



研究の概要

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大きな研究課題となっている。昨年度は、非局所弾性体中の格子欠陥力学解析を行い(jh180028-NAJ)、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レベルのOAS法を用いた大規模並列計算の準備を整えたが、一方で、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った。そのため本研究では、微分幾何学を用いた格子欠陥のモデル化を行うとともに、これをアイソジオメトリック解析を用いた並列計算へ実装することによって、格子欠陥が生み出す力学場を系統的に明らかにすることを目的とする。

共同研究体制

垂水竜一 (大阪大学)
 荻野正雄 (大同大学)
 鈴木 厚 (大阪大学)
 小林舜典 (大阪大学)
 山田 翔 (大阪大学)

微分幾何学に基づく格子欠陥のモデル化

本研究で解析する格子欠陥は、刃状転位、らせん転位、くさび型回位、ねじれ型回位を含む計6種類の線欠陥である。格子欠陥の一例として、Fig. 1に結晶中の刃状転位を模式的に示す。図中の⊥記号に沿って挿入された余分な原子面が刃状転位を表しており、その周囲に引かれた回路の始点(S)と終点(F)を結ぶベクトル**b**がこの刃状転位のバーガースベクトルである。

Fig. 2に微分幾何学を用いた解析を模式的に示す。まず、解析対象とする刃状転位の転位密度を仮定し、この転位が生み出す変形勾配を次のように乗算分解する： $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$ 。ここで \mathbf{F}^p は塑性変形勾配、 \mathbf{F}^e は弾性変形勾配を表している。塑性変形は一般に振率を生み出すことから、塑性変形後の中間状態はユークリッド空間内ではなく、これを数学的に拡張した材料多様体（Riemann-Cartan多様体）となる。この中間状態からユークリッド空間内の現状態への埋め込み写像が弾性変形となる。具体的な解析手順は次の通りである。まず、与えられた格子欠陥密度（振率1形式 T^i 、曲率2形式 R_j^i ）とCartanの第一・第二構造方程式を用いて材料多様体の双対枠 ϑ^j と接続係数 ω_k^i を決定する。

$$\begin{aligned} T^i &= d\vartheta^i + \omega_j^i \wedge \vartheta^j & \vartheta^j &: \text{orthonormal frame} \\ R_j^i &= d\omega_k^i + \omega_l^i \wedge \omega_k^l & T^i &: \text{vector-valued torsion 2-form} \\ dT^i &= R_k^i \wedge \vartheta^k - \omega_j^i \wedge T^j & \omega_j^i &: \text{matrix-valued connection 1-form} \\ dR_j^i &= R_k^i \wedge \omega_j^k - \omega_k^i \wedge R_j^k & R_j^i &: \text{matrix-valued curvature 2-form} \end{aligned}$$

ここから中間状態の計量テンソル $g_{[0]cd}$ を決定することができる。次に、材料多様体からユークリッド空間への埋め込み写像を $x_{[t]}^l$ とすると、この問題は $x_{[t]}^l$ を未知関数とした弾性ひずみエネルギー汎関数の最小化問題へと帰着する。この汎関数の停留条件（弱形式のEuler-Lagrange方程式）は次のように表される。

$$\int_{M_{[0]}} \delta_{ij} C^{abcd} \frac{\partial x_{[t]}^i}{\partial u^a} \frac{\partial x_{[t]}^j}{\partial u^b} \left(\delta_{kl} \frac{\partial x_{[t]}^k}{\partial u^c} \frac{\partial x_{[t]}^l}{\partial u^d} - g_{[0]cd} \right) \det(J_{st}) v_{[0]} = 0$$

本研究では、この方程式をアイソジオメトリック解析（NURBSを基底関数とした Galerkin法による弱形式解析）を用いて数値計算し、格子欠陥の力学場を決定する。

格子欠陥力学場の数値計算

参考のため、この解析方法によって得られた刃状転位の応力場の数値計算結果をFig. 3に示す。図において、境界条件としてはモデル下面にDirichlet条件を課している。ここでは約37万自由度の解像度の低いテスト計算を行っていることから、計算領域が狭く、得られた応力場は境界条件の影響を大きく受けて上下非対称となっているが、その点を除けば良好な応力場が得られている。特に、微分幾何学を導入することで転位密度分布を連続関数として表現したことによって、得られた格子欠陥の応力場は転位芯においても非物理的な発散を示しておらず、領域全体で正則化されている点が大きな進歩となっている。本研究では、この数値計算を大型並列計算機へ実装し、高解像度の格子欠陥の力学場解析を実施する。並列化の手法としては、弾性体の物理領域を分割し、領域境界での基底関数の重複を考慮した2レベルのOverlapped Additive Schwarz法（2レベルOAS法）を用いることで、MPIとOpen-MPによるハイブリッド並列計算を実現する。この解析に必要な計算機資源としては、阪大・サイバーメディアセンターのOCTOPUSおよびSX-ACEの使用を予定している。

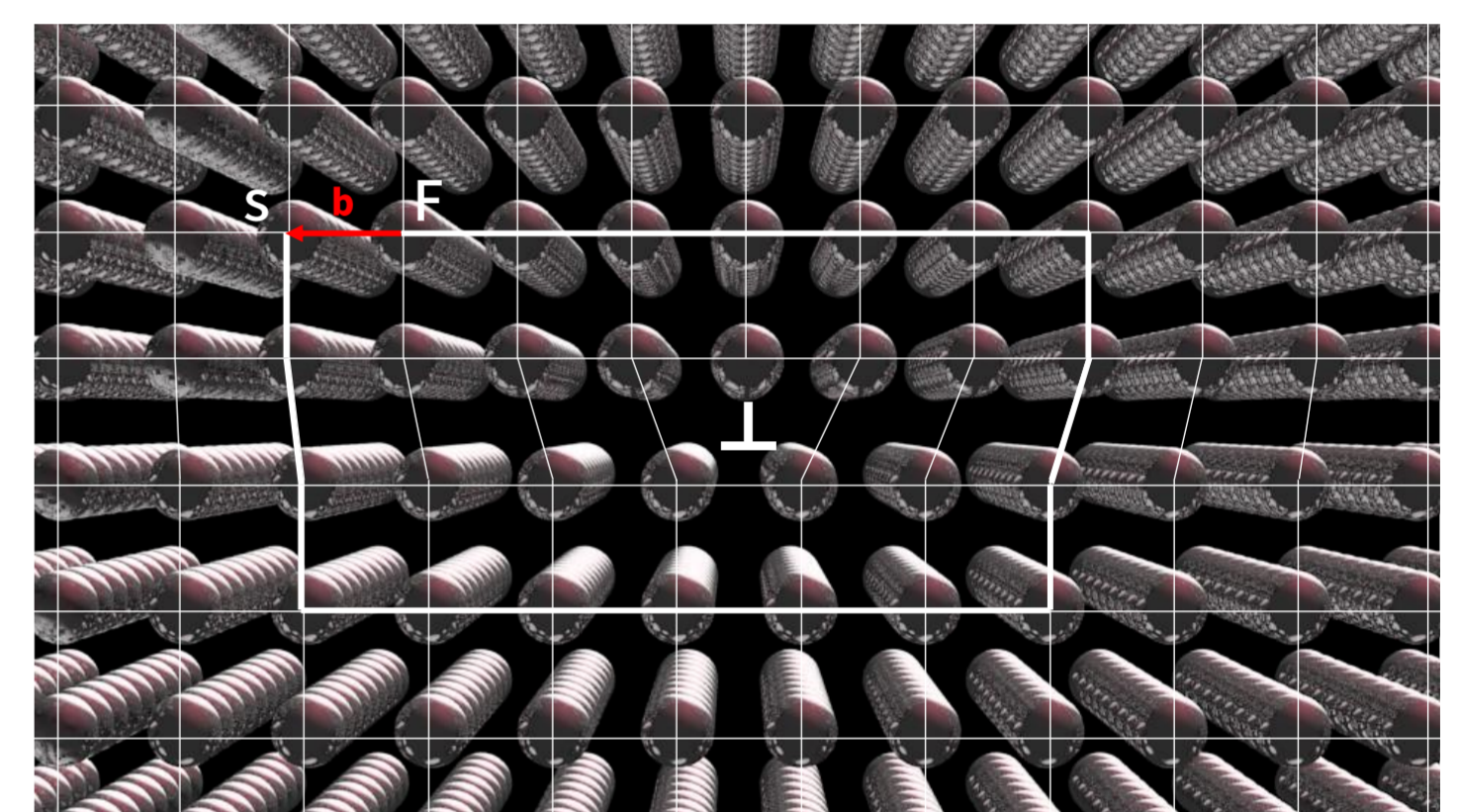


Fig. 1: Schematic illustration of edge dislocation and Burgers circuit, where b is called Burgers vector. The symbol \perp represents the location of extra-half plane.

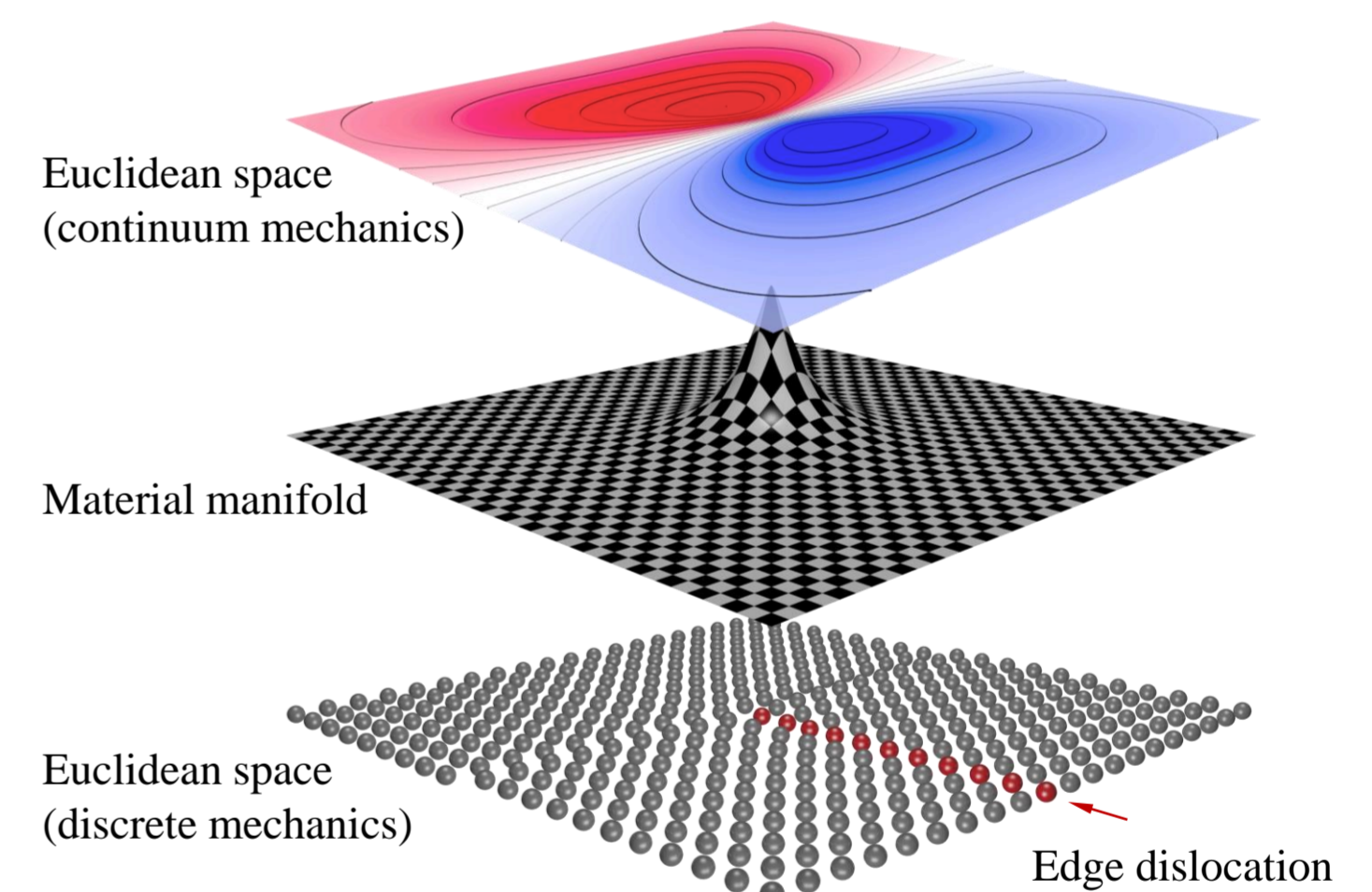


Fig. 2: Modeling of an edge dislocation on the basis of differential geometry. Plastic displacement of an edge dislocation generates torsion tensor on a material manifold (Riemann-Cartan manifold). Corresponding elastic fields are obtained by embedding of the manifold to Euclidean space.

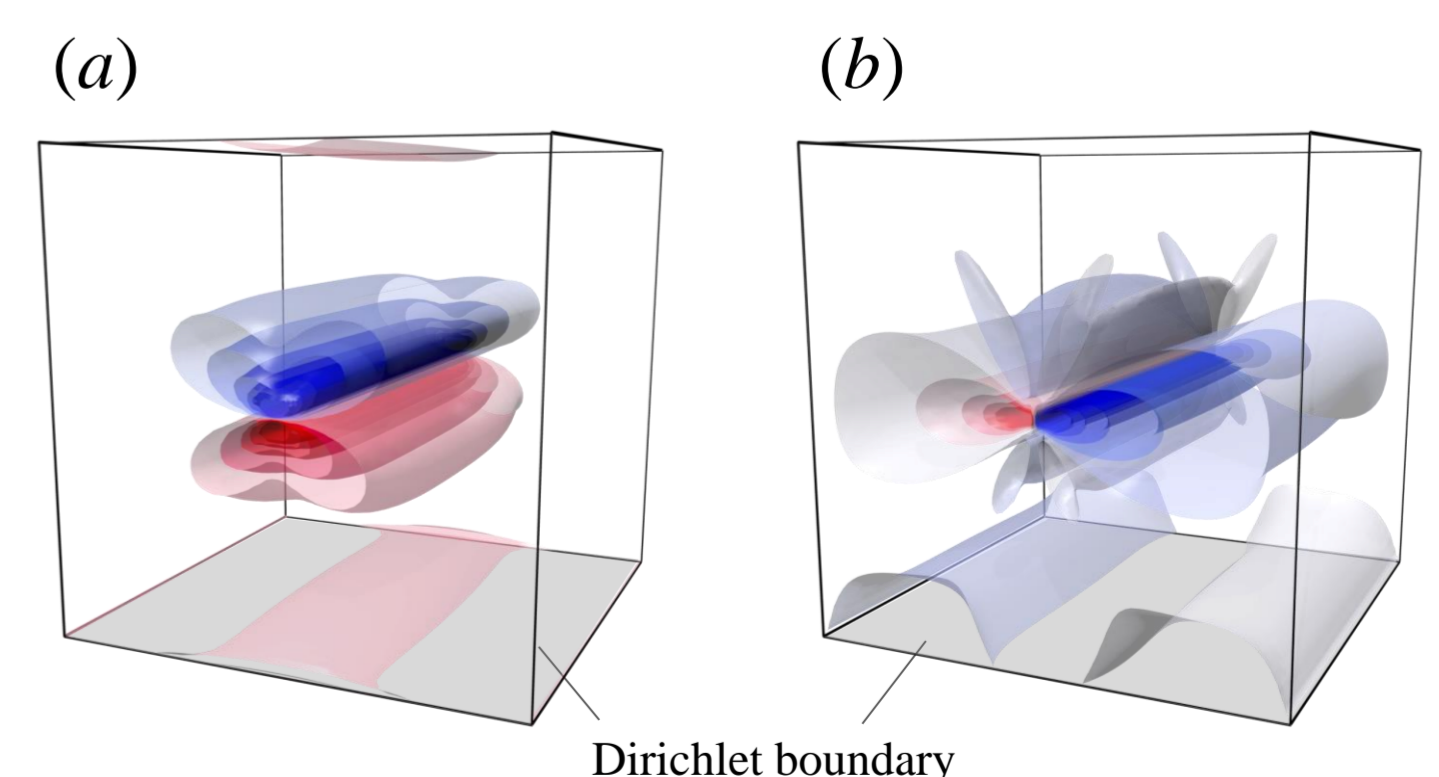


Fig. 3: 2nd Piola-Kirchhoff stress field around an edge dislocation obtained by NURBS-based IGA. (a) and (b) show S_{11} and S_{12} stress components, respectively. The stress fields show no singularity even at the core of dislocation. Note that Dirichlet boundary condition is imposed on the bottom plane.