

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2：比例荷重下における連続体損傷力学・等方性モデルに関する考察——

Mesoscopic Simulation of Microcracking Behaviors of Brittle Polycrystalline Materials

——Part 2: Consideration of the Isotropic Continuum Damage Mechanics Model Under Proportional Loading——

都 井 裕*・諸 正 信*
Yutaka TOI and Jung-Sin CHE

1. 序

著者らは文献1)において、多結晶脆性体のマイクロクラッキング挙動に対するメソスコピック・シミュレーション手法（連続体力学と分子動力学の中間に位置する結晶粒レベルの準微視的シミュレーション）を提案し、文献2)～4)においては、ランダムに分布したマイクロクラックを有する脆性固体の弾性コンプライアンスを計算し、その結果を連続体損傷力学に基づく有限要素解析において活用した。

本報告では、比例負荷を受ける多結晶脆性体のマイクロクラッキング挙動に対する種々の2次元メソスコピック・シミュレーションを行い、比例荷重下における連続体損傷力学・等方性モデル^{5)～8)}の妥当性について検討した結果を報告する。ここで、検討対象とする連続体損傷力学モデルは、Budiansky and O'Connellによる等方的マイクロクラックを仮定した弾性コンプライアンス解⁹⁾、およびFu and Evansによる単一損傷変数発展解¹⁰⁾に基づくような、等方性理論モデルである。

メソスコピック・シミュレーションにおいては、多結晶脆性体の結晶粒界に発生するマイクロクラックの安定性（伝播しない）を仮定する。すなわち、多結晶脆性体において、熱的異方性に起因して発生する残留応力は、隣接結晶粒界において交互に引張り、圧縮を繰り返す傾向があり、引張り残留応力を有する結晶粒界で発生したマイクロクラックは、隣接粒界の圧縮残留応力によりアレストされ、マイクロクラックの安定性が現れる¹¹⁾。

2. 2次元のメソスコピック・シミュレーションモデル

Fig. 1に、本研究で用いた2次元のメソスコピック・シミュレーションモデルを示す。ポロノイ分割手法により、ランダムな形状の多角形メッシュを発生させ、各多角形を結晶粒と見なし、これを剛体と仮定する。メッシュ境界線、すなわち、結晶粒界と見なす部分に、隣接結晶

*東京大学生産技術研究所 第2部

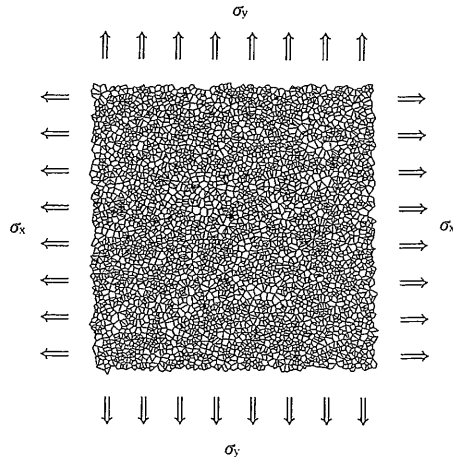


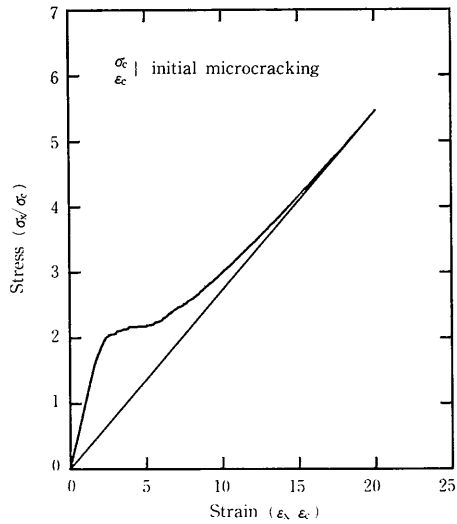
Fig. 1 Analyzed polycrystalline material model

粒間の相対変位に抵抗する、垂直ばね、せん断ばね、回転ばねより成るばね系を配置する。各結晶粒の重心点に2次元剛体変位の3自由度を配し、各ばね系に対する剛性方程式を全ばね系について足し込むことにより、全体系の平衡方程式を得る。各結晶粒界におけるばね定数は、マイクロクラックの存在、開閉、表面摩擦の有無などにより、適宜コントロールされる。マイクロクラックは、結晶粒界端部の垂直応力がある限界値に達したときに発生すると仮定し、マイクロクラック発生直後には、結晶粒界表面力の解放計算が行われる。Fig. 1のモデルにおける結晶粒数は4453である。計算法の詳細は、文献1)～4)を参照されたい。

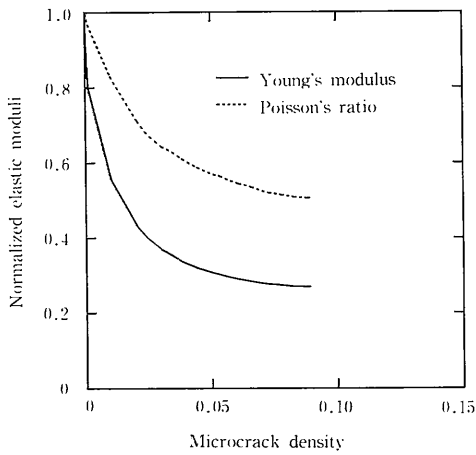
3. 単軸構成式に関する考察

Fig. 2に単軸引張り挙動の計算結果を示す。図(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

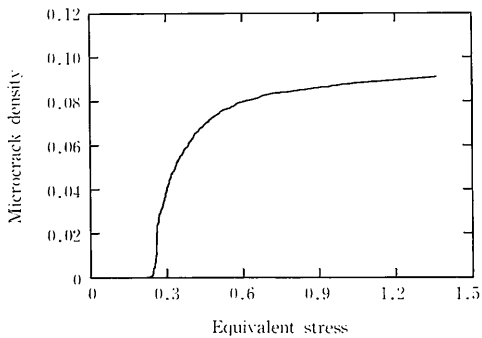
研究速報



(a) stress-strain relation



(b) elastic moduli versus microcrack density



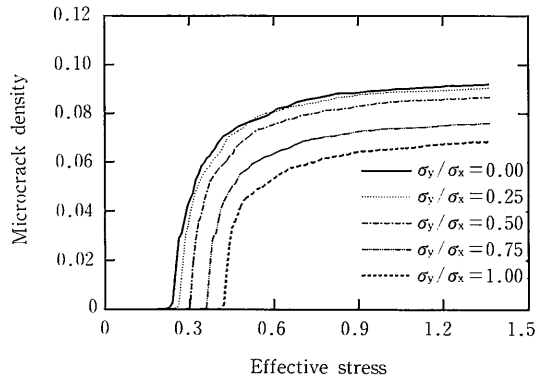
(c) microcrack density versus equivalent stress

Fig. 2 Results for uniaxial tension

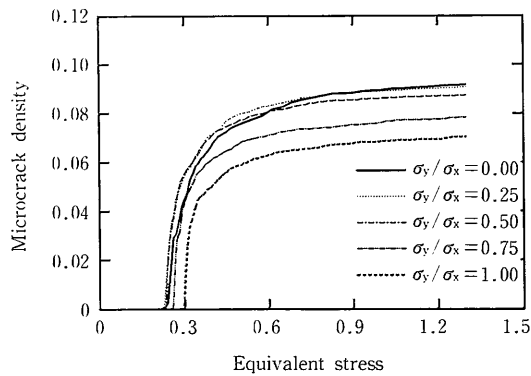
の議論に一般に用いられている、典型的な多結晶脆性体の応力・ひずみ関係^{7,8)}と同様の関係が得られている。また、図(b)のマイクロクラック密度と弾性定数の関係より、ヤング率とポアソン比は、Budiansky and O'Connellの理論解析結果⁹⁾のように、マイクロクラック密度の増大に対し、同じ割合では低減しないことがわかる。これは、Budiansky and O'Connellの解析ではランダムに分布したマイクロクラックが仮定されているのに対し、単軸引張りにより発生するマイクロクラックは明らかな方向性を有していることに起因する (Fig. 4(a)を参照)。すなわち、Budiansky and 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できない。図(c)の相当応力とマイクロクラック密度の関係は、Fu and Evansにより解析的に求められている指数関係⁶⁾と良好に対応している。

4. 多軸構成式に関する考察

Fig. 3は、2軸引張り挙動の計算より得られた、相当応力とマイクロクラック密度の関係である。Fig. 3の



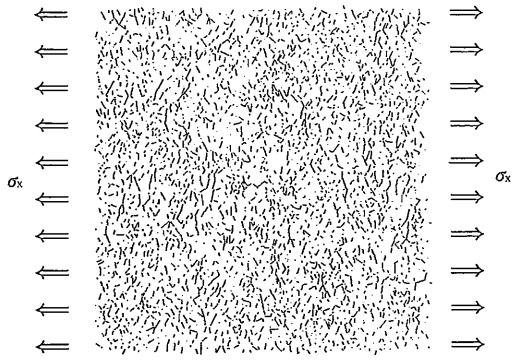
(a) effective stress (Fu and Evans)



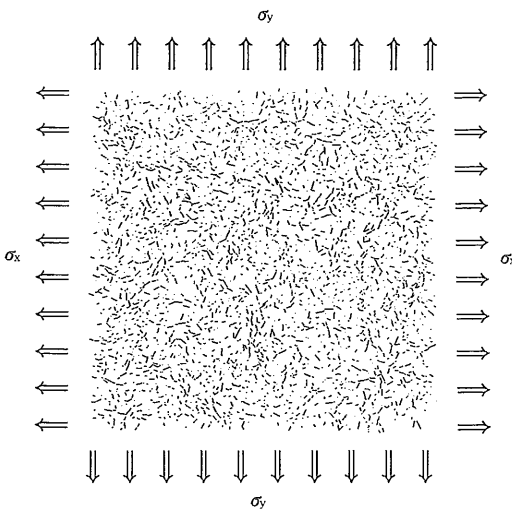
(b) equivalent stress (von Mises)

Fig. 3 Microcrack density versus equivalent stress under biaxial tension

研究速報



(a) uniaxial tension ($\sigma_y/\sigma_x=0.0$)



(b) biaxial tension ($\sigma_y/\sigma_x=1.0$)

Fig. 4 Patterns of microcracks

(a)図と(b)図の比較からわかるように, Fu and Evans による有効応力 ($\sigma_e = (\sigma_x^2 + \sigma_y^2)^{1/2}$)⁶⁾よりも, Misesの相当応力 ($\sigma_e = (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 - \sigma_x\sigma_y)^{1/2}$)で整理した方が, 2軸応力比による結果のばらつきが小さく, 多軸のマイクロクラッキング挙動をよく説明する. したがって, 以下の計算においては, 相当応力としてMisesの定義を用いた. なお, Fig. 3に見られるように, マイクロクラック密度の飽和値は, 2軸応力比により, かなり異なった値をとり, 単軸に近い場合に大きな値をとる. これは, Fig. 4に示すように, 単軸の場合と2軸の場合とで, マイクロクラックの発生パターンが全く異なり, Fig. 5に示すように, 単軸の場合にはより長いマイクロクラックの比率が増すことに起因する.

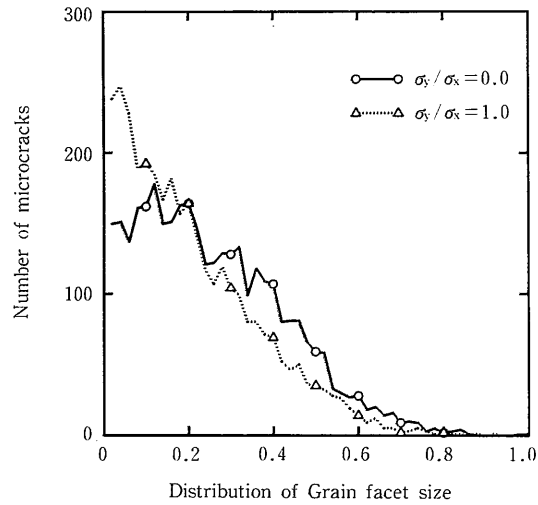


Fig. 5 Statistics of microcracks

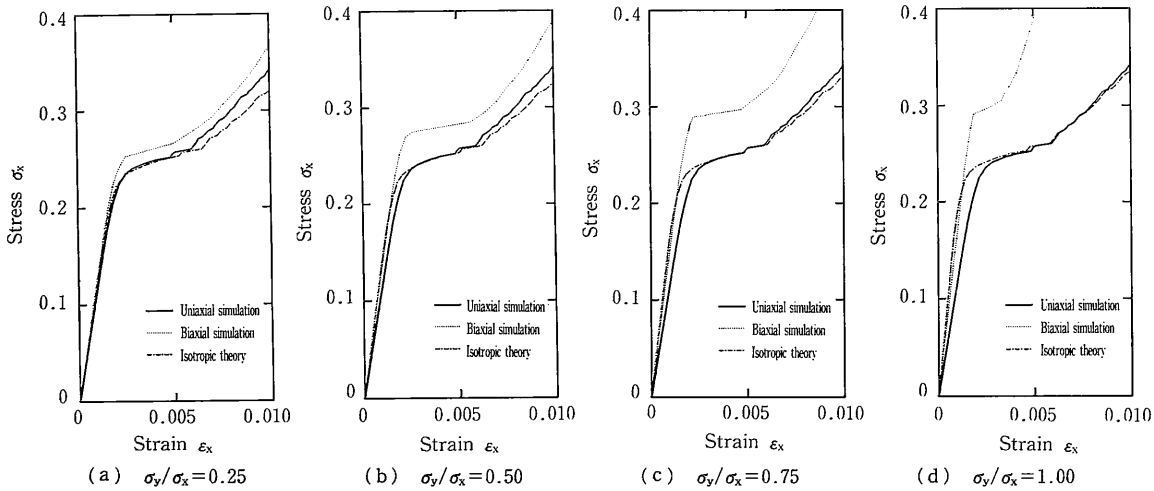


Fig. 6 Stress-strain relations

研究速報

Fig. 6には、応力比を変えた場合の2軸引張りシミュレーション結果を、単軸引張りシミュレーション結果、および単軸結果を連続体損傷力学における等方性理論モデルにより2軸に一般化した計算結果を、比較して示す。これらの図からわかるように、単軸に近い場合には、この連続体損傷力学理論は、ほぼ正当な結果を与えるが、応力比が1に近づくほど、次第に精度が失われてゆく。この点を改善するためには、マイクロクラックの異方性の考慮された連続体損傷力学理論を構成する必要がある。

5. 結 言

多結晶脆性固体のマイクロクラッキング挙動に対する2次元メソスコピック・シミュレーションを行い、比例荷重下における連続体損傷力学・等方性モデルの妥当性について検討した。本シミュレーションより得られた知見を以下に列挙する。

- (1) マイクロクラックの安定性を仮定することにより、マイクロクラックの飽和現象を含む、多結晶脆性固体の典型的な構成挙動のシミュレーションが可能となる。
- (2) 単軸引張り応力下における、ヤング率とポアソン比の低減率は等しくない。これは、マイクロクラックパターンの異方性に起因する。また、マイクロクラック密度との関係も線形的ではない。これらは、Budiansky and O'Connellの理論の適用限界を示している。
- (3) 相当応力とマイクロクラック密度の関係は指数関数的であり、Fu and Evansの理論解析結果と対応する。
- (4) 多軸の場合の相当応力としては、Fu and Evansの有効応力よりもMisesの相当応力が適当である。
- (5) マイクロクラック密度の飽和値は、単軸状態に近いほど大きく、完全な2軸状態に近いほど小さい。これは、応力比により、マイクロクラックパターンの異方性の程度が異なることに起因する。
- (6) (2), (5)などの要因により、マイクロクラック

クパターンの等方性を仮定した連続体損傷力学の等方性理論により求められる多軸の構成関係は、多軸応力比に依存して、大きな誤差を含むようになる。

(1992年2月4日受理)

参 考 文 献

- 1) 都井・諸：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(ヴォロノイ分割メッシュによる剛体・ばねモデルの応用), 生産研究, 第42巻, 第7号, (1990), 444~447.
- 2) 都井・諸：メソスコピック・シミュレーションを援用した脆性固体の連続体損傷力学解析, 第10回シミュレーション・テクノロジー・コンファレンス発表論文集, 日本シミュレーション学会, (1991), 47~50.
- 3) 都井・諸：マイクロクラックの閉鎖を考慮した脆性固体の連続体損傷力学解析, 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集, 第15巻, (1991), 473~478.
- 4) Y. Toi and J. -S. Che: Continuum Damage Mechanics Analysis of Brittle Polycrystalline Solids with the Aid of Mesoscopic Simulation of Microcracking, (1991), submitted.
- 5) B. Budiansky and R. J. O'Connell: Elastic Moduli of a Cracked Solid, Int. J. Solids Structures, Vol. 12, (1976), 81~97.
- 6) Y. Fu and A. G. Evans: Some Effects of Microcracks on the Mechanical Properties of Brittle Solids (I. Stress, Strain Relations), Acta Metall., Vol. 33, (1985), 1515~1523.
- 7) P. G. Charalambides and R. M. McMeeking: Finite Element Method of Crack Propagation in a Brittle Microcracking Solid, Mechanics of Materials, Vol. 6, (1987), 71~87.
- 8) Y. Toi and S. N. Atluri: Finite Element Analysis of Static and Dynamic Fracture of Brittle Microcracking Solids (Part I: Formulation and Simple Numerical Examples), Int. J. of Plasticity, Vol. 6, (1990), 169~188.