

## マイクロクラッキング脆性固体の計算損傷力学

## ——メソ力学に基づく損傷力学モデルの改良——

Computational Damage Mechanics Models for Brittle Microcracking Solids

——Improvement of Damage Mechanics Models Based on Mesomechanics——

都 井 裕\*

Yutaka TOI

セラミックスなどに代表されるマイクロクラッキング脆性固体の構成挙動に関し、メソ力学モデルによる結晶粒レベルのシミュレーションを行い、その結果に基づいて既存の損傷力学モデルを改良する。さらに、改良された損傷力学モデルをマイクロクラッキング脆性固体の破壊問題の有限要素解析に応用する。

## 1. 序

セラミックスなどの多結晶脆性固体が応力を受けるとマイクロクラックと呼ばれる微小亀裂(数ミクロン~数十ミクロン程度の大きさ)が結晶粒界に発生する。マイクロクラックの発生を伴う脆性固体(マイクロクラッキング脆性固体)の破壊問題に対し、連続体損傷力学(continuum damage mechanics)<sup>1)</sup>(以下では単に損傷力学と呼ぶ)の概念に基づく有限要素解析が近年いくつか試みられているが<sup>2)~6)</sup>、このような損傷力学に基づく計算力学的アプローチをここでは計算損傷力学(computational damage mechanics)と呼ぶことにする。

損傷力学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ポイドなどのような微視的損傷を扱う理論体系であり、マイクロクラッキング脆性固体に対しては基本的に、マイクロクラック密度の発展方程式(相当応力とマイクロクラック密度の関係式)およびマイクロクラック密度と等価弾性定数の関係式に基づいて構成方程式が記述される<sup>2)~6)</sup>。

従来の巨視的・現象論的な構成方程式の記述と比較すると、損傷力学は一步ミクロな視点に踏み込んでおり、より合理的な材料挙動の表現を可能とするが、発展方程式、等価弾性定数などを理論的に誘導するのは決して容易でない。特に、マイクロクラックパターンの異方性、一旦発生したマイクロクラックの閉鎖、さらにはマイクロクラック表面の摩擦の影響などを考慮するのは至難である。また、マイクロクラックのような微視的損傷を対象とするだけに、実験的にこれらの情報を得るのも現状では困難である。

そこで著者らはこれらの問題に対し、メソ力学モデル(メソスケールの不連続体力学モデル)による結晶粒レ

ベルの直接的シミュレーション手法の活用を試み、そのシミュレーション結果に基づいて既存の連続体損傷力学モデルを評価するとともに、改良された計算損傷力学モデルを提案した<sup>7)~11)</sup>。本稿はこれらの要点を解説することを目的としており、以下ではメソ力学モデルによるシミュレーション(2節)、既存の等方性および異方性損傷力学モデルの改良(3節および4節)、改良された計算損傷力学モデルによる有限要素解析(5節)の順に解説を加える。最後の6節は結言である。

## 2. メソ力学モデルによるシミュレーション

連続体力学をマクロスケールの力学、分子動力学をミクロスケールの力学とすれば、多結晶脆性固体に対する結晶粒レベルの力学はメソスケール(メソは中間の意味)の力学といえることができる。脆性固体に限らず、このようなメソスケールの力学は、固体あるいは材料のミクロな構造とマクロな特性の橋渡しをする学問領域として近年注目を集めており、Haritosらにより「メソ力学(mesomechanics)」という呼称も与えられている<sup>12)</sup>。メソ力学においては連続体力学よりも微視的な観点が要求されるため、必然的に不連続体力学が重要な役割を果たす。

本研究における計算手法は、計算機により自動的に生成した多結晶モデル(図1を参照)の結晶粒および結晶粒界をそれぞれ剛体要素および結合ばね系に置き換えたシミュレーションモデルによる、均質化操作を伴わない直接的な計算手法であり、まさに上述のメソ力学モデルによるシミュレーションの範疇に含まれる。この計算においては、個々のマイクロクラックの生成、閉鎖、表面摩擦などが、結合ばね定数のコントロールにより逐一考慮されるので、損傷力学モデルの構成に必要な応力とマイクロクラック密度の関係、マイクロクラック密度

\*東京大学生産技術研究所 第2部

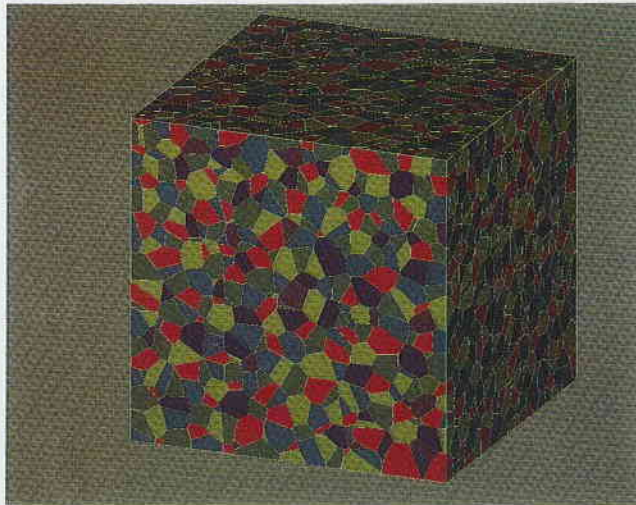
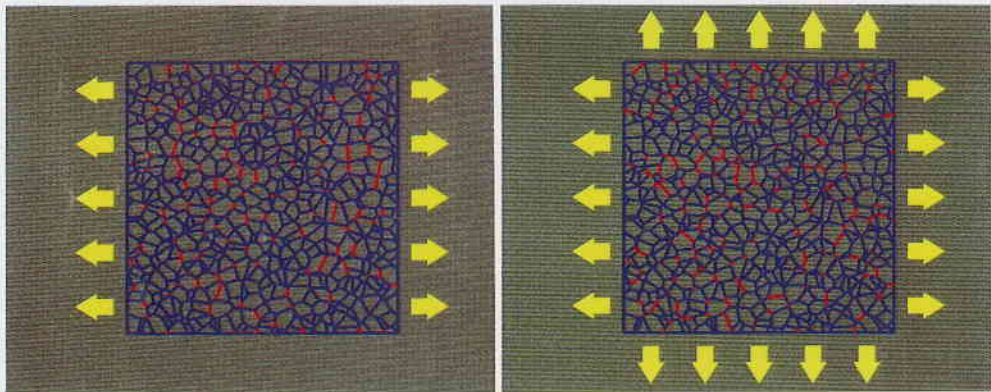


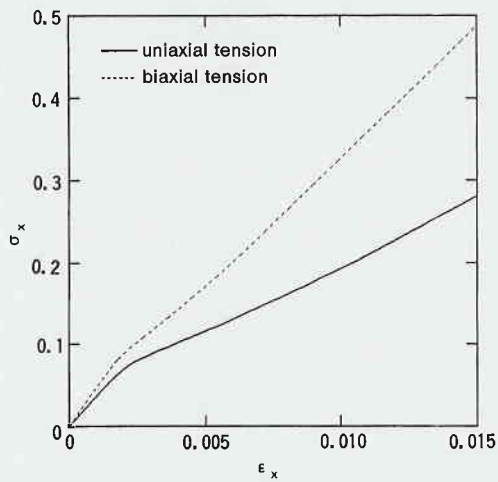
図1 多結晶脆性固体の3次元メソ力学モデル



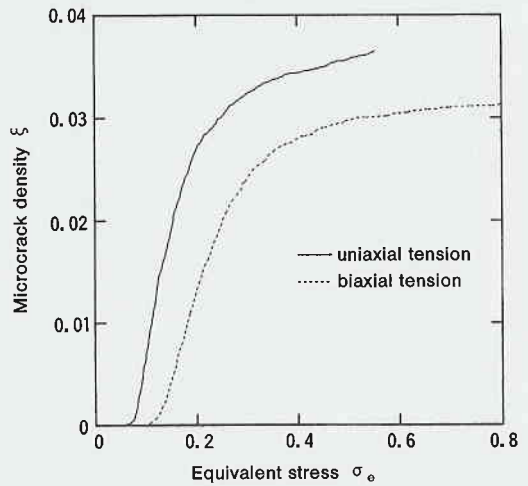
(a) 単軸引張り下のマイクロクラッキング挙動

(b) 2軸引張り下のマイクロクラッキング挙動

図2 3次元メソ力学モデルによる計算結果(1)



(a) 応力・ひずみ関係



(b) 相当応力・マイクロクラック密度関係

図3 3次元メソ力学モデルによる計算結果(2)

と等価弾性定数の関係を、実際に即して評価することが可能となる。以下に、3次元計算のサンプルを示す。

図1は計算幾何学における領域分割の一概念であるヴォロノイ分割法<sup>13)</sup>により作成した、3次元の多結晶体モデルであり、8000個の結晶粒からなる。ヴォロノイ分割により生成した結晶粒モデルの形状(面の数、辺の数など)は、実際が多結晶体と類似している<sup>14)</sup>。

図2(a), (b)はこのモデルにそれぞれ単軸引張り応力および2軸引張り応力を負荷したときのマイクロクラック発生状況を示す断面図であり、図中の赤色の線はマイクロクラックの発生した結晶粒界を意味する。単軸引張りの場合は引張り方向に垂直な方向に多くのマイクロクラックが発生し、2軸引張りの場合は等方的に分布していることがわかる。マイクロクラックの発生は、結晶粒界面における最大垂直応力値により判定し、焼結残留応力の効果によりマイクロクラックは安定、すなわち隣接粒界面に伝播しないことを仮定している。

図3(a), (b)はそれぞれ、応力・ひずみ曲線および相当応力(後述のFuとEvansの相当応力)・マイクロクラック密度関係である。応力・ひずみ曲線からは、弾性変形-マイクロクラックの進展-飽和の3段階が観察され、相当応力・マイクロクラック密度関係は指数関数的であることがわかる。

このようなメソスケールのシミュレーション(以下ではメソスコピック・シミュレーションと称する)により、マイクロクラック密度の発展方程式、等価弾性定数などを含む構成関係が把握され、その結果に基づいて既存の計算損傷力学モデルを評価・改良し、マクロスケールの有限要素解析を合理化することが可能になる。メソスケールの計算手法を無数の結晶粒を含む日常的なサイズ

の固体の解析にそのまま適用することは不可能なので、このような階層的なアプローチが必要となることを付言しておく。等方性損傷力学モデルおよび異方性損傷力学モデルの改良について次節および次々節で述べる。

### 3. 等方性理論に基づく計算損傷力学モデル

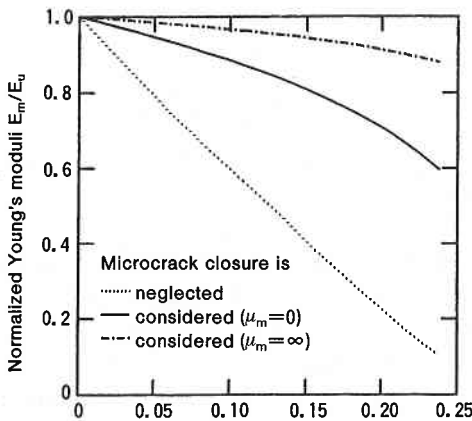
マイクロクラックを伴う脆性固体を等方性固体と仮定した損傷力学理論は厳密には、完全にランダムな低密度マイクロクラック場にしか適用できないが、その簡略さゆえに便宜的によく使用される<sup>2)-6)</sup>。

FuとEvans<sup>15)</sup>による相当応力( $\sigma_e = \sqrt{\sigma_{ij} \sigma_{ij}}$ )とマイクロクラック密度 $\xi$ の関係をひずみ速度依存型に拡張すると次式を得る<sup>4)</sup>。

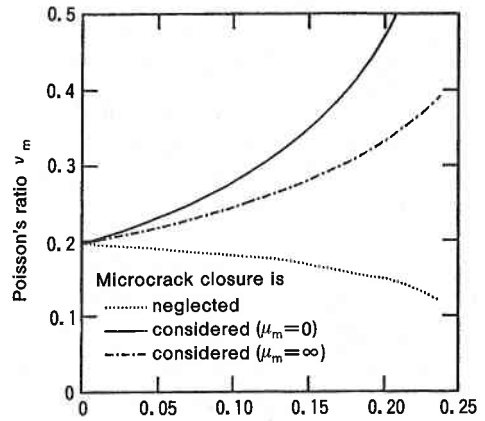
$$\begin{aligned} \dot{\xi} &= 0 && (\sigma_e + \xi/\lambda) > \sigma_c \text{ の時} \\ \dot{\xi} &= (1/\lambda) \{ \sigma_e / (\sigma_e + \xi/\lambda) - 1 \}^n && (\sigma_e + \xi/\lambda) \leq \sigma_c \text{ の時} \\ \dot{\xi} &= 0 && \sigma_e \leq \sigma_c \text{ の時} \end{aligned} \tag{1}$$

ここに、 $(\dot{\quad})$ は時間微分を意味し、 $\sigma_c$ はマイクロクラックが発生する限界応力値、 $\sigma_s$ はマイクロクラック密度が飽和する応力値、 $\lambda$ と $n$ はその他の材料定数である。(1)式においては、伝統的な粘塑性理論<sup>16)</sup>を参照して、ひずみ速度効果が導入されている( $\xi$ を粘塑性ひずみ $\epsilon_{vp}$ で置き換えれば、粘塑性理論との類似が明らかであろう)。ひずみ速度効果が小さい場合の(1)式(指数則)の正当性は、図3(b)のようなメソスコピック・シミュレーションの結果により確認されている<sup>7)</sup>。

さて、マイクロクラックの閉鎖を無視したBudianskyとO'Connell<sup>17)</sup>の近似理論解によれば、損傷体の等価弾性定数(ヤング率 $E_m$ およびポアソン比 $\nu_m$ )は、マイ



(a) ヤング率



(b) ポアソン比

図4 圧縮応力下の等価弾性定数

クロクラック密度の増大に伴い同じ割合で低減する。しかし、マイクロクラックの閉鎖および表面摩擦を考慮すると、図4の単軸圧縮応力下のメソスコピック・シミュレーション結果に示されるようにこの理論は成立しない。すなわち、ランダム分布マイクロクラックを含む多結晶体モデルに対し、メソスコピック・シミュレーションにより単軸圧縮応力下の等価弾性定数を評価すると、マイクロクラックの閉鎖を考慮した場合は、マイクロクラック密度の増大とともにヤング率は低減するが、ポアソン比は増大する。そこで両等価弾性定数がマイクロクラック密度の増大に対し独立に変動すると仮定する。すなわち、

$$E_m / E_u = 1 - \beta_Y \xi = 1 / f_Y \quad (2a)$$

$$\nu_m / \nu_u = 1 - \beta_P \xi = 1 / f_P \quad (2b)$$

ここに、 $E_u$  および  $\nu_u$  は非損傷体の弾性定数、 $\beta_Y$  と  $\beta_P$  は Budiansky と O'Connell<sup>17)</sup> の理論では一律に 16/9 とされている比例係数である。マイクロクラック密度  $\xi$  は、

$$\xi = (2N/\pi) \langle A^2/P \rangle \quad (3)$$

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  $\langle \rangle$  は平均値を意味する。 $f_Y$  と  $f_P$  は弾性定数変動率の逆数であり、 $\xi$  と次のような関係にある。

$$f_Y = 1 / (1 - \beta_Y \xi) \quad (4a)$$

$$f_P = 1 / (1 - \beta_P \xi) \quad (4b)$$

(4)式を微分すると、次式を得る。

$$\dot{f}_Y = \beta_Y \xi / (1 - \beta_Y \xi)^2 \quad (5a)$$

$$\dot{f}_P = \beta_P \xi / (1 - \beta_P \xi)^2 \quad (5b)$$

平面ひずみ状態にある2次元等方線形弾性体の構成式におけるヤング率とポアソン比を(2)式の  $E_m$  と  $\nu_m$  で置き換え、時間微分すると次式を得る。

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{ij} = & \{f_Y(f_P + \nu_u) / f_P E_u\} \cdot [\dot{\sigma}_{ij} - (\nu_u / f_P) \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij}] \\ & + \{(\dot{f}_Y f_P - f_Y \dot{f}_P) (f_P + \nu_u) / f_P^2 E_u + f_Y \dot{f}_P / f_P E_u\} \sigma_{ij} \\ & + (\nu_u / f_P^3 E_u) [(f_P + 2\nu_u) f_Y \dot{f}_P - (f_P + \nu_u) \dot{f}_Y f_P] \cdot \sigma_{kk} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (6)$$

(1), (4), (5), (6)式は、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型の増分型構成方程式系を与えている。(6)式に  $f_Y = f_P = f$  を代入すると、文献4)の(5)式が導かれる。増分法による有限要素解析においては、(6)式の第1項は接線剛性において、第2項は初期ひずみとして考慮される。

#### 4. 異方性理論に基づく計算損傷力学モデル

計算損傷力学における異方性理論モデルとして、

Chow と Wang の理論<sup>18),19)</sup> を考える。まず、損傷発生条件は次式により与えられる。

$$F_d(\sigma, \mathbf{D}, B) = F_d(\bar{\sigma}, B) = \bar{\sigma}_d - [B_0 + B(\beta)] = 0 \quad (7)$$

ここに、 $\sigma$  は応力テンソル、 $\mathbf{D}$  は損傷テンソル、 $\bar{\sigma}$  は有効応力テンソル、 $\bar{\sigma}_d$  は有効損傷等価応力、 $B_0$  は初期損傷発生限界、 $\beta$  は総損傷、 $B(\beta)$  は  $\beta$  に依存する損傷限界増分である。有効損傷等価応力  $\bar{\sigma}_d$  は次式により与えられる。

$$\bar{\sigma}_d = \{ (1/2) \bar{\sigma}^T \bar{\mathbf{J}} \bar{\sigma} \}^{1/2} = \{ (1/2) \sigma^T \bar{\mathbf{J}} \sigma \}^{1/2} \quad (8)$$

ここに、

$$\bar{\mathbf{J}} = \mathbf{M}(\mathbf{D})^T \mathbf{J} \mathbf{M}(\mathbf{D})$$

式中、 $\mathbf{M}(\mathbf{D})$  は損傷効果テンソル、 $\mathbf{J}$  は損傷特性テンソル、 $\bar{\mathbf{J}}$  は有効損傷特性テンソルと呼ばれており、(8)式における  $\mathbf{M}(\mathbf{D})$  と  $\mathbf{J}$  の具体形については、文献8)を参照されたい。損傷特性テンソル  $\mathbf{J}$  には材料定数  $\mu$  が含まれ、 $\mathbf{J}$  が半正定値であるためには

$$-1/2 \leq \mu \leq 1 \quad (9)$$

でなければならない<sup>18)</sup>。

(7)式の損傷発生条件をポテンシャル関数とすれば、損傷発展方程式は次式のような形で表される。

$$\dot{\mathbf{D}} = \lambda_d (\partial F_d / \partial \sigma) = (\beta / 2 \bar{\sigma}_d) \bar{\mathbf{J}} \sigma$$

ここに、

$$\beta = 2 \{ (1/2) \dot{\mathbf{D}}^T \bar{\mathbf{J}}^{-1} \dot{\mathbf{D}} \}^{1/2}$$

物理的な理由により、負の損傷変化率は起こり得ない、すなわち、 $\dot{D}_i \geq 0$  と仮定すれば、 $\bar{\mathbf{J}}$  は半正定値マトリックスでなければならず、このための必要十分条件として

$$0 \leq \mu \quad (11)$$

が得られる<sup>6)</sup>。

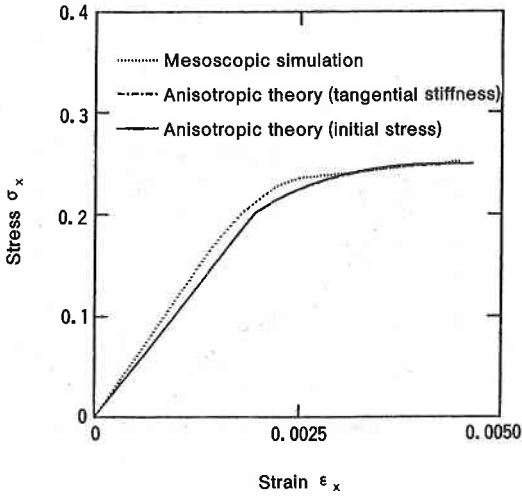
損傷体の応力・ひずみ関係は、次式により表される。

$$\epsilon = \mathbf{M}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{M} \sigma \quad (12)$$

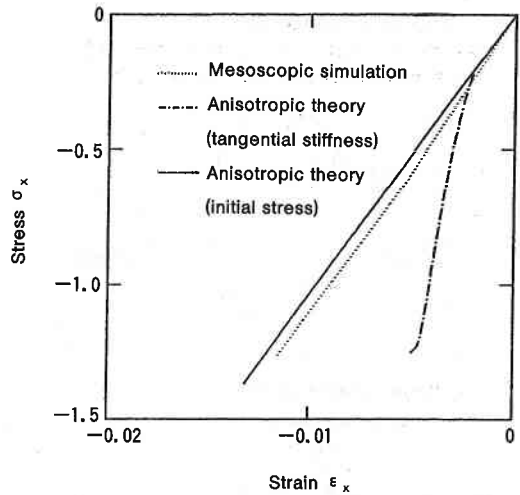
$\mathbf{C}^{-1}$  は、非損傷体のヤング率  $E_u$  およびポアソン比  $\nu_u$  の関数であり、その具体形は文献8)に与えられている。

文献8)で指摘したように、実際のマイクロクラッキング脆性固体では、 $\mu$  値に対する(11)式の制限が必ずしも満たされるとは限らず、(10)式の損傷発展方程式から計算される損傷変数変化率が負値をとる場合がある。この不合理は簡単には、(10)式により計算された負の損傷変数変化率を零と置くことにより回避できるが、Chow と Wang は、(12)式を接線剛性増分形に変換して有限要素定式化を行っており<sup>19)</sup>、(10)式が陰に増分形構成式に取り込まれた形になっているため、このような操作が行えない。

したがって本研究では、初期応力法に基づく定式化を



(a) 単軸引張り



(b) 単軸圧縮

図5 異方性損傷力学モデルによる応力・ひずみ関係

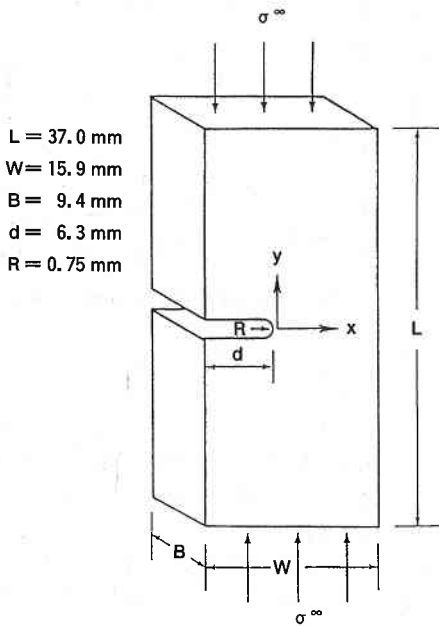


図6 圧縮応力を受けるノッチ付き試験片

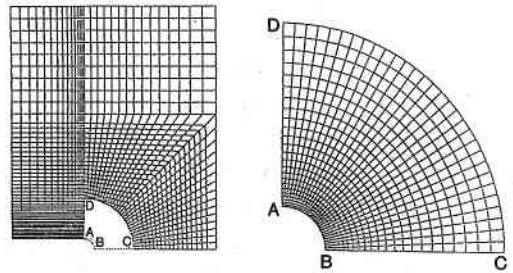


図7 ノッチ付き試験片の有限要素分割

ピック・シミュレーション結果と同様に線形弾性に近い挙動を示しており、初期応力法により負の損傷変数値を除去した効果が明らかである。なお、図5(a)に示した単軸引張りの場合を含む多軸引張り応力下においては、ChowとWangのモデルは顕著な破綻を見せないことを述べておく<sup>8)</sup>。

### 5. 改良された計算損傷力学モデルによる有限要素解析

改良された計算損傷力学モデルによるマクロスケールの有限要素解析例として、圧縮応力下におけるマクロクラック（ノッチ）近傍のマクロクラッキング挙動を解析した。ここでは既存の等方性理論モデルおよび異方性理論モデルを含むすべての計算損傷力学モデルで解析を行い、損傷力学モデルの相違がどれほど解に影響を与えるかを観察した。

問題および有限要素メッシュをそれぞれ図6と図7に示す。この問題は文献3)において、繰返し圧縮応力を受けるマクロクラッキング脆性固体の疲労破壊に関連して解析されている。本解析では、改良された等方性理論モデルにおける $\beta_Y$ および $\beta_P$ の値は図4に示したよう

行った。この定式化においては、初期応力項が損傷変数増分の関数として陽な形で与えられ、(10)式より計算された負の損傷変化率を零と置き換える操作を簡単に行うことができる。図5(b)の単軸圧縮挙動に対する異方性損傷力学モデルの計算結果とメソスコピック・シミュレーション結果の比較を見ると、接線剛性法による計算結果が負の損傷変数値に起因して不自然な硬化現象を呈しているのに対し、初期応力法による計算結果はメソスコ

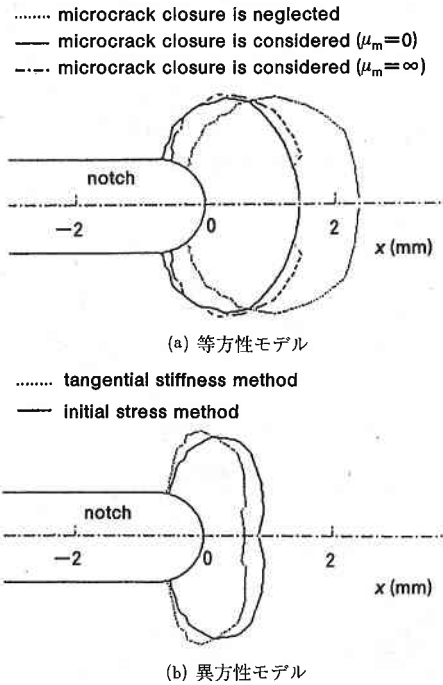


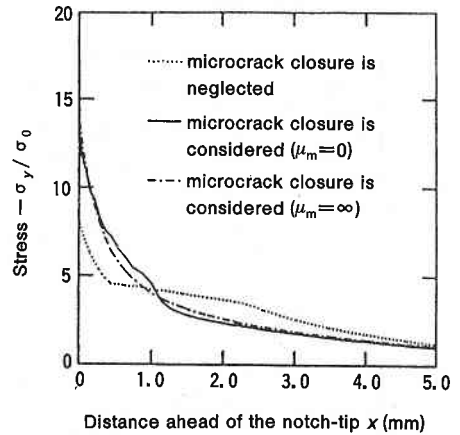
図8 ノッチ近傍の損傷領域

なメソスコピック・シミュレーションによる等価弾性定数図, また両理論モデルにおける他のすべての材料定数値は, 同一の2次元モデルに対する単軸問題のメソスコピック・シミュレーション結果に基づいて決定した。

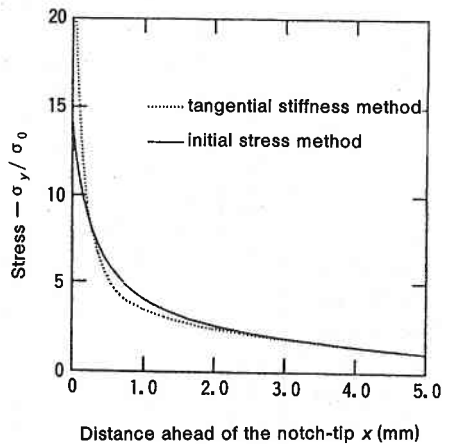
荷重レベル  $\sigma^\infty = \sigma_0$  の時のノッチ近傍の損傷領域と応力分布に関する解析結果をそれぞれ, 図8と図9に示す。図8と図9の結果を見ると, 改良された等方性モデルでは損傷領域がかなり小さくなり, ノッチ先端近傍の応力レベルが上昇して弾性変形時の応力分布に近くなっていることがわかる。これは, 圧縮応力時のマイクロクラックの閉鎖が考慮されたことより, マイクロクラッキングによる弾性定数変動 (特にヤング率の大幅な低下) が抑制されたことに起因する。また, 改良された異方性モデルでは損傷領域が若干大きくなっており, ノッチ先端の応力レベルは大きく低下していることがわかる。これは, 元のモデルにおける負の損傷変化率に起因した不合理な硬化現象が除去されたためである。マイクロクラックの閉鎖を考慮した等方性損傷力学モデルによる解析結果と, 初期応力法に基づく異方性損傷力学モデルによる解析結果は, 既存モデルによる結果と比較して明らかに合理的である。なお, 両者の隔たりは異方性理論に対する等方性理論の限界を表している。

6. 結 言

マイクロクラッキング脆性固体の構成挙動に対し, メ



(a) 等方性モデル



(b) 異方性モデル

図9 ノッチ近傍の応力分布

ソ力学モデルによるメソスケールのシミュレーションを行い, その結果を利用して既存の計算損傷力学モデルを改良した。さらに, 改良した損傷力学モデルをマイクロクラッキング脆性固体のマクロスケールの有限要素解析に応用し, 改良の効果を確認した。本手法のような階層的なアプローチは, マイクロクラッキング脆性固体を含む種々の構造を有する材料 (structured materials) の構成挙動あるいは構造挙動の解明に有用と思われる。本研究の詳細については, 文献(7)~(11)などを参照されたい。

なお, 本文中の数値例は東京大学生産技術研究所の諸正信助手<sup>20)</sup>, 同大学院の清末考範君<sup>21)</sup>による。ここに記して謝意を表する。

(1993年6月11日受理)

参 考 文 献

- 1) Kachanov, L. M., Introduction to Continuum Damage Mechanics, Martinus Nijhoff Publishers, (1986).
- 2) Charalambides, P. G. and McMeeking R. M., Finite ele-

- ment method of crack propagation in a brittle microcracking solid, *Mechanics of Materials*, 6 (1987), 71-87.
- 3) Brockenbrough, J. R. and Suresh, S., Constitutive behavior of a microcracking brittle solid in cyclic compression, *J. Mech. Phys. Solids*, 35 (1987), 721-742.
  - 4) Toi, Y. and Atluri, S. N., Finite element analysis of static and dynamic fracture of brittle microcracking solids (Part 1: formulation and simple numerical examples), *Int. J. Plasticity*, 6-2 (1990), 169-188.
  - 5) Toi, Y. and Atluri, S. N., Finite element analysis of static and dynamic fracture of brittle microcracking solids (Part 2: stationary and growing macrocracks under static loading), *Int. J. of Plasticity*, 6-3 (1990), 263-280.
  - 6) Chow, C. L. and Lu, T. J., A continuum damage mechanics approach to crack tip shielding in brittle solids, *Int. J. of Fracture*, 50 (1991), 79-114.
  - 7) 都井 裕・諸 正信, 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 (その 1: 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), *日本機械学会論文集(A)*, 59-557 (1993), 240-247.
  - 8) 都井 裕・諸 正信, 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 (その 2: 連続体損傷力学における異方性理論モデルに関する考察), *日本機械学会論文集(A)*, 59-557 (1993), 248-255.
  - 9) 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)*, 59-563 (1993)印刷中
  - 10) 都井 裕・清末考範, マイクロクラッキング脆性固体の 3次元メソ解析と計算損傷力学モデルの改良 (その 1: 等方性理論モデル), *日本機械学会論文集(A)*, 投稿中
  - 11) 都井 裕・清末考範, マイクロクラッキング脆性固体の 3次元メソ解析と計算損傷力学モデルの改良 (その 2: 等方性理論モデル), *日本機械学会論文集(A)*, 投稿中
  - 12) Haritos, G. K., Hager, J. W., Amos, A. K. and Salkind, M. J., Mesomechanics: the microstructure-mechanics connection, *Int. J. Solids Structures*, 24-11 (1988), 1081-1096.
  - 13) 浅野孝夫・今井 浩: 計算アルゴリズム, オーム社, (1986).
  - 14) 都井 裕・清末考範, 多結晶脆性体のマイクロクラッキング挙動の準微視的シミュレーション (その 3: 3次元手法への拡張と計算例), *生産研究*, 44-5 (1992), 234-237.
  - 15) Fu, Y. and Evans, A. G., Some effects of microcracks on the mechanical properties of brittle solids (I. stress, strain relations), *Acta metall.*, 33-8 (1985), 1515-1523.
  - 16) Owen, D. R. J. and Hinton E., *Finite Elements in Plasticity*, Pineridge Press, (1980).
  - 17) Budiansky, B. and O'Connell, R. J., Elastic moduli of a cracked solid, *Int. J. Solids Structures*, 12 (1976), 81-97.
  - 18) Chow, C. L. and Wang J., An anisotropic theory of continuum damage mechanics for ductile fracture, *Engineering Fracture Mechanics*, 27-5 (1987), 547-558.
  - 19) Chow, C. L. and Wang J., A finite element analysis of continuum damage mechanics for ductile fracture, *Int. J. of Fracture*, 38 (1988), 83-102.
  - 20) 諸 正信, マイクロクラッキング脆性固体の計算損傷力学モデルに関する研究, *東京大学学位論文*, (1993).
  - 21) 清末考範, マイクロクラッキング脆性固体の 3次元メソスコピック・シミュレーションと連続体損傷力学モデルの構成, *東京大学修士論文*, (1993).