



構造健全性評価の信頼性向上に向けた計算科学基盤の構築と破壊挙動の解明

1. 課題目標

原子炉構造材料の延性-脆性遷移の基本的なメカニズムを解明するためのマルチスケール材料モデリングを基礎とする計算科学的基盤技術の構築を行う。構築した基盤技術によって得られる延性-脆性遷移のメカニズムに関する情報と、蓄積されてきた実験的観察結果を統合し、破壊靱性値などの工学的に重要なパラメータを導き出すことを目指す。

2. 研究実施体制・事業実施計画

東京理科大学 (全体統括)

- (1)-① 混合転位の分子動力学モデリング
- (2)-① 転位の弾性場を考慮した破壊靱性値評価法の確立
- (3)-① 大規模解析結果の可視化の準備

電力中央研究所

- (1)-② 混合転位の運動特性の分子動力学モデリング
- (1)-③ 合金や不純物元素を含む金属中での転位挙動解析の準備
- (2)-② 照射や熱時効の破壊靱性値への影響評価

東洋大学

- (3)-① 超大規模解析に適している計算アルゴリズムの検討とコード整備

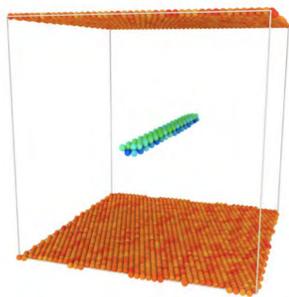
	平成28年度 (12月~)	平成29年度	平成30年度
(1) 転位の運動特性の分子動力学モデリング	モデルの検討 数値解析	数値解析・モデリング	
① 混合転位の分子動力学モデリング	モデルの検討 数値解析	数値解析・モデリング	
② 混合転位の運動特性の分子動力学モデリング			
③ 合金や不純物元素を含む金属中での転位挙動解析の準備	調査・資料作成	原子間ポテンシャルの準備	
(2) 破壊靱性値の評価のための計算科学基盤技術の開発			
① 転位の弾性場を考慮した破壊靱性値評価法の確立	き裂解析コードの作成	き裂・転位連成コードの作成	数値解析・評価
② 照射や熱時効の破壊靱性値への影響評価		転位-欠陥クラスタ相互作用の調査・実装	数値解析・評価
(3) き裂先端における力学的状態と破壊靱性値の関係の評価			
	可視化準備	可視化実装	データ可視化
① 大規模計算結果の可視化の準備			
	アルゴリズム調査	コード性能評価	チューニング・数値解析
② 超大規模解析に適している計算アルゴリズムの検討とコード整備			
	委員会開催・まとめ・評価	委員会開催・まとめ・評価	委員会開催・まとめ・評価
(4) 研究推進			

3. 研究計画内容

(1) 転位の運動特性の分子動力学モデリング

1. せん断応力条件下での転位の運動を観察

- 転位の速度とせん断応力の関係 $M(T, \theta)$
- 転位の移動に必要な最小のせん断応力 τ_f



$$v = M(T, \theta)(\tau - \tau_f) \leftarrow \text{転位運動のモデル化}$$

2. キンク対活性化エネルギー E_f のNudged Elastic Band法による計算

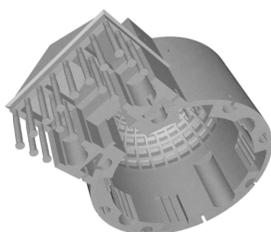
- せん断応力を与えて計算 $\rightarrow V_f$
- 1. の転位速度との比較 $\rightarrow v_0$

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{E_f - \tau V_f}{kT}\right) \leftarrow \text{転位運動のモデル化}$$



(3) き裂先端における力学的状態と破壊靱性値の関係の評価

- 1. き裂先端の様々な応力場を考慮
 - 有限要素法と転位動力学法の重ね合わせ
 - 応力場と破壊靱性値の関係評価の実現

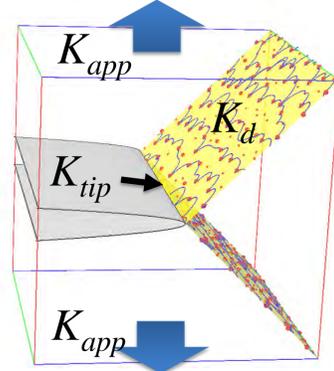


2. (大規模)データの可視化技術の開発

- き裂先端の破壊挙動の理解
- 大規模データの取り扱い

(2) 破壊靱性値の評価のための計算科学基盤技術の開発

- き裂を転位で表現する
 - き裂面に転位を配置
 - 転位動力学法の適用し、釣り合い状態の転位配置を求める
- き裂先端での転位の放出を考慮
 - 放出された転位の弾性場によるき裂への影響を考慮



き裂先端の応力拡大係数:

$$K_{app} = K_{tip} + K_d \leftarrow \text{転位による遮蔽}$$

K_{tip} が臨界値に到達
 \rightarrow
 K_{app} を破壊靱性値とする

計算科学基盤の概略

