

3 次元結晶構造の変形・破壊における可視画像化 に関する研究

Visualization for Deformation and Destruction of 3D crystal structure

小池輝明*・濱島良吉**

Teruaki KOIKE and Ryoukichi HAMAJIMA

In an Earth Simulation project, crustal movement analysis of an islands scale has been performed using FESM. It has been pointed out that the form of the plate that is hidden in the Japanese Islands influences an earthquake occurrence mechanism greatly. However, it is difficult to judge modeled crustal movement only from an analysis result. 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.

Key Words : FESM (Finite Element Spring Model) ,visualization, crystal structures

1. はじめに

地殻変動解析に関しては、3 次元不連続体解析 FESM(Finite Element Spring Model)が濱島により開発され、その手法を用いて解析を行っている¹⁾。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滑り、剥離を考慮することが可能な解析手法である。しかし、解析結果のみからモデルの変形等を判断するのは困難であり、結晶構造内部の破壊状態を可視画像化することが不可欠となる。そこで、解析に並行して可視画像化のプログラムを独自に、Windows DirectX のサブシステムである Direct3D を用いて開発してきた。

本研究では、結晶構造内部を任意断面で切断し、切断面での結晶粒界の滑り、剥離、更には結晶構造内部の弾塑性状態を把握することが可能である。プログラム開発段階でのトラブルも含め、こうした可視画像化プログラムの複雑さを示す。

2. 可視画像化プログラム

(1)プログラムの概要

不連続体解析 FESM による解析においては、先にも述べたように結晶構造の粒界において、滑り、剥離が生ずる。こうした内部の変形・破壊性状を詳細に調べるためには、任意の断面での切断、あるいは任意の位置で剥がしてみる必要があるといった目的で可視画像化プログラムは開発されてきた。また、FESM で解析を行う際に用いるデータは、モデルを構成する要素の座標値等からなる数値データであり、その解析結果もまた数値データとして出力される。これらのデータ量は膨大なものであり、そのような数字の羅列からモデルの変形・破壊性状を知り得るのは困難であることから、モデルを可視画像化することが重要となる。

*学生会員 修士(工学) 前橋工科大学大学院 工学研究科

**正会員 教授 前橋工科大学 工学部 建設工学科

(2) プログラムの構成

可視画像化プログラムは以下のような構成になっている。

- ① FESM の解析に用いるインプットデータと解析から得られたアウトプットデータの読み込み、保存、呼び出し及び画像描画に必要なデータの作成機能
- ② 画像描画機能（フラット表示機能、線画表示機能、破損面表示機能、半透明表示機能、モデル分断表示機能、切断面表示機能）
- ③ モデルを軸回りに回転させるアニメーション機能

3. 画像描画機能

(1) フラット表示機能・線画表示機能

図－1、図－2に示すのはフラット表示機能、線画表示機能である。どちらも FESM 解析後のモデルを画像描画させているが、これらはモデルの外形のみで、モデル内部の状態を知るには十分とは言えない。

また、FESM 解析後におけるモデルの変形は微小なものであるため、可視画像化にあたっては任意の誇張倍率を与え変位を表現している。これは他の機能も同様であり、任意の大きさに誇張して表示することができる。

(2) 破損面表示機能

図－3は不連続体解析 FESM 解析後のデータから、結晶構造内部に生じた破損面の情報をもとに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。

(3) 半透明表示機能

図－4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亀裂や開口を、一層明瞭に示すことができる。

(4) モデル分断表示機能

モデル分断表示機能は、FESM の特徴である要素間の変形や剥離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捉えることができる。図－5 (b) に示すモデルは解析後の状態であり、このモデル分断表示機能は現在、各面に平行な任意の面で要素を分断することができる。また分断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ることが可能となる。図－5 では解析後のモデルを XY 面に平行な面により分断し、表示させている。図－5 (a) は XY 面に平行な面で 0.0～0.5 の間に重心のある要素のみを表示したもので、図－5 (c) は XY 面に平行な面で 0.5～1.0 の間に重心のある要素のみを表示させている。このようにモデルの大きさを 0.0～1.0 の比率で表し、その値にモデルの座標値を乗ずることで実際の範囲を算出している。

(5) 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、任意の切断面における要素内の弾塑性状態、要素間の滑り、剥離そして開口状態等を知ることができる。この機能には各面に平行に切断する場合と任意の位置で切断する場合の2通りの方法がある。図－6に示した線の位置でモデルを切断したものが図－7である。

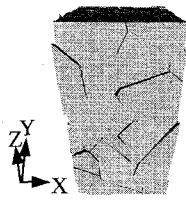


図-1 フラット表示機能

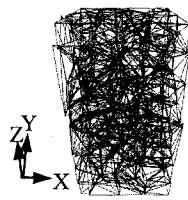


図-2 線画表示機能

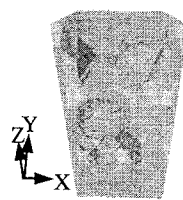
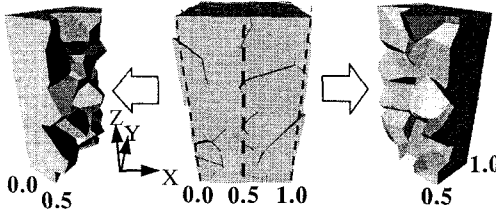


図-3 破損面表示機能



図-4 半透明表示機能



(a)モデル分断表示 (b)フラット表示 (c)モデル分断表示
図-5 モデル分断表示機能

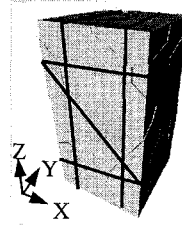


図-6 解析後のモデル

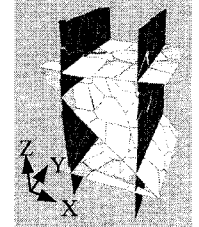


図-7 切断面表示機能

(6) 切断面表示のアルゴリズム

ここでは切断面表示機能のアルゴリズムについて説明する。図-8 に示すのは実際に切断しようとするモデルである。以下に、図-8 (b) に示す切断面 $A_1A_2A_3A_4A_5A_6$ を持つ任意の要素をもとに説明する。

- ① 図-8 (a) 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の算出

切断面の単位法線ベクトル n は方向ベクトル $A (=P_2-P_1)$ と $B (=P_3-P_2)$ より、次式で与えられる。

$$n = \frac{A \times B}{\sqrt{(A \times B) \cdot (A \times B)}} \quad (1)$$

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

$$n \cdot \nu = k \quad (2)$$

また、点 P_1 の位置ベクトルを P_1 とすると、式 (2) から ν が P_1 の位置にあるとき、次式が成り立つ。

$$n \cdot P_1 = k \quad (3)$$

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。

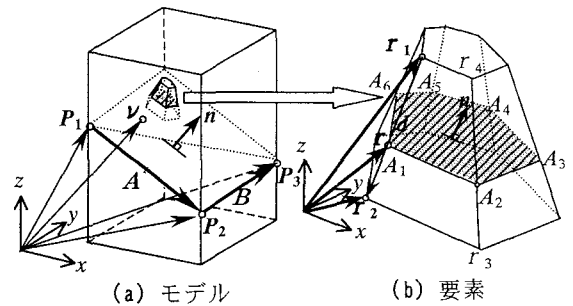
- ③ 図-8 (b) は、1つの要素 (多面体) が切断面によって切断される面 $A_1A_2A_3A_4A_5A_6$ を示している。これを得るためには要素を構成する面の各辺と切断面の交点を求めることになる。この操作を、要素を構成する全ての面について行うことになる。

- ④ 取り出した要素を構成する面を1つ取り出す。ここでは図-8 (b) に示す任意の要素における面 $r_1r_2r_3r_4$ について説明する。

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。

$$r = r_1 + \mu d \quad (4)$$

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。



(a) モデル (b) 要素
図-8 切断面表示のアルゴリズム

⑤ 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、 $r=\nu$ とみなせるので式 (3) に式 (4) を代入すると、次式となる。

$$n \cdot (r_1 + \mu d) = k \quad (5)$$

$n \cdot d \neq 0$ のとき (切断面と辺 $r_1 r_2$ が平行でないとき)、次の結果が得られる。

$$\mu = \frac{k - n \cdot r_1}{n \cdot d} \quad (6)$$

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。この範囲内において切断面との交点を算出している。

$$P_1 = r_1 + \mu d \quad (7)$$

なお、ここで得られた座標値を変位を求める式に代入することにより、切断面における交点の変位を求めることができる。

⑧ 1つの面で交点の判定が終われば次の面へ移り、この操作を要素を構成するすべての面について行う。

③～⑧の処理をモデルを構成するすべての要素について行い、求められた交点を結ぶことで切断面を描画することができる。

4. プログラムの問題点

(1) 切断面表示機能における要素の欠落

プログラム開発途中で生じた、いくつかの問題点について述べる。まず、切断面表示機能において、描画する際の微妙な位置関係により要素の欠落部分が発生した (図-9)。これは定義した切断面とモデルを構成する各要素との交点を求める場合の判定条件の不足によるものであり下記に示す。

(2) 判定式の算出

図-10 は、切断面によって要素が切断される場合に考えられる切断面と要素の関係である。これら6つのうち、条件 (d)、(e)、(f) の不足が図-9に示される要素の欠落の原因である。

以下に、図-10の (a) ～ (f) において面 $r_1 r_2 r_3 r_4$ と切断面との交点について分類する。判定式は切断面表示のアルゴリズムで示した計算式をもとに算出した。

(a) 面上で2つの交点を有する場合

これは切断面と要素の関係を考える上で最も多くある場合であり、面 $r_1 r_2 r_3 r_4$ 上において、切断面表示機能の説明で述べた式 (6) により、交点の位置を求めるための μ の値が得られる。また μ は比率であり、その範囲は $0 \leq \mu \leq 1$ である。これから面 $r_1 r_2 r_3 r_4$ での交点の位置を A_1 、 A_2 とすれば、交点の位置ベクトルは次式から求められる。

$$\left. \begin{aligned} A_1 &= r_1 + \mu (r_2 - r_1) \\ A_2 &= r_3 + \mu (r_4 - r_3) \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

この式から、(a) の場合において切断面と要素を構成する面の辺との交点を求めることができる。

(b) 面上で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、図-10 (b) において直線 $r_1 r_2$ 、 $r_2 r_3$ 、 $r_3 r_4$ そして $r_4 r_1$ と切断面との交点の位置を考えた場合、 μ の値がそれぞれの辺において $\mu=0$ 、 $\mu=1$ 、 $\mu=0$ 、そして $\mu=1$ となっている。この場合、 μ の範囲を $0 \leq \mu \leq 1$ とすると、面 $r_1 r_2 r_3 r_4$ 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

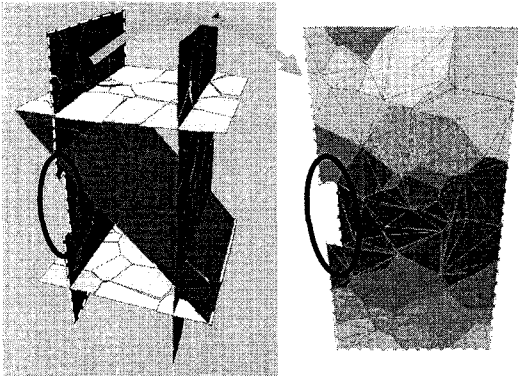


図-9 要素の欠落部分

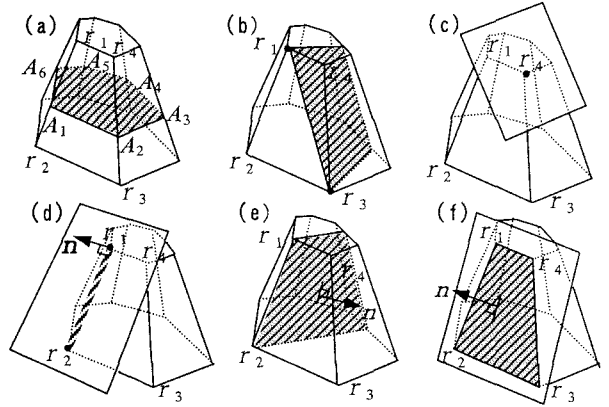


図-10 切断面と要素の関係¹⁾

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 $r_1 r_2$ と $r_3 r_4$ 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。この場合の交点の位置ベクトルは交点の位置を A_1 、 A_2 とすれば、次式のようになる。

$$\left. \begin{array}{l} \text{辺 } r_1 r_2 \text{ において } \mu=0 \text{ のとき、 } A_1 = r_1 \\ \text{辺 } r_3 r_4 \text{ において } \mu=0 \text{ のとき、 } A_2 = r_3 \end{array} \right\} \quad (9)$$

これにより (b) の場合において切断面との交点を求めることができる。

(c) 面上で 1 つの交点を有する場合

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 r_4 ）である。この場合、要素は切断される面を持たない。この場合、(b) の判定式により交点の位置は求められるが、プログラムでは 1 つの面上で交点が 2 つある場合に限り、その面での交点を格納している。そのため、この場合の交点は除外され、交点の判定は次の要素に移る。

(d) 要素の面を構成する辺の 1 つのみが切断面と重なる場合

この場合は切断面の単位法線ベクトル n と方向ベクトル $r_2 - r_1$ が直行することから、

$$n \cdot (r_2 - r_1) = 0 \quad (10)$$

が成り立つ。このとき切断面と辺 $r_1 r_2$ は平行になる。そこで更に次式が成り立てば切断面上に点 r_1 及び r_2 が存在する。

$$n \cdot r_1 - k = 0 \quad (n \cdot r_2 - k = 0 \text{ でも良い}) \quad (11)$$

ここでの k は切断面表示機能の説明で示した切断面上の任意の点 v の法線方向の成分（大きさ）を示しており、切断面上のすべての点においてこの式が成立する。つまり、式 (11) において $n \cdot r_1$ と k の値が等しいとき、点 r_1 は切断面上の点となる。よって、式 (10)、(11) が成り立てば切断面と要素の面は平行かつ重なるといえる。

なお、この場合には式 (10)、(11) において近似を行う必要がある。コンピュータが扱う数値が 2 進数であることやプログラムに用いられている変数の関係から、 $n \cdot (r_2 - r_1) = 0$ が成り立たない場合がある。そのため $|n \cdot (r_2 - r_1)| < 0.000001$ のときを近似的に $n \cdot (r_2 - r_1) = 0$ としている。

この場合には、点 r_1 、 r_2 の座標値を交点として記録する。この問題については後に詳しく解説する。

(e) 要素内に切断面を有するが、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。

$$\left. \begin{aligned} n \cdot (r_2 - r_1) &= 0 \\ n \cdot r_1 - k &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

ここでは (d) の場合と同じく、点 r_1 、 r_2 の座標値を交点として記録し、(a) の場合と同じ手順を進める。

(f) 切断面と要素の面が重なる場合（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）

このとき 2 つの辺上で (d) と同じ条件が成立すれば、その面と切断面とが平行かつ重なるということになる。

$$\left. \begin{aligned} n \cdot (r_2 - r_1) &= 0 \\ n \cdot r_1 - k &= 0 \\ n \cdot (r_4 - r_3) &= 0 \\ n \cdot r_4 - k &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

この場合には、点 r_1 、 r_2 、 r_3 、 r_4 の座標値を交点として記録する。

(3) プログラムの注意点

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、メモリ等の関係から Single（単精度浮動小数点型）で変数を宣言している。Single は、有効桁数約 7 桁なので、例として 1.23456789 という 9 桁の数字を格納する際には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。

(d)、(e)、(f) の場合では $n \cdot d = 0$ となり、単位法線ベクトルと直線の方向ベクトルが直交するため、要素の面の辺（方向ベクトル）と切断面は平行になる。しかし、 $n \cdot d = 0$ 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

$$|n \cdot d| < 0.000001 \quad (14)$$

において $n \cdot d = 0$ が成り立つとする。これにより $n \cdot d = 0$ となる場合でも処理を行うことができる。しかし、式 (14) の 0.000001 という値は経験値であるため、この値についても検討の余地がある。

5. 修正結果

判定式を算出し、プログラムへの追加を行ったところ、要素の欠落が見られた部分を表示することが可能となった。しかし、部分的にはまだ要素の欠落が見られた。これにはプログラムの注意点で述べた問題やプログラムに用いられている変数の問題等も考えられる。そのため、引き続きプログラムの問題点の検証を行っていくとともに、曲面形状断層の組み込み等の新しい機能についても開発を行ってゆく。

6. おわりに

現在、地球シミュレータプロジェクトの中で列島規模の地殻変動解析を行っている。ここで日本列島に潜り込むプレートの形状（曲面形状）が地震発生メカニズムに大きな影響を与えることが指摘され、モデル化等において多くの検討の余地があることが判明した。そこでそれらを考慮し、今後はプレートの潜り込み、内陸部の断層を組み込んだ詳細なモデルの構築を行っていくとともに、今回行った修正以外でも必要となるものに関しては随時プログラムの修正を行い、機能の追加を行ってゆく。

参考文献

- 1) 荻原 律、濱島良吉、元島三明：結晶構造の変形・破壊現象に関する可視画像化、第 7 回分子動力学シンポジウム講演論文集（日本材料学会）、88-93（2002）