけの外力増分ベクトルである。式 (3) を全要素について足し込んだ全体系の増分形剛性方程式を繰返し解くことにより、損傷力学に基づく有限要素解析が可能となる。

3.2 メソスケール解析

著者の一人は約 10 年前より、セラミックス、氷、岩石などに代表されるマイクロクラッキング脆性固体を対象とし、計算不連続体力学モデル⁷⁾ の概念に基づいて、メソスケールの直接的シミュレーション手法である 3 次元メソスケール解析手法の開発を進めてきた⁸⁻¹⁰⁾。この解析手法によれば、個々のマイクロクラックの発生、停留/伝播、閉鎖、クラック表面摩擦などを逐一考慮しながら、マイクロクラッキング脆性固体の破壊挙動や構成式挙動を、結晶粒スケールで 3 次元的にシミュレートすることが可能である。本システムにおけるメソスケール解析部においては、この解析法を用いている。

ランダム形状を有する多数の結晶粒から成る 3 次元多結晶モデルを、ボロノイ分割を利用することにより自動的に生成する。ボロノイ分割メッシュは、実際多結晶と良好に対応する幾何学的特性を有することが確認されている。生成した 3 次元多結晶モデルにおいて、各結晶粒は 1 剛体多面体要素に、各結晶粒界は隣接剛体要素を結合するばね系に置換する。この 3 次元メソ力学モデルは、マイクロクラッキング脆性固体に対する結晶粒スケールのモデル化としては最も単純なものと考えられるが、その有用性は多くの数値例により実証されている⁸⁻¹⁰⁾。本研究では、要素間に弾塑性ばね系を仮定することにより、この手法を延性固体解析にも拡張適用している。

定式化の概略は以下のとおりである。すなわち、6 種類のばね $k_x, k_y, k_z, k_{rx}, k_{ry}, k_{rz}$ により結合された 2 つの隣接多面体要素を考える。要素 A 内の任意点 (x_A, y_A, z_A) における変位 (u, v, w) を、微小回転を仮定した剛体変位関数により表現する。要素境界面上の中心点 M における相対変位

ベクトル増分 $\{\Delta d\}$ と節点 (要素中心点) 変位ベクトル増分 $\{\Delta u_c\}$ の関係、相対変位成分に抵抗するばねに生ずる内力ベクトル増分 $\{\Delta s\}$ と相対変位ベクトル増分 $\{\Delta d\}$ の関係を、次式のように定式化する。

$$\{\Delta d\} = [B] \{\Delta u_c\} \dots \dots \dots (4)$$

$$\{\Delta s\} = [D] \{\Delta d\} \dots \dots \dots (5)$$

これらを増分形仮想仕事の原理に代入することにより、次式のような増分形剛性方程式を得る。

$$[k] \{\Delta u\} = \{\Delta f\} + \{f_i\} \dots \dots \dots (6)$$

ここで、 $[k]$ は増分剛性マトリックス、 $\{\Delta f\}$ は荷重増分ベクトル、 $\{f_i\}$ はマイクロクラックの発生による解放力ベクトルである。全結晶粒界について式 (6) の総和を取ることにより、全体系の増分形剛性方程式が得られ、これを繰返し解くことにより、マイクロクラッキング脆性固体および延性固体の 3 次元メソスケール解析が可能となる。

3.3 ミクロスケール解析

分子動力学は、周囲の原子 (または分子) によるポテンシャル場において運動する多数の原子に対する運動方程式を同時に数値的に解き、各原子の位置座標と速度の値から成る調和のとれた原子配置を形成させ、これにより系の様々な平衡状態および動的性質を計算する方法である¹¹⁻¹³⁾。本システムにおけるミクロスケール解析部においては、古典的分子動力学法を用いて解析を行っている。すなわち、ニュートンの運動方程式に従う原子の集合体を考え、経験的なポテンシャル関数より粒子に働く力を求め、時間発展的に粒子の挙動を追跡している。想定する原子団は 1 ~ 10 nm 程度の立方体で、結晶構造は単純正方晶、体心立方晶 (bcc) あるいは面心立方晶 (fcc) を想定している。具体的には N 個の原子が次式のように運動している系を考える。

$$m_\alpha \frac{d^2 \{r_\alpha\}}{dt^2} = \{F_\alpha\} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N) \dots \dots \dots (7)$$

ここに、

$$\{F_\alpha\} = \sum_{\beta=1, \beta \neq \alpha}^N \frac{\partial \phi^{\alpha\beta}}{\partial r^{\alpha\beta}} \frac{\{r^{\alpha\beta}\}}{r^{\alpha\beta}} \dots \dots \dots (8)$$

ここに、 m_α は原子 α の質量、 $\{r_\alpha\}$ は位置ベクトル、 $\{F_\alpha\}$ は原子 α が他の原子から受ける相互作用力および外部から受ける力を表すベクトルである。また、 $\phi^{\alpha\beta}$ は原子 α と原子 β に作用する原子間ポテンシャル、 $r^{\alpha\beta}$ は原子 α と原

子 β 間の距離, $\{r^{\alpha\beta}\}$ は原子 α から原子 β に向かうベクトル, N は総原子数である.

原子に働く力は, ポテンシャル関数の空間勾配として誘導される. 本解析においては, ポテンシャル関数として Lennard-Jones (12-6) 型, および Morse 型ポテンシャルを用いている. Lennard-Jones 型ポテンシャルは不活性ガスに対して提案された最も簡便な二体ポテンシャル関数であり, 同様に 2 原子分子に対して提案された Morse 型ポテンシャルは次式により与えられる.

$$\phi(r^{\alpha\beta}) = D_M e^{-2A(r^{\alpha\beta}-r_0)} - 2D_M e^{-A(r^{\alpha\beta}-r_0)} \dots \dots \dots (9)$$

ここに D_M , A , r_0 , は材料パラメータである. Morse 型ポテンシャルにおいては, fcc や bcc の金属に関して得られたパラメータを利用することができる. 数値積分法としては, ベルレ法の改良版であり, 比較的安定性の高い速度ベルレ法 (velocity Verlet algorithm) を使用し, 外力は強制変位により与えている.

3.4 マクロ・メソ・ミクロスケールの結合

前述したマクロスケールとメソスケールレベルの解析部, およびメソスケールとミクロスケールレベルの解析部を有機的に結合することにより, マルチスケール解析プログラムが完成する. マクロスケールは有限要素法, メソスケールは計算不連続体モデル, またミクロスケールは分子動力学と異なったモデル化を行っているため, それぞれの計算モデル間で各力学量の連続性を考慮して境界データの受け渡しを行う必要がある. 本システムにおいては, 対象固体 (試験体, 構造物など) のマクロスケール解析結果より損傷発生箇所などの着目点のひずみ 6 成分を, 強制変位の形でメソスケール解析部に引き渡す. 同様にメソスケール解析結果より, 着目点のひずみ 6 成分を強制変位の形でミクロスケール解析部に引き渡している. 各スケールのモデルが十分に合理的であり, また十分な自由度数を確保できれば, このようなアプローチでマクロスケールの解析からメソスケールを経てミクロスケールの解析結果を得ることは正当化される. いわば, 顕微鏡の倍率を徐々に拡大してより狭い領域をより高い倍率で観察する操作に似ている. この方法の成否は, マクロスケール, メソスケール, ミクロスケールのモデルが同一固体に対するモデルとして, 十分な精度で同定され, 整合性を有しているか否かにも依存する. 以下で述べる数値例においては可能な範囲でこのプロセスを実行しているが, 将来的にはこの手順の詳細を確立しマニュアル化することが必要である.

4. ま と め

本研究では, 連続体損傷力学に基づく有限要素法によるマクロスケール解析, メソ力学モデルによるメソスケール解析, 分子動力学法によるミクロスケール解析を, インターフェース部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. (その 1) では, 開発システムと解析法の概要を述べた. 続く (その 2) では計算例を紹介する.

なお, 本研究は, 平成 12 年度の科学技術庁・計算科学技術共同研究推進制度採択課題「微視組織を考慮した固体の損傷・破壊問題のマルチスケール解析に関する研究」(研究代表者: 都井裕) の一部として実施されたものであることを付記し, 関係各位に感謝する.

(2001 年 6 月 19 日受理)

参 考 文 献

- 1) 都井 裕: 有限要素法と計算不連続体力学, 応用数理, 第 3 巻, 第 4 号, (1993), pp. 275-291.
- 2) Campbell, G. H. *et al*: Multi-scale modeling of polycrystal plasticity: a workshop report, Materials Science and Engineering, A 251, (1998), pp. 1-22.
- 3) Kachanov, L. M.: Introduction to Continuum Damage Mechanics, Martinus Nijhoff Publishers, (1986).
- 4) Lemaitre, J.: A Course on Damage Mechanics, Second Edition, Springer, (1996).
- 5) Krajcinovic, J.: Damage Mechanics, Elsevier, (1996).
- 6) Skrzypiek, J. and Ganczarski, A.: Modeling of Material Damage and Failure of Structures (Theory and Applications), Springer, (1999).
- 7) 都井 裕, 鋼構造の離散化極限解析 (コンピュータによる極限解析法シリーズ 3), 培風館, 東京, (1991).
- 8) Toi, Y. and Che, J.-S.: Computational Damage Mechanics Models for Brittle Microcracking Solids Based on Mesoscopic Simulations, Engineering Fracture Mechanics, Vol. 48, No. 4, (1994), pp. 483-498.
- 9) Toi, Y. and Kiyosue, T.: Damage Mechanics Models for Brittle Microcracking Solids Based on Three-Dimensional Mesoscopic Simulations, Engineering Fracture Mechanics, Vol. 50, No. 1, (1994), pp. 11-27.
- 10) 都井 裕: マイクロクラッキング脆性固体の 3 次元メソ解析, 応用数理, 5-4, (1995), pp. 73-83.
- 11) 日本機械学会編: 原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション, コロナ社, (1996).
- 12) 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).
- 13) 神山新一・佐藤 明: 分子動力学シミュレーション, 朝倉書店, (2000).