3次元結晶構造内部の変形と破壊の可視画像化[†]

荻原 律* 濱島 良吉** 元島 三明**

Visualization of Internal Deformation and Fracture of Three-Dimensional Crystal Structure

by

Tadashi OGIHARA*, Ryoukichi HAMAJIMA** and Mitsuaki MOTOJIMA**

Monitoring internal deformation and fracture of three-dimensional crystal structures under three-dimensional stress is very important. However, observing these phenomena solely by laboratory experiment is difficult. Several experimental results are available, but they are insufficient, since only the surfaces of the crystal structures could be observed. In an effort to obtain data beyond the limitations of laboratory experiment, we have been pursuing the development of computational simulation. This system enables us to analyze internal deformation and fracture of three-dimensional crystal structures with flaking and slipping on crystal grain boundaries. During this process we discovered the lack of useful visualization software, which is vital in evaluating the computational simulation results. In the present study we succeeded in developing visualization software which enables us to display and analyze internal deformation and fracture with flaking and slipping on crystal grain boundaries in an arbitrary cross section of three-dimensional crystal structures. The software development environment that we used is Direct3D "Retained Mode" in Microsoft DirectX7.

Key words: Visualization, Fracture, Crystal structure, Grain boundary, Finite element spring model

1 緒 言

本研究では、3主応力の作用を受ける岩石供試体のシミュレーションを行い、その内部の変形、破壊状態を把握するための可視画像化手法を開発することを目的としている。解析に関しては、これまで不連続体解析 FESM (Finite element spring model)^{1)~3)}を開発してきた。この解析手法は、困難とされてきた複雑な形状を有する3次元結晶構造に対しての変形、破壊を扱うものであり、要素内の弾性、塑性、粘弾性変形状態に加え、結晶粒界での引張破壊、せん断破壊によって生ずるはく離、滑りを考慮することが可能な解析手法である。

複雑な多面体要素からなる結晶構造は、分子動力学手法と比較すればマクロな扱いとなり、設計に直結した分野での適用が主体となる。しかし、現在、文部科学省で進められている地球シミュレータプロジェクトでは並列計算機および有限要素法のプラグインソフト GeoFEM が開発され、数千万個の要素の解析が可能となっている。またパソコンレベルでも数万個の要素の解析が可能であり、ミクロな状態の解析が可能となりつつあり、分子動力学解析と結晶構造解析の距離が近づきつつあると思われる。この不連続体解析 FESM により、ミクロな結晶構造解析から列島規模の地殻変動解析への応用も可能となりつつある。⁴⁾一方、アメリカ地質調査所 (USGS) においては20年以上前から円柱岩石供試体を用いて拘束圧、間隙圧、温度、载荷速度を変化させた実験を行い、地震

発生メカニズムに必要な岩石の構成則の一連の研究が行われている。さらに、岩石内部の破壊を破壊音 (アコースティックエミッション) から把握し、これと荷重変形曲線との対応の研究を行っている。しかし岩石内部の破壊を把握するには必ずしも充分ではない。これに対し、筆者らは三軸試験後の岩石供試体を薬品で固め、断面を細かくスライスし、この多数の断面写真から3次元画像を作成し、岩石内部の破壊状況の把握を行った。⁵⁾しかし、これには多大の労力を必要とするばかりでなく、実験の各変形段階での内部状態を把握することができない。こうしたことを踏まえ、結晶構造モデルによる破壊実験シミュレーション、特に3主応力状態での解析の開発を行ってきた。この場合、供試体を任意の断面で切断し、そこでの結晶構造のはく離、滑りの状態を把握することが必要となる。しかし、FESM 開発当初は、このように複雑な3次元結晶構造内部の変形や破壊状態を可視化可能なソフトは残念ながら存在せず、すべて手作りで可視化プログラムを開発してきた。現在では、6面体以内であれば不連続体表現に対しても可視化可能なソフトが他にも存在する。しかし6面体を超える複雑な結晶構造において任意の断面でスライスして、そこでの変形、破壊状態等を観察する可視化ソフトは自前でプログラム開発せざるを得ない。本研究では、すべて手作りで可視化ソフトを開発してきたが、こうした可視化ソフトの開発が逆に結晶構造の研究に対する起爆剤となり得ると推察される。

[†] 原稿受理 平成14年6月11日 Received June 11, 2002

* 前橋工科大学工学研究科建設工学専攻 〒371-0816 前橋市上佐鳥町, Dept. of Civil Eng., Maebashi Inst. of Tech., Kamisatori-cho, Maebashi, 371-0816

** 正会員 前橋工科大学工学部建設工学科 〒371-0816 前橋市上佐鳥町, Dept. of Civil Eng., Maebashi Inst. of Tech., Kamisatori-cho, Maebashi, 371-0816

2 FESM (Finite Element Spring Model) の特徴

本解析手法 FESM は、以下に示す特徴を有する。

(1) 変位関数を要素重心の剛体変位と要素内の一定ひずみで表すため、要素形状の制約がなくなり、任意の多面体要素を使用することができる。また、要素毎に変形を独自に定めることができ、したがって、要素間での相対変位を求めることが可能となり、不連続体としての解析が可能となる。

(2) 変位関数は4面体定ひずみ要素に対応するものとなっているため、4面体メッシュを用いた場合には、通常の有限要素解と一致する。

(3) 弾塑性解析において、要素内の弾塑性のみならず、要素間での引張破壊、せん断破壊を扱うことができる。

2.1 FESM に基づく結晶構造要素内の変位の計算と可視画像化に必要なデータ

インプットデータとして、モデルを構成する要素（多面体）の数と要素番号、要素の頂点の数と頂点番号および頂点座標、そして要素を構成する面の数と面番号、面を構成する頂点の数と頂点番号が必要とされる。これらのデータより、各要素重心点 G の座標値 (x_G, y_G, z_G) はプログラム内で要素の頂点座標から計算して得られる。また、要素重心点の x, y, z 方向の変位 (u_G, v_G, w_G) 、 x, y, z 軸回りの回転角 (θ, ϕ, ψ) 、要素内の直ひずみ $(\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z)$ 、そしてせん断ひずみ $(\gamma_{xy}, \gamma_{yz}, \gamma_{zx})$ が解析結果として得られる。これらより式 (1) を用いて、要素内の任意の点 $P(x, y, z)$ の x, y, z 方向の変位 u, v, w を求めることができる。これより各要素の頂点の変位を求めることができる。ここで FESM では各要素が独立に変位し得ることから、要素間の引張破壊、せん断破壊に基づく要素間の開口、滑りを表現することができる。しかし、隣り合う要素の頂点は、接点番号を共有しているため、可視画像化に際しては、同じ接点番号でも、要素毎に独立した接点番号を設定し、計算された変位を格納しておく必要がある。また要素内、要素間の材料状態をアウトプットしている。また要素間においては引張破壊後の再接触、それに伴う材料の変化がアウトプットされる。

Fig. 1. Displacements and strains in crystal element.

$$\begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & (z-z_G) & -(y-y_G) \\ 0 & 1 & 0 & -(z-z_G) & 0 & (x-x_G) \\ 0 & 0 & 1 & (y-y_G) & -(x-x_G) & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_G \\ v_G \\ w_G \\ \theta \\ \phi \\ \psi \end{Bmatrix} \quad (1)$$

$$+ \begin{bmatrix} (x-x_G) & 0 & 0 & (y-y_G)/2 & 0 & (z-z_G)/2 \\ 0 & (y-y_G) & 0 & (x-x_G)/2 & (z-z_G)/2 & 0 \\ 0 & 0 & (z-z_G) & 0 & (y-y_G)/2 & (x-x_G)/2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \end{Bmatrix}$$

3 可視画像化プログラムの構成

① FESM のインプットデータとアウトプットデータの読み込み、および画像描画に必要なデータ作成

② 画像描画機能

③ アニメーション機能

① データの読み込み・および画像描画に必要なデータの作成

ここでは画像描画に必要なデータの入力、作成を行う。

(1) 画像描画に必要なデータとしては、先に述べたインプットデータと FESM の解析により得られたアウトプットデータが必要となる。これらより、各要素の接点の変位、さらに要素内の弾性、塑性状態、要素間の引張破壊、せん断破壊の情報がインプットされる。これらのデータから画像描画プログラムにより、(a) フラット表示、ワイヤーフレーム表示、(b) 破損面表示、半透明表示、(c) 断面カット表示等が可能となる。これらは②の画像描画機能を用いて比較的容易に可視画像化が可能である(第4章参照)。

(2) 任意の断面で切断して、その切断面での変形状態、さらに破壊の状態を把握するために、切断面表示機能が必要であり、ここで②の画像描画機能に必要なデータを作成する。結晶構造に対してこうした機能を有する可視化ソフトは無く、可視画像化部分で最も苦勞した。結晶要素を平面で切断する場合には線と面との交点、線と面との接触、面と面との接触を含めてプログラム上での注意が必要となる(第5章参照)。

② 画像描画機能

不連続体解析 FESM の開発当初はこうした可視画像化に関するソフトは無く、すべてを手作りで行った。しかし現在では DirectX7 の機能の中の Direct3D-RM⁶⁾ の機能を使うことにより、陰線処理、アニメーションを含めて比較的容易に行うことができる(ただし DirectX8 からは、Direct3D の RM (レジウムモード) の機能が無くなり手作りの必要がある)。画像描画するための描画命令は、AddVertex メソッド(頂点の追加機能)を用いて頂点の座標値を指定する。次に、AddFace メソッド(面の

追加機能)を用いて各面を構成する頂点番号を指定する。最後に、Render メソッドを用いて画像描画を行う。

③ アニメーションプログラム

Visual Basic のタイマーコントロールを用いて、アニメーションを作成する。ここではモデルを x 軸, y 軸, そして z 軸回りに回転させ、さらに、同時に2軸以上の回転をさせることもできるものとした。

4 画像描画機能

4・1 フラット表示機能, ワイヤフレーム機能

FESM 解析後の画像描画であるが、モデルの外形のみで、モデル内部の状態を知ることはできない。

4・2 破損面表示機能, 半透明表示機能

Fig. 4 は不連続体解析 FESM 解析後のデータからの結晶構造内部に生じた破損面の情報から、物体内部の破損面を描画させた破損面表示機能である。これにより破壊が生じた要素内部を視覚的に捉えることができる。ここでは、要素内部の弾性、塑性状態、要素間での破壊の種類を選択して表示可能である。

Fig. 5 はモデル全体に透過率を与え、モデル内部を透視できるようにした半透明表示機能である。また、破損面に色付けし、モデルを透視することによりモデル内部のき裂や開口を、一層明瞭に示すことができる。しかし要素内部をより正確に把握するためには、断面をカットし、そこでの粒子の凹凸の状態を知ることが必要となる。今後は数万個の要素での解析が可能となりつつあり、粒子の大きさが破壊に及ぼす影響等を知る手掛りとなりうる(4・3節参照)。

4・3 断面カット表示機能

断面カット表示機能は、FESM の特徴である要素間の変形や離れ状態を知るために作成した機能であり、モデル内部における個々の要素の形状を視覚的にとらえることができる。Fig. 6-a に示すモデルは解析後の状態であり、この断面カット機能は現在 x , y , z 軸に平行な任意の面で要素を分断することができる。しかし、斜めの任意断面でのカット機能についても、比較的簡単に作成可能であり、必要に応じて作成する。またカット面において引張破壊、せん断破壊、さらには再接触等の変化も表示可能であり、内部の破壊状態をより一層明らかにす

Fig. 2. Flat display.

Fig. 3. Wire frame display.

Fig. 4. Display of inner fracture surfaces.

Fig. 5. Translucent display of model.

ることが可能となる。要素数の変化に伴う破壊性状の変化と強度の変化との対応など多くの情報を得ることができよう。

4・4 任意の位置を指定した切断面表示機能

この機能は FESM の解析により得られた要素内部の変形・破壊性状を知るために作成した機能である。これはモデルのあらゆる部分の切断面を取り出すことができ、その切断面での要素内の弾塑性状態、要素間の滑り、はく離そして開口状態等を知ることができる(第5章参照)。

5 任意の位置での結晶構造の切断

モデルを任意の位置で切断する場合、切断する面を切断面と定義する(Fig. 8 面 $P_1 \sim P_4$)。方法としては、3次元ベクトル表示により結晶構造と切断面との切断平面(Fig. 9 面 $A_1 \sim A_6$)を求めることになるが、基本的には要素が構成する面の辺と切断面との交点を求めることに

(b)Cutting-off domain(0-0.5). (c)Cutting-off domain(0.5-1.0).

Fig. 6. Flaking display.

Fig. 7. Crystal structure cut by arbitrary cross sections.

帰着する。ただし、要素の辺、さらに要素の面と切断面との接触の判定等、特殊な条件が発生する。

5・1 切断面表示機能のアルゴリズム

① Fig. 8に示すように、モデル内に3点 (P_1 , P_2 , P_3) を指定して切断する平面 (切断面) を設定する。

② 切断面のベクトル方程式。

切断面の単位法線ベクトル $\mathbf{n}$ は、方向ベクトル $\mathbf{A}$ ($=\mathbf{P}_2-\mathbf{P}_1$) と $\mathbf{B}$ ($=\mathbf{P}_3-\mathbf{P}_2$) より、次式で与えられる。

Fig. 8. Vector expression in crystal structure for a cross section.

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{A} \times \mathbf{B}}{\sqrt{(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})}} \quad (2)$$

また、平面上の任意の点 v における位置ベクトル $\mathbf{v}$ の法線方向の成分を k とすれば、次式の関係が成り立つ。

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = k \quad (3)$$

また、点 P_1 の位置ベクトルを $\mathbf{P}_1$ とすると、式 (3) から $\mathbf{v}$ が $\mathbf{P}_1$ の位置にあるとき、次式が成り立つ。

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{P}_1 = k \quad (4)$$

これにより k の値が定められる。式 (3) は点 (P_1 , P_2 , P_3) から定められる切断面のベクトル方程式である。

③ Fig. 9は、1つの要素 (多面体) が切断面によって切断される面 $A_1 \sim A_6$ を示している。これを得るためには要素を構成する面の各辺と切断面の交点を求めることになる。この操作を、要素を構成するすべての面について行うことになる。

④ ここでは、便宜的に Fig. 9に示す要素の面 Q_1, Q_2

Fig. 9. Crystal element cut by a cross section.

Q_3Q_4 をFig. 8に示したモデルの面 $r_1r_2r_3r_4$ に置きかえて説明する.

⑤ 直線 r_1r_2 上に任意の点 r を考えたときに, その点における位置ベクトル r は次式で得られる.

$$r = r_1 + \mu d \quad (5)$$

ただし, $d = r_2 - r_1$ であり, 直線 r_1r_2 の方向ベクトルである. ここで, $0 \leq \mu \leq 1$ であり, $\mu = 0$, $\mu = 1$ において, $r = r_1$, $r = r_2$ となる.

⑥ $r = P_1$ のとき, $r = v$ とみなせるので式 (3) に式 (5)を代入すると, 次式となる.

$$n \cdot (r_1 + \mu d) = k \quad (6)$$

$n \cdot d \neq 0$ のとき (切断面と辺 r_1r_2 が平行でないとき), 次の結果が得られる.

$$\mu = \frac{k - n \cdot r_1}{n \cdot d} \quad (7)$$

⑦ $0 \leq \mu \leq 1$ の範囲においてのみ直線と切断面との交点 P_1 の座標値を決定できる.

$$P_1 = r_1 + \mu d \quad (8)$$

式 (8)から得られる座標値を式 (1)に代入することにより, 交点の変位を求めることができる.

⑧ この処理を, 要素内のすべての面の辺について行い, さらにモデル内のすべての要素について行う.

ただし, $n \cdot d = 0$ の時, 単位法線ベクトルと直線 r_1r_2 の方向ベクトルが直交するため, 面の辺と切断面は平行になる. この場合にも交点を設定する場合があります, プログラム上の注意事項で述べる.

5・2 プログラム上の注意

(1) $n \cdot d = 0$ における丸めの誤差

切断面表示のプログラムにおいて, 直線 (辺) の方向ベクトル d を求めるときに必要な変数はsingle (単精度浮動小数点型)で変数の宣言をしている. singleは, 有効けた数約7けたなので, 1.23456789という9けたの数字を内部的にその値を丸めて1.234567にする. このような内部処理が行われることによって誤差が生じる. このため, 平面と直線が平行のとき $n \cdot d = 0$ となるはずが, 丸め誤差のために $n \cdot d = 0$ とならなくなる恐れがある. そこで, プログラム上では近似的に

$$|n \cdot d| < 0.000001 \quad (9)$$

において $n \cdot d = 0$ が成り立つとする.

(2) 要素 (多面体) を切断する平面と要素との関係

Fig. 10 (a)~(f)において面 $Q_1Q_2Q_3Q_4$ と切断面との交点について分類する.

(a) 面上で2つの交点を有する場合

面上において, 式 (7)を用い, μ の値が次式で得られる. また μ は $0 \leq \mu \leq 1$ である.

交点の位置ベクトルは次式から求められる.

$$\begin{aligned} A_1 &= Q_1 + \mu(Q_2 - Q_1) \\ A_2 &= Q_3 + \mu(Q_4 - Q_3) \end{aligned} \quad (10)$$

(b) 面上で切断面と2つの交点を有するが, 面の頂点に交点を有する場合

(a)の手順を進める中で, 交点が面の頂点と一致する場合がある. 例えば, Fig. 10 (b)において直線 Q_1Q_2 ,

Fig. 10. Crystal element cut by a cross section.

Q_2Q_3 , そして Q_3Q_4 と切断面との交点の位置が, それぞれ $\mu = 0$, $\mu = 1$, $\mu = 0$, そして $\mu = 1$ となっている. この場合, 面 $Q_1Q_2Q_3Q_4$ と切断面との交点は実際には2つであるが見かけ上4つあることになる. これに対しプログラム上では, $\mu = 0$ の場合は, 直線と平面が交わっているとみなし, $\mu = 1$ の場合は, 交わっていないとする. すなわち, $0 \leq \mu < 1$ とする. こうすることで, 平面は直線 Q_1Q_2 と Q_3Q_4 の2箇所で交わっていることになり, 交点は2つとなる. これは (a)における特殊な場合として扱うことができる

交点の位置ベクトルは式 (10)において,

$$\begin{aligned} \text{辺 } Q_1Q_2 \text{ において } \mu = 0, A_1 &= Q_1 \\ \text{辺 } Q_3Q_4 \text{ において } \mu = 0, A_2 &= Q_3 \end{aligned} \quad (11)$$

(c) 要素を構成する面の頂点が切断面と1箇所で接する場合

これは, (b)の特殊な場合であり, 要素を構成する面上において $\mu = 0$ が1つのみ生ずる場合 (ここでは Q_4)である. この場合, 要素は切断される面を持たない. そのため, この場合の交点は除外しておく必要がある.

(d) 要素の面を構成する辺の1つのみが切断面上にある場合

切断面の単位法線ベクトル n と方向ベクトル Q_1Q_2 が直行することから,

$$n \cdot (Q_2 - Q_1) = 0 \quad (12)$$

更に次式が成り立てば切断面上に点 Q_1 および Q_2 が存在する.

$$\begin{aligned} n \cdot Q_1 - k &= 0 \\ (n \cdot Q_2 - k &= 0 \text{ でも良い}) \end{aligned} \quad (13)$$

式 (12), (13) において, 式 (9) の近似を行う. この場合には, 点 Q_1 , Q_2 の座標値を交点として記録する.

(e) 要素の面を構成する辺の 1 つが切断面上にある場合
この場合は 1 つの辺上で (d) と同じ条件が成立する.

$$\left. \begin{aligned} n \cdot (Q_2 - Q_1) &= 0 \\ n \cdot Q_1 - k &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

この場合には, 点 Q_1 , Q_2 の座標値を交点として記録し, あとは (a) の場合と同じ手順を進める.

(f) 要素の 1 つの面上において 2 つの辺が切断面上にある場合

この場合は 2 つの辺上で (d) と同じ条件が成立する.

$$\left. \begin{aligned} n \cdot (Q_2 - Q_1) &= 0 \\ n \cdot Q_1 - k &= 0 \\ n \cdot (Q_4 - Q_3) &= 0 \\ n \cdot Q_4 - k &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

この場合には, 点 Q_1 , Q_2 , Q_3 , Q_4 の座標値のみを交点として記録する.

6 結 言

不連続体解析 FESM は多面体としてのボロノイ分割要素を用いることが可能である. 要素の変形を考慮でき, さらに要素間の引張破壊, せん断破壊を考慮できる. 変形は要素重心点の剛体変位と要素内の定ひずみで表される. このことから, 個々の要素が独立して運動し, かつ要素形状には拘束されない (ただしここでは 12 面体までのボロノイ分割要素を用いている). これまで岩石実験の内部の破壊性状を把握することが困難であったが, FESM の解析と併用して本研究で行った可視画像化が有効となる.

可視画像化においては DirectX7 のサブシステムである Direct3D を用いた. これは DirectX7 以降 Visual Basic でグラフィックス・ライブラリを読み込むことが可能となり, 画像処理の専門知識があまり無くても陰線処理などの基本的 3 次元グラフィックス機能を活用することが

可能である. 画像描画のためのデータとして, 要素 (多面体) の数と要素番号, 要素の接点数と接点番号および接点座標 (変位を加算したもの), 要素を構成する面の数と面番号, その面の頂点数と頂点番号が必要とされる. さらに要素内の弾性, 塑性状態, 要素間の引張破壊, せん断破壊の情報が必要となる. FESM では結晶要素毎にこれらのデータを与えることができる. ただし任意の断面で切断される切断面上 (2 次元平面上) での画像表示に関しては, Direct3D に受け渡す情報 (切断される多面体から形成される 2 次元多角形) を作成し, これに基づいて可視画像化を行った. 結晶構造に対してこうした機能を有する可視化ソフトは無く, 可視画像化部分で最も苦労した. 結晶要素を平面で切断する場合には線と面との交点, 線と面との接触, 面と面との接触を含めてプログラム上での注意が必要となる.

画像描画の主な機能としては

- (a) フラット表示, ワイヤフレーム表示,
- (b) 破損面表示, 半透明表示,
- (c) 断面カット表示,
- (d) 任意の断面で切断し, その切断面での変形状態表示等が可能であるが, 状況に応じて機能が追加される.

参 考 文 献

- 1) 中井仁彦, 濱島良吉, 日本地熱学会誌, **16**, No.4, 1 (1995).
- 2) 中井仁彦, 濱島良吉, 日本地熱学会誌, **17**, No.2, 95 (1995).
- 3) 濱島良吉, 元島三明, 第 7 回分子動力学シンポジウム講演論文集, 77 (2002).
- 4) 濱島良吉, 元島三明, 第 7 回分子動力学シンポジウム講演論文集, 82 (2002).
- 5) 清水 均, 高橋 学, 濱島良吉, 応用地質, **36**, No.3, 265 (1995).
- 6) 川田 徹, “Visual Basic による Direct3D アニメーション入門”, 第 1 章 (1999) 工学社.