

3DSCC き裂進展プログラム開発の方針

平成19年6月28日 AAS

以下に、仕様書案に添った見積もりの前提となる基本的な開発方針を、5パートに分けて説明する。

- パート1 プログラム開発の基本的考え方
- パート2 要素分割の戦略
- パート3 プログラム仕様と検討項目
- パート4 プログラムのフロー
- パート5 開発期間の概略

パート1 プログラム開発の基本的考え方

実際の SCC き裂進展を表現できるプログラムを開発することが目的であるが、解析のためのデータ入力および結果のグラフィック表示は、解析を正しく行い、正しく評価するのに不可欠である。従って、開発対象を「プログラム本体」の開発と、「支援システム」の開発に大きく分類した。

さらに、「プログラム本体」の開発を、「理論検証プログラム開発」と「実用プログラム開発」の2フェーズに区分し、まず仕様書案に添いながら、不明な点や考慮すべき点を補って実装し、パソコンで解けるレベルのモデルについて SCC き裂進展を表現できるようにする。その上で、次のフェーズとして実用的なモデルサイズに対応できるようにプログラムの各種効率化を図り、実際のモデルサイズで検証を行う。

「支援システム開発」は「入力支援システム」と「出力支援システム」に分類して考える。結果を評価するのに特に重要なことは、3次元における任意断面でのき裂進展を表示できることであると思われる、その他についての支援と区別することを念頭においた。

1. プログラム本体

- 1. 1 理論検証プログラムの開発
*AAS の FEM コードをベースに開発する

- 1. 2 実用プログラムの開発
*理論検証プログラムの効率化をはかる。
*または、理論検証プログラムどおりの動作を ABAQUS で行う

2. 支援システム

- 2. 1 入力支援 GUI システムの開発
*入力条件を作成し、図化することでデータの適正をチェックする。

- 2. 2 出力支援 GUI システムの開発
*任意断面のき裂を表示する。
*その他、3次元および2次元で必要な情報を表示する。

1. プログラム本体

1. 1 理論検証プログラムの開発(理論検証フェーズ)

目的は、仕様に添うプログラムを完成させる。そのためには、仕様のない項目の考慮および仕様の変更が必要となることが予想される。

基本的な弾性解析部は弊社が保有するプログラムを用いて、適宜改良することとする。

FORTTRAN90 に準拠したコーディングとし、モデルの大きさは、通常のパソコンで計算できる範囲とする。

1. 2 実用プログラムの開発(実用化フェーズ)

理論が基本的に仕様通りに動作することを確認の上、実用化に向けて以下の項目で効率化を図る。この段階で、2つの可能性を考えられる。

- (1) 1. 1 で開発したプログラムを実用サイズが解けるように改良を行う。
- (2) 1. 1 で開発したプログラムの動作を **ABAQUS** で行うようにする。

(1) の開発方針の場合は、以下の点が主な改良点になると考えられる。

- (a)効率的なソルバーの適用 (効率はデータサイズによって異なることが一般的)
- (b)ベクトル化・並列化に適したコーディング改良 (種々のロジックの改良を含む)
- (c)情報の効率的な管理 (外部ファイルの使用、動的配列等)
- (d)その他

(2) の開発方針の場合は、まず **ABAQUS** の機能を調査し、明確な見通しを立てる必要がある。

2. 支援システム

「支援システム」を入力と出力に分けて開発する。もちろん、**GUI** は統合化したものとする。開発言語は **Microsoft Visual Studio 2005(Visual C++)**以上とする。

2. 1 入力データの作成支援 GUI システム

- (1) 解析領域 (寸法)、解析条件 (物性、き裂位置、破断条件等) の入力
- (2) **Voronoi** 分割の条件入力と分割
- (3) 結晶粒の分割条件入力と分割
- (4) 上記 (1) から (3) の条件表示と、最終有限要素モデルの 3次元および2次元表示
- (5) 上記 (1) から (4) の出力 (ファイル、図面)

2. 2 解析結果の表示支援 GUI システム

結果の表示での必須条件は、3次元での任意断面における **SCC** き裂の表示である。

- (1) 最終解析結果 (き裂位置、応力状態等) の 2次元 (任意の切断面)、3次元表示

- (2) き裂進展のアニメーション
- (3) 上記 (1) ~ (2) の出力 (ファイル、図面)

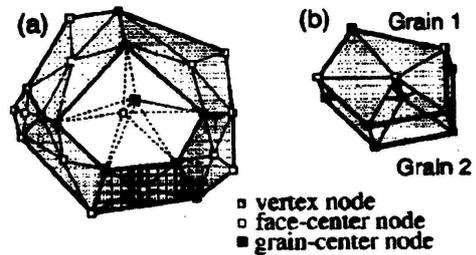
参考文献

- ref(1) Branching mechanism of intergranular crack propagation in three dimensions, M.Itakura, H.kaburaki, C.Arakawa, Physical Review E 71,055102(R) (2005)
- ref(2) 3DSCC き裂進展プログラム仕様書案、五十嵐誉廣、加治芳行、2007.06.12

パート2 要素分割の戦略

本プログラム開発において最も重要な開発項目の一つが、結晶粒および粒界をどのような有限要素モデルで表現するかである。以下に、基本的な方針を説明する。

- (1) Voronoi 分割した結晶粒を、どのように有限要素に分割する方法は種々あるが、基本的に参考文献 ref(1)で使用した要素(a)を使い、粒界を要素(b)を使って有限要素モデルを作成する。

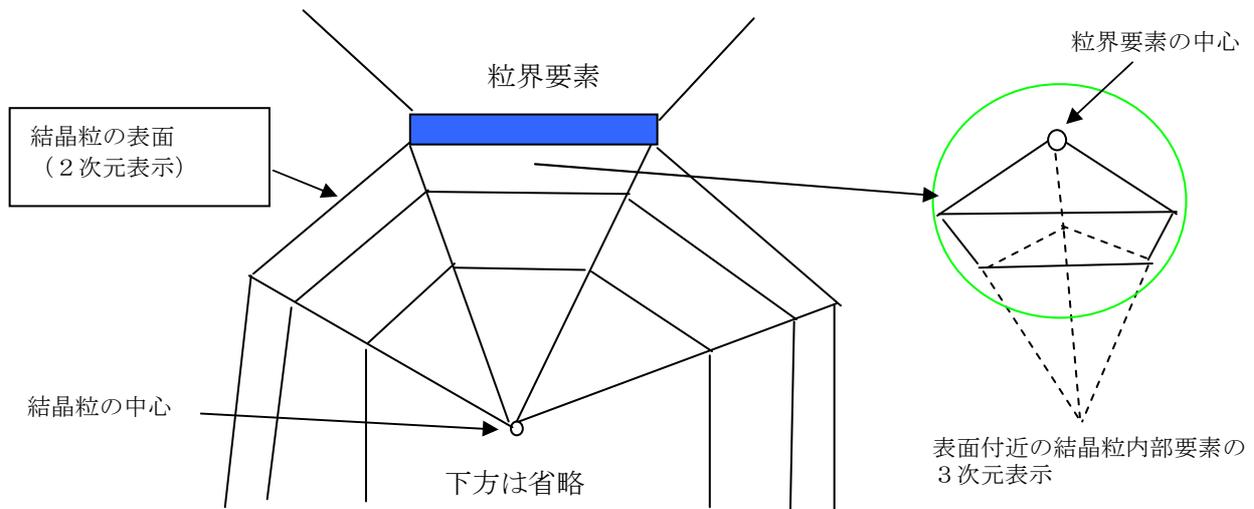


- (2) ただし、(1) の分割では、いくつか取り扱えない状況がある。

- (a) ref(1)で使用した4面体要素だけでは結晶粒の変形を適切に表現できない可能性がある。中心から表面まで応力一定を仮定することになるからである。
 (b)仕様書にある粒界近くの応力集中を表現するために、要素を細かくすることができない。

そこで、以下のような考え方をに入れて分割自由度を増す。

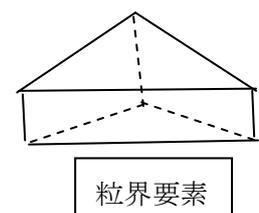
つまり、表面から中心までをn分割して「蜘蛛の巣」分割をする。表面近くの要素は変形した3角柱要素とする。



- (3) さらに、結晶粒内部の節点は、他の結晶粒と繋がっていないから、結晶粒の剛性行列を作った後で内部節点を消去（縮約）して、表面節点だけで表現する。一度作成すれだけなので、こうすることによって全体の自由度を減らして精度を上げることができる。

- (4) 粒界要素も上記要素と同じタイプの要素になる。

- (5) 破断の判定は、この粒界要素の応力を用いる。



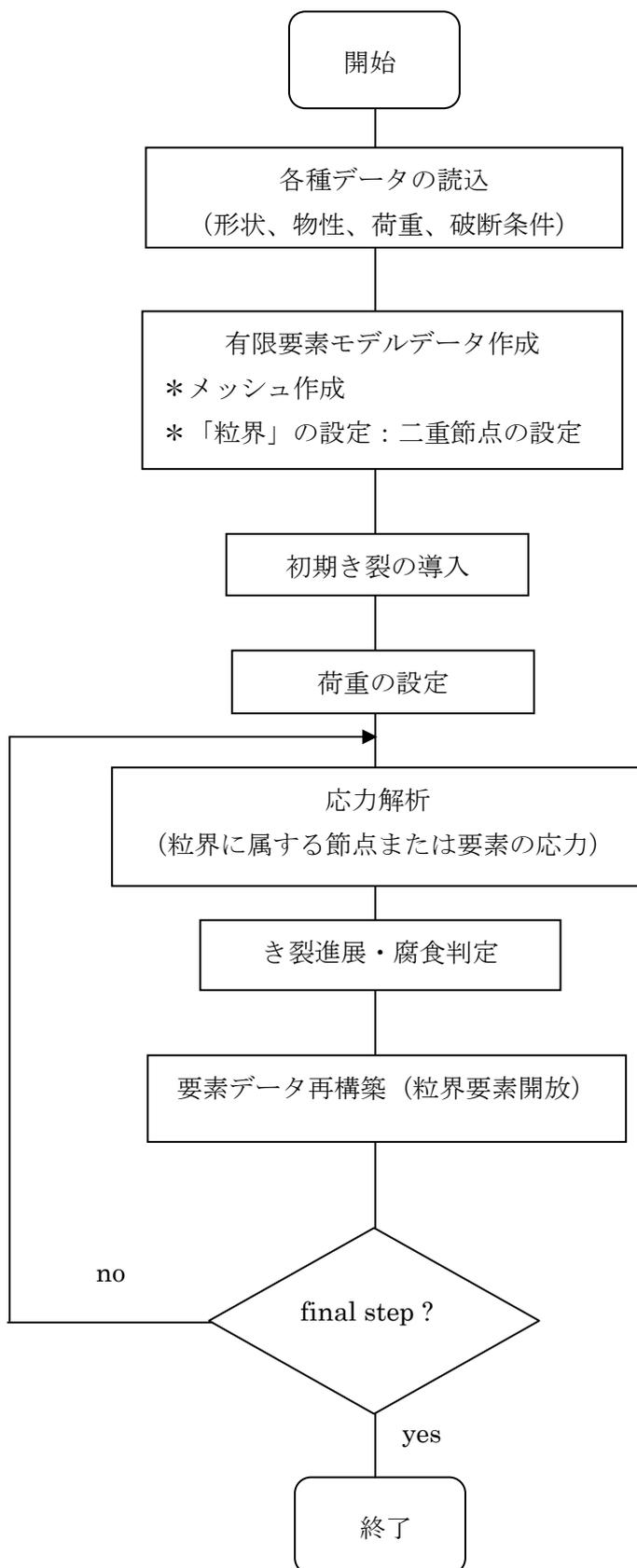
パート3 プログラム仕様と検討項目

以下はプログラム仕様書案に基づいて作業項目を整理し、予想される検討項目をまとめたものである。

主要作業項目	仕様にある項目	検討項目
モデル作成	3次元 Voronoi 分割 (2.1)	効率化を図る。
	結晶粒の有限要素分割	*要素タイプの選択する。 *分割パターンを設定する。
	結晶粒の方位設定(2.2)	
	粒界の有限要素モデル設定	粒界面要素を設けるか、節点拘束を行う。
	粒界近傍を相対的に小さい要素で分割する (3)。	メッシュ・パターンを検討する。
物性入力作成	粒界強度の設定 (2.3) *粒界の種類による強度の違いを一定のゆらぎで与える。 *ゆらぎ幅はユーザー入力。 *基本となる粒界強度が異なる粒界種を数個設定する。	理論的根拠を検討する。
	粒界に対する応力の定義 (2.4) *垂直応力およびせん断応力を考慮	
	破断条件の設定	理論的根拠・妥当性を検討する。
	粒界の腐食の考慮 (2.5) *腐食後の粒界強度を変数とする。 1. 腐食の進行速度を定義 2. (腐食量－粒界強度) の関数を定義	理論的根拠・妥当性を検討する。
荷重の自動設定	上下方向の引張荷重 (面荷重) (2.6)	
初期き裂の設定	直方体表面の中央部(2.6)	具体的設定法を設定する。
応力解析	弊社プログラムを改良。 または、ABAQUS を使用する。	理論検証フェーズは弊社プログラムを仕様する。その後、実用フェーズで、ABACUS の適用可能性を判断する。いずれの場合も、ソルバーを含め、種々の効率化 (並列化、ベクトル化コード) および剛性行列作成の効率化 (破断しないところは再構築しない等) が必須である。
節点応力作成	近傍の積分点での応力値から体積補間により算出。	粒界要素を使用することで、直接評価することも考えられる。
き裂進展ロジック作成	粒界割れ条件 (2.7)	粒界割れ条件の根拠・妥当性の検討。 き裂発生部位の効率的検索
		き裂が閉じる場合の考慮

パート4 プログラムのフロー

プログラムのフローは以下のようになる。



パート5 開発期間の概略

以下に、各段階の開発に必要と思われるおおよその工数（人日）をまとめる。詳細については、各段階の仕様が明確になった時点で再度見積もることを前提にしている。

1. 理論検証プログラムの開発(理論検証フェーズ)

作業項目	詳細項目	工数(人日)
モデル作成	3次元 Voronoi 分割 (2.1)	
	結晶粒の有限要素分割	
	結晶粒の方位設定(2.2)	
	粒界の有限要素モデル設定	
	粒界近傍を相対的に小さい要素で分割する (3)。	
入力部作成	形状、物性データ入力	
	粒界強度の設定 (2.3)	
	粒界に対する応力の定義 (2.4)	
	破断条件の設定	
	粒界の腐食の考慮 (2.5)	
荷重の自動設定	上下方向の引張荷重 (面荷重) (2.6)を自動設定	
初期き裂の設定	直方体表面の中央部(2.6)に自動設定	
応力解析	剛性行列、荷重ベクトルを構築して、変位を解く。	
粒界応力算定	粒界要素または粒界節点での応力算定	
き裂進展ロジックを実装 (統合化)	粒界割れ条件 (2.7) を考慮して粒界要素または節点を分離して、剛性行列を再構築する。	
出力部作成	結果をファイルへ出力	
	結果を評価するための簡単な図化	
検証解析	条件を変えて計算結果を評価する。	
		計

3. 実用プログラムの開発(実用化フェーズ)：理論検証プログラムを発展させる場合

作業項目	工数 (人日)
効率的なソルバーの適用	
ベクトル化・並列化に適したコーディング改良 (種々のロジックの改良を含む)	
情報の効率的な管理 (外部ファイルの使用、動的配列等)	
その他総合的な効率化	
検証解析	
計	

3. 入力データの作成支援 GUI システム

作業項目	工数 (人日)
解析領域 (寸法)、解析条件 (物性、き裂位置、破断条件等) の 入力画面の作成	
Voronoi 分割の条件入力と分割画面の作成 (種々のロジックの改良を含む)	
結晶粒の分割条件入力と分割画面の作成	
入力データ表示と、最終有限要素モデルの 3 次元および 2 次元表 示画面の作成	
出力 (ファイル、図面) 画面の作成	
計	

4. 解析結果の表示支援 GUI システム

作業項目	工数 (人日)
最終解析結果 (き裂位置、応力状態等) の 2 次元 (任意の切断面)	
最終解析結果の 3 次元表示	
き裂進展のアニメーション	
出力 (ファイル、図面)	
計	