

連続体と原子モデル間でのマクロ-ミクロ連立解析手法の構築

宇都宮大学大学院 学生員 菅家 茂理 宇都宮大学 正員 斉木 功
宇都宮大学大学院 正員 中島 章典

1. はじめに

一般的に金属結晶の塑性は転位論により説明されており、分子動力学によって固体の塑性変形を原子レベルからシミュレートすることが可能である。しかし、分子動力学では極めて小さい領域内の原子の挙動の解析を行っている。例えば、10億個の原子を用いたとしても1辺が1000原子の立方体となり、多結晶を原子からシミュレートするには現在のコンピュータでは不可能である。また、連続体の弾塑性解析では様々な材料に対する構成則が開発され、有限要素法分野において有効に活用されている。これらの構成則はあくまで経験的に得られたものであり、物質の変形の元となる、原子群の挙動との関連がない。分子動力学と連続体の力学はそれぞれの分野において、完成されつつあるが、これらの手法を関連付ける方法についてはあまり検討されていない。

そこで、著者らは原子レベルの微視構造の変形と巨視的な材料特性を結びつけるために、原子モデルを微視問題とするマルチスケール解析法の定式化を行い²⁾、マルチスケール解析手法によって原子モデルの塑性の考察を行った¹⁾。本論文では、均質化理論により、原子レベルの微視構造での力学応答と結晶レベルの力学応答を結びつけ、単結晶-原子モデル間におけるマクロ-ミクロ連立解析手法の構築を行う。

2. マクロ-ミクロ連立解析

まず、原子モデルのような離散体におけるマクロ-ミクロ解析定式化の概要を示す²⁾。図-1のように、非常に小さい ϵ によって規定される大きさ ϵY の微小なユニットセルにより、周期的に埋め尽くされた領域 Ω^ϵ を解析対象とする。ここで ϵ に依存する変数には Ω^ϵ のように上付きの ϵ を付すものとする。物体力がないものとする、大変形超弾性体の境界値問題は

$$\nabla_X \cdot P^\epsilon = 0 \quad (1)$$

$$u^\epsilon = \underline{u} \quad \text{on } \Gamma_u, \quad P^{\epsilon T} \cdot N = \underline{t} \quad \text{on } \Gamma_\sigma \quad (2)$$

と表される。ここに、 P^ϵ は第1 Piola-Kirchhoff 応力、 \underline{u} 、 \underline{t} は与えられる幾何学および力学的境界条件、 N は初期配置における単位外向き法線ベクトル、 Γ は領域 Ω の境界、 X は物質座標を表す。この境界値問題からミクロ、マクロ、

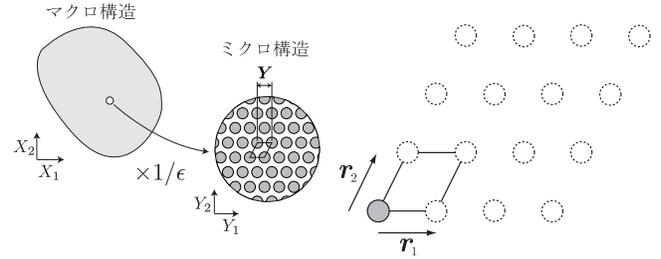


図-1 マクロ-ミクロスケール概念図

図-2 ユニットセル

両スケールでの弱形式の釣合式

$$\langle P^0 : \nabla_Y \eta^1 \rangle_{NY} = 0 \quad (3)$$

$$\int_{\Omega} \nabla_X \eta^0 : \bar{P} \, dv - \int_{\Gamma_\sigma} \underline{t} \cdot \eta^0 \, ds = 0 \quad (4)$$

を得る。ここに、 u^0 、 η^0 はマクロスケール変位およびその許容変分、 u^1 、 η^1 は NY 周期性を有するミクロスケール変位およびその許容変分である。また、 P^0 は全応力、 F^0 は全変形勾配、 \bar{P} は平均応力であり、それぞれ

$$F^0 := 1 + \nabla_X u^0 + \nabla_Y u^1, \quad \bar{P} := \langle P^0 \rangle_{NY} \quad (5)$$

により定義した。このとき代表体積要素内の全変形に起因する実変位 w は、一様変形に起因する成分と周期成分 u^1 の和として

$$w(X, Y) = \nabla_X u^0(X) \cdot Y + u^1(X, Y) \quad (6)$$

により与えられる。ここに Y はミクロスケール $Y = X/\epsilon$ を表している。またミクロスケール問題は、マクロスケール問題から得られるマクロ変形を受けたときのミクロ構造の自己釣合問題であり、陰的構成関係を与えている。

ミクロスケールにおける原子群の弱形式釣合式は

$$\sum_{i=1}^n -\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial w_i} \cdot \delta w_i = 0 \quad (7)$$

となり、ここに n は代表体積要素内の粒子の総数、 w_i は粒子 i の実変位である。 \mathcal{U} はミクロ構造での全ポテンシャルを示している。ここで、ミクロスケール Y の原点が属する境界上のある粒子の実変位を w_i 、周期境界によりこの粒子に

Key Words: マクロ-ミクロ連立解析, 分子動力学, 均質化法

〒321-8585 宇都宮市陽東7-1-2 宇都宮大学工学部建設学科 Tel.028-689-6210 Fax.028-689-6210

対応する粒子，すなわちこの粒子を Nr_i 並進させた位置の粒子の実変位を w_d とする．ここに r_i は図-2 に実線で示す単位周期構造を規定する基本並進ベクトルである．このとき，マクロ変形 $\nabla_X u^0$ に起因する両粒子間の相対変位 d は

$$d := w_d - w_i = \{ \nabla_X u^0(\mathbf{X}) \} \cdot Nr_i \quad (8)$$

により与えられ，ミクロスケールにおける非線形釣合式 (7) を周期境界条件 (8) のもとで解析する．

3. 解析結果

通常，分子動力学では極めて短い時間内の原子の挙動を追うことによって物質の特性を評価せざるを得ない．しかし，本研究ではマクロ構造の静的挙動を対象としているため，ミクロスケール問題も静的に解析を行った．ミクロ解析において，繰り返し計算が収束しない場合にのみ，仮想的な減衰を与えつつ動的に解析し静的釣合状態を求めた．

例題として用いるマクロ，ミクロの解析モデルを図-3 に示す．マクロ構造は結晶方位が一様な単結晶と仮定し，マクロ構造の右端に水平方向の一樣変位を与えた．ミクロ構造は単位周期構造を 16×16 含んだ代表体積要素とし，予めミクロ構造のみに対しいくつかの粒子に対して強制変位を与えつつ解析を行い，転位を含ませた．転位を含む非一樣状態とした代表体積要素の釣合状態を求めることで初期状態とした．図-3 に示すようにマクロ構造の 1 要素内の Gauss 点は 4 点とし，各 Gauss 点に図-3 (b) に示すミクロ構造を定義した．各ミクロ構造に Gauss 点のひずみを与え非線形解析を行った．各ミクロ構造の平均応力は，対応する Gauss 点の応力を与えることとなる．つまり，ミクロ問題はマクロ構造に対して陰的構成関係を与えている．

このとき，マクロ構造の載荷点における変位 u をマクロ構造の幅 W で無次元化した変位 u/W と荷重の関係を図-4 に示す．無次元化変位 u/W が 0.03 になったときのマクロ構造の変形を図-5 に示す．また，図-5 の I 点と II 点として示す Gauss 点でのミクロ構造の変形を図-6，図-7 に示す．図-4 の曲線前半で負の荷重が生じているのは，ミクロ構造を非一樣状態にしているためである． u/W が 0.18 付近で勾配が不連続になっているのは，ミクロ構造において転位を含む箇所ですり方向にすべりを生じているためである．

参考文献

- 1) 菅家茂理， 齊木 功， 中島章典， 寺田賢二郎: ポテンシャルを有する離散体のマルチスケールモデリング，応用力学論文集， Vol. 5, pp. 167-173, 2002.
- 2) 齊木 功， 菅家茂理， 中島章典， 寺田賢二郎: 原子モデルによる塑性のマルチスケールモデリングに関する一考察応用力学論文集， Vol. 6, pp. 123-130, 2003.

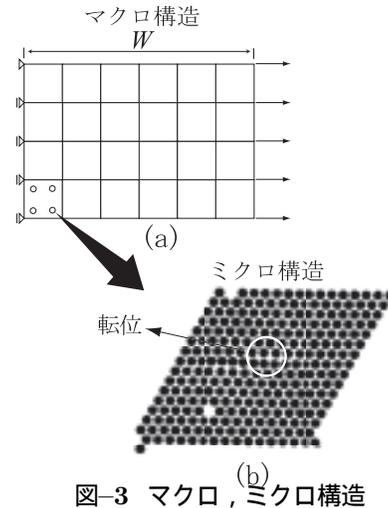


図-3 マクロ，ミクロ構造

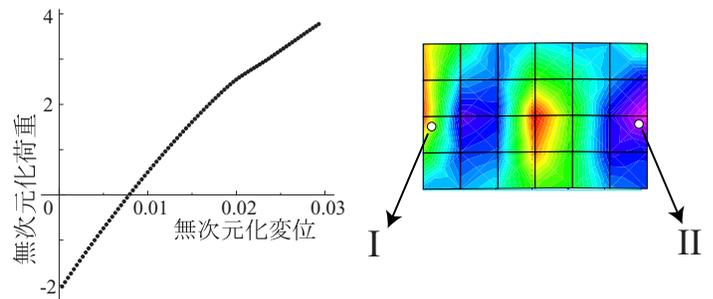


図-4 荷重 - 変位関係

図-5 マクロ変形

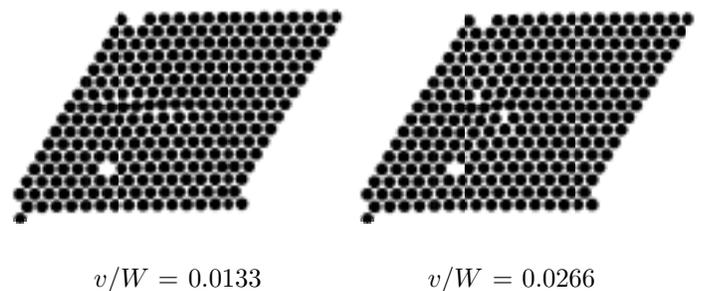


図-6 I点におけるミクロ構造の変形

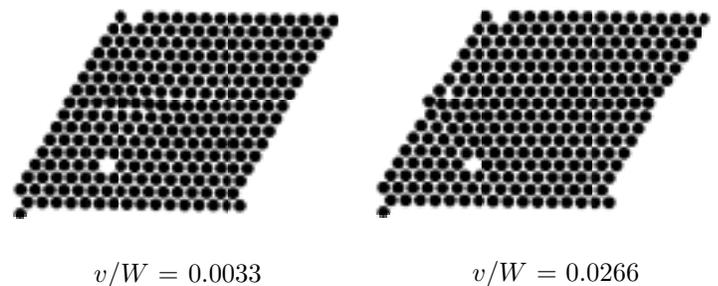


図-7 II点におけるミクロ構造の変形