

博士論文

一般化結合力モデルと結合力埋込型損傷構成則を
用いたシームレスき裂進展解析手法の開発

A method of seamless crack propagation analysis
with universal cohesive zone model
and cohesive-force embedded damage constitutive law

東北大学大学院工学研究科土木工学専攻

新宅 勇一

Yuichi SHINTAKU

2016年 3月

Copyright © 2016 by Yuichi SHINTAKU

寺田 賢二郎 教授
(主 査)

京谷 孝史 教授

橋田 俊之 教授

斉木 功 准教授

ABSTRACT

A method of seamless crack propagation analysis
with universal cohesive zone model
and cohesive-force embedded damage constitutive law

Yuichi SHINTAKU

The objective of this contribution is to develop a method of crack propagation analysis to realize seamless connection between fracture processes, to propose a universal cohesive zone model which can represent various types of failure, and to formulate cohesive-force embedded damage constitutive law incorporating the deformation of cohesive zone at a material point. The proposed method of seamless crack propagation analysis hinges on the cohesive zone model, which generally defines the relationship between the traction force and crack opening displacement (COD) on the so-called fracture process zone around the crack tip to characterize the macroscopic stiffness reduction followed by the material softening. Although the microscopic mechanisms of the above-mentioned failure types must be different in spatial dimension, the macroscopic mechanical behavior of the fracture process zone has much in common from a phenomenological standpoint. In fact, at the first stage, the process zone is generally developed from small defects caused by stress concentration and crystallographic slips around the crack tip, and exhibits the reduction of the macroscopic stiffness. At the second stage, the coalescence of the defects transitions to the aggregation of small

cracks and causes the negative rate of change of the macroscopic stiffness with the progress of the coalescence, which is realized as macroscopic material softening. Then, at the third stage, a major crack is recognized by the formation of two opposite free surfaces as a result of consecutive coalescence. The cohesive-force at the first stage of this failure process is embedded to the continuum damage model, while those developed at the other two stages are incorporated with the finite cover method (FCM) that enables us to simulate arbitrary crack propagation. The consistent use of the universal cohesive crack model throughout the whole fracture process makes it possible to make crack propagation analyses with seamless transition from the first stage to the second one. Thus, the new method of seamless crack propagation analysis developed in this study is the enhanced FCM with the cohesive-force embedded damage model and the universal cohesive zone model.

In the first chapter, after the microscopic mechanisms of various types of failure and the corresponding macroscopic fracture phenomena are reviewed, fracture mechanics theories are explained in view of the underlying mechanisms. Then, the review of noteworthy existing models techniques of crack propagation analyses are followed by the presentations of the purpose and contents of this study.

In Chapter 2, the universal cohesive zone model is proposed to represent several types of fracture, including brittle fracture, ductile fracture, fatigue fracture and hydrogen embrittlement, which is a kind of environment-assisted cracking. The proposed model is realized by the introduction of the damage variable characterizing the effect of microscopic defects such as voids, micro-cracks and etc. into the existing atomics-based cohesive zone model for brittle fracture. The atomic-based model employed in this study was proposed by Rice and Wang and derived from the universal relationship of atomic binding energy as it is called UBER, which represents atomic the separation caused by the cleavage failure in

brittle materials. The damage variable is introduced as a multiplier to the fracture energy in the atomics-based model by the thermodynamic approach and its evaluation law is proposed in view of the decrease of energy release rate caused by the development microscopic defects that is supposed to be induced by the accumulation of plastic deformation or crystallographic slip. Then, the proposed model can naturally be applied to each type of fracture behavior in the cohesive zone associated with brittle, ductile and fatigue fracture according to the definition of plastic deformation or crystallographic slip at various spatial scales. In addition, the hydrogen-induced decrease of the energy release rate is considered to represent the hydrogen embrittlement. Some representative numerical examples are presented to demonstrate the performance of the proposed universal cohesive zone model in simulating crack propagations of ductile fracture, fatigue fracture and hydrogen embrittlement.

In Chapter 3, the cohesive-force embedded damage constitutive law is formulated under the assumption that a cohesive zone is generated at a material point in the direction perpendicular to each axis of positive principal stresses. The equilibrium condition between the principal stress and the cohesive traction force is imposed at each material point so that the resultant deformation is the same as the apparent strain of the region involving an explicitly represented cohesive crack. Thanks to this feature, the proposed damage constitutive law accommodates any type of cohesive zone model, including the universal cohesive zone model proposed in Chapter 2, and any types of material constitutive laws such as elasticity, plasticity and crystal plasticity models. In addition to the consistency with the conventional cohesive zone models for explicitly represented crack surfaces, the new damage constitutive law is capable of performing numerical simulations for crack nucleation at arbitrary locations and propagation in arbitrary directions. The capability of the proposed damage constitutive law is demonstrated by conducting several numerical simulations. In particular,

the new damage constitutive law incorporated into plasticity enables us to simulate ductile crack propagation in a three-point bending test of a notched-specimen, in which different fracture morphologies appear around the mid-plane and the surface; they are called the flat and shear lip fractures. Also, a crystal plasticity model is incorporated to assess the overall strength of a polycrystalline aggregate subjected to fatigue degradation.

In Chapter 4, the new method of crack propagation analysis is proposed to simulate seamlessly the fracture process from the damaged material with macroscopic stiffness reduction to the nucleation and propagation of an explicit crack opening. The cohesive-force embedded damage constitutive law is assigned to each integration point in a finite element, which is divided into two discrete physical covers in the FCM context to form a crack once the positive principal stress exceeds the material 's tensile strength. Then, the crack faces explicitly represented by the physical covers are furnished with the cohesive zone model whose cohesive traction force is the same as the positive principal stress that was used to determine the crack initiation. Here, the cohesive zone exhibits macroscopic softening behavior in the relationship between the cohesive traction force and COD. Since the physical domain in each physical cover is polygonal, it must be divided into subdivisions so that numerical integration can be properly conducted. In this study, an automatic domain partitioning technique is developed to subdivide the polygonal domain generated by a crack into several tetrahedrons. In addition, in the case of inelastic material behavior, the moving least square method is employed to map the state variables to new integration points in each of the tetrahedrons. The proposed FCM enhanced by the automatic subdivision and mapping algorithms enables us to simulate propagation of a crack with an arbitrary shape under three-dimensional mode I, mode II, and mode III conditions for inelastic materials . Some numerical examples are presented to illustrate the performance of the proposed algorithms as well as the capability

of seamless connection from the initial to final processes of fracture.

謝 辞

本論文は、私が東北大学大学院工学研究科土木工学専攻博士後期課程在学期間（2013年4月～2016年3月）の研究成果をまとめたものです。本論文を完成させるにあたり、多くの方々からご指導・ご支援いただきました。ここに感謝の意を表します。

本学災害科学国際研究所の寺田賢二郎教授には、博士後期課程の3年間にわたり、ご指導を賜りました。先生には博士後期課程から私を研究室に迎えてくださり、素晴らしい研究環境を整えていただきました。また、先生は計算力学などの研究に関わることでだけでなく、研究者としてのあるべき姿勢から論文の書き方まで丁寧かつ厳しく指導していただきました。この経験を生かし、私も先生のように熱意と情熱をもって研究と教育に精進して参ります。

副査を引き受けてくださった京谷孝史教授、橋田俊之教授、斉木功准教授には、論文執筆に関して貴重なご意見・ご討議を賜りました。なかでも、京谷先生には博士後期課程に編入学した当時から温かいお心遣いをいただきました。また、橋田先生には唐突に副査を引き受けていただいたことに加えて、金属材料の破壊に関して貴重な情報やご助言を賜りました。

地域安全工学および材料力学研究室の先生方には、本学に編入学時から現在まで公私にわたって大変お世話になりました。森口周二准教授、加藤準治准教授には、私が研究で悩んでいたときに親身に相談に乗っていただき、研究者としての精神的な心構えを示していただきました。また、高瀬慎介助教には、プログラミングや計算機の知識などについてたびたび教えていただきました。そして、村松眞由助教には投稿論文などの書き方について細かく、丁寧に指導していただきました。

私が東京理科大学修士課程在学中にお世話になった菊池正紀先生には、計算力学か

ら破壊力学まで多岐にわたってご教授いただきました。また、先生は私の将来を真摯に考え、在学中に米国ヴァージニア工科大学で研究ができるように取り計らってくださいました。さらに、先生が研究の面白さを教えてくださったことに加えて、博士後期課程への進学を強く薦めてくださったおかげで、私は研究者を志すことができました。

ヴァージニア工科大学の古川知成教授には、米国の厳しい研究環境を目の当たりにする機会を与えていただき、研究者としての生き抜くのに必要な姿勢を示していただいたことで、博士後期課程に進学する前の早い段階から将来の方向性を強く意識できました。また、現在の指導教員である寺田先生を紹介していただき、感謝しております。

東北大学在学中に共同研究員として私を受け入れてくださった大阪大学接合科学研究所の堤成一郎准教授には、金属材料の疲労破壊や延性破壊などに関する質問や相談などに快く応じていただきました。

地域安全工学研究室秘書の芳賀麻由美さん、秘書であった宮澤（早坂）理恵さん、材料力学研究室秘書の阿部綾子さんには、研究室のための事務的な仕事に加えて、論文複写などの直接研究に関わる面でもたびたび補佐していただき、お世話になりました。

そして、東北大学に編入学した当時から私は頼もしい後輩達にも恵まれ、楽しく、有意義な日々を過ごすことができました。地域安全工学研究室・材料力学研究室の学生の皆さまには、3年のあいだ本当にお世話になりました。

また、2014年4月～2016年3月の2年間、日本学術振興会の特別研究員として、科学研究費補助金・研究奨励金の支給を受けることができ、経済的な不安を感じることなく研究に専念することができました。

最後に、私を信頼し、常に見守り続けてくださった両親と妹、経済援助を一度も惜しまなかった祖父母に心から感謝します。

2015年12月

新宅 勇一

目 次

1	序論	1
1.1	破壊現象に関する現状の課題	1
1.2	破壊形態毎の巨視的挙動と微視的メカニズム	3
1.2.1	脆性破壊	3
1.2.2	延性破壊	4
1.2.3	疲労破壊	5
1.2.4	水素脆化	6
1.2.5	き裂進展に伴う巨視的挙動の変化	7
1.3	破壊現象に関する理論体系	8
1.3.1	破壊力学	8
1.3.2	損傷力学 ⁴⁶⁾	10
1.3.3	結合カモデル	12
1.4	破壊の数値解析手法に関する先行研究	15
1.4.1	破壊力学と損傷力学の有限要素法への適用	15
1.4.2	一般化有限要素法の発展とそのき裂進展問題への適用	16
1.4.3	破壊問題における数値解析手法の現状と課題	18
1.5	研究の位置付けと目的	19
2	多様な破壊現象を表現可能な一般化結合カモデル	27

2.1	はじめに	27
2.2	原子間レベルの微視的な破壊に基づく結合カモデル	29
2.3	繰り返し载荷時における疲労損傷	32
2.3.1	疲労破壊における結合カモデル	32
2.3.2	提案モデルの基礎的検討	35
2.3.3	疲労破壊の数値解析例	41
2.4	水素脆化による破壊靱性値の低下	44
2.4.1	水素吸着説に基づく結合カモデル	44
2.4.2	水素脆化の数値解析例	48
2.5	過大荷重下における延性破壊	50
2.5.1	塑性変形を考慮した一般化結合カモデル	50
2.5.2	延性破壊および疲労破壊の数値解析例	54
2.6	まとめ	58
3	結合カを埋め込んだ損傷構成則の構築	81
3.1	はじめに	81
3.2	結合カ埋込型損傷構成則の弾性構成則への適用	82
3.2.1	結合カ埋込型弾性損傷構成則の定式化	83
3.2.2	結合カ埋込型弾性損傷構成則の実装方法	87
3.2.3	弾性材料のき裂進展問題への適用例	89
3.3	結合カ埋込型損傷構成則の弾塑性構成則への適用	97
3.3.1	結合カ埋込型弾塑性損傷構成則の定式化	98
3.3.2	結合カ埋込型弾塑性損傷構成則の実装方法	103
3.3.3	延性き裂進展問題における数値解析例	103
3.4	結合カ埋込型損傷構成則の結晶塑性構成則への適用	105

3.4.1	結合力埋込型結晶塑性損傷構成則の定式化	105
3.4.2	多結晶体における疲労劣化後の予耐力評価	110
3.5	まとめ	111
4	結合力埋込型構成則と有限被覆法を用いたシームレスき裂進展解析手法の構築	129
4.1	はじめに	129
4.2	有限被覆法によるき裂進展解析手法の構築	131
4.2.1	一般化有限要素法における従来手法	131
4.2.2	提案手法の概要	132
4.2.3	多面体自動再分割アルゴリズム	133
4.2.4	移動最小二乗法による状態変数のマッピング	137
4.2.5	各アルゴリズムの検証	138
4.3	シームレスき裂進展解析手法の開発	140
4.3.1	結合力埋込型損傷構成則から有限被覆法への移行	141
4.3.2	シームレスき裂進展解析の適用例	142
4.4	まとめ	143
5	結論	155
	参考文献	159
	補遺 I 結合力埋込型損傷構成則における	
	リターンマッピング方程式および材料ヤコビアン <small>の導出</small>	175
	補遺 I.1 弾性構成則	175
	補遺 I.2 弾塑性構成則	177
	補遺 I.2.1 次元問題	177

補遺 I.2 多次元問題	178
補遺 I 結晶塑性構成則	180
補遺 II 結合力埋込型損傷構成則における Clausius-Duhem の散逸不等式に関する 検討	182

表 目 次

2.1	結晶塑性モデルの材料パラメータ ¹¹¹⁾	60
2.2	マクロ均質化材料パラメータの同定結果	60
2.3	MBLA におけるき裂進展速度の要素サイズ依存性の検証結果	60
2.4	損傷変数を導入した結合カモデルのパラメータ	60
2.5	SM490Y の弾塑性材料パラメータ	61
2.6	SM490Y の一般化結合カモデルのパラメータ ¹²³⁾	61
2.7	原子間結合に基づく結合カモデルのパラメータ ¹²³⁾	61
3.1	A533B 鋼の弾塑性材料パラメータ	112
3.2	A533B 鋼の一般化結合カモデルのパラメータ	112
3.3	結晶塑性モデルにおける一般化結合カモデルのパラメータ	112
4.1	破壊の各段階における解析手法とモデル	144
4.2	SEN 試験片の弾塑性材料パラメータ	144
4.3	三角形型結合カモデルのパラメータ	144

目 次

1.1	脆性破壊（へき開破壊）におけるき裂進展	23
1.2	カップアンドコーン破壊 ²⁰⁾	23
1.3	延性破壊におけるき裂進展	24
1.4	突出しの形成と疲労き裂の発生	24
1.5	疲労破壊におけるき裂の安定成長	25
1.6	水素脆化におけるき裂進展	25
1.7	き裂進展に伴う巨視的挙動	26
2.1	各破壊における遷移関係	62
2.2	原子間結合に基づく結合カモデル	62
2.3	熱力学に基づき損傷変数を導入した結合カモデル	62
2.4	修正バウンダリー解析の概念図	63
2.5	多結晶体を有するユニットセル	63
2.6	数値材料試験によるマクロパラメータ同定結果	63
2.7	MBLAにおける要素サイズ依存性の検討	64
2.8	要素サイズによるき裂進展速度の違い	64
2.9	き裂先端に多結晶体を有する MBLA	65
2.10	$\Delta K = 63 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ における結晶粒ごとのき裂進展速度	65
2.11	疲労き裂進展問題におけるパラメータ同定結果	66

2.12	結晶粒径 50[μm] からなる三次元有限要素モデル	66
2.13	一定および過大荷重時の繰り返し载荷条件	67
2.14	300 ステップにおける応力, 蓄積すべり量および損傷値の分布	67
2.15	単調载荷時の結晶粒ごとのき裂進展速度	68
2.16	1 サイクル時における応力分布	68
2.17	1 サイクル時におけるる応力, 蓄積すべり量および損傷値の分布	68
2.18	き裂先端近傍の結晶粒における損傷値の蓄積	69
2.19	2 サイクル時に作用する引張応力と蓄積すべり量	69
2.20	2 サイクルにおける载荷および除荷時の応力分布	70
2.21	繰り返し载荷ごとの損傷値の蓄積	70
2.22	14 サイクル時の蓄積すべり量	71
2.23	き裂進展に伴うエネルギーの変化	71
2.24	水素濃度の変化に伴う表面エネルギーの推移	72
2.25	水素濃度の変化に伴う結合力の推移	72
2.26	160 個の結晶粒からなる解析モデル	72
2.27	結晶粒内および粒界における拡散係数	73
2.28	暴露時間毎の水素濃度分布	73
2.29	水素脆化によるき裂進展解析の境界条件と結合力モデルの導入位置	73
2.30	暴露時間の違いによるき裂進展挙動の違い	74
2.31	暴露時間毎の公称応力公称ひずみ線図	74
2.32	限界 CTOD 値と温度の関係	75
2.33	限界 CTOD 値と塑性ひずみの関係	75
2.34	塑性変形を考慮した結合力モデル	76
2.35	延性破壊における従来の結合力モデル	77

2.36	三点曲げの解析モデル	77
2.37	塑性変形を考慮した結合カモデルのき裂開口変位	78
2.38	原子間結合に基づく結合カモデルのき裂開口変位	78
2.39	塑性変形を考慮した結合カモデルの相当性ひずみ分布 ($\bar{u} = 2.20\text{mm}$)	79
2.40	塑性変形を考慮した結合カモデルの損傷値分布 ($\bar{u} = 2.20\text{mm}$)	79
2.41	繰り返し载荷によるき裂開口変位	79
2.42	繰り返し载荷による損傷値の分布	80
3.1	一次元における埋込型結合カモデルの概念	113
3.2	近似接線解法	114
3.3	接線入れ子割線解法	115
3.4	埋込型結合カモデルと従来通りの結合カモデルの比較のための解析モデル	116
3.5	埋込型結合カモデルと従来通りの結合カモデルの荷重変位曲線	116
3.6	円孔を有する平板の解析条件	117
3.7	円孔板の公称応力ひずみ線図	117
3.8	き裂進展に伴う円孔板の z 方向垂直応力分布	117
3.9	き裂進展に伴う円孔板のき裂開口変位	117
3.10	片持ち梁状構造物の解析条件	118
3.11	最大主応力-主ひずみ線図	118
3.12	片持ち梁の最大主応力分布 ($\varepsilon^{(1)} = 0.5\%$)	119
3.13	片持ち梁の主き裂方向 ($\varepsilon^{(1)} = 0.5\%$)	119
3.14	$\varepsilon^{(1)} = 0.5\%$ における近似接線解法と接線入れ子割線解法の収束性	120
3.15	混合モード下におけるき裂を有する平板の解析条件	120
3.16	負荷・除荷過程を考慮した結合カモデルによる混合モード下におけるき裂進展挙動	121

3.17	接線入れ子割線解法と陽的割線解法による混合モード下におけるき裂進展に伴う最大主応力分布	121
3.18	接線入れ子割線解法と陽的割線解法による最大主応力主ひずみ線図 . . .	122
3.19	負荷・除荷過程を考慮していない結合力モデルによる混合モード下におけるき裂進展挙動	122
3.20	臨界有効き裂開口変位 w_c の違いによる混合モードにおけるき裂進展挙動の違い	122
3.21	弾塑性構成則における接線入れ子割線解法	123
3.22	丸棒試験によるパラメータ同定結果	124
3.23	三点曲げ試験の表面部におけるき裂進展の様子 ²⁰⁾	124
3.24	三点曲げ試験の解析モデル	125
3.25	三点曲げ試験によるき裂進展挙動	125
3.26	き裂進展直前の相当塑性ひずみの分布	125
3.27	き裂進展直前の損傷値の分布	126
3.28	各変形勾配における配置	126
3.29	8結晶粒からなる多結晶体モデル	127
3.30	8サイクルにおける蓄積すべり量, 損傷値およびき裂開口変位	127
3.31	疲労劣化に伴う材料強度の低下	128
3.32	疲労劣化の違いによるき裂の発生位置の違い	128
4.1	シームレスき裂進展解析の全体像	145
4.2	き裂進展に伴って各提案アルゴリズムが適用される過程	146
4.3	六面体要素と三角形パッチからなるき裂面	147
4.4	六面体要素の各面の分割と面の生成法	147
4.5	き裂面上にある面の作成法	148

4.6	四面体で分割された六面体要素	148
4.7	き裂面で分割される四面体および六面体のパターン	148
4.8	SEN 試験片の有限要素モデル	149
4.9	SEN 試験片のき裂面パッチ	150
4.10	SEN 試験片の最大主応力分布	151
4.11	三角形型結合カモデル	151
4.12	γ^p を移動最小二乗法によりマッピングした結果	151
4.13	SEN 試験片による弾塑性き裂進展解析の結果	152
4.14	結合カモデルの分割方法	152
4.15	両端切欠き付き試験片の有限要素モデル	153
4.16	両端切欠き付き試験片の応力ひずみ線図	153
4.17	三点曲げ試験片の有限要素モデル	154
4.18	三点曲げ試験におけるき裂進展に伴うき裂の開口変位	154

1. 序論

1.1 破壊現象に関する現状の課題

人類が道具を作るようになり、徐々に大型の構造物を製造するようになる過程で、構造物が安定状態として成立し、健全な状態が長期的に保たれることが重要となった。その意味で、「工学」と「構造物や材料の破壊現象」は不可分の関係にあり、工学の発展に伴って古くから破壊現象に関する研究は行われてきた。記録として最も古い破壊に関する実験は、レオナルド・ダ・ヴィンチによる鉄線の強度実験であり、破壊に関する研究には約500年近い歴史がある¹⁾。このように長年に渡り蓄積されてきた成果をもとにして、現在では構造強度に関する安全性評価のガイドラインが作成され、各種産業において広く活用されている^{2)~7)}。また、材料の破壊現象が解明されることで構造物の安全性が増すだけでなく、深刻な事故による損害を未然に防ぐことができるため、その経済効果は大きい。米国において実施された経済調査によれば、1978年の破壊に起因する年間コストは国民総生産の約4%に当たる1190億ドルであり、その内の280億ドルは破壊に関する専門知識を活用することで削減可能であると報告している⁸⁾。また、打ち抜き加工などの工業製品の製造技術においても、部材としての強度と加工しやすさという相反する性質を考慮しなくてはならず、破壊現象に関する知識が不可欠となる⁹⁾。以上のように、破壊現象は工業において安全性や保守点検といった観点だけでなく、経済性や生産性においても重要であり、破壊現象の解明は今もなお工学における

重要課題の1つである。

設計および保守点検の観点から破壊現象の問題を分類すると2つに大別することができる。1つは繰り返し荷重や化学的な作用による材料の劣化を伴う構造物の長期的な寿命の問題である。材料に繰り返し荷重が加わった場合、その荷重が降伏応力よりも微小であっても材料内部が損傷することで疲労破壊に至る。疲労破壊は船舶や機械製品などの通常時に振動を伴う工業製品で特に問題とされてきたが、近年では日本国内においてインフラ設備の老朽化が進んでおり、土木・建設分野においても重要性が指摘されている^{10,11)}。また、海水や石油などに隣接する構造物では、化学作用により劣化した材料にき裂が生じる環境助長割れなどが問題となる。このような現象は海水などの特殊な環境下だけでなく、PC鋼棒や高力ボルトなどの高強度鋼を長期間使用した場合にも問題となることが知られている¹²⁾。さらに、近年では水素エネルギーが注目されており、これを活用するためには水素によって金属材料が脆化する水素脆化のメカニズム解明が重要となる¹³⁾。このように通常荷重や周辺環境に起因する破壊現象では、数年もしくは数十年単位で徐々に構造物にき裂が発生・進展し、最終的に構造物が耐えられなくなり崩壊に至る。これらの問題は、メンテナンスの間隔や部品の交換時期などを決める保守・点検の観点において特に重要となる。

もう1つの問題は、材料の強度に対して過大荷重が加わることによって延性破壊が生じ、それによって脆性破壊がもたらされ、構造物が瞬時に崩壊に至る現象である。このような破壊現象は例えば地震時の建物や鋼橋などの大型構造物、撃力が作用した場合の航空機や自動車などで生じる。前述の疲労破壊や環境助長割れとは異なり、これらの瞬時に起きる破壊現象は、通常時に想定されているよりも大きな荷重が加わった際に生じ、設計段階において安全率として考慮されるべき問題である。構造物の設計や安全性評価は、以上のような通常時に作用する変動荷重や周囲環境による影響、および地震時などの緊急時に作用する即時荷重といった作用因子によって分類されたう

えで、規定されることが多い。

しかし、実際の航空機や自動車などでは繰り返し荷重により疲労き裂が発生した後に、衝撃荷重が加わることで延性破壊、そして脆性破壊に至ることも多い。そのため、通常使用によって生じた欠陥が予耐力に対して及ぼす影響が問題となることがある。これとは反対に、地震などの緊急時には過大荷重が作用した後の構造物の場合、短長期的な余寿命が問題となることもある。例えば、地震時に過大荷重が作用することで鋼橋に延性き裂が発生すると、その後の緊急車両が通行可能であるかといった観点が重要となる¹⁴⁾。また、化学的作用を伴う場合には、例えば水素濃度ごとに材料特性は延性から脆性に遷移し、材料の強度特性も変化する。今後、このような複合的な破壊問題を扱うためには、それぞれの破壊形態に対する従来知見と整合し、かつ各現象を区別することなく連続的に遷移できる破壊理論を体系化しなくてはならない。しかし、このような複合的な破壊現象を再現できる破壊モデルを実験のみで構築するには無数のパターンを考慮する必要があり、事実上不可能である。そのため、実験を行うには数値シミュレーションを用いて必要なパターンを限定した上で臨むのが望ましいといえる。

1.2 破壊形態毎の巨視的挙動と微視的メカニズム

本節では、脆性破壊・延性破壊・疲労破壊・水素脆化の巨視的挙動と微視的メカニズムの視点から破壊現象を整理する。また、各破壊現象を数値解析において表現するためにき裂進展に伴う巨視的挙動の変化について説明する。

1.2.1 脆性破壊

脆性破壊では、ほとんど塑性変形することなく、炭化物などの第二相粒子や介在物の界面で発生した微小き裂^{15)~19)}が高速伝播する。き裂伝播の過程は、結晶粒内にき裂

が進展するへき開破壊と結晶粒界に割れが生じる粒界破壊に別けられる。多くの場合にはへき開破壊が生じ、図 1.1 のように原子結合の分離によって引き起こされる。このため、へき開破壊は原子構造に依存し、原子結合の数が少なく、原子間距離が大きくなる緻密度が最低の結晶面において発生する¹⁾。例えば、体心立方格子は低温下で活動すべり系が少なくなるために図 1.1 のように {100} 面でへき開破壊が発生し、六方緻密格子は 3 つのすべり系しかないために比較的簡単にへき開破壊に至る。一方、面心立方格子は温度に関わらず豊富なすべり系が存在するので、延性が高く、へき開破壊に対して敏感ではない。また、前述のようにへき開破壊は脆性破壊の起点にはならないので、脆性破壊が発生する際の応力は原子結合が分離する原子間力よりも小さくなる。

1.2.2 延性破壊

本項では、丸棒試験片と切り欠きを有する試験片を例に挙げて延性破壊の巨視的挙動を述べたうえで、それらの微視的メカニズムについて概説する。

丸棒試験に引張荷重を加えると伸長にともなって中央部にくびれが生じた後に、破断に至る。その破面は図 1.2 のように中央部では平坦となり、表面部では引張方向とおよそ 45° 方向となる。このような破壊形態はカップアンドコーンと呼ばれ、さらにそれぞれの破壊形態は平坦破壊とシェアーリップ破壊に区別される。この破壊形態の違いは、板厚中央部と表面部での応力状態と塑性域の違いに起因する。板厚中央部では周囲の弾性域によって変形が拘束されるため、静水圧応力が高くなり塑性域は小さくなる。一方、表面部における変形は自由であるので、静水圧応力は小さくなり塑性域は大きくなる。この板厚中央部における弾性域による変形の拘束は拘束効果と呼ばれ、その大きさは応力三軸度によって表される。応力三軸度は相当応力に対する静水圧応力の比であり、板厚中央部では増加し、表面近傍では低下する。

切り欠きを有する試験片に荷重を加えると塑性変形によってき裂先端が鈍化し、き裂が大きく開口した後に進展を開始する。その破面形状はカップアンドコーンと同様に

試験片中央部では平坦破壊となり，表面部ではシェアリップ破壊が生じ，中央部から表面部に向かって平坦なものから斜めに湾曲したものになる．また，トンネル効果によって応力三軸度が高くなる板厚中央部の方がき裂進展速度は速くなる．このようにシェアリップ破壊と平坦破壊に加えて，トンネル効果が混在するために，延性き裂進展における破面形状は三次元的に複雑な形状となる．

これらの破面上からは微細ボイドとその一部が合体することによって形成されたディンプルが図 1.3 のように観察され，表面部のシェアリップ破壊では最大せん断応力方向に合体した伸長ディンプルが観察される．この微細ボイドの挙動は発生・成長・合体の三段階の過程で分類され，応力三軸度と塑性ひずみに依存する．まず，材料内部に含まれる介在物・第二相粒子・結晶粒界に生じる結晶すべりの不整合（GN 転位）によって，剥離や割れがもたらされることで微細ボイドが発生する．この発生過程では静水圧が増すにつれて微細ボイドが発生しやすくなることが実験的に観察されている²¹⁾．次に，発生した微細ボイドの成長は静水圧に強く依存し，特にその成長率は応力三軸度が高くなると急激に大きくなる^{22)~24)}．最終的に，微細ボイドの成長に伴って隣接微細ボイド同士の合体が起こり，試験片の破断に至る²⁵⁾．このような微細ボイドの発生・成長・合体は図 1.3 のようにき裂先端近傍で発生し，破壊プロセスゾーンと呼ばれる．

1.2.3 疲労破壊

疲労破壊は，破壊に至るまでに要する繰返し荷重の回数やその破壊形態によって分類され，繰返し荷重の少ない順に極低サイクル・低サイクル・高サイクル・ギガサイクル疲労などがある．ここでは，代表的な高サイクル疲労に分類される破壊形態に焦点を当てて，き裂の発生・安定成長・不安定破壊という 3 つの段階にさらに別けてたうえて，そのメカニズムについて概説する．

発生段階では，多結晶金属に繰返し荷重が加わることで結晶粒内において結晶すべりが蓄積され，すべり帯が形成される．その後，図 1.4 のようにすべり帯が徐々に表

面へ突き出し、反対の表面では入れ込みとなることで、それらの箇所が応力集中源となる。これによって発生した微小き裂はすべり方向に沿って進展するため、巨視的には主応力に対して斜め 45° となる主せん断方向に進展する。

成長段階では、主せん断方向から主応力と垂直な方向へとき裂は向きを変えて進展する。面心立方格子を例に挙げてこの際の微視的メカニズムを概説すると、図 1.5 のようにき裂面が $\{100\}$ 面と一致する場合には $\{111\}$ 面が主すべり面となるので、負荷時には $\{111\}$ 面がすべる。このすべり面が酸化するために、除荷時にはもとに戻ることはなく、次の負荷時には前の負荷時とは異なる $\{100\}$ 面がすべる。この負荷・除荷の繰り返しによって交互すべりが起き、徐々にき裂が進展する。

不安定破壊となる最終的な段階ではき裂は急激に成長し破壊に至り、その破面からは脆性破壊や延性破壊と類似の特徴が観察される。これらの特徴については前述したので、本項では省略する。以上のように、疲労破壊は発生段階では結晶すべりの影響を強く受け、安定成長段階へ移ると主応力に従ってき裂は塑性変形とともに成長し、最終的に脆性破壊や延性破壊などの単調載荷時に近い破壊形態を示す。

1.2.4 水素脆化

水素脆化のメカニズムを説明するモデルとして、水素吸着説・転位説・水素ガス圧説・格子脆化説などが提唱されている。

水素ガス圧説では金属内に潜在的に存在する欠陥に水素が析出し、再結合により水素分子となり、これにより高圧が生じることで破壊に至ると説明されている。しかし、この仮説ではガスの種類によらず同様の脆性現象が生じるはずであるが、実際には水素以外でこのような脆化現象は発生しない。また、圧縮時にも微細ボイドやマイクロクラックが生じ、それにより水素が析出するはずであるが、実際の圧縮時には水素脆化は認められない。このように水素ガス圧説ではいくつかの矛盾が指摘されているのに対して、水素吸着説では矛盾なく説明することができる。

水素吸着説では、水素が金属の表面に接すると表面エネルギーが低下することに着目し、これにより破壊靱性値が低下することで破壊に至ると説明している。また、表面エネルギーと原子結合には一定の関係があることから、水素の影響により原子の結合力が低下するとした格子脆化説とも整合する。以上のように、表面吸着説は物理的意味が明確なことに加えて、水素脆化現象を矛盾なく説明できるために、現在提案されている仮説の中では最も有力な仮説の1つとされている²⁷⁾。

また、化学種が金属内部を拡散する場合には、引張の静水圧によって結晶格子の原子間距離が大きくなり、化学種が結晶格子内を拡散しやすくなるために、応力誘起拡散が生じる。これによって、き裂表面から金属内部に侵入した水素原子が応力集中部であるき裂先端部に集まることで、図 1.6 のように破壊靱性値および原子結合が低下し、徐々にき裂が進展する。

1.2.5 き裂進展に伴う巨視的挙動の変化

図 1.7 の橙色の枠で示すようにき裂先端に接する領域で巨視的な応力 σ と材料剛性 \bar{E} を定義すると、各破壊現象のき裂進展に伴う巨視的な応力 σ の変化は破壊形態に依らず以下のように3つ段階の過程を経る。すなわち、破壊の初期段階では、荷重が作用することで巨視的な応力 σ が増加する。それに伴って、橙色の領域内部で前述のように微小き裂や微細ポイドなどの欠陥が発生し、巨視的な材料剛性 \bar{E} が処女材料の剛性 \bar{E}_0 から低下する。さらに中間的な段階では、欠陥の成長に伴って橙色の領域が軟化挙動となるので、き裂進展に対する巨視的な応力 σ が低下する。そして最終的な段階では、き裂面が領域を分断するために応力が解放され、主き裂面と垂直な方向の巨視的な応力 σ はゼロとなる。

ただし、前述のように微視的メカニズムの違いに起因して微小き裂や微細ポイドなどの挙動が変化するために、破壊現象ごとに各段階における巨視的な応力の変化は異なる。例えば、前述のように脆性破壊では塑性変形がほとんど生じることなく、瞬時

にき裂進展するために、巨視的な応力は一瞬で変化する。これに対して、延性破壊では塑性変形と破壊プロセスゾーンが発生した後にき裂進展に至るために、巨視的な応力の変化も複雑である。このため、各破壊現象はそれぞれの微視的メカニズムを踏まえたうえで、各段階を表現可能な破壊モデルを構築しなくてはならない。

1.3 破壊現象に関する理論体系

材料が破壊に至るまでの挙動を表現する理論体系は、破壊力学と損傷力学に大別される。前者においては、破壊に伴うエネルギー解放率・応力拡大係数・J積分などのパラメータを導入して破壊靱性値やき裂進展速度を表現する。一方、材料内部に生じる微細き裂やポイドなどによる見かけの剛性の低下や降伏面の変化を損傷として材料構成則に導入するのが後者の損傷力学である。本節では破壊力学と損傷力学について概説するとともに、近年注目を集めている結合力モデル (Cohesive Zone Model: CZM) についても説明する。

1.3.1 破壊力学

第二次大戦前後の技術革新により工業が飛躍的に発展し、工業製品における破壊が顕著な問題となったことをうけて、破壊に関する研究が盛んに行われるようになった。このような破損事故を防ぐことを目的として誕生したのがエネルギー解放率、応力拡大係数やJ積分といったき裂先端近傍の応力場を表すパラメータを用いた破壊力学と呼ばれる理論体系である。その発展の初期段階で、1929年に英国のGriffithによってガラスの脆性破壊問題が取り上げられ、破壊応力と欠陥寸法の関係が明らかにされた²⁸⁾。Griffithは、楕円体の応力解析をき裂の不安定伝播問題に応用し、熱力学の第一法則からエネルギー平衡論に基づく破壊の理論的な条件式を導いた。その後、米国海軍技術研究所のIrwinによって金属材料の脆性破壊に適用するためにGriffith条件に修正が加

えられ、破壊靱性を表すパラメータとしてエネルギー解放率が定義された²⁹⁾。さらに、Irwin はき裂先端における応力・変位場の特性を表す応力拡大係数とエネルギー解放率が理論的に関連付けられることを証明した³⁰⁾。このように線形破壊力学が確立されたことで、金属材料における脆性破壊の定量的な評価が可能となった。

その後の研究の対象はき裂先端の塑性変形へと移り、Irwin の塑性域を補正する方法³¹⁾や後述する結合力モデルの基礎となる Dugdale³²⁾と Barrenblatt³³⁾の帯状降伏モデルが提案されるに至った。しかし、これらの理論はそもそも線形弾性を仮定するために大きな塑性変形を伴う延性破壊に適用することは困難であった。そこで、第 1.2.2 項で述べたように延性破壊の初期段階ではき裂が大きく開口するという観察結果に基づいて、英国溶接研究所の Wells はき裂先端開口変位 (Crack Tip Opening Displacement: CTOD) を破壊靱性を表すパラメータとして用いることを提案した³⁴⁾。一方、1968 年に米国において Rice は塑性変形を非線形弾性体として理想化した上で、Eshelby の Energy Momentum Tensor³⁵⁾をき裂先端に応用し、非線形材料におけるエネルギー解放率を意味する J 積分というパラメータを導いた³⁶⁾。同年、Hutchinson³⁷⁾、Rice と Rosengren³⁸⁾によって J 積分が非線形材料のき裂先端における応力状態を表すことが証明された。このことを利用して、Shi ら³⁹⁾は J 積分と CTOD の関係性に着目し、両パラメータが等しく破壊特性を表すことを示した。しかし、弾塑性材料における破壊問題に対しては未だに完全な解決策は見だされていない。なぜならば、J 積分はあくまでも非線形弾性体におけるエネルギー解放率であり、き裂進展に伴うき裂面の弾性除荷を捉えることができないためである。このため、弾塑性き裂進展問題においてその物理的意味はなくなり、多くの適用限界が指摘されている^{42)~45)}。

以上のように、応力状態を一意に規定する破壊力学におけるパラメータは、き裂の開口量などの測定結果から理論的に換算できるために、それらの測定方法は既に確立されている。このような標準化された破壊靱性に関する測定法として、米国材料試験

協会（ASTM）の破壊靱性規格⁴⁰⁾や英国のCTOD試験法が挙げられる。これにより、各業界において破壊力学が構造物の設計に実際に活用されるようになった。なお、応力状態が一意に規定されることから、実験式における1つのパラメータとして用いられることも多い。例えば、疲労破壊におけるパリズ則⁴¹⁾や環境助長割れの一種である応力腐食割れ⁶⁾のき裂進展速度を経験的に表すのに用いられている。

1.3.2 損傷力学⁴⁶⁾

破壊力学では材料構成則とは独立な破壊パラメータを用いて破壊靱性値やき裂進展速度を表すのに対して、損傷力学は材料内部に生じる微小き裂や微細ポイドなどによる見かけ上の剛性の低下や降伏関数の変化を損傷として材料構成則に導入する理論である。この損傷力学は、材料の破壊挙動を現象論的に説明する現象論モデルと、材料の微視的なメカニズムに基づくモデルに大別される。

現象論に基づく損傷力学は、1958年に旧ソビエト連邦のKachanov⁴⁷⁾が金属材料のクリープ破断時間を予測するために、材料内部の損傷を表す抽象的な物理量を新たに導入したことを契機に発達した。この背景には、当時過熱化した宇宙開発競争や原子力開発によって高温強度とクリープ特性の定量的な評価が要請されていたためである。その後、LemaitreやChabocheを中心として不可逆熱力学理論を用いた研究が盛んに行われ、クリープ損傷以外にも多くの破壊現象を対象とするようになった。その代表的な例として、抽象的な物理量である損傷変数の発展方程式に塑性変形を考慮することで延性破壊を表現したLemaitreのモデル⁴⁸⁾がある。さらに、Lemaitre⁴⁹⁾は微視スケールにおける介在物により局所的な塑性変形が発生すると考え、セルフコンシステント理論を用いて微視スケールの塑性を考慮したモデルを高サイクル疲労破壊に適用している。しかし、このモデルでは損傷変数と微細ポイドの大きさや含有率を定量的に関連付けることは困難であると言われている。

一方、材料の微視的なメカニズムに基づく損傷力学モデルでは、微細ポイドの体積分

率などの具体的な物理量を用いて延性破壊などの特定の破壊現象が表現される。このようなモデルとして米国の研究者らが中心となって発展したのがGTNモデル（Gurson-Tvergaard-Needleman model）であり、現在も延性破壊の解析によく用いられている。GTNモデルは、Gurson²²⁾が微小微細ポイドを含む連続体を1つの同心球体ポイドを含む剛塑性球として仮定した剛塑性極限解析から、微細ポイドを含む損傷材料の関数を導いたことに端を発する。その後、TvergaardとNeedleman^{23),24)}によって修正・改良がなされ、現在の定式化に落ち着いた。このモデルを用いることで、微細ポイドの体積分率という物理的に意味の明確な物理量を用いて、平坦破壊とシェアリップ破壊の違いを再現することができる。その他にも、微細ポイドの発達に伴う質量密度の変化を考慮したRousselierモデル⁵⁰⁾などが材料の微視的なメカニズムに基づく損傷モデルの1つとして挙げられる。GTNモデルなどではポイド率を用いて延性破壊を表現するので、実験の破面観察から得られた微細ポイドの分布と定量的に比較することが可能である。しかし、微細ポイドの成長速度は圧縮の静水圧で負となり、微細ポイドの回復を意味するために、実際の金属の破壊現象と整合しない。

これらの損傷モデルは、計算機の普及と発展による有限要素法を用いた詳細な変形解析によってより緻密なモデルに改良されることで発展してきた。その意味で、損傷力学の発展には有限要素法が不可欠であったといえる。このように損傷力学が発展したもう1つの要因として、損傷力学は破壊挙動を材料構成則として表現するため、き裂進展に伴う要素の再分割などの特殊な技術を必要としない点が挙げられる。そのため、通常有限要素法と親和性が高く、比較的簡単に破壊問題の解析が可能となっている。

一方、損傷力学の欠点として材料構成則として破壊挙動を表現するため、き裂面が陽的に表現できないことが挙げられる。このため、き裂面同士の接触問題やき裂面からの化学種の流入などを厳密に考慮することができない。また、損傷に関する材料パラメータを一意に決めることが困難であることが知られている。これは破壊靱性規格

として標準化されている破壊力学とは相反する点であり、未だに実験力学における破壊の研究の中心が破壊力学を前提としている所以でもある。このために損傷力学は実際の構造物の設計に用いられる機会が未だに少ない。

1.3.3 結合カモデル

結合カモデルはDugdale³²⁾とBarenblatt³³⁾の帯状降伏モデルから発展し、Hillerborg^{51),52)}によって初めて数値解析に適用された。結合カモデルでは、破壊力学パラメータであるエネルギー解放率に加えて、結合カが最大となる臨界結合カ（もしくは、その際のき裂開口量である臨界き裂開口量）の2つの材料パラメータを用いて、古典的な破壊力学では考慮できないき裂の発生および進展過程をモデル化している。具体的には、連続体が破断する際の新たな表面の形成に伴って、第1.2.5項のように材料内部に蓄えられている応力が解放される過程を表現するのが結合カモデルである。現在では金属材料を始めとしてコンクリートやCFRPといった複合材料に対しても適用されており、汎用性の高いモデルであるといえる⁵³⁾。ただし、第1.2項のように破壊形態ごといき裂進展の過程は異なり、それに伴う応力の解放過程も異なるため、同じ金属材料であっても脆性破壊や延性破壊などの破壊形態ごとに様々な結合カモデルが提案されている。したがって、結合カモデルは汎用性が高いものの、現象の表現に関しては統一性に欠けることが指摘されている。以下では、脆性破壊・延性破壊・疲労破壊・水素脆化に対して提案されている結合カモデルについて概説する。

脆性破壊における結合カモデルでは、第1.2.1項で述べたようにへき開破壊における原子間分離を表現するために、原子間に生じる結合エネルギー（Universal Binding Energy Relation: UBER）⁵⁴⁾が用いられている。ここで、UBERとは複数の種類の原子に対して第一原理計算から求められた原子間距離と結合エネルギーの関係を与えるものである。この結合カモデルは、RiceとWang⁵⁵⁾、Needleman⁵⁶⁾によって同じ年にそれぞれ別々に提案されている。RiceとWang⁵⁵⁾はUBERに厳密に従ったモデルとして指

数型モデルを提案し、金属が温度によって延性から脆性へ変化する過程について考察している。これに対して、Needleman⁵⁶⁾はより工学的に扱い易くするために多項式に近似したモデルを提案し、き裂の発生過程について調べている。これらのモデルは、Griffithの理想破壊モデルにおいて正弦波で近似されていた原子間結合の関係を、第一原理計算に基づくより厳密な原子間結合の一般化された関数形である UBER に置きかえたモデルである。つまり、理想的な破壊形態に近いへき開破壊のように原子同士の分離によって生じる破壊を表しており、材料の微視的なメカニズムに基づくモデルといえる。また、このモデルをより単純化して結合力とき裂の開口変位の関係を三角形型に近似したモデルが Ortiz と Pandolfi⁵⁷⁾によって提案されている。さらに、Ortiz と Pandolfi らはそのモデルを 3次元に拡張し、混合モード下における脆性き裂進展問題に適用している。

延性破壊における結合力モデルでは、第 1.2.2 項での述べたように延性き裂は開口した後に進展を開始するため、き裂開口変位が一定値に達するまで結合力が臨界値を維持する台形型の関数が用いられている。しかし、Tvergaard と Hutchinson⁵⁸⁾によって提案されたこの結合力モデルは、シェアーリップ破壊のような延性破壊特有の形態を完全に表現するには至っていない⁵⁹⁾。なぜなら、前述のように微細ボイドの発生と成長過程には塑性変形が影響するが、台形型結合力モデルは応力のみを考慮して結合力と分離面同士の距離の関係を与えているにすぎず、塑性ひずみを考慮していないためである。

疲労破壊に対して結合力モデルを適用した先駆的な研究として、負荷・除荷過程の違いを考慮した Andres ら⁶⁰⁾の研究が挙げられる。しかし、負荷・除荷過程を考慮するだけでは一定振幅荷重問題に対しては有効であるものの、変動振幅荷重問題に対しては不十分であることが指摘されている²⁶⁾。これは第 1.2.3 項のように負荷時の結晶すべりによる微視的なき裂進展が表現されていないことに起因する。近年ではこのような

観点から負荷過程の微視的なき裂進展を表現した結合力モデルがいくつか提案されている。例えば、Nguyenら⁶¹⁾はき裂開口変位に応じた臨界結合力の低下として微視的なき裂進展を表現した履歴依存型の結合力モデルを提案している。また、Bouvardら⁶²⁾は熱力学的に基づく損傷変数の発展則で表現した結合力モデルを提案している。

水素脆化における結合力モデルでは、RiceとWangのモデルに対して第1.2.4項で述べた水素吸着説に基づいて水素濃度による表面エネルギーの低下が考慮されている⁶³⁾。その他の結合力モデルや損傷モデルでは水素濃度の影響を現象論的にしか考慮されていないのに対して、この結合力モデルは水素脆化のメカニズムを考慮した妥当なモデルであるといえる。しかし、一般的に知られているようにエネルギー解放率は表面エネルギーと塑性流れによる散逸エネルギーに別けられ、金属材料では表面エネルギーよりも散逸エネルギーの方が大きいため、散逸エネルギーも考慮する必要がある。

損傷モデルに対する優位性として、結合力モデルは材料パラメータの決定が容易な点が挙げられる。結合力モデルの多くはエネルギー解放率を材料パラメータの1つとしてしており、その同定方法は既に米国材料試験協会（ASTM）の破壊靱性規格などで確立されている。また、それらに基づいて多くの実験も行われているために、材料パラメータに関して既存のデータが豊富に存在する。このように破壊力学の概念を継承して発展した結合力モデルであるが、様々な破壊形態を表現するために多くの種類のモデルが存在する。これら破壊形態を全てを表現できる完全なモデルは現在までに存在しない。したがって、同じ破壊形態の問題であっても研究者ごとにそれぞれ異なるモデルを用いており、モデルとしての統一性に欠けることが指摘されている。また、既存のモデルでは延性破壊特有の形態であるシェアーリップ破壊を表現できていないために、未だ改善の余地が残されているといえる。

1.4 破壊の数値解析手法に関する先行研究

本節では、まず前述した破壊力学や損傷力学に基づく破壊モデルを有限要素法に適用した際の利点と欠点を整理する。次に、き裂進展に伴う要素の再分割を必要としないメッシュフリー法に代表される一般化有限要素法について概説し、その破壊問題への適用性について述べる。最後に、これらのことを踏まえて現状の数値解析手法の課題を整理する。

1.4.1 破壊力学と損傷力学の有限要素法への適用

前節で述べた破壊力学および損傷力学に基づくモデルを数値解析の枠組みに導入する際には、それらの特徴に応じてそれぞれ異なる方法が用いられる。実際、破壊力学がき裂先端近傍に着目して理論が構築されているために、既にき裂などの不連続性を含む構造物が対象となるのに対して、損傷力学では材料構成則に材料の軟化挙動を考慮するために連続体を対象としている。

有限要素法を用いてき裂面を表現する方法としては、き裂面上に二重節点を設けることで変位の不連続性を陽的に表現するのが一般的である。破壊力学に基づきエネルギー解法率、応力拡大係数やJ積分などを有限要素法から求める場合には、二重節点を用いてき裂を表現した上で仮想き裂閉口積分法など^{64),65)}などを適用することが多い。また、結合力モデルは二重節点で挟まれる領域に設けられ、き裂の形状が陽的に表現されていることが前提となる。そのため、き裂開閉口挙動を適切に表現することができ、き裂面同士の接触問題も比較的容易に扱うことができる⁶⁶⁾。その反面、結合力モデルを設定する箇所は潜在き裂面としなくてはならないため、予めき裂の進展方向を予測しておく必要がある。そのため、アダプティブ有限要素法^{67),68)}などを用いてき裂進展に伴って要素再分割を行い、結合力モデルをき裂先端近傍に挿入しながら解析を行うことになる。しかし、このような解析手法を用いた場合には、要素の再分割に伴っ

て要素を構成する節点情報の更新と二重節点を設ける必要があるために、その解析アルゴリズムは煩雑化する。

一方、損傷モデルは材料の軟化挙動を材料構成則で表現しているために、通常の有限要素法に対して特別な処理を行う必要はなく、物質点あるいは積分点における軟化挙動が要素剛性の低下として解析に反映される。このため、き裂の幾何形状を陽的に表現する必要はなく、延性破壊により形成される三次元的な破壊面を比較的容易に再現することができる²⁵⁾。また、結合力モデルのようにき裂の進展経路を予測する必要がなく、解析モデルにおいて任意の箇所からのき裂の発生と進展を表現することができる。このように損傷モデルでは比較的容易にき裂の進展を要素剛性の低下として表すことができるが、材料軟化につれて要素剛性行列の正定値性が失われる。このため、解析からその要素を取り除くなどの対応が取られることがあるが、その場合には質量保存則が満たされず、特に動的問題への適用が困難となる。また、き裂の形状が幾何学的な面として表現されないため、き裂開閉口挙動を的確に表現することは困難であり、き裂面での接触の取り扱いが煩雑になるといった欠点もある。

1.4.2 一般化有限要素法の発展とそのき裂進展問題への適用

通常の有限要素法以外にも、メッシュレスやメッシュフリーと呼ばれる新たな離散化解析手法を用いたき裂進展解析手法が提案されている。これらの手法に共通する特徴は、有限要素法と同様につり合い方程式を弱形化し、変位場の補間関数を工夫することでき裂進展に伴う変位の不連続性を解析に反映させる点である。これにより、新たなき裂面の生成による要素の再分割を行うことなくき裂進展解析を行うことができる。

このような手法の先駆けとして登場したのが、補間関数に移動最小自乗近似を用いるエレメントフリーガラキン法^{69),70)}である。この手法に代表されるメッシュレス法やメッシュフリー法には要素の概念が存在せず、節点のみで解析が行われる点が注目され、き裂進展解析への適用性が期待された。しかし、弱形式化した支配方程式を採

用しているために領域積分の計算が必要であり，要素が存在しないことでその計算アルゴリズムが複雑化する⁷⁰⁾．また，要素がないことで基本境界^{71)~74)}・材料界面における変位の拘束条件^{75)~77)}・節点配置の取り扱いが煩雑になること⁷⁸⁾も欠点として知られている．このような課題を解決していく過程で，次第に要素の重要性が再認識されるようになった．

このような中で，新たに登場したのが X-FEM や G-FEM と呼ばれる一般化有限要素法である．これらの方法は，メッシュレス法の枠組みで適用された Partition of Unity (PU) 条件^{79),80)}を有限要素法の枠組みで積極的に活用し，要素特性に反映させる解析手法とみなすことができる．X-FEM^{81)~84)}では，要素を構成する節点上での近似関数にき裂先端の特異場や変位場の不連続性を有するエンリッチ関数を付加し，PU 条件を満たすように近似関数を構成することで，き裂の不連続性^{85)~91)}や異種材料界面^{92)~95)}を表現している．また，G-FEM は有限要素法の形状関数の高次化をはかるもので，解の精度向上に焦点を当てた手法である^{96)~98)}．ところで，これら以前に提案された手法として，有限要素法と不連続解析法の両方の特徴を併せ持つ Numerical Manifold Method (NMM)^{99)~101)}がある．この手法はメッシュレス法の枠組みで PU 条件の重要性が認識される以前に提案されていたが，適用対象が岩盤などの運動シミュレーションに限定されていたために，2000 年第になるまで注目されていなかった．その後，NMM のメッシュフリー的な特徴と有限要素法としての側面を強調した有限被覆法が登場し，一般化有限要素法の 1 つとして認識されるようになった．これらの方法は要素の内部に変位の不連続性を導入できるため，き裂進展解析手法として多くの破壊問題に適用されてきた．

しかし，この一般化有限要素法も弱形式に基づくため，き裂面の進展に伴って不連続面で要素が分割された場合には，それぞれの領域に対して領域積分を実行しなくてはならない．特に，き裂先端が要素内部にある場合には要素を積分領域毎に分割する

ことが困難になる。また、X-FEMでは破壊力学において導かれたき裂先端の特異場をエンリッチ関数として用いることで対処しているが、この方法は破壊力学が適用可能な線形および非線形弾性問題に限られ、弾塑性問題においてはき裂先端の塑性変形によって変位場も異なるために適用できない。

一方、一般化有限要素法と結合モデルを併用する場合には、き裂の発生から進展までの過程を表現できるため、き裂先端を陽的に表現する必要はなく、潜在き裂面を定義するだけでよい。すなわち、予め要素を完全に不連続面で分割し、結合モデルをその面上に設けることで、き裂進展に伴う先端部の移動はその面上において表現されることになる。このように、一般化有限要素法に結合モデルを適用する場合には、要素を完全に不連続面で分割できるので、分割された各領域の積分のための再分割のみを行えばよい。このような1つの要素内における再分割にはMarching Cubes法などの既存の六面体分割アルゴリズムを適用可能であり、き裂面形状を表現するためにアダプティブ有限要素法を適用するよりはるかに少ない労力で済む。

以上のように一般化有限要素法と結合モデルを併用した方法は比較的簡単に任意き裂進展を解析できるが、前述のように要素内部に不連続面を潜在き裂面として仮定するために、脆性破壊や疲労破壊のようにき裂が最大主応力の方向と垂直な方向に進展することが予測できる問題に適用が限られる。特に、延性破壊においてはき裂は、主応力にのみ依存するわけではないため、き裂の進展方向を予測することは困難であり、このような手法を適用することはできない⁵⁹⁾。

1.4.3 破壊問題における数値解析手法の現状と課題

前述のように、損傷モデルは材料の軟化挙動を材料構成則で表現するめに、通常の有限要素法との親和性が高い。これに対して、破壊力学モデルの一種である結合モデルは一般化有限要素法との相性が良い。また、これら2つのモデルはき裂の不連続性の表現方法に起因して、相反する利点と欠点を有している。すなわち、損傷モデルは

き裂の発生や進展に特別な基準を設ける必要がなく、き裂の発生から材料剛性の低下を表すのに適しているといえる。これに対して、結合カモデルを用いた方法ではき裂面の幾何形状を陽に表現するため、材料の軟化挙動から完全に不連続面が形成されるまでの過程を表すのに適しているほか、き裂が完全に生成した後のき裂面同士の接触問題を比較的簡単に表現することができる。そのため、破壊の初期段階に連続体損傷モデルを用いた後に、この状態と等価なエネルギー状態の状態に移行することで、損傷モデルと結合カモデルを併用して破壊挙動を再現する試みが行われている^{102),103)}。しかし、このような方法を用いたとしても、2つのモデルは前述のようにき裂の不連続性の表現方法が異なるために、損傷モデルから結合カモデルへ連続的に移行するための理論は整備されていない。以上のように、損傷モデルのような連続体モデルとしてき裂を表す手法から、結合カモデルのような陽的にき裂を表す手法へと連続的に遷移できる数値解析手法は現在のところ存在しない。

1.5 研究の位置付けと目的

本節では、以上に述べてきた破壊力学および損傷力学に基づくモデルや結合カモデルの利点や欠点を整理し、課題を明確化したうえで、本研究の目的を述べる。

材料の破壊挙動を表す破壊力学および損傷力学に基づくモデルには、それぞれ以下の利点と欠点がある。

- 古典的な破壊力学は、物理的根拠が明確であり、材料パラメータの同定方法が確立されているが、延性破壊のような弾塑性き裂進展問題は扱うことができない。
- 損傷力学は、延性破壊に特有の現象であるシェアリップ破壊まで含めて再現できるが、材料パラメータを一意に定めることが難しい。

一方、破壊力学から発展した結合カモデルには以下の利点と欠点がある。

利点

- 破壊力学の知見を活用できるために材料パラメータの同定が容易である。
- 脆性破壊に対しては原子レベルの微視的な破壊現象に基づいている。
- き裂面形状を陽的に表現することが前提となるため、き裂面の接触条件や環境条件の取り扱いに長けており、疲労破壊のようにき裂面同士の接触を伴う問題にも対応可能である。
- 水素吸着説に従って結合力モデルを拡張することで、水素脆化を表現することができる。

欠点

- 現象に応じてそれぞれ個別の定式化がなされてきたため、前述のような多様な破壊現象を統一的に扱うことができない。
- 延性破壊の挙動を一部表現できるものの、塑性変形が考慮されていないためにシェアリップ破壊などを含む3次元的な挙動の再現は不得手である。
- 結合力モデルを有限要素法に適用するためには、き裂の方向を予測し、潜在き裂面を定義する必要がある。

そこで本研究では、ここで挙げた結合力モデルの利点を失うことなく、欠点を克服し、金属材料における様々な破壊現象を表現できる一般化結合力モデルを提案するとともに、破壊の初期段階から最終段階を途切れなく解析できる手法を構築する。具体的には、脆性破壊・延性破壊・疲労破壊・水素脆化を区別することなく、それぞれの現象を網羅的に表現できる結合力モデルの一般化形を提案する。そして、き裂に先行して発生する損傷がもたらす材料剛性の低下と軟化挙動を表すために、結合力モデルを損傷構成則の枠組みに導入した結合力埋込型構成則を提案する。さらに、繰り返し载荷時

のき裂面同士の接触問題や化学種が流入するき裂表面の問題を取り扱うために、破壊の最終段階におけるき裂形状は有限被覆法を用いて陽的に表現する。そして、破壊の初期段階には提案する結合力埋込型損傷構成則を適用し、材料の軟化域では一般化結合力モデルと有限被覆法を併用することで、図 1.7 のような材料剛性の低下からき裂が完全に形成される段階をシームレスに接続できる新しいき裂進展解析手法を開発する。本論文の構成は以下の通りである。

- **第 2 章**では、金属材料の多様な破壊現象を表現できる破壊モデルとして一般化結合力モデルを提案する。まず原子レベルの微視的な破壊現象に基づく結合力モデルを原形として、疲労破壊や水素脆化のメカニズムのメカニズムに着目することで、これらを表現可能なモデルに拡張する。次に、既往の結合力モデルでは表現が難しいとされている延性破壊に対応できるように、熱力学的なエネルギー収支の観点から塑性変形の影響を再度検討し、結合力モデルの一般化形を新たに提案する。この一般化結合力モデルを構築する過程で、疲労破壊・水素脆化・延性破壊それぞれのき裂進展解析例を示し、その性能を例証する。
- **第 3 章**では、各物質点において主応力方向と直交する面に仮想的なき裂面を想定し、その面上に結合力モデルを導入した結合力埋込型損傷構成則を提案し、これを用いたき裂の進展解析を行う。この提案する損傷構成則は任意の結合力モデルと任意の弾性・非弾性構成則との組み合わせが可能なものであり、弾塑性構成則を用いれば延性破壊も表現可能である。例として、第 2 章で構築した一般化結合力モデルと等方塑性構成則を適用することで、延性破壊における 3 次元的に複雑なき裂進展挙動の再現が可能であることを示す。また、結晶塑性構成則を用いることで、単結晶に対する異方性損傷構成則にも拡張できることを解析例を通して示す。なお、本研究では変形によって主応力方向が逐次変化する場合であっても、き裂の方向と主応力方向を一致させるために、つり合い条件とき裂進展の条件が

同時に満足されるような解法を採用し，その正当性・優位性を例証する．

- **第4章**では，図 1.7 のような材料剛性が低下するき裂の発生段階から，き裂面が完全に形成される段階までを連続的に表現できるシームレスき裂進展解析手法を提案する．まず，有限被覆法によるき裂進展解析を効率的かつ精度よく行うために，多面体自動再分割アルゴリズムを提案し，分割後に定義される新たな積分点に状態変数をマッピングする方法を実装する．これにより，第3章で提案した損傷モデルから有限被覆法への移行に際して全体の釣り合い条件の不整合を最小限に抑えることができ，破壊の初期段階から最終的な段階までをシームレスにつなぐき裂進展解析が可能となる．いくつかの解析例を通して，本章で提案した手法の性能を検証する．
- **第5章**では，本研究で得られた成果や結論の総括を行うとともに，今後の課題と展望を述べる．

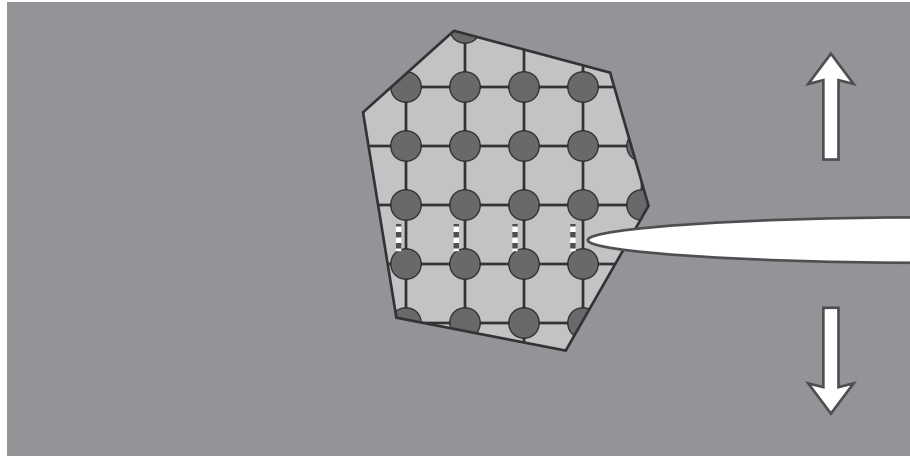


図-1.1 脆性破壊（へき開破壊）におけるき裂進展



図-1.2 カップアンドコーン破壊²⁰⁾

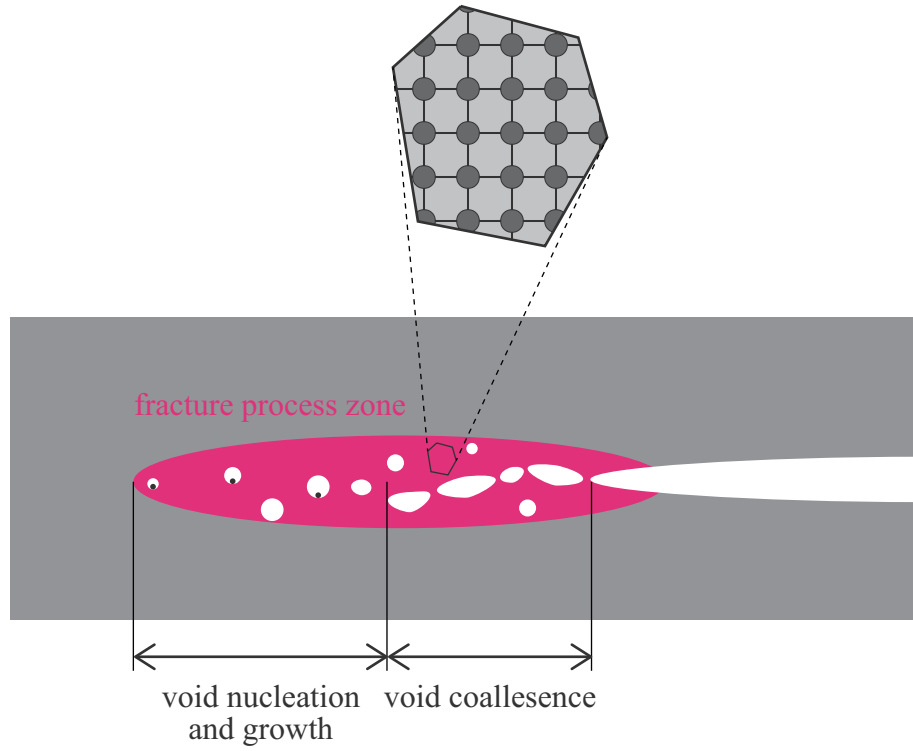


図-1.3 延性破壊におけるき裂進展

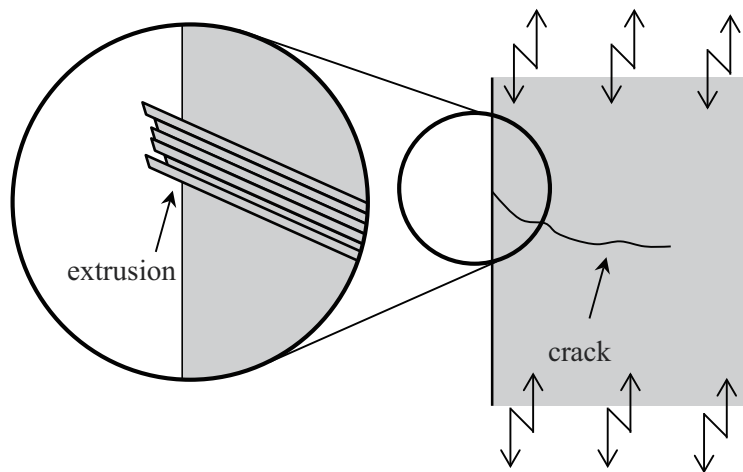


図-1.4 突出しの形成と疲労き裂の発生

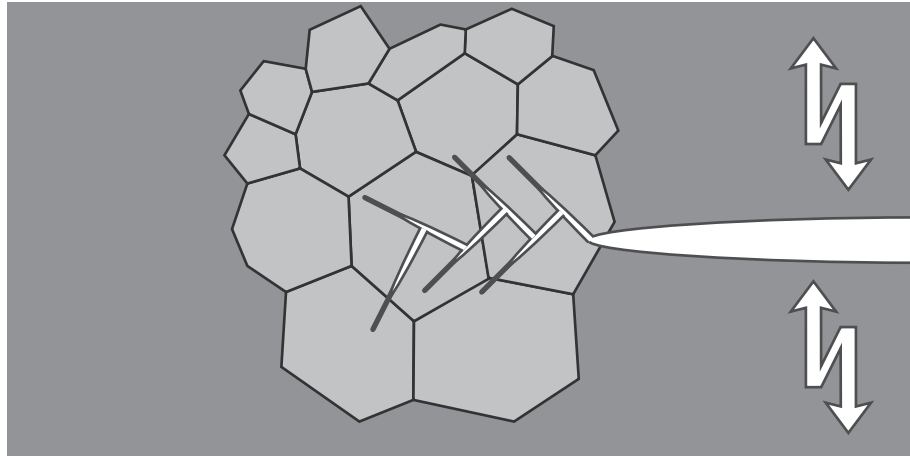


図-1.5 疲労破壊におけるき裂の安定成長

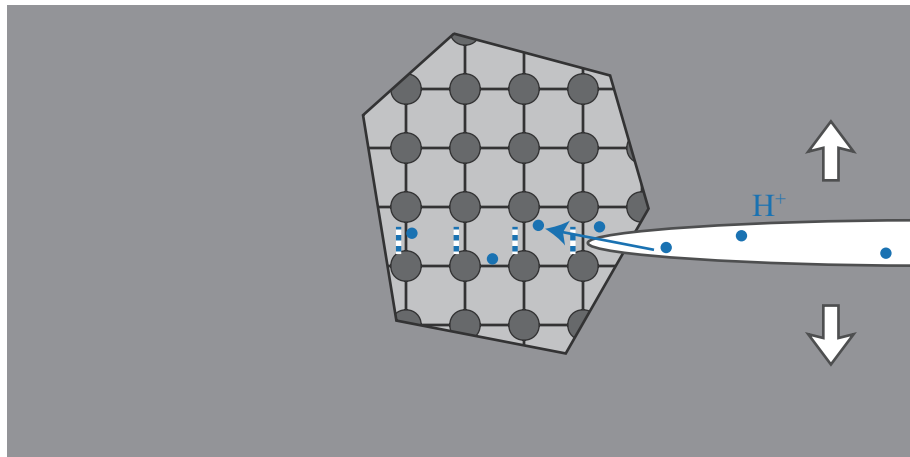


図-1.6 水素脆化におけるき裂進展

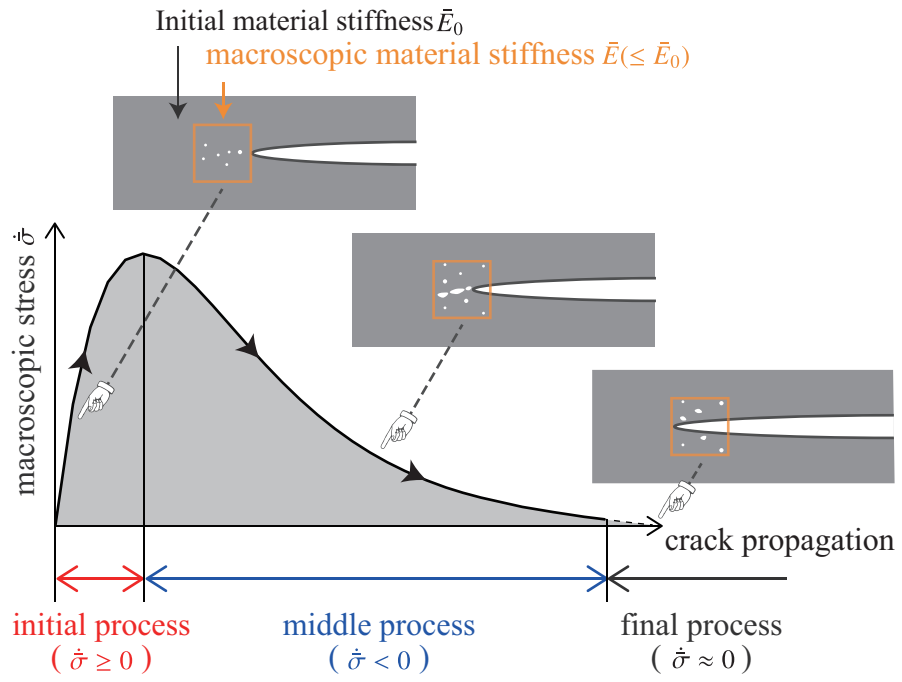


図-1.7 き裂進展に伴う巨視的挙動

2. 多様な破壊現象を表現可能な一般化結合力モデル

2.1 はじめに

図2.1に示すように金属材料における多くの破壊現象はお互いに遷移する関係にあるが、その遷移過程はほとんどわかっていない。例えば、常温時には延性に富む金属材料であっても、低温になるに従ってその性質は脆性を示すようになり、破壊形態は延性破壊から脆性破壊に遷移する。また、繰り返し载荷の振幅を大きくすると、高サイクルから低サイクル疲労となり、最終的に脆性破壊もしくは延性破壊になる。このため、疲労破壊も変動荷重の大きさによって破壊形態が遷移しているといえる。

一方、水素脆化などの環境助長割れの問題は、化学的作用による材料の劣化に加えて前述の各破壊形態にも影響を及ぼすが、以下に述べるように、現状では個別の評価がなされている。疲労破壊におけるき裂進展速度は、応力拡大係数 K を用いて次のパリス則で与えられる。

$$\frac{da_F}{dN} = C\Delta K^m \quad (2.1)$$

ここで、 a_F は疲労き裂進展量、 N は繰り返し荷重のサイクル数、 ΔK は応力拡大係数範囲、 C および m は材料パラメータである。また環境助長割れの進展速度は、パリス則

と同様の指数型のき裂進展則として,

$$\frac{da_{\text{EAC}}}{dT} = \alpha K^\beta \quad (2.2)$$

で表されることが経験的に知られている。ここで、 a_{EAC} は環境助長割れのき裂進展量、 T は経過時間、 α および β は環境と材料に依存する定数である。これら2つのき裂進展則を比較すると、環境助長割れの進展速度が経過時間 T に依存するのに対して、疲労寿命は荷重の繰り返し数 N で表される。ゆえに、これらの2つの破壊現象が複合的に発現する際のき裂進展則を経験的に求めるためには、経過時間と荷重の繰り返し回数との関係が加わるので無数のパターンの実験を行う必要がある。しかし、すべての荷重条件と環境条件を想定して実験することは不可能である。そのため、一般的には環境助長割れと疲労破壊のそれぞれ別々に求めたき裂進展則を重ね合わせた次式を用いて評価されている。

$$\frac{da}{dN} = \frac{da_F}{dN} + \frac{1}{f} \frac{da_{\text{EAC}}}{dT} \quad (2.3)$$

ここで、 f は荷重周波数である。このような重ね合わせでモデル化する他にもき裂の進展速度の速い方を用いる方法も提案されているが、どちらの方法も便宜的に用いられているに過ぎない。実際、これらの方法はそれぞれのき裂進展のメカニズムを考慮している訳ではなく、実験に基づく経験則である。そのため、第1.3.3項に示したようにき裂進展に伴う応力の解放過程を微視的メカニズムに基づいて表現可能な結合力モデルを用いて、それぞれの破壊現象を統一的に表すことで、複合的な破壊現象にも適用できると考えられる。

以上の現状を踏まえて、本章では脆性破壊・延性破壊・疲労破壊および水素脆化などの破壊形態の連続的な遷移挙動を表現可能な結合力モデルの一般化形を提案する。本研究ではこの提案モデルを一般化結合力モデルと呼称することにする。第2.2節では、本章で提案する一般化結合力モデルの原形となる結合力モデルを概説する。第2.3節で

は、このモデルに疲労破壊を考慮できるように、熱力学的方法に従って材料の損傷を表す損傷変数を導入する。材料パラメータ等に関する基礎的検討を行った後、多結晶体における疲労き裂進展挙動に関する数値解析例を示す。また、過大荷重が作用した後の疲労寿命についても検討する。第2.4節では、水素吸着説に基づき水素濃度によるエネルギー解放率の変化を考慮することで、提案モデルを水素脆化よるき裂進展を表現可能なものに拡張する。第2.5節では、脆性破壊・疲労破壊・水素脆化という3つの破壊現象を表現可能な提案モデルに塑性変形の影響を考慮することで、延性破壊も表現できる一般化結合力モデルを提案する。ここで三点曲げの数値解析を通して、提案した一般化結合力モデルが延性破壊特有の破壊形態であるシェアリップ破壊を表せることを示す。さらに、この三点曲げ解析モデルに繰り返し载荷を加えて、疲労破壊の解析を行い、単調载荷による破壊挙動との違いを表現できることを検証する。

2.2 原子間レベルの微視的な破壊に基づく結合力モデル

本節では、一般化結合モデルの原形とした原子間レベルの微視的な破壊に基づく Rice と Wang⁵⁵⁾のモデルについて概説する。この結合力モデルは、第1.2.1項で述べたようにへき開破壊における原子間分離を UBER を用いて表現したものである。ただし、実際の材料内部には炭化物などの介在物や第二相粒子があり、それらの界面が起点となって微小き裂が発生することで脆性破壊が開始するため、臨界結合力 t_c は原子間力よりも小さい値となる。そのため、Rice と Wang のモデルで有効き裂開口変位 w を原子間距離にすると、本来の強度よりも過大に評価されることが知られている。実際には、臨界有効き裂開口変位 w_c (もしくは臨界有効結合力 t_c) は実験から同定されるべき材料パラメータであり、Rice と Wang のモデルは巨視的な材料の分離過程と微視的な原子間の分離過程に相関性を仮定している。この妥当性に関しては多くの研究者によって検討されている。例えば、Nguyen と Ortiz¹⁰⁴⁾は巨視的なき裂開口変位と結合力の関数

形と UBER には相関があることを解析的に導いている。また、Hao ら¹⁰⁵⁾は分子動力学計算から同様に巨視的なき裂開口変位と結合力、および原子間結合の関係には相関があることを示している。さらに、この結合力モデルを用いた数値解析と実験を比較し、き裂進展速度やき裂進展方向などの定量的・定性的に検討した研究も報告されている^{57),66),106)~109)}。本研究では Rice と Wang の結合力モデルを原形として、以下の節において疲労破壊・水素脆化・延性破壊へと対応できるように結合力モデルを拡張する。

微視的な破壊に基づく結合ポテンシャル⁵⁵⁾は次の形式である。

$$\Psi(w) = G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right) \right] \quad (2.4)$$

ここで、 w は後述する有効き裂開口変位を表すスカラー量であり、 w_c は臨界有効き裂開口変位である。また、 G_c は臨界エネルギー解放率である。この結合ポテンシャル Ψ を有効き裂開口変位 w で微分することで、有効結合力 t が次式のように得られる。

$$t(w) = \frac{\partial \Psi(w)}{\partial w} = \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right) \quad (2.5)$$

この関数形を図 2.2 に示すが、臨界エネルギー解放率 G_c は曲線と横軸で挟まれる部分の面積であることが次式により確認できる。

$$G_c = \int_0^{\infty} t \, dw \quad (2.6)$$

また、き裂開口変位 w が臨界値 w_c に達した際の有効結合力を t_c とし、式 (2.5) に臨界き裂開口変位 w_c を代入すると、次式のような臨界有効結合力 t_c と臨界き裂開口変位 w_c の積の関係を導くことができる。

$$G_c = e t_c w_c \quad (2.7)$$

ここで、 e は自然対数である。

この Rice と Wang⁵⁵⁾の結合力モデルでは、図 2.2 のようにき裂開口有効変位 w がその臨界値に達した後に、その増加に伴って有効結合力 t はゼロに漸近する。すなわち、

連続体内部のある面における応力ベクトルのノルム t が臨界有効結合力 t_c に達すると、その面上の応力が徐々に解放されて新たなき裂面が形成されることになる。古典的な破壊力学との違いは、臨界エネルギー解放率 G_c に加えて、臨界き裂開口変位 w_c もしくは臨界有効結合力 t_c といったパラメータが新たに加わる点である。ただし、 G_c を材料パラメータとして一定と考え、 $w_c \rightarrow 0$ とすると式 (2.7) より $t_c \rightarrow \infty$ となる。これは、き裂先端では特異応力場となることを意味し、古典的な線形破壊力学モデルも整合している。

有効き裂開口変位には Ortiz ら⁵⁷⁾によって導入された次式を採用する。

$$w = \sqrt{w_n^2 + \beta w_s^2} \quad (2.8)$$

ここで、 w_n はき裂面に垂直な方向のき裂開口変位、 w_s はき裂面内方向のき裂開口変位を表し、 β は破壊モードの比を表す 1 以下の係数である。これにより、垂直方向および接線方向の結合力ベクトルは、次式のように結合ポテンシャルをそれぞれの方向のき裂開口変位ベクトルで微分することで得られる。

$$t_n = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_n} = \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_n}{w_c} \right) \exp\left(-\frac{w}{w_c}\right) \quad (2.9)$$

$$t_s = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_s} = \beta \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_s}{w_c} \right) \exp\left(-\frac{w}{w_c}\right) \quad (2.10)$$

これらの二式を比較すると、き裂面に垂直な方向の結合力 t_n よりも、き裂面内方向の結合力 t_s が破壊モード比 β 分だけ小さくなっていることがわかる。また、有効結合力とは次式のような関係がある。

$$t = \sqrt{t_n^2 + \frac{1}{\beta} t_s^2} \quad (2.11)$$

以上をまとめると、原子レベルの微視的破壊に基づく結合力モデルは次のようになる。

- 結合ポテンシャル

$$\Psi(w) = G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp\left(-\frac{w}{w_c}\right) \right]$$

- 有効き裂開口変位

$$w = \sqrt{w_n^2 + \beta w_s^2}$$

- 結合力

$$t_n = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_n} = \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_n}{w_c} \right) \exp\left(-\frac{w}{w_c}\right)$$

$$t_s = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_s} = \beta \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_s}{w_c} \right) \exp\left(-\frac{w}{w_c}\right)$$

2.3 繰り返し載荷時における疲労損傷

2.3.1 疲労破壊における結合力モデル

第 1.2.3 項で述べたように、疲労破壊では繰り返し載荷によって発生する交互すべりによってき裂が徐々に進展する。本項では、前述した原子間レベルの破壊に基づく結合力モデルを用いて疲労破壊を表現できるように拡張する。まず、疲労破壊における先駆的な結合力モデルである Andres ら⁶⁰⁾の負荷・除荷過程の違いを考慮したモデルを説明し、その問題点を指摘する。そして、この問題点を解決した履歴依存型の結合力モデルを紹介し、これを参考にして前述の結合力モデルで疲労破壊を表現できるように拡張する。

負荷・除荷過程を考慮した結合力モデル

Andres ら⁶⁰⁾のモデルで荷重の負荷・除荷過程を考慮した場合、図 2.2 のように除荷過程では有効結合力は原点に向かって線形的に減少し、再負荷過程では除荷開始時点

で最大到達有効き裂開口変位 w_{\max} まで除荷過程と同じ経路をたどり、 w_{\max} を超えた段階で再び式 (2.5) に従って減少する。この除荷および w_{\max} までの再負荷過程を数式で表すと、

$$t = \frac{t_{\max}}{w_{\max}} w \quad (2.12)$$

となる⁶⁰⁾。ここで、 t_{\max} は最大到達有効結合力である。このように、負荷・除荷過程を考慮する場合には、新たに内部変数として w_{\max} が加わることになる。

しかし、この結合力モデルは一定振幅荷重問題に対しては有効であるが、変動振幅荷重問題に対しては不十分であることが指摘されている。具体的には、このモデルにおいてひとたび最大到達有効き裂開口変位 w_{\max} までき裂が開口すると、その後の繰り返し荷重でそれ以下の開口しか生じない場合には、原点と w_{\max} までの直線の経路をたどるだけである。つまり、図 1.5 のように再載荷時の結晶すべりに起因する微視的なき裂進展が表現されていないために、変動荷重問題を適切に取り扱うことができない。

熱力学構成理論に基づき損傷変数を導入した結合力モデル

近年では再載荷時の微視的なき裂進展を表現するために履歴依存型の結合力モデルが盛んに研究されている。Nguyen ら⁶¹⁾は現象論的に剛性が低下するモデルを提案しているのに対して、Bouvard ら⁶²⁾は熱力学に基づき損傷の発展則を結合力モデルに導入する定式化を提案している。しかし、この損傷変数を導入した結合力モデルは単なるペナルティーバネであり、材料に損傷が発生しない場合には破壊は生じない。従って、前述のへき破壊のように材料内部がほとんど損傷することなく原子間の分離による脆性破壊的な現象を再現できない。

そこで、第 2.2 節に示した脆性破壊を表現可能な結合力モデルに対して、繰り返し載荷によって発生する微視的なき裂進展を表す損傷変数 D を熱力学的な方法で導入した

次の結合ポテンシャルおよび有効結合力を提案する.

$$\Psi = (1 - D)G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right) \right] \quad (2.13)$$

$$t = (1 - D) \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right) \quad (2.14)$$

損傷変数と同伴な熱力学的力 Y は, 物理的には微視的なき裂進展による結合ポテンシャルの解放率を意味し, 次式のように表される.

$$Y = -\frac{\partial \Psi}{\partial D} = G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right) \right] \quad (2.15)$$

前述のように, 疲労破壊に至る過程には結晶すべりに起因して微視的なき裂進展が生じるため, 損傷変数の発展方程式としては材料の塑性履歴が考慮されるべきであるが, 本研究では簡単のため, Bouvard ら⁶²⁾が提案した次式を採用する.

$$\dot{D} = C(1 - D)^m \langle \sqrt{Y} - \sqrt{Y_{th}} \rangle^n \left| \frac{\dot{w}}{w_c} \right| \quad (\text{if } \dot{Y} \geq 0) \quad (2.16)$$

$$\dot{D} = 0 \quad (\text{otherwise}) \quad (2.17)$$

ここで, C, m および n はそれぞれ材料定数である. また, $\langle \bullet \rangle$ は Macauley 括弧を表し, Y_{th} は損傷が生じる臨界値であり, この値を超えると損傷が生じる. 物理的には, 前述のように Y が微視的なき裂進展に伴う結合ポテンシャル解放率であるので, Y_{th} は微視的にき裂が進展する靱性値とみなすことができる. このように式 (2.17) の n 乗の因数部が微視的なき裂進展の開始を表し, m 乗の因数部がその時間発展を表現する. また, クリープ疲労ではき裂開口変位の速度によって疲労き裂の進展速度が変化するため, 式 (2.17) にはき裂開口変位の速度 \dot{w} を含む因数部が導入されている. なお, 損傷変数の発展方程式については後述する第 2.5 節において, 次式による結果を踏まえて再度検討する.

図 2.3 の赤い実線のように負荷時における損傷変数の増加によって結合力モデルの剛性が徐々に低くなることで, 疲労き裂の微視的な進展を表現した. ただし, 今回は簡

単のため $Y_{th} = 0.0$ としている。以上をまとめると、原子レベルの微視的破壊に基づく結合力モデルを疲労破壊を表現できるように、拡張したモデルは次のようになる。

- 結合ポテンシャル

$$\Psi = (1 - D)G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp\left(-\frac{w}{w_c}\right) \right]$$

- 有効き裂開口変位

$$w = \sqrt{w_n^2 + \beta w_s^2}$$

- 結合力

$$t_n = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_n} = (1 - D) \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_n}{w_c} \right) \exp\left(-\frac{w}{w_c}\right)$$

$$t_s = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_s} = \beta(1 - D) \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_s}{w_c} \right) \exp\left(-\frac{w}{w_c}\right)$$

- 損傷変数の発展方程式

$$\dot{D} = C(1 - D)^m \langle \sqrt{Y} - \sqrt{Y_{th}} \rangle^n \left| \frac{\dot{w}}{w_c} \right| \quad (\text{if } \dot{Y} \geq 0)$$

$$\dot{D} = 0 \quad (\text{otherwise})$$

- 損傷変数と同伴な熱力学的力

$$Y = -\frac{\partial \Psi}{\partial D} = G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp\left(-\frac{w}{w_c}\right) \right]$$

2.3.2 提案モデルの基礎的検討

提案した結合力モデルおよび結晶塑性構成則を用いて多結晶体におけるき裂進展解析を実施し、提案モデルの要素サイズ依存性および損傷パラメータについて検討する。高サイクル疲労におけるき裂進展速度は、弾性解析においてき裂先端の変位場・応力場

を規定する応力拡大係数を用いて、式(2.1)のようにパリズ則で表される。しかし、結晶塑性構成則を用いた弾塑性解析では応力拡大係数を厳密に定義できないため、Irwinの推定法を用いてき裂先端における塑性域の大きさを算出した上で、応力拡大係数によって規定される変位場を付加する修正バウンダリーレイヤー解析 (Modified Boundary Layer Analysis: MBLA) を塑性域よりも十分に大きな領域に対して行う。これにより弾塑性解析から応力拡大係数とき裂進展速度の関係を求め、パリズ則との比較から結合力モデルのパラメータについて検討する。また、き裂先端の漸近解や Irwin の推定法はともに巨視的な等方均質体を仮定しているため、多結晶体のマクロ材料パラメータを求める必要がある。そこで、結晶塑性構成則で表現される結晶粒によって構成される多結晶体金属に対して、均質化法に基づく数値材料試験からマクロ材料パラメータを求める。数値材料試験の詳細については参考文献¹¹⁰⁾に記されているので、ここでは省略する。

修正バウンダリーレイヤー解析

MBLA ではき裂先端近傍の円形領域周辺 (図 2.4 の灰色の領域) に、き裂先端の漸近解に基づく変位場 u_x および u_z を付加する。これは応力拡大係数を用いて次式のように表される。

$$u_x = \frac{K_I}{2\bar{G}} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[\frac{3-\bar{\nu}}{1+\bar{\nu}} - 1 + 2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] \quad (2.18)$$

$$u_z = \frac{K_I}{2\bar{G}} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[\frac{3-\bar{\nu}}{1+\bar{\nu}} + 1 - 2 \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] \quad (2.19)$$

ここで、 K_I, r, θ および \bar{G} はそれぞれモード I の応力拡大係数、き裂先端から境界までの距離、き裂先端からの角度およびマクロせん断弾性係数である。ここで、マクロせん断弾性係数 \bar{G} はマクロ弾性係数 \bar{E} およびポアソン比 $\bar{\nu}$ により次式のように定義した。

$$\bar{G} = \frac{\bar{E}}{2(1-\bar{\nu})} \quad (2.20)$$

ここで、これらの材料パラメータは結晶塑性レベルのミクロスケールではなく、マクロスケールのパラメータであるため、後述する均質化法に基づく数値材料試験によって同定する必要がある。

ここでのき裂進展解析に際してはき裂進展に伴う応力拡大係数の変化は無視するものと仮定する。ただし、実験的にパリス則を求める際にはビーチマークの間隔などからき裂進展速度を算出する。この算出に際しては、ビーチマーク同士の間における応力拡大係数やき裂進展速度の変化は考慮されず、それぞれの値は平均値として計算される。そのため、実験においても同様の仮定がなされているといえる。また、き裂先端にける漸近解は弾性論に基づくため、塑性域(図中赤色の領域)はこの変位場を付加した領域内に含まれている必要がある。そこで、Irwin の推定法³¹⁾に基づき塑性域寸法 r_{ys} を次式のように見積もる。

$$r_{ys} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{K_I}{\bar{\sigma}_{ys}} \right)^2 \quad (2.21)$$

ここで、 $\bar{\sigma}_{ys}$ はマクロ降伏応力である。以下の解析はこの塑性域寸法よりも大きい領域で行っている。

マクロ均質化材料パラメータの同定

解析対象としたユニットセルは図 2.5 のような 16 個の結晶粒からなり、各結晶粒の形状は六角形とする。その各結晶粒はすべり系の数が 12 個の面心立方格子 (FCC) であり、それぞれの結晶方位は乱数を発生させて与えている。本解析モデルは 8 節点 6 面体要素で構成されており、ロッキング回避するために次数低減積分法を用いる。奥行き方向は結晶粒の形状が変化しないものとして、奥行き方向に 4 要素から構成される擬似 3 次元モデルとする。ただし、予備検討として要素分割を図 2.5 の要素分割を各方向にさらに 2 分割したモデルについて行い、解析結果が十分に収束していることを確認している。このことから、このユニットセルの解析モデルの要素分割は十分である

と判断した。また，各結晶粒の弾性係数は次式のように与える。

$$[\mathbf{C}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

$$C_{11} = 142300 \text{ MPa}, \quad C_{12} = 124100 \text{ MPa}, \quad C_{44} = 95240 \text{ MPa}$$

また，結晶のすべり変形に関するパラメータは Table 2.1 に示す値を用いる¹¹⁾。マクロ均質化構成モデルは，一般的な金属塑性解析で用いられる次式のような Mises の降伏条件，および Voce 型非線形塑性硬化モデルとする。

$$\bar{\phi} = \sqrt{\frac{3}{2} \text{dev}[\bar{\boldsymbol{\sigma}}] : \text{dev}[\bar{\boldsymbol{\sigma}}]} - \bar{\sigma}_{\text{ys}} - q \quad (2.23)$$

$$q = \bar{H}\alpha + (\sigma_{\infty} - \bar{\sigma}_{\text{ys}})(1 - \exp[-\bar{A}\alpha]) \quad (2.24)$$

ここで， α は塑性履歴パラメータ， $\bar{\sigma}_{\text{ys}}$ はマクロ降伏応力， \bar{H} ， σ_{∞} および \bar{A} は塑性硬化に関する材料パラメータである。以上のモデルに基づいて，数値材料試験を行うことで，ミクロ解析結果を体積平均した応力ひずみ曲線を再現するマクロ材料パラメータを求める。

まず，ユニットセルに対して x 軸および z 軸方向にマクロひずみを与えた結果はそれぞれ図 2.6 の赤および青のプロットのようになる。これら 2 つの応力ひずみ曲線はおおよそ一致しているが，降伏点付近で若干ずれているため，図 2.6 の実線のように応力ひずみ曲線がマクロひずみを与えた際の 2 つの曲線の間になるようにマクロ材料パラメータを決定する。このようにして同定したマクロ材料パラメータの値を Table 2.2 に示す。

要素サイズ依存性の検討

まず、図 2.7 に示すような半円形の解析モデルを用いて、要素サイズの依存性について検討する。弾性材料パラメータは $E = 206 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$ とし、結晶塑性パラメータは Table 2.1 に示す値を用いる。結晶方位は (100) が z 軸と垂直になるようにしている。また、疲労き裂は劈開破壊のように結晶粒界から割れることもあるが、多くの場合には結晶粒内を進展することが知られている¹¹²⁾。一方、き裂進展は結晶方位に大きく影響を受けるが、本研究では簡単のためにき裂は応力の作用方向と垂直に結晶粒内を進展すると仮定し、結合力モデルを図 2.7 に示すようにき裂先端方向から直線的に配置する。図 2.7 のき裂先端近傍の要素サイズ h を $1/10 \text{ mm}$, $1/20 \text{ mm}$, $1/30 \text{ mm}$ および $1/40 \text{ mm}$ とした計 4 種類である。結合力はき裂面上における面内の各方向に 6 点の計 36 点の積分点から表面積分することで算出し、以降の解析でも同じ数の積分点を用いる。

結合力モデルの各パラメータは $G_c = 4.86 \text{ MJ/m}^2$, $w_c = 1.0 \times 10^{-2} \text{ mm}$, $\beta = 0.0$, $C = 100$, $m = 1.0$, $n = 0.1$, および $Y_{th} = 0.0$ を仮定する。想定する応力拡大係数は $K_I = 100 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ および応力比は $R = 0.0$ とする。き裂先端は応力集中部と考えられるので、き裂面の結合力が最大となる箇所をき裂先端と定義する。

以上の条件で数値解析を行った結果、き裂が進展した距離とそれに要するサイクル数の関係は図 2.8 のようになった。さらに、き裂進展速度をこのグラフの中央部における接線として計算すると、Table 2.3 に示す値を得た。この Table 2.3 から、 $h = 1/30 \text{ mm}$ および $h = 1/40 \text{ mm}$ のき裂進展速度は完全に一致しており、要素サイズを十分に細かく分割することで、要素サイズ依存性がなくなることが確認できる。したがって、以降の解析では $h = 1/30 \text{ mm}$ 以下の要素サイズを用いることとする。

損傷パラメータの検討

まず結合力モデルにおける疲労損傷以外のパラメータは Table 2.4 の G_c , w_c , β とする¹¹³⁾。3.2 節で用いたユニットセルを図 2.9 に示すようにき裂先端の前後に 2 個配置し、

き裂がそのユニットセル 1 個分を進展するように結合モデルを設定する。解析に用いるき裂先端近傍の要素サイズは $6.25 \mu\text{m}$ であり、結晶粒径は縦幅 $66 \mu\text{m}$ および横幅 $50 \mu\text{m}$ とする。き裂先端に配置した多結晶体以外の領域は式 (3.23) および式 (2.24) の等方塑性モデルとし、式 (2.18) および式 (2.19) で表される任意の応力拡大係数に基づく変位場を与える。

多結晶粒内部をき裂が進展する場合、その進展速度は結晶粒毎に異なるため、本節では、後述する 3 パターンのき裂進展速度について、式 (2.1) のパリズ則のパラメータについて検討した。日本機械学会の原子力維持規格⁶⁾によれば、式 (2.1) の C および m は PWR 一次系の配管および炉水構造物用オーステナイト系ステンレス鋼は次式で表されるので、本研究では参照値としてこれを用いる。

$$C = \frac{4.35 \times 10^{-13} T_c^{0.63} t_r^{0.33}}{(1 - R)^{1.56}}$$

$$m = 3.0 \quad (2.25)$$

ここで、 $T_c = 30 \text{ }^\circ\text{C}$ 、 $t_r = 1000$ および $R = 0.1$ と仮定する。応力拡大係数範囲 ΔK が $54 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ 、 $63 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ 、 $72 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ 、 $81 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ および $90 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ の 5 ケースについて解析を行う。式 (2.21) よりその塑性域寸法 r_{ys} は 0.218 mm 、 0.254 mm 、 0.290 mm 、 0.328 mm および 0.364 mm となるので、図 2.9 に示す解析モデルの内部に位置することがわかる。

図 2.10 に $\Delta K = 63 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ におけるサイクル数とき裂先端の位置の関係を示す。この図より、各結晶粒内のき裂進展速度はほぼ一定であるが、その値は粒毎に異なることがわかる。さらに、き裂が粒界を挟んで隣の粒へ突入する際の進展速度はさらに大きく変動していることがわかる。本現象に関しては、隣接する結晶粒同士の方角差や粒界の特性と関係があることが実験的に指摘されている^{114),115)}が、今後さらなる考察が必要である。

図 2.10 の結晶粒内における進展速度を接線から算出し、最大値および最小値を応力

拡大係数範囲毎に求める。これら2つの値に加えて、ユニットセル1個分の領域（図2.9の緑矢印）をき裂が完全に通過するまでのサイクル数を求め、得られたサイクル数でこの領域の長さを除すことで平均的なき裂進展速度を算定する。これら3つの進展速度、および式(2.25)を用いた式(2.1)で表されるパリス則を図2.11に示す。破線はそれぞれ同色のプロットに関して式(2.1)の指数関数で近似した線である。この図より、参照値である式(2.1)は平均速度の傾きが一致していないが、結晶粒内におけるき裂進展速度の最大値および最小値の間に収まっている。このことから、本節の解析において用いた結合モデルのパラメータ（Table 2.4）は概ね良好な値であると考え、以降の数値解析例ではこのパラメータを用いることとする。

2.3.3 疲労破壊の数値解析例

提案モデルを用いた単調引張荷重下および一定振幅荷重下の破壊挙動

本モデルは前述のように、単調载荷時の脆性破壊を表したモデルを繰り返し载荷時の疲労破壊に拡張した結合モデルであることから、ここでは単調引張および一定振幅荷重下の2種類のき裂伝播問題に適用し、その解析結果と比較・検討する。

解析モデルはともに図2.12に示すように図2.5のユニットセルを3個並べた縦0.20 mm および横0.60 mm の領域とし、初期き裂は0.20 mm とする。このモデルの上端面を z 方向に強制変位を加え、単調引張荷重下のき裂進展問題および一定振幅荷重解析を行う。単調引張荷重下のき裂進展解析は引張ひずみ1.5%になるような強制変位で増分的に与え、一定振幅荷重解析では図2.13の破線で示すような変位履歴を与え、最大引張ひずみ0.25%、最小引張ひずみ0.025%の応力比0.1とする。

単調引張荷重下における300 step時の引張方向の応力、蓄積すべり量および損傷値の分布を図2.14に示す。ここで、下端面は鏡面对称像である。ただし、図中の白文字は初期き裂先端から何番目の結晶粒かを示している。図2.14のように応力はき裂先端部に集中しており、主き裂に先行して微小き裂が発生することなく、主き裂が進展す

る。次に、図 2.15 に示す各ステップでのき裂進展量をみると、結晶粒毎にき裂が進展する速度が異なっていることがわかる。これは結晶方位によって応力状態が異なることに加え、図 2.14 に示すように 3 番目と 4 番目の間の結晶粒界近傍に結晶のすべり変形が生じるためである。

次に、一定振幅荷重下における 1 サイクル時の引張方向の応力分布図を図 2.16 に、16 サイクル時の引張方向の応力と、蓄積すべり量および損傷値の分布を図 2.17 に示す。ここで、下端面は鏡面对称像である。図 2.17 より、16 サイクル時において主き裂に先行して、副次的な微小き裂が発生していることがわかる。また、き裂先端から 3 個目までの結晶粒の中心の要素におけるそれぞれの損傷値の推移を図 2.18 に示す。損傷値は図 2.18 のように階段状に変化しており、除荷時には損傷は変化せず、再載荷時のみ増加している様子が確認できる。2 番目と 3 番目の結晶粒を比較すると、1 サイクル時から 3 番目の結晶粒における損傷値の方が大きくなっている。これは結晶方位の不均一性によって、3 番目の結晶粒において応力が高くなるためである（図 2.16）。これによって損傷の進行が速くなり、副次的な微小き裂が主き裂に先行して発生している。

以上から、単調引張荷重下ではき裂先端に応力が集中することで、先端部のみで損傷が進行し主き裂が進展する。また、一定振幅荷重下では、結晶粒の不均一性によって応力の高い箇所では主き裂に先行して微小き裂が発生する。このような挙動は実験的にも確認されており、提案モデルにより定性的に再現できたといえる。

過大荷重による疲労き裂の遅延効果

パリス則が適用できない過大荷重が加わった際のき裂進展について解析を行う。解析対象は前節と同様のモデル（図 2.12）とし、前節の一定振幅荷重下の解析結果と比較する。図 2.13 における赤色の実線に示すように、最初のサイクルに与える最大引張ひずみは一定振幅荷重の 2 倍の値とし、その後の繰り返し引張ひずみは一定振幅荷重と同じ値とする。

まず、過大荷重を加えた場合の2サイクルまでの初期き裂先端から2番目の要素における引張方向の応力と蓄積すべり量の推移を図2.19に示す。この要素は2サイクル終了時にはき裂先端に接する要素である。図2.19より、載荷時に増加した応力は、除荷時に減少し、最終的に圧縮側に達している。また、蓄積すべり量は載荷時に増加し、除荷時で一定となった後に、圧縮応力が作用することで再度増加している。しかし、2サイクル以降では蓄積すべり量はほとんど変化せず、一定のままであることがわかる。

過大荷重が加わった直後の2サイクルにおける(i)再載荷時および(ii)除荷時(図2.13)の引張方向の応力分布を図2.20に示す。図2.20(a)より、一定振幅荷重下では再載荷時に引張応力が生じており、除荷時に一部の粒界で圧縮応力が作用しているが、ほとんどの領域において圧縮応力は生じていない様子が見られる。この圧縮応力は、引張荷重が作用した際に塑性変形および格子回転が生じることで発生したと考えられる。これに対して、図2.20(b)より、過大荷重載荷の場合には再載荷時に引張応力はほとんど作用しておらず、除荷時には圧縮応力が生じている。これは過大荷重によりき裂先端に引張による大きな塑性域が形成されるとともに、き裂が鈍化するためである。き裂先端に接する要素における応力値は、一定振幅荷重の場合には引張時に480 MPa、除荷時に44 MPaであるのに対し、過大荷重を加えた場合には引張時に182 MPa、除荷時に-323 MPaとなる。このように、過大荷重後にはき裂先端に作用する応力振幅の最大値が低下していることがわかる。

次に、き裂先端から3番目までの各要素における損傷値を図2.21に示す。この図より、過大荷重載荷の場合には1番目の要素の損傷値は1サイクル目で1に達し、破壊していることがわかる。しかし、2番目以降の要素の損傷値は最初の載荷によって大きく増加し、それ以降は前述のようにき裂先端に作用する最大応力が低下するために、一定振幅荷重下の損傷値と比較して損傷の蓄積速度は遅くなっている。

図2.22に14サイクル時のき裂先端近傍の蓄積すべり量の分布を下端面について鏡面

対称像を用いて示す。この時点で既に一定振幅荷重下におけるき裂先端は最初の結晶粒内を進展し、次の結晶粒内に達している。一方、過大荷重載荷の場合、き裂先端は未だに1つ目の結晶粒にあり、それほど進展していない。き裂先端近傍の蓄積すべり量の分布から、き裂先端の結晶粒にすべりが集中していることがわかる。蓄積すべり量は1サイクルで0.036であるのに対して、14サイクルでは0.037であり、前述のように最初の過大荷重で大きく塑性変形し、その後はほとんど塑性変形していない。これは図2.19に示すように、最初の過大荷重載荷時の塑性変形は等方硬化を伴うので、その後の応力振幅は弾性範囲内となり、以降ではほとんど塑性変形が発生しないと考えられる。最終的に、一定振幅の荷重を加えた場合は36サイクルで破断するのに対して、過大荷重を加えた場合は75サイクルで破断する。このように、過大荷重が作用した場合には塑性変形が生じ、き裂先端が鈍化および加工硬化する。これによって、最大応力が低下するとともに、塑性変形の累積が抑制されることにより、き裂進展速度が遅くなる。

以上のように、本提案モデルを用いることで単調載荷および繰り返し載荷時のき裂進展挙動を再現できることが示された。さらに、熱力学的方法によって導入した損傷変数によって、再載荷時の結合カモデルにおける剛性の低下が考慮されたことで、負荷・除荷過程を考慮したモデルでは不可能な過大荷重後の疲労き裂進展解析が可能となった。

2.4 水素脆化による破壊靱性値の低下

2.4.1 水素吸着説に基づく結合カモデル

本節では、第1.2.4項で述べたようにき裂面から侵入した水素原子に起因する破壊靱性値の低下を考慮することで、水素脆化を表現可能な結合カモデルに拡張する。ただ

し、提案モデルでは図 1.6 のような水素の拡散は表現されていないので、き裂進展解析を行う前に水素拡散解析を実施する必要がある。

まず、Griffith²⁸⁾-Orowan¹¹⁶⁾-Irwin²⁹⁾理論に従い、臨界エネルギー解放率 G_c を表面エネルギー ω_s と塑性流れによって散逸するエネルギー ω_p に別けると、

$$G_c = 2(\omega_s + \omega_p) \quad (2.26)$$

となる。ここで、 ω_s と ω_p が 2 倍にされているのは、き裂が進展することで新たに上下 2 つの面が形成されるためである。これをエネルギー図として記述すると、図 2.23 の黒い実線のようになる。き裂が進展するには $2\omega_s$ と $2\omega_p$ の和である G_c が必要であり、き裂が進展すると新たに形成された上下二つの面に $2\omega_s$ が蓄えられ、それに伴って生じる塑性流れによって $2\omega_p$ が散逸することになる。Serebrinsky ら⁶³⁾は水素濃度に対する ω_s の変化に対して、図 2.24 の第一原理計算の結果¹¹⁷⁾をもとに次の近似式を提案している。

$$\omega_s(\theta) = (1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2)\omega_{s0} \quad (2.27)$$

ここで、 $\theta = C/C_s$ であり、 C は表面における水素濃度、 C_s はその収束濃度である。また、 ω_{s0} は水素濃度がゼロの時の表面エネルギーである。

一方、金属材料の破壊現象では塑性流れによる散逸エネルギーが大きく影響することが知られており、 ω_p はガラスなど脆性材料では $\omega_p \approx 0$ であるが、金属などの脆性破壊では $\omega_p \gg \omega_s$ である。また、 ω_p は ω_s と相互関係があり、 ω_s のわずかな低下が ω_p の急激な低下をもたらすことが指摘されているが¹¹⁸⁾、その過程は不明な点も多い。したがって、本研究では ω_p は ω_s と同様に式 (2.27) のように変化するものと仮定して、次式を採用する。

$$\omega_p(\theta) = (1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2)\omega_{p0} \quad (2.28)$$

ここで、水素濃度がゼロの時の散逸エネルギーである。式(2.27)および(2.28)を式(2.26)に代入すると、水素濃度に対する臨界エネルギー解放率の変化は、

$$G_c(\theta) = (1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2)G_{c0} \quad (2.29)$$

となる。ここで、 G_{c0} は水素濃度がゼロの時の臨界エネルギー解放率である。上式を式(2.14)に反映させると、本研究で提案する結合モデルの臨界有効結合力は図 2.25 のように水素濃度の増加に伴って減少する。以上をまとめると、前節の結合モデルを水素脆化を表現できるように拡張したモデルは次のようになる。

- 結合ポテンシャル

$$\Psi = (1 - D)G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right) \right]$$

- 水素濃度によるエネルギー解放率の変化

$$G_c(\theta) = (1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2)G_{c0}$$

- 有効き裂開口変位

$$w = \sqrt{w_n^2 + \beta w_s^2}$$

- 結合力

$$t_n = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_n} = (1 - D) \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_n}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right)$$

$$t_s = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_s} = \beta (1 - D) \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_s}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right)$$

- 損傷変数の発展方程式

$$\dot{D} = C(1 - D)^m \langle \sqrt{Y} - \sqrt{Y_{th}} \rangle^n \left| \frac{\dot{w}}{w_c} \right| \quad (\text{if } \dot{Y} \geq 0)$$

$$\dot{D} = 0 \quad (\text{otherwise})$$

- 損傷変数と同伴な熱力学的力

$$Y = -\frac{\partial \Psi}{\partial D} = G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right) \right]$$

2.4.2 水素脆化の数値解析例

粒界および粒内の拡散速度の違いを考慮した水素拡散解析

原子が金属内部を拡散する際には、結晶粒界と結晶粒内でその拡散速度が異なることが一般的に知られている。原子配列の方向が各結晶粒で異なるために結晶粒界では原子配列に乱れによる隙間が生じ、これによって結晶粒界における物質拡散は結晶粒内よりも速くなる。このような物質拡散現象は Fick の第 2 法則により次式で表される。

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (2.30)$$

ここで、 \mathbf{j} は物質の流速である。さらに、この流速は Fick の第 1 法則により、

$$\mathbf{j} = -K\nabla c \quad (2.31)$$

で表される。ここで、 K は拡散係数であり、前述の通り結晶粒界と粒内部でなる材料定数である。この式 (2.31) を式 (2.30) に代入すると、

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (k\nabla C) \quad (2.32)$$

となる。

解析対象には、図 2.26 のような 0.25mm の初期き裂が導入された $1.0 \times 0.4 \times 0.025\text{mm}$ の SEN 試験片とした。結晶粒の形状は外接円の半径が 0.1mm の六角柱とし、結晶粒の数は 160 個とした。境界条件は、初期き裂面上で既に水素が収束値に達していると仮定し、初期き裂面上で $\theta = 1$ とする。図 2.27 に示すように拡散解析に用いた有限要素モデルでは結晶粒界近傍を細分化し、水素の拡散係数を結晶粒界上で文献¹¹⁹⁾より $2.53 \times 10^{-9}\text{m}^2/\text{s}$ とし、結晶粒内部では結晶粒界上よりも十分に大きい値として $2.53 \times 10^{-13}\text{m}^2/\text{s}$ を適用した。なお、後述するき裂進展解析における有限要素モデルとは別のものを使用している。

解析の結果として、400, 800, 1600, 3200s 後における水素濃度分布を図 2.28 に示す。

この図から、水素は始め結晶粒界を拡散した後に、徐々に結晶粒内に侵入し、最終的に結晶粒界と同じ値になっていることが確認できる。

水素脆化によるき裂進展解析

水素拡散解析から求めた 0, 400, 800, 1600, 3200s における水素濃度を提案した結合力モデルに反映させ、き裂進展解析を行った。境界条件は図 2.29 のように上下面に強制変位を $0.25 \times 10^{-2} \text{mm}$ 加え、板の上下端面中央部を y 方向拘束とし、板厚方向に対称性を考慮することとした。結合力モデルは初期き裂先端方向の結晶粒に対して、結晶粒界上と結晶粒の中央部に配置した。前節と同じく、材料モデルは式 (2.22) および表 2.1 とし、結合力モデルのパラメータは表 2.4 とした。

各暴露時間毎に強制変位を加えたことによるき裂進展に伴う引張方向の応力分布を図 2.30, 見かけの応力（上端部の全反力をその面積で割った量）と見かけのひずみ（与えた強制変位を平板の縦寸法で除した値）の関係を図 2.31 に示す。また、暴露時間 0s の時、つまり水素が全く影響しない場合のき裂進展解析の結果も併記する。図 2.30(a) のように水素が全く影響しない場合には結晶粒中央をき裂が進展するが、水素が影響する場合にはそれぞれの暴露時間毎にき裂の進展挙動が異なることがわかる。これは、水素脆化が生じない場合にはき裂は主応力と垂直な方向に進展するために、結晶粒内部を進展するのに対して、水素が影響する場合には図 2.28 のように水素が結晶粒界を優先して拡散するので、結晶粒界の強度方が結晶粒内部よりも速く低下するためである。ただし、800s で結晶粒内をき裂が進展しているのは結晶方位の不均一性に起因すると考えられる。また、見かけの応力ひずみ関係は図 2.31 に示すように暴露時間が長くなるにつれて引張強さが低下し、破断伸びが短くなっている。

しかし、このようなき裂進展挙動は実際の破面から観察されず、鉄の純度・金属の種類・不純物元素の種類や濃度によって変化する¹²⁰⁾。ただし、見かけの応力ひずみ関係における暴露時間の増加に伴う傾向は一般的に見られる水素脆化の実験結果と定性

的に一致している¹²¹⁾。そのため、金属内部の不純物の影響を考慮した固体拡散や、き裂面における電位差による化学種の流入などのより詳細な解析を行うことで、提案した結合モデルを用いて破壊形態などの違いを含めて表現可能であると考えられる。

2.5 過大荷重下における延性破壊

本節では、前節までの結果と整合するように、シアリップ破壊を含めて延性破壊を表現可能な一般化結合モデルを構築する。そのためにエネルギー解放率と塑性変形の関係について再検討した上で、損傷変数の発展方程式について新たに提案する。

2.5.1 塑性変形を考慮した一般化結合モデル

佐々木ら¹²²⁾は、予め塑性変形を与えた試験片と予ひずみなしの通常の試験片を用いて、温度低下に伴う脆性破壊の問題に対して、き裂開口変位 (CTOD) 試験を行っている。実験結果は図 2.32 のように温度の低下に伴って限界 CTOD 値が低下するという従来の知見と一致している。この図をもとにして縦軸に限界 CTOD 値、横軸に予ひずみとして負荷した塑性ひずみをとると、図 2.33 のようになる。この図から限界 CTOD 値は塑性ひずみの増加に伴って減少していることがわかる。この限界 CTOD 値と J 積分には次式の関係がある。

$$\text{CTOD} = \frac{d_n J_c}{\sigma_0} \quad (2.33)$$

ここで、 σ_0 は初期降伏応力、 d_n はひずみ硬化指数などで与えられる無次元定数である。また、J 積分の物理的意味は非線形弾性体におけるエネルギー解放率なので、き裂進展によってき裂面に除荷が生じるまでは J 積分とエネルギー解放率は一致する。つまり、破壊靱性値としての限界 CTOD 値とエネルギー解放率には一定の関係があり、塑性ひずみに依存してエネルギー解放率が減少していることがわかる。これは塑性変形によ

り生じた微細ポイドなどによって材料内部が損傷することで、破壊靱性値が低下するためであると考えられる。

一方、Griffith²⁸⁾-Orowan¹¹⁶⁾-Irwin²⁹⁾理論によれば、式(2.26)のように臨界エネルギー解放率に塑性流れによる散逸エネルギー ω_p は考慮されているが、この散逸エネルギーは一定値であり、塑性変形の蓄積量に依存しないとされている。しかし、塑性変形が蓄積されると、塑性流れによる散逸エネルギーは低下すると考えられ、これにより前述の実験におけるエネルギー解放率の低下を説明できる。本研究では、このことを考慮して式(2.26)に塑性変形の蓄積量に依存する損傷変数を導入した次式のエネルギー解放率を新たに定義する。

$$G_D = 2\{\omega_s + (1 - D)\omega_p\} \quad (2.34)$$

以降では通常エネルギー解放率と区別するために、上式で定義されるエネルギー解放率を損傷エネルギー解放率と呼称する。これをエネルギー図で表すと図2.23の赤線のように、塑性変形に伴って ω_p が減少し、最終的には表面エネルギーのみが蓄えられる。この ω_p は直接計測することができない材料定数であり、工学的な取扱いが不便なので、上式から式(2.26)を用いて ω_p を消去すると、

$$\begin{aligned} G_D &= \left[1 - \left(1 - \frac{2\omega_s}{G_{c0}} \right) D \right] G_{c0} \\ &:= (1 - D')G_{c0} \end{aligned} \quad (2.35)$$

となる。ここで、

$$D' = \left(1 - \frac{2\omega_s}{G_{c0}} \right) D \quad (2.36)$$

とおいた。また、 G_{c0} は $D = 0$ の時のエネルギー解放率である。なお、前述のように一般的な金属材料では $\omega_p \gg \omega_s$ より $G_c \gg 2\omega_s$ となるので、 $D' \approx D$ とできる。これによ

り，簡単な形式として次式のように近似できる．

$$G_D = (1 - D)G_{c0} \quad (2.37)$$

以上のように塑性変形によるエネルギー散逸の観点から再度，損傷変数 D について検討したが， $\omega_p \gg \omega_s$ を仮定すると結合ポテンシャルおよび有効結合力は式 (2.13) および (2.14) に帰着する．

延性破壊では第 1.2.2 項で述べたように塑性変形に伴って微細ボイドが発生し，成長する．また，エネルギー解放率が塑性変形に伴って低下することを考慮すると，損傷変数と同伴な熱力学的力 Y に加えて，損傷変数 D の発展方程式に塑性変形の影響が含まれる必要がある．そこで，本研究では次式のような発展方程式を提案する．

$$\dot{D} = \dot{\gamma}^p \left(\frac{Y}{S} \right)^m \left(1 - \frac{w}{w_c} \right)^n \langle \gamma^p - \gamma_D^p \rangle \quad (2.38)$$

ここで， γ^p は相当塑性ひずみ， γ_D^p は損傷が開始されるとききの γ^p ， $\dot{\gamma}^p$ は γ^p の速度， S, m および n は材料パラメータである．塑性ひずみが γ_D^p まで蓄積されると微細ボイドなどの材料の微視的な欠陥が発生し，その成長速度は塑性ひずみ速度と比例する．また，ボイド同士の合体によって主き裂が進展すると新たなき裂面に作用していた応力ベクトルは解放されるために，有効き裂開口変位がその臨界値に近づくとボイドの成長速度は低下する．このような材料欠陥の挙動と熱力学的力 Y を考慮すると，本研究で提案する損傷変数の発展方程式は上式となる．なお，疲労き裂進展は微視的には交差すべりに起因するが，巨視的には繰り返し振幅時の塑性ひずみ範囲によって表されることが知られている．このことから，塑性ひずみの効果を考慮した式 (2.38) の損傷に関する発展方程式は，疲労き裂進展問題にも適用可能であると考えられる．

塑性変形を損傷変数の発展に考慮したことで，脆性破壊および延性破壊のそれぞれの結合力モデルに矛盾なく移行できる．すなわち，脆性破壊では塑性変形がほとんど起きないために $D \approx 0$ となり，図 2.34(a) のように従来の原子間ポテンシャルに基づく

結合カモデルと一致する。これにより、劈開破壊のように原子間の分離による破壊形態を説明できる。また、延性破壊では塑性変形が発生すると D が増加し、臨界有効結合カが低下する。ここで完全塑性を仮定すると、図 2.34(b) のように結合カと応力のつり合いによって結合カは降伏応力 σ_y と等しくなる。最終的に有効き裂開口変位 w が w_c に達すると応力が解放され、破壊に至る。なお、応力解放によって塑性変形はそれ以上進行しなくなるために、この過程では損傷変数の増加は起きない。以上の過程を図示すると、見かけ上の結合カと開口変位の関係は図 2.34(b) における赤線の台形型のようなになる。従来、延性破壊において比較的好く用いられてきた結合カモデルは、き裂が大きく開口した後に進展する延性き裂の特徴を表現するために、図 2.35 の台形型や多項式型のように上底部分が存在する。提案した一般化結合カモデルはこのような従来の特徴を有しており、塑性変形の大きさによって脆性破壊を表す結合カモデルから、延性破壊を表現できるモデルへと自然に遷移させる。さらに、疲労破壊では繰り返し載荷時に塑性変形が増加することによって、結合カモデルの剛性が低下することで図 2.34(c) のように結合カが低下する。なお、エネルギー解放率の水素濃度による変化を考慮することで、前節のように水素脆化などの化学的作用を伴う破壊現象も再現可能である。以上のように、本結合カモデルは脆性・延性・疲労・水素脆化を再現できる結合カモデルの一般化形といえる。また、一般化結合カモデルをまとめると次のようになる。

- 結合ポテンシャル

$$\Psi = (1 - D)G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right) \right]$$

- 水素濃度によるエネルギー解放率の変化

$$G_c(\theta) = (1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2)G_{c0}$$

- 有効き裂開口変位

$$w = \sqrt{w_n^2 + \beta w_s^2}$$

- 結合力

$$t_n = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_n} = (1 - D) \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_n}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right)$$

$$t_s = \frac{\partial \Psi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial w_s} = \beta (1 - D) \frac{G_c}{w_c} \left(\frac{w_s}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right)$$

- 損傷変数の発展方程式

$$\dot{D} = \dot{\gamma}^p \left(\frac{Y}{S} \right)^m \left(1 - \frac{w}{w_c} \right)^n \langle \gamma^p - \gamma_D^p \rangle$$

- 損傷変数と同伴な熱力学的力

$$Y = -\frac{\partial \Psi}{\partial D} = G_c \left[1 - \left(1 + \frac{w}{w_c} \right) \exp \left(-\frac{w}{w_c} \right) \right]$$

2.5.2 延性破壊および疲労破壊の数値解析例

単調荷荷による延性き裂進展解析

塑性変形を考慮した結合力モデルの妥当性を検証するため、ノッチ付き三点曲げ試験片に対する単調荷荷による延性き裂進展解析を実施した。解析に用いるモデルは、薄

い3次元固体としてモデル化し、板厚方向の対称性を考慮した図 2.36 に示すような2分の1の有限要素法モデルとした。境界条件として、上端面の中央部に z 方向に強制変位 $\bar{u}=3\text{mm}$ を与え、 x 方向は固定とし、さらに下端面の右端と左端を z 方向に拘束した。参考文献の実験²⁰⁾に際して導入されている疲労予き裂を模擬して、図 2.36 の赤線部に初期き裂を1mm導入した。また、結合力モデルは図 2.36 に示すように z 軸方向と z 軸に対してそれぞれ $\pm 45^\circ$ 方向の計3つのき裂進展経路を予測して導入した。三点曲げ試験片は溶接鋼材用圧延材 SM490Y からなるものとし、そのパラメータは参考文献から表 2.5 とした。ただし、材料構成則は弾塑性モデルとし、塑性硬化則には Voce 硬化則を採用した。また、本節で提案した塑性変形を考慮した結合力モデルおよびのパラメータはおよび 2.6 の値を用いた。これに加えて、塑性変形を考慮していない第 2.2 節の原子間結合に基づく結合力モデルを用いた解析も併せて実施するため、そのパラメータは表 2.7 のようにした。

塑性変形を考慮した結合力モデルと考慮していない従来モデルによるき裂進展に伴うき裂開口変位とその臨界値との比 w/w_c の分布を、それぞれ図 2.37 および 2.38 に示す。塑性変形を考慮したモデルおよび考慮していないモデルのどちらも、前述のように w/w_c が1に達するとそれ以降は結合力が減少するため、き裂が進展していることを表している。この図から塑性変形考慮したモデルではき裂は z 軸に対して斜め $\pm 45^\circ$ の方向に分岐して進展することが再現されている。これに対して、考慮していない従来モデルではき裂は z 軸方向にまっすぐ進展していることが確認できる。ここで、塑性変形を考慮した結合力モデルによる強制変位 $\bar{u}=2.20\text{mm}$ の時の相当塑性ひずみと損傷値の分布を、それぞれ図 2.39 および 2.40 に示す。このときの塑性ひずみの分布は z 軸に対して斜め $\pm 45^\circ$ の方向に分布していることがわかる。このことから、塑性変形を考慮した結合力モデルでは相当塑性ひずみが偏差応力方向に発展するために、損傷値が z 軸に対して斜め $\pm 45^\circ$ の方向に分布し、これによってき裂は斜めに分岐して進展した

ものといえる。一方、塑性変形を考慮していないモデルでは応力のみの影響しか受けられないために、曲げ変形によって生じた最大主応力方向と垂直な z 軸方向に進展したものとといえる。

以上、塑性変形を結合力モデルに考慮することで延性破壊特有の破壊形態であるシェアリップ破壊を再現することができたといえる。ただし、実際の破壊形態は前述のように板厚中央部では平坦破壊が生じ、表面部においてシェアリップ破壊となる。しかし、本解析では板厚中央部でもシェアリップ破壊が生じる結果となった。これはき裂進展経路を前述のように3つの経路に限定したことで、本来は板厚方向に沿って平坦破壊からシェアリップ破壊への推移する過程が表現できていないためである。つまり、この原因は第1.5節で述べたように結合力モデルを用いた方法における任意き裂進展解析の困難さに起因する。そのため、次章では、結合力モデルを材料構成則に導入した損傷モデルを提案し、この問題について再度検証することにする。

繰り返し载荷による疲労き裂進展解析

塑性変形を考慮した結合力モデルでも前節のように疲労破壊を表現できることを示すために、ノッチ付き三点曲げ試験片に対する繰り返し载荷による疲労き裂進展解析を実施した。単調载荷によるき裂進展解析と同じ有限要素法モデルを用いて、境界条件も同様とした。ただし、強制変位は最初に0.4mm押し込んだ後0.07mmまで除荷し、その後、再度同じ位置まで载荷と除荷を繰り返すこととした。解析に用いた塑性変形を考慮した結合力モデルおよび材料モデルのパラメータは延性破壊解析と同じく、表2.5および2.6の値を用いた。

塑性変形を考慮した結合力モデルによるき裂進展に伴うき裂開口変位とその臨界値との比 w/w_c および損傷値の分布を、それぞれ図2.41および2.42に示す。図2.41よりき裂開口変位とその臨界値との比 w/w_c は初期き裂先端部でしか1に達していないが、図2.42を見ると損傷値は既に1となっており、結合力が作用していないことが確認で

きる。このことから、塑性変形を考慮した結合モデルは疲労破壊ではき裂は z 軸方向へ進展し、延性破壊時とは異なるき裂挙動を示している。これは延性破壊時には塑性変形が大きいために、その影響によって損傷値が初期き裂先端から斜めめ $\pm 45^\circ$ の方向に分布するのに対して、本解析の押し込み量は前述よりも小さいので塑性ひずみの影響が少なく、損傷値もき裂先端部のみに集中する。このため、き裂は斜めに分岐することなく、主応力と垂直な方向進展した。このような疲労破壊と延性破壊のき裂進展挙動の違いは実験的に確認されており、疲労き裂は主応力方向と垂直な方向に進展することが知られている。このことから本解析から得られた結果は妥当なものであるといえる。

なお、微小変形問題と有限変形問題における移動硬化を考慮した等方塑性モデルを用いて、過大荷重による疲労き裂進展の遅延効果について解析を行った。しかしながら、微小変形問題では図 2.20 のような過大荷重によるき裂先端の鈍化が表現できないため、遅延効果が再現できなかった。また、有限変形問題ではき裂先端の応力場の特異性が消失し、相当塑性ひずみが飽和するために、疲労き裂進展が表現できなかった。このように、等方塑性構成則を用いた解析では疲労き裂進展と過大荷重による遅延効果の再現が困難であることがわかった。ここで、第 2.3.3 項の結晶塑性構成則を用いた有限変形問題の解析結果に着目すると、図 2.17 のように結晶粒の不均一性によって微小き裂が発生し、主き裂と合体するために、疲労き裂が進展していることがわかる。このことを踏まえると、等方塑性構成則を用いた有限変形問題として疲労き裂進展を再現するには、微小き裂の進展を表す損傷の発展方程式を提案することで、過大荷重による疲労き裂進展の遅延効果も再現可能になるものと考えられる。

以上のことから、損傷変数の発展方程式に塑性変形の影響を考慮することで、延性破壊と疲労破壊の異なる破壊挙動をそれぞれ再現できる一般化結合モデルを提案した。ただし、より厳密に疲労破壊を再現するためには、微小き裂の進展を表現する損

傷の発展方程式を検討する必要がある。

2.6 まとめ

本章では、原子レベルの破壊に基づく結合カモデルに熱力学的方法を用いて損傷変数を導入することで、繰り返し負荷時の塑性変形の履歴および水素濃度などの環境因子の影響を考慮できる一般化結合カモデルを提案した。提案したモデルは以下の特徴を有している。

- 脆性破壊時 ($D = 0$) には従来の原子レベルの破壊に基づくモデルと一致する。
- 水素濃度ごとのエネルギー解放率の変化を考慮することで、水素脆化によるき裂進展挙動を表現できる。
- 延性破壊と疲労破壊に2つを区分することなく、延性破壊におけるシェアリップ破壊と疲労破壊におけるき裂の挙動を表現することが可能である。

このような特徴を有する提案モデルによれば、将来的には繰り返し荷重により発生した疲労き裂の予耐力の評価や、地震などによる過大荷重で発生した延性き裂の余寿命などの推定が可能になるほか、種々の破壊形態が複合的に生じる場合の強度発現機構の解明に際しても有用な情報提供が可能となるものと期待される。

ただし、数値解析を用いて水素脆化を再現するためには、第2.4節で述べたようにき裂表面における電位差による化学種の流入や金属内部における不純物元素の拡散を考慮した物質拡散解析の高度化が重要となる。また、損傷の発展方程式についてGTNモデルのようにボイド率で表される定式化や、疲労き裂における微小き裂を表現可能な定式化について再検討する必要がある。さらに、J積分などの従来活用されてきた知見を活用するために、一般化結合カモデルにおけるエネルギー解放率と損傷変数の関係と、J積分などの従来活用されてきた破壊靱性値に関する対応関係の定量化が不可欠

となる。これに加えて、実験データに照らした定量的な比較に基づく性能検証を重ねたうえで、実現象と整合するように損傷の発展方程式を改良する必要がある。

表-2.1 結晶塑性モデルの材料パラメータ¹¹¹⁾

h_0	τ_s	τ_0	q	$\dot{\alpha}$	n^v
220	300 MPa	93 MPa	1	0.001	30

表-2.2 マクロ均質化材料パラメータの同定結果

\bar{E}	$\bar{\nu}$	$\bar{\sigma}_{ys}$
110 GPa	0.3	175 MPa
\bar{H}	$\bar{\sigma}_\infty$	\bar{A}
13 GPa	90 MPa	3500

表-2.3 MBLA におけるき裂進展速度の要素サイズ依存性の検証結果

Mesh size h	1/10	1/20	1/30	1/40
Crack growth rate	145.0	134.0	128.6	128.6

表-2.4 損傷変数を導入した結合力モデルのパラメータ

$G_c^{113)}$	w_c	β	C	m	n
5.02 MJ/m ²	1.0×10^{-3} mm	0.0	180	1.50	0.01

表-2.5 SM490Y の弾塑性材料パラメータ

\bar{E}	$\bar{\nu}$	$\bar{\sigma}_{YS}$
206.0 GPa	0.3	400.0 MPa
\bar{H}	$\bar{\sigma}_{\infty}$	\bar{A}
0.0 GPa	110.0 MPa	110.0

表-2.6 SM490Y の一般化結合力モデルのパラメータ¹²³⁾

G_c	w_c	β	S	m	n	γ_D^p
6.01 MJ/m ²	2.2×10^{-2} mm	1.0	7.0×10^{-25}	0.3	0.0	0.0

表-2.7 原子間結合に基づく結合力モデルのパラメータ¹²³⁾

G_c	w_c
0.00383 MJ/m ²	0.2×10^{-2} mm

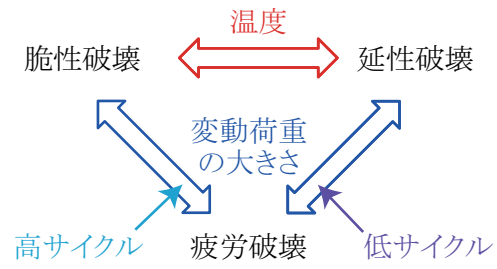


図-2.1 各破壊における遷移関係

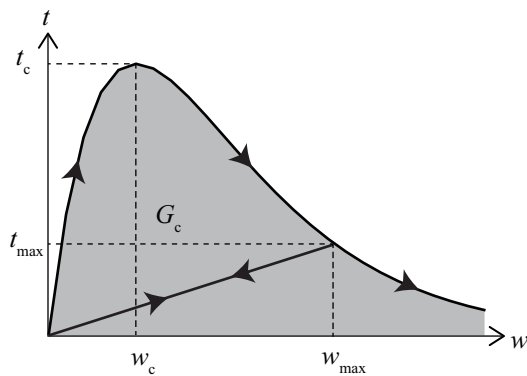


図-2.2 原子間結合に基づく結合力モデル

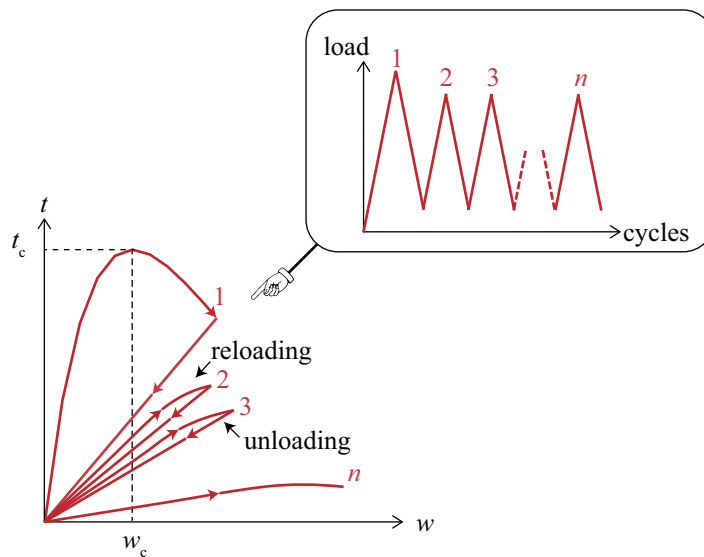


図-2.3 熱力学に基づき損傷変数を導入した結合力モデル

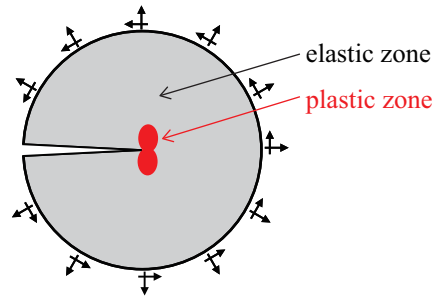


図-2.4 修正バウンダリー解析の概念図

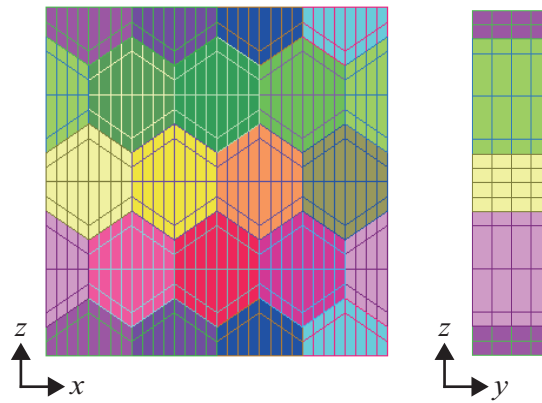


図-2.5 多結晶体を有するユニットセル

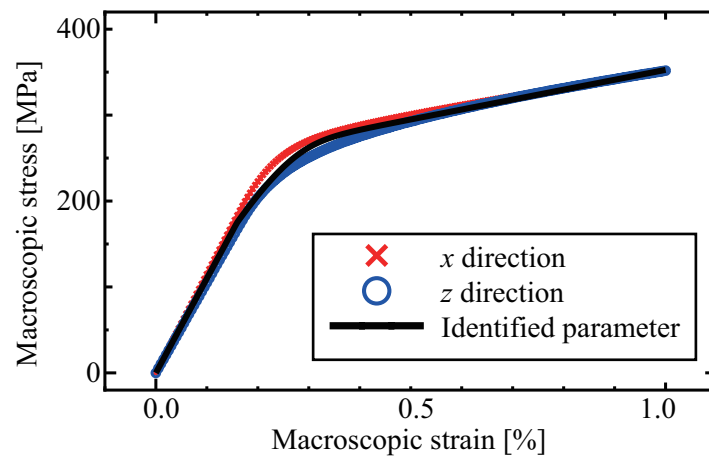


図-2.6 数値材料試験によるマクロパラメータ同定結果

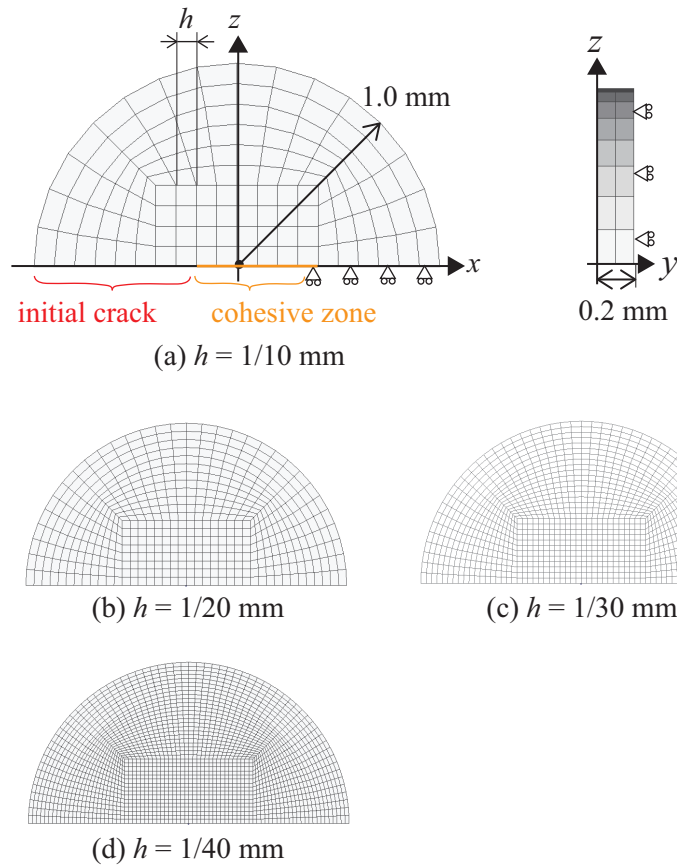


図-2.7 MBLAにおける要素サイズ依存性の検討

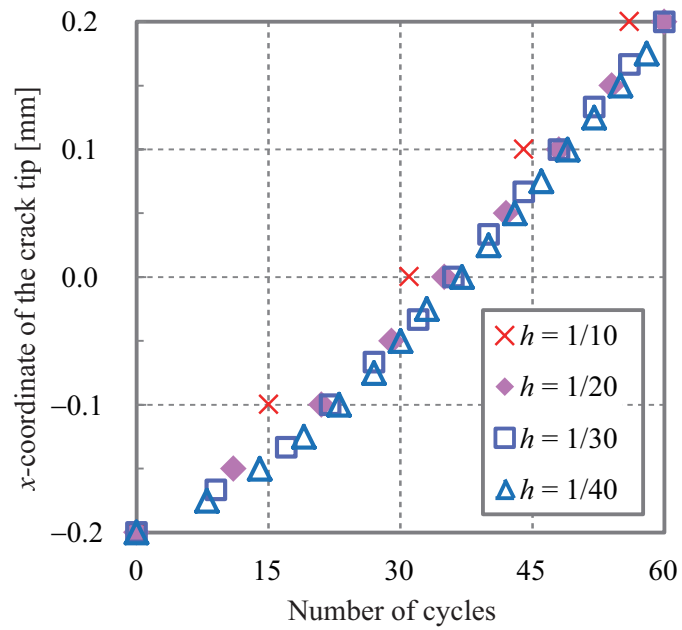


図-2.8 要素サイズによるき裂進展速度の違い

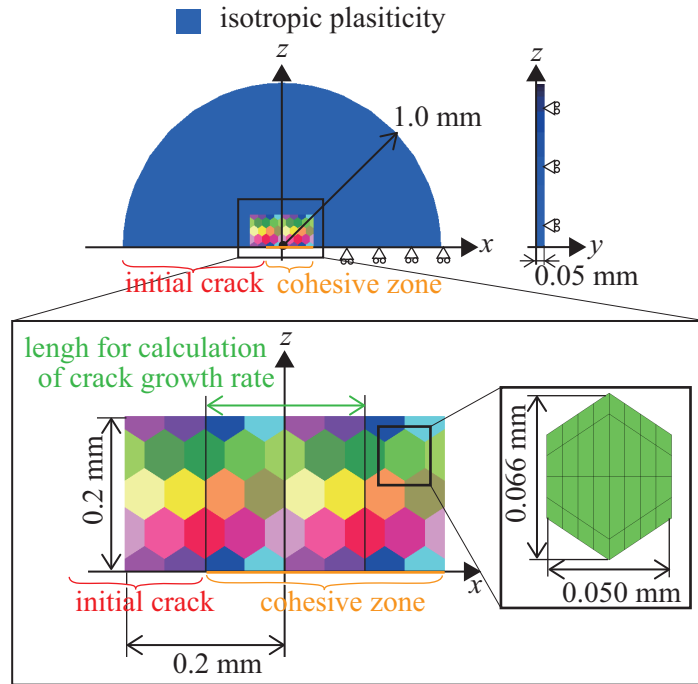


図-2.9 き裂先端に多結晶体を有する MBLA

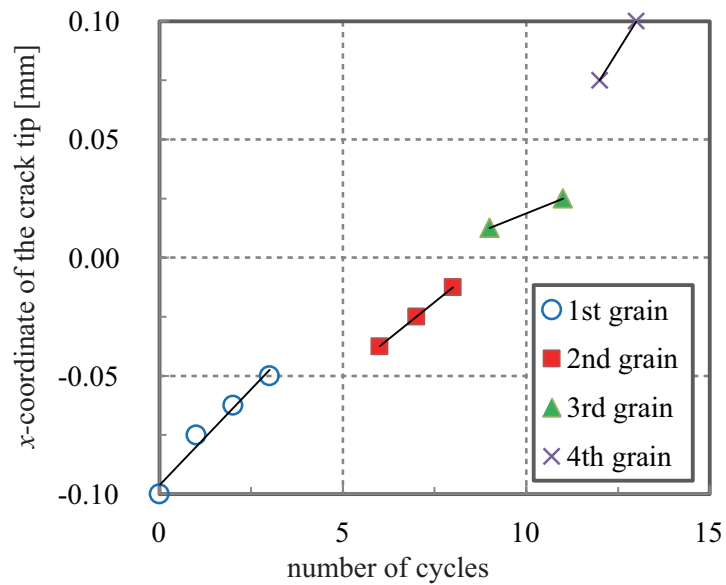


図-2.10 $\Delta K = 63 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ における結晶粒ごとのき裂進展速度

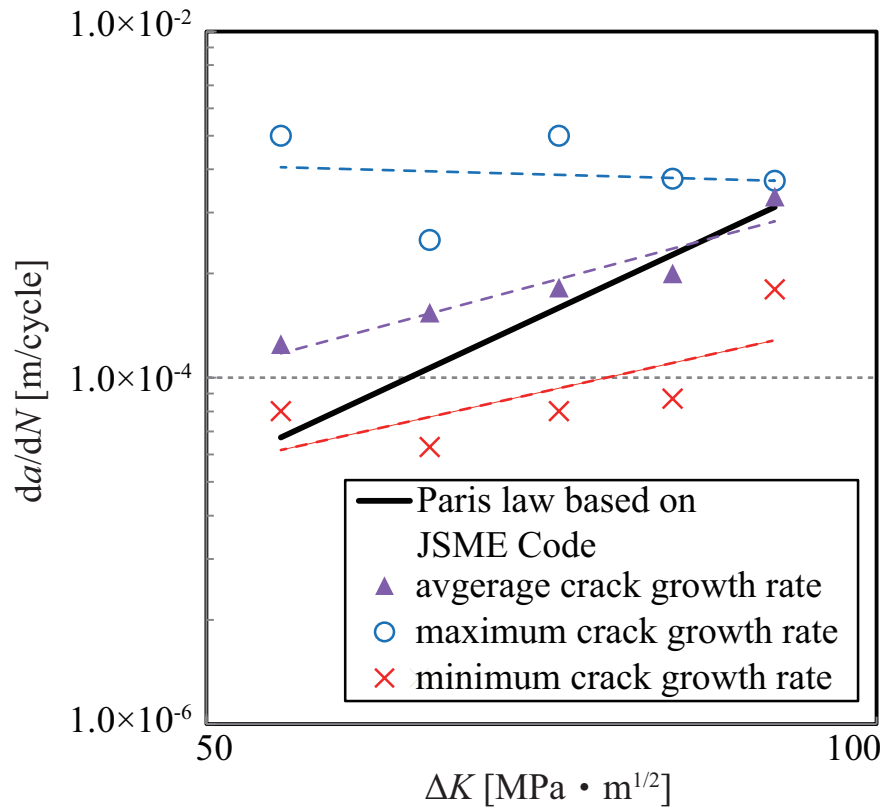


図-2.11 疲労き裂進展問題におけるパラメータ同定結果

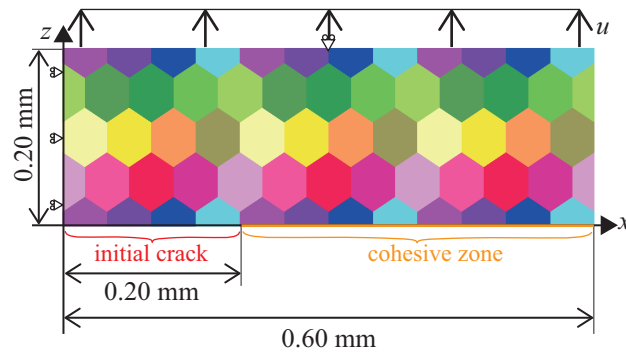


図-2.12 結晶粒径 50[μ m] からなる三次元有限要素モデル

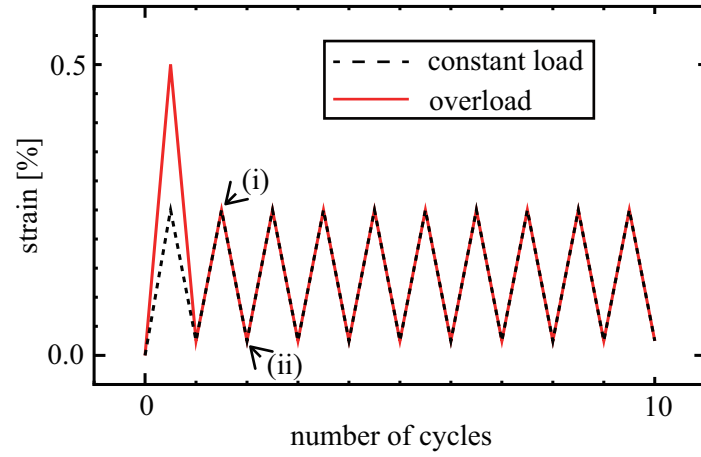


図- 2.13 一定および過大荷重時の繰り返し载荷条件

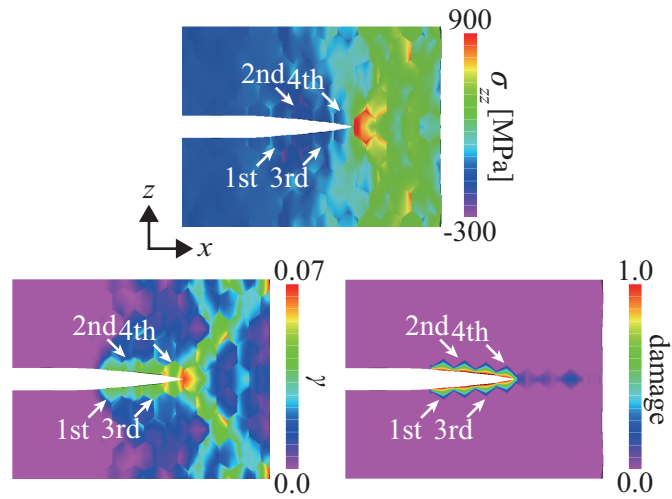


図- 2.14 300 ステップにおける応力，蓄積すべり量および損傷値の分布

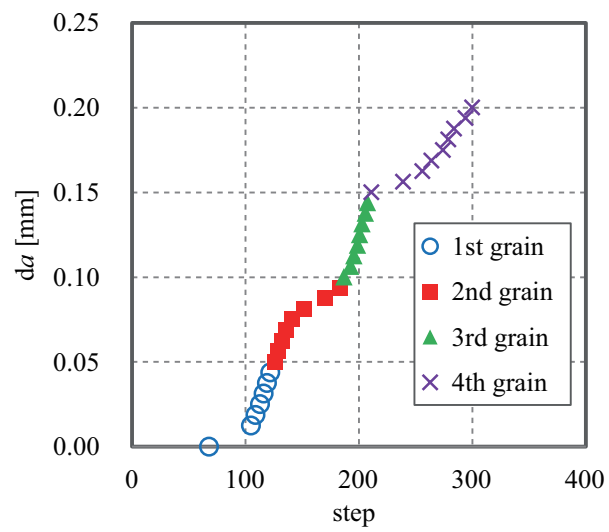


図- 2.15 単調载荷時の結晶粒ごとのき裂進展速度

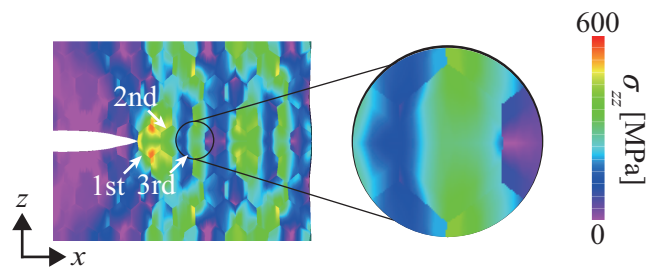


図- 2.16 1 サイクル時における応力分布

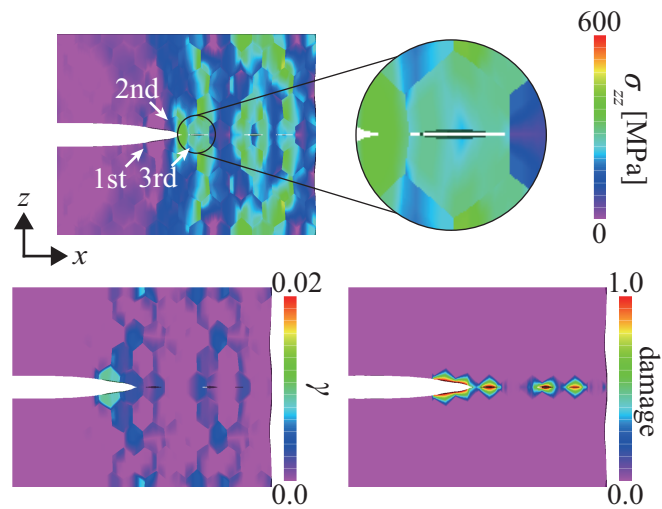


図- 2.17 1 サイクル時におけるる応力，蓄積すべり量および損傷値の分布

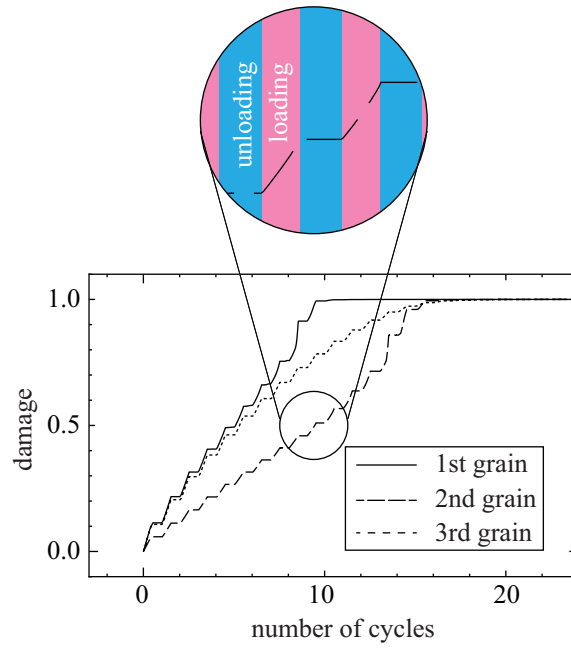


図-2.18 き裂先端近傍の結晶粒における損傷値の蓄積

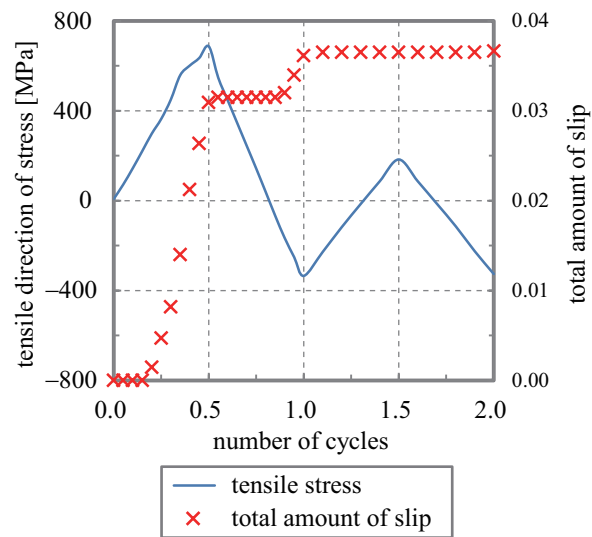


図-2.19 2サイクル時に作用する引張応力と蓄積すべり量

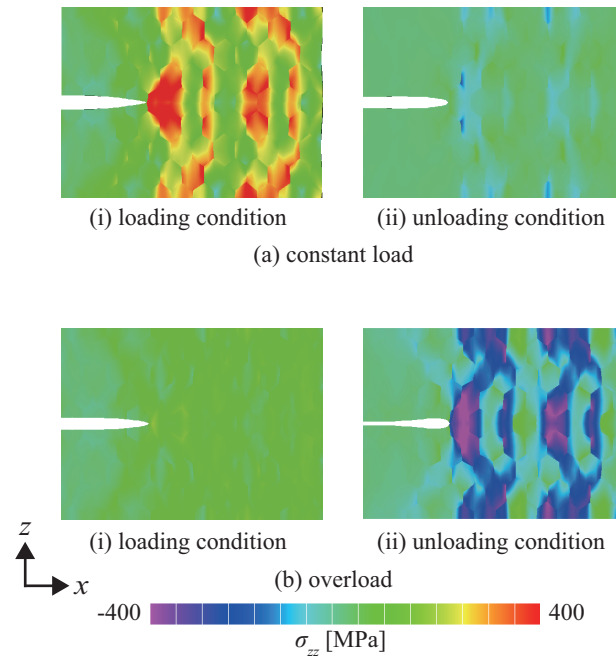


図-2.20 2サイクルにおける荷重および除荷時の応力分布

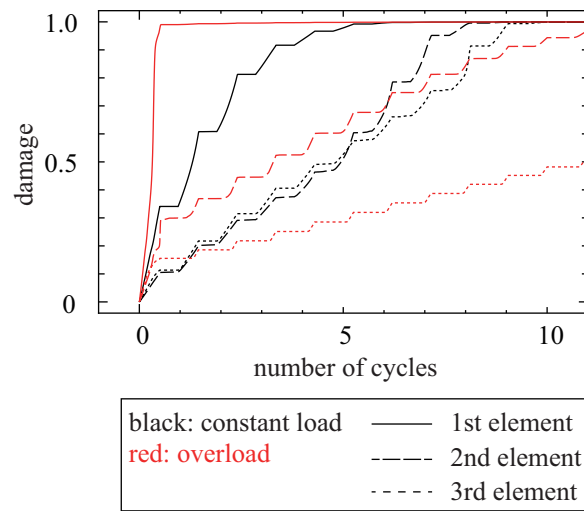


図-2.21 繰り返し荷重ごとの損傷値の蓄積

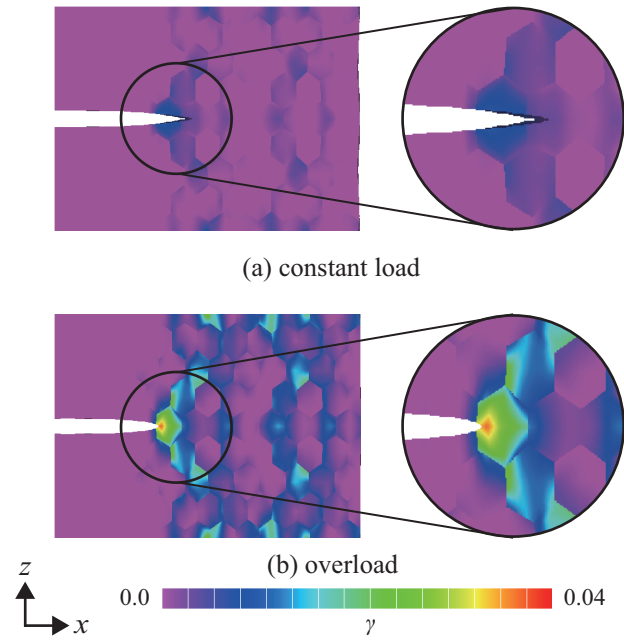


図-2.22 14 サイクル時の蓄積すべり量

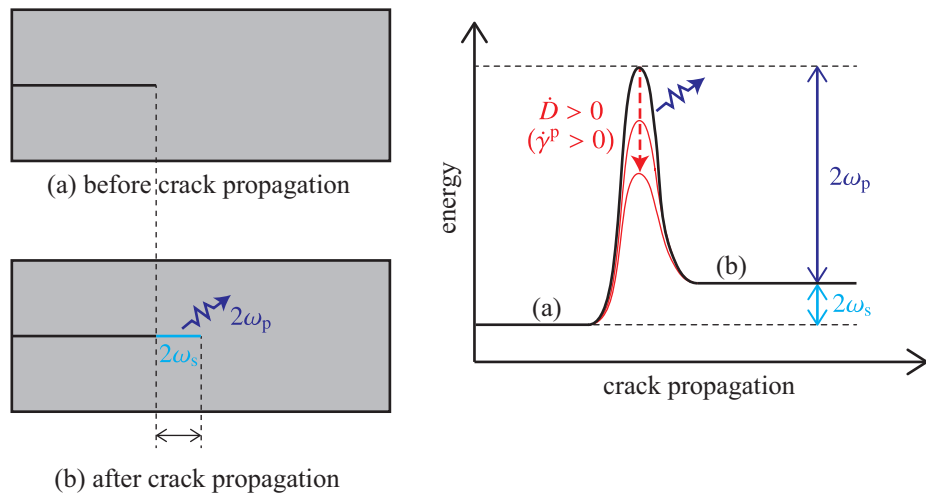


図-2.23 き裂進展に伴うエネルギーの変化

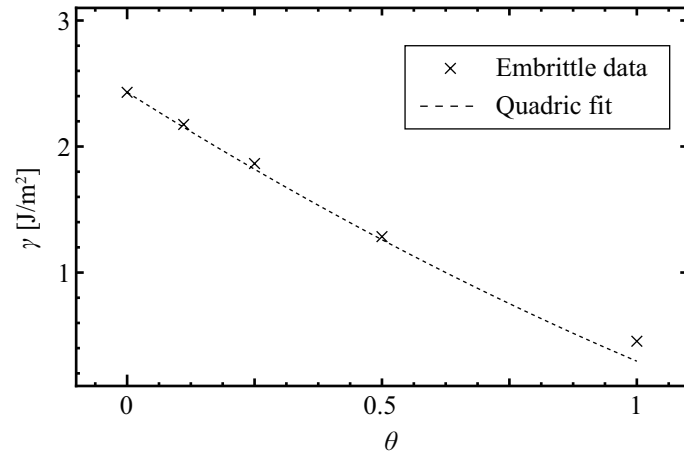


図- 2.24 水素濃度の変化に伴う表面エネルギーの推移

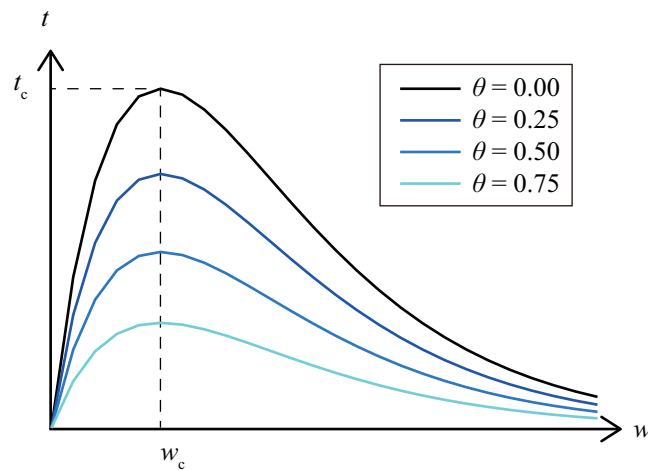


図- 2.25 水素濃度の変化に伴う結合力の推移

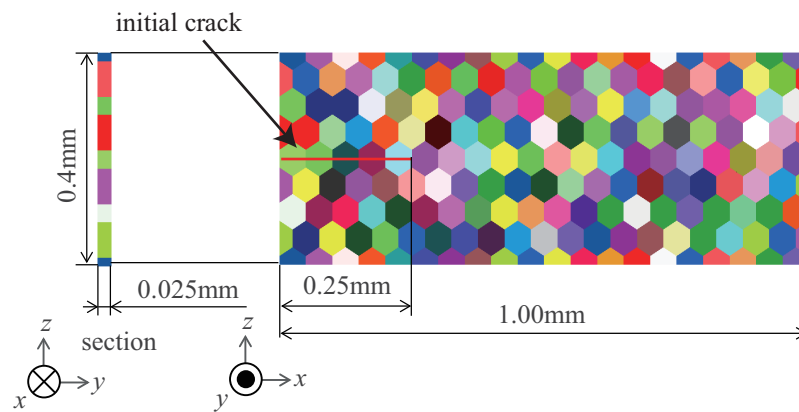


図- 2.26 160個の結晶粒からなる解析モデル



図- 2.27 結晶粒内および粒界における拡散係数

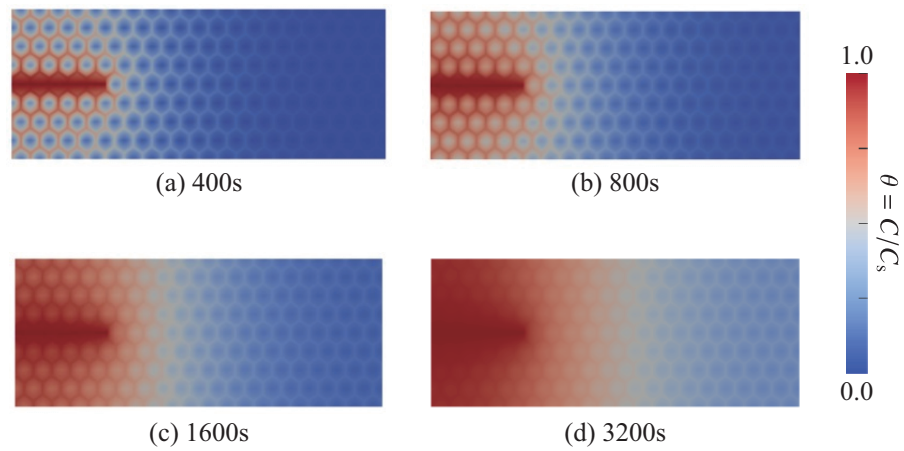


図- 2.28 暴露時間毎の水素濃度分布

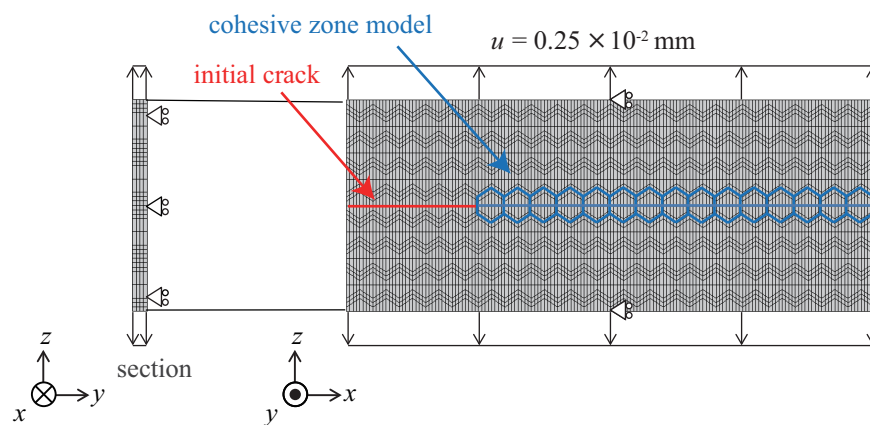


図- 2.29 水素脆化によるき裂進展解析の境界条件と結合力モデルの導入位置

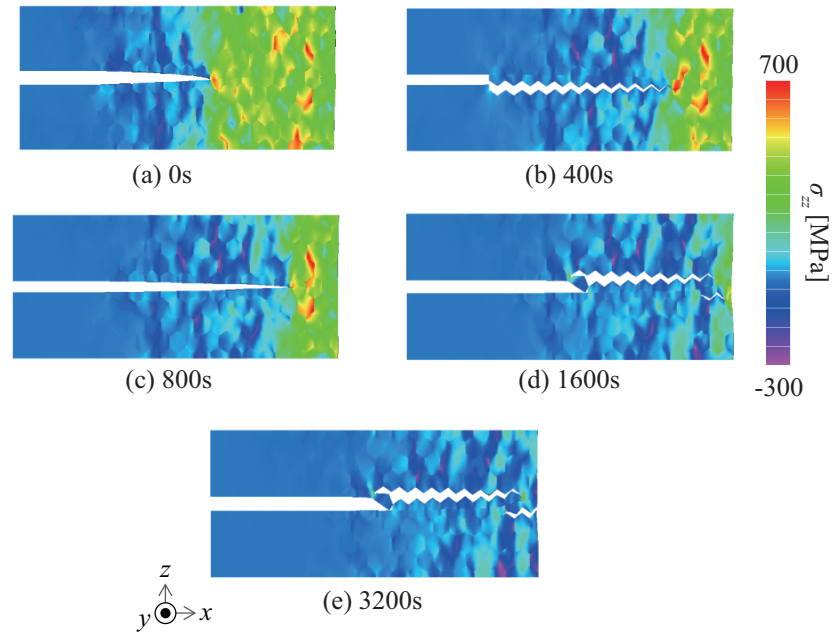


図- 2.30 暴露時間の違いによるき裂進展挙動の違い

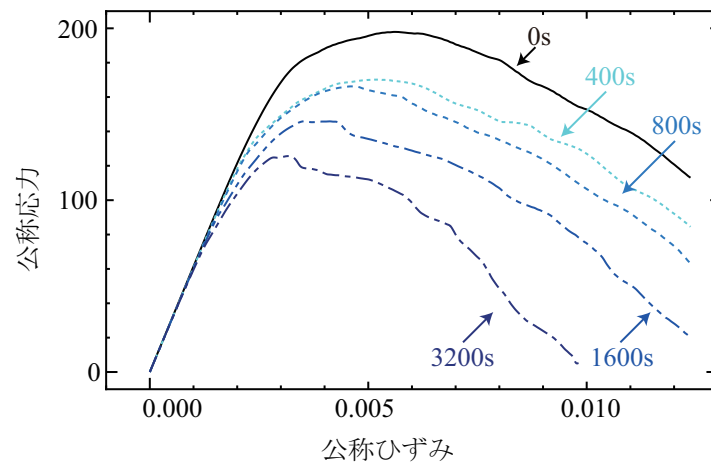


図- 2.31 暴露時間毎の公称応力公称ひずみ線図

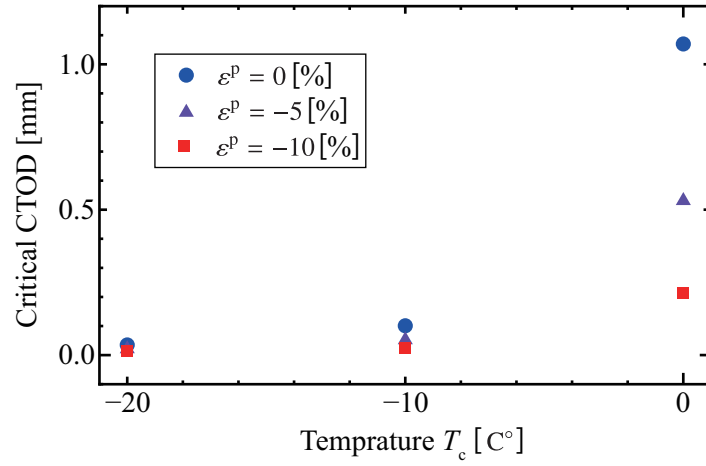


図- 2.32 限界 CTOD 値と温度の関係

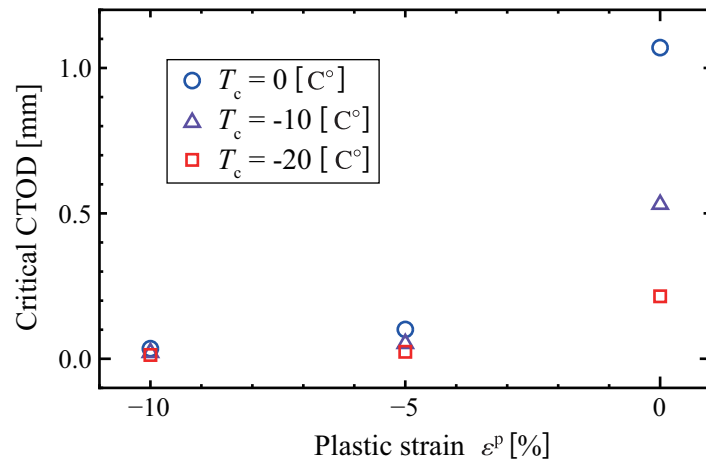
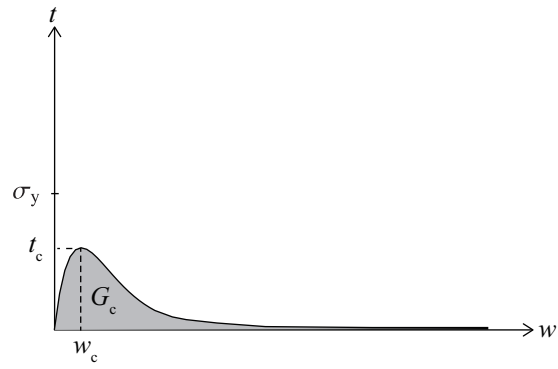
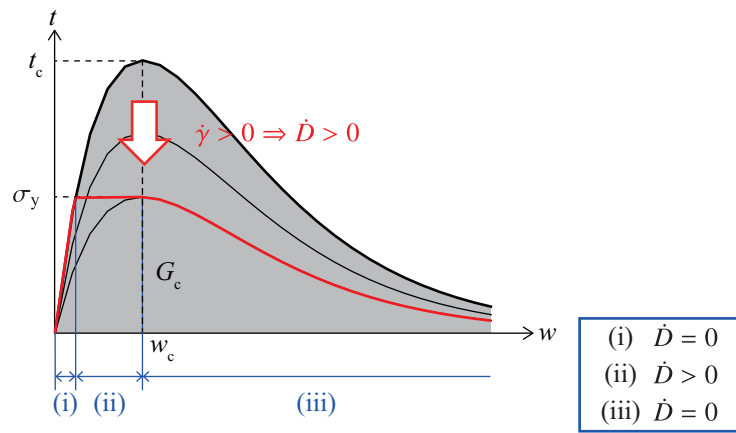


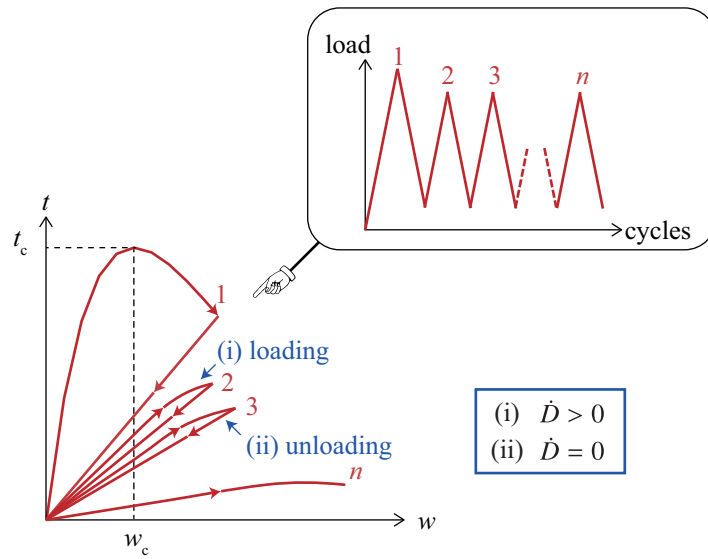
図- 2.33 限界 CTOD 値と塑性ひずみの関係



(a) brittle fracture



(b) ductile fracture



(c) fatigue fracture

図-2.34 塑性変形を考慮した結合力モデル

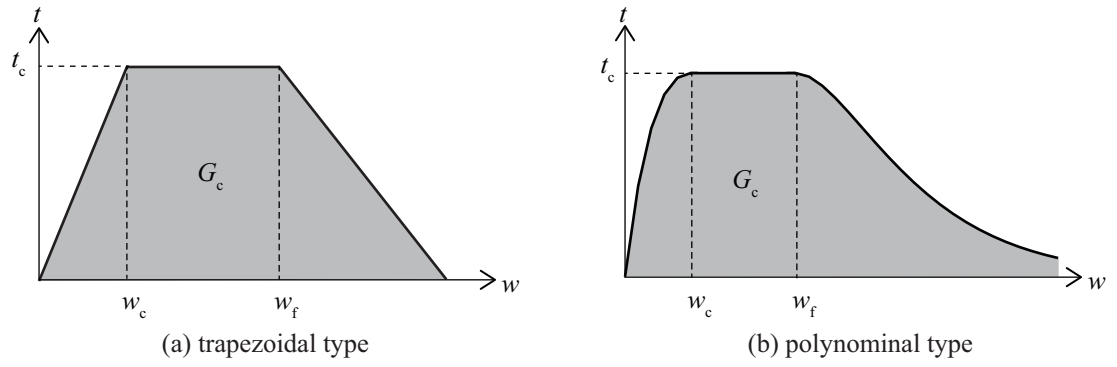


図- 2.35 延性破壊における従来の結合力モデル

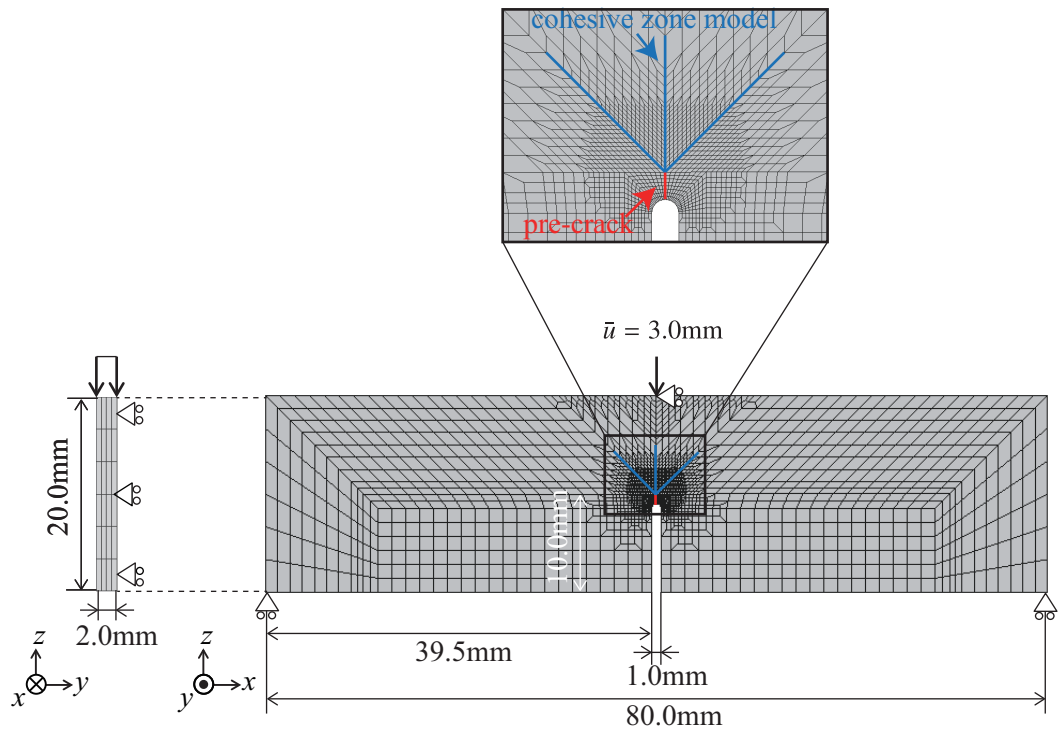


図- 2.36 三点曲げの解析モデル

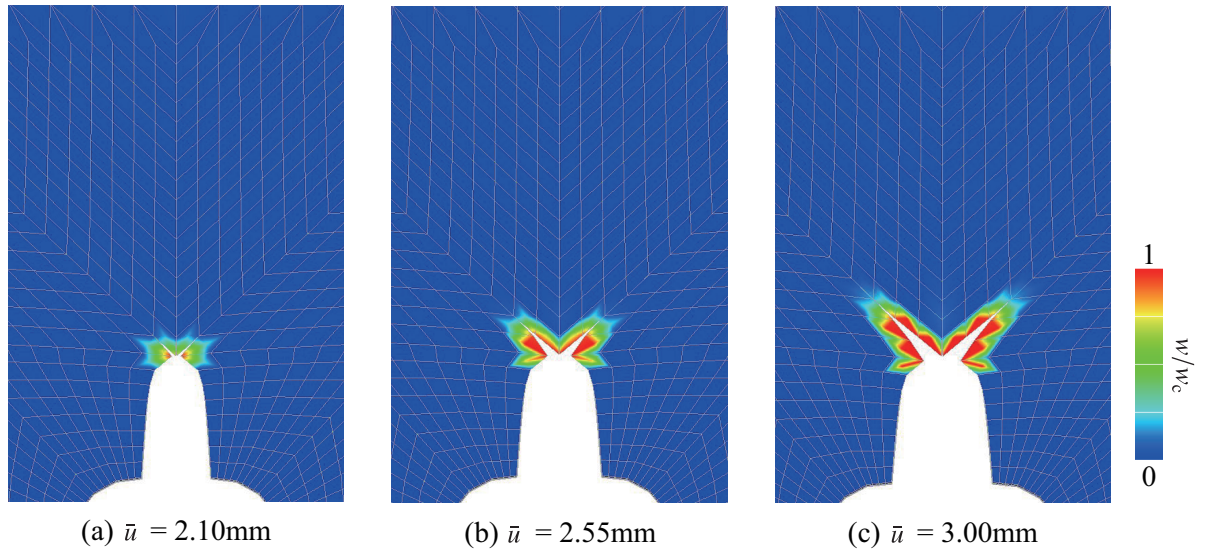


図- 2.37 塑性変形を考慮した結合力モデルのき裂開口変位

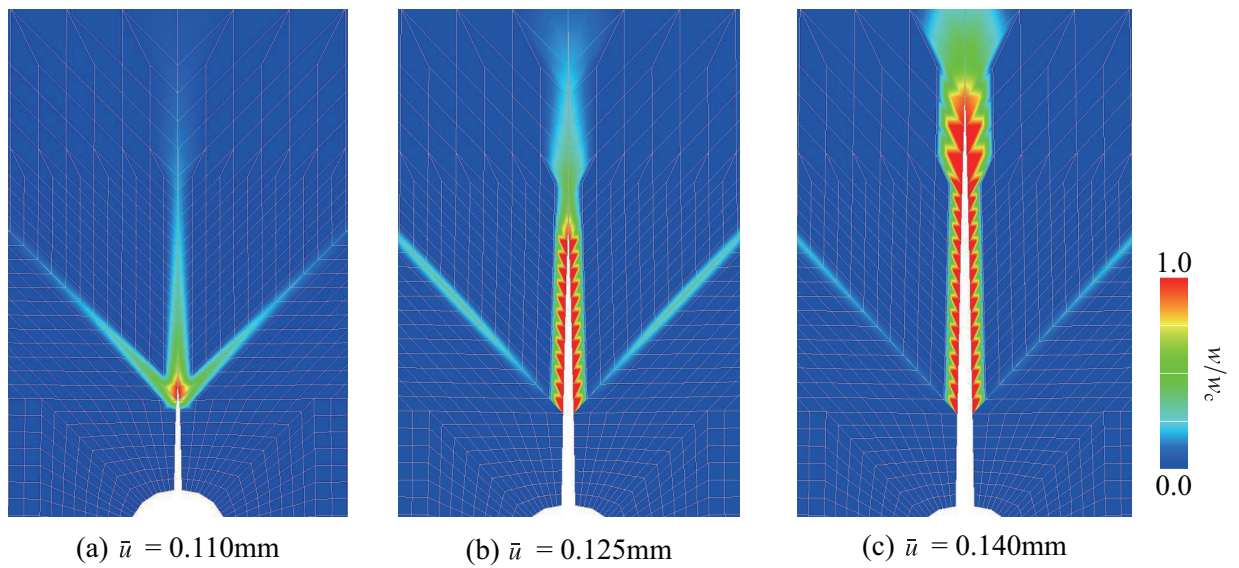


図- 2.38 原子間結合に基づく結合力モデルのき裂開口変位

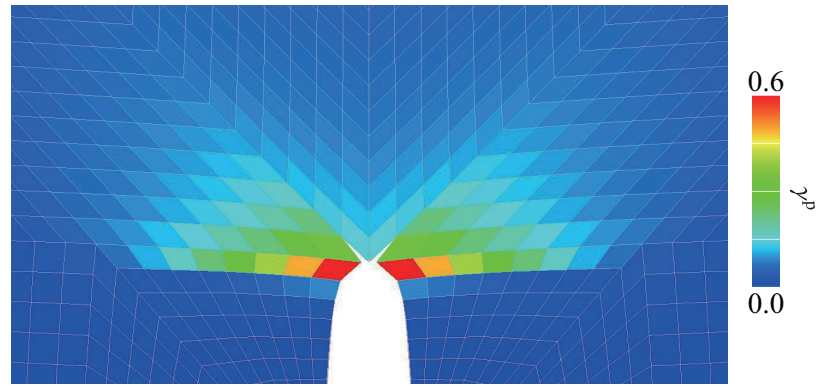


図- 2.39 塑性変形を考慮した結合力モデルの相当性ひずみ分布 ($\bar{u} = 2.20\text{mm}$)

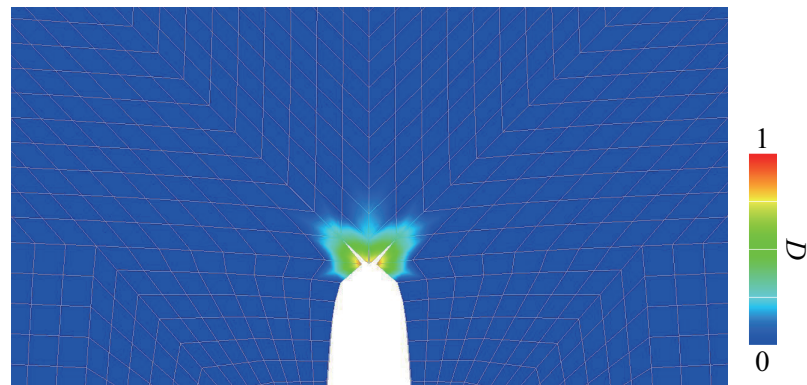


図- 2.40 塑性変形を考慮した結合力モデルの損傷値分布 ($\bar{u} = 2.20\text{mm}$)

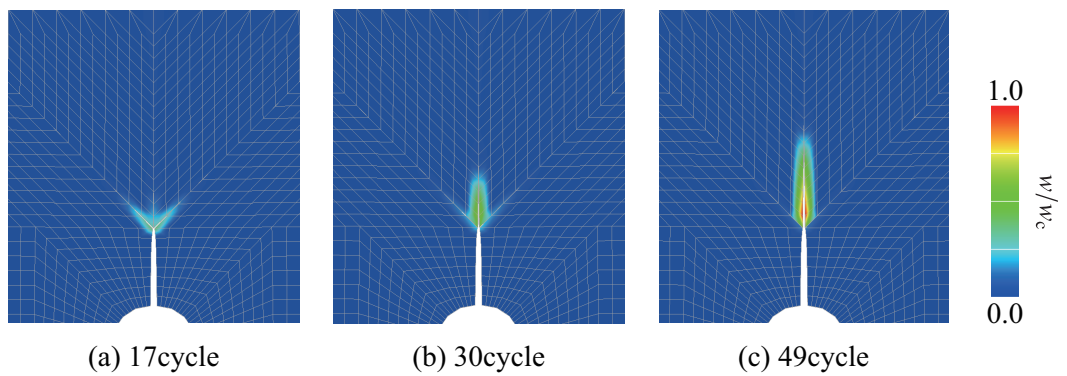


図- 2.41 繰り返し载荷によるき裂開口変位

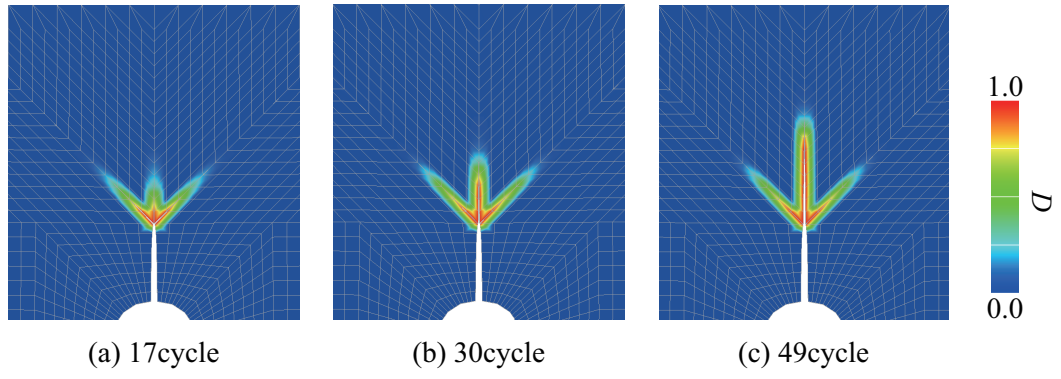


図-2.42 繰り返し载荷による損傷値の分布

3. 結合力を埋め込んだ損傷構成則の構築

3.1 はじめに

第2章のように、従来通りの結合カモデルを用いた数値解析では潜在き裂面を定義する必要があるために、任意方向に進展するき裂を解析することは困難である。また、第1章で述べたように連続体モデルから陽的なき裂形状に矛盾なく移行するためにも、従来の結合カモデルと整合した構成則の構築が不可欠となる。そこで、本章では物質点の材料挙動に運動学的な整合性を保ちながら結合カを対応づけた異方性損傷構成則を提案する。具体的には、Smearred クラックモデル¹²⁴⁾や回転ひび割れモデル (Rotating Crack Model)¹²⁵⁾と同様に、材料内部において主応力方向と直交する面内に微小き裂が発生するものと仮定する。各物質点にこのき裂の開口挙動による見かけ上のひずみを定義し、このひずみと仮想的なき裂面上の応力ベクトル、すなわち、主応力が結合カモデルの関数形で関係づけられるような損傷構成則を定式化する。

このように、提案する損傷構成則は結合カモデルを物質点の材料挙動として構成則に埋め込んだ形式になっているため、本論文では結合カ埋込型損傷構成則 (Coesive-force embedded damage model) と呼称することにする。なお、埋め込む結合カモデルは任意のものでよく、埋め込まれる側の構成則も任意でよい。また、提案モデルを有限要素法に実装するにあたり、物質点におけるき裂の方向とつり合い状態における主応力の方向を常に一致させる数値解析アルゴリズムを採用するが、著者の知る限りこのよう

な解法が紹介されている文献は見当たらないので、多少詳しく解説する。

以下の第3.2節では、結合カモデルを弾性材料構成則に組み込んだ結合カ埋込型損傷構成則の定式化を示し、き裂の開口量に関する条件式を新たに導出する。そして、この提案モデルを有限要素法に実装する際の具体的な数値解析アルゴリズムを解説する。数値解析例として、まず陽的に定義されたき裂面に導入する結合カモデルと提案モデルを用いた一様引張問題においては、主応力方向の応答が完全に一致することを示した後に、引張負荷を受ける円孔板の数値解析例を通して提案モデルの特徴を説明する。次に、片持ちはり状の構造物の曲げ問題を対象として、採用した数値解析アルゴリズムの妥当性を検証する。最後に、き裂面を陽的に既定する従来の結合カモデルでは追従が容易ではないとされる混合モード下でのき裂進展解析例を通して、提案した結合カ埋込型損傷構成則の有効性を例証する。第3.3節では、弾塑性材料構成則に対する結合カ埋込型損傷構成則の定式化およびその数値解析アルゴリズムを示す。また、第2章で提案した一般化結合カモデルをこの損傷構成則に用いて、第2.5.2項の延性き裂進展における破壊挙動の再現性能について検証する。第3.4節では、結晶塑性構成則に対する結合カ埋込型損傷構成則を定式化し、多結晶体に繰り返し荷重を作用させた後の予耐力の評価例を示す。

3.2 結合カ埋込型損傷構成則の弾性構成則への適用

本節では、一次元弾性問題を対象に結合カ埋込型損傷構成則を定式化した後、多次元問題に拡張する。また、この損傷構成則を有限要素法に実装するための具体的な数値解析アルゴリズムを解説する。そして、いくつかの数値解析を通して提案構成則の性能を検証するとともに、数値計算を行ううえでき裂の方向とつり合い条件を満たす主応力の方向を常に一致させることの重要性を例示する。

3.2.1 結合力埋込型弾性損傷構成則の定式化

一次元問題

図 3.1 のように、仮想的なき裂面に結合力モデルが導入された長さ h の一次元モデルを考え、全ひずみ ε が作用しているものとする。このときのき裂開口量を w とすると、見かけ上のひずみは、

$$\varepsilon^w = \frac{w}{h} \quad (3.1)$$

である。また、結合力 t は w のポテンシャルを用いて

$$t = \frac{d\Psi}{dw} \quad (3.2)$$

の関数形で表されるものとする。

一方、一次元モデルに作用している応力 σ は、 E を弾性係数として

$$\sigma = E\varepsilon^e = E(\varepsilon - \varepsilon^w) \quad (3.3)$$

で与えられる。ここで、 ε^e と ε は、それぞれ弾性ひずみと全ひずみである。これを連続体損傷構成則と同様の形式で書くと、

$$\sigma = E \left(1 - \frac{\varepsilon^w}{\varepsilon} \right) \varepsilon = E \left(1 - \frac{w}{h\varepsilon} \right) \varepsilon \quad (3.4)$$

となる。すなわち、 $\varepsilon^w/\varepsilon$ は損傷力変数と同様に見かけ上の材料剛性の低下を意味することがわかる。

いま、この一次元モデルのつり合い状態では、応力と結合力は等しくなるので $\sigma = t$ が成り立ち、式 (3.2) と (3.4) を等値して

$$g^w(w) = E \left(\varepsilon - \frac{w}{h} \right) - t(w) = 0 \quad (3.5)$$

が得られる。この条件式は、強不連続解析 (Strong discontinuity analysis) ^{126),127)} に結合力モデルを導入する際に用いられる要素内の不連続面における応力と結合力の局所的

なつり合い条件と同形であり，本モデルはこれを物質点に適用するものである．前述のように，式(3.4)は連続体損傷構成則の形式であるが，条件式(3.5)を通して物質点の応力ベクトルと結合カモデルの内力ベクトルが整合するので，このモデルを一次元問題に対する「結合カ埋込型損傷構成則」と呼ぶことにする．

以上をまとめると，一次元弾性問題に対して提案する結合カ埋込型損傷構成則は次のようになる．

- ひずみの加算分解

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^w$$

- 弾性構成則

$$\sigma = E\varepsilon^e$$

- き裂開口による見かけ上のひずみ

$$\varepsilon^w = \frac{w}{h}$$

- 応力と結合カ $t(w)$ の条件式

$$g^w(w) = \sigma(w) - t(w) = 0$$

また，ひずみ ε が既知であれば，この条件式はき裂開口量 w を求めるための方程式と見なすことができるため，解析上はリターンマッピング方程式としての役割を果たすことになる．

多次元問題

式(3.4)と同様の形式を採用し，等価ひずみなどの不変量を用いることで三次化した等方損傷構成則^{128),129)}は広く知られているが，本来の破壊現象ではき裂が存在するこ

とによる異方性が顕在化することを考えると、物理的意味が曖昧である。以下では、弾性構成式と通常の結合力モデルとの関係を明確にしなが、前節で提示した一次元問題に対する結合力埋込型損傷構成則を多次元問題に拡張する。

まず、ある物質点に作用している Cauchy 応力を以下のようにスペクトル分解する。

$$\boldsymbol{\sigma} = \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \sigma^{(i)} \mathbf{e}^{(i)} \otimes \mathbf{e}^{(i)} \quad (3.6)$$

ここで、DIM は空間次元、 $\sigma^{(i)}$ は固有値、 $\mathbf{e}^{(i)}$ は固有ベクトルを表す。ただし、 $\sigma^{(1)} \geq \sigma^{(2)} \geq \dots \geq \sigma^{(\text{DIM})}$ の順とする。

いま、回転ひび割れモデル¹²⁵⁾と同様に、物質点において主応力 $\sigma^{(i)}$ の各方向にき裂が発生するものと仮定すると、その方向のき裂開口変位の成分 $w^{(i)}$ を用いた見かけ上のひずみは

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{w(i)} = \frac{w^{(i)}}{h^{(i)}} \quad (3.7)$$

と表され、ひずみテンソル $\boldsymbol{\varepsilon}^w$ は、

$$\boldsymbol{\varepsilon}^w = \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \boldsymbol{\varepsilon}^{w(i)} \mathbf{e}^{(i)} \otimes \mathbf{e}^{(i)} \quad (3.8)$$

となる。ここで、 $h^{(i)}$ はこの物質点に関する代表長さであり、選び方には多少の任意性がある。例えば、すべての方向に有限要素の外接円の直径 h などを採用してもよいし、有限要素の各軸方向の辺の長さを採用しても良い。本研究では、後述するように立方体要素のみを用いた数値解析例を示すため、後者の定義を採用する。なお、ここでの「主応力の各方向にき裂が発生する」とした仮定は、金属材料の脆性破壊や疲労破壊、およびセラミックスやコンクリートなどの（準）脆性材料の破壊問題に対しては妥当なものであるとされる。本研究では、この (3.8) で定義したひずみを“開口ひずみ”と呼ぶことにする。

開口ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}^w$ と全ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}$ を用いると、弾性ひずみは

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^w \quad (3.9)$$

と求められるので、線形弾性体の構成則として $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E} : \boldsymbol{\varepsilon}^e$ を用いると、主応力 $\sigma^{(i)}$ は Rayleigh 商により、次式のように表すことができる。

$$\sigma^{(i)} = \mathbf{e}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{e}^{(i)} = \mathbf{e}^{(i)} \cdot [\mathbf{E} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^w)] \mathbf{e}^{(i)} \quad (3.10)$$

ここで、 $\boldsymbol{\sigma}$ と $\boldsymbol{\varepsilon}^w$ の主方向が一致すると仮定しているため、等方弾性を仮定すると $\boldsymbol{\sigma}$ と $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ の主方向が一致し、結果的に全ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}$ の主方向も一致することになる。したがって、式(3.10)は、式(3.8)、(3.7)などを用いて

$$\begin{aligned} \sigma^{(i)} &= \mathbf{e}^{(i)} \cdot \left\{ \mathbf{E} \left[\sum_{j=1}^{\text{DIM}} (\varepsilon^{(j)} - \varepsilon^{w(j)}) \mathbf{e}^{(j)} \otimes \mathbf{e}^{(j)} \right] \right\} \mathbf{e}^{(i)} \\ &= \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \left\{ \mathbf{e}^{(i)} \cdot [\mathbf{E} : (\mathbf{e}^{(j)} \otimes \mathbf{e}^{(j)})] \mathbf{e}^{(i)} \right\} (\varepsilon^{(j)} - \varepsilon^{w(j)}) \\ &= \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} (\varepsilon^{(j)} - \varepsilon^{w(j)}) \end{aligned} \quad (3.11)$$

と表すことができる。ここで、 $\varepsilon^{(j)}$ は主ひずみであり、

$$\hat{E}^{(ij)} = \mathbf{e}^{(i)} \cdot (\mathbf{E} : \mathbf{e}^{(j)} \otimes \mathbf{e}^{(j)}) \mathbf{e}^{(i)} \quad (3.12)$$

とおいた。

き裂面と主応力面は一致するものと仮定しているため、一次元と同様に、主応力 $\sigma^{(i)}$ と結合力モデルにおいてき裂面に規定される結合力 $t^{(i)}(w^{(i)})$ の多次元問題における条件式は、

$$\begin{aligned} g^{w(i)}(w^{(i)}) &= \sigma^{(i)} - t^{(i)}(w^{(i)}) \\ &= \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} (\varepsilon^{(j)} - \varepsilon^{w(j)}) - t^{(i)}(w^{(i)}) = 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

である。

以上をまとめると、一次元弾性問題に対して提案する結合力埋込型損傷構成則は次のようになる。

- ひずみの加算分解

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^c + \boldsymbol{\varepsilon}^w$$

- 弾性構成則

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E} : \boldsymbol{\varepsilon}^c$$

- き裂開口による見かけ上のひずみ

$$\boldsymbol{\varepsilon}^w = \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \frac{w^{(i)}}{h^{(i)}} \mathbf{e}^{(i)} \otimes \mathbf{e}^{(i)}$$

- 応力と結合力 $t^{(i)}(w^{(i)})$ のつり合い条件式

$$g^{w^{(i)}}(w^{(i)}) = \sigma^{(i)}(w^{(i)}) - t^{(i)}(w^{(i)}) = 0$$

条件式の求解に用いた Newton-Raphson 法, および材料ヤコビアン¹³⁰⁾の導出過程は補遺 I.1 に記す。

以下では指数関数型の結合力モデルのみ例示するが, ここで定式化した結合力埋込型損傷構成則による応力評価は, 式 (3.13) の条件方程式を解くことことに帰着するため, 任意の結合力モデルに適用可能な汎用的な手法であることを強調しておく。ただし, 結合力埋込型損傷構成則では前述のように主応力方向にき裂が発生することを仮定している¹³¹⁾ので, き裂面に垂直方向な方向のき裂開口変位 w_n が $w^{(i)}$ と対応し, 接線方向の w_s はゼロとなる。このため, 例えば第 2.2 節の結合力モデルを用いた場合には破壊モード比 β は無効なパラメータとなる。

3.2.2 結合力埋込型弾性損傷構成則の実装方法

提案モデルのような異方性損傷構成則を用いる場合, 特に軟化域での求解が数値的に不安定になることが知られている^{130),131)}。また, 非弾性構成式との組み合わせにも対応

できるようにつり合い方程式に増分解法を適用する場合、平衡状態を満たす応力の固有ベクトルが未知で、その線形化は事実上不可能であるので、厳密には Newton-Raphson 法を適用できない。

そこで本研究では、各増分ステップにおいて平衡方程式を解くための数値計算アルゴリズムとして、固有値のみを線形化した接線係数を用いる次の二通りの反復解法を提示し、それらの有効性を検討する。

- 近似接線解法

固有値のみを線形化した近似的な接線係数を用いて Newton-Raphson 法の反復計算を行い、その修正過程で固有値 $w^{(i)}$ だけでなく固有ベクトル $e^{(i)}$ も同時に修正する解法

- 接線入れ子割線解法

荷重増分のステップ内で固有ベクトルを固定したうえで、固有値のみを線形化した接線を用いた Newton-Raphson 法を適用して平衡方程式を満たす固有値 $w^{(i)}$ が定まった後、対応する応力の固有ベクトルも正規のものを求め直して固定し、その荷重増分ステップにおける固有値 $w^{(i)}$ を求め直す解法

前者では、反復の過程で固有ベクトルが逐次変わることが平衡方程式の線形化方程式に反映されない近似的な接線解法となるため「近似接線解法」とした。一方、後者における固有ベクトルは各増分ステップで割線的な反復計算により更新され、その各反復計算のなかで固有値のみを線形化した接線を用いた Newton-Raphson 法により固有値を更新する。固有値に関する近似的な接線係数を用いる Newton-Raphson 法が固有ベクトルに関する割線的な反復計算の入れ子になるため「接線入れ子割線解法」と呼ぶことにした。それぞれのアルゴリズムのフローチャートを図 3.2 と図 3.3 に示す。「近似接線解法」は通常の Newton-Raphson 法の派生と見なされるので説明は不要であろうが、「接線入れ子割線解法」については以下にその計算過程を詳しく述べておく。

まず、図 3.3 のように、荷重増分の初期において弾性係数を用いた線形計算を行うことで仮想的なつり合い状態を求める。ここで、全ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}$ から前荷重増分ステップで求められた開口ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}_0^w$ を差し引いて試行的な弾性ひずみを

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\text{trial}} = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0^w \quad (3.14)$$

のようにおき、線形解析を行う。そして、この試行弾性ひずみの固有ベクトル $\boldsymbol{e}_0^{(i),\text{trial}}$ を固定したうえで、結合力埋込型損傷構成則における開口ひずみを求めながら平衡方程式を解く。この平衡方程式を満たす弾性ひずみの固有ベクトル $\boldsymbol{e}_{k+1}^{(i),\text{trial}}$ は固定しておいた固有ベクトル $\boldsymbol{e}_k^{(i),\text{trial}}$ (初期は $k=0$) と同一である保証はないので、これを新たな試行弾性ひずみとして、この荷重増分ステップの初期から平衡方程式を解き直す。この操作を $\boldsymbol{e}_{k+1}^{(i),\text{trial}}$ と $\boldsymbol{e}_k^{(i),\text{trial}}$ が一致するまで繰り返すため、固有ベクトルに関する反復計算は割線的といえる。

なお、固有ベクトルに関する割線的な反復計算は、各積分点における最大主応力の固有ベクトルの変化が十分小さくなるまで行う必要がある。この収束判定には、前の反復ステップの固有ベクトル $\boldsymbol{e}_k^{(1),\text{trial}}$ と現在の $\boldsymbol{e}_{k+1}^{(1),\text{trial}}$ とのベクトル積のノルムを用い、その値がすべての積分点で許容値以下になるまで反復計算を行うことにする。一方、この割線的反復計算の (1 ステップごとに) 入れ子で行われる反復計算は、開口ひずみの固有値に関する近似的な接線を用いる Newton-Raphson 法であり、収束判定には通常 residual ベクトルのノルムを用いればよい。

3.2.3 弾性材料のき裂進展問題への適用例

従来の結合力モデルの挙動の再現性

第 2.2 節で示した従来の結合力モデルで表現しうるき裂開口時の軟化挙動について、前節で提案した結合力埋込型損傷構成則の再現性能の検証を行う。具体的には、図 3.5 のような提案モデルを導入した 1 要素の解析対象と、従来通り要素間に設けた 2 重節

点に結合力モデルを導入した2要素の解析対象に対して一様一軸引張応力の状態となるように上下方向に強制変位 0.05mm を与え、両者の解析結果を比較する。等方弾性体の材料定数として Young 率 206MPa, Poisson 比 0.3 を与え、結合力モデルのパラメータには $G_c = 0.0136\text{MJ/m}^2$, $w_c = 0.01\text{mm}$ を用いた。

得られた荷重-変位曲線を図 3.5 に示す。結合力埋込型損傷構成則および従来手法による結果は完全に一致しており、このような一様一軸応力の状態で引張方向が最大主応力方向（すなわち、き裂の生じる方向）に一致する問題については、2つの手法は等価であるといえる。

なお、図 3.5 の曲線は軟化する以前に弾性係数の傾きが徐々に変わっているように見えるが、これは第 2.2 節で示し、本解析にも採用したの結合力の特性であり、 w_c を十分に小さくすることで弾性係数の傾きとほぼ同じになる。このことは、式 (3.4) に w_c を代入して考えると $w_c/h\varepsilon$ が十分に小さければ弾性係数と一致することからも確認できる。

円孔を有する平板の引張試験

ここでは、円孔を有する平板の引張試験のシミュレーションを行うことで、提案する結合力埋込型損傷構成則の従来モデルに対する優位性を例証する。平板は薄い3次元固体としてモデル化し、対称性を考慮して図 3.6 に示すような8分の1の有限要素モデルを用いる。この上端面のすべての節点に強制変位 0.2mm を加え、き裂の生成と進展の再現性能を検証する。Young 率を 206MPa, Poisson 比を 0.3 とし、結合力モデルのパラメータは $G_c = 0.0033\text{MJ/m}^2$, $w_c = 0.02\text{mm}$ とした。

解析結果として、見かけの応力（上端部の全反力をその面積で割った量）と見かけひずみ（与えた強制変位を平板の縦寸法で除した値）の関係を図 3.7 に示す。また、き裂進展に伴う z 方向垂直応力分布と、き裂開口変位とその臨界値との比 w/w_c の分布を、それぞれ図 3.8 と 3.9 に示す。ここで、応力集中部における w/w_c が 1 に達すると結合力が最大となり、対応する積分点がき裂先端部と見なされる。実際、図 3.8(a) における

円孔縁の応力集中部から，図 3.9(b) のようなき裂の発生・進展を模擬できていることが分かる．このとき， w/w_c が 1 に達した積分点（あるいは要素）の結合力は，開口量に従って徐々に漸減するが，それ以外の積分点（あるいは要素）では応力が解放されることで w/w_c の値は（1 に達する前に）0 に戻る．図 3.8(c) と図 3.9(c) は，このような過程を経た最終的な状態である．

結合力モデルを一般化有限要素法などと併用する場合，ある荷重増分により得られた平衡状態において最大主応力が臨界有効結合力を超えた要素を検索するのが一般的である．そして，そのような要素に対しては，最大主応力方向に新たなき裂面と結合力モデルを挿入して，再度つり合い方程式を解き直すことになる．このとき，このき裂面の方向はつり合い方程式を解き直す前の最大主応力方向であり，解き直した後に平衡解が得られた段階での最大主応力の方向を定めてき裂面を定義し直す必要がある．しかしながら，多くの場合，このつり合い方程式の再計算で設定する新たなき裂面は，き裂がないものとして得られた平衡解に基づいて決められた方向に進展することになるため，同じ荷重増分ステップ内で同様の反復計算を繰り返さない限り，平衡状態を満たす応力とき裂の方向は整合しない．このような方法は，解析前に新たなき裂面の形成箇所を初期き裂として既定する場合には大きな問題にはならないが，初期き裂が存在しない場合，き裂の方向を修正する毎にその発生箇所も異なる可能性がある．一方，本研究で提案する結合力埋込型損傷構成則は，従来の結合力モデルとの親和性が高いだけでなく，平衡状態を満たす応力の主方向とき裂の発生・進展の方向を常に一致させることができる．このため，第 3.2.2 節に示した方法で平衡方程式と固有ベクトルの収束計算を行うことで，き裂の方向だけでなく，発生箇所も解析に自然に導入されるという特徴を有している．

片持ち梁状構造物の曲げ変形の解析

前述の2つの数値解析例では、変形の程度に応じて主応力方向の変化がほとんどないため、第3.2.2節で示した固有ベクトルの収束計算の有無により得られる解に大きな差異はない。しかし、変形量に応じて主応力方向が変化するような問題の場合、固有ベクトルの収束計算の有無によって差異が生ずるはずである。特に固有ベクトルの収束計算を行わない場合には、主応力方向と異なる方向に物質点におけるき裂を考慮することになり、全体座標系でき裂を表した **Smeared** クラックモデル¹²⁴⁾と同様に“**Stress locking**”¹²⁵⁾が発生することが予想される。本節では、そのような例としてはり状構造物の曲げ問題を設定し、第3.2.2節で示した近似接線解法 (**Approximate Tangent Method: ATM**) と接線入れ子割線解法 (**Nested Tangent Secant Method: NTSM**) に加えて、後者において固有ベクトルの収束計算を行わない陽的割線解法 (**Explicit Secant Method: ESM**) を用いて得られる解を比較・考察する。以下では、まず固有ベクトルの収束計算の必要性を例示し、その後近似接線解法と接線入れ子割線解法との収束性を比較し、接線入れ子割線解法の優位性を示す。

設定した解析対象は、図3.10に示すような y - z 面に関する対称性を考慮した片持ちはり状の3次元固体構造物の有限要素モデルである。これが曲げ変形を生じるように右下端の3節点に強制変位 0.03 mm を加える。Young 率は 206 MPa 、Poisson 比は 0.3 、結合力モデルのパラメータは $G_c = 0.0033 \text{ MJ/m}^2$ および $w_c = 0.02 \text{ mm}$ とした。また、接線入れ子割線解法においては、現ステップと前ステップの固有ベクトルの外積のノルム値がすべての積分点において 0.001 以下になるときに収束したものと判定する。

解析の結果、3種類のすべての解法において最大主応力が作用する固定端上部からき裂が発生し、 y 軸の負の方向に向かって進展するという結果になった。この解析対象全体の挙動を比較するために、3種類の解析手法による体積平均した最大主応力と主ひずみの関係を図3.11に示す。この図から、近似接線解法および接線入れ子解法はほぼ同

じ値を示しているのに対して、陽的割線解法ではこれら2つの方法に比べて、軟化挙動に遅れが生じており、変形が硬くなっている。すなわち、3種類の解法で同じき裂の進展挙動を示したが、陽的割線解法を用いた解析では、近似接線解法および接線入れ子解法と比較して固定端上部から発生したき裂の進展が遅れ、変形が硬くなる。このような硬化現象は Smearred クラックモデルにおいて特に問題視されている “Stress locking”¹³²⁾ によるものであると考えられる。

“Stress locking” を検証するために、近似接線解法および接線入れ子解法でき裂が進展している時点 ($\varepsilon^{(1)} = 0.5\%$) での最大主応力分布と物質点におけるき裂の方向の z 軸に対する角度の分布を、それぞれ図 3.12 および 3.13 に示す。図 3.12(a) および (b) から、接線入れ子割線解法と近似接線解法による解は、前述のように最大主応力が作用する固定端上部からき裂が発生し、鉛直方向に進展したことで応力が解放された様子が確認できる。また、図 3.13(a) および (b) から、どちらの解析方法でも物質点におけるき裂の方向は x 軸方向を示していることがわかる。これに対して、図 3.12(c) より、陽的割線解法では固定端上端部において前述のように応力が解放されておらず、この時点でまだき裂が発生していないことがわかる。さらに、図 3.13(c) のように固定端付近の物質点におけるき裂の方向が 45° 傾いており、前述の2つの結果とは異なる。これは、陽的割線解法では固有ベクトルの収束計算を行わないため、各物質点でつり合い状態を満たす応力と、き裂の方向を定めるために用いた応力が異なることに起因する齟齬である。実際、陽的割線解法では式 (3.10) の計算に際して常に試行固有ベクトル $\mathbf{e}_0^{\text{trial}}$ を用いるが、これはつり合い状態における最大主応力の固有ベクトルとは異なる。結果として $\mathbf{e}_0^{\text{trial}}$ を用いて計算した Ralyleigh 商はつり合い状態における応力の固有値と一致せず、最大主応力よりも小さい値となる。これによってき裂の進展が遅れ、全体の変形挙動が本来よりも硬くなる。以上のように、近似接線解法や接線入れ子割線解法を用いて物質点におけるき裂の方向と応力の固有ベクトル方向を一致させることで “Stress

locking”を回避することができる。

最後に、最大主ひずみの体積平均値が $\varepsilon^{(1)} = 0.5\%$ のときの近似接線解法と接線入れ子割線解法の収束の様子を図 3.14 に示す。図中の縦軸はつり合い方程式の残差であり、 10^{-5} 以下を収束判定値とした。また、図 3.14(b) における反復回数は、固有ベクトルを更新する毎につり合い方程式を解くのに要した反復回数の総和である。ここで、図 3.14(b) の残差が振動しているように見えるのは、接線入れ子割線解法では応力の固有ベクトルを更新した後に増分ステップ初期に戻ってつり合い方程式を解き直す際に、残差も初期の値に戻るためである。近似接線解法では、接線に整合性がないために収束するまでに図 3.14(a) のように 677 回の反復を要している。これに対して、接線入れ子割線解法では固有ベクトルの更新の回数は多いが、更新後につり合い方程式を解くための Newton-Raphson 法では接線が整合しているため、反復回数が 2, 3 回程度と少ない。その結果、接線が整合していない近似接線解法よりも速く収束している。実際、総反復回数は近似接線解法の 1/6 以下である。このように、本提案モデルは接線入れ子割線解法を用いることで、安定的かつ比較的効率的に解を得ることができる。

混合モードき裂進展解析への適用

本節の前半部において、まず Mode I および II の混合モード下におけるき裂進展挙動について、本研究で提案した結合力埋込型損傷構成則の妥当性を検証する。さらに、その妥当性は固有ベクトルの収束計算を前提としていることを示す。後半部では、本提案モデルを用いることで従来提案されてきた結合力モデルを連続体モデルとしたうえで、従来の結合力モデルの問題点と特徴について検討する。具体的には、従来の結合力モデルが変形履歴に依存しないことで生じる問題点と、古典的な破壊力学にはないパラメータである臨界有効き裂開口変位の値の変化によるき裂進展挙動への影響について検討する。

解法には、前節の解析例から優位性が示された接線入れ子割線解法を用いる。解析

対象は図 3.15 に示すような平板状の 3 次元構造物であり，引張方向に強制変位 0.10 m，せん断方向に強制変位 0.05mm を等しい増分ステップ数で漸増的にかつ同時に与える．Young 率は 206MPa，Poisson 比は 0.3，結合力モデルのパラメータは $t_c = 60\text{MPa}$ ， $w_c = 0.5 \times 10^{-2}\text{mm}$ とした．このとき，式 (2.7) より $G_c = 815\text{J/m}^2$ となる．

まず，第 2.3.1 項で導入した負荷・除荷過程を考慮した結合力モデルを用いて混合モード下におけるき裂進展挙動の妥当性を検証する．妥当性の検証は，脆性破壊や疲労破壊におけるき裂進展方向の予測によく用いられる最大接線応力規準（Maximum Tangential Stress criterion or maximum circumferential stress criterion : MTS）¹³³⁾ のき裂進展角 Θ_c と比較することで行う．この最大接線応力規準は，

$$K_I \sin \Theta_c + K_{II} (3 \cos \Theta_c - 1) = 0 \quad (3.15)$$

で表される．この式は，き裂が最大主応力方向に沿って進展すると仮定して，応力拡大係数から最大主応力の方向を解析的に求めたものである．また，モード I および II の応力拡大係数 K_I および K_{II} は，埋込型結合力モデルの解析とは別に実施した弾性解析の結果に，仮想き裂閉口積分法⁶⁴⁾を適用して求める．き裂開口変位とその臨界値との比 w/w_c の分布を，式 (3.15) の Θ_c を併記して図 3.16(a) に示す．この図から確認できる通り，負荷・除荷過程を考慮した結合力モデルによる解析結果は最大接線応力規準とよく一致している．

また，き裂進展に伴う最大主応力分布を図 3.17 に，最大主応力と主ひずみの関係を図 3.18 に示す．参考として，き裂の長さが同じ荷重ステップにおける，固有ベクトルの収束計算を行わない陽的割線解法を用いた解析結果も併記した．この最大主応力分図を見ると，接線入れ子割線解法を用いた解析では最大主応力が臨界有効結合力 $t_c = 60\text{MPa}$ を超えていないことが確認できる．これに対して，陽的割線解法により得られた最大主応力分図では，き裂進展後の要素周辺に比較的大きな応力が不自然に分布しており，その最大主応力値も臨界結合力を上回っている．また，全体の挙動を表す図 3.18 の応

力ひずみ曲線を見ても、陽的割線解法による結果は接線入れ子割線解法と比較して1.2倍程度大きくなっており、第3.2.3節の解析と同様に“Stress locking”が生じている。以上のように、陽的接線解法では局所的に不自然な応力が生じ、最大主応力が臨界結合力を上回っているのに対して、固有ベクトルの収束計算を行う接線入れ子割線解法ではこのような問題が生じることなく、結合力埋込型損傷構成則を用いた解析を適切に行うことができる。

次に、負荷・除荷過程を考慮した結合力モデルの結果とき裂長さが同じ荷重ステップの考慮しない結合力モデルによる解析結果を図3.19に示す。き裂先端のみ斜めに進展し、全体が初期き裂先端方向に沿って平行移動した結果となった。これはき裂が進展した箇所では実際の材料では剛性が低下するはずであるが、負荷・除荷過程を考慮しない場合、き裂進展後に応力が局所的に緩和されると結合力とき裂開口変位の剛性は初期状態に戻る。これに対して、負荷・除荷過程を考慮したモデルでは、図2.2のように結合力モデルの剛性が低下するので、再載荷時にはき裂開口が容易になる。これにより、同じ変形を再度負荷した場合でも、き裂開口変位 w が大きくなり、式(3.4)のように弾性係数自体は変化しないが見かけ上の材料剛性は低下する。

以上のように、混合モード下では最大到達有効き裂開口変位 w_{\max} のように変形履歴を考慮する内部変数が必要である。つまり、破壊現象は履歴依存の問題であるので、本来は破壊モデルも履歴に依存したモデル化でなくてはならない。そのため、損傷構成則の多くは損傷変数を発展方程式で記述した定式化となっているが、従来提案されてきた結合力モデルの多くは履歴依存性を考慮していない。このようなモデルが成立するのは、一軸の一方向変形状態という極めて限定された条件下であり、混合モード問題では、結合力モデルに履歴依存性を表現する内部変数が必要であるといえる。

最後に、古典的な破壊力学にはないパラメータである臨界き裂開口変位 w_c の影響について考察する。 $t_c = 60\text{MPa}$ に固定し、臨界き裂開口変位は上記の解析に用いた値よ

りも大きい $w_c = 2.0 \times 10^{-2}$ と 8.0×10^{-2} mm の 2 つを設定する．このとき，式 (2.7) より，それぞれ $G_c = 32.6 \times 10^{-1}$ と 0.1304×10^{-1} MJ/m² であるので，臨界き裂開口変位が大きいほど臨界エネルギー解放率に大きくなる．有効き裂開口変位との比 w/w_c の分布を図 3.20 に，最大接線応力規準より求めた Θ_c と併記して示す．この図より，き裂の進展角度は前述の結果と同じく，概ね Θ_c と一致していることが確認できる．また，図 3.16(a) と図 3.20 を比較すると，臨界有効き裂開口量の増加に伴って損傷域が広がっていることがわかる．つまり，エネルギー解放率が大きいほど損傷域が広がる傾向にある．このことは，従来の古典的な破壊力学では困難であった損傷域の大きさを考慮した解析が可能であることを示唆している．また，このような損傷域の拡大はゴム変性エポキシ樹脂などの白化現象に見られる傾向¹³⁴⁾ と類似しており，今後これらの材料への適用も期待できる．

以上，本研究で提案した結合力埋込型損傷構成則および接線入れ子解法を用いることで，混合モード下における任意き裂進展解析が可能であることを示した．また，従来提案されてきた結合力モデルを連続体損傷構成則として用いる場合，変形履歴への依存性の欠如による問題点があることを指摘した．さらに，古典的な破壊力学にないパラメータである臨界き裂開口変位によって損傷域の大きさの変化を表現できることを示した．

3.3 結合力埋込型損傷構成則の弾塑性構成則への適用

前節の弾性構成則と同様に，本節では一次元弾塑性問題に対する結合力埋込型損傷構成則を定式化した後，多次元問題に拡張する．また，前節で示した接線入れ子割線解法を弾塑性問題に適用するための修正点を述べる．数値解析例として第 2.5.2 項の延性き裂進展問題に適用し，平坦破壊とシェアリップ破壊が混在する破壊形態に対する提案した構成則の再現性能を検証する．

3.3.1 結合力埋込型弾塑性損傷構成則の定式化

一次元問題

前述した結合力埋込型損傷構成則に塑性ひずみ ε^p を考慮すると、式 (3.3) の一次元のモデルにおける応力は、

$$\sigma = E\varepsilon^e = E(\varepsilon - \varepsilon^w - \varepsilon^p) \quad (3.16)$$

で表されるので、き裂開口変位に関する条件式 (3.5) は、

$$\begin{aligned} g^w(w, \Delta\gamma^p) &= E(\varepsilon - \varepsilon^w - \varepsilon^p) - t(w) \\ &= E\left(\varepsilon - \frac{w}{h} - \varepsilon^p\right) - t(w) = 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

となる。ここで、塑性ひずみ速度 $\dot{\varepsilon}^p$ は、塑性流れ則により塑性乗数 γ^p を用いて

$$\dot{\varepsilon}^p = \gamma^p \text{sign}(\sigma) \quad (3.18)$$

で与えられる。

一方、降伏応力 σ_y および硬化に関する内部変数 α を用いると降伏関数は、

$$\begin{aligned} g^p(w, \Delta\gamma^p) &= |\sigma| - \sigma_y(\alpha) \\ &= \left| E\left(\varepsilon - \frac{w}{h} - \varepsilon^p\right) \right| - \sigma_y = 0 \end{aligned} \quad (3.19)$$

となる。

このように式 (3.19) の弾塑性構成則の降伏関数に加えて、式 (3.17) の応力と結合力のついで合い条件を解くことで、一次元弾塑性問題に対する結合力埋込型損傷構成則となる。以上をまとめると、提案する一次元結合力埋込型弾塑性損傷構成則の定式化は次のようになる。

- ひずみの加算分解

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^w$$

- 弾性構成則

$$\sigma = E\varepsilon^e$$

- き裂開口による見かけ上のひずみ

$$\varepsilon^w = \frac{w}{h}$$

- 塑性ひずみ速度

$$\dot{\varepsilon}^p = \dot{\gamma}^p \text{sign}(\sigma)$$

- 応力と結合力 $t(w)$ のつり合い条件

$$g^w(w, \dot{\gamma}^p) = \sigma(w, \dot{\gamma}^p) - t(w) = 0$$

- 降伏関数

$$g^p(w, \Delta\dot{\gamma}^p) = |\sigma(w, \dot{\gamma}^p)| - \sigma_y = 0$$

- 硬化則

$$\sigma_y = \sigma_y(\alpha)$$

$$\dot{\alpha} = \dot{\gamma}^p$$

- 負荷／除荷の判定基準

$$g^p \leq 0, \quad \dot{\gamma}^p \geq 0, \quad g^p \dot{\gamma}^p = 0$$

また、式 (3.17) および (3.19) の連立方程式の求解に用いた Newton-Raphson 法の導出過程は補遺 I.2.1 に記す。

多次元問題

一次元問題と同様に多次元問題でも塑性ひずみを考慮すると、Cauchy 応力は、

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^w - \boldsymbol{\varepsilon}^p) \quad (3.20)$$

で表される。ここで、多次元問題における塑性ひずみ速度は、

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \dot{\gamma}^p \mathbf{N} \quad (3.21)$$

である。ここで、 \mathbf{N} は流れベクトルであり、Prandtl-Reuss 則に従うと仮定すると、

$$\mathbf{N} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})}{\|\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})\|} = \frac{3}{2} \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})}{\sigma_{\text{eq}}} \quad (3.22)$$

である。ただし、 σ_{eq} は Mises 応力であり次式で表される。

$$\sigma_{\text{eq}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})\| \quad (3.23)$$

これにより、応力の固有値は、式 (3.7), (3.8) および (3.12) より、

$$\sigma^{(i)} = \mathbf{e}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{e}^{(i)} = \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} (\varepsilon^{(j)} - \varepsilon^{w(j)}) - \mathbf{e}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^p \mathbf{e}^{(i)} \quad (3.24)$$

となる。よって、多次元問題における応力と結合力のつり合い条件は、

$$\begin{aligned} g^{w(i)}(w^{(j)}, \Delta\gamma^p) &= t^{(i)}(w^{(i)}) - \sigma^{(i)} \\ &= t^{(i)}(w^{(i)}) - \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} (\varepsilon^{(j)} - \varepsilon^{w(j)}) + \mathbf{e}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^p \mathbf{e}^{(i)} \end{aligned} \quad (3.25)$$

となる。

一方、von-Mises の降伏関数を採用すると式 (3.7), (3.8), (3.12), (3.23) および (3.20) より、

$$\begin{aligned} g^p(w^{(i)}, \Delta\gamma^p) &= \sigma_{\text{eq}} - \sigma_y \\ &= \sqrt{\frac{3}{2}} \|\text{dev} \left[\mathbf{E} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \frac{w^{(i)}}{h^{(i)}} \mathbf{e}^{(i)} \otimes \mathbf{e}^{(i)} - \boldsymbol{\varepsilon}^p \right) \right]\| - \sigma_y \end{aligned} \quad (3.26)$$

となる。

一次元問題と同様に，多次元弾塑性問題においても式 (3.26) の降伏関数と式 (3.25) の応力と結合力のつ合い条件を合わせて解くことに帰結するため，結合力埋込型損傷構成則は任意の弾塑性構成則に対して適用可能である。以上をまとめると，多次元問題に対する結合力埋込型損傷弾塑性構成則の定式化は次のようになる。

- ひずみの加算分解

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^c + \boldsymbol{\varepsilon}^w + \boldsymbol{\varepsilon}^p$$

- 弾性構成則

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E} : \boldsymbol{\varepsilon}^c$$

- き裂開口による見かけ上のひずみ

$$\boldsymbol{\varepsilon}^w = \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \frac{w^{(i)}}{h^{(i)}} \mathbf{e}^{(i)} \otimes \mathbf{e}^{(i)}$$

- 塑性ひずみ速度

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \dot{\gamma}^p \mathbf{N}$$

- 応力と結合力 $t^{(i)}(w^{(i)})$ のつり合い条件

$$g^{w^{(i)}}(w^{(j)}, \dot{\gamma}^p) = t^{(i)}(w^{(i)}) - \sigma^{(i)}(w^{(j)}, \dot{\gamma}^p) = 0$$

- 降伏関数

$$g^p(w^{(i)}, \dot{\gamma}^p) = \sigma_{\text{eq}}(w^{(i)}, \dot{\gamma}^p) - \sigma_y = 0$$

- 硬化則

$$\sigma_y = \sigma_y(\alpha)$$

$$\dot{\alpha} = \dot{\gamma}^p$$

- 負荷／除荷の判定基準

$$g^p \leq 0, \quad \dot{\gamma}^p \geq 0, \quad g^p \dot{\gamma}^p = 0$$

また、式 (3.25) および (3.26) の連立方程式の求解に用いた Newton-Raphson 法、および材料ヤコビアン²⁰⁾の導出過程は補遺 I.2.2 に記す。

3.3.2 結合力埋込型弾塑性損傷構成則の実装方法

結合力埋込型弾塑性損傷構成則に第 3.2.2 で提示する接線入れ子解法を適用した場合には、荷重増分の初期において求められる仮想的なつり合い状態が弾性の場合と異なるため注意が必要である。

弾性構成則に適用した場合には、弾性解析の結果を初期値として開口ひずみを考慮してつり合い方程式を解く。これに対して、弾塑性構成則に適用した場合には、図のように開口ひずみを考慮せずに弾塑性解析を行った結果を初期値として、開口ひずみを考慮してつり合い方程式を解く。また、全ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}$ から前荷重増分ステップで求められた開口ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}_0^w$ と併せて、塑性ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}_0^p$ を差し引いて試行的な弾性ひずみを

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\text{trial}} = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0^w - \boldsymbol{\varepsilon}_0^p \quad (3.27)$$

のようにおき、弾塑性解析を行う。

3.3.3 延性き裂進展問題における数値解析例

第 2.5.2 項において、本研究で提案した一般化結合力モデルと二重節点で予めき裂面を規定した有限要素法モデルでは再現できなかった三点曲げ試験片の板厚中央部における平坦破壊と表面部におけるシェアリップ破壊について再度検討する。具体的には、第 2.5 節で提案した一般化結合力モデルを本節で提示した結合力埋込型損傷構成則に適用して延性き裂進展解析を行う。ただし、菊池らによって行われた 3 点曲げの実験²⁰⁾との定性的な比較を行うため、試験片の材料および寸法は変更した。

まず、き裂進展解析に先だって A533B 鋼による丸棒引張試験の結果²⁰⁾をもとに材料パラータを決定した。実験および数値解析による応力ひずみ関係の比較を図 3.22 に示

す。この図から実験結果と数値解析の結果が応力の降伏から軟化までよく一致していることがわかる。同定した弾塑性モデルおよび結合力モデルのパラメータは表 3.1 および 3.2 のようになった。

次に、丸棒引張試験の結果をもとに求めた材料パラメータを用いてノッチ付き三点曲げによるき裂進展解析を実施した。き裂進展解析に用いるモデルは、薄い 3 次元固体としてモデル化し、板厚方向と長手方向の対称性を考慮して図 3.24 に示すような 4 分の 1 の有限要素法モデルとした。境界条件は、上端面の中央部に z 方向に強制変位 3mm を与え、 x 方向は固定とし、さらに下端面の右端と左端を z 方向に拘束した。

丸棒試験と同じく、菊池らによって行われた 3 点曲げ試験の実験結果²⁰⁾を図 3.23 に示す。この図から試験片の表面部ではシェアリップ破壊によってき裂が分岐して斜めに進展していることが確認できる。き裂進展解析の結果として試験片の表面部、き裂面および板厚中央部におけるき裂進展に伴うき裂開口変位とその臨界値との比 w/w_c の分布を図 3.25 に示す。この図からわかるように板厚中央部では平坦破壊が生じるためにき裂は荷重点に向かって真っすぐ進展した。一方、実験結果と同様に、表面部ではシェアリップ破壊によって左右斜め方向に分岐した。ここで、き裂が進展を開始する直前の板厚中央部と表面部における相当塑性ひずみおよび損傷値の分布を図 3.26 および 3.27 に示す。図 3.26 から相当塑性ひずみは板厚中央部においてき裂先端のみに集中しているのに対して、表面部では押し込み方向から斜め $\pm 45^\circ$ に分布していることが確認できる。これにより、図 3.27 のように損傷値は板厚中央部ではき裂先端からまっすぐに分布し、表面部では斜め $\pm 45^\circ$ 方向の領域が高くなったものと判断される。この結果、板厚中央部では平坦破壊が生じたのに対して、表面部ではシェアリップ破壊が適切に再現されている。図 3.25(b) をみるとき裂面上ではき裂開口変位とその臨界値との比 w/w_c が板厚の中央部になるに従って大きくなっている。これは板厚効果によって生じる応力三軸度の板中央部と表面部での違いがもたらすトンネルリングと呼ばれる現象

であり，提案モデルの妥当性が示されたといえる．

以上，き裂進展解析から第 2.5 節で提案した一般化結合力モデルによって平坦破壊とシェアリップ破壊が混在する延性破壊を表現できることを確認した．また，結合力埋込型損傷構成則を用いることでこのような複雑な破面形状を再現した解析ができることを例示した．

3.4 結合力埋込型損傷構成則の結晶塑性構成則への適用

本節では，結晶塑性構成則に対する結合力埋込型損傷構成則の定式化を行う．また，ここで提案する構成則の適用例として繰り返し载荷後の予耐力評価のための数値解析を行う．

3.4.1 結合力埋込型結晶塑性損傷構成則の定式化

有限ひずみ弾塑性モデルでは，変形勾配は次式のように弾・塑性成分に加えて，き裂開口成分の乗算分解で与えられると仮定する．

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \mathbf{F}^w \quad (3.28)$$

ここで， \mathbf{F}^e は弾性変形勾配， \mathbf{F}^p は塑性変形勾配， \mathbf{F}^w はき裂開口変形勾配である．弾性成分は結晶格子の回転と歪み，塑性成分は結晶の純粋なすべり，き裂開口成分はき裂が開口することによる見かけの変形を図 3.28 表す．このとき，速度勾配は，弾性変形による速度勾配 \mathbf{l}^e ，塑性変形による速度勾配 \mathbf{l}^p およびき裂開口による速度勾配 \mathbf{l}^w の加算分解で次式のように表される，

$$\begin{aligned} \mathbf{l} &:= \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1} + \mathbf{F}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{F}^{e-1} + \mathbf{F}^e \dot{\mathbf{F}}^w \mathbf{F}^{w-1} \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{F}^{e-1} \\ &= \mathbf{l}^e + \mathbf{l}^p + \mathbf{l}^w \end{aligned} \quad (3.29)$$

さらに、二階のテンソル \bullet の対称・反対称成分をそれぞれ $\text{sym}[\bullet]$ と $\text{skw}[\bullet]$ で表すと、ストレッチテンソル \mathbf{d} とスピテンソル $\boldsymbol{\omega}$ はその弾・塑性成分 $\mathbf{d}^e, \mathbf{d}^p, \mathbf{d}^w, \boldsymbol{\omega}^e, \boldsymbol{\omega}^p$ および $\boldsymbol{\omega}^w$ でそれぞれ与えられる。

$$\mathbf{d} := \text{sym}[\mathbf{I}] = \mathbf{d}^e + \mathbf{d}^p + \mathbf{d}^w := \text{sym}[\mathbf{I}^e] + \text{sym}[\mathbf{I}^p] + \text{sym}[\mathbf{I}^w] \quad (3.30)$$

$$\boldsymbol{\omega} := \text{skw}[\mathbf{I}] = \boldsymbol{\omega}^e + \boldsymbol{\omega}^p + \boldsymbol{\omega}^w := \text{skw}[\mathbf{I}^e] + \text{skw}[\mathbf{I}^p] + \text{skw}[\mathbf{I}^w] \quad (3.31)$$

弾性挙動を表すための構成式として、回転に対して客観性のある応力速度を用いた重弾性構成則は、

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^* + \boldsymbol{\sigma} \text{tr}[\mathbf{d}^e] = \mathbb{L} : \mathbf{d}^e \quad (3.32)$$

となる。ここで、 \mathbb{L} は弾性テンソル、 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^*$ は次式で定義される中間配置を参照する客観応力速度である。

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^* := \hat{\boldsymbol{\sigma}} + (\boldsymbol{\omega}^p + \boldsymbol{\omega}^w) \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\omega}^p + \boldsymbol{\omega}^w) \quad (3.33)$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} := \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} \quad (3.34)$$

ここで、 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ は Jaumann 応力速度、 $\boldsymbol{\sigma}$ は Cauchy 応力である。

いま、対象とする材料のすべり系の数を n 個とし、その中の任意のすべり系 α における初期のすべり方向の単位ベクトル $\mathbf{s}_0^{(\alpha)}$ とすべり面に対する単位法線ベクトル $\mathbf{m}_0^{(\alpha)}$ をそれぞれ表す。すべり変形により結晶格子にゆがみが生じないと仮定すると、変形後の $\mathbf{s}^{*(\alpha)}$ および $\mathbf{m}^{*(\alpha)}$ は互いに直交を保つことになり、

$$\mathbf{s}^{*(\alpha)} = \mathbf{F}^e \mathbf{s}_0^{(\alpha)} \quad (3.35)$$

$$\mathbf{m}^{*(\alpha)} = \mathbf{m}_0^{(\alpha)} \mathbf{F}^{e-1} \quad (3.36)$$

となる。また、すべり系 α における分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ は、

$$\tau^{(\alpha)} = (\mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)}) : \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma} \quad (3.37)$$

となる。ここで、 $J = \det[F]$ である。この時、すべり系 α のすべり速度を $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ とすると、塑性仕事率に関しては次式の関係が成立する。

$$J\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{l}^p = \sum_{\alpha=1}^n \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (3.38)$$

この式に式(3.37)を代入し、整理すると、塑性速度勾配の発展方程式は、

$$\boldsymbol{l}^p = \sum_{\alpha=1}^n \left(\boldsymbol{s}^{*(\alpha)} \otimes \boldsymbol{m}^{*(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (3.39)$$

と規定される。

本研究では結晶すべりの構成モデルの発展方程式に次式で表される Asaro ら¹³⁵⁾の指数形の粘塑性モデルを用いる。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} := \dot{a} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{n^v} \text{sign} \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \quad (3.40)$$

ここで、 $g^{(\alpha)}$ はすべり系 α のすべり抵抗力、 \dot{a} は初期すべり速度、 n^v は速度感度指数で、いずれも材料定数である。また、すべり抵抗力の発展方程式は、

$$\dot{g}^{(\alpha)} := \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (3.41)$$

のように与える。ここで、 $h_{\alpha\beta}$ は硬化係数行列の成分を表しており、次の関数形を採用する。

$$\begin{cases} h_{\alpha\alpha} := h_0 \text{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \\ h_{\alpha\beta} := q h_{\alpha\alpha} \quad (\alpha \neq \beta) \end{cases} \quad (3.42)$$

ここで、 $h_{\alpha\alpha}$ と $h_{\alpha\beta}$ はそれぞれ自己硬化係数と潜在硬化係数を表し、 q はそれらの比である。また、 h_0 は初期硬化係数、 τ_s は Stage-I 応力、 τ_0 は初期臨界分解せん断応力を表す材料定数である。また、 γ は蓄積すべり量であり、次式で定義した。

$$\gamma := \sum_{\alpha=1}^n \int_0^t |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (3.43)$$

一方、本研究においてき裂開口速度勾配は、

$$l_{ij}^w = \sum_{\alpha=1}^{\text{NUM}} \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \sum_{j=1}^{\text{DIM}} (s_i^{*(\alpha)} \otimes m_j^{*(\alpha)}) \frac{\dot{w}_j^{(\alpha)}}{h} \quad (3.44)$$

で定義する。ここで、NUM はき裂が生じるへき開面の数であり、 h は物質点における代表長さである。応力に起因して生じる結晶スケールの微視的な破壊は、へき開破壊のように緻密度が最低の結晶面において生じるので、前節までのように主応力方向にき裂面を仮定せずに、この緻密面にてき裂が生じると仮定する。これにより、体心立方を仮定した場合には第 1.2.1 項で述べたように {100} 面におけるへき開破壊を考慮することになる。また、へき開面の数は次元と同じなので、NUM=DIM となる。この緻密面に作用する結合力は、

$$t_{ij} = \sum_{\alpha=1}^{\text{NUM}} \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \sum_{j=1}^{\text{DIM}} (s_i^{*(\alpha)} \otimes n_j^{*(\alpha)}) t_j^{(\alpha)} \quad (3.45)$$

のように表される。ただし、この結合力の固有ベクトル方向は応力方向とは一致せず、緻密面と平行な方向にも結合力をことを仮定している。このため、前節までの結合力埋込型損傷構成則とは異なり、破壊モード比 β が有効なパラメータとなる。

つり合い状態では結合力 \mathbf{t} と応力 $\boldsymbol{\sigma}$ は等しくなるので、次の条件式を満たすことになる。

$$\mathbf{g}^w(w^{(\alpha)}) = \boldsymbol{\sigma}(w^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}) - \mathbf{t}(w^{(\alpha)}) = \boldsymbol{\sigma}(w^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}) - \sum_{\alpha=1}^{\text{NUM}} (s^{(\alpha)} \otimes n^{(\alpha)}) t^{(\alpha)}(w^{(\alpha)}) = 0 \quad (3.46)$$

以上をまとめると、結合力埋込型結晶塑性損傷構成則の定式化は次のようになる。

- ひずみの乗算分解

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \mathbf{F}^w$$

- 歪弾性構成則

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^* + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr}[\mathbf{d}^e] = \mathbb{L} : \mathbf{d}^e$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^* := \hat{\boldsymbol{\sigma}} + (\boldsymbol{\omega}^p + \boldsymbol{\omega}^w) \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\omega}^p + \boldsymbol{\omega}^w) \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}} := \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}$$

- き裂開口速度勾配

$$\mathbf{l}^w = \sum_{\alpha=1}^{\text{NUM}} \left(\mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} \right) \frac{\dot{W}_j^{(\alpha)}}{h}, \quad \mathbf{l}^w = \mathbf{F}^e \dot{\mathbf{F}}^p \dot{\mathbf{F}}^w \mathbf{F}^{w-1} \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{F}^{e-1}$$

$$\mathbf{s}^{*(\alpha)} = \mathbf{F}^e \mathbf{s}_0^{(\alpha)} \quad \mathbf{m}^{*(\alpha)} = \mathbf{m}_0^{(\alpha)} \mathbf{F}^{e-1}$$

- 塑性速度勾配

$$\mathbf{l}^p = \sum_{\alpha=1}^n \left(\mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad \mathbf{l}^p = \mathbf{F}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{F}^{e-1}$$

- 応力と結合力 $\mathbf{t}(w^{(\alpha)})$ のつり合い条件

$$\mathbf{g}^w(w^{(\alpha)}) = \boldsymbol{\sigma}(w^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}) - \mathbf{t}(w^{(\alpha)})$$

- 塑性流れ則

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} := \dot{a} \left| \frac{\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}}{\mathbf{g}^{(\alpha)}} \right|^{n_Y} \operatorname{sign} \left(\frac{\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}}{\mathbf{g}^{(\alpha)}} \right)$$

- 硬化則

$$\dot{g}^{(\alpha)} := \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}$$

$$h_{\alpha\alpha} := h_0 \operatorname{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right|, \quad h_{\alpha\beta} := q h_{\alpha\alpha} \quad (\alpha \neq \beta)$$

条件式の求解に用いた Newton-Raphson 法, および材料ヤコビアン¹⁾の導出過程は補遺 I.3 に記す.

3.4.2 多結晶体における疲労劣化後の予耐力評価

本節では, 第 2.5 節で提案した一般化結合力モデルを前項の結合力埋込型結晶塑性損傷構成則に適用して, 繰り返し载荷による疲労き裂進展解析を行う. その後, 疲労損傷が生じた多結晶体に単調荷重を作用させて, 疲労劣化後の予耐力の評価例を示す.

疲労劣化後の予耐力を評価するために, まず 8 結晶粒からなる多結晶体に繰り返し荷重を作用させた解析を実施する. 解析に用いるモデルは, 薄い 3 次元固体としてモデル化し, 板厚方向の対称性を考慮して図 3.29 に示すような有限要素法モデルとした. 境界条件は, 上端面を 0.2mm 引っ張って負荷した後に 0.04mm まで除荷し, 再度同じ位置まで負荷と除荷を繰り返すこととした. 材料モデルのパラメータは式 (2.22) および表 2.1 に与えられた値を用い, 結合力モデルのパラメータは表 3.3 に示されている値を用いた.

8 サイクルにおける全蓄積すべり, 損傷値, およびき裂開口変位に対する臨界値の比 w/w_c の分布を図 3.30 に示す. この図から結晶粒界近傍にすべりが蓄積され, 各結晶粒に損傷が生じていることがわかる. そして, き裂開口変位に対する臨界値の比が 1 に達した箇所からき裂が発生していることが確認できる. この解析結果を用いて, き裂が完全に発生する前の 4 サイクル目および発生する直前の 7 サイクル目の状態変数を保存したモデルに対して, 単調負荷を加えて, それぞれの静的強度を比較した.

この解析により得られた応力ひずみ関係, およびき裂開口変位に対する臨界値の比 w/w_c の分布をそれぞれ図 3.31 に示す. また, 繰り返し荷重を作用させずに, 単調負荷のみを作用させた処女材の結果も併記する. この図より, 4 サイクル繰り返し負荷した直後のみかけの応力は加工硬化により処女材の引張強度よりも大きくなっている. しかし, 微視的には材料に損傷が生じているために, 繰り返し载荷後に単調载荷を加え

ると処女材よりも速く軟化する。また、き裂が発生する直前の7サイクルでは見かけの応力は引張強度よりも小さくなっており、単調载荷時の軟化挙動も速い。また、図3.32からき裂の発生位置を比較すると、繰り返し载荷を予め加えたモデルと処女材で異なることが確認できる。これは、繰り返し载荷ごとに結晶の方位が変わることに起因して、結晶すべりが卓越する箇所も変化するためであると考えられる。

以上、本項では結合力埋込型損傷構成則を結晶塑性構成則に適用し、一般化結合力モデルを用いることで、荷重履歴に依存した材料の微視的な疲労損傷を捉えた上で、疲労劣化後の材料強度の低下を数値解析的に再現できることを確認した。

3.5 まとめ

本章では、結合力モデルを材料構成則に導入した結合力埋込型損傷構成則を提案し、き裂の進展を正規化したき裂開口変位の分布の時間発展として表現する数値解析を可能とした。その定式化に際して、物質点において主応力方向に仮定した微小き裂の開口変位をみかけのひずみに換算し、この開口変位を変数とする結合力と主応力とのつり合い条件式を導いた。提案した結合力埋込型損傷構成則は、つり合い条件式を設定するだけで任意の開口変位—結合力関係を埋め込むことが可能な汎用的なモデルとなる。また、弾性構成則に限らず、等方塑性構成則および結晶塑性構成則に適用できることを示した。さらに提案した構成則の有限要素法への具体的な実装方法として、つり合い方程式の求解を行ったうえで物質点におけるき裂の方向と主応力の方向を一致させる接線入れ子割線解法を提示し、数値解析例を通して、破壊問題の解析にはそのような解法が本質的に必要であることを例示した。

表-3.1 A533B 鋼の弾塑性材料パラメータ

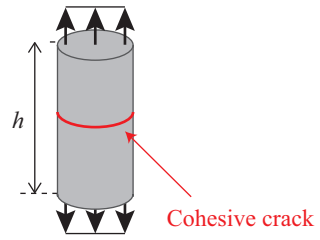
\bar{E}	$\bar{\nu}$	$\bar{\sigma}_{YS}$
206.0 GPa	0.3	599.0 MPa
\bar{H}	$\bar{\sigma}_{\infty}$	\bar{A}
0.0 GPa	190.0 MPa	40.0

表-3.2 A533B 鋼の一般化結合カモデルのパラメータ

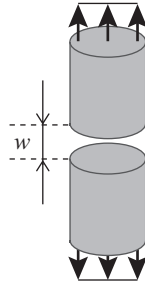
G_c	w_c	β	S	m	n	γ_D^p
4.0 MJ/m ²	1.6×10^{-1} mm	1.0	1.0×10^{-4}	0.3	2.0	0.0

表-3.3 結晶塑性モデルにおける一般化結合カモデルのパラメータ

G_c	w_c	β	S	m	n	γ_D^p
0.3005 MJ/m ²	2.2×10^{-2} mm	1.0	0.276	2.5	1.0	0.0



(a) Before deformation



(b) After deformation

図-3.1 一次元における埋込型結合力モデルの概念

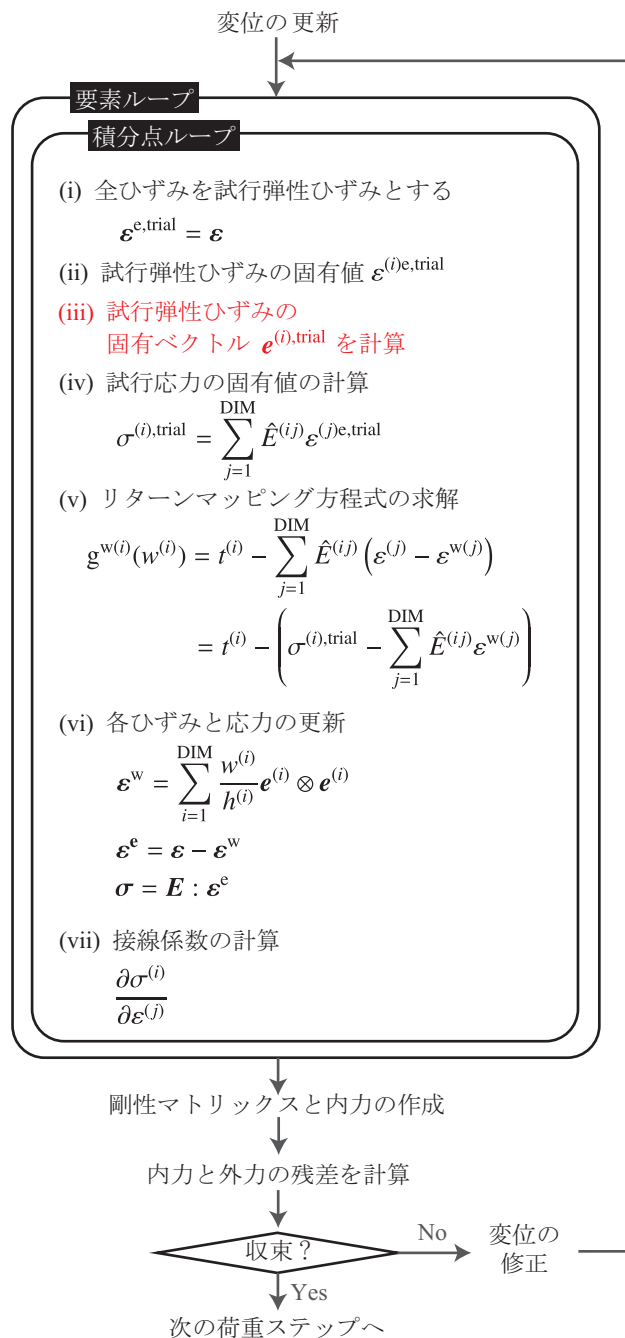


図-3.2 近似接線解法

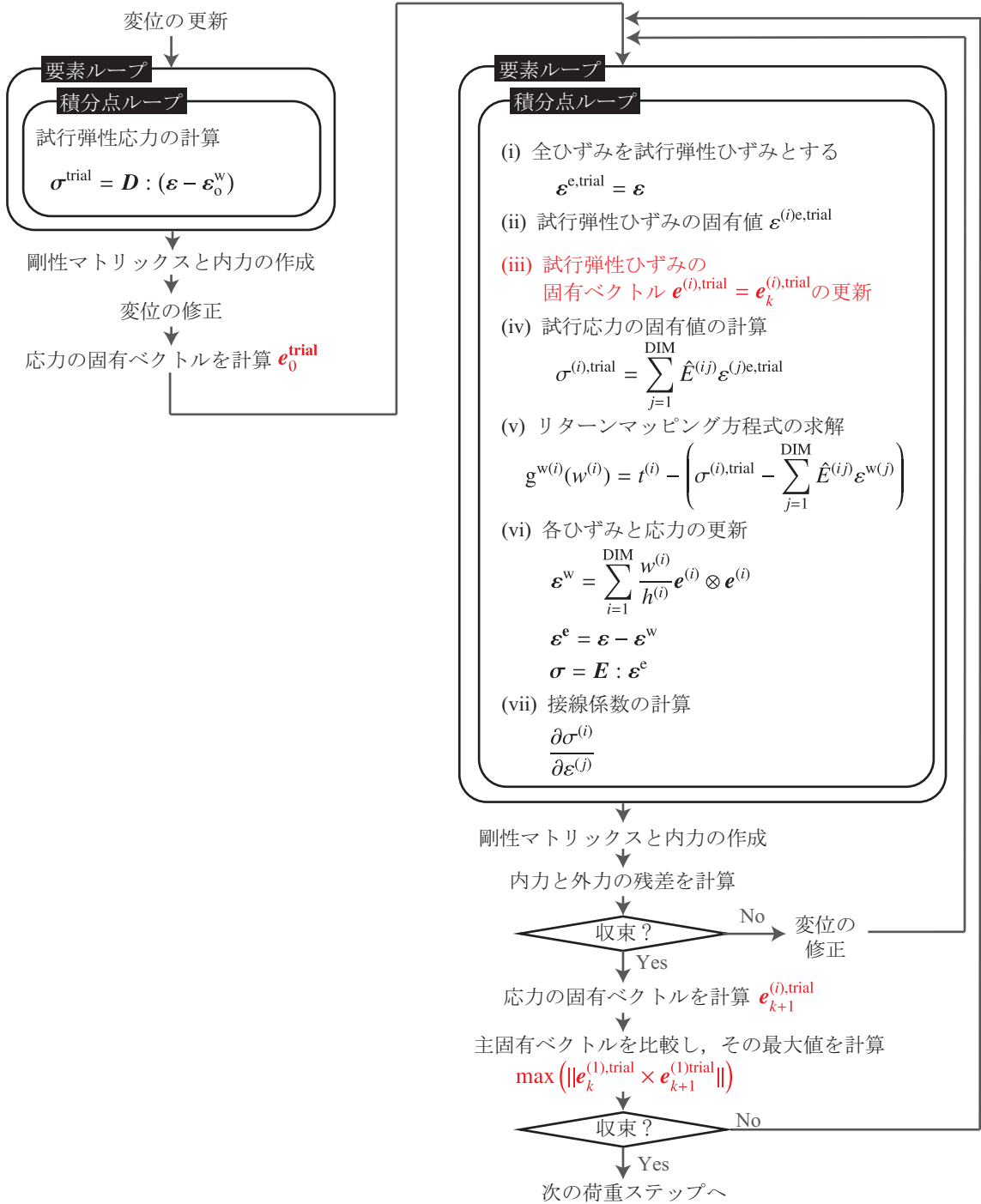


図-3.3 接線入れ子割線解法

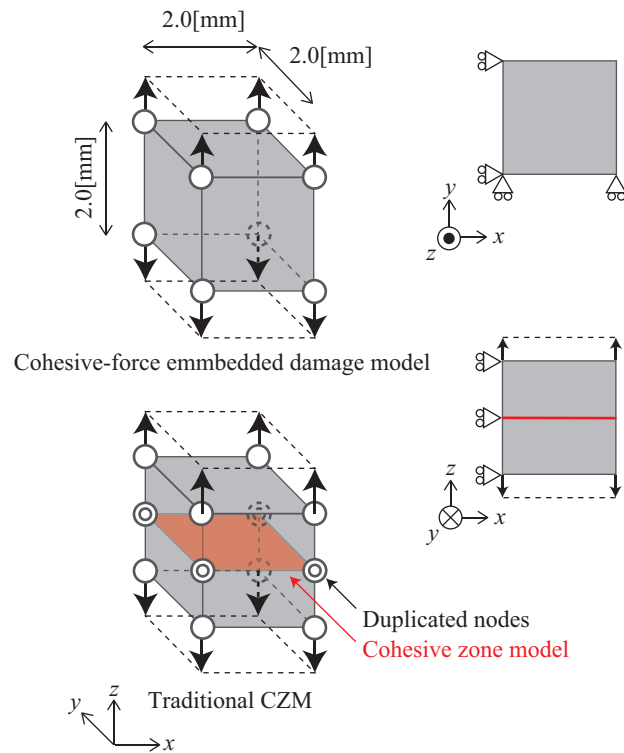


図- 3.4 埋込型結合力モデルと従来通りの結合力モデルの比較のための解析モデル

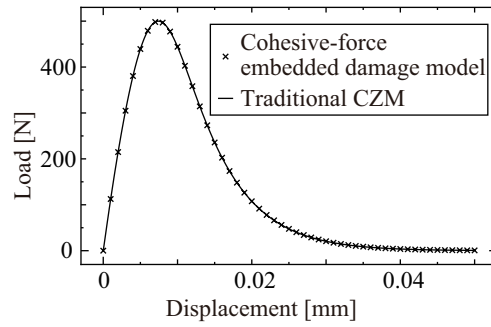


図- 3.5 埋込型結合力モデルと従来通りの結合力モデルの荷重変位曲線

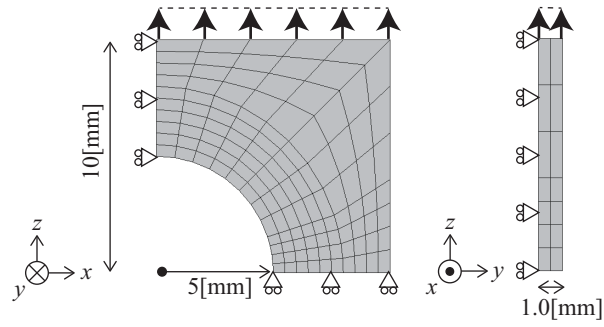


図-3.6 円孔を有する平板の解析条件

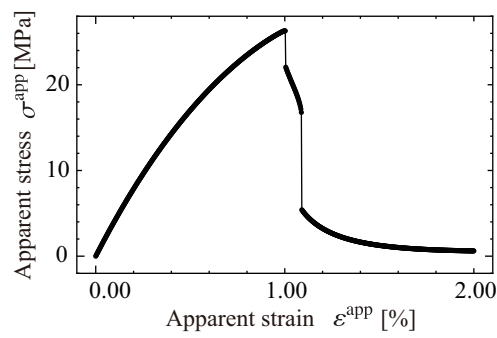


図-3.7 円孔板の公称応力ひずみ線図

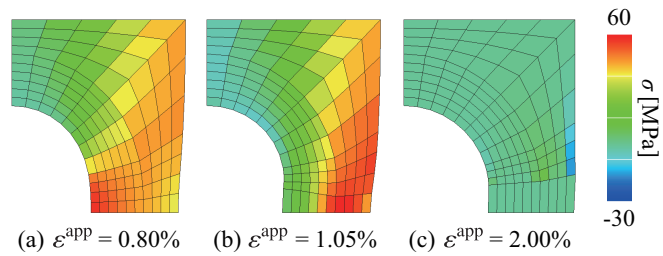


図-3.8 き裂進展に伴う円孔板の z 方向垂直応力分布

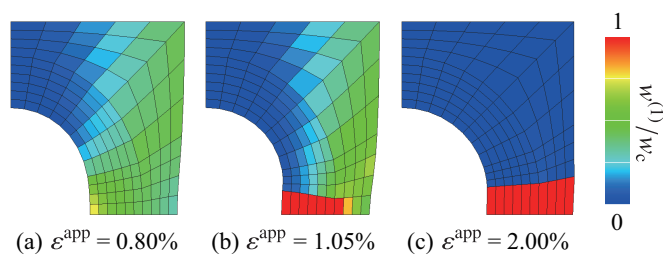


図-3.9 き裂進展に伴う円孔板のき裂開口変位

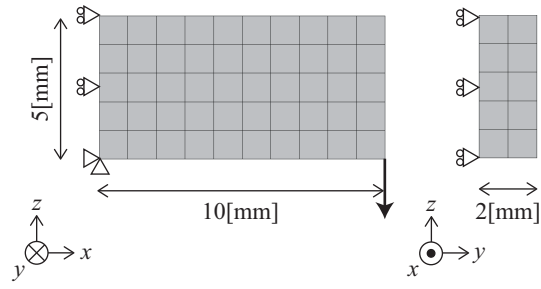


図-3.10 片持ち梁状構造物の解析条件

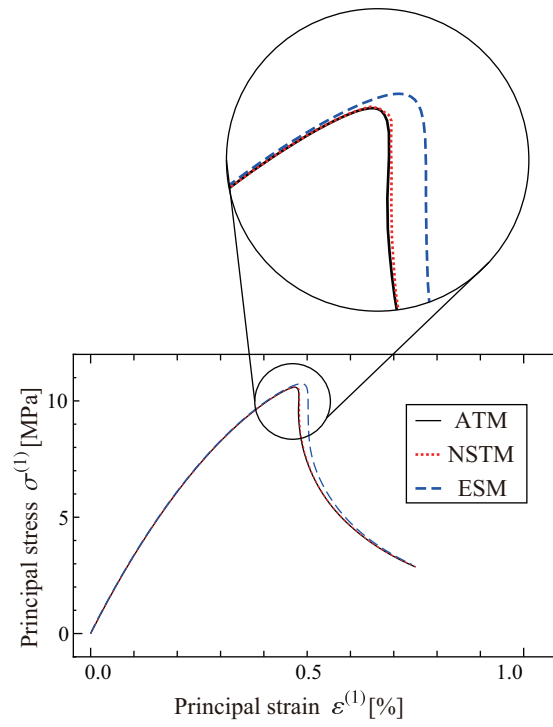


図-3.11 最大主応力-主ひずみ線図

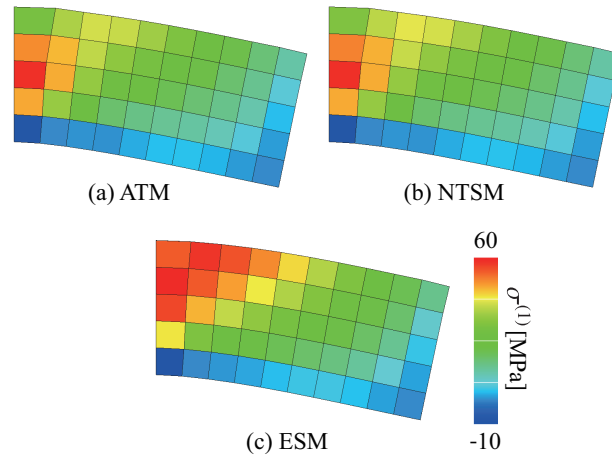


図-3.12 片持ち梁の最大主応力分布 ($\varepsilon^{(1)} = 0.5\%$)

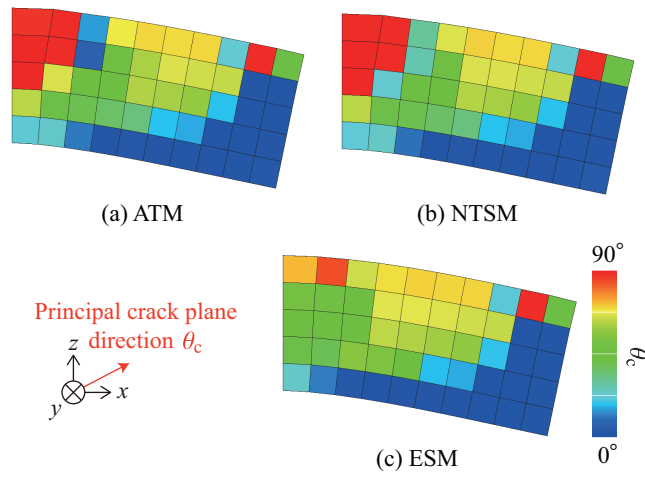


図-3.13 片持ち梁の主き裂方向 ($\varepsilon^{(1)} = 0.5\%$)

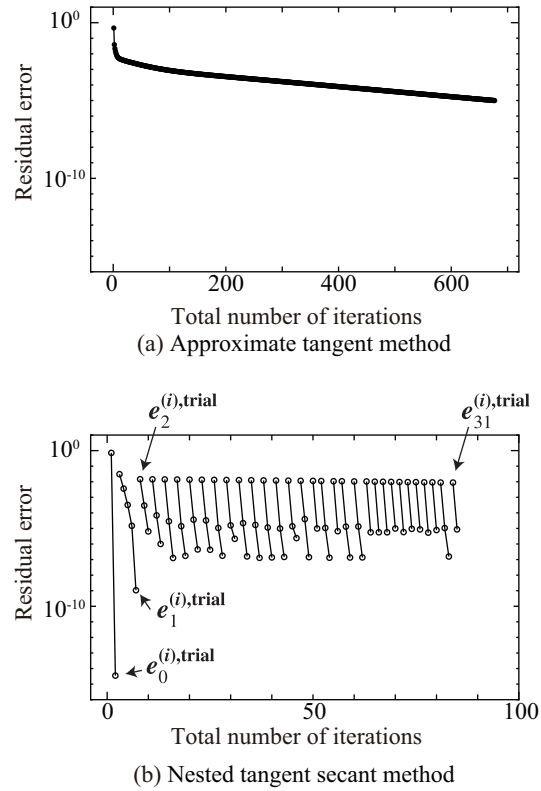


図-3.14 $\varepsilon^{(1)} = 0.5\%$ における近似接線解法と接線入れ子割線解法の収束性

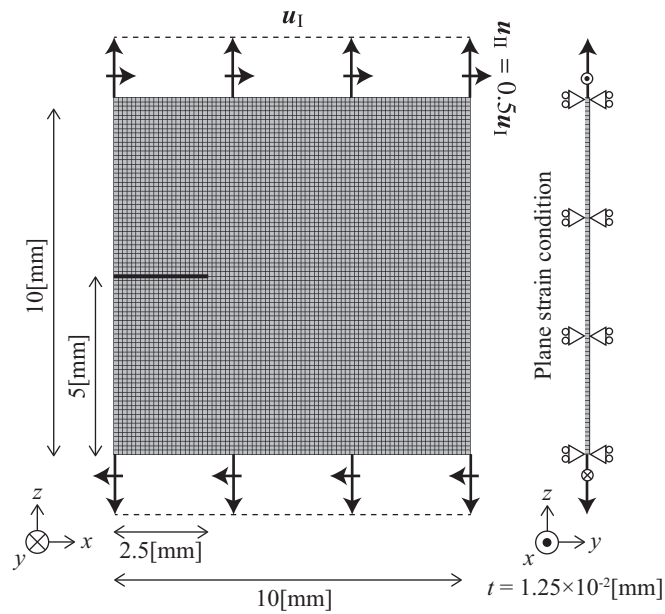


図-3.15 混合モード下におけるき裂を有する平板の解析条件

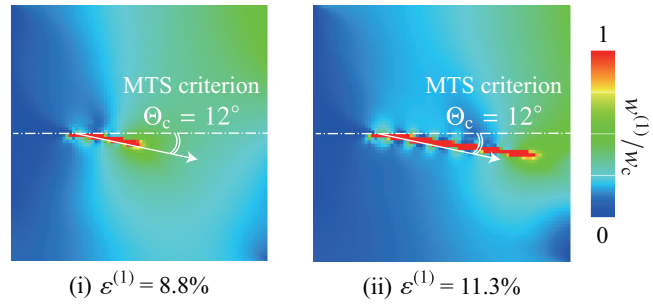


図-3.16 負荷・除荷過程を考慮した結合力モデルによる混合モード下におけるき裂進展挙動

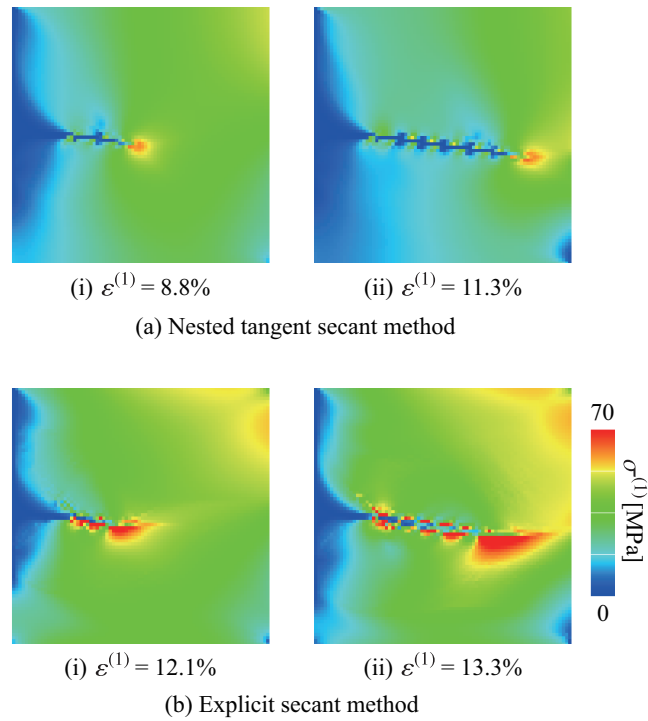


図-3.17 接線入れ子割線解法と陽的割線解法による混合モード下におけるき裂進展に伴う最大主応力分布

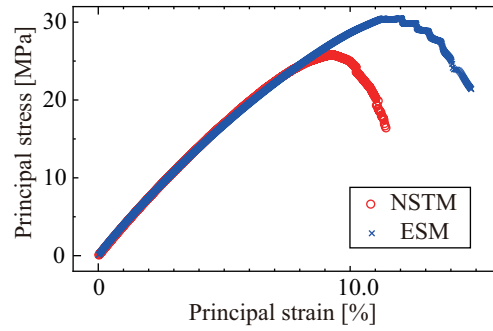


図-3.18 接線入れ子割線解法と陽的割線解法による最大主応力主ひずみ線図

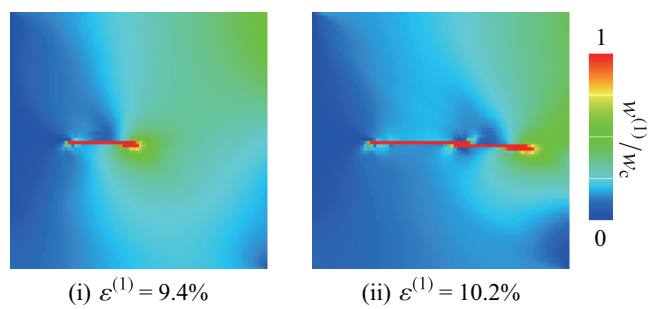


図-3.19 負荷・除荷過程を考慮していない結合力モデルによる混合モード下におけるき裂進展挙動

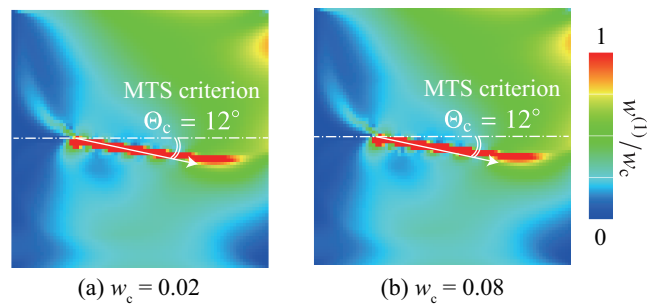


図-3.20 臨界有効き裂開口変位 w_c の違いによる混合モードにおけるき裂進展挙動違い

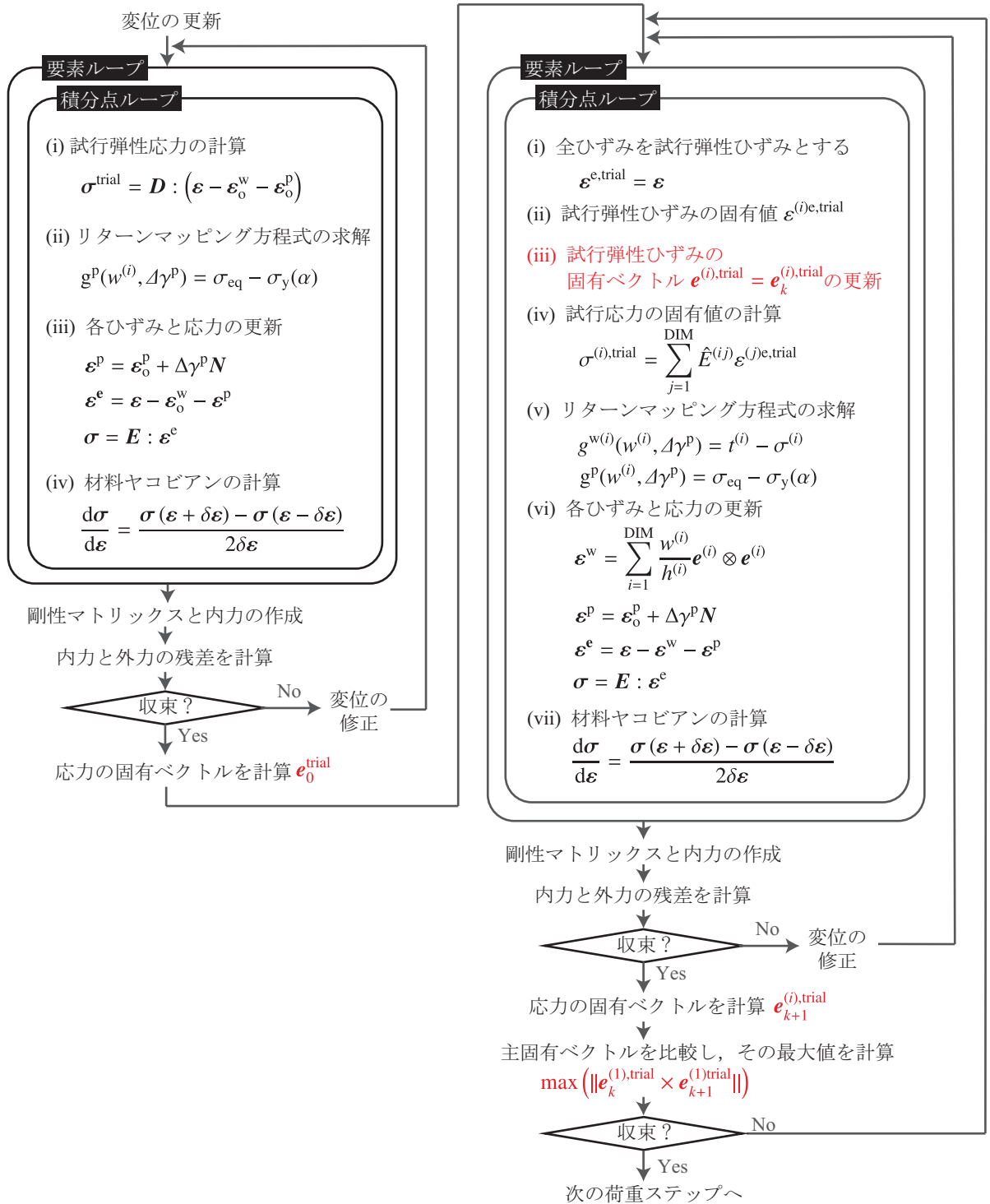


図- 3.21 弾塑性構成則における接線入れ子割線解法

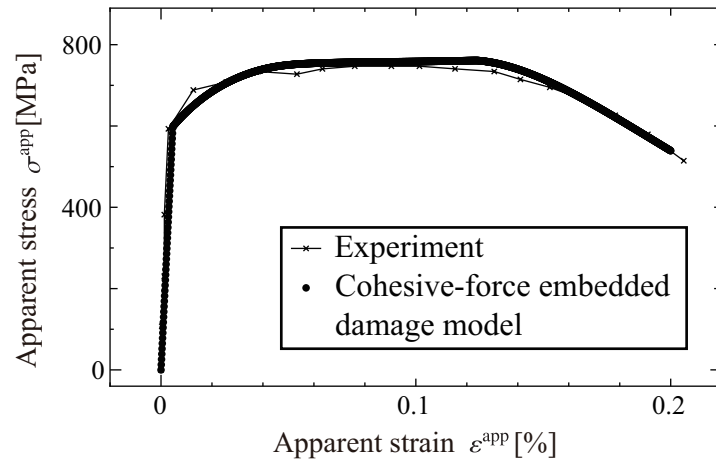


図- 3.22 丸棒試験によるパラメータ同定結果



図- 3.23 三点曲げ試験の表面部におけるき裂進展の様子²⁰⁾

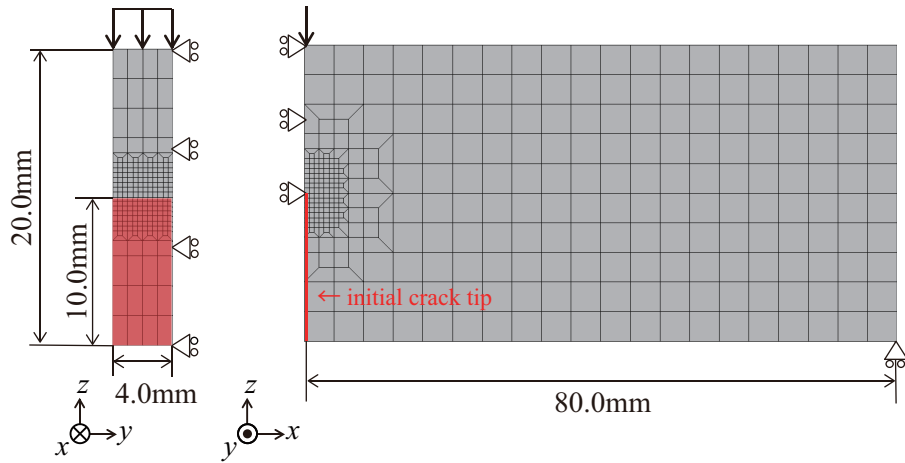


図-3.24 三点曲げ試験の解析モデル

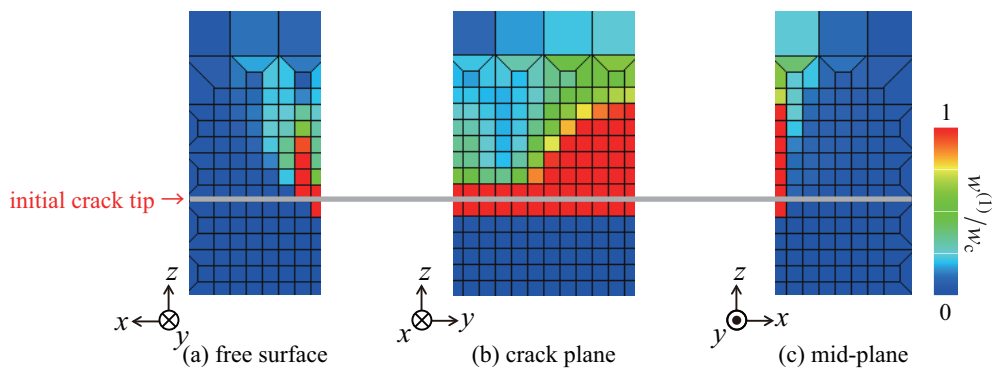


図-3.25 三点曲げ試験によるき裂進展挙動

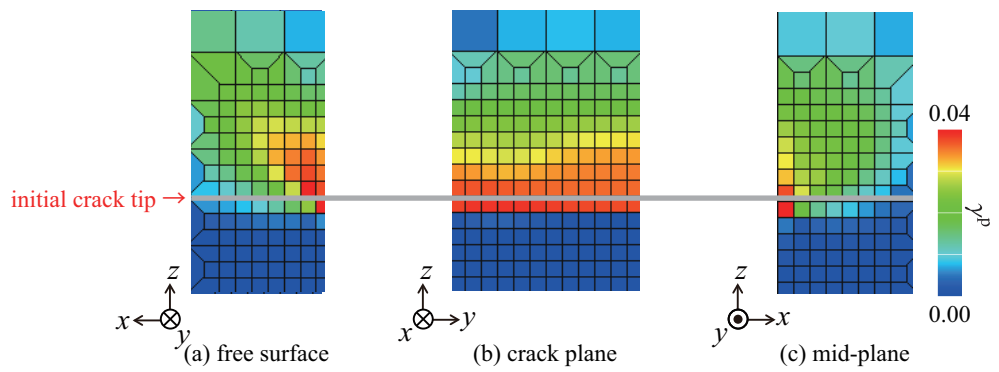


図-3.26 き裂進展直前の相当塑性ひずみの分布

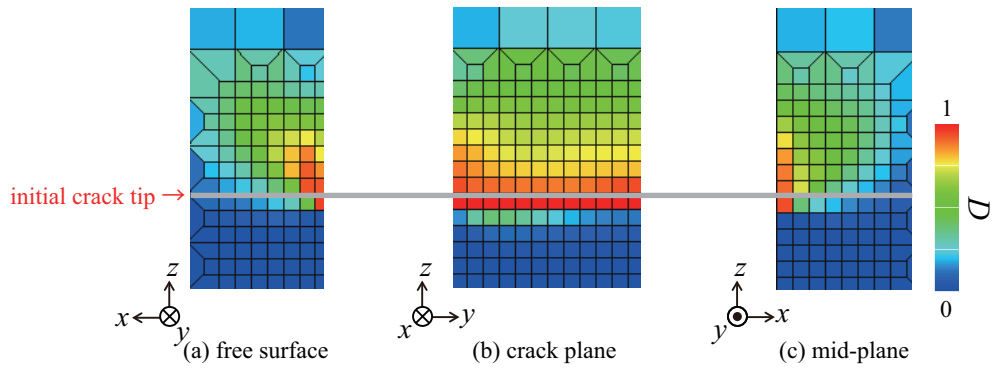


図- 3.27 き裂進展直前の損傷値の分布

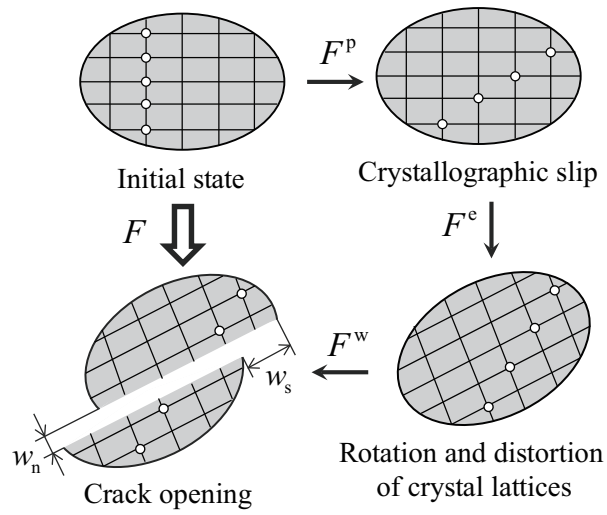


図- 3.28 各変形勾配における配置

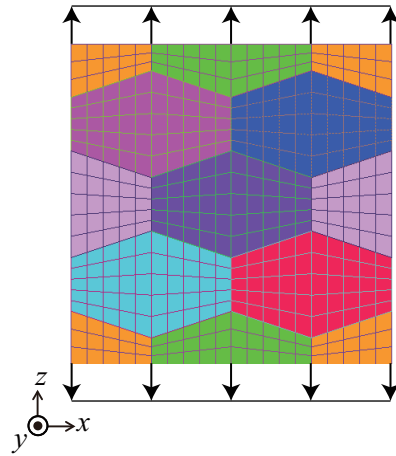


図-3.29 8結晶粒からなる多結晶体モデル

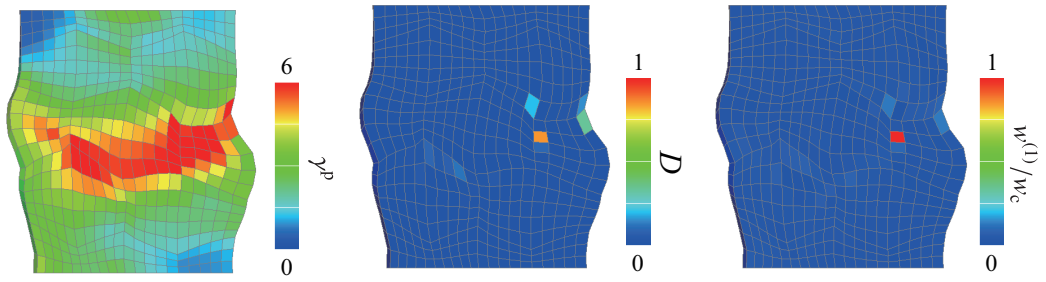


図-3.30 8サイクルにおける蓄積すべり量，損傷値およびき裂開口変位

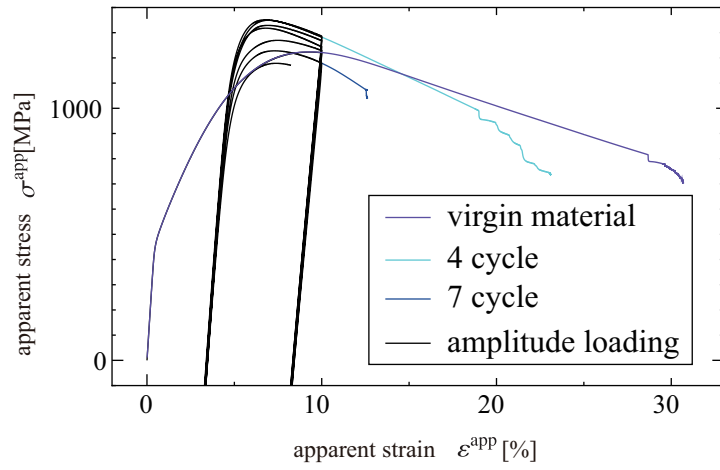


図- 3.31 疲労劣化に伴う材料強度の低下

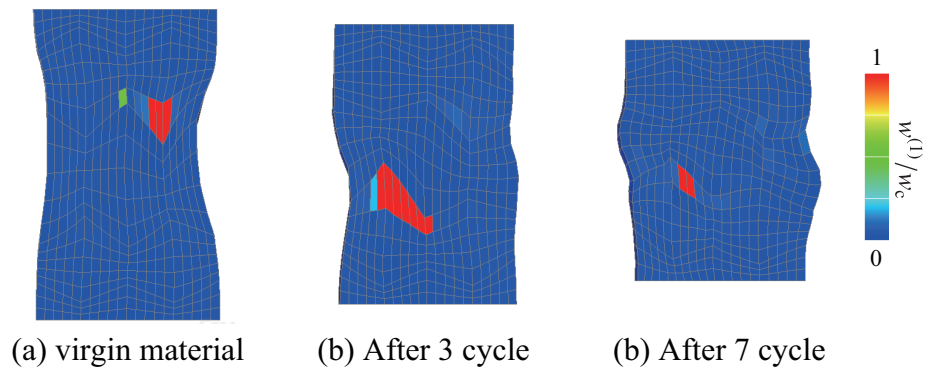


図- 3.32 疲労劣化の違いによるき裂の発生位置の違い

4. 結合力埋込型構成則と有限被覆法を用いた シームレスき裂進展解析手法の構築

4.1 はじめに

第1章で述べたように，材料が破壊する過程は材料剛性の低下となり，巨視的に材料が軟化し，最終的にき裂面が完全に形成される．このような破壊の過程をシームレスに接続して数値解析を行うために，本章ではまず有限被覆によるき裂進展解析手法を構築した上で，第2章で提案した一般化結合力モデルと第3章で提案した結合力埋込型損傷構成則を組み合わせ，有限被覆法に実装することで新たなシームレスき裂進展解析手法を提案する．具体的には，図4.1に示すように破壊の初期段階に第3章で提案した結合力埋込型損傷構成則を適用し，中間的な段階から最終的な段階までの解析には有限被覆法と従来通りの結合力モデルを併用した手法を適用する．また，結合力埋込型損傷構成則による主応力方向の変形は従来のように二重節点の間に導入した結合力モデルと完全に一致するため，結合力埋込型損傷構成則から有限被覆法に移行する際には主応力方向にき裂面を挿入し，新たに生成した重複被覆間に一般化結合力モデルを導入する．すなわち，シームレスき裂進展解析は表4.1に示す解析手法とモデルで構成されている．

なお，有限被覆法によるき裂進展解析では，き裂面によって2分された要素の多面体領域に対して弱形化されたつり合い方程式の領域積分を実行するために，多面体領

域を四面体で再分割することが必須となる。この多面体の再分割はき裂が進展するたびに行う必要があるため、再分割の工程を自動化する多面体自動再分割アルゴリズムを提案する。これに加えて、再分割によって新たに定義される積分点に状態変数をマッピングするために、エレメントフリー Galerkin 法などで用いられている移動最小二乗法に基づく方法を実装する。このように有限被覆法を用いたき裂進展解析手法には以下の2つの手法が必要となる。

- 多面体自動再分割アルゴリズム
- 移動最小二乗法による状態変数のマッピング

以下の第4.2節では、有限被覆法による自動き裂進展解析手法を提案する。まず、き裂進展解析の全体の流れを示した後に、新たに開発した多面体自動再分割アルゴリズムと移動最小二乗法を用いた状態変数のマッピング方法を説明する。提案した多面体自動再分割アルゴリズムを四面体要素および六面体要素に適用して、要素の種類（位相）に関係なく適切に分割できることを例証する。次に、解析例として SEN 試験片の各破壊モードの負荷条件下における弾性体中のき裂進展解析、およびモード I の負荷条件下における弾塑性体中のき裂進展解析をそれぞれ実施し、各アルゴリズムの性能を検証するとともに、構築した有限被覆法によるき裂進展解析手法の妥当性を例示する。第4.3節では、第3章で提案した結合力埋込型損傷構成則、本章で構築した有限被覆法によるき裂進展解析手法を実装して剛性低下からき裂が完全に形成される段階へシームレスに移行する方法を述べる。数値解析例として、両側切欠き試験および3点曲げ試験の解析から本提案手法の妥当性と有用性を示す。なお、有限被覆法については文献¹³⁶⁾で詳しく述べられているので、ここでは詳細な説明は割愛する。

4.2 有限被覆法によるき裂進展解析手法の構築

以下では、まず一般化有限要素法でき裂面を陽的に表現しながらき裂進展解析を行う際に採用されている従来の要素分割法を説明し、その問題点を指摘する。そして、本研究で提案するき裂進展解析手法を概説した後、多面体自動再分割アルゴリズムと移動最小二乗法による状態変数のマッピング法の順に記述する。数値解析例を通して開発した手法の性能検証を行う。

4.2.1 一般化有限要素法における従来手法

第1章で述べたように、X-FEM⁶⁹⁾、G-FEM、Numerical Manifold Method^{99),100)} や有限被覆法¹³⁶⁾などの一般化有限要素法を用いて、完全にき裂が生成された後はき裂面形状を陽的に表現した解析を行う必要がある。しかし、これらの方法は有限要素法の一般化形に過ぎず、支配方程式を弱形化したことによる領域積分を行わなくてはならない。そのため、き裂進展に伴い要素内の領域が2つに分割された場合には、それぞれの領域ごとの積分が必要である¹³⁹⁾。また、積分領域の再定義に伴って積分点も移動するため、分割前の積分点から分割後の積分点に状態変数をマッピングしなくてはならない。

一般化有限要素法を用いた既往研究の多くは、レベルセット法と Marching Cubes 法を併用するなどして、不連続面で分割された要素領域の再分割を行っている。例えば、具体的な手順は以下の通りである。

- ① まずレベルセット関数の値がゼロの等値面となるように、各節点から不連続面までの最短距離を計算し、符号付き距離関数を作成する。
- ② そのレベルセット関数を元にして、要素の各辺上における不連続面との交点の座標を計算する。

③ この要素に対して Marching Cubes 法を適用し，四面体に再分割する．

ここで，Marching Cubes 法とは，予め要素が分割されるパターンを全て用意しておく，不連続面で分割された要素に該当するパターンを検索し，そのパターンに従って要素を再分割する方法である．しかし，要素が不連続面で分割されるパターンは要素の形状によって異なるため，解析に用いる要素が四面体か，六面体かでそれぞれプログラムを用意する必要がある．また，分割するパターンを限定していることに起因して，Marching Cubes 法には次の 2 つの欠点があることが指摘されている．1 つは，薄い形状や細い形状の再現性が要素サイズによって大きく変化する点，もう 1 つは，滑らかな表面は適節に再現される反面，鋭角部まで滑らかにしてしまう点である．このような欠点を補う方法として，物体の表面に応じて節点の位置を変化させる Deformed Marching Cubes 法¹³⁷⁾も提案されているが，有限要素法ではと組み合わせることを考えた場合，節点の移動によって要素にゆがみが生じ，精度が低下する恐れがあるため，好ましい手法とはいえない．

4.2.2 提案手法の概要

第 4.1 節で述べたように提案する有限被覆法を用いたき裂進展解析では，

- 多面体自動再分割アルゴリズム
- 移動最小二乗法による状態変数のマッピング

を併用する．図 4.2 にき裂進展に伴ってこれらのアルゴリズムが適用される過程を示す．この図のように提案手法ではレベルセット法などを用いることなく，き裂面を定義する表面パッチによってき裂面の幾何形状は表される．本研究ではこの表面パッチをき裂面パッチと呼ぶことにする．き裂の進展によって新たな表面が形成されると，図 4.2 のように新たなパッチが追加される．そして，このき裂面パッチを用いてき裂面で分割される要素を検索し，提案する多面体自動再分割アルゴリズムを適用することで，

該当する要素のき裂で2分された領域を四面体に再分割する。また、もとの要素の積分点から四面体の積分点に状態変数をマッピングする必要がある場合には、後述する移動最小二乗法に基づく方法を適用する。これらの手法を用いることで、き裂進展を伴う構造部に対して有限被覆法による増分解析が可能となる。

4.2.3 多面体自動再分割アルゴリズム

本研究で提案する多面体自動再分割アルゴリズムについて六面体要素の場合を例にとって説明する。

予め用意した図4.3のような三角形パッチからなるき裂面の幾何情報をもとに以下の手順で再分割を行う。まず、き裂面と要素の各辺を探索し、き裂面とそれらの辺との交点を求める。分割された辺の情報を元に六面体要素がき裂面によって分割されることのできる2つの多面体の幾何情報を作成し、これらの多面体を複数の四面体に分割する。以下では六面体を用いて説明するが、第4.2.5項で示すように本アルゴリズムは六面体に限らず、任意の多面体に対して有効である。

き裂面で分割される辺の探索と交点座標の計算

六面体要素を分割するにあたり、まず各辺とき裂面を構成する三角形パッチとの交点を以下で説明する線形代数計算から求める。

まず、図4.3に示すように六面体の1つの頂点をO、その頂点と同じ辺を共有する頂点をGとし、その辺上のベクトルを \mathbf{g} とする。また、三角形パッチの各頂点をA, B, Cとし、頂点Oから三角形の各頂点へのベクトルをそれぞれ $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ とする。さらに、三角形ABCとベクトル \mathbf{g} の交点をG'とする。このベクトル \mathbf{g} について $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ を基底とすると、

$$\mathbf{g} = \alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{b} + \gamma\mathbf{c} \quad (4.1)$$

で表される。ただし,

$$\alpha = \frac{\det \begin{bmatrix} g_x & b_x & c_x \\ g_y & b_y & c_y \\ g_z & b_z & c_z \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{bmatrix}}, \quad \beta = \frac{\det \begin{bmatrix} g_x & c_x & a_x \\ g_y & c_y & a_y \\ g_z & c_z & a_z \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{bmatrix}}, \quad \gamma = \frac{\det \begin{bmatrix} g_x & a_x & b_x \\ g_y & a_y & b_y \\ g_z & a_z & b_z \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{bmatrix}} \quad (4.2)$$

と定義した。式 (4.1) において $\alpha + \beta + \gamma$ を共通する因数部として表すと,

$$\mathbf{g} = (\alpha + \beta + \gamma)(\alpha' \mathbf{a} + \beta' \mathbf{b} + \gamma' \mathbf{c}) = (\alpha + \beta + \gamma) \mathbf{g}' \quad (4.3)$$

となる。ここで, \mathbf{g}' は次のようにおいた。

$$\mathbf{g}' = \alpha' \mathbf{a} + \beta' \mathbf{b} + \gamma' \mathbf{c} \quad (4.4)$$

また, この各係数は,

$$\alpha' = \frac{\alpha}{\alpha + \beta + \gamma}, \quad \beta' = \frac{\beta}{\alpha + \beta + \gamma}, \quad \gamma' = \frac{\gamma}{\alpha + \beta + \gamma} \quad (4.5)$$

である。これにより, 式 (4.4) の各係数 α', β', γ' の和は 1 となるので, \mathbf{g}' は図 4.3 に示すように基底ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ の終点を結んで作られる面上のベクトルである。これにより, このベクトルが三角形 ABC 内にある条件は,

$$0 < \alpha' < 1 \quad \wedge \quad 0 < \beta' < 1 \quad \wedge \quad 0 < \gamma' < 1 \quad (4.6)$$

となる。さらに, \mathbf{g}' が辺 OG 上にある条件は, 式 (4.3) より,

$$0 < \alpha + \beta + \gamma < 1 \quad (4.7)$$

となる。

以上の簡単な線形代数計算を要素の辺ごとに計算し、式(4.6)および(4.7)の条件を満たしていればき裂面によって分割される辺と判定することができる。さらに、式(4.4)からその交点 G' の座標も計算される。このため、第4.1章で記したレベルセット法に基づく方法のように①や②の段階を踏むことなく、不連続面に分割される判定とその交点座標を同時に求めることができる。

実装に際しては、このようにして算出した結果をもとにき裂面上に新たに生成される形状定義のためポイントの座標と分割された辺を保存しておく。また、図4.3のように分割された六面体の各節点に三角形パッチの番号を符号付きでラベリングすることで、各節点が分割された後に上下どちらに属するか区別できるようにしておく。以下ではこの符号付きの三角形パッチの番号をパッチラベルと呼ぶことにする。この処理はレベルセット関数における符号付き距離関数と類似のものであるが、本手法において保存すべき値は符号付きのパッチ番号なので、その整数値のみを記憶すればよい。

多面体の幾何情報の作成と四面体分割

前述のように、分割されることが判定された六面体はき裂面を挟んで2つの多面体となる。最終的にこの多面体を四面体に分割するには、多面体を構成している辺や面などの幾何情報が必要である。多面体を構成する面は、六面体のもとの面が分割されることによってできる面とき裂面上の新たな面に別けられ、それぞれ以下の方法によってその幾何情報が作成される。説明のために、以下では節点1および2によって構成される辺は辺{1,2}とし、節点1,2,3および4によって構成される面は面[1,2,3,4]で表すことにする。

まず、六面体のもとの面が分割されることで形成される面は、その面を構成する各節点のパッチラベルの符号から上下どちらに属するかが判定される。そして、各節点が該当する側に保存され、各面を構成する節点の情報となる。ただし、各辺の両端で符号が異なる場合には、前のステップで求めたき裂面上の新たなポイントを追加する。

例えば、図 4.4 のような節点と辺で構成されている面の場合には、まず辺 {1,2} の節点 1, 2 のパッチラベルの符号からどちらも下側の多面体に属する節点であることがわかる。次に、辺 {2,3} の節点 2, 3 からこの辺上でパッチラベルの符号が入れ替わっていることから、この辺とき裂面が交わっていることがわかり、上側の多面体に節点 9, 3 および下側に節点 9 が属することになる。同様に辺 {3,4}, {4,1} と繰り返すことで上下の多面体の面がそれぞれ面 [9,3,4,12], [1,2,9,12] のように作成される。

次に、き裂面上となる面の情報は次の方法で作成する。まず、任意の面における辺の中からき裂面で分割される箇所を検索する。次に、該当した辺を共有している面を割り出し、その面上においてき裂面で分割される箇所を探索する。これを繰り返していき、最初に発見した辺に辿り着くことができれば、き裂面上の新たな面の構成情報を作成できる。例えば、図 4.5 のように面 [1,2,3,4] について検索し、まず辺 {2,3} と {4,1} を見つけたとする。次に、辺 {1,2} を共有している面 [2,6,7,8] の各辺の中からき裂面で分割される辺を検索し、辺 {6,7} を見つけて次の検索対象を面 [6,7,8,5] とする。これを辺 {1,2} が再度見つかるまで繰り返すことで、き裂面上の新たな面 [12,9,10,11] が上下の多面体にそれぞれ面情報として追加される。

これら 2 つの方法を用いることで、多面体における全ての面の構成情報が作成され、それをもとに各面心および重心を計算し、図 4.6 のように四面体に再分割することができる。

以上のように、提案する多面体自動再分割アルゴリズムはき裂面で分割された六面体をその面ごとに、再度多面体の面として構成するため、特に Marching cubes 法のような場合分けを必要としない。そのため、本アルゴリズムは任意の多面体に対して用いることのできるため、き裂面によって一旦分割された要素が再度新たなき裂面で分割された場合には、一旦分割した多面体に対してこのアルゴリズムを再度適用すればよい。

4.2.4 移動最小二乗法による状態変数のマッピング

第3章で提案した結合力埋込型損傷構成則や弾塑性モデルのように内部変数をもつ構成則の場合、き裂進展に伴って要素が再分割されると、その要素の積分点における内部変数を分割前の積分点の値をもとにマッピングする必要がある。そこで本項では、移動最小二乗法¹⁴⁰⁾を用いて状態変数をマッピングする方法を提案する。

移動最小二乗法で形状関数を作成するにあたって、まず次の線形基底関数を用いる。

$$\mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = \{1, x, y, z\} \quad (4.8)$$

このとき、評価点における状態変数の関数は、

$$u(\mathbf{x}) = \sum_i^M p_i(\mathbf{x})a_i(\mathbf{x}) \quad (4.9)$$

のように近似される。ここで、 M は基底関数の項数であり、三次元問題における線形基底の場合には $M = 4$ となる。また、 $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ は未定係数であり、次のように定義される評価関数を最小化することで決定される。

$$J = \sum_{I=1}^N m(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_I\|) [\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_I)\mathbf{a}(\mathbf{x}) - u_I]^2 \quad (4.10)$$

ここで、 N は評価点近傍の参照する積分点の数であり、 m は重み関数である。この重み関数¹³⁸⁾には、参照点から評価点までの距離 $d = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_I\|$ と影響半径 d_c を用いた次のものを採用する。

$$m(d) = 1.0 - 6.0\left(\frac{d}{d_c}\right)^2 + 8.0\left(\frac{d}{d_c}\right)^3 - 3.0\left(\frac{d}{d_c}\right)^4 \quad (4.11)$$

ただし、本研究で移動最小二乗法を適用する箇所は応力が急激に上昇するき裂先端近傍なので、図4.2のように影響半径 d_c を大きくし過ぎると局所的な値の変化が再現されない可能性がある。そこで、 d_c を定めるのではなく、参照する積分点を最近傍の8点とする。すなわち、 $N = 8$ として d_c はそのうちの最も遠い点までの距離とする。

未定係数 $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ についての式 (4.10) の J の停留条件より，移動最小二乗法による近似関数は，

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^N \phi_I(\mathbf{x}) u_I \quad (4.12)$$

のように表される．ここで，

$$\begin{aligned} \phi_I(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^M p_i(\mathbf{x}) [\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{B}(\mathbf{x})]_{iI} \\ \mathbf{A}(\mathbf{x}) &= \sum_I^N m(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_I\|) \mathbf{p}(\mathbf{x}_I) \mathbf{p}^T(\mathbf{x}_I) \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}) &= [m(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1\|) \mathbf{p}(\mathbf{x}_1), m(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\|) \mathbf{p}(\mathbf{x}_2), \dots, m(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_N\|) \mathbf{p}(\mathbf{x}_N)] \end{aligned} \quad (4.13)$$

と定義した．

4.2.5 各アルゴリズムの検証

四面体および六面体要素による多面体自動再分割アルゴリズムの検証

本章で提案した多面体自動再分割アルゴリズムを四面体要素と六面体要素に適用して，その性能を検証する．検証に際して，六面体要素の分割パターンは，**Marching cubes** 法によれば回転と反転を考慮することで 15 通りである．しかし，1 要素内に複数のき裂面パッチが存在しないと仮定したうえで分割された断面形状ごとに分類すると，三角形，四角形，五角形，六角形の計 4 通りとなる．一方，四面体要素の場合には断面形状が三角形と四角形の 2 通りしかない．これらの分割パターンについて前項で述べた多面体自動再分割アルゴリズムを適用すると，図 4.7 に示すようにそれぞれ適切に四面体へ分割することができる．この図から，本研究で提案する分割手法を用いることで **Marching cubes** 法のように分割パターンを場合分けすることなく，四面体や六面体などの多面体を四面体に再分割可能である．

また，複数のパッチが存在した場合には，それぞれのパッチに対して順番に本手法を適用することで，一度分割されてできた多面体を再分割することで対応できる．こ

のような方法を用いることで、Marching cubes法では取り扱えない多面体の1辺が2か所以上分割される場合に対応でき、細い形状や薄い形状などに対応可能であると考えられる。

SEN試験片による各破壊モード下における弾性き裂進展解析

本項ではSEN試験片に3種類のき裂の変形モードを加え、それぞれについての三次元的なき裂進展挙動の再現性を検証する。ここで、モードIではき裂が開口し、モードIIでは面内せん断、およびモードIIIでは面外せん断である。各モードのき裂進展解析には、図4.8に示すような3次元固体の六面体要素からなる有限要素モデルを用いる。ただし、モードIおよびIIでは板厚方向の対称性を考慮して、図4.8のモデルを半分にした1/2モデルとした。それぞれの境界条件は、モードIでは $u_I = 0.3\text{mm}$ 、モードIIでは $u_{II} = 0.3 \times 10^{-4}\text{mm}$ をそれぞれ増分的に与えた。また、モードIIIでは捻じれによってき裂が閉口するため、 $u_{III} = 5.0 \times 10^{-4}\text{mm}$ に加えて、 $u_I = 2.5 \times 10^{-4}\text{mm}$ とした。材料パラメータとして、Young率を206MPa、Poisson比を0.3、引張強さを200MPaとした。なお、き裂先端の要素が引張強さを超えた場合にはき裂が進展したものとして、第4.2.2項に示した流れに従って新たなき裂面を作成する。

解析の結果、最終的に得られたき裂面パッチを図4.9に示す。この図から、モードIではき裂は初期き裂と同じ方向にまっすぐ進展し、モードIIでは下向き斜め28°方向に進展した。また、モードIIIではき裂は捻じれながら、三次元的に複雑な進展していることがわかる。次に、最終段階における最大主応力の分布とき裂面で分割された要素が複数の四面体で再分割されている様子を図4.10に示す。この図より、応力分布から、すべてのき裂の変形モードでき裂先端に応力が集中し、開口していることが確認できる。これは、提案した多面体自動再分割アルゴリズムによって不連続面で分割された要素が2つの領域に別けたうえで、有限被覆法を適用したことで要素内を進展するき裂の再現が可能となったものである。

以上、三次元的に複雑な挙動を示すき裂進展も提案した多面体自動再分割アルゴリズムと有限被覆法によって再現できることを例示した。

移動最小二乗法により状態変数のマッピングを必要とする弾塑性き裂進展解析

図 4.8 におけるモード I の SEN 試験片について材料構成則に等方塑性モデルと、図 4.11 に示す三角形型の結合カモデルを用いてき裂進展解析を行う。等方塑性モデルおよび結合カモデルのパラメータはそれぞれ表 4.2 および 4.3 とした。弾塑性き裂進展解析では、き裂進展に伴う要素の 2 分割および四面体への再分割によって積分点の位置が変化するために、新たな積分点における塑性に関する状態変数を分割前の解析結果からマッピングする必要がある。ここでは、塑性に関する内部変数を第 4.2.4 項に示した移動最小二乗法に基づく方法でマッピングする。

まず、マッピングする前の要素平均した相当塑性ひずみの分布とマッピング後の結果を図 4.12 に示す。この図から、両者の分布にほとんど差がないことがわかる。また、定量的にはマッピング前後で要素平均した塑性乗数 γ^p の値が両者ともに 8.0×10^{-6} であり、差がないことが確認できた。次に、き裂進展解析の結果得られた相当塑性ひずみと最大主応力の分布を図 4.13 に示す。この図から、き裂面上に塑性痕が生じていることが確認でき、き裂進展に伴って発生した塑性に関する状態変数が適切にマッピングされていることがわかる。

以上、提案した多面体自動再分割アルゴリズムを実装した有限被覆法によれば、塑性に関する状態変数のマッピングを行ったことで、弾塑性変形を伴うき裂進展解析が可能であることを例示した。

4.3 シームレスき裂進展解析手法の開発

本節では、一般化結合カモデルを埋め込んだ損傷構成則と前節で提案した有限被覆法によるき裂進展解析手法を組み合わせることで、材料剛性の低下からき裂が完全に

形成される段階にシームレスに移行できる新しいき裂進展解析手法を提案する。

4.3.1 結合力埋込型損傷構成則から有限被覆法への移行

第3章で示したように、結合埋込型損傷モデルと通常の結合力モデルは最大主応力方向の変形が完全に一致するので、有限被覆法を用いてその方向にき裂面を挿入すれば、結合埋込型損傷モデルから有限被覆法による結合力モデルへと矛盾なく移行できる。そのため、移行するタイミングによって結果が左右されることはない。しかし、物理的な側面を考慮すると、第2.2節で述べたように結合力モデルにおけるき裂先端は結合力が最大となる有効き裂開口変位が臨界値に達した時点である。このことから、き裂形状が陽的に表れるのはそれ以降と考えればよい。そこで、提案するき裂進展解析手法では、有効き裂開口変位が臨界値に達するまでは結合力埋込型損傷構成則で表現し、臨界値に達した後は有限被覆法と通常の結合力モデルで陽的にき裂形状を表現する。つまり、図4.14(a)に示すような第2.2節の結合力モデルであれば、結合力埋込型損傷構成則が図4.14(b)のように有効き裂開口変位が臨界値に達するまでの材料剛性の低下を表し、有限被覆法による結合力モデルは図4.14(c)のように有効き裂開口変位が臨界値に達した後のき裂の開口挙動を表現する。これにより、材料剛性の低下を示す破壊の初期段階からき裂面形成に至る過程をシームレスに移行できるき裂進展解析手法となる。なお、これらの図を比較するとわかる通り、この方法では結合力埋込型損傷構成則から有限被覆法への移行でエネルギーが散逸することはなく、移行の前後におけるエネルギー状態は等価である。

また、結合力埋込型損傷構成則のみで結合力モデルを表現すると、図4.14(a)のように材料の軟化挙動によって要素剛性の正定値性が失われる。さらに、損傷領域が拡大すると軟化挙動を示す要素が増え、全体剛性において領域的に正定値性が失われることになる。これに対して本手法の場合では、図4.14(c)のように剛性が負になる箇所は有限被覆法によって導入されたき裂面が受け持つことになる。このため、軟化挙動は

き裂面の箇所のみ限定されるので、全体剛性が領域的に正定値性を失うことが低減され、前述の方法よりもつり合い方程式を安定的に解くことが可能である。

4.3.2 シームレスき裂進展解析の適用例

両端切欠き試験片におけるき裂進展解例

まず、両端切欠き試験片の解析を通して結合力埋込型損傷構成則を用いた方法から有限被覆法と結合力モデルを併用した方法に移行する前後で、矛盾なく連続的に行われることを例証する。

解析対象は、薄い3次元固体領域とし、対称性を考慮して図4.15に示すような2分の1の有限要素モデルとした。このモデルの上下端面のすべての節点に強制変位 2.0mm を引張方向に負荷した。また、材料パラメータは Young 率を 206MPa, Poisson 比を 0.3 とし、結合力モデルのパラメータは $G_c = 0.0054\text{MJ/m}^2$, $w_c = 0.01\text{mm}$ とした。

解析結果として、見かけの応力（上端部の全反力をその面積で割った量）と見かけひずみ（与えた強制変位を平板の縦寸法で除した値）の関係を図4.16に示す。この図からき裂が生成され、そのき裂面上に結合力モデルが挿入された前後で、応力ひずみ線図に大きな差異はみられず、連続的に変化していることがわかる。このことから、結合力埋込型損傷構成則による材料剛性が低下する破壊の初期段階から有限被覆法と結合力モデルを併用した方法によるき裂が完全に生成される段階へと矛盾なく移行できたといえる。

3点曲げ試験片におけるき裂進展解例

第4.3.1項で述べたように、結合力埋込型損傷構成則を使用する方法から有限被覆法と結合力モデルを併用する方法へと移行するタイミングをき裂開口変位を用いて定義する。この開口変位による切り替えによって解析結果に矛盾が生じないことを確認するために、三点曲げ試験におけるき裂進展解析を実施する。解析に用いるモデルは、図

4.17に示す薄い3次元固体要素からなる有限要素モデルとし、初期き裂上部に強制変位0.1mmを作用させた。また、材料パラメータおよび結合カモデルのパラメータには前述の両端切欠き試験片と同じ値を用いた。

解析結果として、き裂進展に伴うき裂の開口変位に対する臨界値の比 w/w_c の分布を図4.18に示す。この図より、き裂開口変位はき裂先端に先行して発生していることが確認できる。また、有限被覆法により分割されたき裂面上において w は1を超えているのに対して、き裂先端以外の領域では1以下となっている。以上、開発したシームレスき裂進展解析手法によれば、第4.3.1項で示した2つの方法が移行するタイミングが適切に据えられ、またき裂に先行して生じる材料剛性の低下を再現可能であることを例示した。

4.4 まとめ

本章では、第3章で提案した結合カ埋込型損傷構成則を材料剛性が低下する破壊の初期段階に適用し、き裂が完全に形成された最終段階では有限被覆法と第2章で提案した結合カモデルを併用した方法を適用することで、き裂の発生から完全に形成されるまでをシームレスに解析できる新たなき裂進展解析手法を提案した。本手法の最大の特徴は、き裂先端部の先行領域における材料の損傷による剛性低下を連続体損傷モデルで表現し、き裂が完全に生成された時点で陽的にき裂面を表現する点である。また本手法では、本章で新たに開発した多面体自動再分割アルゴリズムと移動最小二乗法に基づいて状態変数をマッピングする方法が有限被覆法に実装されているため、有限要素がき裂面に2分されても全体のつり合い方程式の不整合が最小限に抑えられる点も従来法に比べて優位な特徴であるといえる。

表-4.1 破壊の各段階における解析手法とモデル

破壊の段階	数値解析手法	き裂の表現方法	破壊モデル
初期	有限要素法	陰的なき裂 (結合力埋込型損傷構成則)	一般化結合力モデル
中間	有限被覆法	陽的なき裂	
最終		(重複被覆)	(自由表面)

表-4.2 SEN 試験片の弾塑性材料パラメータ

\bar{E}	$\bar{\nu}$	$\bar{\sigma}_{ys}$
206.0 GPa	0.3	200.0 MPa
\bar{H}	$\bar{\sigma}_{\infty}$	\bar{A}
2.0×10^4 GPa	0.0 MPa	0.0

表-4.3 三角形型結合力モデルのパラメータ

G_c	w_f
0.001 MJ/m ²	1.2×10^{-2} mm

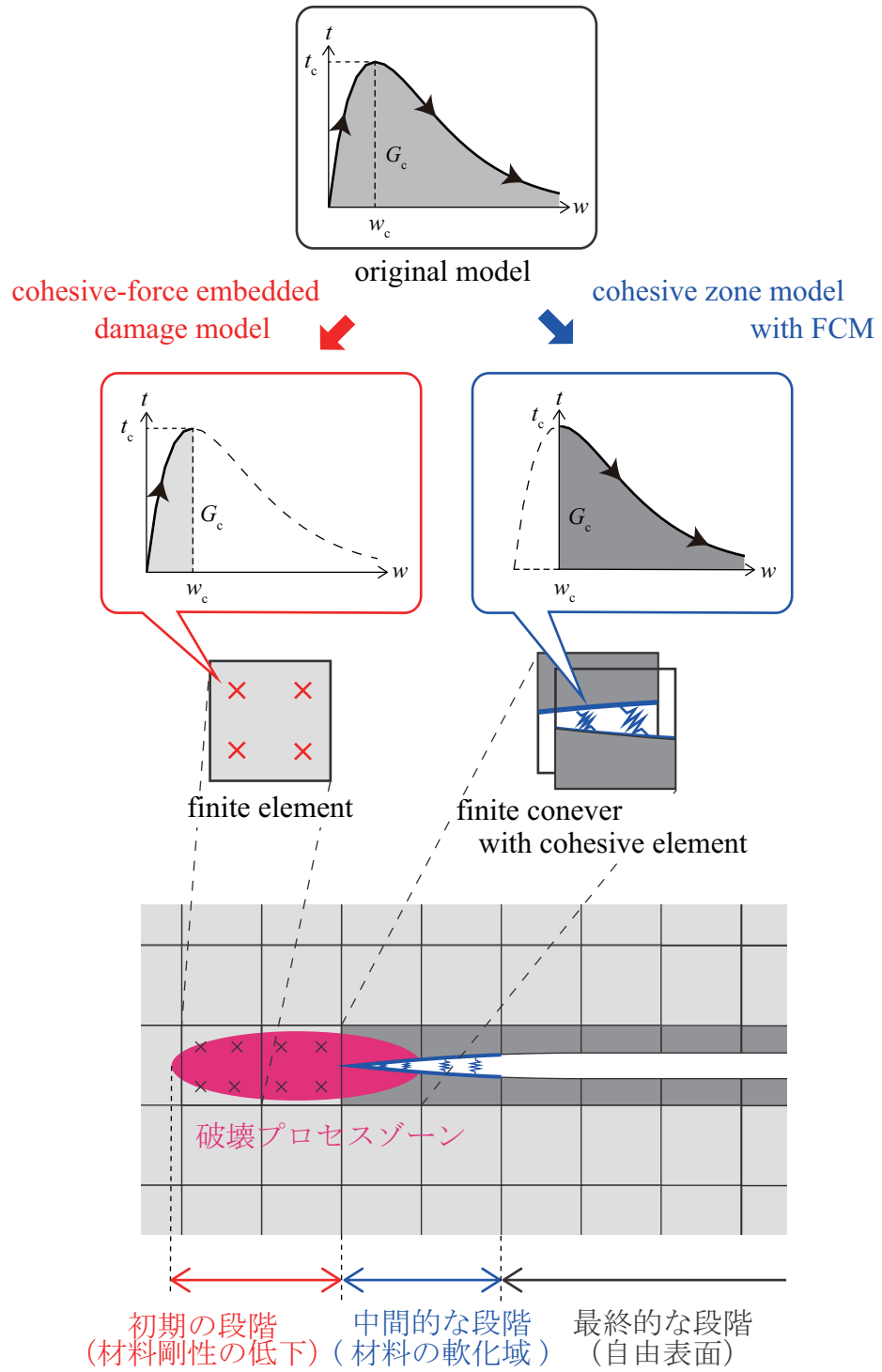


図-4.1 シームレスき裂進展解析の全体像

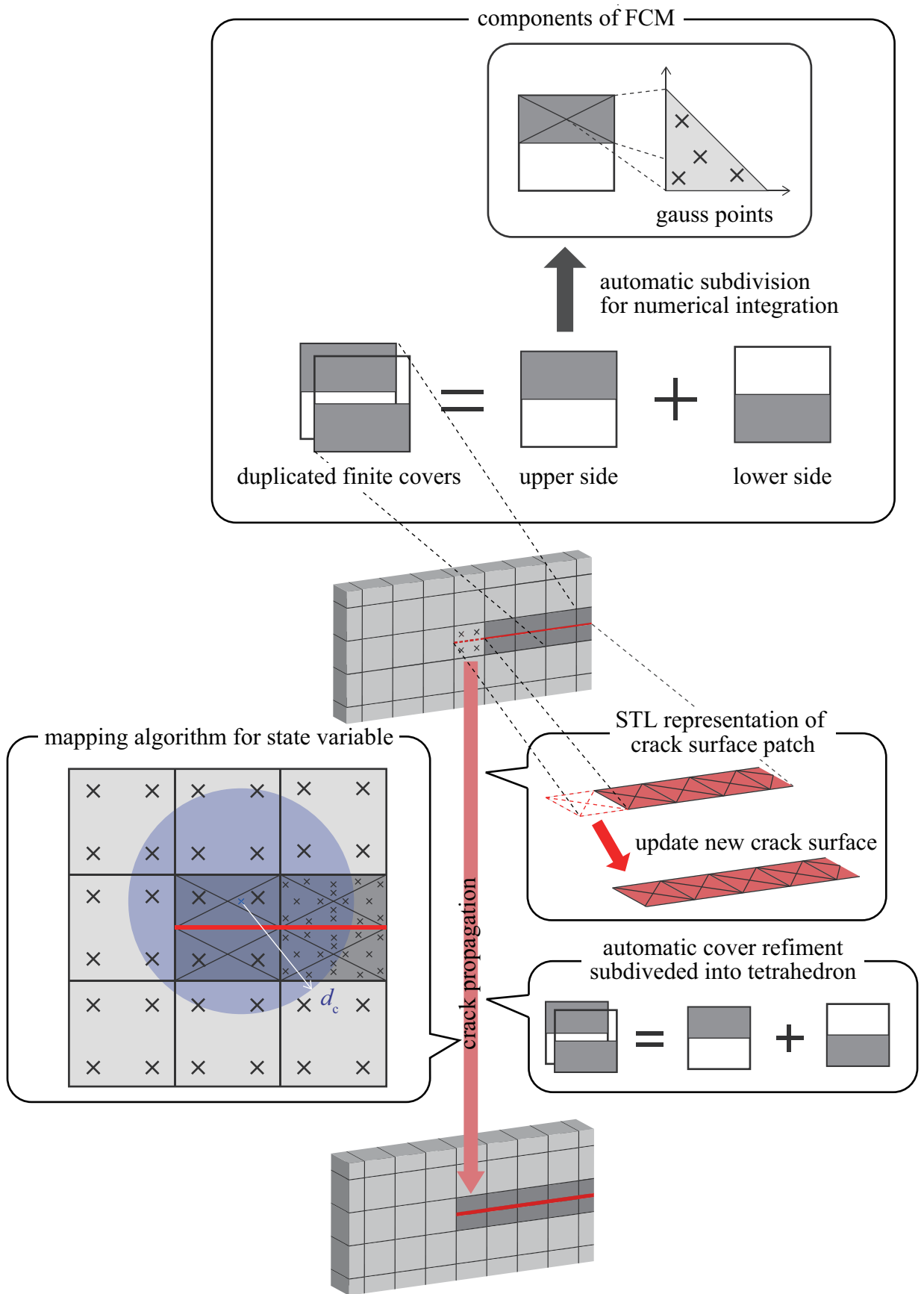


図-4.2 き裂進展に伴って各提案アルゴリズムが適用される過程

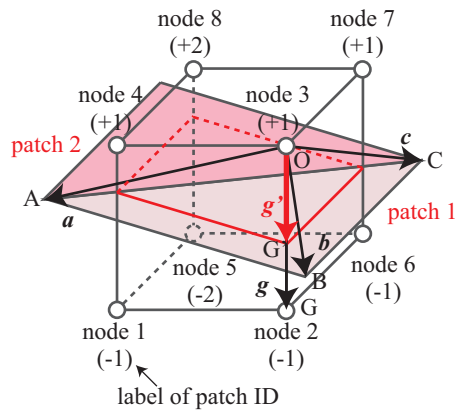
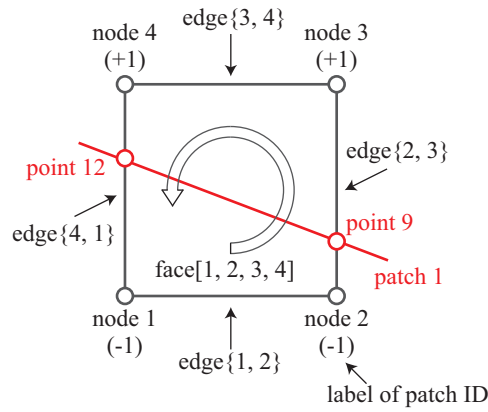


図-4.3 六面体要素と三角形パッチからなるき裂面



target edge	face of polygon	
	upper side	lower side
{1, 2}	[]	[1, 2]
{2, 3}	[9, 3]	[1, 2, 9]
{3, 4}	[9, 3, 4]	[1, 2, 9]
{4, 1}	[9, 3, 4, 12]	[1, 2, 9, 12]

図-4.4 六面体要素の各面の分割と面の生成法

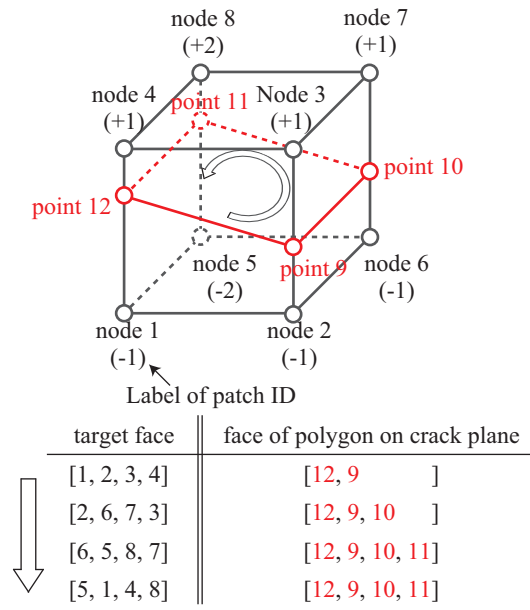


図-4.5 き裂面上にある面の作成法

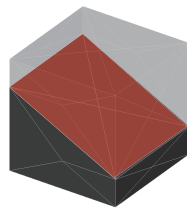


図-4.6 四面体で分割された六面体要素

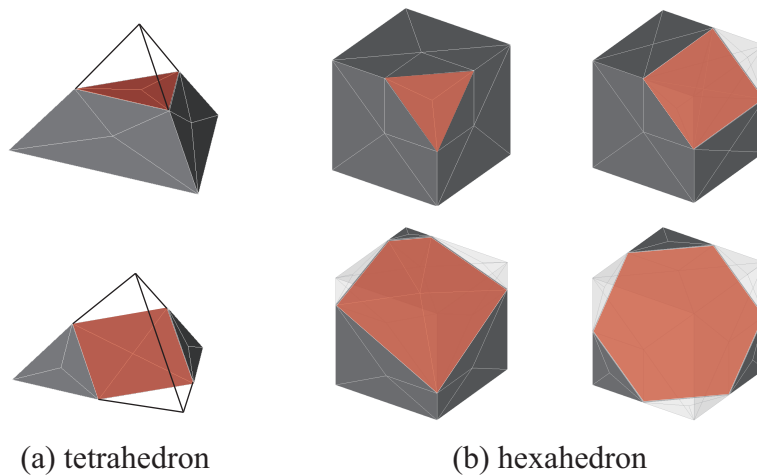


図-4.7 き裂面で分割される四面体および六面体のパターン

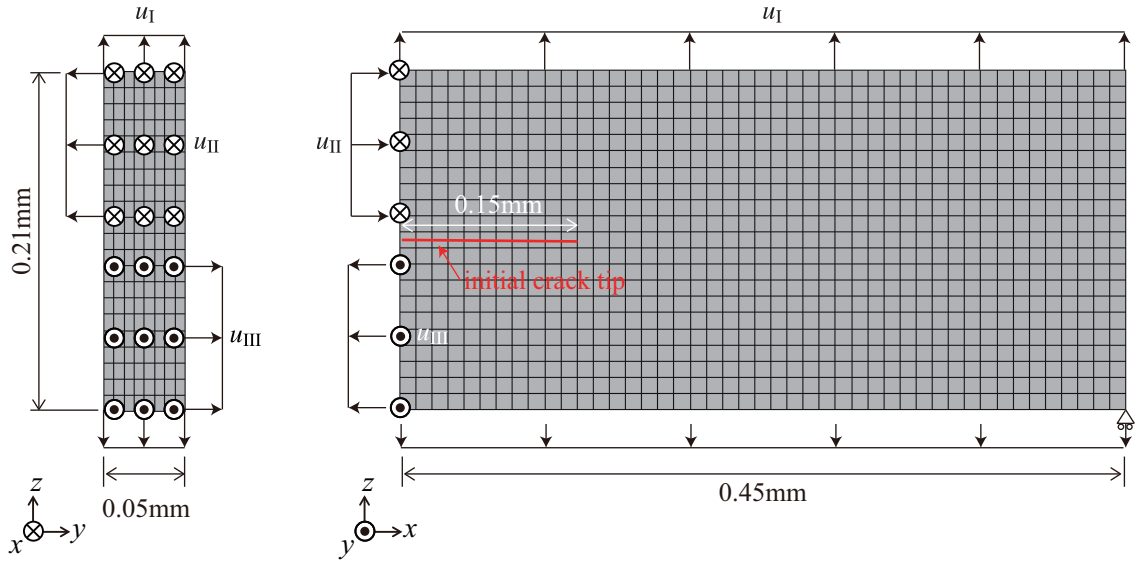


図-4.8 SEN 試験片の有限要素モデル

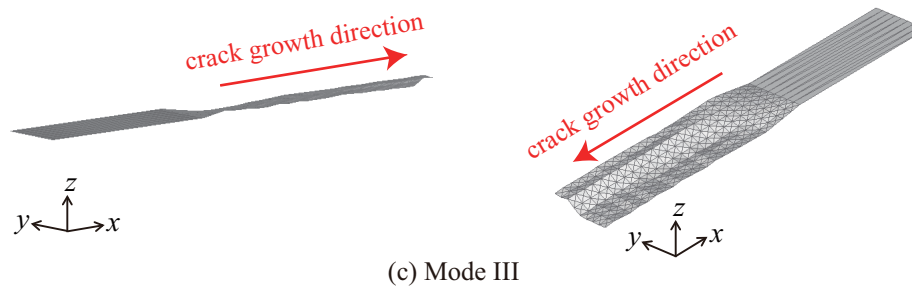
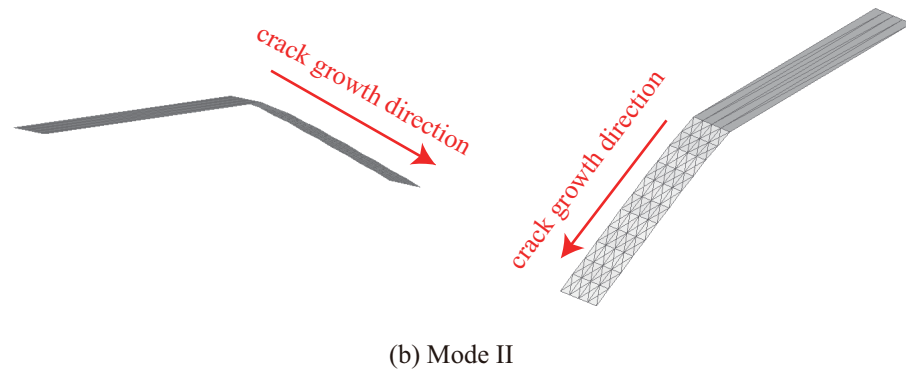
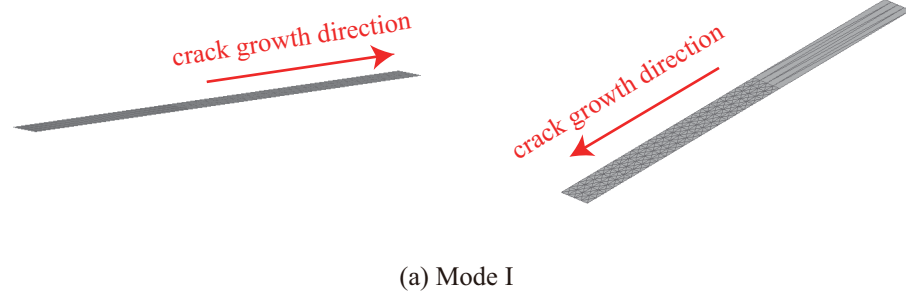


図-4.9 SEN 試験片のき裂面パッチ

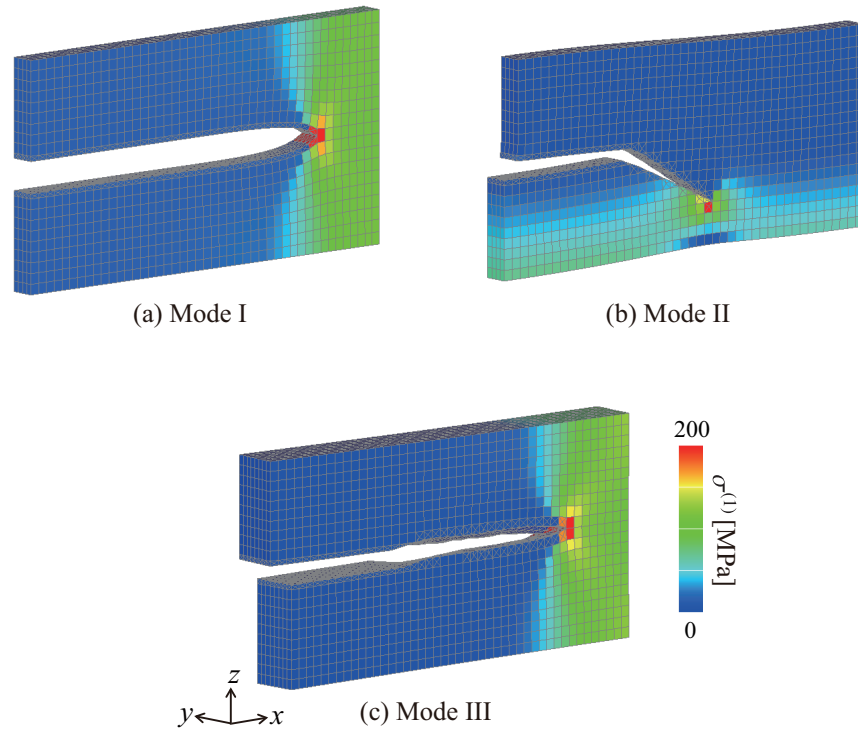


図-4.10 SEN試験片の最大主応力分布

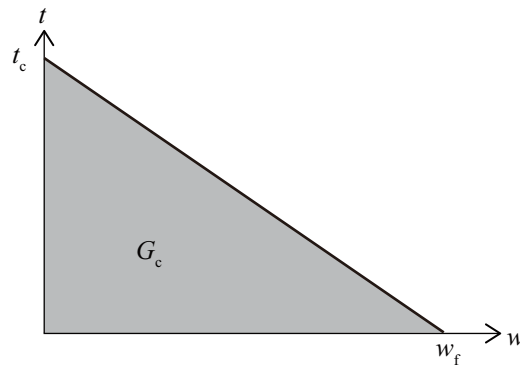


図-4.11 三角形型結合力モデル

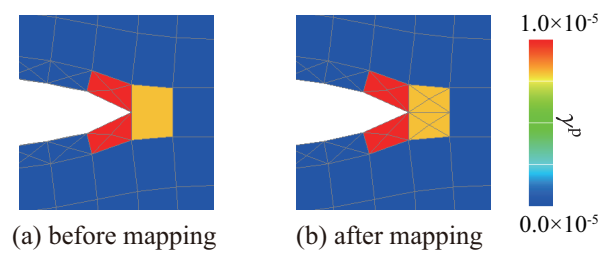


図-4.12 γ^p を移動最小二乗法によりマッピングした結果

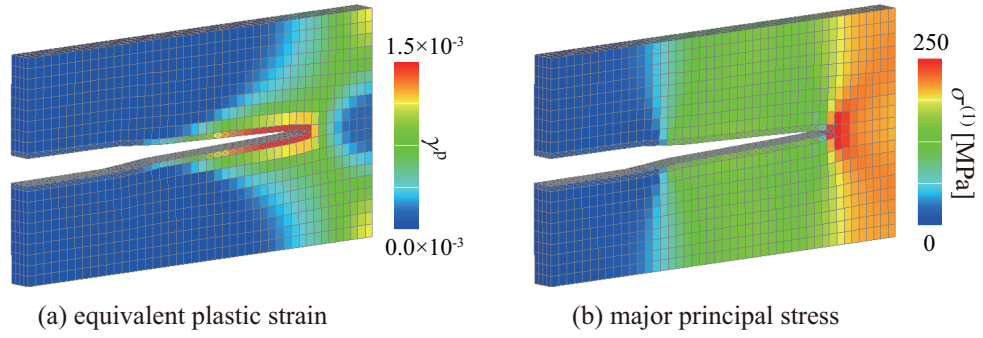


図-4.13 SEN 試験片による弾塑性き裂進展解析の結果

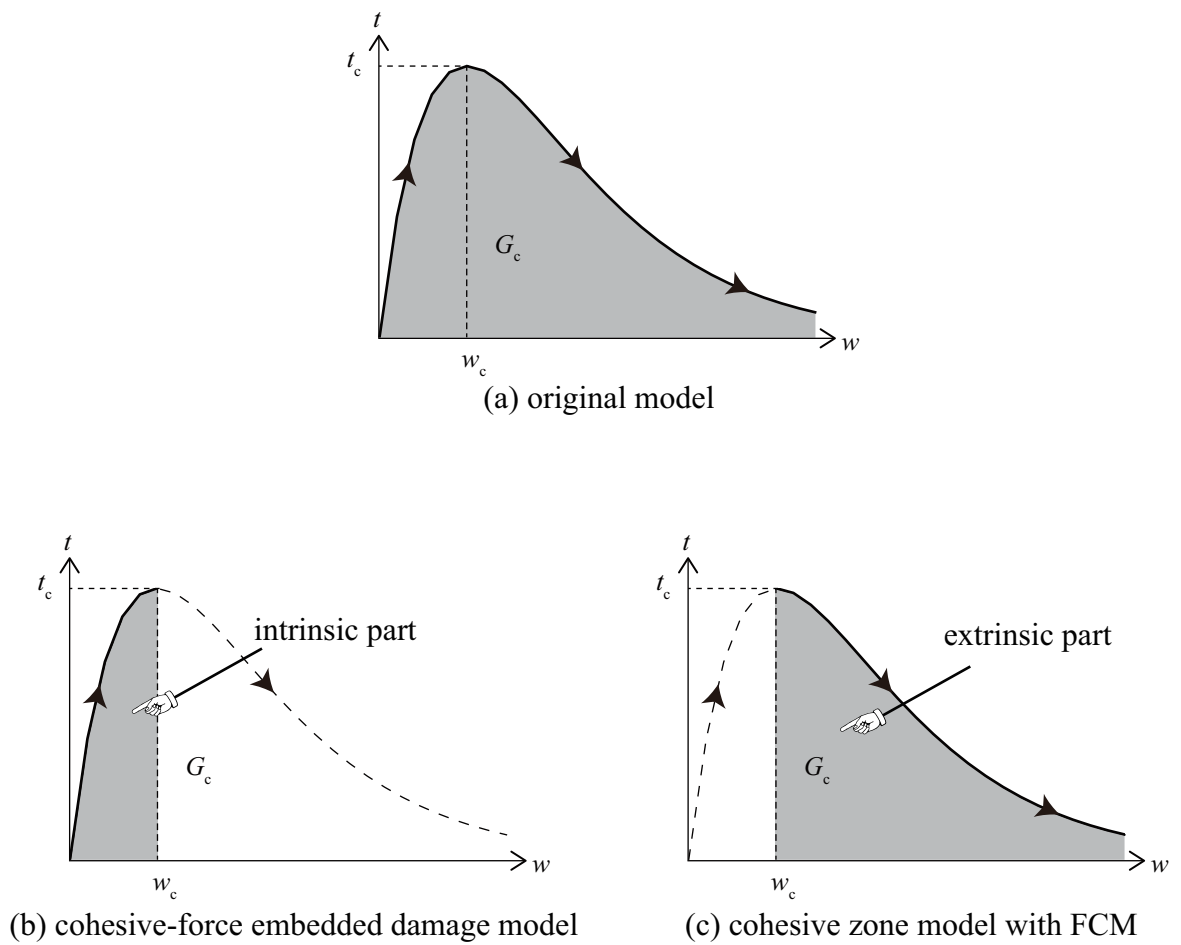


図-4.14 結合力モデルの分割方法

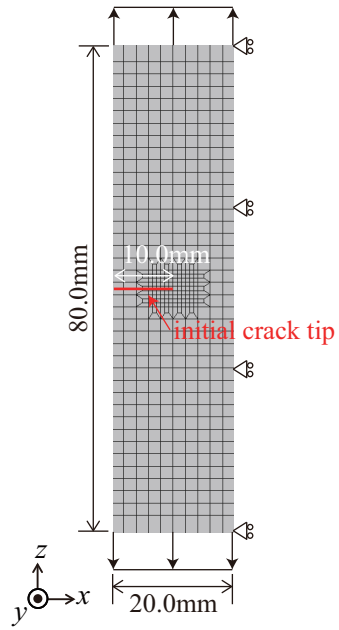


図-4.15 両端切欠き付き試験片の有限要素モデル

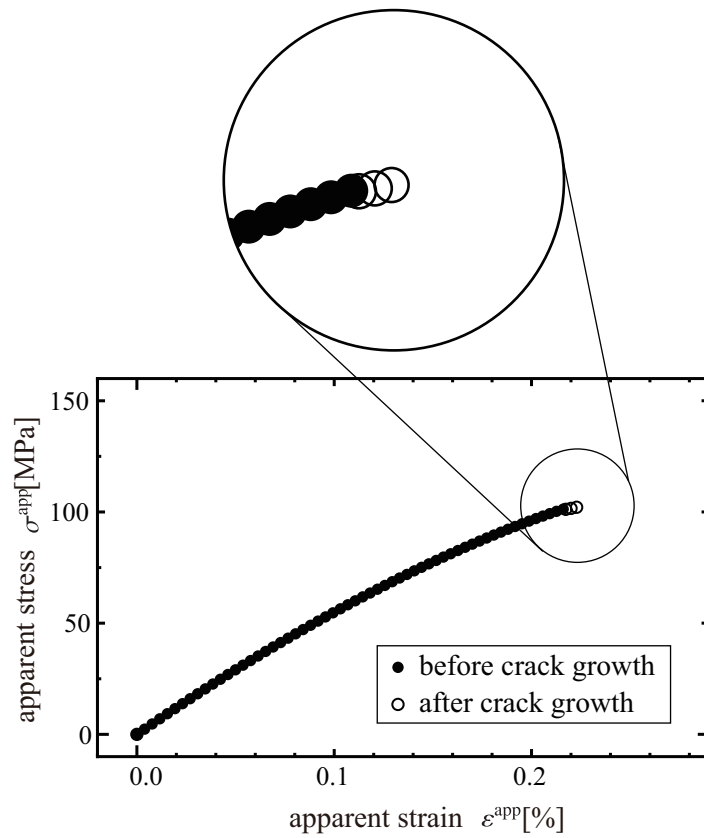


図-4.16 両端切欠き付き試験片の応力ひずみ線図

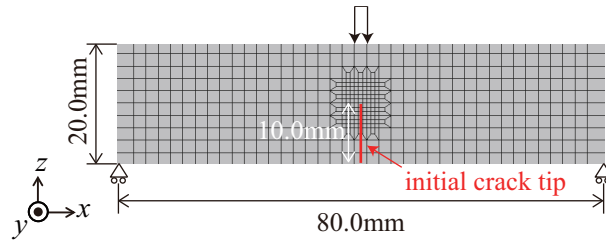


図-4.17 三点曲げ試験片の有限要素モデル

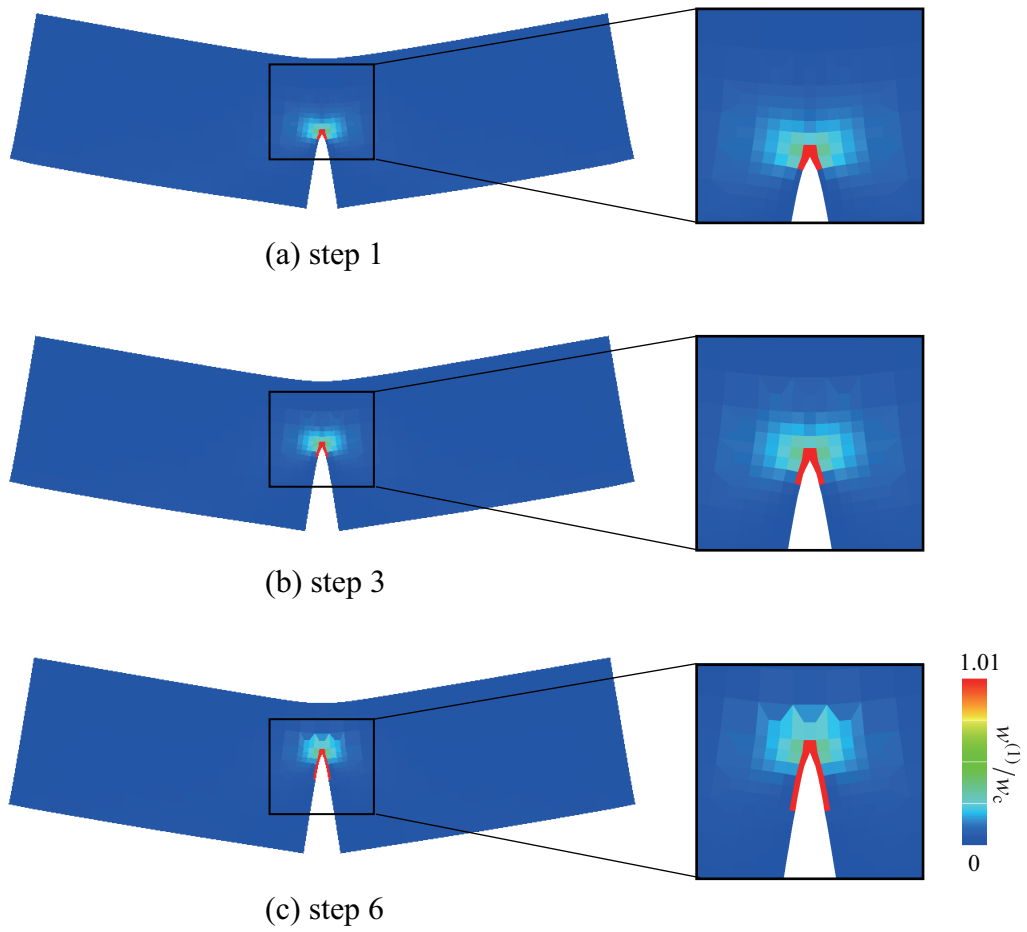


図-4.18 三点曲げ試験におけるき裂進展に伴うき裂の開口変位

5. 結論

本研究では、金属材料の多様な破壊現象を網羅的に表現可能な破壊力学モデルを構築するとともに、材料剛性の低下からき裂面形成に矛盾なく移行できるよう結合力埋込型損傷構成則を提案し、これと有限被覆法を組み合わせた新たなき裂進展解析手法を開発した。具体的には、まず脆性破壊の微視的メカニズムに着目し、疲労破壊や水素脆化を表現できるように熱力学的内部変数を導入した結合力モデルを提案するとともに、これに塑性変形の影響を考慮することで様々な破壊形態への連続的な遷移を表現可能な一般化結合力モデルを提案した。そして、このモデルを連続体損傷理論の枠組みに導入した結合力埋込型損傷構成則を定式化することで、延性破壊や疲労破壊におけるき裂先端の先行領域での損傷に起因する材料剛性の低下と仮想的なき裂面形成後の軟化挙動を表現可能とした。さらに、提案した一般化結合力モデルと結合力埋込型損傷構成則で表される材料挙動から、き裂面を陽に表現可能な数値解析アルゴリズムを有限被覆法に実装し、材料剛性の低下から陽なき裂面形成に至る過程を矛盾なく繋ぐことのできるシームレスき裂進展解析手法を開発した。以下、主な研究成果を各章ごとにまとめる。

- 第2章では、原子レベルの破壊挙動に基づいて提案された従来の結合力モデルを拡張して、金属材料の様々な破壊形態を表現できる一般化結合力モデルを提案した。具体的には、脆性破壊挙動を表現可能な結合力モデルを原型として、塑性変形や環境因子による破壊エネルギーの変化を熱力学的応力に依存する損傷変数の

発展則として定式化し、疲労破壊・水素脆化・延性破壊などを網羅的に表現可能な結合力-開口変位関係の数理モデルを構築した。このモデルによれば、同じ材料パラメータを用いながら、塑性変形が大きい場合には既存の結合力モデルでの再現が困難であったシェアリップ破壊を、小さい場合には平坦破壊を表現できるようになった。また、繰り返し载荷時に蓄積される塑性変形や水素濃度に伴うエネルギー解放率の低下も考慮できるため、疲労破壊および水素脆化に起因する破壊も表現可能となった。

- 第3章では、主応力方向に仮想的なき裂を想定した上で、結合力モデルを材料構成則に導入した結合力埋込型損傷構成則を提案した。この仮想的なき裂面上における応力と結合力のつり合い条件式を解くことで、任意の結合力モデルにも適用できる汎用的なモデルとなる。また、弾性構成則に限らず、等方塑性構成則および結晶塑性構成則にも適用できることを示した。さらに具体的な実装方法として、つり合い方程式の求解を行ったうえで物質点におけるき裂の方向と主応力の方向を一致させる接線入れ子割線解法を提示し、弾性構成則に適用した結合力埋込型損傷構成則の解析からその特徴と妥当性を示した。提案モデルの変形挙動は通常の結合力モデルと主応力方向の変形が完全に一致し、従来の損傷モデルと同様にき裂の発生がつり合い方程式の求解に自然に導入されるため、標準的な結合力モデルと損傷モデル双方の特徴を継承しているといえる。また、結合力埋込型損傷構成則を弾塑性構成則に適用し、第2章で構築した一般化結合力モデルを用いることで、延性破壊を特徴づける現象の1つである平坦破壊とシェアリップ破壊が混在した3次元的に複雑な破面を再現した。さらに、提案モデルを結晶塑性構成則に適用することで、荷重履歴に依存した疲労破壊の挙動を微視的に捉えた上で、疲労劣化後に材料が有する予耐力を評価した。

- 第4章では、材料剛性の低下からき裂面形成までを矛盾なく表現できるシームレスき裂進展解析手法を開発した。まず、き裂面が完全に形成された後のき裂進展挙動を捉えるために、有限被覆法による自動き裂進展解析手法を構築した。これに際して、き裂面によって要素が分割された場合には、それらを四面体に再分割する多面体自動再分割アルゴリズムを考案した。また、四面体に再分割された場合には、再分割前のメッシュから状態変数をマッピングするための移動最小二乗に基づく方法を実装した。これにより、三次元的なき裂進展解析が可能となり、結合力埋込型損傷構成則と併用することで、破壊の初期段階から最終段階までを連続的に表現できる解析が可能となった。

本研究で提案した一般化結合力モデルでは、塑性変形や水素濃度によるエネルギー解放率の変化を考慮できるため、脆性破壊・延性破壊・疲労破壊・水素脆化といった多様な破壊現象の表現が可能である。このエネルギー解放率の変化は損傷変数の発展則で規定されており、そのなかのパラメータを固定しながら負荷形態や負荷パターン、環境条件の変化に応じた破壊の遷移現象を扱うことも可能である。例えば、単調載荷による破壊、高および低サイクル疲労における破壊挙動を表現することもできるため、数値解析に際してのパラメータさえ適切に設定できれば、従来行われてきた疲労破壊に関する実験の回数を大幅に減らすことも不可能なことではない。

ただし、提案したモデルに用いられる材料パラメータを同定するための具体的な指針を示すが必要である。例えば、塑性変形によるエネルギー解放率の変化を規定する損傷変数の発展則内のパラメータは、第2.5.2項で示したような予塑性ひずみを付加した試験片を用いて実験的に同定すれば良いし、水素濃度に対する依存性についても水素環境中に暴露した試験片を用いれば良いはずであるが、これらの実証実験については今後の課題としたい。

また、水素脆化などの化学的作用による破壊現象と通常の負荷作用による脆性破壊・延性破壊・疲労破壊との複合的な破壊現象を数値的に再現することができれば、そのメカニズム解明の一助となるはずであるが、現状では前者の影響について理論的な検討が不十分であり、適切なモデルであるとは言いがたい。例えば、化学的作用による経年劣化と疲労破壊の複合破壊が対象であれば、き裂先端の応力勾配によって生じる応力誘起拡散の影響だけでなく、き裂表面での電位差によって生じる化学種等の流入出を考慮しなければならないが、提案した結合カモデルのままでは対応できない。このような複合破壊に対するより精緻なモデルの構築と検証についても今後の課題の一つである。

一方、提案したシームレスき裂進展解析手法を有限変形問題に適用するには、解決しなければならない幾つかの課題が挙げられる。実際、本論文では亜弾性構成則を用いことで一般化結合カモデルを結晶塑性構成則に適用することができたが、超弾性構成則や乗算分解に基づく弾塑性構成則に適用するには定式化を根本的に見直す必要があり、現状では樹脂やゴムなどの高分子材料の破壊現象への対応は難しい。また、提案した一般化結合カモデルと結合カ埋込型構成則を実装した有限被覆法によりき裂面を発生・進展させ、そのき裂面や構造全体の大きな動きや回転に追従しながら安定的に平衡解を求めることは容易ではない。

以上、提案した一般化結合カモデルと結合カ埋込型構成則、そしてこれらを有限被覆法に実装してシームレスなき裂進展解析が可能になったが、本論文ではその理論的枠組みの構築に主眼を置いたため、実現象に照らしたパラメータの同定や条件設定に関する検討が不十分であり、簡単な数値解析も検証に止まっている。提案した結合カモデル・損傷構成則・き裂進展解析手法を実構造物の設計や評価にも適用できるように計算手法に発展させるには、対応する数理モデルの精緻化と数値解析技術の高度を図るとともに、実験データに照らした性能検証を重ねていく必要があるといえる。

参考文献

- 1) Anderson, T.: Fracture Mechanics, Fundamentals and Applications, *Boca CRC Press*, 1995.
- 2) ASTM: Standard test method for plane-strain fracture toughness of metallic materials, *ASTM*, E 399-90, 1990.
- 3) BSI: Methods of testing for plane strain fracture toughness (K_{IC}) of Metallic Materials, *BSI*, BS 5447, 1974.
- 4) 日本材料学会破壊力学分門委員会: 破壊靱性データ集 (金属材料), 日本材料学会, 1995.
- 5) 日本機械学会: 弾塑性破壊靱性 J_{IC} 試験法 (増補第1版), 日本機械学会, 1992.
- 6) 日本機械学会: 発電用原子力維持規格 2004年版, 日本機械学会, 2008.
- 7) 日本溶接学会: き裂開口変位 (CTOD) 試験, 日本溶接学会, 1992.
- 8) Duga, J.J., Fisher, W.H., Buxbaum, R.W., Rosenfield, A.R., Burh, A.R., Honton, E.J. and McMillan, S.C.: The economic effects of fracture in the United States, *NBS Special Publication*, 647-2, 1983.
- 9) 田中徹, 萩原世也, 只野裕一, 稲田拓真, 森孝信, 瀧脇健二: 有限要素法を用いた打抜き加工における切断面の延性破壊判定に関する考察, *塑性と加工*, Vol.52(609), pp.1104–1108, 2011.

- 10) 産業競争力懇談会 COCN: インフラ長寿命化技術 (産業競争力懇談会 2013 年度 プロジェクト 最終報告), <http://www.cocn.jp/common/pdf/thema59-L.pdf> (参照日 2015 年 10 月 20 日) .
- 11) 内閣府 政策統括官 (科学技術・イノベーション担当) : SIP (戦略的イノベーション創造プログラム) インフラ維持管理・更新・マネジメント技術研究開発計画, http://www8.cao.go.jp/cstp/gaiyo/sip/keikaku/7_infura.pdf (参照日 2015 年 10 月 20 日) .
- 12) 石井浩司, 関博, 福手勤, 井川一弘, 杉橋直行: PC 鋼材の水素脆化に関する実験的研究, 土木学会論文集, Vol.30(532), pp.131-140, 1996.
- 13) 横川清志, 福山誠司: 水素脆性と金属材料の安全性, 水素エネルギーシステム, 水素エネルギー協会, Vol.22(2), pp.18-26, 1997.
- 14) 独立行政法人土木研究所 構造物メンテナンス研究センター: 既設道路橋基礎の耐震性能簡易評価手法に関する研究, 土木研究所資料, Vol.4168, 2010.
- 15) MacMahon Jr., C.J., and Cohen, M.: Initiation of cleavage in polycrystalline iron, *Acta Metall.*, Vol.13, pp.591-604, 1965.
- 16) Smith, E.: The nucleation and growth of cleavage microcracks in mild steel, *Acta Metall.*, Vol.13, pp.591-604, 1965.
- 17) Dolby, R.E. and Knott, J.F.: Toughness of martensitic and martensitic-bainitic microstructures with particular reference to heat-affected zones, *J. Iron Steel Inst.*, Vol.210, pp.857-865, 1972.
- 18) Ritchie, R.O., Knott, J.F. and Rice, J.R.: On the relationship between critical tensile

- stress and fracture toughness in mild steel, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.21, pp.395-410, 1973.
- 19) Anderson, T.L. and Dodds Jr., R.H.,: Specimen size requirements for fracture toughness testing in ductile-brittle transition region, *J. Test. Eval.*, Vol.19, pp.123-134, 1991.
- 20) 菊池正紀, 山王丸将吾: 混合モード荷重下における延性破壊機構の研究, 日本機械学会論文集 A, Vol.74, No. 745, pp.1235-1242, 2008.
- 21) Argon, A.S., Im, J., and Dafogulu, R.: Cavity formation from inclusions in ductile fracture, *Metallurg. Trans. A.*, Vol.6, pp.825-837, 1975.
- 22) Gurson, A. L.: Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part 1-Yield criteria and flow rules for porous ductile media, *J. Eng. Mater. Technol.*, Vol.99, pp.2-15, 1977.
- 23) Tvergaard, V.: On localization in ductile materials containing spherical voids, *Int. J. Fract.*, Vol.18, pp.237-252, 1982.
- 24) Tvergaard, V.: Material failure by void growth to coalescence, *Adv. Appl. Mech.*, Vol.27, pp.83-151, 1990.
- 25) Tvergaard, V. and Needleman, A.: Analysis of cup-cone fracture in round tensile bar, *Acta. Metall.*, Vol.32, pp.157-169, 1984.
- 26) Liu, J., Li, J. and Wu, B.: The cohesive zone model for fatigue crack growth, *Adv. Mech. Eng.*, Vol.46, pp.1-16, 2013.
- 27) 大谷南海男: 金属の塑性と腐食反応, 産業図書, 1979.

- 28) Griffith, A. A.: The phenomena of rupture and flow in solids, *Philos. T. Roy. Soc. A.*, Vol.221, pp.163-198, 1920.
- 29) Irwin, G. R.: Onset of fast crack propagation in high strength steel and aluminum alloys, *Proc., Sagamore Research Conf.*, Vol.2, pp.289-305, 1956.
- 30) Irwin, G. R. : Analysis of stress and strain near the end of a crack traversing a plate, *J. Appl. Mech.*, Vol.24, pp.361-364, 1957.
- 31) Irwin, G. R. : Plastic zone near a crack and fracture toughness, *Proc., Sagamore Research Conf.*, Vol.4, pp.63-78, 1961.
- 32) Dugdale, D. S. : Yield in steel sheets containing slits, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.8, pp.100-104, 1960.
- 33) Barenblatt, G. I. : The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture, *Adv. appl. mech.*, Vol.VII, Academic Press, pp.55-129, 1962.
- 34) Wells, A. A. : Unstable crack propagation in metals: cleavage and fast fracture, *Proc., The Crack Propagation Symposium*, Vol.1, pp.84, 1961.
- 35) Eshelby, J. D. : The continuum theory lattice defects, *Solid State Phys.*, Vol.3, 1956.
- 36) Rice, J. R. : A path independent integral and the approximate analysis of strain consideration by notches and cracks, *J. Appl. Mech.*, Vol.35, pp.379-386, 1968.
- 37) Hutchinson, J. W. : Singular behavior at the end of a tensile crack tip in a hardening material, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.16, pp.13-31, 1968.
- 38) Rice, J. R. and Rosengren, G. F. : Plane strain deformation near a crack tip in a power-law hardening material, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.16, pp.13-31, 1968.

- 39) Shih, C. F.: Relationship between the J-integral and crack opening displacement for stationary and extending cracks, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.29, pp.305-326, 1981.
- 40) ASTM: Standard test method for J_{Ic} , a measure of fracture toughness, *ASTM*, E 818-18, pp.1-20, 1972.
- 41) Paris, P. and Erdogan, F.: A critical analysis of crack propagation laws, *J. Basic. Eng.*, Vol.85, pp.528-534, 1963.
- 42) McClintock, F. A.: Plasticity aspect of fracture, *Fracture: An Advanced Treatise*, Vol.3, pp.47-225, 1971.
- 43) O'Dowd, N. P. and Shih, C. F.: Family of crack-tip fields characterized by a triaxiality parameter— I. structure of fields, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.39, pp.898-1015, 1991.
- 44) O'Dowd, N. P. and Shih, C. F.: Family of crack-tip fields characterized by a triaxiality parameter— II. structure of fields, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.40, pp.939-963, 1992.
- 45) Crane, D. L.: Deformation limits on two-parameter fracture mechanics in terms of higher order asymptotics, Ph.D., Dissertation, Texas A&M University, 1991.
- 46) 村上澄男: 連続体損傷力学 損傷・破壊解析の連続体力学的方法, 森北出版, 2008.
- 47) Kachanov, L.M.: Introduction to Continuum Damage Mechanics, *M. Nijhoff*, Boston, 1986.
- 48) Lemaitre, J.: A continuous damage mechanics model for ductile fracture, *J. Eng. Mater. Technol.*, Vol.99, pp.2-15, 1977.
- 49) Lemiatre, J., Sermage J.P. and Desmorat, R.: A two scale damage concept applied to fatigue, *Int. J. Fract.*, Vol.97, pp.67-81, 1997.

- 50) Rousselier, G.: Ductile fracture models and their potential in local approach of fracture, *Nucl. Eng. and Des.*, Vol.105, pp.97-111, 1987.
- 51) Hillerborg, A. Modeer, M. and Peterson, P. E.: Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements, *Cement and Concrete Research*, Vol.6, pp.773-782, 1976.
- 52) Hillerborg, A.: Application of the fictitious crack model to different materials, *Int. J. Fract.*, Vol.51, pp.95-102, 1991.
- 53) Needleman, A.: Some issues in cohesive surface modeling, *Proc. IUTAM*, Vol.10, pp.221–246, 2014.
- 54) Rose, J.H. and Smith, J.R.: Universal binding energy curves for metals and bimetallic interfaces, *Phys. Rev. Lett.*, Vol.44, pp.675-678. 1981.
- 55) Rice, J. R. and Wang, J.: Embrittlement of interfaces by solute segregation, *Mater. Sci. Eng.*, A102, pp.23-40, 1989.
- 56) Needleman. A.: A continuum model for void nucleation by inclusion debonding, *J. Appl. Mech.*, Vol.54, pp.525-531, 1987.
- 57) Ortiz, M. and Pandolfi, A.: Finite-deformation irreversible cohesive elements for three dimensional crack-propagation analysis, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, Vol.44, pp.1267-1282, 1999.
- 58) Tvergaard, V. and Hutchinson, J. W.: The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.40, pp.1377-1397, 1992

- 59) Chen, C. R., Kolednik, O., Heerens, J. and Fischer, F. D.: Three-dimensional modeling of ductile crack growth: Cohesive zone parameters and crack tip triaxially, *Eng. Fract. Mech.*, Vol.72, pp.2072-2094, 2005.
- 60) de-Andres, A., Perez, J.L. and Ortiz, M.: Elastoplastic finite element analysis of three-dimensional fatigue crack growth in aluminum shaft subjected to axial loading, *Int. J. Sol. Struct.*, Vol.36, pp.2231-2258, 1999.
- 61) Nguyen, O., Repetto, E.A., Ortiz, M. and Radovitzky R. A.: A cohesive zone model of fatigue crack growth, *Int. J. Fract.*, Vol.110, pp.351-369, 2001.
- 62) Bouvard, J.L., Chaboche, J.L., Feyel, F. and Gallerneau, F.: A cohesive zone model for fatigue and creep-fatigue crack growth, *Int. J. Fatigue*, Vol.53, pp.1193-1196, 2009.
- 63) Serebrinsky, S., Carter, E.A. and Ortiz, M.: A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.52, pp.2403-2430, 2004.
- 64) Okada, H., Higashi, M., Kikuchi, M., Fukui, Y. and Kumazawa, N.: Three dimensional virtual crack closure-integral method (VCCM) with skewed and non-symmetric mesh arrangement at the crack, *Eng. Fract. Mech.*, Vol.72, pp.1717-1737, 2005.
- 65) Shi, C.F., Moran, B. and Nakamura, T.: Energy release rate along a three dimensional crack front in a thermally stressed body, *Int. J. Fract.*, Vol.30, pp.79-102, 1986.
- 66) Camacho, G.T. and Ortiz, M.: Computational modeling of impact damage in brittle materials, *Int. J. Solids Structures*, Vol.33, pp.2899-2938, 1996.
- 67) 手塚明, 土田英二: 計算力学レクチャーシリーズ②, アダプティブ有限要素法, 丸善, 2003.

- 68) Paulino, G.H., Park, K., Celes, W. and Espinha, R.: Adaptive dynamic cohesive fracture simulation using nodal perturbation and edge-swap operators, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.64, pp.1303-1343, 2010.
- 69) Belytschko, T., Lu, Y.Y. and Gu, L.: Element-free Galerkin methods, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.37, pp.229-256, 1994.
- 70) Lu, Y.Y., Belytschko, T. and Gu, L.: A new implementation of the element free Galerkin method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.113, pp.397-414, 1994.
- 71) Krongauz, Y. and Belytschko, T.: Enforcement of essential boundary conditions in meshless approximations using finite elements, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.131, pp.133-145, 1996.
- 72) Pannachet, T. and Askes, H.: Some observations on the enforcement of constraint equations in the EFG method, *Commun. Numer. Meth. Engng.*, Vol.16, pp.819-830, 2000.
- 73) Ventura, G.: An augmented Lagrangian approach to essential boundary conditions in meshless methods, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.53, pp.825-842, 2002.
- 74) Fernández-Méndez, S. and Huerta, A.: Imposing essential boundary conditions in mesh-free methods, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.193, pp.1257-1275, 2004.
- 75) Cordes, L.W. and Moran, B.: Treatment of material discontinuity in the Element-Free Galerkin method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.139, pp.75-89, 1996.
- 76) Krongauz, Y. and Belytschko, T.: EFG approximation with discontinuous derivatives, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.41, pp.1215-1233, 1998.

- 77) Carpinteri, A., Ferro, G. and Ventura, G.: An augmented lagrangian approach to material discontinuities in meshless methods, *Comput. Mech.*, Vol.37, pp.207–220, 2006.
- 78) Augarde, C.E. and Deeks, A.J.: On the effects of nodal distributions for imposition of essential boundary conditions in the MLPG meshfree method, *Commun. Numer. Meth. Engng.*, Vol.21, pp.389-395, 2005.
- 79) Babuška, I. and Melenk, J.M.: The partition of unity method, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.40, pp.727-758, 1997.
- 80) Melenk, J.M. and Babuška, I.: The partition of unity finite element method: basic theory and applications, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.29, pp.289-314, 1996.
- 81) Belytschko, T. and Black, T.: Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.45, pp.601-620, 1999.
- 82) Moës, N., Dolbow, J. and Belytschko, T.: A finite element method for crack growth without remeshing, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.46, pp.131-150, 1999.
- 83) Dolbow, J.: An extended finite element method with discontinuous enrichment for applied mechanics, Ph.D, dissertation, Northwestern University, 1999.
- 84) Sukumar, N., Moës, N., Moran, B. and Belytschko, T.: Extended finite element method for three-dimensional crack modelling, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.48, pp.1549-1570, 2000.
- 85) Daux, C., Moës, N., Dolbow, J., Sukumar, N. and Belytschko, T.: Arbitrary branched and intersecting cracks with the extended finite element method, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.48, pp.1741-1760, 2000.

- 86) Dolbow, J., Moës, N. and Belytschko, T.: An extended finite element method for modeling crack growth with frictional contact, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.190, pp.6825-6846, 2001.
- 87) Moës, N. and Belytschko, T.: Extended finite element method for cohesive crack growth, *Engng. Fract. Mech.*, Vol.69, pp.813-833, 2002.
- 88) Nagashima, T., Omoto, Y. and Tani, S.: Stress intensity factor analysis of interface cracks using X-FEM, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.56, pp.1151-1173, 2003.
- 89) Zi, G. and Belytschko, T.: New crack-tip elements for XFEM and applications to cohesive cracks, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.57, pp.2221-2240, 2003.
- 90) Budyn, É., Zi, G., Moës, N. and Belytschko, T.: A method for multiple crack growth in brittle materials without remeshing, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.61, pp.1741-1770, 2004.
- 91) Lee, S.H., Song, J.H., Yoon, Y.C., Zi, G. and Belytschko, T.: Combined extended and superimposed finite element method for cracks, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.59, pp.1119-1136, 2004.
- 92) Sukumar, N., Chopp, D.L., Moës, N. and Belytschko, T.: Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite element method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.190, pp.6183-6200, 2001.
- 93) Moës, N., Cloirec, M., Cartraud, P. and Remacle, J.F.: A computational approach to handle complex microstructure geometries, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.192, pp.3163-3177, 2003.

- 94) Belytschko, T., Parimi, C., Moës, N., Sukumar, N. and Usui, S.: Structured extended finite element methods for solids defined by implicit surfaces, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.56, pp.609-635, 2003.
- 95) Sukumar, N., Huang, Z.Y., Prévost, J.-H. and Suo, Z.: Partition of unity enrichment for bimaterial interface cracks, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.59, pp.1075-1102, 2004.
- 96) Strouboulis, T., Copps, K. and Babuška, I.: The generalized finite element method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.190, pp.4081-4193, 2001.
- 97) Strouboulis, T., Babuška, I. and Copps, K.: The design and analysis of the generalized finite element method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.181, pp.43-69, 2000.
- 98) Strouboulis, T., Copps, K. and Babuška, I.: The generalized finite element method: an example of its implementation and illustration of its performance, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.47, pp.1401-1417, 2000.
- 99) Shi, G.-H.: Manifold method of material analysis, *Transactions of the 9th Army Conference On Applied Mathematics and Computing, Report*, No.92-1, U.S. Army Research Office, 1991.
- 100) Shi, G.-H.: Numerical Manifold Method, *Proceedings of the 2nd International Congress on Analysis of Discontinuous Deformation*, pp.1-35, 1997.
- 101) Chen, G., Ohnishi, Y. and Ito, T.: Development of high-order manifold method, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.43, pp.685-712, 1998.
- 102) Mas, E.T. and Ferran, A.R.: A new continuous-discontinuous damage model: cohesive cracks via accurate energy-transfer process, *Theor. Appl. Fract. Mec.*, Vol.69, 2014, pp.90-101.

- 103) Wu, L., Becker, G. and Noels, L.: Elastic damage to crack transition in a coupled non-local implicit discontinuous Galerkin/extrinsic cohesive law framework, *Comput. Method Appl. M.*, Vol.279, 2014, pp.379-409.
- 104) Nguyen, O. and Ortiz, M.: Coarse-graining and renormalization of atomistic binding relations and universal macroscopic cohesive behavior, *J. Mech. Phys. Solids.*, Vol.50, pp.1727-1741, 2002.
- 105) Hao, S., Liu, W.K., Moran, B., Vernery, F. and Olson, G. B.: Multi-scale constitutive model and computational framework for the design of ultra-high strength, high toughness steels, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, Vol.193, pp.1865-1908, 2004.
- 106) Xu, X. P. and Needleman, A.: Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids, *J. Mech. Phys. Solids.*, Vol.42, pp.1397-1434, 1994.
- 107) Miller, O., Freund, L.B. and Needleman, A.: Modeling and simulation of dynamic fragmentation in brittle materials, *Int. J. Fract.*, Vol.96, pp.101-125, 1999.
- 108) Ruiz, G., Ortiz, M. and Pandolfi, A.: Three-dimensional finite-element simulation of the dynamic Brazilian tests on concrete cylinders, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.48, pp.963-994, 2000.
- 109) Ruiz, G., Pandolfi, A. and Ortiz, M.: Three-dimensional cohesive modeling of dynamic mixed-mode fracture, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.52, pp.97-120, 2001.
- 110) 寺田賢二郎, 犬飼壯典, 濱名泰彰, 身寄明男, 平山紀夫: 数値材料試験による異方性超弾性体のパラメータ同定, 計算工学講演会論文集, Vol.13, pp.513-516, 2008.
- 111) 名取美咲, 寺田賢二郎: 結晶塑性均質化法による鋼材の加工後強度予測, 土木学会東北支部技術研究発表会, I-25, 2007.

- 112) 戸梶恵郎, 小川武史, 原田行雄, 安藤善司: 微小疲労き裂の成長に対する線形破壊力学の適用限界とその組織依存性, *材料*, Vol.34, pp.1160-1166, 1985.
- 113) 和田山芳英, 松本俊美, 佐藤宏, 高橋秀明: オーステナイトステンレス鋼(SUS316LN)の極低温破壊靱性に及ぼす試験片寸法効果, *日本機械学会論文集 A*, Vol.54, pp.1763-1770, 1988.
- 114) Jay, D. C., Wael, A., John, L. and Huseyin, S.: High resolution digital image correlation measurements of strain accumulation in fatigue crack growth, *Int. J. Fatigue*, Vol.57, pp.140-150, 2013.
- 115) Zhang, Y., Shi, H., Gu, J., Li, C., Kadau, K. and Luesebrink, O.: Crystallographic analysis for fatigue small crack growth behaviors of a nickel-based single crystal by in situ SEM observation, *Theo. and App.Fracture Mech.*, Vol.69, pp.80-89, 2014.
- 116) Orowan, E. : Fracture and strength of solids, *ROPP*, Vol.XII, p. 185, 1948.
- 117) Jiang, E.A. and Carter, E.A.: First principles assessment of ideal fracture energies of materials with mobile implications for hydrogen embrittlement of metals, *Acta. Mater.*, Vol.52, pp.4801-4807, 2004.
- 118) Jokl, M.L., Vieh, V. and Mcmachon, C. J.: A Microscopic theory of brittle fracture in deformable solids: a relation between ideal work to fracture and plastic work, *Acta. Metall.*, Vol.28, pp.1479-1488, 1980.
- 119) Rimoli, J.J. and Ortiz, M.: A three dimensional multiscale model of intergranular hydrogen-assisted cracking, *Philos. Mag.*, Vol.90, pp.2939-2963, 2010.
- 120) 木村晃彦, 木村宏: 鉄の粒界水素脆性に対する炭素の影響, *日本金属学会誌*, Vol.47, No.10, pp.807-813, 1983.

- 121) 堀川敬太郎: 高圧水素貯蔵用アルミニウム合金の研究動向, 軽金属, Vol.60, No.11, pp.542-547, 2010.
- 122) 佐々木栄一, 荒川泰二, 三木千尋, 市川篤司: 鋼製鉄脚における地震時脆性破壊防止に必要な鋼材の破壊靱性レベル, 土木学会論文集, No. 731/I-63, pp.93-102,2003.
- 123) 番場良平, 新宅勇一, 村松真由, 高瀬慎介, 森口周二, 寺田賢二郎, 堤成一郎: 地震荷重を受ける鋼製橋脚のき裂進展評価, 計算工学講演会論文集, Vol.20, 4p, 2015.
- 124) Rashid, Y. R.: Ultimate strength analysis of prestressed concrete pressure vessels, *Nucl. Eng. Des.*, Vol.7, pp.334-344, 1968.
- 125) Jirasek, M. and Zimmermann T.: Analysis of rotating crack model, *J. Eng.Mech.*, Vol.124, pp.842-851, 1998.
- 126) Armero, F. and Linder, C.: Recent developments in the formulation of finite elements with embedded strong discontinuities, *IUTAM Bookseries.*, Vol.5, pp.105-122, 2004.
- 127) Galvez, J.C., Planas, J., Sancho, J. M., Reyes, E., Cendon, D.A. and Casati, M.J.: An embedded cohesive crack model for finite element analysis of quasi-brittle materials, *Eng. Fract. Mech.*, Vol.2013, pp.369-368, 2013.
- 128) Jirasek, M. and Zimmermann T.: Rotating crack model with transition to scalar damage, *J. Eng.Mech.*, Vol.124, pp.227-284, 1998.
- 129) 車谷麻緒, 寺田賢二郎, 加藤準治, 京谷孝史, 檜山和男: コンクリートの破壊力学に基づく等方性損傷モデルの定式化とその性能評価, 計算工学講演会論文集, Vol.2013, pp.20130015, 2013.
- 130) Hasegawa, T.: Finite element analysis of diagonal tension failure in RC beams, *Proc. of FraMCoS-6 Catania*, Italy: Catania, pp.5-9.

- 131) Rashid, K. and Abu, Al-Rub: Gradient-enhanced coupled plasticity-anisotropic damage model for concrete fracture: computational aspects and applications, *Int. J. Damage Mech.*, Vol.21, pp.115-154, 2009.
- 132) 山谷敦, 中村光, 檜貝勇: 回転ひび割れモデルによる RC 梁のせん断挙動解析, 土木学会論文集, Vol.43, pp.187-199, 1999.
- 133) Erdogan, F. and Gupta, G.: The stress analysis of multi-layered composites with a flaw, *Int. J. Solids Struct.*, Vol.7, pp.39-61, 1971.
- 134) Lee, D., Ikeda, T., Miyazaki, N. and Choi, N.: Damage zone around crack tip and fracture toughness of rubber-modified epoxy resin under mixed-mode conditions, *Eng. Fract. Mech.*, Vol.69, pp.1363-1375, 2002.
- 135) Asaro, J.R., Crystal plasticity, *J. Appl. Mech.*, Vol.50, 1983, pp.921-934.
- 136) Terada, K., Asai, M. and Yamagishi, M.: Finite cover method for linear and nonlinear analyses of heterogeneous solids, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, Vol.58, pp.1321-1346, 2003.
- 137) 藤本敬介, 守屋俊夫, 中山泰一: 格子形状の変形による Marching Cubes 法の細部表現能力の向上, 情報処理学会誌, Vol.49, pp.1031-1040, 2008.
- 138) 鈴木克幸, 長嶋利夫, 萩原世也: 計算力学レクチャーシリーズ④ メッシュフリー解析法, 丸善, 2006.
- 139) Yang, S., Gouwei, M., Xuhua, R. and Feng, R.: Cover refinement of numerical manifold method for crack propagation simulation, *Eng. Anal. Bound. elem.*, Vol.43, pp.37-49, 2014.

- 140) Nayroles, B., Touzot, G. and Villon, P.: Generalizing the finite element method: diffuse approximation and diffuse elements, *Comput. Mech.*, Vol.10, pp.307-318, 1992.

補遺 I. 結合力埋込型損傷構成則における リターンマッピング方程式および材料ヤコビアン の導出

補遺 I.1 弾性構成則

式 (3.13) の $w^{(i)}$ に関するリターンマッピング方程式の線形化方程式は

$$g^{w^{(i)}}(\tilde{w}^{(i)}) + \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \frac{\partial g^{w^{(i)}}}{\partial w^{(j)}} \delta w^{(j)} = 0 \quad (\text{I.1})$$

である。ここで、この接線係数は、

$$\frac{\partial g^{w^{(i)}}}{\partial w^{(j)}} = \frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(j)}} + \sum_{k=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ik)} \frac{\partial \varepsilon^{w^{(k)}}}{\partial w^{(j)}} \quad (\text{I.2})$$

である。式 (3.8) より、

$$\frac{\partial \varepsilon^{w^{(i)}}}{\partial w^{(j)}} = \frac{1}{h^{(i)}} \delta_{ij} \quad (\text{I.3})$$

である。この式を代入すると、リターンマッピング方程式の接線係数は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial g^{w^{(i)}}}{\partial w^{(j)}} &= \frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(j)}} + \sum_{k=1}^{\text{DIM}} \frac{\hat{E}^{(ik)}}{h^{(k)}} \delta_{kj} \\ &= \frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(j)}} + \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \frac{\hat{E}^{(ij)}}{h^{(j)}} \end{aligned} \quad (\text{I.4})$$

である。

次に、式(3.13)において $g^w = 0$ として両辺を ε で微分すると、

$$\begin{aligned}
\sum_{l=1}^{\text{DIM}} \frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(l)}} \frac{\partial w^{(l)}}{\partial \varepsilon^{(k)}} - \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} \left(\delta_{jk} - \sum_{l=1}^{\text{DIM}} \frac{\partial \varepsilon^{w(j)}}{\partial w^{(l)}} \frac{\partial w^{(l)}}{\partial \varepsilon^{(k)}} \right) &= 0 \\
\sum_{l=1}^{\text{DIM}} \left(\frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(l)}} - \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} \frac{\partial \varepsilon^{w(j)}}{\partial w^{(l)}} \right) \frac{\partial w^{(l)}}{\partial \varepsilon^{(k)}} &= \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} \delta_{jk} \\
\frac{\partial w^{(l)}}{\partial \varepsilon^{(k)}} &= \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \left(\frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(l)}} - \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} \frac{\partial \varepsilon^{w(j)}}{\partial w^{(l)}} \right)^{-1} \hat{E}^{(ik)} \\
\frac{\partial w^{(l)}}{\partial \varepsilon^{(k)}} &= \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \left(\frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(l)}} - \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \frac{\hat{E}^{(ij)}}{h^{(l)}} \delta_{jl} \right)^{-1} \hat{E}^{(ik)} \\
\frac{\partial w^{(l)}}{\partial \varepsilon^{(k)}} &= \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \left(\frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(l)}} - \frac{\hat{E}^{(il)}}{h^{(l)}} \right)^{-1} \hat{E}^{(ik)} \tag{I.5}
\end{aligned}$$

である。よって、材料ヤコビアンは、式(3.11)より

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \sigma^{(i)}}{\partial \varepsilon^{(j)}} &= \sum_{k=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ik)} \left(\delta_{kj} - \sum_{l=1}^{\text{DIM}} \frac{\partial \varepsilon^{w(k)}}{\partial w^{(l)}} \frac{\partial w^{(l)}}{\partial \varepsilon^{(j)}} \right) \\
&= \sum_{k=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ik)} \left\{ \delta_{kj} - \sum_{l=1}^{\text{DIM}} \sum_{m=1}^{\text{DIM}} \frac{\partial \varepsilon^{w(k)}}{\partial w^{(l)}} \left(\frac{\partial t^{(m)}}{\partial w^{(l)}} - \frac{\hat{E}^{(ml)}}{h^{(l)}} \right)^{-1} \hat{E}^{(mj)} \right\} \\
&= \sum_{k=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ik)} \left\{ \delta_{kj} - \sum_{m=1}^{\text{DIM}} \left(\frac{\partial t^{(m)}}{\partial w^{(k)}} - \frac{\hat{E}^{(mk)}}{h^{(k)}} \right)^{-1} \frac{\hat{E}^{(mj)}}{h^{(k)}} \right\} \tag{I.6}
\end{aligned}$$

もしくは、応力と結合力のつり合い条件 $\sigma^{(i)} = t^{(i)}$ を用いれば、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \sigma^{(i)}}{\partial \varepsilon^{(j)}} &= \sum_{k=1}^{\text{DIM}} \frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(k)}} \frac{\partial w^{(k)}}{\partial \varepsilon^{(j)}} \\
&= \sum_{k=1}^{\text{DIM}} \frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(k)}} \sum_{l=1}^{\text{DIM}} \left(\frac{\partial t^{(l)}}{\partial w^{(k)}} - \frac{\hat{E}^{(lk)}}{h^{(k)}} \right)^{-1} \hat{E}^{(lj)} \tag{I.7}
\end{aligned}$$

である。

補遺 I.2 弾塑性構成則

補遺 I.2.1 一次元問題

式 (3.17) の応力と結合力のつり合い条件式を差分近似して，離散化すると，

$$\begin{aligned}
 g^w(w, \Delta\gamma^p) &= E(\varepsilon - \varepsilon^p) - E\frac{w}{h} - t(w) \\
 &= E(\varepsilon - \varepsilon_0^p - \Delta\varepsilon^p) - E\frac{w}{h} - t(w) \\
 &= E(\varepsilon - \varepsilon_0^p) - E\Delta\varepsilon^p - E\frac{w}{h} - t(w) \\
 &= \sigma^{\text{trial}} - E\Delta\gamma^p \text{sign}(\sigma^{\text{trial}}) - E\frac{w}{h} - t(w) = 0
 \end{aligned} \tag{I.8}$$

となる．ここで， \bullet_0 は前荷重増分ステップにおける状態変数， $\Delta\bullet$ は変数の増分量を示し， σ^{trial} は試行弾性応力である．

また，式 (3.19) の降伏関数は，

$$\begin{aligned}
 g^p(w, \Delta\gamma^p) &= \|E[\varepsilon - (\varepsilon_0^p + \Delta\varepsilon^p)]\| - E\frac{w}{h} - \sigma_y(\alpha_0 + \Delta\alpha) \\
 &= \|E(\varepsilon - \varepsilon_0^p)\| - E\Delta\varepsilon^p - E\frac{w}{h} - \sigma_y(\alpha + \Delta\alpha) \\
 &= \|\sigma^{\text{trial}}\| - E\Delta\gamma^p \text{sign}(\sigma) - E\frac{w}{h} - \sigma_y(\alpha + \Delta\gamma^p) \\
 &= \|\sigma^{\text{trial}}\| - E\left(\Delta\gamma^p \text{sign}(\sigma) + \frac{w}{h}\right) - \sigma_y(\alpha + \Delta\gamma^p) = 0
 \end{aligned} \tag{I.9}$$

となる．これら二式の連立方程式を Newton-Raphson 法において解くべき線形化方程式は，

$$\begin{Bmatrix} g^w(\tilde{w}, \Delta\tilde{\gamma}^p) \\ g^p(\tilde{w}, \Delta\tilde{\gamma}^p) \end{Bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial g^w}{\partial w} & \frac{\partial g^w}{\partial \Delta\gamma^p} \\ \frac{\partial g^p}{\partial w} & \frac{\partial g^p}{\partial \Delta\gamma^p} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \delta w \\ \delta \Delta\gamma^p \end{Bmatrix} \tag{I.10}$$

となる。ここで、接線係数の各成分は、

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g^w}{\partial w} &= -\frac{E}{h} - \frac{df(\tilde{w})}{dw} \\
 \frac{\partial g^w}{\partial \Delta\gamma^p} &= -E \text{sign}(\sigma^{\text{trial}}) \\
 \frac{\partial g^p}{\partial w} &= -\frac{E}{h} \\
 \frac{\partial g^p}{\partial \Delta\gamma^p} &= -E \text{sign}(\sigma^{\text{trial}}) - \frac{d\sigma_y}{d\Delta\gamma^p}
 \end{aligned} \tag{I.11}$$

である。

補遺 I.2.2 多次元問題

塑性ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ を差分近似して離散化すると、式 3.20 の Cauchy 応力は、

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0^p - \boldsymbol{\varepsilon}^w - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^p) = \boldsymbol{\sigma}^{\text{trial}} - \mathbf{E} : (\boldsymbol{\varepsilon}^w + \Delta\gamma^p \mathbf{N}) \tag{I.12}$$

である。これにより、主応力は、

$$\begin{aligned}
 \sigma^{(i)} &= \mathbf{e}^{(i)} \cdot [\mathbf{E} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^w - \boldsymbol{\varepsilon}^p)] \mathbf{e}^{(i)} \\
 &= \mathbf{e}^{(i)} \cdot [\boldsymbol{\sigma}^{\text{trial}} - \mathbf{E} : (\boldsymbol{\varepsilon}^w + \Delta\gamma^p \mathbf{N})] \mathbf{e}^{(i)} \\
 &= \sigma^{(i), \text{trial}} - \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} \varepsilon^{w(j)} - \Delta\gamma^p \mathbf{e}^{(i)} \cdot \mathbf{N} \mathbf{e}^{(i)}
 \end{aligned} \tag{I.13}$$

となる。

多次元問題における応力と結合力のつり合い条件は、

$$g^{w(i)}(w^{(i)}, \Delta\gamma^p) \mathbf{t}^{(i)} - \sigma^{(i), \text{trial}} + \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} \varepsilon^{w(j)} + \Delta\gamma^p \mathbf{e}^{(i)} \cdot \mathbf{N} \mathbf{e}^{(i)} = 0 \tag{I.14}$$

となる。また、降伏関数は、

$$\begin{aligned}
 g^p(w^{(i)}, \Delta\gamma^p) &= \sqrt{\frac{3}{2}} \|\text{dev} [\boldsymbol{\sigma}^{\text{trial}} - \mathbf{E} : (\boldsymbol{\varepsilon}^w + \Delta\gamma^p \mathbf{N})]\| - \sigma_y(\alpha + \Delta\alpha) \\
 &= \sigma_{\text{eq}}^{\text{trial}} - \sqrt{\frac{3}{2}} \|\text{dev} \left(\sum_{j=1}^{\text{DIM}} \hat{E}^{(ij)} \varepsilon^{w(j)} + \Delta\gamma^p \mathbf{E} : \mathbf{N} \right)\| - \sigma_y(\alpha + \Delta\alpha) = 0
 \end{aligned} \tag{I.15}$$

となる。これらの連立方程式を Newton-Raphson 法で解く際に必要な線形化方程式は、

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{g}^{\text{w}(i)}(\tilde{w}^{(i)}, \Delta\gamma^{\text{p}}) \\ \mathbf{g}^{\text{p}}(\tilde{w}^{(i)}, \Delta\gamma^{\text{p}}) \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{g}^{\text{w}(i)}}{\partial w^{(j)}} & \frac{\partial \mathbf{g}^{\text{w}(i)}}{\partial \Delta\gamma^{\text{p}}} \\ \frac{\partial \mathbf{g}^{\text{p}}}{\partial w^{(j)}} & \frac{\partial \mathbf{g}^{\text{p}}}{\partial \Delta\gamma^{\text{p}}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \delta w^{(j)} \\ \delta \Delta\gamma^{\text{p}} \end{Bmatrix} \quad (\text{I.16})$$

となる。ここで、接線係数の各成分は、

$$\frac{\partial \mathbf{g}^{\text{w}(i)}}{\partial w^{(j)}} = \frac{\partial t^{(i)}}{\partial w^{(j)}} + \sum_{j=1}^{\text{DIM}} \frac{\hat{E}^{(ij)}}{h^{(j)}} \quad (\text{I.17})$$

$$\frac{\partial \mathbf{g}^{\text{w}(i)}}{\partial \Delta\gamma^{\text{p}}} = \mathbf{e}^{(i)} \cdot \mathbf{N} \mathbf{e}^{(i)} \quad (\text{I.18})$$

$$\frac{\partial \mathbf{g}^{\text{p}}}{\partial w^{(i)}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \left\| \text{dev} \left(\mathbf{E} \left(\frac{1}{h^{(i)}} \mathbf{e}^{(i)} \otimes \mathbf{e}^{(i)} \right) \right) \right\| \quad (\text{I.19})$$

$$\frac{\partial \mathbf{g}^{\text{p}}}{\partial \Delta\gamma^{\text{p}}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \left\| \text{dev}(\mathbf{E} \mathbf{N}) \right\| - \frac{d\sigma_y}{d\Delta\gamma^{\text{p}}} \quad (\text{I.20})$$

である。

つり合い方程式を解く以前の段階では平衡状態を満たす応力の固有ベクトルが未知なために、前述のように主応力の固有ベクトルを構成則に用いた材料モデルでは、材料ヤコビアンを求めることは事実上不可能である。これに加えて、き裂開口ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{w}}$ が主応力の固有ベクトルによって規定されるのに対して、塑性ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{p}}$ は偏差応力によって与えられる流れベクトル \mathbf{N} で表される。このため、2つのひずみは異なる方向ベクトルで規定されているので、材料ヤコビアンを陽的に表すことがさらに難しくなる。そこで、本研究では次のように数値微分を用いて、仮想的なひずみの微小量 $\pm\delta\boldsymbol{\varepsilon}$ から得られる応力の変化率を材料ヤコビアンとして用いる。

$$\frac{d\boldsymbol{\sigma}}{d\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon} + \delta\boldsymbol{\varepsilon}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon} - \delta\boldsymbol{\varepsilon})}{2\delta\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (\text{I.21})$$

補遺 I.3 結晶塑性構成則

差分近似により離散化した式 3.20 の Cauchy 応力は,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{g}^w &= \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{t} \\
 &= \boldsymbol{\sigma}_0 + \Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{t} \\
 &= \boldsymbol{\sigma}_0 + \mathcal{J}\mathbb{L} : (\Delta \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d}^p - \Delta \mathbf{d}^w) - \boldsymbol{\sigma}_0 \text{tr} [\Delta \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d}^p - \Delta \mathbf{d}^w] \\
 &\quad - (\Delta \boldsymbol{\omega}^p + \Delta \boldsymbol{\omega}^w) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot (\Delta \boldsymbol{\omega}^p + \Delta \boldsymbol{\omega}^w) - \mathbf{t} = \mathbf{0}
 \end{aligned} \tag{I.22}$$

となる. ここで, Cauchy 応力の対称性を考慮すると $t_{ij} = t_{ji}$ となるので, 結合力によって生じる変形も対称となり, \mathbf{l}^w は対称行列で表される. よって, $\mathbf{d}^w = \mathbf{l}^w$ および $\boldsymbol{\omega}^w = \mathbf{0}$ より,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{g}^w &= \boldsymbol{\sigma}_0 + \mathcal{J}\mathbb{L} : (\Delta \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d}^p - \Delta \mathbf{d}^w) - \boldsymbol{\sigma}_0 \text{tr} [\Delta \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d}^p - \Delta \mathbf{d}^w] \\
 &\quad - \Delta \boldsymbol{\omega}^p \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \boldsymbol{\omega}^p - \mathbf{t} \\
 &= \mathbf{g}_0^w - (\mathbb{L} : \Delta \mathbf{d}^w - \boldsymbol{\sigma}_0 \text{tr} [\Delta \mathbf{d}^w]) - \mathbf{t} = \mathbf{0}
 \end{aligned} \tag{I.23}$$

と表すことができる. ここで,

$$\mathbf{g}_0^w = \boldsymbol{\sigma}_0 + \mathcal{J}\mathbb{L} : (\Delta \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d}^p) - \boldsymbol{\sigma}_0 \text{tr} [\Delta \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d}^p] - \Delta \boldsymbol{\omega}^p \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \boldsymbol{\omega}^p \tag{I.24}$$

とおいた. ここで採用している粘塑性型の結晶塑性モデルにおいて, 塑性に関する状態変数の時間積分を陰的に解くことは難しいために, 陽的な方法もしくは中点則などが一般的に用いられる. 陰的な時間積分を行う場合には塑性と損傷に関する状態変数を完全に連成して解く必要があるが, 陽的な方法もしくは中点則などの場合には必ずしも連成する意味はないため, 塑性と損傷を分離して解く非連成アルゴリズムを採用することになる. この場合, 上式は定数となり, Newton-Raphson 法を用いた式 (I.23) の接線係数および材料ヤコビアン の導出は大幅に簡略化される. なお, Newton-Raphson

法における接線係数と材料ヤコビアンは前項までと同じ過程で導出できるのでここでは省略する。また、本モデル化に際してはき裂はへき開面上に生じると仮定しているため、前節までのように接線入れ子解法によってき裂の方向に関する収束計算を行う必要はない。

補遺 II． 結合力埋込型損傷構成則における

Clausius-Duhem の散逸不等式に関する検討

本章では，提案した結合力埋込型損傷構成則が Clausius-Duhem の散逸不等式を満たすか検証する．Clausius-Duhem の散逸不等式は Cauchy 応力 $\boldsymbol{\sigma}$ ，全ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}$ ，質量密度 ρ ，単位質量あたりの Helmholtz の自由エネルギー Ψ^A ，温度 T ，エントロピー s および熱流束ベクトル \boldsymbol{q} によって次式で表される．

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho \left(\dot{\Psi}^A + \dot{T}s \right) - \frac{\text{grad}T}{T} \cdot \boldsymbol{q} \geq 0 \quad (\text{II.1})$$

$$\boldsymbol{\sigma} : (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^w) - \rho \left(\dot{\Psi}^A + \dot{T}s \right) - \frac{\text{grad}T}{T} \cdot \boldsymbol{q} \geq 0 \quad (\text{II.2})$$

ただし， $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ は弾性ひずみ， $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ は塑性ひずみ， $\boldsymbol{\varepsilon}^w$ はき裂開口による見かけ上のひずみである．Helmholtz の自由エネルギーは，弾性ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ ，温度 T ，等方硬化の内部変数 r ，移動硬化の内部変数 $\boldsymbol{\alpha}$ ，各方向のき裂開口量 $w^{(i)}$ を用いて，

$$\Psi^A(\boldsymbol{\varepsilon}^e, T, r, \boldsymbol{\alpha}, w^{(i)}) = \Psi^E(\boldsymbol{\varepsilon}^e) + \Psi^T(T) + \Psi^H(r, \boldsymbol{\alpha}) + \sum_{i=1}^{\text{NUM}} \Psi^W(w^{(i)}) \quad (\text{II.3})$$

で定義する．ただし， Ψ^E は弾性ポテンシャル， Ψ^T は熱力学ポテンシャル， Ψ^H は硬化ポテンシャル，および Ψ^W は1つのき裂の開口変位に関するポテンシャルであり，NUM は発生したき裂の個数である．き裂は上式を各変数で微分すると，

$$\dot{\Psi}^A = \frac{\partial \Psi^E}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \frac{\partial \Psi^T}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial \Psi^H}{\partial r} \dot{r} + \frac{\partial \Psi^H}{\partial \boldsymbol{\alpha}} : \dot{\boldsymbol{\alpha}} + \sum_{i=1}^{\text{NUM}} \frac{\partial \Psi^W(w^{(i)})}{\partial w^{(i)}} \cdot \dot{w}^{(i)} \quad (\text{II.4})$$

である。これを式 (II.2) に代入して、整理すると、

$$\begin{aligned} \left(\sigma - \rho \frac{\partial \Psi^E}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e - \rho \left(s + \frac{\partial \Psi^T}{\partial T} \right) \dot{T} + \sigma : (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^w) - \frac{\text{grad} T}{T} \cdot \boldsymbol{q} \\ - \rho \frac{\partial \Psi^H}{\partial r} \dot{r} - \rho \frac{\partial \Psi^H}{\partial \alpha} : \dot{\boldsymbol{\alpha}} - \rho \sum_{i=1}^{\text{NUM}} \frac{\partial \Psi^W(w^{(i)})}{\partial w^{(j)}} \cdot \dot{w}^{(j)} \geq 0 \end{aligned} \quad (\text{II.5})$$

である。弾性構成式および熱状態方程式は、

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \frac{\partial \Psi^E}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} \quad (\text{II.6})$$

$$s = \frac{\partial \Psi^T}{\partial T} \quad (\text{II.7})$$

で与えられ、式 (II.5) に代入すると、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} : (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^w) - \frac{\text{grad} T}{T} \cdot \boldsymbol{q} \\ - \rho \frac{\partial \Psi^H}{\partial r} \dot{r} - \rho \frac{\partial \Psi^H}{\partial \alpha} : \dot{\boldsymbol{\alpha}} - \rho \sum_{i=1}^{\text{NUM}} \frac{\partial \Psi^W(w^{(i)})}{\partial w^{(j)}} \cdot \dot{w}^{(j)} \geq 0 \\ \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p - \frac{\text{grad} T}{T} \cdot \boldsymbol{q} - \rho \frac{\partial \Psi^H}{\partial r} \dot{r} - \rho \frac{\partial \Psi^H}{\partial \alpha} : \dot{\boldsymbol{\alpha}} \\ + \left(\boldsymbol{\sigma} - \rho \sum_{i=1}^{\text{NUM}} \frac{\partial \Psi^W(w^{(i)})}{\partial w^{(j)}} \frac{\partial w^{(j)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^w} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^w \geq 0 \end{aligned} \quad (\text{II.8})$$

である。ここで、左辺の最終項以外は一般的な弾塑性モデルなので、それ以外の項の和が正であるとすれば、最終項とそれ以外の項に別けて、

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p - \frac{\text{grad} T}{T} \cdot \boldsymbol{q} - \rho \frac{\partial \Psi^H}{\partial r} \dot{r} - \rho \frac{\partial \Psi^H}{\partial \alpha} : \dot{\boldsymbol{\alpha}} \geq 0 \quad (\text{II.9})$$

$$\left(\boldsymbol{\sigma} - \rho \sum_{i=1}^{\text{NUM}} \frac{\partial \Psi^W(w^{(i)})}{\partial w^{(j)}} \frac{\partial w^{(j)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^w} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^w \geq 0 \quad (\text{II.10})$$

とできる。ただし、式 (II.10) は必要十分条件ではなく、Clausius-Duhem の散逸不等式を満たすための十分条件である。上式に式 (I.3) を代入すると、

$$\boldsymbol{\sigma} - \rho \sum_{i=1}^{\text{NUM}} \frac{\partial \Psi^W(w^{(i)})}{\partial w^{(j)}} \frac{\partial w^{(j)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^w} = \boldsymbol{\sigma} - \sum_{i=1}^{\text{NUM}} \rho h^{(j)} \frac{\partial \Psi^W(w^{(i)})}{\partial w^{(j)}} \quad (\text{II.11})$$

となる。ここで、結合ポテンシャル Ψ はき裂面における単位面積あたりのエネルギーであり、 Ψ^W は結合力モデルに関する単位質量あたりの Helmholtz の自由エネルギー、

$h^{(i)}$ は図 3.1 き裂面に垂直な代表体積における長さなので,

$$\Psi(w^{(i)}) = \rho h^{(i)} \Psi^w(w^{(i)}) \quad (\text{II.12})$$

とできる. よって, Clausius-Duhem の散逸不等式を満たすための十分条件は,

$$\sigma - \sum_{i=1}^{\text{NUM}} \frac{\partial \Psi(w^{(i)})}{\partial w^{(j)}} = 0 \quad (\text{II.13})$$

となる. ここで, 結合力 t はき裂開口変位 w による結合ポテンシャル Ψ^w の微分で与えられる. さらに, 任意のき裂が開口することによってその他のき裂が影響を受けないと仮定すると,

$$\frac{\partial \Psi(w^{(i)})}{\partial w^{(j)}} = \begin{cases} t^{(i)} & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (\text{II.14})$$

となる. 前述までのように固有応力の各方向にき裂が発生していると考えると $\text{NUM}=\text{DIM}$ となり,

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \sigma^{(i)} \mathbf{e}^{(i)} \otimes \mathbf{e}^{(i)} - \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \frac{\partial \Psi(w^{(i)})}{\partial w^{(i)}} \delta_{ij} \\ &= \sum_{i=1}^{\text{DIM}} \left(\sigma^{(i)} - \frac{\partial \Psi(w^{(i)})}{\partial w^{(i)}} \right) \mathbf{e}^{(i)} \otimes \mathbf{e}^{(i)} \\ &= \sum_{i=1}^{\text{DIM}} (\sigma^{(i)} - t^{(i)}) \mathbf{e}^{(i)} \otimes \mathbf{e}^{(i)} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$

となる. 以上により, 提案した結合力埋込型損傷構成則が Clausius-Duhem の散逸不等式を満足していることが示された.