

非局所弾性理論に基づく格子欠陥力学場のアイソジオメトリック解析

JHPCN

研究の概要

固体材料の強度や力学特性は、材料内部に存在する格子欠陥の力学場に強く依存することが知られている。個々の格子欠陥力学場に対する数値解析手法として、本研究課題では非局所弾性理論に基づくアイソジオメトリック解析 (IGA: IsoGeometric Analysis) を用いる。非局所弾性理論は、従来の古典弾性体の構成則にひずみ勾配項を取り入れて一般化したもので、これによって格子欠陥中心における特異応力場の解決が期待される。一方、IGAはNURBS (NonUniform Rational B-Spline) を基底関数とした弱形式解析であり、非局所弾性理論が要請する基底関数の高次微分可能性に対して柔軟な対応が可能となる。本研究課題では、(i)非局所弾性理論に基づくIGAの大型並列計算機への実装、(ii)固体材料中の線欠陥 (Volterra欠陥) と点欠陥 (格子間原子・原子空孔) 近傍に形成される応力場の解析、という二つの研究目的を設定する。その遂行により、スーパーコンピュータを用いた高精度な格子欠陥力学場の解析手法を確立する。

非局所弾性理論に基づくアイソジオメトリック解析

非局所弾性体の構成則にはひずみの1次勾配を考慮した次の形式を考える。

$$\mathcal{W} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + M_{ijklm} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl,m} + \frac{1}{2} A_{ijklmn} \epsilon_{i,j,k} \epsilon_{l,m,n}$$

ここで弾性定数 C_{ijkl} , M_{ijklm} , A_{ijklmn} には等方性および中心対称性を仮定する。さらに、Schur-Weylの双対律を用いて一般線形群 $GL(3)$ 下での既約分解を行い、その全対称な部分空間から構成則を導いた。この弾性体に対する弱形式の応力平衡方程式は次のように表される。

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial u_{i,j}} \delta u_{i,j} + \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial u_{i,j,k}} \delta u_{i,j,k} \right) dV - \int_{\Omega} F_i \delta u_i dV - \int_{\partial\Omega} p_i \delta u_i dS - \int_{\partial\Omega} R_i D \delta u_i dS = 0$$

大型並列計算機への実装

本研究課題で遂行する格子欠陥力学場の解析は、計算機科学上は実対称疎行列によって表される線形方程式の数値解析に帰着される。この解析にあたって、本研究課題ではLU分解を用いた直接法と、Additive Schwarz法を前処理とした反復法 (共役勾配法) の二つの手法を用いる。直接法を用いた計算では、 $DOF = 10^6$ 以下の比較的小さな自由度を持つ非線形系を対象とし、Dissectionをソルバーとした解析を行う。この計算にはOCTOPUS (阪大・CMC) の汎用CPUノードを用いる。一方、反復法を用いた計算では $DOF = 10^7$ 以上の大きな自由度を持つ線形系を対象とし、OCTOPUSの大容量主記憶搭載ノードを使用する。

Volterra欠陥の応力場計算とその応用

Volterra欠陥は、固体中に存在する転位と回位 (線欠陥) の総称であり、前者は刃状転位とらせん転位に、後者はツイスト回位とウェッジ回位に分類される。本研究課題では、これらの格子欠陥近傍に形成される応力場計算と、そのキック変形機構解析への応用を進める。キック変形は、正負の刃状転位対により構成される面状の格子欠陥である。変形を誘導する刃状転位対のバーガスベクトルは並進成分のみを有するが、極性の異なる二つのキック面間には、回位に類似した回転変形場が生み出される。スーパーコンピュータを用いた精密な応力場計算と、微分幾何学を用いた数理解析を組み合わせることで、キック変形の形成機構解明を目指している。

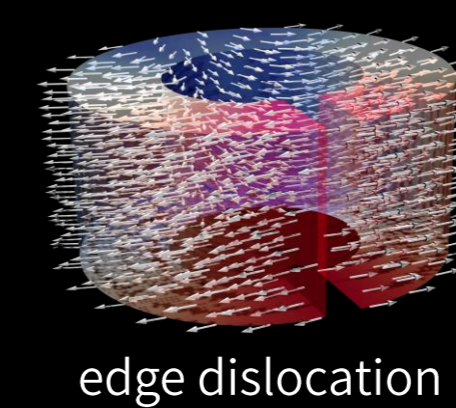
格子間原子近傍の応力場計算とその応用

金属材料中には、様々な元素が格子間原子として固溶している。これらの原子はその周辺に応力場を生み出すが、この応力場と他の格子欠陥群 (線欠陥や面欠陥など) の応力場との長距離弾性相互作用によって、固溶原子は格子欠陥近傍へと異方的に拡散する。本研究課題では、スーパーコンピュータを用いて格子間原子近傍の精密な応力場を導くとともに、これをランジュバン方程式と連成させた新しい計算手法の開発を行う。これによって、固溶原子 (水素原子や炭素原子等) の長距離拡散経路解析を、実現象と同一の時・空間スケールで実現する新しいマルチスケール解析手法の確立を目指す。

共同研究体制

垂水竜一 (大阪大学)
荻野正雄 (名古屋大学)
鈴木厚 (大阪大学)
小林俊典 (大阪大学)
堀川由人 (大阪大学)

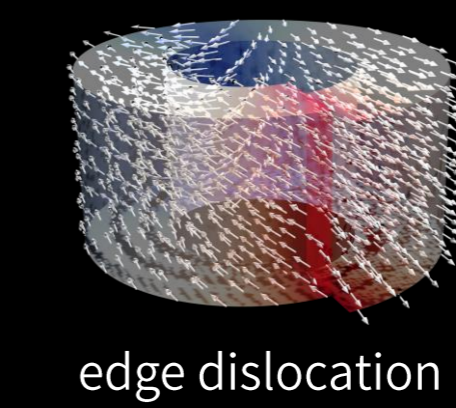
Classification of line defects (Volterra distortions)



edge dislocation



twist disclination



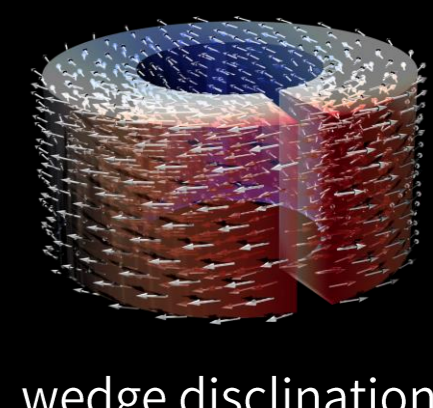
edge dislocation



twist disclination

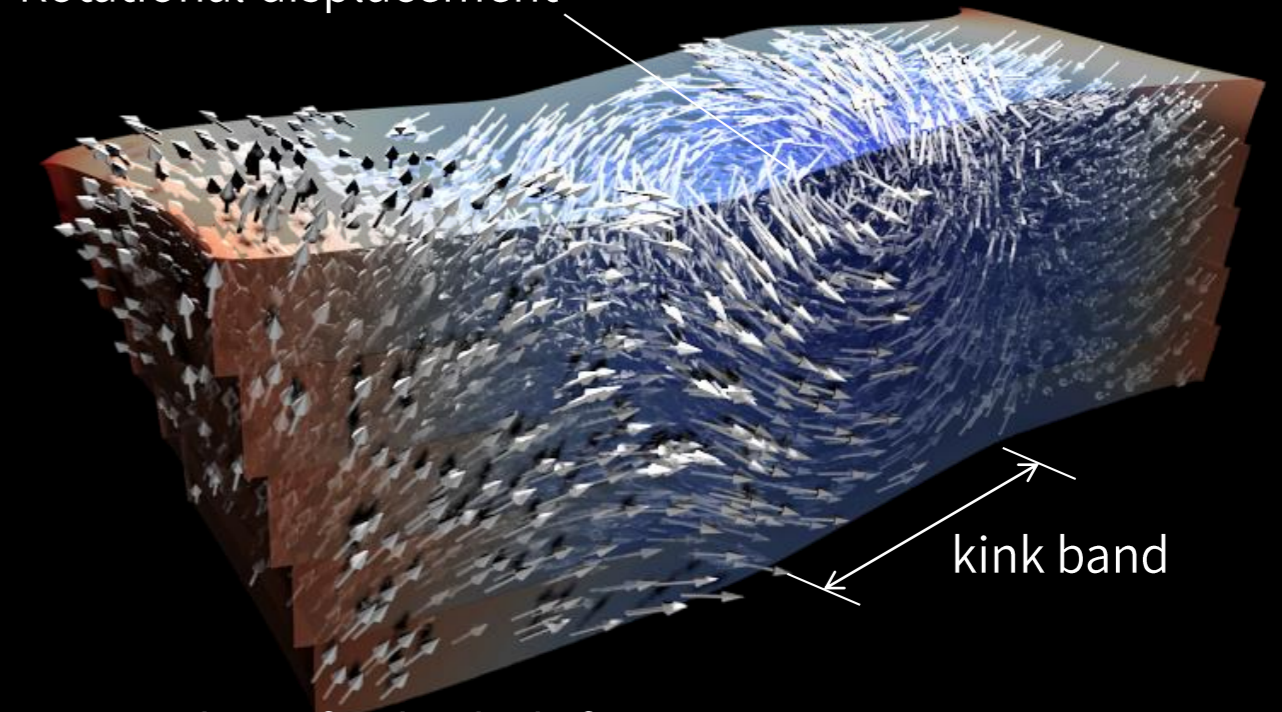


screw dislocation

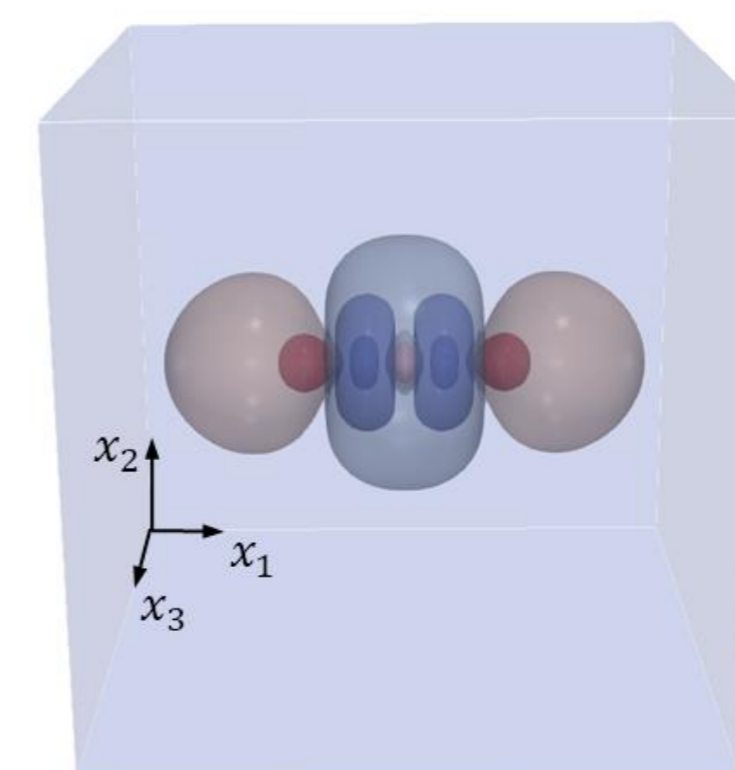


wedge disclination

Rotational displacement



IGA+FSGE analysis for kink deformation



Localized stress field around a pair of interstitial atoms

