

jh190028-NAH

格子欠陥力学場のアイソジオメトリック解析

垂水 竜一（大阪大学）

概要 本研究課題では、格子欠陥のモデリングとアイソジオメトリック解析（IGA）による大規模数値計算を組み合わせることによって、結晶性金属材料の弾塑性変形解析のための新しい理論的枠組みを構築することを目的としている。研究の二年目となる 2019 年度は、格子欠陥のモデリングに微分幾何学を導入することによって、従来とは異なる新しいモデリングに挑戦した。また、得られた理論モデルに対して昨年度まで進めてきた大規模 IGA 計算を実装することによって、格子欠陥近傍の力学場を高解像度で決定することに成功した。当初予定では、新たに構築した理論的枠組みを用いて様々な格子欠陥に対する力学場解析を想定していたが、当該モデリングでは複数の格子欠陥を取り扱う際に理論上の問題が生じることが明らかとなった。そのため、研究期間の後半はその修正に充てることとした。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

大阪大学サイバーメディアセンター

(2) 共同研究分野

□ 超大規模数値計算系応用分野

(3) 参加研究者の役割分担

- 垂水竜一（代表者、阪大・基礎工）：研究計画の作成と結果の総括
- 荻野正雄（副代表、大同大・情報）：反復法による疎行列解析
- 鈴木厚（阪大・サイバーメディアセンター）：直接法による疎行列解析
- 小林舜典（阪大・基礎工）：基礎理論の構築
- 山田翔（阪大・基礎工）：大規模並列計算の実施

2. 研究の目的と意義

構造用金属材料に代表される結晶性固体材料の強度は、材料内部に存在する格子欠陥（転位や回位など）に支配されている。したがって、個々の格子欠陥が生み出す力学場（応力・ひずみ場）とそれらの非線形相互作用

を理解することは、固体力学・材料科学分野に残された最も重要な研究課題の一つである。当研究グループでは、これまで格子欠陥力学場のアイソジオメトリック解析（IGA）を進めてきた。研究の初年度となる 2018 年度は、非局所弾性理論を用いた格子欠陥力学モデルの構築とそのアイソジオメトリック解析を進めた（jh180028-NAJ）。その結果、2,000 万自由度を超える大規模問題の数値解析に成功するとともに、2 レベル OAS 法（Overlapped Additive Schwarz 法）を用いた大規模並列計算の準備を整えることができた。しかしながら、研究の理論的基盤として導入した非局所弾性理論では格子欠陥中心の特異応力を解消できないことが明らかとなり、これに代わる新しい理論的基盤の導入とその IGA への実装が新しい研究課題となっていた。

非局所弾性理論に代わる新しい理論的基盤として、微分幾何学に基づく格子欠陥理論が考えられる。この理論的枠組みは、今から半世紀以上に Kondo ら応用数学者によって構築されたもので、近年になって Yavari と Goriely によって現代的な立場から再定式化が進められている。その結果、材料内部で連

続な密度分布を持つ格子欠陥の表現が可能となり、これによって格子欠陥中心における特異力学場問題の原理的な解決が可能となった。そこで継続研究（二年目）となる本年度は、格子欠陥力学の新しい理論的基盤として、微分幾何学に基づく格子欠陥理論を導入するとともに、その IGA への実装と、それを用いた大規模数値計算の実施を目的とした。析対象は最も基本的な格子欠陥（6 種類のボルテラ欠陥）とし、その力学場の完全な決定を今年度の研究目標とする。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

当研究グループでは、これまで格子欠陥力学研究を連続体力学の立場から行うための基礎研究を進めてきたが、大型計算機を用いた大規模数値計算についてはこれまで研究経験がなかった。そのため、2018 年度から現在のチーム編成で共同研究を開始したが、その結果、当初の予想をはるかに上回るペースで研究を進めることができた。これは、当研究グループが持つ力学理論と、共同研究者である荻野・鈴木が持つ高度な計算機科学の専門知識の相乗効果による。そのため、本年度も昨年度と同様の共同研究体制で研究を進めることにした。結果的に見ると、今年度は理論上の問題が生じたことから大規模数値計算については限定的な実施となったが、今後の展望に示すように、理論を構築後の次々年度からは再び同様のチーム編成で研究に取り組みたい。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

昨年度の研究成果は大きく二つに分けることができる。一つは「非局所弾性理論に基づく格子欠陥力学場の大規模数値解析」である。これまで、当研究グループでは構築した理論の数値解析に Mathematica を用いていたが、これでは解析の規模が大きく限定されてしまう。そこで、Mathematica を用いて書かれ

た IGA のコードを C++ で書き直し、これを阪大サイバーメディアセンターに設置された OCTOPUS を用いて実行した。その結果、計算規模・計算速度の双方で飛躍的な向上が実現できた。

もう一つの研究成果は「行列分解を用いた並列計算の実施」である。IGA を用いた弾性体の解析は、計算機科学の視点では疎行列により表現された連立方程式の解析問題へと帰着する。当グループの IGA 解析では、通常、100 万自由度の問題を解析する際に 60 GB 程度のメモリーを必要とする。将来的には 1 億自由度を超える大規模な問題の解析を予定していることから、領域分割法による並列計算が必要である。そのため、Additive Schwarz 法に基づく領域分割を数値計算に実装し、大規模問題を解くための計算手法の確立を行った。

5. 今年度の研究成果の詳細

上記の研究成果を基にして、今年度は微分幾何学を用いた格子欠陥のモデリングと数値解析を行った。昨年度実施した非局所弾性理論によるモデリングでは、格子欠陥の中心が特異力学場となることから、応力やひずみの発散が生じていた。この問題を解決するために導入したのが Kondo らにより提案された格子欠陥の微分幾何学である。この理論では、連続密度関数を用いてリーマン・カルタン多様体上に転位による塑性変形状態を構成し、この多様体をユークリッド空間へ埋め込むことによって、その後の弾性変形状態を決定する。従来の解析法では、解くべき方程式は弾性変形を決定する応力の平衡方程式のみであったが、この解析法では平衡方程式に加えて多様体を構成するためのカルタンの構造方程式を解く必要がある。

カルタンの構造方程式を解くための一つの方法として、ホモトピー演算子を用いる方法が知られている。そこで本研究では、まず

ホモトピー演算子を用いて格子欠陥を含む多様体を解析的に構成し、次いでこの多様体を数値計算によってユークリッド空間へ埋め込むことで弾性変形状態の決定を試みた。

この解析によって得られた結果を Fig. 1 に示す。転位ループの導入にはレベルセット法を用いており、弾性場の数値計算にはアイソジオメトリック解析を用いている。得られた応力場の断面分布はキルク変形と呼ばれる固体材料の特異な変形形態を再現しており、理想的な解析が行われたものと考えられる。なお、この解析を行った際の計算条件は次の通りである：

- IGA の全自由度：300 万（基底関数は 100x100x100）
- 領域分割：64 領域（重複を含めて 4x4x4 領域に分割）
- 計算機：OCTOPUS の汎用 CPU ノードを 16 ノード使用（合計 384 コア）
- 並列計算：MPI で 65 プロセス
- 並列計算の利用箇所：接線剛性行列の計算、および Newton 法の各ステップでの線形連立方程式の数値計算
- 計算時間：実行時間は 1266.1 秒

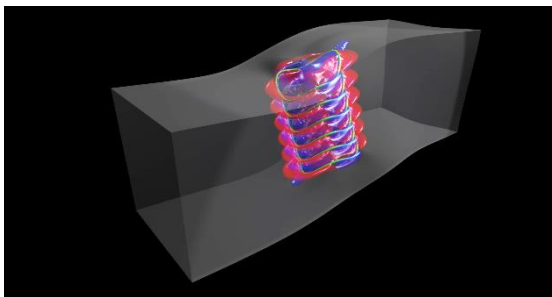


Fig. 1: 転位ループによって生じる力学場の解析結果。図中の 6 本の緑の曲線は転位ループを表しており、その周辺に局在化した Cauchy 応力テンソルを赤・青の等高曲面として表示している。

同様の解析を回位に対して行った結果を Fig. 2 に示す。回位は転位と並ぶボルテラ欠陥の一種であり、回転変形を司る塑性変形として

理解することができる。Fig. 1 同様、Fig. 2 の計算結果もまた回位のモデリングが正しく行っていることを確認している。

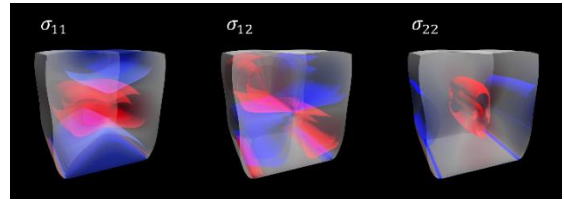


Fig. 2: 回位によって生じる力学場の解析結果。各図の中央に 1 本の回位線が導入されており、その周辺に局在化した Cauchy 応力テンソルを赤・青の等高曲面として表示している。

Fig. 1 および 2 に示した計算結果は今年度の中間報告の時点までに得られたものである。そのため、この段階で当初の研究目標は概ね達成することができた。研究期間の後半はこの計算方法を用いて、様々な格子欠陥の配置とそれに対する応力場の解析を予定していたが、この問題へ取り組むにあたって理論上の問題が発生した。上記のように、微分幾何学を用いた格子欠陥理論ではカルタンの構造方程式を解く必要があるが、弾性体内部の格子欠陥数が増えるとホモトピー演算子を用いた解析解の導出が極めて困難となる。実用上、多数の格子欠陥を同時に取り扱う必要がある。そのため、研究期間の後半では当初の方針を変更してカルタンの構造方程式を数値的に解く方針へと切り替え、そのための理論研究に注力した。その結果、構造方程式の残差ノルムを最小化する方針で数値計算に成功し、また得られた結果をホモトピー演算子を用いた解析解との比較によって、新しい計算手法の妥当性について定量的な検証を終えることができた。しかしながら、この新しい計算手法を用いた複雑な格子欠陥配置に対する大規模数値計算は時間的な制約のため実施することができず、この点が今後の研究課題である。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

上記の通り、今年度の研究は中間報告の時点までは極めて順調に推移しており、この時点で概ね当初計画を達成することができた。しかしながら、研究の基本方針としていたホモトピー演算子による解析解の導出に大きな問題が生じたことから、急遽、研究期間の後半については新しい研究方針への切り替えを行った。その結果、現在では構造方程式の数値計算が可能となったが、JHPCN の 2020 年度申請時期にはこの新しい研究方針の目途が立っていなかったことから、残念ながら 2020 年度の課題申請は見送ることとした。今後の展望としては、現在理論・数値計算技術を向上させ、2021 年度以降に再び JHPCN への課題申請を目指したい。

7. 研究業績一覧（発表予定も含む）

(1) 学術論文（査読あり）

S. Kobayashi and R. Tarumi, ‘Dislocation-based Modeling and Numerical Analysis of Kink Deformations on the Basis of Linear Elasticity’, *Mat. Trans.* Vol. 61, No. 5, pp. 862-869 (2020)

(2) 国際会議プロシーディングス（査読あり）

該当なし

(3) 国際会議発表（査読なし）

Ryuichi Tarumi, Shunsuke Kobayashi, Sho Yamada and Masao Ogino, ‘Dislocation-Based Modeling and Numerical Analysis on the Formation of Kink Band’, 2019 Sustainable Industrial Processing Summit & Exhibition (2019 年 10 月 24 日 Coral Bach Resort, Paphos, Cyprus)

Shunsuke Kobayashi, ‘Differential geometry of defective solids: modeling and numerical analysis’, RIMS Workshop: Pattern formation and defects in biology and materials science (2019 年 10 月 8 日、関西セミナーハウス)

Ryuichi Tarumi, ‘Irreducible decomposition of strain gradient elastic constants and its application to lattice defect’, RIMS Workshop: Pattern formation and defects in biology and materials science (2019 年 10 月 8 日、関西セミナーハウス)

Ryuichi Tarumi and Shunsuke Kobayashi, ‘Numerical verification of Hess-Barrett model for kink deformation’, (The international conference “ADVANCED MATERIALS WEEK”, The 5th Japan-Russian Seminar on Advanced MAterials: the structure and mechanism of plasticity of advanced magnesium alloys and related materials (2019 年 9 月 20 日 ITMO University, Saint Petersburg, Russia)

(4) 国内会議発表（査読なし）

垂水竜一, 小林舜典, 微分幾何学による格子欠陥のモデリングと数値解析, 日本金属学会 2020 年春期 (第 166 回) 講演大会 (2020 年 3 月 17 日, 東京工業大学, 基調講演)

垂水竜一, 小林舜典, 格子欠陥の微分幾何学とキック解析への応用, 日本物

理学会 第75回年次大会 (2020年3月16日, 名古屋大学)

垂水竜一, 格子欠陥のマルチスケール連続体力学解析へ向けて, 第21回現象数理解析研究会 (2019年11月18日 金沢大学自然科学研究科)

小林舜典, 線欠陥を含む物体の微分幾何と内部応力場の数値計算, 第21回現象数理解析研究会 (2019年11月18日 金沢大学自然科学研究科)

高橋慶多, 垂水竜一, 小林舜典, 微分幾何学を用いた回位のモデリングと応力場の数値解析, 日本機械学会 M&M2019 材料力学カンファレンス (CMD2019) (2019年11月2日 九州大学伊都キャンパス)

丹治大輝, 堀川由人, 小林舜典, 垂水竜一, Riemann多様体上の弾性論を用いた不均一変形のモデル化と数値解析, (日本機械学会 第32回計算力学講演会 (CMD2019) (2019年9月17日 東洋大学川越キャンパス))

小林舜典, 垂水竜一, 鈴木厚, 荻野正雄, 微分幾何学を用いた転位ループのモデル化と数値解析, (日本機械学会 第32回計算力学講演会 (CMD2019) (2019年9月17日 東洋大学川越キャンパス))

山田翔, 小林舜典, 垂水竜一, 鈴木厚, 荻野正雄, 拡張アイソジオメトリック解析を用いた転位ループのモデル化と数値解析, (日本機械学会 第32回計算力学講演会 (CMD2019) (2019年9月17日 東洋大学川越キャンパス))

垂水竜一, 転位論に基づくキンク変形の表現とその数値解析, (結晶の界面, 転位, 構造の先進数理解析 (2019年9月9日 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所))

垂水竜一, 小林舜典, 連続体力学に基づくキンク変形のモデリングと数値解析, (日本繊維学会年次大会 (2019年6月7日 タワーホール船堀))

垂水竜一, 連続体力学を用いた格子欠陥のモデリングと数値解析, (粉体粉末冶金協会 2019年度春季大会 (2019年6月5日 東京工業大学)), 招待講演)

(5) その他(特許, プレスリリース, 著書等)
該当なし