

## 2014 JACM Awards の募集

吉村 忍 JACM 会長 (東京大学)

日本計算力学連合 (JACM) は、計算力学分野における顕著な功績および業績をあげた研究者を表彰する3種類の JACM Awards の候補者を募集します。JACM 会員におかれましては、候補者を自薦他薦で奮ってご推薦下さい。

推薦者は、次の5項目を含む A4 用紙 1 ページの推薦書 (PDF フォーマット) の推薦書を期日までに提出してください。

推薦書に記載すべき項目

1. 推薦しようとしている Award の名称
2. 候補者の氏名, 所属・住所, e-mail アドレス  
(奨励賞候補者は生年月日も記載のこと)
3. 推薦者の氏名, 所属・住所, e-mail アドレス
4. 主な受賞歴を含む経歴 (最大 10 行以内)

完全なリストである必要はありません。最近のものあるいは最も重要なポストを記載してください。

5. 候補者の最も主要な功績あるいは業績の簡潔な記述 (500 字以内)

特に、その Award の候補者として推薦する理由がわかるように記載してください。

今回募集する JACM 各賞は次の通りです。過去の受賞者は、下記 URL で一覧できます。

<http://www.sim.gsic.titech.ac.jp/jacm/Japanese/Award/index.html>

また、推薦状のフォーマット兼例文は、同じ URL にあります。推薦書は、2014年3月31日 (月) までに e-mail にて、次のアドレスに送ってください。

送付先: [yoshi@sys.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:yoshi@sys.t.u-tokyo.ac.jp)

本 Award 受賞者には、2014年7月20日-25日にスペインで開催されます WCCM XI-ECCM V-ECFD VI(<http://www.wccm-eccm-ecfd2014.org/>)の会期中に開催されます 2014年 JACM 総会において表彰予定です。

\*\*\*\*\*

### JACM Awards

#### The JACM Computational Mechanics Award

日本計算力学賞 (3名以内)

計算力学の広い分野での顕著な研究業績、ソフトウェア開発、計算技術開発に対して与えられる。

#### The JACM Young Investigator Award

日本計算力学奨励賞 (3名以内)

計算力学分野で顕著な業績及び研究を行った 40 才以下 (表彰年以内に 41 才になってはならないこと) の研究者に与えられる。

#### The JACM Fellows Award

日本計算力学連合フェロー賞 (5名以内)

計算力学分野で顕著な業績を上げ、JACM へのサポート、および IACM 関連国際学会に貢献した研究者に対して与えられる。

## WCCM2014 のご案内及び学生向け奨学金の募集

吉村 忍 JACM 会長 (東京大学)

11<sup>th</sup> World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI), 5<sup>th</sup> European Conference on Computational Mechanics (ECCM V) and 6<sup>th</sup> European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD VI) が2014年7月20日 (水) ~25日 (土) にパロセロナ (Palau de Congressos de Catalunya, Barcelona) で開催されます。前回、第10回のWCCMは2012年にブラジル・サンパウロ市で開催されています。

会議の詳細はWEBページ:

<http://www.wccm-eccm-ecfd2014.org/>

に掲載されております。以下に重要な締切日を列挙致します。

3月15日 フルペーパー提出締切

3月15日 Early Registration 締切

状況により変更があるかもしれません。WEBページを

適宜ご覧下さい。JACM総会ならびに2014 JACM Awards授賞式をWCCM2014期間中に開催致します。JACM会員の皆様におかれては本会議に奮ってご参加の程お願いいたします。

また、この会議において、IACMは学生向けに奨学金(具体的には、全部で29名の学生参加者に、学生参加登録費375ユーロを無料にする)を出すことを決定しました。そのうちJACMに2名の割り当てが来ました。つきましては、JACMより提案する学生参加者2名を公募したいと思えます。以下にその公募要領を示しますので、是非奮ってご提案いただきますよう、よろしくお願い致します。

#### 応募資格

1. Full-time university student (学部、大学院どちらでも可)であり、本人自身がJACM会員であるか、あるいはJACM会員の研究室に所属していること
2. WCCM2014での口頭発表がAcceptされていること (Acceptの通知は2014年2月15日です)
3. WCCM2014にFull-length paperを提出すること (提出締切は2014年3月15日です。)
4. その発表のFirst Authorであり、自分自身でpresentationすること
5. Scholarshipに採択された場合にはpresentationとFull-length paperにIACM supportを明記

(acknowledge) すること

#### 提出書類

以下の書類を、JACM事務局(jacm-jim@save.sys.t.u-tokyo.ac.jp)に2014年2月18日(火)17:00締切、までに提出すること

1. 以下の情報(すべて英語)をフリーフォーマットで記載したpdfファイル1) Name and e-mail of applicant, 2) Sex, 3) Date of birth, 4) Age, Affiliation, school year on July 1, 2014, 5) Name, Affiliation and e-mail of Advisor
2. WCCM2014に申し込んだAbstract
3. WCCM2014に提出予定のFull-length paperのdraft (Abstractのtemplateを使い最低6ページとする。もし、Full-length paperのTemplateがWCCM2014のwebにupされればそれに従っていただいても結構です。)

#### 選考方法

JACM会長を委員長とする選考委員会(執行部を中心に5名)を設け、そこで書類審査により選考する。なお、選考にあたっては分野のバランスも考慮する。選考結果は、2014年2月26日頃を目途に通知する。

## JACM 関連若手研究者紹介 (その1)

JACMメルマガ新企画として、JACMに関連する若手研究者の方々を順次紹介していきたいと思えます。その第1回として、高橋昭如先生(東京理科大学)と荻野正雄先生(名古屋大学)を紹介いたします。

### 金属材料の強化機構に関する 転位動力学解析

高橋 昭如 (東京理科大学)

金属材料の強化機構として、1) 分散強化、2) 析出強化、3) 固溶強化、4) 結晶粒微細化強化などが挙げられる。これらの強化機構の根本的なメカニズムは、塑性変形の源である転位の運動を制御することである。したがって、転位に対する粒子や析出物、溶質原子、結晶粒界の影響を考慮することによって、転位の運動に必要なせん断応力(臨界分解せん断応力)の変化を理論的に計算することが可能である。しかし、これらの臨界分解せん断応力の理論的な計算では、主に転位の形状や粒子・析出物を作る弾性場の影響などを考慮するに留まり、原子論的な転位芯の影響や、複数の転位間の弾性相互作用の影響などが考慮されていないため、強化機構による臨界分解せん断応力の定量的な評価を行うことが困難であった。

近年、転位を原子構造の乱れとして表現するのではなく、転位を直接離散化し、転位の運動を調べる転位動力学法の開発によって、複数の転位の複雑な弾性相互作用の計算や、転位に関するさまざまな性質を変化させた計算が可能になってきた。本研究では、転位動力学法を基礎とした金属

材料の強化機構に対する新しい数値計算手法を開発し、原子論的な転位芯の影響などを含めた金属材料の強化機構の全貌を理解することを目的としている。これまでに、分散強化、固溶強化、析出強化、結晶粒微細化強化のそれぞれについての研究に取り組んできたが、その中から本稿では、析出強化と結晶粒微細化強化について実施した研究成果について紹介する。

析出強化とは、母材中に析出物を形成し、析出物が転位の運動に対する障害物として働くことによって、臨界分解せん断応力を上昇させる方法である。転位は析出物から様々な影響を受けながら、析出物の内部を進行し、析出物をせん断することによって材料中を進行する。この強化を与える機構として1) 積層欠陥強化、2) 整合強化、3) 弾性率の違いによる強化などが考えられている。従来の転位動力学法は、無限均質体中の転位の運動を解析することが可能であるが、このような析出物を含んだ非均質体中の転位の運動を解析することは不可能であった。そこで、本研究では、重ね合わせの原理を用いて転位を含む無限非均質体の弾性問題を、転位を含む無限均質体の弾性問題と、それを修正する修正問題に分解し、前者は転位動力学法で計算し、後者については修正問題の境界積分方程式を導出して境界要素法を用いて解く方法を開発した<sup>[1]</sup>。さらに、転位の原子論的特性である転位芯の影響を、古典的な転位芯の連続体モデルである Peierls-Nabarro モデルを、離散転位によって離散化することによって、転位動力学法に実装し、転位動力学法において転位芯の影響を考慮することを可能にした<sup>[2]</sup>。この方法では、従来1本の転位線は、バーガスベクトル  $\mathbf{b}$  を有する1本の線で表現していたのに

対し、1本の転位線を、バーガースベクトル  $b/n$  を有する  $n$  本の線で表現する。開発した方法を用いて、鉄中の銅析出物と刃状転位の相互作用の数値解析を実施した。計算により得られた、刃状転位と銅析出物の相互作用過程を図1に示す。図1(a)-(c)では、Peierls-Nabarroモデルを用いて転位芯の影響を考慮した結果を示している。転位が析出物内部に侵入すると転位芯の幅が大きく広がり、転位が強く銅析出物に運動を阻害されながら析出物を越えていく様子を見ることができる。一方、図1(d)-(f)では、転位芯の影響を考慮せず、従来の転位動力学法と同様に1本の転位線を用いて計算した結果を示している。この結果では、転位芯の影響を考慮した場合に比べて、銅析出物から転位が受ける影響は弱く、大きく湾曲すること無く転位が移動していることが分かる。

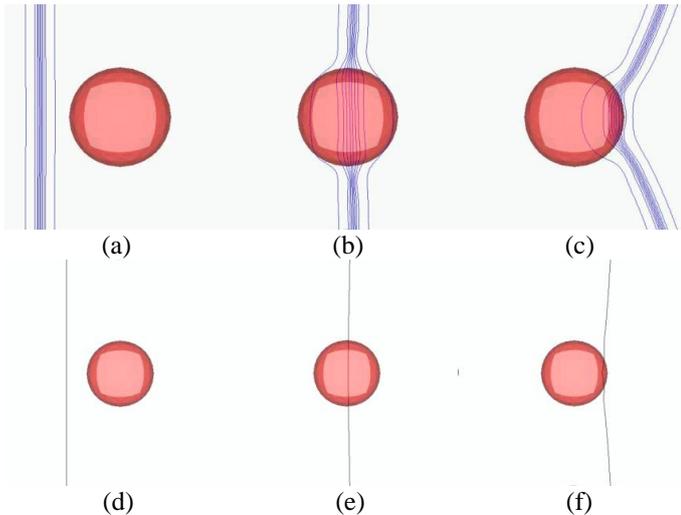


図1 刃状転位と銅析出物の相互作用過程。(a)~(c)は転位芯を考慮した場合。(d)~(f)は転位芯を考慮しない場合

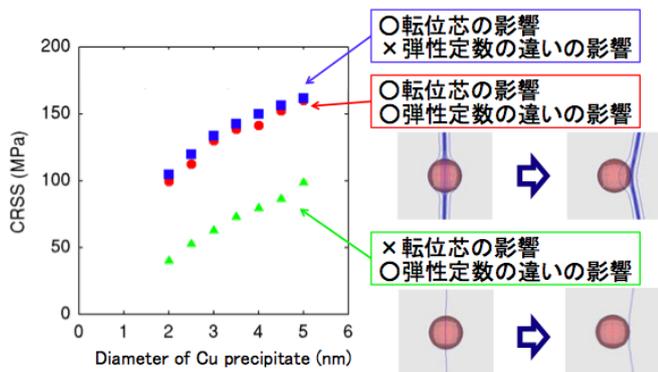


図2 異なる直径の銅析出物に対する臨界分解せん断応力 (CRSS) の計算結果

図2に転位が銅析出物を越えて移動するために必要な臨界分解せん断応力を示す。銅析出物の直径が大きくなると、臨界分解せん断応力も上昇している。弾性率の違いの影響を無視して、銅析出物の弾性率を母材の弾性率と同様として計算した結果は、転位芯の影響と弾性率の違いの影響の両者を考慮した結果とほぼ同様の結果となっているが、転位芯の影響を考慮しない場合には、他の結果と比較すると非常に小さい結果となっている。すなわち、この結果から刃状転位と銅析出物の相互作用において、転位芯の影響が臨界分解せん断応力に対して強く影響し、弾性率の違いによる影響は小さく、支配的なメカニズムであることが分かった。このように転位芯の影響や、非均質体の取り扱いを転位動力学法に実装することによって、転位の運動に関連

する機構を変化させたシミュレーションが可能になり、強化機構に影響を与えるメカニズムの発見やその影響を調べることが可能になった。

結晶粒微細化強化に関する研究では、転位の運動に基づく塑性変形解析から、マクロな応力-ひずみ関係を導出することを可能にした。多結晶金属の降伏応力や変形応力は、結晶粒径に依存する(寸法効果)ことが知られており、古典的には、”Smaller is stronger”ということが知られている。このような寸法効果の発現機構を詳細に調べるためには、塑性変形の源である転位の挙動から、材料の巨視的な塑性変形(降伏挙動)を理解する必要がある。そこで本研究では、転位の運動によるミクロな塑性変形の転位動力学解析と、マクロな応力-ひずみ応答を、均質化法を用いて連成させ、多結晶金属の変形応力に見られる寸法効果の新しい数値解析手法を開発した。多結晶金属を構成する結晶粒は弾性異方性を有し、それぞれの結晶粒が異なる結晶方位を持つことから、見かけ上弾性定数の異なる材料の集合体として考えることができる。このような析出物の場合と異なる形式の非均質体中の転位動力学解析を可能にするために、O’Dayらによって提案されている領域分割型の重ね合わせの原理<sup>[3]</sup>を応用した。この方法における修正問題の解法には有限要素法を用いる。さらに、Okumuraらによって提案されている転位動力学解析に対する均質化理論<sup>[4]</sup>を修正し、領域分割型の重ね合わせの原理に対する均質化法を開発した。これらにより、結晶粒が持つ弾性異方性の影響を精度良く考慮することが可能になり、またミクロな転位の運動による塑性変形と、マクロな応力-ひずみの応答を連成させることが可能になった。開発した転位動力学法を用いて、多結晶金属(銅)の塑性変形解析を行った。図3に解析に用いた多結晶体の有限要素メッシュを示す。多結晶体は、16個の結晶粒を含み、全方向に周期境界条件を課し、結晶粒の形状は14面体(ケルビンセル)とした。結晶粒径を4, 6, 8  $\mu\text{m}$ に変化させ、結晶粒内での転位の運動および応力-ひずみ応答を調べた。また本研究では、転位は結晶粒界を通過することができず、結晶粒界の位置で運動を停止することを仮定し、転位源として両端を固定した転位線分(Frank-Read源)を用いた。図4に転位の運動の様子を示す。転位源から放出された転位ループが結晶粒内を移動し、結晶粒界を先頭として堆積している様子を見ることができる。また結晶粒内部では、転位同士の切り合いや出会いが数多く起こり、ジョグやジャンクションが多数形成していることができた。図5にマクロな応力-ひずみ関係を示す。4~8  $\mu\text{m}$ と結晶粒径の変化の幅は小さいが、結晶粒径が小さくなるにつれ、変形に必要な応力が上昇していることが分かる。これは”Smaller is stronger”の古典的な寸法効果の理解と定性的に一致している。また本シミュレーションでは寸法に関するパラメータは転位の持つバーガースベクトルの大きさだけであり、その他の人工的な寸法パラメータを全く用いていない。

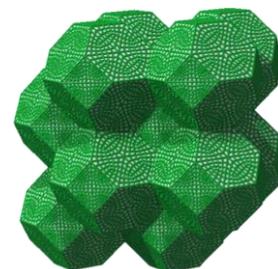


図3 多結晶金属(銅)の有限要素メッシュ

# 超大規模有限要素解析の実用化研究

荻野 正雄 (名古屋大学)

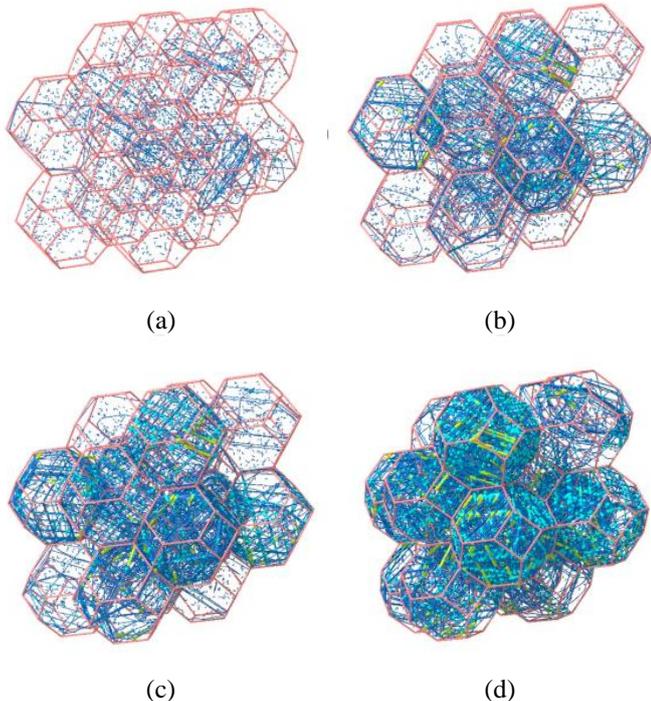


図4 多結晶金属(銅)中の転位の運動

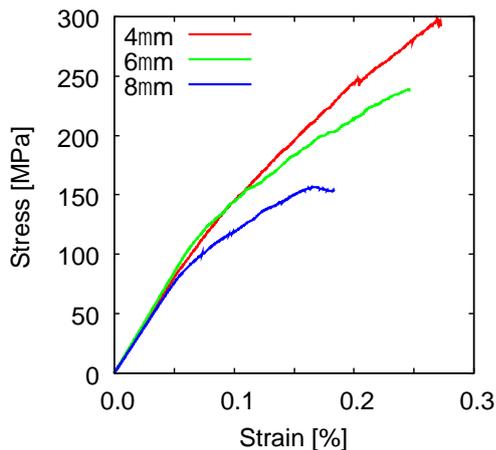


図5 マクロな応力-ひずみ応答

最後に、本研究では転位動力学法を中心として、転位に関連する数値解析手法を開発しながら、金属材料の強化機構の詳細な理解を目指した研究を行っている。これまでに、分散強化や析出強化など、個々の強化機構の数値解析を実現してきた。しかし実際の金属材料における強化は、これらの複合的な影響の結果として現れるため、個々の強化機構を理解するのみでは不十分であろう。今後は、転位動力学法の大規模化を視野に入れながら、複合的な強化機構の解明に向けた数値解析手法の開発および数値解析に関する研究に取り組んでいきたい。

## 参考文献：

- [1] A. Takahashi, N.M. Ghoniem, J. Mech. Phys. Solids, 56 (2008), pp.1534-1553
- [2] A. Takahashi, N.M. Ghoniem, Phys. Rev. B, 80 (2009), 174104
- [3] M.P. O'Day, W.A. Curtin, J. Appl. Mesh, 71 (2004), pp.805-815
- [4] D. Okumura, N. Ohno, K. Yamaguchi, Int. J. Plast., 27 (2001), pp.2040-2055

この度は、私の研究を紹介できる機会をいただきありがとうございます。

私は、名古屋大学情報基盤センター大規模計算支援環境研究部門において、ハイ・パフォーマンス・コンピューティング(HPC)を専門とし、工学などで表れる偏微分方程式の初期値境界値問題に対する数値解析において、大規模数値シミュレーションを実用化することを目指し、数値計算アルゴリズムや並列計算機利用技術に関する研究を行っています。特に、数値解析法として有限要素法を対象とし、大規模な疎行列を係数に持つ線形方程式に対する高速・安定な反復法や効率的な負荷分散方法の開発、そこから得られる大規模数値データの効率的な並列可視化システムの構築、将来を見据えた多様な演算処理装置に対する性能最適化、それらの技術を応用した防災・減災分野やものづくり分野における大規模汎用 CAE システムの構築などを行っています。

「大規模な」有限要素解析を実用化するためには、解くべき線形方程式に対して反復法がある程度の回数で収束することが保証され、計算資源の処理能力向上に対応して実行時間が改善することで、小規模解析の場合と同程度の計算時間で近似解を得ることが期待できる必要があります。そこで、任意形状に対して非構造格子を用いる有限要素解析においても高い並列効率が期待できる数値計算法として、領域分割法(DDM)に着目しています。DDMは、国内では東洋大学の矢川元基教授のグループによって長らく研究されており、図6のように領域分割したメッシュデータを階層的に管理することで、並列計算機が持つ階層構造に対して柔軟に対応することが可能な手法です。そこで、東洋大学の塩谷隆二教授と共同で、この数値計算アルゴリズムを拡張し、マルチコア CPU, GPU, メニーコアなどの異機種混在環境への応用を行い、将来の計算機アーキテクチャにおける並列効率や演算効率の改善を目指しています。また、DDMは構造解析を中心に発展してきましたが、苫小牧工業高等専門学校の武居周准教授並びに諏訪東京理科大学の杉本振一郎助教と共同で、電磁場解析への応用に向けてDDMの改良を進めるとともに、産業機械の設計や生体影響の評価などを行っています。

DDMに基づく反復法に対して有効な前処理の研究も行ってまいります。特に、高速かつ安定した収束性が期待できるバランシング領域分割(BDD)法に着目しています。BDD法は、マルチグリッド法などでも用いられているコースグリッド修正を含んだ前処理となっており、問題規模に強く依存しない非常に高い収束性が期待できる手法ですが、国内では研究事例がほとんどなく、世界的にも大規模解析への適用例はありませんでした。そこで、基礎的な調査に始まり、収束性の改良、高プロセス並列環境における効率的な実装技術の開発などを進め、大規模解析への適用を可能にしています。また、BDD法は解析対象とする問題ごとに研究開発すべき項目が含まれていますため、名古屋大学の金山寛教授、九州大学の田上大助准教授、Shahjalal工科大学のProf. Mukaddes, Sun Yat-sen大学のProf. Yaoと共同で、弾性問題、熱伝導問題、非定常 Navier-Stokes 問題、静磁場問題などへの応用研究を進めています。

DDM は並列計算に適した数値計算法ですが、DDM の基礎的なプログラミングに加えて、任意形状のメッシュに対する領域分割、通信のパターン化と最適化など、実施するためには多大なコストが要求されるため、導入コストに見合うだけの効果が得られるのか、という見積もりが行いづらい点があります。そこで、DDM に基づく反復法ライブラリも開発しています。DDM のアルゴリズムから可能な限り有限要素法に特徴的な部分を切り離すことを目指しており、線形方程式の係数行列と右辺ベクトルに加えてメッシュ情報を入力することで、解きたい問題における DDM の収束率評価や最適な反復法・前処理の組み合わせ検証を可能にします。また、DDM に関する様々な基礎研究にも利用できます。これにより、多くの方々が DDM 並びに大規模計算に興味を持たれ、同分野がさらに盛んになることを期待しています。

末筆になりますが、書き尽くせない程多くの方々にご指導ご協力いただいたことで、2012年に The JACM Award for Young Investigators in Computational Mechanics という荣誉ある賞を受賞させて頂きました。改めて、御礼申し上げます。

す。これからも、計算力学分野の益々の発展に貢献できるよう、精一杯努めてまいります。

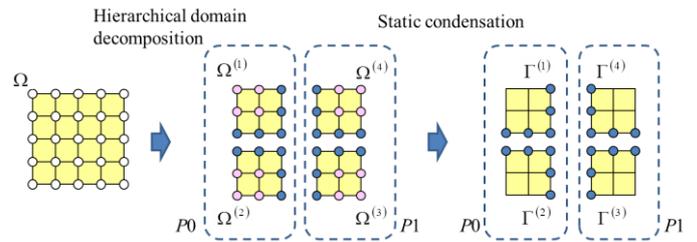


図6 階層型領域分割のイメージ

編集責任者

西脇 眞二 (京都大学)

山田 崇恭 (京都大学)