

破壊のモデリングと数値シミュレーション

東北大学 電気通信研究所 早川 美徳¹

1 はじめに

最近、物質設計の立場から、脆性破壊や延性などを分子・原子のレベルから明らかにしようとする研究が盛んになりつつある。こうした研究の有効な手法として、非常に大規模な分子動力学シミュレーションも行なわれており、ミクロなレベルから、破壊の「リアル」な描像が得られつつある。

その一方で、物質の絶対的な強度などを問題にしなければ、マクロな連続体描像でも現象がうまく説明できる場合がある。はたして、このようなマクロな現象にも化学結合の詳細が顔を出す余地はあるのだろうか？

この発表では、準静的な脆性破壊と高速破壊のいくつかの事例について、マクロなモデリングとシミュレーションを紹介し、計算モデルや数値解析の可能性と限界について考えるとともに、最近の大規模シミュレーション等についても紹介した。

2 準静的破壊

脆性物質に亀裂が入っていて、その亀裂面が融合も進行もせず、殆ど「止まって」見えるような系で外部から歪みをゆっくりと調整すると、亀裂の位置を制御できる場合がある。平田森三は熱したガラスをゆっくりと水に沈めて冷却し熱歪みによって亀裂を生成させるという実験を行っているが、これは、一般に制御不可能という印象の強い亀裂を実験的に制御した、興味深い事例である。この系について、Yuse と Sano はいくつかの興味深い亀裂パターンを見いだすとともに、それらの転移について現代的な実験系で定量的な測定を行なった [1]。

実験の概略は以下のとおりである。十分に薄く縦方向に長いガラス板をヒーターで一旦過熱しながら、ゆっくりとした速度 V で水中に浸していく。ガラス板の下降速度 V と、ヒーターと水の温度差 ΔT を調節しながら注意深く実験を行なうと、 V と ΔT の増加に伴い、真っ直ぐな亀裂が定常的にガラス中を進行しはじめる。この時、亀裂の進行速度はガラス板の下降速度 V そのものである。これらの制御パラメータを増加させると、直進亀裂が Hopf 分岐して振動を始め、波状の亀裂が見いだされる。さらに、パラメータの増加とともに、不規則な振動、複数亀裂の共存など、多様な亀裂形成が高い再現性をもって観察される。

このような系では、亀裂の進行速度はガラス板の沈降速度 V によって制御されているものの、ガラスのどの部位を亀裂が進展するのかについての自由度は依然残されている。よって、実験条件を変えた場合に、どのような経路で亀裂が進展するか (亀裂のパス) が問題となる。

¹現在の所属: 東北大学 理学部 E-mail: hida@cmpt.phys.tohoku.ac.jp

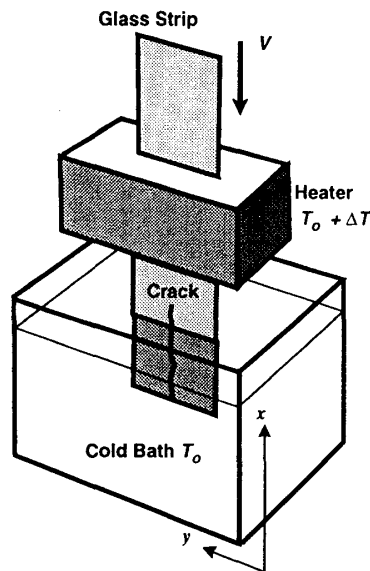


図 1: 熱歪みによるガラスの準静的破壊の実験系

物体内に長さ s の亀裂が存在し、それが仮想的に δs だけ進展したとする。このとき弾性エネルギー $E_e(s)$ と亀裂の表面エネルギー $s\Gamma$ を考慮した系の自由エネルギー $F = E_e + s\Gamma$ を考えると、熱力学的な平衡状態が実現される条件から、 $\Gamma = \delta E_e / \delta s, \delta^2 F / \delta s^2 > 0$ であるような状態で亀裂は止まっているはずである。

ところが、このガラスの実験のように、ゆっくりとではあれ加えられる歪みが増えると、この釣り合いは破れ、亀裂はある方向に進展する。亀裂が滑らかなパスを描く場合 (例えば、ガラスの実験ではそのように見える)、現在の理解では、先端部の応力場が亀裂の接線方向について純粋なモード I (剪断応力が働かない状態) となるように亀裂は進行すると考えられている。つまり、一本のなめらかな亀裂について釣り合いの条件が僅かに破られたとき、系のエネルギー的な釣り合いの回復と、亀裂先端での局所的な応力の対称性の二つの条件によって、亀裂のパスは決定できる [2]。

このように、滑らかで準静的に進展する亀裂については、その運動は連続体近似の範囲で原理的には解析が可能と思われるが、実際問題としては、直線的な亀裂や、無限小振幅の規則的な振動以外の、言わば非線形領域についての解析は困難である。

一方で、離散的な弾性体のモデル (バネモデル) によってこの実験系を再構成すると、実験を良く再現する結果が得られる [3]。さらに、連続モデルでは記述の難しい (キンクのあるような) 滑らかでない亀裂パターンや、分岐する亀裂などについても調べることは容易である。今後、準静的な破壊について、連続体近似の結果と矛盾せず、かつそれらを包含するような形で、このような離散系の亀裂の進展条件を定式化する必要があると思われる。

3 衝突による衝撃破壊

亀裂の進行速度が固体の音速程度となると、亀裂の運動の記述はさらに難しくなる。ところが、強い衝撃によって、非常に多数の亀裂が生成されるような場合については、「壊れ方」についての統計

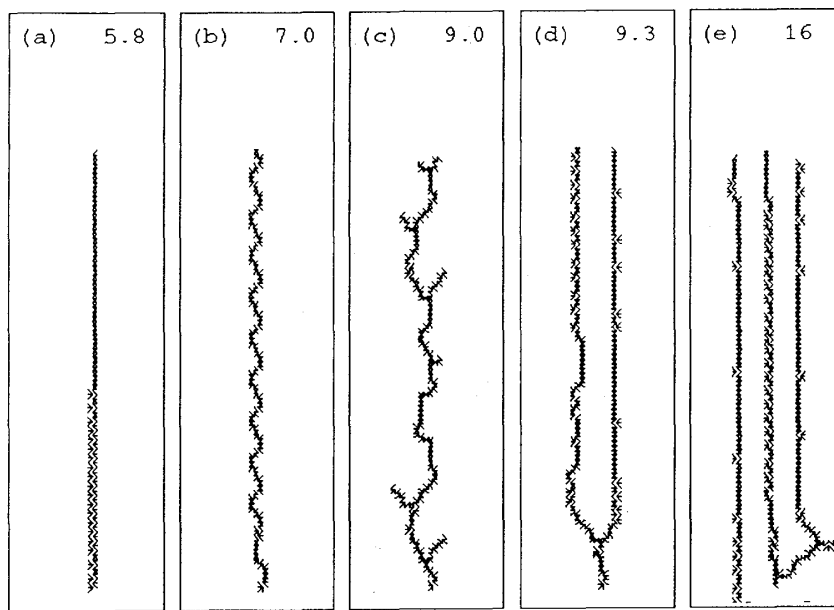


図 2: 二次元バネモデルによる亀裂生成の例

的な記述が可能となる。その例として、単純化した分動力学的モデルによって、脆性物体に強い衝撃が加わる系を構成し、その結果生成される複数の破片のサイズ(質量)分布について解析を行った[4]。図は、立方体状の物体の左側面に、初期条件として大きな力を加え、その後の変形を見たシミュレーションのスナップショットである。このようにして生成される破片の質量 m の分布関数 $n(m)$ は、他の多くの実験で知られているのと同様、広い範囲に渡ってべき乗則 $n(m) \sim m^{-b}$ に従っており、 $b = 2/3$ に近いべき指数が得られた。

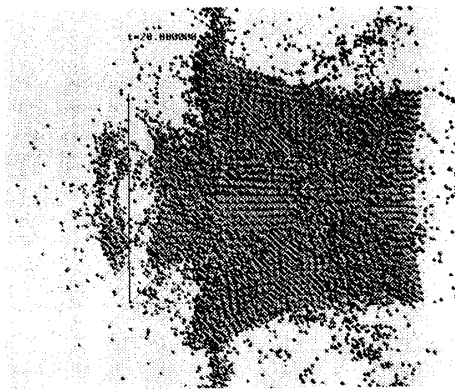


図 3: 衝撃破壊の三次元シミュレーション例

衝撃による破壊の進行をシミュレーションで観察すると、実験からは得にくいであろう情報が容易に得られる。この系ではモデル結晶内にはマイクロクラックは仕組まれていないため、新たな亀裂の生成によって破壊は進行する。亀裂が生成される位置は、ごく薄い層を成して面状に局在し、それが結晶の縦波の音速程度で走り抜ける。モデル物体に衝撃が与えられてから粉々に碎けるまでの間は、

おおまかに言って幾つかの特徴的な段階に分けられる。(i) 試料の表面にインパルスの負荷が与えられ、破壊が開始されるまで、(ii) 亀裂の生成面が音速程度で試料内を移動し、試料の他端に到達する間、(iii) 破片が飛散する最終的な段階。最終的に生ずる破壊のうち、その大部分は(ii)の段階で既に完了。つまり、物体の各所はヒビだらけの状態になっている。段階(iii)では、亀裂の入った物体が、僅かに残った接合点を引きちぎりながら飛散する。数値的にエネルギー収支を調べると、衝撃によって得たエネルギーのうち殆ど(95%以上)は生成された破片の運動エネルギーに転化している。

これらのシミュレーションからの知見を元に、生成される破片の質量分布関数について現象論的な考察を行い、累積分布のべき指数 n が三次元系では $2/3$ となるべきであること、および、この指数はショック波の波面の伝搬様式によっても変化し得ることを示した。

4 破壊のミクロなモデリングと大規模シミュレーション

亀裂の進行と、それに伴う欠陥の生成、および結晶内での欠陥の挙動を、できるだけ抽象化を行わずにシミュレーションする方法の開発が、ここ数年、米国を中心に急速に発展している。例えば、文献[5]では、電子が比較的局在している物質としてシリコンを取り上げ、亀裂のごく先端部分についてのみ強束縛近似によって(sとp軌道の)電子状態を計算し、原子核の運動方程式とカップルさせて、微視的な破壊の進行を追跡している。ところが、このように電子が比較的局在しているような場合であっても、物体のマクロな破壊までを追跡することは事実上困難である。そこで、亀裂先端部の周囲については、経験的な相互作用を考慮した古典的分子動力学モデルによって運動を記述し、さらに亀裂先端から離れた場所では、有限要素法による連続体近似を適用した、三段階のハイブリッド・モデルが提案されている。そして、大規模な並列計算機を駆使し、「リアル」な破壊のシミュレーションが可能になりつつある。

参考文献

- [1] A. Yuse and M. Sano: Nature **362** (1993) 329.
- [2] B. Cotterell and J. R. Rice: Int. J. Fract. **16** (1980) 155.
- [3] Y. Hayakawa: Phys. Rev. E **49** (1994) R1804; Phys. Rev. E **50** (1994) R1748.
- [4] Y. Hayakawa: Phys. Rev. B **53** (1996) 14828.
- [5] J. Q. Broughton, F. F. Abraham, N. Bernstein, and E. Kaxiras, Phys. Rev. B **60** (1999) 2391
; F. F. Abraham, J. Q. Broughton, N. Bernstein, and E. Kaxiras, Computers in Physics **12**
(1998) 538.