論　　文　ORIGINAL PAPERS

き裂模様の評価のためのモンテカルロ・シミュレーション
——三角格子モデル——[†]

外池泰彦[*]　栗山　憲[**]　嶋村修二[***]

Monte Carlo Simulation for Evaluating Crack Patterns
—— Triangular Lattice Model ——

by

Yasuhiko SOTOIKE[*], Ken KURIYAMA[**] and Shuji SHIMAMURA[***]

Features of crack patterns are explored by performing computer simulations of crack growth in the two-dimensional model systems of triangular lattice. The simulations are concerned with crack growth in brittle materials to which the stain energy is supplied nonuniformly.

It is shown that the present model gives different crack patterns and strain energy distributions, which are almost independent of the shape of lattice. The results of simulations have some implications in evaluating crack patterns in real materials which were exposed to thermal shock, radiation and so on ; the differences in materials and external influences could be conjectured from the characteristic aspects of observed crack patterns.

Key words : Crack pattern, Crack growth, Strain energy, Computer simulation, Brittle materials

1　序　　論

材料の表面に多数のき裂が観測される場合，そのき裂模様は，材料の種類，材料に加えられた力などに応じて，多様な様相を示す．多数のき裂の全体像の特徴をとらえて，材料の特性と材料のおかれていた環境を推測することは，工学的見地から重要である．

近年，単純なモデル系を用いて，破壊の機構を考察した研究[1),2)]が盛んになってきた．き裂模様についても，弾性ばね網の破壊の計算機シミュレーションによる研究[3),4)]，乾燥によるき裂の成長を調べた実験的研究[5)]などがある．また，計算機シミュレーションにより，クリープ疲労き裂成長を考察した研究も報告されている[6)]．

き裂模様に関するこれまでの基礎的な研究は，き裂模様が自己相似的な特徴をもち，フラクタル次元により評価できることを示した[7)]．他方，筆者らは，以前の研究において[8),9)]，空間的にランダムにひずみエネルギーの蓄積するぜい性物質を対象に，単純なモデルによるき裂成長の計算機シミュレーションを行った．そこでは，正方形の“要素”からなる二次元系を用いて，き裂模様とひずみエネルギー分布の相関性を考察した．

本研究では，同様のき裂成長モデルを二次元三角格子系に適用する．この系を採用するのは，正方格子系よりもき裂成長方向の自由度を大きくするためである．また，以前の研究[8),9)]では，簡単のため，系内の要素の境界におけるき裂発生に対する抵抗値を同一としたが，本研究ではこの抵抗値に統計的なばらつきをもつ系を対象にする．したがって，現実の材料物質のき裂模様を評価する上で，より実際的な知見を期待できる．本研究では，三角格子モデルによるシミュレーションの結果をもとに，種々の材料表面におけるき裂模様の評価について考察する．

2　モデルとシミュレーション

空間的にランダムにひずみエネルギーの蓄積するぜい性物質におけるき裂成長を，ひずみエネルギーの蓄積，解放，移動の過程の繰り返しとしてモデル化する．モデル系として，Fig. 1(a)のような二次元の三角格子を考える．おのおのの三角形を“要素”，三角形の各辺を“境界”と呼ぶことにし，き裂は境界に発生，進展するものとする．各境界は，き裂の発生に対する抵抗値をもつ．要素，iとjの境界の抵抗値を$E_c(i,\ j)$とする．$E_c(i,\ j)$は，対（i，j）に関して正規分布に従って，各境界に割り当てられる．このようにして，

†　原稿受理　平成2年12月27日　Received Dec. 27, 1990
*　学生会員　山口大学大学院　宇部市常盤台，Graduate Student, Yamaguchi University, Tokiwadai, Ube
**　山口大学工学部　宇部市常盤台，Faculty of Engineering, Yamaguchi University, Tokiwadai, Ube
***　正会員　山口大学工学部　宇部市常盤台，Faculty of Engineering, Yamaguchi University, Tokiwadai, Ube

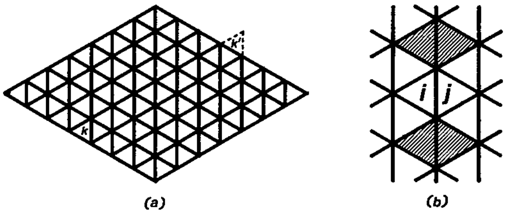

Fig. 1. Two-dimensional model system of triangular lattice.

統計的に分布した境界抵抗値をもつ要素からなる系を設定する.

各要素は，ランダムにひずみエネルギーを蓄積していき，隣り合う要素のひずみエネルギーがある限界値を超えたとき，その境界にき裂が発生するものとする．そこで，次のような一連の過程を行う．まず，全くランダムに一つの要素を選び，そこに ΔE の大きさの"ひずみエネルギー"を入力する．この過程を繰り返し，系の内部にひずみエネルギーを蓄積していく．入力過程により，隣り合う要素，i と j のひずみエネルギー，E_i と E_j が

$$E_i \cdot E_j \geq [E_C(i,\ j)]^2 \tag{1}$$

を満足した時，i と j の境界にき裂を発生させる．したがって，境界抵抗値 $E_C(i,\ j)$ は，隣り合う要素の境界にき裂を発生させるために必要なひずみエネルギーである.

つぎに，き裂の発生に伴い，i と j から

$$E_r(i,\ j)=2 \cdot g \cdot E_C(i,\ j) \tag{2}$$

のひずみエネルギーを解放する．すなわち，系の外部へ取りさる．ここで，g はひずみエネルギーの解放の程度を表わすパラメータである．要素，i と j のひずみエネルギーは，き裂発生前の E_i と E_j から，それぞれ

$$E_i'=f\left[E_i-\frac{1}{2}E_r(i,\ j)\right] \tag{3}$$

$$E_j'=f\left[E_j-\frac{1}{2}E_r(j,\ j)\right] \tag{4}$$

に減少する．すなわち，解放エネルギー $E_r(i,\ j)$ を取りさった残りのひずみエネルギーのうち，f の割合だけを残留エネルギーとして i と j に残す．さらに余ったひずみエネルギー，すなわち

$$(E_i+E_j)-E_r(i,\ j)-(E_i'+E_j')$$
$$=(1-f)\cdot[E_i+E_j-E_r(i,\ j)] \tag{5}$$

は，Fig. 1 (b) に示したき裂先端の 4 個の要素に均等に分配する.

以上のひずみエネルギーの解放と移動の過程を行った後，ひずみエネルギーの変化したすべての要素に属する境界に対して，式 (1) が満足されるかどうかを調べる．もし満足する境界があればき裂が進展する．式 (1) を満足する境界が複数ある場合には，$E_i \cdot E_j-[E_C(i,\ j)]^2$ の値の最も大きな境界を優先する．その値の等しい境界がある場合には，それらから一つをランダムに選ぶ．これらの過程を繰り返していき，き裂の成長が止まったら，入力過程に戻る.

上記の方法により，$N_G=12800$ (=80×80×2) 個の要素からなる系に対して，き裂成長のモンテカルロ・シミュレーションを実行した．すべての要素のひずみエネルギーが 0 の状態からシミュレーションを開始し，系全体の境界については周期的境界条件を用いた．すなわち，Fig. 1 (a) において，系の外部の要素 k' は系内部の要素 k と同一であるとして取り扱われた.

本研究のモデルは 5 個のパラメータを含む．入力エネルギー ΔE，平均境界抵抗値 E_C（正規分布の平均値），境界抵抗値のばらつきの程度 σ（正規分布の標準偏差），ひずみエネルギー解放率 g，ひずみエネルギー残留率 f である．これらのパラメータの値の異なる系に対してシミュレーションを実行し，き裂模様とひずみエネルギー分布を比較した.

3　き裂模様の評価

3・1　定常状態

以前の正方格子系に対する研究で，系はひずみエネルギー分布の安定化する定常状態に落ちつくことが指摘された[8),9)]．本研究の三角格子系でも，き裂の数が 4000 程度になると，系内のひずみエネルギーの分布は変化しなくなる．$\Delta E=1$，$E_C=25$，$\sigma=2$，$g=0.1$，$f=0$ の系の例を Fig. 2 に示す．図は，外部から系に入力された要素当りのエネルギー，$E_{in}=(N \cdot \Delta E)/N_G$（$N$ は入力過程の回数）の増加と共に，き裂の数

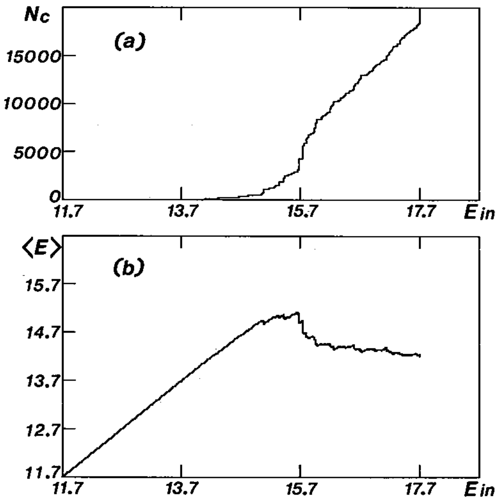

Fig. 2. Dependence of the number of cracks (N_C) and the average strain energy per element ($\langle E\rangle$) on the input strain energy (E_{in}) per element for the system with $\Delta E=1$, $E_C=25$, $\sigma=2$, $g=0.1$ and $f=0$.

N_c と要素当りの平均ひずみエネルギー，$\langle E\rangle=(\sum_i E_i)/N_G$ がどのように変化していくかを表わしている．き裂発生初期の段階では，$\langle E\rangle$ は E_{in} にほぼ比例して増加していくが，き裂の数が4000程度になると，$\langle E\rangle$ がほぼ一定の定常状態になる．そこで以下では，き裂の数が4000の時のき裂模様と安定化したひずみエネルギー分布を示し，き裂模様の評価について考察を加える．

3・2　き裂模様と物質特性

モデルを特徴づける5個のパラメータのうち，平均境界抵抗値 E_c，境界抵抗値の幅 σ，エネルギー解放率 g，エネルギー残留率 f の4個は，系の性質を特徴づけている．これらのパラメータの値は，それぞれ異なる効果として，き裂模様とひずみエネルギー分布の特徴に反映される．

Fig. 3 と Fig. 4 は，$E_c=25$ と $E_c=5$ の系のき裂模様とひずみエネルギー分布を示す．他のパラメータは，$\Delta E=1$，$\sigma=2$，$g=0.1$，$f=0$ で，共通である．ひずみエネルギーの分布については，2種類の分布，すなわち，大きさの分布，$P(E)$ と空間分布，E_i ((a)図のAとBを結ぶ線上の要素 i のひずみエネルギー）を示した．両者の比較から明らかなように，E_c の大き

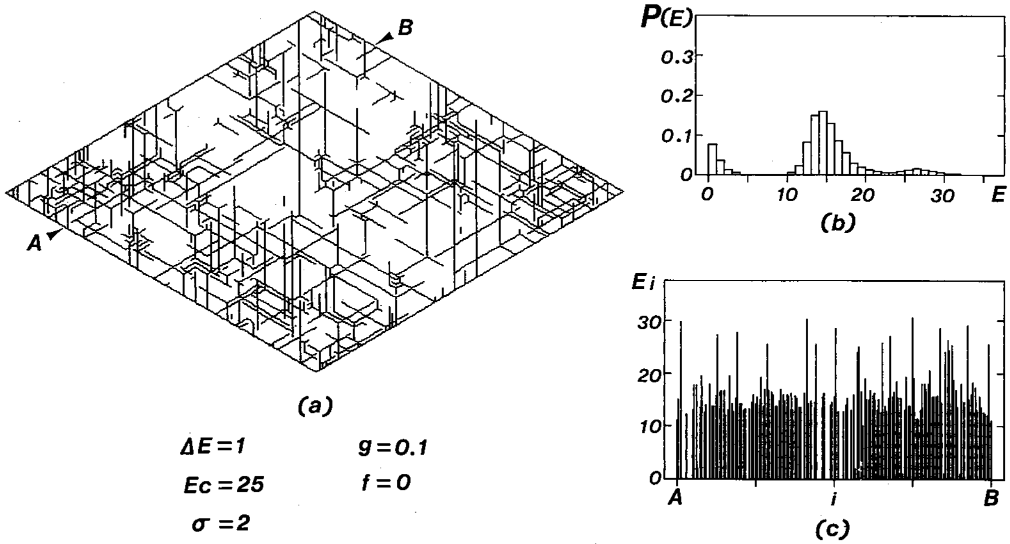

Fig. 3. Crack pattern and strain energy distribution for the system with $\Delta E=1$, $E_c=25$, $\sigma=2$, $g=0.1$ and $f=0$.

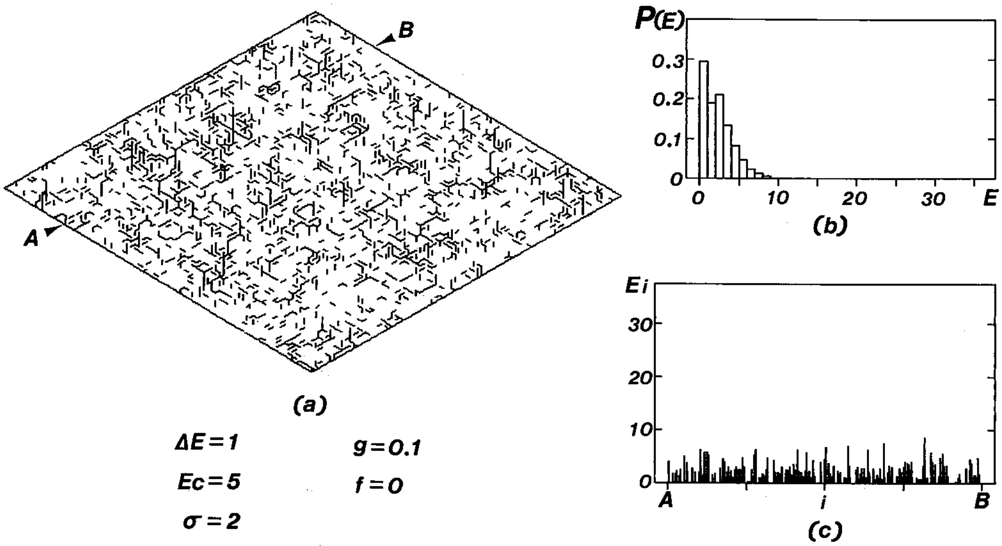

Fig. 4. Crack pattern and strain energy distribution for the system with $\Delta E=1$, $E_c=5$, $\sigma=2$, $g=0.1$ and $f=0$.

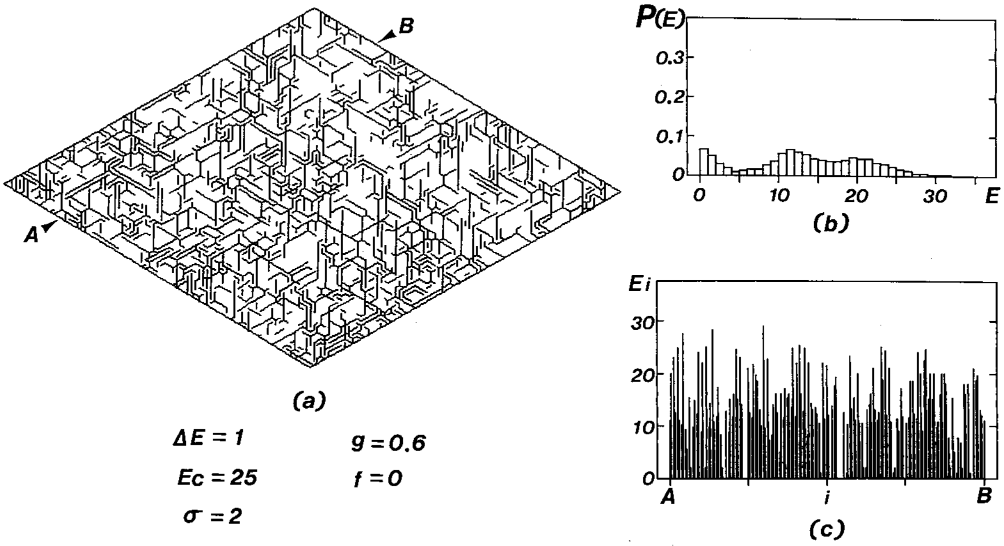

Fig. 5. Crack pattern and strain energy distribution for the system with $\Delta E=1$, $E_c=25$, $\sigma=2$, $g=0.6$ and $f=0$.

な系ほど，平均として長いき裂が生じる．これは，E_c が大きいほど，各要素が大きなひずみエネルギーを蓄積しているため，き裂発生の際にき裂先端部に大きなひずみエネルギーが集中する結果，き裂が伸びやすいことによる．

Fig. 5 は解放エネルギーの大きな系に対する結果を示す．Fig. 3 の系と比較して，パラメータの違いは $g=0.6$ となっているだけである．g の大きな系では，き裂は相対的に短くなり，ほとんど一様に分布する傾向がある．これは，き裂の発生に伴う解放エネルギーが大きいため，き裂進展が抑えられやすく，主に入力過程がき裂の空間的分布を支配するためである．ひずみエネルギーの大きさの分布は，広い範囲にわたり一様化し，ひずみエネルギーの空間的分布は要素ごとに大きく変動している．

Fig. 6 は，残留エネルギーの大きな系のき裂模様とひずみエネルギー分布を示す．Fig. 3 の系と比較して，パラメータの違いは，$f=0.7$ となっている．f の大きな系では，g の大きな系と同じく，き裂は相対的に短くなる．しかし，空間的な偏りが目だつようになる．これは，各要素がき裂発生後もある程度のひずみエネルギーを残しているため，局所的にき裂が発生，進展しやすくなることによる．しかし，き裂先端部のひずみエネルギーの集中度が弱いため，き裂は伸びにくい．

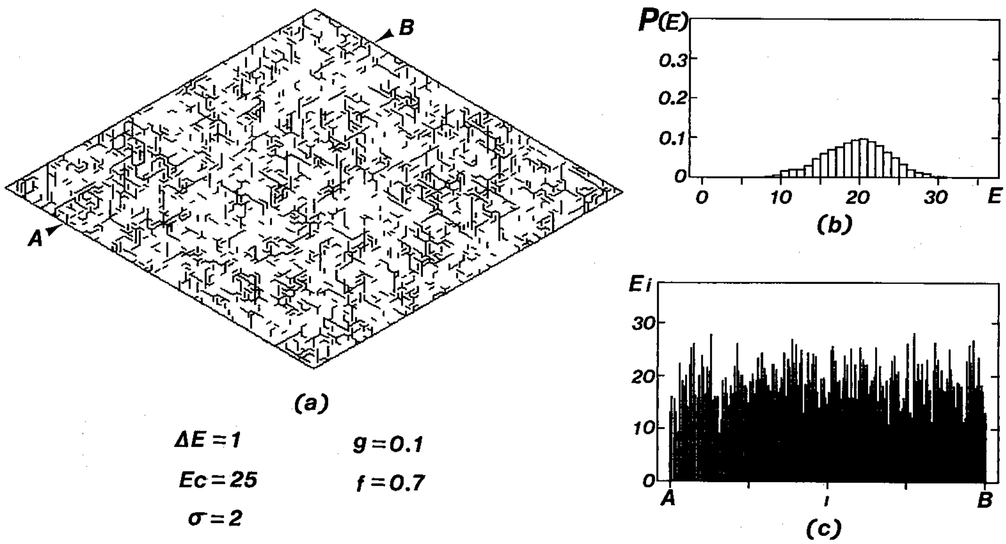

Fig. 6. Crack pattern and strain energy distribution for the system with $\Delta E=1$, $E_c=25$, $\sigma=2$, $g=0.1$ and $f=0.7$.

ひずみエネルギーの大きさの分布は，gの大きな系と対照的である．すなわち，幅の狭い大きさの分布となり，空間的には，ほぼ一様化する．

境界抵抗値の幅 σ の影響については，$\sigma=0$ の場合の結果[10]と比較して，弱い強度をもつ境界にき裂が若干偏ってくる．しかし，き裂の平均的長さ，他のパラメータの違いによるき裂模様の定性的な相違は σ に本質的に依存しない．

以上のシミュレーションの結果は，実際の材料物質のき裂模様の評価に役立つと思われる．本研究のモデルは，乾燥，熱衝撃，放射線照射などによる材料の表面のき裂成長と対応させられる．これらの場合，材料の組織の不規則性や外的影響の空間的な不均一性によって，材料表面には空間的にランダムなひずみや応力が蓄積する．上記の結果から，長いき裂を示す材料ほどき裂発生に対する抵抗の強い組織からなると推測される．また，き裂が空間的に一様に分布している材料は，き裂発生・進展時に大きなひずみエネルギーを解放する機構をもつと判断される．き裂様相と材料特性の相関性については，最近報告されたGurarie と Williams の実験[11]が注目される．そこでは，LiF 結晶表面の熱衝撃によるき裂模様が，あらかじめイオン照射処理をした表面ではどのように変わるのかを観測している．

シミュレーションの結果は，例えば，き裂が空間的に一様に分布している場合には，ひずみエネルギーが空間的に大きな変動を残していることを示している．このことは，観測されるき裂模様から材料内部の残留応力，ひずみ分布などをある程度推測するのに有効であろう．

3・3　き裂模様と環境

モデルのパラメータ，ΔE の大きさは，外部の影響を特徴づけている．Fig. 7 は，$\Delta E=5$ の場合のき裂模様とひずみエネルギー分布を示す．他のパラメータは，Fig. 3 の系と同じ値をもっている．一回の入力過程で入力されるエネルギーが大きくなると，系内のひずみエネルギーが要素ごとに大きく変動して蓄積していく．その結果，き裂の進展が抑えられやすく，き裂の長さは相対的に短くなる．他方，ひずみエネルギー分布の特徴は，Fig. 3 との比較から明らかなように，ΔE の値には依存しない．

以上の結果から，現実の材料のおかれていた環境に関して，次のような推定ができる．同じ材質の物質でも，細かいき裂模様を示す物質ほど，空間的にひずみや応力の変動の激しい状況下におかれていたことが予想される．熱衝撃では，熱衝撃温度差の大きな状況は，ΔE の大きな場合に対応する．

最近，岩石，岩盤などのき裂模様の画像処理の研究が盛んになりつつある[12),13]．また，コンクリートの乾燥あるいはアルカリ骨材反応などによるひび割れの評価[14]，セラミックスの熱衝撃によるき裂の観測結果[15]なども報告されている．本研究のシミュレーションの結果は，このような実験結果を解釈する上で有効と思われる．

3・4　モデルの妥当性

本研究のモデルでは，いくつかの単純化がなされた．三角格子系の採用は，き裂成長方向を制限している．もちろん現実の材料は複雑な幾何学的特性をもっている．しかし，個々のき裂の成長の挙動ではなく，き裂模様の全体像の特徴は，モデルの格子の形には依存しない．したがって，より複雑な格子系においても，き

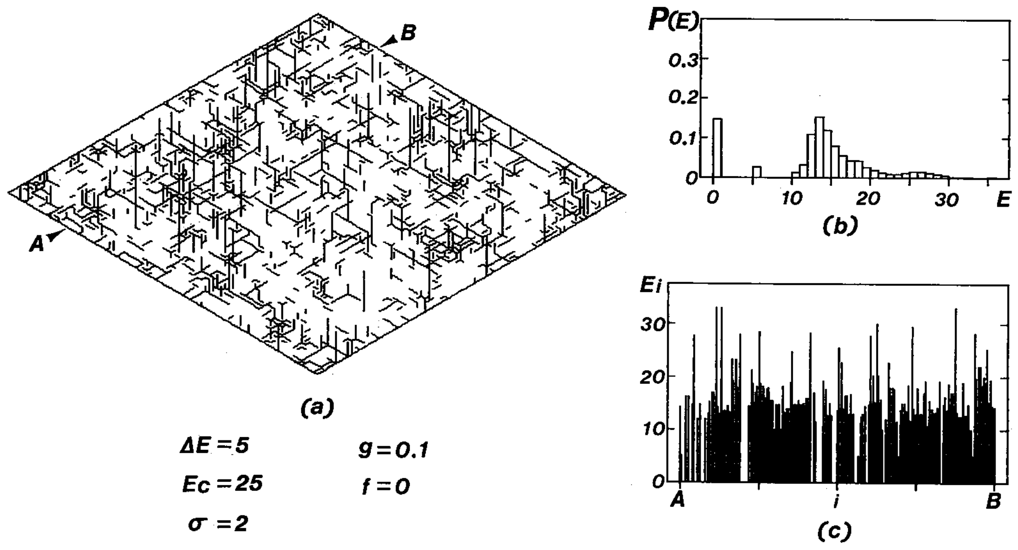

Fig. 7. Crack pattern and strain energy distribution for the system with $\Delta E=5$, $E_c=25$, $\sigma=2$, $g=0.1$ and $f=0$.

裂模様の定性的特徴は変わらないと期待される．

また，本モデルでは，ひずみエネルギーの解放と移動に与えるき裂の長さの影響を考慮しなかった．この効果はき裂の様相を変化させると思われるが，き裂模様のパラメータによる相対的な違いについては，本質的な影響を与えないと考えられる．この方向でのモデルの改良は，実験と比較・検討する上で，今後の課題である．

シミュレーションで用いたパラメータについては，き裂模様とひずみエネルギー分布の相対的な違いを明示するために適当な数値が選ばれた．本研究のモデルのパラメータは，弾性定数や破壊力学パラメータと直接には対応していない．したがって，シミュレーションの結果は，実際の材料に対する定量的な評価を与えるものではない．しかし，モデルのパラメータはき裂模様の特徴の相対的な違いから材料の定性的な違いを推測する上で参考となるであろう．他方，弾塑性理論，破壊力学にもとづく応力・ひずみ解析を通して，多数のき裂の進展・合体を追求することは，現状では難しい．き裂の全体像をとらえるためには，従来の手法とは異なる研究法が開拓される必要がある．この意味で，本研究はき裂模様の評価のための一つの試みである．

4 結 論

本研究では，二次元の三角格子系を用いて，空間的にランダムにひずみエネルギーの蓄積するぜい性物質におけるき裂成長のモンテカルロ・シミュレーションを実行した．その結果のき裂模様とひずみエネルギー分布は，格子の形に本質的に依存しない特徴を示す．したがって，シミュレーションの結果は，熱衝撃などによる材料表面のき裂模様を評価する上で有効であると思われる．

参 考 文 献

1) H. E. Stanley and N. Ostrowsky (ed.), "Random Fluctuations and Pattern Growth : Experiments and Models", p. 149 (1988) Kluwer Academic, Dordrecht
2) H. J. Herrmann and S. Roux (ed.), "Statistical Models for the Fracture of Disordered Media" (1990) North-Holland, Amsterdam
3) Y. Termonia and P. Meakin, Nature, **320**, 429 (1986).
4) W. A. Curtin and H. Scher, J. Mater. Res., **5**, 535 (1990).
5) A. T. Skjeltorp and P. Meakin, Nature, **335**, 424 (1988).
6) 多田直哉，北村隆行，大谷隆一，日本機械学会論文集，A-**56**，28 (1990).
7) B. B. Mandelbrot, D. E. Passoja and A. J. Paullay, Nature, **308**, 721 (1984).
8) S. Shimamura, K. Kuriyama and Y. Kashiwagi, J. Mater. Sci. Lett., **9**, 756 (1990).
9) S. Shimamura and K. Kuriyama, to be published in J. Mater. Sci.
10) 外池泰彦，栗山　憲，嶋村修二，第11回西日本岩盤工学シンポジウム論文集，p. 23 (1990).
11) V. N. Gurarie and J. S. Williams, J. Mater. Res., **5**, 1257 (1990).
12) 大西有三，堀田政國，大谷司郎，土木学会論文集，第412号/Ⅲ-12，61 (1989).
13) 西山　孝，楠田　啓，北川元紀，資源・素材学会誌，**106**，573 (1990).
14) 西林新蔵，矢村　潔，材料，**38**，946 (1989).
15) M. Oguma and T. Motomiya, Nippon Seramikkusu Kyokai Gakujutsu Ronbunshi, **97**, 778 (1989).