

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——

Mesoscopic Simulation of Microcracking Behaviors of Brittle Polycrystalline Materials
——Part 3: Extension to Three-Dimensional Method and Numerical Examples——

都 井 裕*・清 末 考 範*
Yutaka TOI and Takanori KIYOSUE

1. 序

本研究の(その1)で、多結晶脆性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・シミュレーション手法を提案した¹⁾。続いて、文献2)において、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。さらに、本研究の(その2)においては、比例負荷を受ける多結晶脆性固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の等方性モデルの妥当性について検討した。

本報告では、これを3次元のメソスコピック・シミュレーション手法に拡張し、応用例として、ランダムに分布したマイクロクラックを有する3次元脆性固体の、引張りおよび圧縮応力下の弾性コンプライアンスを計算し、マイクロクラックの閉鎖および表面摩擦の影響を明らかにする。

2. 3次元剛体・ばねモデル

多結晶脆性固体の3次元メソスコピック・シミュレーションにおいては、各結晶粒を1剛体多面体要素、結晶粒界を隣接要素を結合するばね系にモデル化する。本節では、このような3次元剛体・ばねモデルの定式化について述べる。

Fig. 1のように、6種類のばね、 $k_x, k_y, k_u, k_{rx}, k_{ry}, k_{rz}$ により結合された2つの任意多面体要素を考える。ここで要素Aの重心点変位を $(a_1^A, a_2^A, a_3^A, a_4^A, a_5^A, a_6^A)$ とする。ただし、 a_1^A, a_2^A, a_3^A はそれぞれ、 x_A, y_A, z_A 軸方向の並進変位、 a_4^A, a_5^A, a_6^A はそれぞれ x_A, y_A, z_A 軸まわりの回転変位である。要素内の任意の点 (x_A, y_A, z_A) における変位 (u_A, v_A, w_A) は、微小回転を仮定すると、次式の剛体変位関数により表わされる。

*東京大学生産技術研究所 第2部

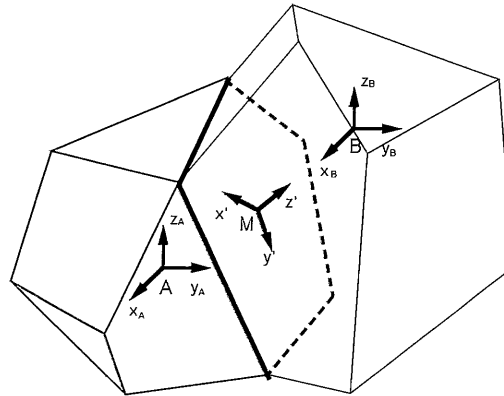


Fig. 1 Three-dimensional polyhedron RBSM

$$\begin{aligned} u_A &= a_1^A - a_6^A y_A + a_5^A z_A \\ v_A &= a_2^A - a_4^A z_A + a_6^A x_A \\ w_A &= a_3^A - a_5^A x_A + a_4^A y_A \end{aligned} \quad (1)$$

要素Bについても、変位関数を同様に表現することができる(添字Aが添字Bに置き換わる)。

要素境界面上の点M(通常は中心点をとる)における相対変位を $(\delta_x, \delta_y, \delta_z, \phi_x, \phi_y, \phi_z)$ とする。ただし、 $\delta_x, \delta_y, \delta_z$ は要素境界座標系の x', y', z' 軸方向の並進相対変位、 ϕ_x, ϕ_y, ϕ_z は、 x', y', z' 軸まわりの回転相対変位である。相対変位ベクトル $\{d\}$ は次式により計算される。

$$\begin{aligned} \{d\} &= [B]\{a\} \\ \text{ここに、} \\ \{d\}^t &= [\delta_x, \delta_y, \delta_z, \phi_x, \phi_y, \phi_z] \\ \{a\}^t &= [a_1^A, \dots, a_6^A, a_1^B, \dots, a_6^B] \end{aligned} \quad (2)$$

[B]マトリックスの具体形をTable 1に示す。

各相対変位成分に抵抗するばねに生ずる内力ベクトル $\{s\}$ と相対変位ベクトル $\{d\}$ の関係は次式により与えられる(式中、「……」は対角マトリクス)。

$$\{s\} = [D]\{d\}$$

Table 1 Matrix [B] in eq. (2)

	a_1^A	a_2^A	a_3^A	a_4^A	a_5^A	a_6^A
δ_x	-1_x^A	$-m_x^A$	$-n_x^A$	$m_x^A z^A - n_x^A y^A$	$n_x^A x^A - 1_x^A x^A$	$1_x^A y^A - m_x^A x^A$
δ_y	-1_y^A	$-m_y^A$	$-n_y^A$	$m_y^A z^A - n_y^A y^A$	$n_y^A x^A - 1_y^A x^A$	$1_y^A y^A - m_y^A x^A$
δ_z	-1_z^A	$-m_z^A$	$-n_z^A$	$m_z^A z^A - n_z^A y^A$	$n_z^A x^A - 1_z^A x^A$	$1_z^A y^A - m_z^A x^A$
ϕ_x	0	0	0	-1_x^A	$-m_x^A$	n_x^A
ϕ_y	0	0	0	-1_y^A	$-m_y^A$	n_y^A
ϕ_z	0	0	0	-1_z^A	$-m_z^A$	$-n_z^A$

Replacements for 7~12 columns in 1~6 columns:
 $-1_x^A, -m_x^A, -n_x^A, \dots, -n_z^A \rightarrow 1_x^B, m_x^B, n_x^B, \dots, n_z^B$
 $x_A, y_A, z_A \rightarrow x_B, y_B, z_B$

ここに,

$$\{s\}^t = [N_x, N_y, N_z, M_x, M_y, M_z] \quad (3)$$

$$[D] = [k_{px}, k_{py}, k_{rx}, k_{ry}, k_{rz}]$$

以上の関係式を剛体要素境界面のばね系に対する仮想仕事式に代入すれば, 次の剛性方程式を得る.

$$[k]\{a\} = \{f\}$$

ここに,

$$[k] = [B]^t [D] [B] \quad (4)$$

$$\{f\}^t = [f_x^A, f_y^A, f_z^A, t_x^A, t_y^A, t_z^A, f_x^B, f_y^B, f_z^B, t_x^B, t_y^B, t_z^B]$$

なお(3)式のばね定数は, 境界面の面積を A, 単位面積当たりの垂直ばね定数およびせん断ばね定数をそれぞれ k_n, k_s とすれば, 次のように計算される.

$$k_{px} = A \cdot k_s$$

$$k_{py} = A \cdot k_s$$

$$k_{pz} = A \cdot k_n \quad (5)$$

$$k_{rx} = \int_A |y'| dA \cdot k_n$$

$$k_{ry} = \int_A |x'| dA \cdot k_n$$

$$k_{rz} = \int_A \{(x')^2 + (y')^2\}^{1/2} dA \cdot k_s$$

3. 3次元ヴォロノイ分割メッシュ

本研究では, 3次元結晶粒分割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. 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.

$$V(X_i) = \cap_j \{X \mid d(X_i, X) \leq d(X_j, X)\} \quad (6)$$

ただし, Xは領域V(X_i)点, $d(X_i, X)$ は X_i, X 間のユークリッド距離を意味する.

このとき, 隣接するヴォロノイ分割要素の要素境界面は, 各要素の母点の垂直2等分面となることを利用して, 3次元ヴォロノイ分割メッシュ作成プログラムを作成した. すなわち, まず勢力圏の初期値として $V^{(0)}(X_i)$ を仮定する. これはメッシュ分割前の全体領域であり, 分割後の $\cup_i V(X_i)$ 相当する. 次に, 2母点 X_i, X_j の垂直2等分面により $V^{(0)}(X_i)$ を切断, その X_i 側を $V^{(1)}(X_i)$ とするこ

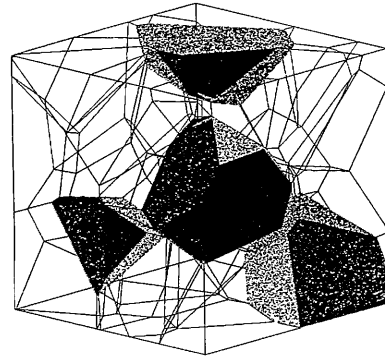
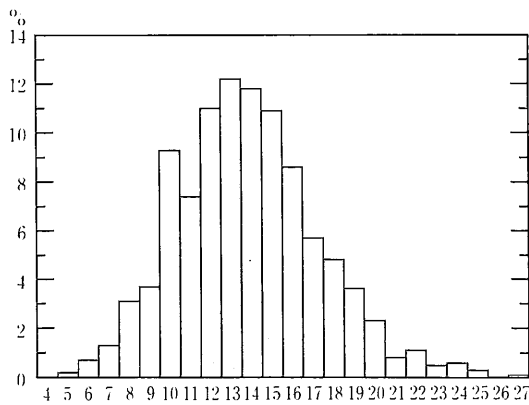
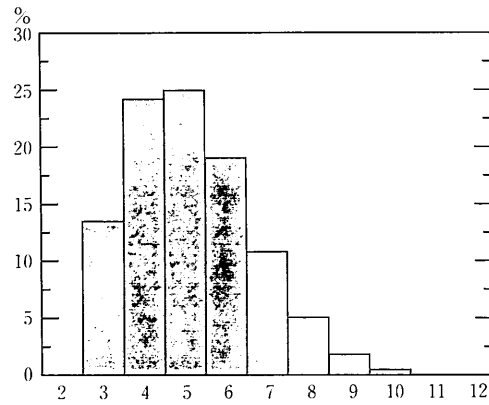


Fig. 2 Three-dimensional Voronoi tessellation mesh



(a) number of facets of each polyhedron



(b) number of edges of each facet

Fig. 3 Statistics of the generated mesh

研 究 速 報

とを X_i 以外のすべての母点 X_j について繰り返す。こうして得られた $V(X_i)$ は(6)式の条件を満たす。実際には余分な計算を省くため、 X_j を $d(X_i, X_j)$ について小さい順にソートし、 $\max\{V(X_i), X_i\} < (1/2)d(X_i, X_j)$ が成立した点で分割を終了している。

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分割要素の例をFig. 2 (40分割要素) に示す。

実際の3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、面当たりの辺数は3~8程度である⁵⁾。1000分割要素による結果は、面数および面当たりの辺数に関し、Fig. 3に示すように、この事実とよく対応していることがわかる。3次元ヴォロノイ分割発生のため計算時間は、8000分割要素の場合で数時間(Stellar GS-1000)を要した。

4. マイクロクラック密度と弾性係数の関係

4.1 単軸引張りに対する弾性係数

あらかじめランダムにマイクロクラックを発生させた立方体形の脆性体に0.1%の単軸引張りの強制変位をあたえ、マイクロクラックが存在しない場合と比較した弾性定数の低減率を求めた。引張り応力下においては、マイクロクラックの閉鎖の影響は小さいと予想されるため、これを無視したシミュレーションを行った。ヴォロノイ分割による要素数(結晶粒数)は8000である。マイクロクラック密度 ξ は、

$$\xi = (2N/\pi) \langle A^2/P \rangle \quad (6)$$

と定義される⁴⁾。ここに、 N は単位体積当た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

$\langle \quad \rangle$ は平均値を意味する。

計算結果をFig. 4に示す。図(a)と図(b)はそれぞれ、ヤング率およびポアソン比とマイクロクラック密度の関係を示している(添字 u は非損傷体の弾性係数、添字 m は損傷体の弾性係数を意味する)。Budiansky and O'Connellによる近似理論解⁶⁾によれば、ヤング率、ポアソン比ともにマイクロクラック密度の増大に対し、線形的に同じ割合で低減し、マイクロクラック密度値9/16で両者は零となる。また、ヤング率の低減率は、ポアソン比(初期値)の値によらない。これに対し、本計算結果においては、ヤング率とポアソン比は異なった低減傾向を示し、マイクロクラック密度0.3程度の値で、零値をとる。また、ヤング率の低減率はポアソン比に若干依存する傾向を示している。

4.2 単軸圧縮に対する弾性係数

続いて、マイクロクラックの閉鎖に関し次の3種類の仮定を設けて、0.1%の単軸圧縮の強制変位を与えた場合の計算を行った。[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、表面摩擦の存在は無視(摩擦係数零)、[C] マイクロクラックの閉鎖を考慮、表面摩擦も考慮(摩擦係数無限大)。

計算結果をFig. 5 (初期ポアソン比0.2) に示す。仮定[A]による計算結果は、引張り応力下の計算結果と同じである。仮定[B]による計算結果においては、ヤング率の低下率が小さくなり、ポアソン比は0.5に向って上昇している。仮定[C]による計算結果においては、ヤング率、ポアソン比ともに変動は相対的に小さい。これらの計算結果は、定性的に文献2)における2次元メソスコピックシミュレーション結果と類似している。すなわち、

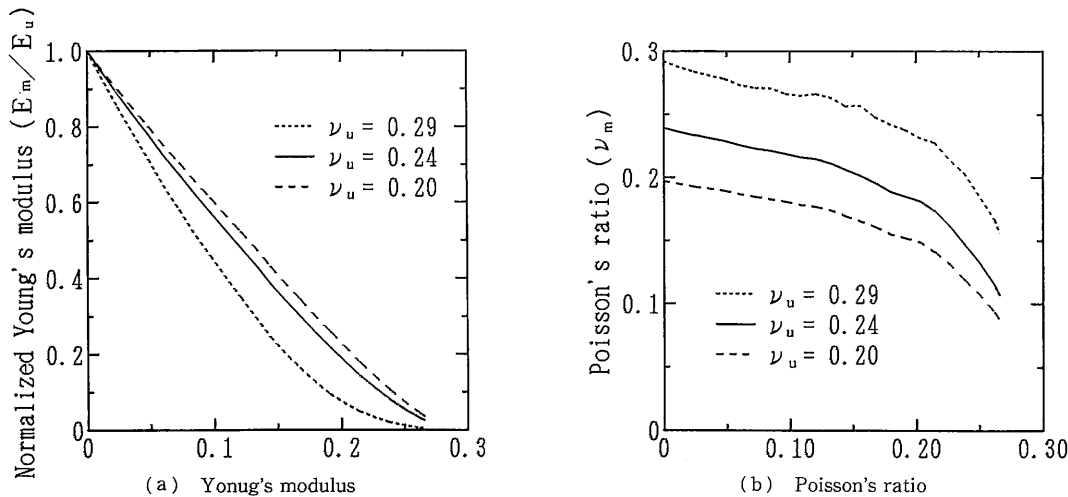


Fig. 4 Elastic moduli versus microcrack density under uniaxial tension

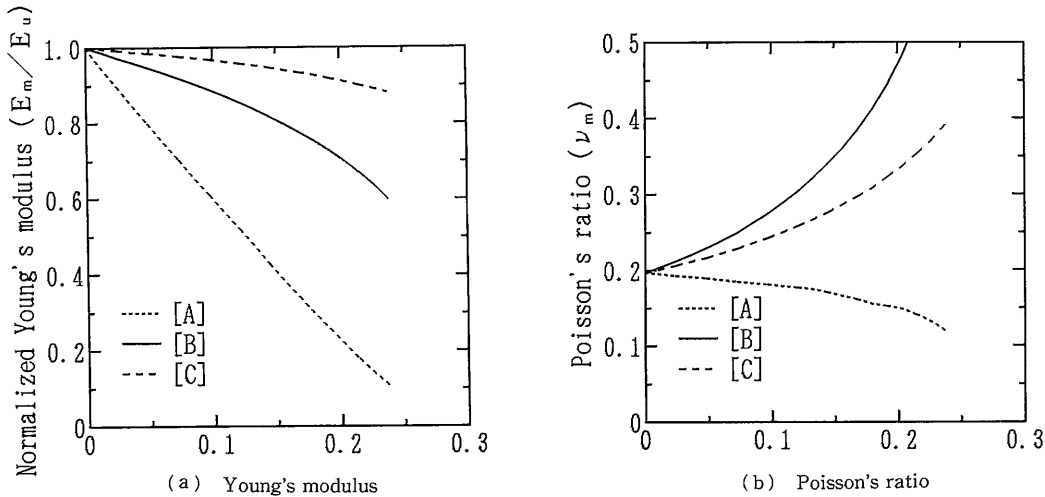


Fig. 5 Elastic moduli versus microcrack density under uniaxial compression

仮定 [B] による計算では、多数 (60~70%程度) のマイクロクラックの閉鎖により、ヤング率の低減率が低下し、マイクロクラック表面の摩擦係数を零としているために、非圧縮変形場 (すべり線場) のポアソン比 0.5 に漸近する。また、仮定 [C] による計算ではさらに、閉鎖したマイクロクラック表面の摩擦係数を無限大と仮定しているため、弾性係数の変動が最も小さい。

なお、本計算では総自由度数が 48000 とかなり大きく、マイクロクラック密度を少しずつ変えたパラメータ計算、あるいはマイクロクラックの閉鎖を考慮するための反復計算などが必要となる。また、剛性マトリックスは、バンド内でも非零成分が疎であるという特徴がある。そこで、このような連立方程式の解法に適した共役傾斜法をスーパーコンピュータ用にチューニングしたプログラムを作成し、求解演算に用いた。その際、収束性を向上させるため、係数マトリックスの対角要素にスケールを施している⁶⁾。1 回の求解演算に要した計算時間は 1 分以内であった (使用計算機 S820/80E)。

5. 結 言

多結晶脆性固体の 3 次元のメソスコピック・シミュレーション手法を提案した。応用例として、ランダムに分布したマイクロクラックを有する 3 次元脆性固体の、単軸引張りおよび単軸圧縮応力下の弾性係数 (ヤング率

およびポアソン比) を計算し、マイクロクラックの閉鎖および表面摩擦の影響を明らかにした。

(1992年2月5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) Y. Toi and J.-S. Che: Continuum Damage Mechanics Analysis of Brittle Polycrystalline Solids with the Aid of Mesoscopic Simulation of Microcracking, (1991), submitted.
- 3) 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—その2. 比例荷重下の連続体損傷力学・等方性モデルに関する考察—, 生産研究, 第44巻, 第5号, (1992).
- 4) B. Budiansky and R. J. O'Connell: Elastic Moduli of a Cracked Solid, Int. J. Solids Structures, Vol. 12, (1976), 81~97.
- 5) R. W. Davidge: Cracking at Grain Boundaries in Polycrystalline Brittle Materials, Acta Metall., Vol. 29, (1981), 1695~1702.
- 6) 吉田・中川・田中: 共役勾配法を基礎とする連立一次方程式解法の効率化に関する考察, 土木学会論文集, No.437, (1991), 173~182.