

平成 30 年 6 月 15 日現在

機関番号：13401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2017

課題番号：16K13735

研究課題名(和文)放射光CT画像を活用した金属組織のイメージベース超並列有限要素解析の実現

研究課題名(英文) Realization of image-based massively-parallel finite element analysis using synchrotron radiation CT for metallographic structures

研究代表者

桑水流 理 (KUWAZURU, Osamu)

福井大学・学術研究院工学系部門・准教授

研究者番号：40334362

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：シンクロトロン放射光CTとスーパーコンピュータを用いた大規模イメージベースシミュレーションの実現可能性を検証した。解析の障害となっているメッシュ生成に対して、容易で確実な方法として、1画素1要素のボクセル要素メッシングを選択した。これにより微細な金属組織を考慮した大規模有限要素解析が可能となり、1億要素程度であれば、弾塑性・有限ひずみ解析が可能であることが明らかとなった。また積分点毎に材料特性を変えられる非均質ボクセル要素の導入により、ボクセル要素特有の解析誤差を低減できることを確認した。実際にアルミニウム鋳造合金の疲労解析を実施し、材料表面からのき裂発生メカニズムを検証することができた。

研究成果の概要(英文)：A feasibility of large-scale image-based simulation using a supercomputer and a synchrotron radiation CT was examined. To overcome the difficulty in the mesh generation based on images, which encumber the large-scale simulation, we employed the voxel element in line with the voxel-to-element strategy. As a result, it became possible to perform a large-scale finite element analysis considering microscopic metallographic structures and we clarified that the elastic-plastic and finite strain analysis can be done up to about one hundred million elements. Moreover, we introduced a heterogeneous voxel element which can use different material property at each integration point within a single element, and examined that this element could reduce the numerical error due to the inaccuracy in shape which is specific to the voxel element. We conducted the micromechanical fatigue simulation for the cast aluminum alloy and discussed the mechanism of fatigue crack initiation from material surfaces.

研究分野：計算固体力学

キーワード：大規模計算 マイクロメカニクス 放射光CT 超並列 有限要素解析 疲労 アルミニウム合金

1. 研究開始当初の背景

シンクロトロン放射光 CT を代表とした微視領域に対する可視化技術の進歩により、金属材料中の欠陥やき裂の 3 次元構造が明らかにされている^①。更にイメージベースモデリング技術を用いれば、可視化だけでなく、有限要素解析による力学特性評価が可能となる^②。このように、可視化技術とシミュレーション技術を融合した次世代の材料評価・材料開発に対する期待が高まっているが、シミュレーション技術の方が遅れている。障害となっているのが、有限要素メッシュ生成の困難さ、結晶毎の材料特性決定の困難さ、そして膨大な計算量である。

高輝度放射光施設 SPring-8 では、画素長 1 μm 以下、画素数 2048³ voxel の 3D 画像が取得でき、1 画素 1 要素の有限要素モデルとしても、80 億要素が必要となり、1 台の PC では到底計算できない。結晶粒界などを考慮すると、要素数は更に増え、形状の複雑さとメモリの限界から、自動要素生成は破綻する。つまり、有限要素メッシュが切れない。また、メッシュが切れたとしても、同様の理由から、並列計算に必要な領域分割も破綻する。本研究では、このメッシュ生成と領域分割を可能にするため、画像と同じ格子状のボクセル要素を採用し、スーパーコンピュータによる超並列計算を用いて、放射光 CT 画像を用いた大規模シミュレーションに挑戦する。

2. 研究の目的

アルミニウム鋳造合金の疲労を対象とし、SPring-8 で取得した放射光 CT 画像に対して、ボクセル要素の利用により、大規模のイメージベース有限要素解析が実現可能となることを明らかにする。ただし超並列計算には、スーパーコンピュータとオープンソース有限要素解析コード FrontISTR を用いる。ただし CT 画像から有限要素モデルを自動生成するプログラムを独自に開発し、解析可能な最大要素数を明らかにする。

また、ボクセル要素モデルの表面・界面のジグザグ形状による応力評価の誤差に対して、要素内の材料不均質性を考慮した要素で改善を試みる。それら解析手法の開発により、金属組織や材料欠陥を同時に考慮した大規模有限要素解析が世界で初めて可能となるので、その解析結果に基づき、疲労き裂の発生に対する金属組織および鋳巣や表面の影響について検証する。

3. 研究の方法

(1) 実験データ 対象材料は AC4CH-T6 アルミニウム鋳造合金とし、熱処理条件を変更した 3 種類の材料を用いた。試験片 B55a は高温溶体化処理によりシリコン粒子を粗大化させたもの、試験片 G19b は鋳造時冷却速度を早くして金属組織を微細化したもの、試験片 I01a は逆に冷却速度を遅くして金属組織を粗大化したものである。

SPring-8 にて低サイクル疲労試験のその場 CT 観察^③を実施したときの画像データを使用した。試験途中で破損した Si 粒子を CT 画像から特定し、解析対象領域を選定した。CT の画素寸法は 0.5 $\mu\text{m}/\text{voxel}$ 、画素数は 2048 \times 2048 \times 2048 voxel であり、試験片中央部を撮像した。試験片中央断面は約 0.6 mm \times 0.7 mm の矩形断面である。撮像した領域には、Si 粒子と IMC (金属間化合物) 粒子を含めて、数十万から百万個程度の介在物が含まれている。デンドライト二次アーム間隔 (SDAS) が 30 μm 程度であるので、アルミニウム母相の塑性変形を厳密に解析するには、少なくとも数百 μm 以上の解析領域が必要である。

(2) 解析モデル 試験片内部の領域を切り抜き、イメージベース有限要素解析を実施した。図 1 に示すように、CT 画像からき裂発生起点のまわりを切り抜いた。ただし試験片表面はアーチファクト (虚偽の陰影) が多く、モデリングと解析が困難であったため、表面の極近傍で画像を切り抜き、解析の中ではその切り取り面を自由表面とした。なお、I01a は CT 撮像の向きがずれていたため、画像を回転補正してから、切り抜いた。

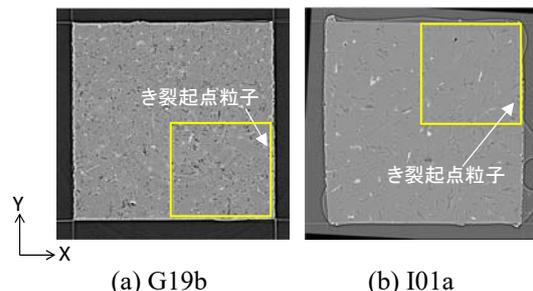


図 1 試験片の CT 画像からの抽出領域

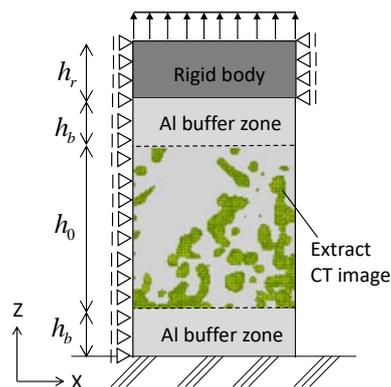


図 2 有限要素モデルの境界条件

図 2 に示すように、鋳巣 (空洞)、シリコン相、金属間化合物相を判別しながら、切り抜いた CT 画像を 1 画素 1 要素で有限要素モデル化した。その後、画像領域端部での応力集中を低減するため、アルミニウム母相による緩衝領域を上下に追加し、一様応力を負荷するための剛体板を上面に付加した。下面は完全拘束とした。なお、各部の寸法は $h_0 = 300$ voxel、 $h_b = 650$ voxel、 $h_r = 650$ voxel とした。

実験と同じ負荷条件として、最大負荷応力を B55a と G19b は 220 MPa、I01a は 200 MPa とし、応力比はいずれも 0.1 とした。ただし負荷波形は三角波とし、10 サイクル分だけ負荷した。

材料の判別は CT 輝度値 (16 bit: $0 \sim 2^{16} - 1$) に基づき、3 つの閾値により、黒側から空洞、シリコン相、アルミニウム母相、金属間化合物相の 4 つに分類した。各相では等方性を仮定し、アルミニウム母相のみ弾塑性体、シリコン相および化合物相は線形弾性体とした。材料定数は超微小硬度試験と有限要素解析^④により同定した。アルミ母相、シリコン相、化合物相のヤング率はそれぞれ 73.7、128、138 GPa、ポアソン比はすべて 0.3 とした。アルミ母相の塑性モデルには多直線硬化曲線を用い、移動硬化則を適用した。初期降伏応力は 16.7 MPa、0.2%耐力は 198 MPa である。また、疲労による塑性変形の影響を厳密に考慮するため、幾何学的非線形性を考慮した。

ソルバーには並列有限要素解析コード FrontISTR を用い、計算は東京大学情報基盤センター FX10 (HPCI 課題番号 hp160055)、九州大学 FX10、およびスーパーコンピュータ「京」(HPCI 課題番号 hp170188) を使用した。並列化には領域分割法を用いたが、ボクセル要素の均一性を活かして、解析領域を直方体領域に等分割した。また解析結果の可視化には大阪大学サイバーメディアセンター VCC (HPCI 課題番号 hp170188) を使用した。

(3) 精度検証 ボクセル要素の形状誤差により発生する不正応力を低減するため、積分点毎に内挿した CT 輝度値に応じた材料特性を与え、要素内での材料非均質性を考慮したボクセル要素を導入する。この要素を非均質ボクセル要素と呼ぶ。一方、従来通り要素内で材料特性を一様とした要素を均質ボクセル要素と呼ぶ。非均質ボクセル要素の精度を検証するため、試験片 B55a の CT 画像から 100^3 voxel の領域を切り抜いた小規模モデルの解析を実施した。解析領域に含まれる介在物を図 3 に示す。解析モデルの側面は全て拘束なしの自由表面とした。比較として、同領域を 4 面体 2 次要素で適切に要素分割したモデルを用いて、解析結果を比較した。

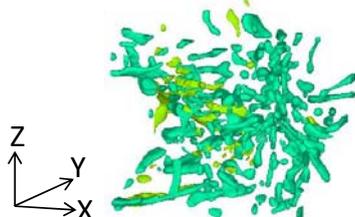


図 3 B55a のシリコン相と化合物相

(4) 大規模疲労解析 次に、非均質ボクセル要素を大規模解析に適用した。予備検討の結果から、スーパーコンピュータ「京」を用いても、有限要素法の並列化効率の限界と

計算時間の制約により、1 億要素程度が有限ひずみ弾塑性解析の限界であることが明らかとなった。そこで剛体板と緩衝領域を含めて約 1.5 億要素を用いて、シリコン粒子群まわりの応力評価を行った。き裂発生活動を含む 1/4 断面領域 (約 600×600 voxel) を対象とし、軸方向はほぼ解析限界の 300 voxel とした。ただし対称境界条件を適用し、実際の試験片断面と同程度の領域の解析結果とした。G19b と I01a の解析モデルに含まれるシリコン相と化合物相をそれぞれ図 4 と図 5 に示す。水色がシリコン相、黄色が化合物相である。両モデルにはシリコン粒子が 5,772 個と 1,424 個、化合物粒子が 3,048 個と 1,939 個それぞれ含まれている。これに対して疲労解析を実施し、介在物まわりの応力に対する金属組織、材料表面、繰り返し負荷の影響等を調べた。

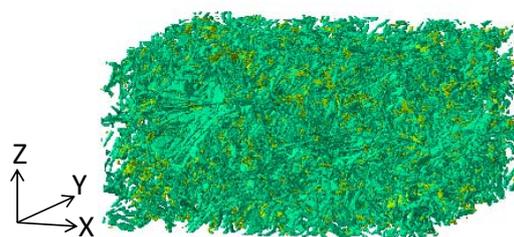


図 4 G19b のシリコン相と化合物相

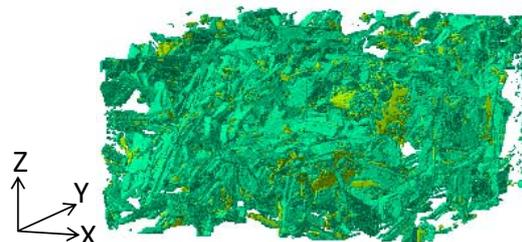


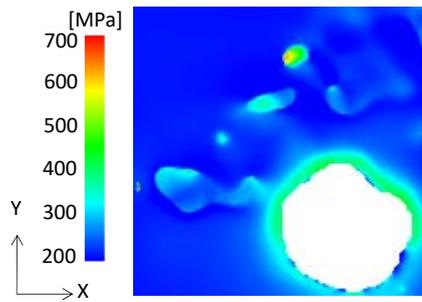
図 5 I01a のシリコン相と化合物相

4. 研究成果

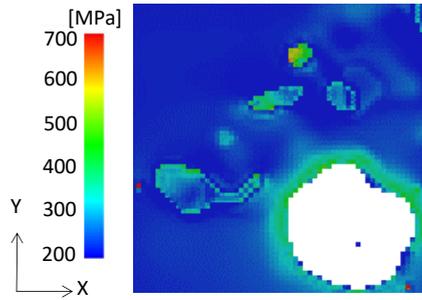
(1) 精度検証の結果 1 画素 1 要素でモデル化し、隣接要素の輝度値を用いて、輝度値を双一次内挿することにより、積分点 8 点の輝度値を求め、閾値から積分点の材料を判定した。そして積分点毎に材料特性を指定する非均質ボクセル要素 (8 節点 6 面体要素) を解析コード FrontISTR に実装した。

均質ボクセル要素および 4 面体 2 次要素と結果を比較した。10 サイクル目ピーク負荷時の鑄巣まわり横断面第 1 主応力分布を図 6 に示す。ただしボクセル要素の結果は、積分点の値を示すため、ボクセルを 8 分割して積分点の応力に対応する色で示した。定性的には 3 モデルとも同様の応力分布が得られた。非均質ボクセル要素では、応力分布は均質ボクセル要素よりもやや滑らかなる傾向を示したが、応力集中部における要素ごとの応力の波打ちが、均質要素よりも強くなった。

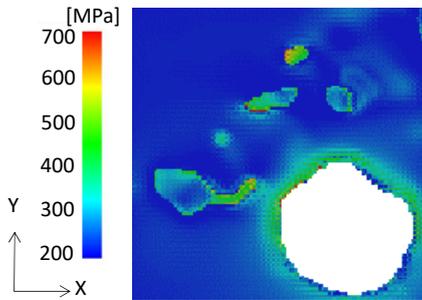
次に各 Si 粒子の 10 サイクル目最大第 1 主応力を図 7 に示す。4 面体要素の応力 (横軸)



(a) 4 面体 2 次要素



(b) 均質ボクセル要素

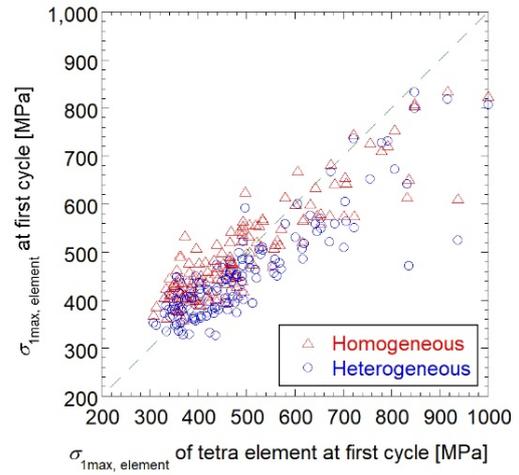


(c) 非均質ボクセル要素

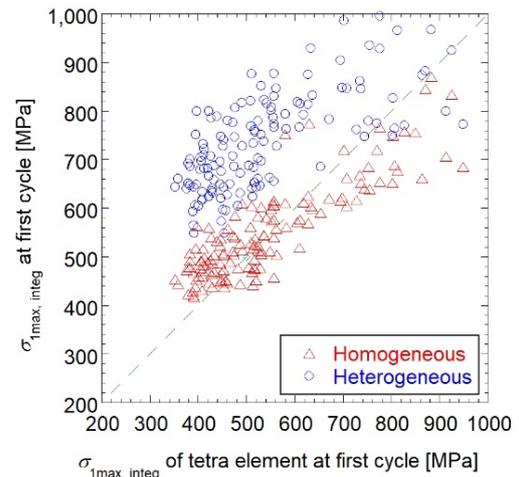
図 6 鋳巣まわり横断面の第 1 主応力分布

を基準に、均質要素と非均質要素の応力（縦軸）を比較している。図 7(a)は要素平均応力、図 7(b)は積分点応力である。非均質要素は均質要素に比べて、要素内にアルミニウムや空洞の積分点が入ることにより、要素平均応力が低くなる。一方、積分点応力では、非均質要素は均質ボクセル要素よりも高くなり、応力集中に敏感であることがわかる。図 6(c)からも、非均質要素の場合、シリコン粒子の表面に赤い要素が点在しており、均質要素に比べて最大応力が高くなり易いことがわかる。以上の結果より、4 面体要素の精度より劣るものの、ボクセル要素でも、ある程度の定量的な応力評価が可能であり、非均質ボクセル要素は応力集中に敏感である反面、応力の波打ちが強くなることが明らかとなった。

(2) 大規模疲労解析の結果 非均質要素を用いて約 1.5 億要素の大規模モデルの解析を実行した。10 サイクルの繰返し負荷を 105 ステップで増分解析した。スーパーコンピュータ「京」において 8,000 コア (1,000 ノード) を使用し、計算時間は約 300 時間であった。大規模モデルの場合、多数の鋳巣を含んでおり、鋳巣表面の応力集中とその有限ひずみに

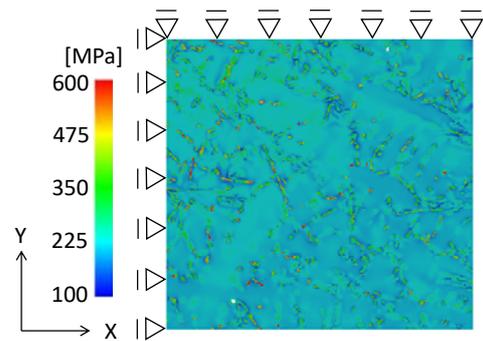


(a) 要素平均応力での比較

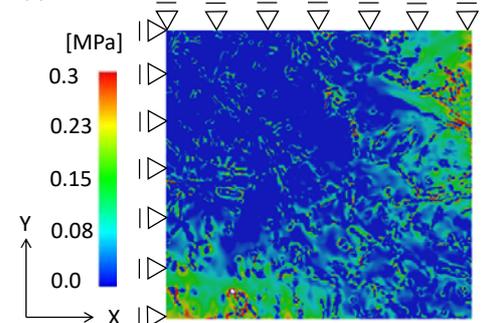


(b) 積分点応力での比較

図 7 各シリコン粒子の最大第 1 主応力

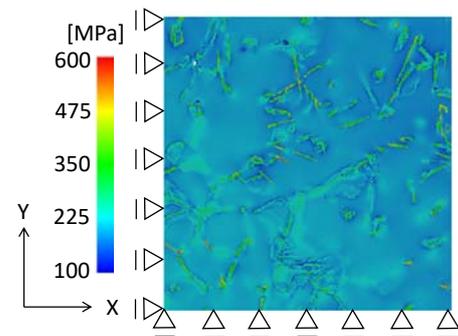


(a) 10 サイクル目ピーク負荷時の応力

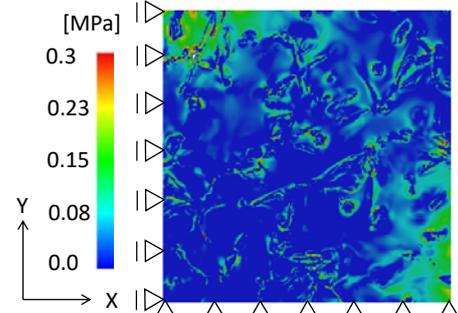


(b) 1 から 10 サイクルまでの増加量

図 8 G19b 横断面における第 1 主応力



(a) 10 サイクル目ピーク負荷時の応力



(b) 1 から 10 サイクルまでの増加量

図9 I01a 横断面における第1主応力

よる応力再配分が発生するため、領域間の連続性を維持するのが難しくなる。これにより解の収束性が悪化したと考えられ、当初の想定よりも長い計算時間となった。

10 サイクル目ピーク負荷時の第1主応力と、その1 サイクルから10 サイクルまでの増分を図8および図9にそれぞれ示す。図8はG19aの結果、図9はI01aの結果である。図8(a)および9(a)より、アルミニウム母相粒界の共晶組織に存在するシリコン粒子または金属間化合物への応力集中が確認できる。特に幾何学的拘束が強い試験片中央側(図8の左上と図9の右下)のシリコン粒子に高い応力が生じている。アルミニウム母相の応力も中心部では高い。

一方、1 サイクルから10 サイクルまでの増分を見ると、側面の中央部(図8の右上と左下、図9の右下と左上)に大きい増加が見られる。自由表面では幾何学的拘束が弱いため、繰返し負荷によりアルミニウム母相の塑性変形が徐々に大きくなる。その結果として、アルミニウム母相の応力は緩和され、その分だけシリコン相や化合物相への応力集中が助長される。これにより試験片表面近傍のシリコン粒子は破損し易いことになる。実際に疲労き裂は試験片表面から発生することが多いので、妥当な解析結果と言える。

ただし、今回使用したI01aはシリコン粒子が極端に肥大化して板状の組織となったものであり、金属組織の方向性があるため、解析に使用した対称境界条件が過剰な幾何学的拘束となっている可能性がある。この場合、対称境界近傍に応力集中が発生することがあるので、図8と9の結果については、更な

る検討が必要である。アルミニウム母相粒子の形状と併せて、シリコン粒子の形状や配向方向、更には自由表面や鑄巣の影響を検証することが、今後の課題である。

本研究により、スーパーコンピュータを駆使すれば、シンクロトン放射光CTの3次元可視化性能をほぼ最大限に活用したイメージベース有限要素解析が可能であることが明らかとなった。本研究のように金属組織を対象とした大規模解析は世界的にも例がなく、先駆的な研究成果である。この成果により、大規模マイクロメカニクス解析への道が開かれたので、今後の課題は、解析規模の更なる拡大と、解析精度の向上である。その先には、マクロな破壊挙動とミクロな材料特性をダイレクトに結び付けたオール・イン・ワン解析・評価がある。これはスケール・ギャップ・フリーな手法であり、現実の破壊現象を忠実に再現可能なので、破壊現象を直感的に理解し易く、材料開発・材料設計への応用が強く期待できる。また、ボクセル要素で常に懸念される解析精度に関しても、非均質要素の適用による改善が確認できたので、今後は更に精密な非均質性を入れるべく、拡張有限要素法などを用いて、変形の不連続性を考慮すれば飛躍的な精度向上が期待できる。結晶塑性モデル等の異方性弾塑性モデルの適用も今後の大きな課題である。

<引用文献>

- ① 戸田 他、軽金属、64、518-524、2014
- ② 桑水流、軽金属、64、525-532、2014
- ③ M. Teranishi 他、Mat. Sci. Eng. A、678、273-285、2016
- ④ H. Li 他、Int. J. Solids Structures、81、151-159、2016

5. 主な発表論文等

[学会発表] (計6件)

- ① 桑水流理、(招待講演)放射光と有限要素法による疲労損傷評価の試み、土木学会 応用力学委員会 計算力学小委員会 計算力学フォーラム in 福井、2018
- ② 寺西正輝、桑水流理、小林正和、戸田裕之、超並列有限要素解析によるアルミニウム鑄造合金の介在物群まわり繰返し弾塑性応力評価、日本機械学会 M&M2017 材料力学カンファレンス、2017
- ③ 内田雅誉、宮下直輝、寺西正輝、桑水流理、小林正和、戸田裕之、アルミニウム鑄造合金の介在物群まわり弾塑性応力に対する不確定応力振幅の影響、日本機械学会 M&M2017 材料力学カンファレンス、2017
- ④ 寺西正輝、内田雅誉、桑水流理、小林正和、戸田裕之、放射光CT画像に基づく有限要素解析によるアルミニウム鑄造合金の疲労損傷評価、日本機械学会 2017 年度年次大会、2017

- ⑤ 寺西正輝、宮下直輝、桑水流理、小林正和、戸田裕之、放射光 CT によるアルミニウム鋳造合金の介在物形状評価と疲労亀裂発生メカニズムの検討、日本機械学会 2017 年度年次大会、2017
- ⑥ O. Kuwazuru, M. Teranishi, S. Gennai, M. Uchida, M. Kobayashi, H. Toda, Image-based micro-mechanical fatigue simulation of cast aluminum alloy by parallel finite element method, 4th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering, 2017

[その他]

ホームページ等

<http://csm.npes.u-fukui.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

桑水流理 (KUWAZURU, Osamu)

福井大学・学術研究院工学系部門・准教授
研究者番号：40334362

(2) 連携研究者

寺西 正輝 (TERANISHI, Masaki)

福井大学・学術研究院工学系部門・助教
研究者番号：80798322