

Applications of phase field crack growth model

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2021-04-05 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 高石, 武史 メールアドレス: 所属:
URL	https://mu.repo.nii.ac.jp/records/1500

勾配流型き裂進展モデルの拡張について

Applications of phase field crack growth model

高石 武史¹

Takeshi Takaishi

概要

木村と筆者によって提案された勾配流型のき裂進展モデルは数値計算のしやすさと拡張の容易さという特徴を持っている。粘弾性体のき裂進展や、水素脆化を伴うき裂進展のモデルへと拡張されたが、それぞれ現象に応じた拡張方法をとっている。本論文では、この2つの拡張の方法を比較することで、新しく導入された変数と元のき裂モデルでのエネルギーが直接的に関係しているかどうかでどちらを使えばよいのか判断する指標となることを示した。

1 初めに

フェーズフィールドモデルは、金属材料や過冷却液体における相分離を解明する数理モデルとして発展してきたが [1], 近年き裂進展現象のモデルとしても用いられている。Bourdin-Francfort-Marigo によって提案された脆性破壊モデル (B-F-M モデル) では、き裂部分を含んだ弾性体に対してフェーズフィールドを用いた近似エネルギーを提案し、その変分問題としてき裂形状を求められることを示した [2]。そこで用いた近似方法は画像区分平滑化問題 (Image segmentation problem) に関する Mumford-Shah 汎関数 [3] に対する Ambrosio-Tortorelli の近似 [4] で、このエネルギー汎関数がき裂を含む平板の面外変形におけるエネルギーと似通っていることを上手く利用している。

B-F-M モデルで提案された近似エネルギー $E = E_{elastic} + E_{surface}$ は、弾性変形によって材料に蓄えられる弾性エネルギー $E_{elastic}$ と、新しいき裂面を生成するために使われる表面エネルギー $E_{surface}$ の和として表されている。本論文では平板の面外変形によるき裂進展 (モード III) に話を限定し、き裂部分を含んだ2次元閉領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ において、 $u \in \mathbb{R}$ を平板の面に垂直方向の変位、 $z \in [0, 1]$ を $z = 1$ でき裂部分、 $z = 0$ で非き裂部分を表すフェーズフィールドとする (図 1(a))。このとき、B-F-M の近似エネルギー E は次のように書くことができる [2]。

$$E[u, z] = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (1-z(x))^2 |\nabla u(x)|^2 dx - \int_{\Omega} f(x)u(x) dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} G(x) \left(\epsilon |\nabla z(x)|^2 + \frac{1}{\epsilon} z(x)^2 \right) dx \quad (1)$$

ここで、 $f(x)$ は平板の各点にかかる外力、 $G(x) > 0$ はき裂長に対する臨界エネルギー解放率で各点における破壊に対する強さを表す。また、 $\epsilon > 0$ は近似に関する微小パラメータで、

¹ 武蔵野大学数理工学センター員 / 武蔵野大学工学部数理工学科教授

フェーズフィールドでき裂を表現する際の幅に相当する. E の第 1,2 項は弾性エネルギー $E_{elastic}$ を, 第 3 項は表面エネルギー $E_{surface}$ を表している. 破壊に関する Griffith 理論 [5] に基づいて導出されたこの近似エネルギーは, き裂進展にかかわらずエネルギーを Ω 全領域の積分で計算できるため, 数値シミュレーションには非常に都合が良い. Bourdin らはこの近似エネルギー (1) を最小にする u, z を数値的に求めることで変位とき裂の形状を求めたが [2, 6, 7], 残念ながら大域的最小解を求めるのは非常に数値計算のコストが高い.

筆者は木村とともに, B-F-M の近似エネルギー $E[u, z]$ から時間発展方程式を導くことで, より数値シミュレーションに適した勾配流モデルを提案した [8, 9].

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha_u \frac{\partial u}{\partial t} = \mu \operatorname{div} ((1-z)^2 \nabla u) + f(x, t) & x \in \Omega \\ \alpha_z \frac{\partial z}{\partial t} = \left(\epsilon \operatorname{div} (G(x) \nabla z) - \frac{G(x)}{\epsilon} z + \mu |\nabla u|^2 (1-z) \right)_+ & x \in \Omega \\ u = g(x, t) & x \in \Gamma_D \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & x \in \Gamma_N \\ \frac{\partial z}{\partial n} = 0 & x \in \Gamma \\ + \text{I.C. ,} \end{array} \right. \quad (2)$$

ここで, $(a)_+ = \max(a, 0)$. μ は弾性を表す Lamé 定数の一つである. $\Gamma = \partial\Omega$ とし, 境界上の変位については, Γ_D においては Dirichlet 境界として $g(x, t)$ を設定し, $\Gamma_N = \Gamma \setminus \Gamma_D$ には Neumann 境界を設定する. また, α_u, α_z は勾配流の方程式導出に関係する定数である.

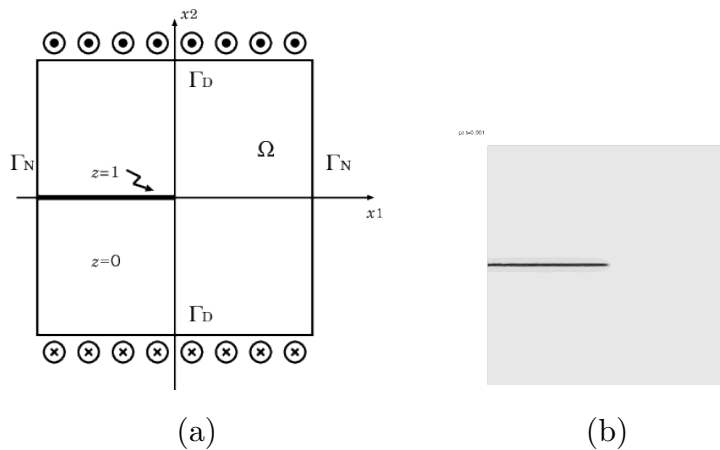


図 1 (a) Mode-III き裂進展の数値計算における領域 (境界 Γ_D における変位は領域に垂直方向で, $x > 0$ で $g(x, t) > 0$, $x < 0$ で $g(x, t) < 0$ とし, 各々 \odot, \otimes と表示). (b) フェーズフィールド z の初期分布 ($z = 0$ が白, $z = 1$ が黒になるように表示).

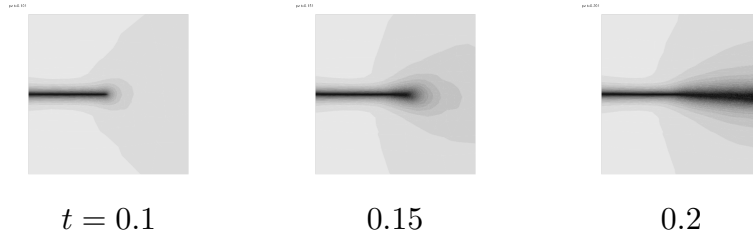


図 2 (2) の数値シミュレーションにおける z の時間発展 ($\alpha_u = 10^{-5}, \alpha_z = 10^{-2}, \epsilon = 0.05, \mu = 19.4, G = 0.5, g(x, t) = \pm 1.5t$).

この方程式 (2) は B-F-M の近似エネルギー $E[u, z]$ の第 1 変分から導出される.

$$\begin{aligned} \alpha_u \frac{\partial u}{\partial t} &= -\frac{\delta E}{\delta u} \\ \alpha_z \frac{\partial z}{\partial t} &= -\frac{\delta E}{\delta z}, \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、 $\frac{\delta E}{\delta u}$ と $\frac{\delta E}{\delta z}$ はそれぞれ近似エネルギー $E[u, z]$ に対する u と z の第 1 変分である. (2) は、全エネルギー E の勾配に応じた速度で変位 u とフェーズフィールド z の分布が時間とともに変化することでき裂進展現象を表現している. 図 2 では、数値計算ツール FreeFEM[10] を用いた (2) の数値シミュレーション結果を紹介する. これらの図では $z = 1$ が黒、 $z = 0$ が白となるようにした. $t = 0$ に初期き裂 (図 1(b)) を設定し、 $g(x, t)$ を時間に比例して大きくしていくとついには破断する (図 2). [9] における数値計算結果ではき裂の分枝や再結合が再現できることを示している. このモデル (2) はき裂進展数値シミュレーションを行うに当たり多くの利点を備えている: 1) き裂の進展方向を自動的に選ぶことができるため、き裂の分枝等も再現でき、2) き裂が進展しても計算領域を変更する必要がないため、固定した計算領域で数値シミュレーションを続けることができ、3) 微小パラメータ $\epsilon (> 0)$ を導入することで、き裂先端での応力発散を抑えることができ、4) モデルのシンプルさを損なわずに拡張が可能といった特徴を持つ.

本論文では 4) の特徴に焦点をあて、勾配流型き裂進展モデル (2) の 2 通りの拡張方法と、その適用の指針について述べる. (2) は脆性破壊に関するモデルで、弾性体の変位とき裂の有無を表現するフェーズフィールドを変数として時間発展方程式を構成している. ここに新しい変数を導入することで、異なる複雑な破壊現象のモデルを導出する. 一つはエネルギーの拡張によるモデルであり、新しく導入した変数が元の変数、変位やフェーズフィールドと密接に関係している場合である. もう一つは、き裂進展の枠組みはそのままにして必要な時間発展方程式を追加するもので、新しく導入した変数が物理パラメータを通して間接的に元の変数と関係している場合である.

第 2 節では近似エネルギー E を拡張することで Maxwell 型粘弾性を持つ材料に対するき裂進展モデルを概観し、近似エネルギーの変化が粘性によりコントロールされ、どのようにき裂進展に反映されているかについて述べる. 第 3 節では水素原子濃度の拡散方程式と、その

拡散係数やエネルギー解放率等の物性変数との関係式を追加することで導出した、水素脆化を伴うき裂進展モデルを概観し、水素原子濃度と元のき裂進展モデルとの関係について述べる。第4節ではこれら2種類の現象の性質とモデル方程式導出手法の違いについて述べ、モデル拡張方法適用の指針についてまとめる。

本論文の内容は、田中良巳氏(横浜国立大学)、木村正人氏(金沢大学)との共同研究により得られた成果の一部を含んでいる。

2 Maxwell 型粘弾性モデル

おもちゃから飛行機の機体に至るまで、いわゆる工業用プラスチック製品は現在の生活のあちこちで使われている。これらのプラスチック材料(高分子材料)の破壊においては、その粘弾性的性質が大きく影響する。バネとダッシュポット(ダンパー)が直列に結合した形で表される Maxwell 型粘弾性モデルは、非常にシンプルながら高分子材料の粘弾性特性を説明できるものである。ここでは、バネとダッシュポットのセットを Maxwell モジュールと呼び、バネの切断が材料の破壊を表し、ダッシュポットの伸びは内部歪 $e(x) \in \mathbb{R}^2$ (モード III の場合)として表すことにする。通常の弾性体モデルではバネの伸びに起因する歪は ∇u となるが、Maxwell モジュールにおけるバネ部分の伸びから生じる歪は $\nabla u - e$ となる。従って、Maxwell 型粘弾性体におけるき裂進展モデルにおける近似エネルギー \mathcal{E} は次のように書けることを田中氏は指摘した [11]:

$$\mathcal{E}[u, z, e] = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (1-z)^2 |\nabla u - e|^2 dx - \int_{\Omega} f u dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \gamma \left(\epsilon |\nabla z|^2 + \frac{1}{\epsilon} z^2 \right) dx. \quad (4)$$

(3)と同様に、この近似エネルギー \mathcal{E} に対して u, z, e で第1変分を取ることで、次の Maxwell 型粘弾性体のき裂進展モデルが導出される [11, 15]:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha_u \frac{\partial u}{\partial t} = \mu \operatorname{div} ((1-z)^2 (\nabla u - e)) + f(x, t) & x \in \Omega \\ \alpha_z \frac{\partial z}{\partial t} = \left(\epsilon \operatorname{div} (G(x) \nabla z) - \frac{G(x)}{\epsilon} z + \mu |\nabla u - e|^2 (1-z) \right)_+ & x \in \Omega \\ \alpha_e \frac{\partial e}{\partial t} = (1-z)^2 (\nabla u - e) & x \in \Omega \\ u = g(x, t) & x \in \Gamma_D \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & x \in \Gamma_N \\ \frac{\partial z}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial n} (\nabla u - e) = 0 & x \in \Gamma \\ + \text{I.C.}, & \end{array} \right. \quad (5)$$

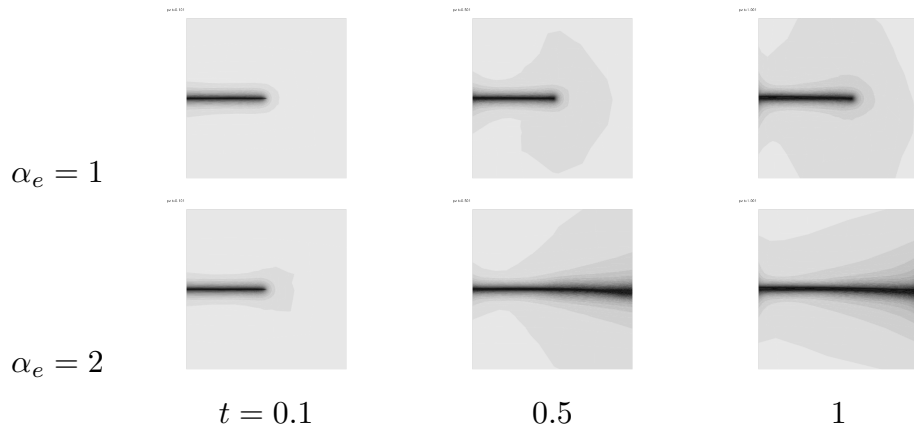


図3 Maxwell 粘弾性体のモデル (5) の数値シミュレーションにおける, フェーズフィールド z の時間発展 ($\alpha_u = 10^{-5}, \alpha_z = 10^{-2}, \varepsilon = 0.05, \mu = 19.3, \gamma = 0.5, g(x, t) = \pm 1.5t$).

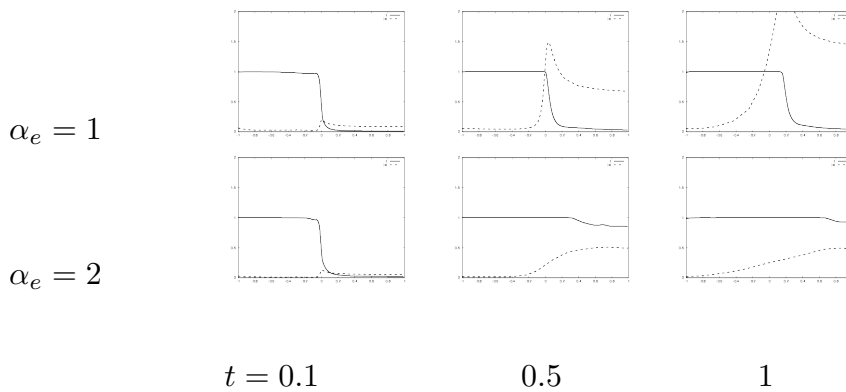


図4 図3における, $x_2 = 0$ の断面での z (実線) と $|e|$ (破線) の分布 ($\alpha_u = 10^{-5}, \alpha_z = 10^{-2}, \varepsilon = 0.05, \mu = 19.3, \gamma = 0.5, g(x, t) = \pm 1.5t$).

ここで, $\alpha_e = \eta$ は Maxwell モジュールのダッシュポット部分の粘性係数である.

数値シミュレーションを行うと, き裂に関するしきい値があることが見出される. ダッシュポットの粘性係数を $\alpha_e = 1, 2$ とした場合の数値シミュレーション結果を図3に示す. $\alpha_e = 2$ ではき裂が進展し, $t = 1$ では破断しているが, $\alpha_e = 1$ の場合にはき裂進展が非常に遅くなり, 破断に至っていない. き裂面に沿った断面におけるフェーズフィールド z と, 内部歪の大きさ $|e|$ の分布を図4で確認すると, $\alpha_e = 1$ ではき裂先端付近 (z が1から0に急激に変化している区間) において, ダッシュポットが伸びる (内部歪 $|e|$ が大きくなる) ことでき裂の進展が抑制されていることがわかる. 一方, $\alpha_e = 2$ の場合には, ダッシュポットが伸び切らないうちにき裂が進展し, 破断していることがわかる.

エネルギーの緩和の視点から見ると, 元のき裂進展モデル (2) は変位 u を反映した弾性エネルギーとフェーズフィールド z によって表された表面エネルギーが競合しながら, 全エネルギーを減らしていく過程でき裂が進展していく (図5(a)). 一方, Maxwell 粘弾性体のき裂進展モデル (5) では, 同じように弾性エネルギーと表面エネルギーの競合ではあるが, 変位に

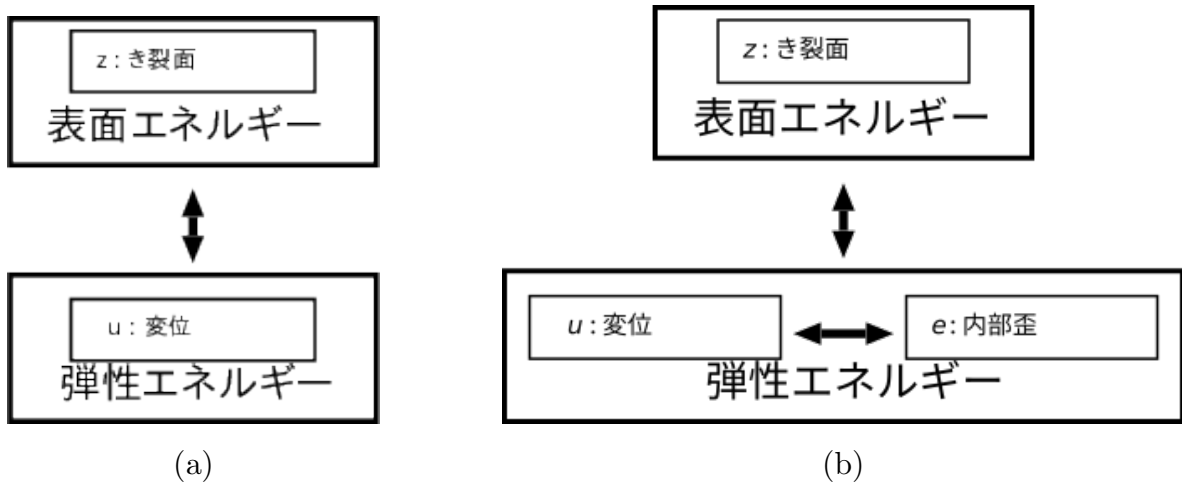


図5 (a) TK モデル (2) では、変位 u による弾性エネルギーと、フェーズフィールド z による表面エネルギーの競合によってき裂進展が生じる。(b) Maxwell 粘弾性体のモデル (5) では、弾性エネルギーは変位 u と内部歪 e の競合で変化する。

対して内部歪がどれだけ追従できているかで弾性エネルギーが変化するので、ダッシュポットの粘性によってき裂の進展がコントロールされていることがわかる (図 5(b)). このように、Maxwell 粘弾性体のき裂進展モデルは弾性エネルギーと表面エネルギーの競合という枠組みを保ちつつ新たな変数を導入する。そのため、(4) のようにエネルギーに新しい変数を加えても、き裂進展モデル (5) は見通しの良さを保ったまま拡張することができる。

3 水素脆化を伴うき裂進展モデル

鋼、アルミニウム、チタンなどの金属への水素原子の侵入は材料を脆化させ破壊に至りやすくする。この現象は水素原子が金属結晶内を拡散することに起因すると考えられており、そのメカニズムについてはいくつか提案されているが [12, 13]、破壊時の水素原子分布を観測することが難しいために十分解明されているとは言えない。

ここでは、正規化された水素原子濃度 $C(x, t)$ を導入し、水素原子の分布は拡散方程式に従うと仮定して考えていく。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(D_C \nabla C) \quad (6)$$

また、水素原子濃度の拡散係数 D_C はき裂部分近傍では指数関数的に大きくなり、き裂進展に必要な臨界エネルギー解放率は水素原子濃度のみにより ($G(x, t) = G(C(x, t))$)、水素原子濃度が上昇することで低下する ($G'(C) < 0$) と考え、次のように設定しよう。

$$G(C) = G_0(1 - C) + G_1 C \quad (7)$$

$$D_C(z) = D_0 \exp(z \log(D_1/D_0)) = D_0^{1-z} D_1^z \quad (8)$$

ここで、 $0 < G_1 < G_0, 0 < D_0 < D_1$ とする。水素脆化を伴うき裂進展として、(2) は次のよ

うに拡張される [14, 15]:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha_1 \frac{\partial u}{\partial t} = \mu \operatorname{div}((1-z)^2 \nabla u) + f(x, t) & x \in \Omega \\ \alpha_2 \frac{\partial z}{\partial t} = \left(\epsilon \operatorname{div}(G(C) \nabla z) - \frac{G(C)}{\epsilon} z + \mu |\nabla u|^2 (1-z) \right)_+ & x \in \Omega \\ \frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div}(D_C(z) \nabla C) & x \in \Omega \\ u = g(x, t) & x \in \Gamma_D \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & x \in \Gamma_N \\ \frac{\partial z}{\partial n} = 0 & x \in \Gamma \\ + \text{I.C.} \end{array} \right. \quad (9)$$

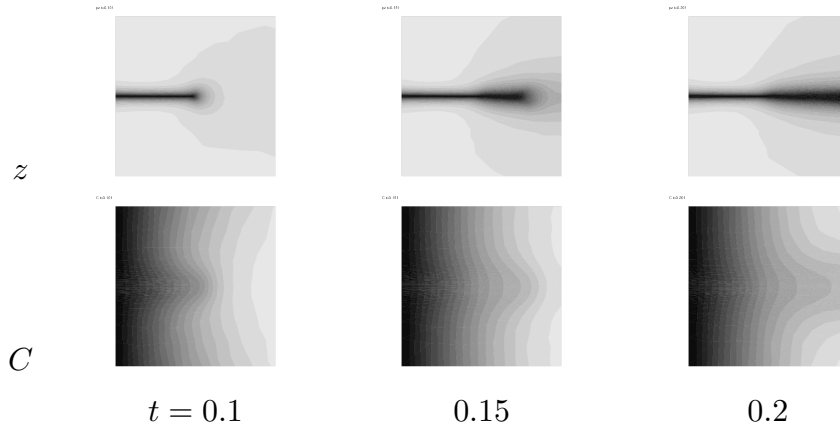


図6 水素脆化を伴うき裂進展モデル (9) の数値シミュレーションにおける、フェーズフィールド z と水素原子濃度 C の時間発展 ($\alpha_u = 10^{-5}$, $\alpha_z = 10^{-2}$, $\epsilon = 0.05$, $\mu = 19.4$, $G_0 = 0.5$, $G_1 = 0.05$, $D_0 = 1$, $D_1 = 100$, $g(x, t) = \pm 1.5t$).

図2と同じ条件において、(9)のモデルに対して数値シミュレーションを行うことで、き裂先端部分での水素濃度上昇と、それによって引き起こされる金属材料の脆化によるき裂進展の加速が見出される(図6)。き裂面に沿った断面におけるフェーズフィールド z と水素原子濃度 C の分布を確認すると、拡散係数 D_C を定数にした場合(図7(上))に比べて、き裂近傍で拡散係数が急激に上昇する(フェーズフィールドに対して指数関数的に上昇する)場合はき裂の進展がさらに加速していることがわかる(図7(下))。

このモデルでは水素原子濃度とその分布の変化がき裂進展に大きな役割を果たすが、それらは弾性エネルギーと表面エネルギーの緩和に対しては拡散係数 D_C と臨界エネルギー解放率 G を通して間接的に影響するのみである(図8)。そのため、簡易的な手法ではあるが、エネル

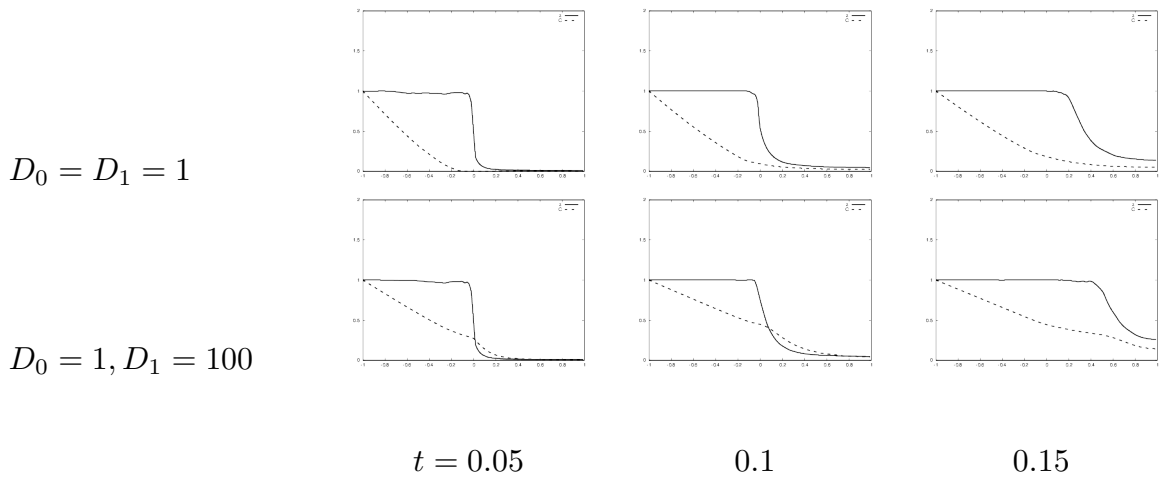


図7 図6について, $D_C = 1(D_0 = D_1 = 1)$ (上), $D_0 = 1, D_1 = 100$ (下)における $x_2 = 0$ の断面での z (実線) と C (破線) の分布 ($\alpha_u = 10^{-5}, \alpha_z = 10^{-2}, \varepsilon = 0.05, \mu = 19.4, G_0 = 0.5, G_1 = 0.05, g(x, t) = \pm 1.5t$).

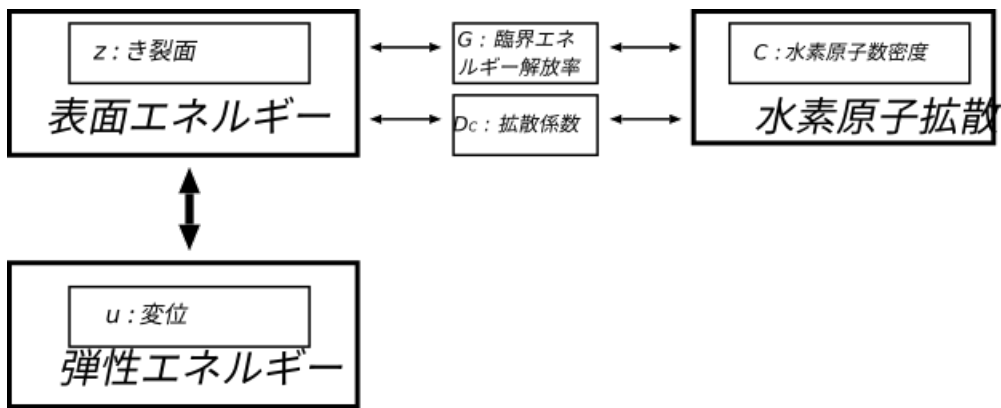


図8 水素脆化を伴うき裂進展モデルでは, 水素原子の拡散係数 D_C と臨界エネルギー解放率 G を介して水素原子濃度とその分布が間接的にき裂進展と関係している.

ギー表式を変更せずに新たな方程式を追加することで, モデル方程式を複雑にすること無くき裂進展の加速現象を再現することができる.

4 Concluding remarks

この論文では, 筆者と木村の導出したき裂進展モデル (フェーズフィールド勾配流モデル) の2通りの拡張方法について述べた.

Maxwell 型粘弾性体のき裂進展モデルでは, 粘性をもたらすダッシュポット部の歪 (内部歪) がバネ部の伸び (歪) に直接影響するため, 弾性エネルギーの表式を変更するとともに, 内部歪の時間発展を解くことで, き裂進展が粘性によってコントロールされる現象を再現することができた. 従って, 新しく導入する変数が弾性エネルギー (または表面エネルギー) に直接

影響する場合は、エネルギーの表式を変更し、再度勾配流の方程式を求めることで、新しいき裂進展のモデルを導出することができると考えられる。

一方、水素脆化を伴うき裂進展モデルでは、水素原子濃度は弾性エネルギーと表面エネルギーに間接的に影響するため、水素原子濃度の拡散方程式を独立に追加しても水素脆化によるき裂進展の加速現象を再現することができた。従って、新しく導入する変数が弾性エネルギー(または表面エネルギー)に間接的に影響する場合は、き裂進展の方程式はそのままにして、新しい変数のための時間発展方程式を追加し、それぞれの方程式に現れる物性パラメータとの関係式を設定することで、新しいき裂進展のモデルを複雑さを増すこと無く導出できると考えられる。

以上の結果より、勾配流によるき裂進展モデルを拡張する場合には、新しく導入した変数が元のき裂進展モデルの弾性エネルギーや表面エネルギーに直接影響する場合にはエネルギー表式を変更して再度勾配流方程式を導出することとで、また、影響が間接的な場合には新しい変数のための時間発展方程式を追加し、それぞれの方程式に現れる物性変数がどのような関数になるか設定することで、それぞれ拡張モデルが作り出せることがわかった。

勾配流を用いたフェーズフィールドき裂進展モデルは、材料の変位とき裂の時間発展の組み合わせで表せる非常に見通しの良いモデルであり、エネルギー関数の1次変分により導出できるためにより複雑な現象へ拡張することが容易である。問題に応じた拡張方法を選ぶことで見通しの良さを保ったモデルとして拡張することができるため、今後も様々な破壊現象への拡張が期待できる。

尚、水素脆化を伴う場合において、複雑にはなるものの、エネルギー表式から作り直す方法でのモデル化も可能である。本論文で取り上げたモデルと、エネルギー表式から作り直す方法でのモデル化することで導出したモデルとにどのような違いが現れるかについては、今後明らかにしていきたい。

本研究は科研費 (17K05378, 17K05609, 17H02857) の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] R.Kobayashi, Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth. *Physica D*, **63**(1993), 410–423.
- [2] B. Bourdin, G. A. Francfort and J.-J Marigo, Numerical experiments in revisited brittle fracture, *J. Mech. Phys. Solids*, **48**(2000), 797–826.
- [3] D. Mumford, J. Shah, Optimal approximations by piecewise smooth functions and associated variational problems, *Comm. Pure Appl. Math.*, **42**(1989), 577–685.
- [4] L. Ambrosio and V. M. Tortorelli, On the approximation of free discontinuity problems, *Boll. Un. Mat. Ital.*, **7**(1992), 105–123.
- [5] A.A.Griffith, The phenomenon of rupture and flow in solids. *Phil. Trans. Royal Soc. London*, **A221**(1921), 163–198.

- [6] B.Bourdin, Numerical implementation of the variational formulation of brittle fracture. *Interfaces Free Bound.*, **9**(2007), 411–430.
- [7] M.Buliga, Energy minimizing brittle crack propagation. *J. Elasticity*, **52**(1998/99), 201–238.
- [8] T.Takaishi and M.Kimura, Phase field model for mode III crack growth, *Kybernetika*, **45**(2009), 605–614.
- [9] M.Kimura, T.Takaishi, A phase field approach to mathematical modeling of crack propagation, *A mathematical approach to research problems of science and technology Mathematics for Industry* **5**(2014), 161–170.
- [10] F.Hecht, New development in FreeFem++, *J. Numer. Math.*, **20**, pp.251-265, (2012)
- [11] Y.Tanaka, T.Takaishi, Gradient Flow Model of Mode-III Fracture in Maxwell-type Viscoelastic Materials, *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**(2020), 084801.
- [12] A.R. Troiano, The role of Hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals, *Trans. of ASM*, **52**(1960), 54–80.
- [13] C.D.Beachem, A new model for Hydrogen-asisted cracking, *Metall. Trans.*, **3**(1972), 437–451.
- [14] T.Takaishi, Phase Field Crack Growth Model with Hydrogen Embrittlement, *Mathematical Analysis of Continuum Mechanics and Industrial Applications*, (2016), 27–34.
- [15] M.Kimura, T.Takaishi, S.Alfat, T.Nakano, Y.Tanaka, Phase field models for crack growth in industrial applications: thermal stress problem, hydrogen embrittlement, viscoelasticity, submitted to *SN Applied Sciences*.

(原稿提出: 2021 年 1 月 12 日; 修正稿提出: 2021 年 2 月 6 日)