多結晶脆性固体のマイクロクラッキング挙動の メソスコピック・シミュレーション*

(第1報, 連続体損傷力学における等方性理論モデルに関する考察)

都 井 裕*¹, 諸 正 信*¹

Mesoscopic Simulation of Microcracking Behaviors of Brittle Polycrystalline Solids (1st Report, Study of Isotropic Theory in Continuum Damage Mechanics)

Yutaka TOI and Jung-Sin CHE

Fracture behaviors of brittle polycrystalline solids such as ceramic materials are deeply related to microcracking. Continuum damage mechanics is considered a powerful theoretical framework to deal with brittle microcracking materials, however, it is fairly difficult to obtain analytically as well as experimentally evolution equations for microcracking and reduced elastic compliances of microcracked solids. In the present study, a mesoscopic (grain level) simulation method using a discontinuum mechanics model is proposed to solve these problems. The validity and limitations of the isotropic theory of continuum damage mechanics are studied in the first report.

Key Words: Computational Mechanics, Brittle Fracture, Ceramics, Damage Mechanics, Polycrystalline Solid, Microcracking, Mesoscopic Simulation, Isotropic Theory

1. 序

多結晶脆性固体の破壊挙動は、結晶粒界における微細亀裂の発生、すなわちマイクロクラッキングと関係が深い。近年、セラミックスなどに代表される多結晶脆性固体の破壊問題に対し、連続体損傷力学⁽¹⁾の概念に基づく計算力学のアプローチが試みられている^{(2)~(6)}。この方法は連続体力学の枠内でマイクロクラックあるいはマイクロボイドなどのような微視的損傷を扱う手法として極めて有効であるが、損傷体の構成方程式の定式化において必要とされる、マイクロクラック密度の発展方程式、マイクロクラック密度と弾性係数の関係式などを解析的に得るのは必ずしも容易でなく、特にマイクロクラックパターンの異方性、あるいは個々のマイクロクラックの閉鎖、さらには表面摩擦の影響などを考慮するのは至難である。また、実験的にこれらの微視的情報を得ることも、現状では困難である。

そこで本研究では、これらの問題の解決策として、マイクロクラックを伴う多結晶脆性固体に対する準微

視的なシミュレーション手法の活用を提案している。すなわち、計算不連続体力学モデルの一つである剛体・ばねモデル⁽⁷⁾を用いて、多結晶体における各結晶粒を剛体要素に、結晶粒界を結合ばね系に置換し、マイクロクラッキング脆性固体を結晶粒レベルで直接的にモデル化することにより、マイクロクラック密度の発展方程式あるいはマイクロクラック密度と弾性係数の関係などを数値的に評価することを試みる。ここで述べた結晶粒レベルのシミュレーションは、いわゆる分子動力学(微視的)と連続体力学(巨視的)の中間レベルの計算であり、本研究ではこれをメソスコピック・シミュレーション(「メソ」は中間の意味)と呼称する。

上述のような意味でのメソスコピック・シミュレーションは、宮本らの先駆的研究を初めとして、金属、ポリマーを対象としたものなどが見られるが^{(8)~(10)}、本研究は、多結晶脆性固体のマイクロクラッキング挙動を対象とし、そのような解析に好適な計算不連続体力学モデルを用いている点に特色がある。ランダム形状を有する結晶粒モデルは、ヴォロノイ分割メッシュにより発生させている。

本研究の第1報では、連続体損傷力学における等方性理論モデルの妥当性および適用範囲を評価すること

* 原稿受付 平成4年6月24日。

*¹ 正員, 東京大学生産技術研究所 (〒106 東京都港区六本木7-22-1)。

を目的に、マイクロクラックを有する脆性固体の、引張応力場および圧縮応力場での弾性係数を、マイクロクラックの閉鎖および表面摩擦を考慮しながら計算した。また、マイクロクラックの安定性を仮定した上で、単軸引張応力下の非定常マイクロクラッキング挙動を解析した。このような計算は、種々の連続体損傷力学モデルの評価および改良に通じる。本研究の第2報では、異方性理論モデルについて考察する予定である。

2. 連続体損傷力学における 等方性理論モデル

本研究で考察対象とする、連続体損傷力学における等方性理論モデルに関し、簡単に記述する。ここに、等方性理論モデルとは、スカラー損傷変数発展解および等方分布マイクロクラックに対する弾性係数解に基づく、最も単純な理論モデルであり、アルミナなどの、マイクロクラッキングが主たる材料非線形要因であるセラミックスの破壊解析に用いられている^{(2)~(5)}。典型的な構成関係を図1に示す。

Fu と Evans⁽¹¹⁾ によれば、相当応力 ($\sigma_e = \sqrt{\sigma_{ij}\sigma_{ij}}$) とスカラー損傷変数であるマイクロクラック密度 ξ は、次式のような関係にある [図1(b)を参照]。

$$\begin{aligned} \xi &= 0 & \text{when } \sigma_e < \sigma_c \\ \xi &= \lambda(\sigma_e - \sigma_c)^n & \text{when } \sigma_c \leq \sigma_e \leq \sigma_s \cdots \cdots (1) \\ \xi &= \lambda(\sigma_s - \sigma_c)^n = \xi_s & \text{when } \sigma_e > \sigma_s \end{aligned}$$

ここに、 σ_c はマイクロクラックが発生する限界応力値、 σ_s はマイクロクラック密度が飽和する応力値、 ξ_s はその飽和値であり、 λ と n はそのほかの材料定数である。諸定数は、引張りあるいは圧縮応力場において異なる値をとると考える。

Budiansky と O'Connell の近似理論解⁽¹²⁾ に従えば、ランダムに分布したマイクロクラックを有する三次元損傷体の弾性係数 (ヤング率 E_m およびポアソン比 ν_m) は、マイクロクラック密度 ξ と次式の関係にある。

$$E_m/E_u = \nu_m/\nu_u = 1 - (16/9)\xi = 1/f \cdots \cdots (2)$$

ここに、 E_u および ν_u は非損傷体の弾性係数である。また、 f は弾性係数低減率の逆数であり、 ξ と次式の関係にある。

$$f = 1/\{1 - (16/9)\xi\} \cdots \cdots (3)$$

式(2)の誘導に際しては、マイクロクラックの閉鎖の影響が無視されていることに注意されたい。

なお、Budiansky と O'Connell の解析では、マイクロクラック密度 ξ は、

$$\xi = (2N/\pi) \langle A^2/P \rangle \cdots \cdots (4)$$

と定義されており、ここに、 N は単位体積当りのマイクロクラック数、 A はマイクロクラック面積、 P は周長、記号 $\langle \rangle$ は平均値を意味し、たとえば、直径 D の円形マイクロクラックの場合は、 $A = \pi D^2/4$ 、 $P = \pi D$ であるから、 $\xi = ND^3/8$ となる。すなわち、 ξ は単位体積当りのマイクロクラック数 (N) とその平均サイズ (D) の3乗に比例するような量であり、物理的に明確に定義された損傷変数である。

平面ひずみ状態にある二次元等方線形弾性体の構成式におけるヤング率およびポアソン比を式(2)の E_m と ν_m で置き換えると次式を得る。

$$\epsilon_{ij} = \{(1 + \nu_u/f)/(E_u/f)\} \cdot [\sigma_{ij} - (\nu_u/f)\sigma_{kk}\delta_{ij}] \cdots \cdots (5)$$

上述の式(1)、式(3)、式(5)をそれぞれ時間微分すると、平面ひずみ状態にあるマイクロクラッキング脆性固体に対する自己完結形の増分形構成方程式系を得

(a) 応力・ひずみ関係

(b) 応力とマイクロクラック密度の関係

図1 マイクロクラッキング脆性固体の応力・ひずみ関係

る⁽³⁾。

3. 二次元メソスコピック・シミュレーション

3.1 二次元多結晶モデル 実際の三次元多結晶脆性体の結晶粒の形状と寸法に関し、次のことが知られている。すなわち、個々の結晶粒は9～18面の凸多面体であり、面当りの辺数は3～8程度である。大きさは一けたもしくは二けたの間で変化しているが、全体にすぎ間なく組合されている⁽¹³⁾。本研究では、このようなランダムな性質をもつ二次元多結晶モデルをヴォロノイ分割により自動的に生成している。

ヴォロノイ図は計算幾何学の概念であり、空間内に置かれた有限個の点(母点)の勢力圏を表す領域分割図である⁽¹⁴⁾。すなわち、ある領域内に分布する母点(X_i)の勢力圏を次のように定義する。

$$V(X_i) = \bigcap \{X | d(X_i, X) \leq d(X_j, X)\} \dots\dots (6)$$

ただし、 X は領域 $V(X_i)$ の点、 $d(X_i, X)$ は X_i, X 間のユークリッド距離を意味する。すなわち、図2の白丸の母点に対し、実線がその勢力圏を表しており、このような凸多角形要素が必ず各母点の周りに構成される。要素境界線(ヴォロノイ線)は隣接母点との垂直二等分線であり、要素頂点(ヴォロノイ点)は隣接3要素の母点から成る3角形の外心である。一様乱数により発生させた母点に基づいて構成したヴォロノイ多角形要素を結晶粒、ヴォロノイ線を結晶粒界と見なす。図4の実例によれば、最多角要素は13角形であり、平均的には6角形であった。

このようにして発生させた二次元多結晶モデルにおいて、各結晶粒を剛体要素と仮定し、結晶粒界を結

合ばね系に置換する。本モデル化における結合ばね系は、結晶粒の基本弾性変形モード(一様ひずみモード)に対する剛性と、マイクロクラックの発生・閉鎖などを表現するための処罰剛性を兼ねている。結晶粒の高次弾性変形モードを無視した、このようなモデル化が、実際の多結晶脆性固体に対し常に(厳密な意味で)適切であるという保証はないが、結晶粒界におけるマイクロクラッキングが主たる材料非線形要因であるような脆性固体を対象とした連続体損傷力学モデルの妥当性、適用範囲などを考察するための(仮想的)実験データを提供するメソスコピック・シミュレーションモデルとしては、十分実用に供するものと考ええる。

3.2 計算法 図3に示す、3種類のスプリング k_a, k_s および k_r により結合された2枚の任意多角形の剛体要素を考える。要素A, Bの重心点の座標を $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ 、辺CDの端点の座標を $(x_3, y_3), (x_4, y_4)$ とし、各要素の重心点変位をそれぞれ (u_1, v_1, θ_1) および (u_2, v_2, θ_2) とすれば、要素Aにおける任意点の変位は、次式により表現される。

$$u = u_1 + (y - y_1)\theta_1$$

$$v = v_1 - (x - x_1)\theta_1 \dots\dots\dots (7)$$

ここに、回転変位 θ_1 は微小であると仮定されている。

変形前の辺CDの中点 $M : ([x_3 + x_4]/2, [y_3 + y_4]/2)$ が、変形後に M' および M'' に移動したとすれば、 $M'M''$ 間の相対変位増分ベクトル $\{\Delta d\}$ は、次式により計算される。

$$\{\Delta d\} = [B]\{\Delta u_e\} \dots\dots\dots (8)$$

ここに、

$$\{d\}^t = [\delta_n, \delta_t, \phi]$$

$$\{u_e\}^t = [u_1, v_1, \theta_1, u_2, v_2, \theta_2]$$

$$[B] = (1/l_{34})$$

図2 ヴォロノイ分割メッシュ

図3 二次元任意多角形剛体・ばねモデル

$$\begin{bmatrix} -x_{43} & -y_{43} & -x_{43}(y_{31}+y_{41}) & x_{43} & y_{43} & x_{43}(y_{32}+y_{42}) \\ & & +y_{43}(x_{31}+x_{41}) & & & -y_{43}(x_{32}+x_{42}) \\ y_{43} & -x_{43} & x_{43}(x_{31}+x_{41}) & -y_{43} & x_{43} & -x_{43}(x_{32}+x_{42}) \\ & & +y_{43}(y_{31}+y_{41}) & & & -y_{43}(y_{32}+y_{42}) \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

ここで, δ_n, δ_t, ϕ はそれぞれ, 辺 CD に対する垂直方向相対変位, 水平方向相対変位, 回転相対変位である。

各相対変位成分に抵抗するばねに生ずる内力増分ベクトル $\{\Delta S\}$ と相対変位増分ベクトル $\{\Delta d\}$ の関係は, 次式により与えられる。

$$\{\Delta S\} = [D]\{\Delta d\} \quad \cdots \cdots \cdots (9)$$

ここに,

$$\{\Delta S\}^t = [N, F, M_\phi]$$

$$[D] = \begin{bmatrix} k_d & 0 & 0 \\ 0 & k_s & 0 \\ 0 & 0 & k_r \end{bmatrix}$$

ここに, k_d, k_s, k_r はそれぞれ, 相対変位 δ_n, δ_t, ϕ に抵抗するばね定数であり, N, F, M_ϕ はこれらのばねに生ずる内力である。これらのばね定数を適宜, コントロールすることにより, マイクロクラックの発生, 開閉, 表面摩擦などを簡単に考慮することができる。

以上の関係式を剛体要素境界辺 CD のばね系に対する増分形仮想仕事式に代入すれば, 次の増分形剛性方程式を得る。

$$[k]\{\Delta u\} = \{\Delta f\} + \{f_r\} \quad \cdots \cdots \cdots (10)$$

ここに,

$$[k] = [B]^t [D] [B]$$

$$\{f_r\} = -[B]^t \{s\}$$

なお, 式(10)中の $\{f_r\}$ は, 前ステップにおいてマイクロクラックが発生した結晶粒界ばね系に対する解放力ベクトルである。

式(9)中のばね定数は本来, 結晶粒および結晶粒界の力学的特性に応じて決められるべきものであるが, 4章および5章の数値例においては, 次式の条件に従い, 非損傷体のヤング率およびポアソン比が所要の値になるように, 試算によりばね定数を決定している。

$$k_d \propto L_{CD}$$

$$k_s \propto L_{CD} \quad \cdots \cdots \cdots (11)$$

$$k_r = k_d L_{CD}^2 / 12$$

ここに, L_{CD} は要素境界線 CD の長さである。

4. マイクロクラックを有する

脆性固体の弾性係数

本章では, あらかじめランダムにマイクロクラックを発生させた正方形の脆性固体に単軸引張りあるいは単軸圧縮の強制変位を与え, その弾性係数をメソスコピック・シミュレーションにより数値的に評価した。

図4に, シミュレーションに用いた多結晶脆性固体の二次元メソスコピックモデルを示す。計算では, 結晶粒数がそれぞれ1700および4453の2種類のモデルを用いた。

三次元損傷体に対するマイクロクラック密度は式(4)により定義されるが, 本研究では二次元モデル, すなわち, すべてのマイクロクラックが同一座標軸に平行な場合を取扱うので, これを次のように修正した。

(a) 1700 要素

(b) 4453 要素

図4 マイクロクラックを含む脆性固体のメソスコピックモデル

$$\xi = \sqrt{N_T} \cdot \sum_{i=1}^{N_T} (l_i)^3 / 8L^3 \dots\dots\dots (12)$$

ここに、 L は正方形解析領域の辺長、 N_T はマイクロクラック総数、 l_i は各マイクロクラックの長さである。式(12)は、前述した、円形マイクロクラックに対する三次元式 $\xi = ND^3/8$ において、 $N = N_T^{3/2}/L^3$ 、 $D^3 = \sum (l_i)^3/N_T$ と置換することにより得られる。

4・1 マイクロクラックの閉鎖を無視した計算

まず、Budiansky と O'Connell の近似理論解析⁽¹²⁾と同様に、マイクロクラックの閉鎖を無視した計算を実施した。すなわち、マイクロクラックの存在する結晶粒界においては、すべてのばね定数を零と設定した。

図5に、マイクロクラック密度と弾性係数（非損傷体の弾性係数で正規化した値）の関係に対する計算結

果を示す。非損傷体に対するポアソン比の値として $\nu_u = 0.201, 0.301, 0.400$ の3種類の値を仮定し、1700要素モデルにより計算した。

二次元モデルと三次元モデルの相違があるため、得られた計算値を直接式(2)と比較はできないが、ヤング率、ポアソン比ともに、Budiansky と O'Connell による理論解析結果⁽¹²⁾と定性的に良好に対応している。すなわち、両者ともマイクロクラック密度の増加に伴いほぼ同じ割合で線形的に低下し、ヤング率の低下率は非損傷体のポアソン比の値に依存しない。なお、図中に示されているように、 $\nu_u = 0.301$ の場合について4453要素モデルを用いて計算しても、結果はほとんど変化しなかった。すなわち、1700要素モデルで収束

(a) ヤング率

(b) ポアソン比

図5 マイクロクラック密度と弾性係数の関係
(マイクロクラックの閉鎖を無視)

(a) ヤング率

(b) ポアソン比

図6 引張応力下におけるマイクロクラック密度と弾性係数の関係 (マイクロクラックの閉鎖を考慮)

解が得られていると判断される。

4.2 マイクロクラックの閉鎖を考慮した計算

続いて、マイクロクラックの閉鎖効果を考慮して、引張りおよび圧縮応力下でのマイクロクラック密度と弾性係数の関係を計算した。メソスコピック・シミュレーションにおいては、各結晶粒は多角形剛体要素に、結晶粒界は結合ばね系に置換されているが、マイクロクラックの開閉は、結晶粒界における剛体要素間の法線方向・相対変位 δ_n (式(8)参照) の符号により判定した。個々のマイクロクラックの開閉は事前には不明であるため、数回の反復計算により、収束解を求めた。

図6および図7はそれぞれ、引張りおよび圧縮応力

下の計算結果であり、マイクロクラックの閉鎖に関し次の3種類の仮定が設けられている。

- [A] マイクロクラックの閉鎖を無視。
- [B] マイクロクラックの閉鎖を考慮、表面摩擦の存在を無視 (摩擦係数零: $k_s=0$)。
- [C] マイクロクラックの閉鎖を考慮、表面摩擦の存在を仮定 (摩擦係数無限大: $k_s \neq 0$)。

図6に示す引張応力下の計算結果においては、マイクロクラックの閉鎖を考慮することにより剛性が若干増大し、ヤング率はやや大きめの値をとり、ポアソン比はやや小さめの値をとることが確認されるが、総体的にマイクロクラックの閉鎖の影響は小さい。この結果より、引張応力下においては、マイクロクラックの閉鎖を無視した Budiansky と O'Connell の近似理論解でも定性的には妥当と判断される。

他方、図7に示す、圧縮応力下における計算結果においては、多くのマイクロクラックが閉じるため、マイクロクラックの閉鎖を考慮することによる影響は大きい。ケース[C]の計算結果からわかるように、マイクロクラックの閉鎖および表面摩擦の存在を考慮すると、ヤング率、ポアソン比ともに、初期値からほとんど変化しない。また、ケース[B]の計算結果に見られるように、表面摩擦の存在を無視した場合のポアソン比は、マイクロクラック密度の増大とともに0.5に近づいているが、これは滑り線による塑性変形が非圧縮であることから類推すれば、合理的な計算結果である。この結果から、圧縮応力下においては、ヤング率とポアソン比の変化率が引張り応力の場合と大きく異なり、また両者は全く独立に変化することがわかる。すなわち、Budiansky と O'Connell の近似理論解の式(2)は完全に正当性を失う。

5. 単軸引張下の脆性固体のマイクロクラッキング挙動

本章では、図4(b)に類似した4501要素モデルにより、単軸引張応力下における非定常マイクロクラッキング挙動をシミュレートした。計算は増分理論に従い、結晶粒界端部の垂直応力がある限界値に達した時にマイクロクラックが発生すると仮定し、マイクロクラック発生直後に結晶粒界表面力の解放計算を行った。また、隣接結晶粒界には、見かけ上の高応力が発生しても、圧縮残留応力の効果により、マイクロクラックが発生しないと仮定した。

図8に計算結果を示す。図8(a)の応力・ひずみ曲線より、線形弾性、マイクロクラッキングの進展およびマイクロクラックの飽和、さらには除荷挙動が適切

(a) ヤング率

(b) ポアソン比

図7 圧縮応力下におけるマイクロクラック密度と弾性係数の関係 (マイクロクラックの閉鎖を考慮)

にシミュレートされていることがわかる。すなわち、セラミックスのマイクロクラックによる高靱性化の議論に一般に用いられている、典型的な多結晶脆性固体の応力・ひずみ関係^{(2)~(6)}と同様の関係が得られている。また図8(b)のマイクロクラック密度と弾性係数の関係より、ヤング率とポアソン比は、マイクロクラック密度の増大に対し、非線形的に低減し、しかも両者は同じ割合では低減しないことがわかる。これは、Budiansky と O'Connell の解析⁽¹²⁾ではランダムに分布したマイクロクラックが仮定されているのに対し、単軸引張りにより発生するマイクロクラックは明らかな方向性を有していることに起因する(図8(d)を参照)。すなわち、Budiansky と O'Connell の解のような等方性問題の理論解を、異方性環境下でそのまま適用することは本来はできない。図8(c)の相当応力とマイクロクラック密度の関係は、Fu と Evans により解析的に求められている指数関係と良好に対応してい

る。

6. 結 言

ヴォロノイ分割メッシュを用いた二次元剛体・ばねモデルにより、多結晶脆性体のマイクロクラッキング挙動を結晶粒レベルで直接的にシミュレートする方法を提示し、数値例として、マイクロクラック密度と弾性係数の関係、およびマイクロクラッキングの進展挙動を解析した。その結果、連続体損傷力学の等方性理論モデルに関し、以下の知見を得た。

(1) マイクロクラックを伴う脆性固体の弾性係数に関する Budiansky と O'Connell の近似理論解は、引張応力下においては、定性的にほぼ妥当であるが、圧縮応力下においては、マイクロクラックの閉鎖およびクラック表面の摩擦の影響により、完全に正当性を失う。すなわち、摩擦係数が大きい場合、弾性係数値はほとんど変動せず、摩擦係数が小さい場合、ポアソン

図 8 単軸引張応力下におけるマイクロクラッキング挙動

比は0.5に漸近する。

(2) マイクロクラックの安定性を仮定したメソスコピック・シミュレーションにより、単軸引張応力下における脆性固体の典型的なマイクロクラッキング挙動を再現することができる。すなわち、FuとEvansの損傷発展解は適切である。ただし、BudianskyとO'Connellの弾性係数解の適用は、マイクロクラックの異方性に起因する非線形性を考慮すると、妥当性を欠くといえよう。

本メソスコピック・シミュレーションによる多結晶脆性固体の解析結果は、(仮想的)実験データとして、諸連続体損傷力学モデルの評価および改良にさまざまな利用が可能である。次報では、連続体損傷力学における異方性理論モデルについて考察する。

なお、二次元ヴォロノイ図発生のために、東京大学生産技術研究所・谷口伸行助教授作成のプログラム⁽¹⁵⁾を借用し、数値計算には旭化成情報システム株式会社提供のグラフィック・スーパーコンピュータ STELLAR GS-1000 を利用した。ここに記して、謝意を表す。

文 献

- (1) Kachanov, L. M., *Introduction to Continuum Damage Mechanics*, (1986), 1, Matrinus Nijhoff Publishers.
- (2) Charalambides, P. G. and McMeeking R. M., *Mechanics of Materials*, 6(1987), 71.
- (3) Toi, Y. and Atluri, S. N., *Int. J. of Plasticity*, 6-2(1990), 169.
- (4) Toi, Y. and Atluri, S. N., *Int. J. of Plasticity*, 6-3(1990), 263.
- (5) Brockenbrough, J. R. and Suresh, S., *J. Mech. Phys. Solids*, 35(1987), 721.
- (6) Chow, C. L. and Lu, T. J., *Int. J. of Fracture*, 50(1991), 79.
- (7) 都井, 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), (1990), 34, 培風館.
- (8) 宮本・ほか3名, 日本機械学会誌, 74-624(1971), 53.
- (9) Ostoja-Starzewski, M., *Acta Mechanica*, 80(1989), 61.
- (10) Meakin, P., *Statistical Models for the Fracture of Disordered Media* (Herrmann, H. J. and Roux, S.)編, (1990), 291, North-Holland.
- (11) Fu, Y. and Evans, A. G., *Acta metall.*, 33-8(1985), 1515.
- (12) Budiansky, B. and O'Connell, R. J., *Int. J. Solids Structures*, 12(1976), 81.
- (13) Davidge, R. W., *Acta metall.*, 29(1981), 1695.
- (14) 浅野・今井, 計算とアルゴリズム(計算機と科学)(1986), 107, オーム社.
- (15) 谷口・ほか2名, 機論, 55-513, B(1989), 1324.