



平成 24 年度大規模施設の構造を計算科学手法により 評価するための基盤技術に関する共同研究開発

(共同研究)

Joint R&D of Basic Technology to Evaluate Structure of
a Large-scale System by the Computing Science in Fiscal Year 2012

(Joint Research)

システム計算科学センター

東京大学 人工物工学研究センター

Center for Computational Science & e-Systems

Research into Artifacts, Center for Engineering, The University of Tokyo

March 2014

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ (<http://www.jaea.go.jp>)
より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail: ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency.
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail: ird-support@jaea.go.jp

平成 24 年度大規模施設の構造を計算科学手法により評価するための基盤技術に関する
共同研究開発（共同研究）

日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター

東京大学 人工物工学研究センター

（2014 年 1 月 7 日受理）

本報告書では、平成 24 年度における東京大学・人工物工学研究センターと日本原子力研究開発機構・システム計算科学センターの共同研究について報告する。この共同研究での主な研究成果は、大規模な構造解析などを高速かつ効率的に行うためのミドルウェア開発および材料安全性評価のためのモデル構築である。また、共同研究の一環として、ワークショップやセミナーを開催した。これらの活動概要について報告する。

本研究は日本原子力研究開発機構と東京大学人工物工学研究センターとの共同研究に基づいて実施したものである。

システム計算科学センター（駐在）：〒277-8587 千葉県柏市柏の葉 5-1-5
東京大学柏キャンパス内

東京大学人工物工学研究センター：〒277-8568 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

Joint R&D of Basic Technology to Evaluate Structure of
a Large-scale System by the Computing Science in Fiscal Year 2012 (Joint Research)

Center for Computational Science & e-Systems
Japan Atomic Energy Agency
Kashiwanoha, Kashiwa-shi, Chiba-ken

Research into Artifacts, Center for Engineering
The University of Tokyo
Kashiwanoha, Kashiwa-shi, Chiba-ken

(Received January 7, 2014)

This report provides an overview of the joint research of the Center for Computational Science & e-Systems (CCSE), JAEA and Research into Artifacts, Center for Engineering, the University of Tokyo in fiscal year 2012 (April 1, 2012 – March 31, 2013). The primary results of the research and development activities are the development of the middleware to perform the structural analysis fast and efficiently and the model construction to evaluate the safety of the materials. Other results of the activity are holding a joint workshop and seminars. Overview of the activity is also included in this report.

Keywords: R&D Activities, CCSE, RACE, Joint Research, Large-scale System, High Performance Computing, Structural Analysis

This work has been performed in JAEA as a joint research with Research into Artifacts, Center for Engineering, the University of Tokyo.

目 次

1. はじめに	1
2. 大規模複雑人工物シミュレーション	3
2.1 共同研究報告（テーマ A：計算科学）	3
2.1.1 共同研究の概要	3
2.1.2 2012 年度の共同研究の内容	3
2.2 共同研究報告（テーマ B：材料計算科学）	17
2.2.1 共同研究の概要	17
2.2.2 2012 年度の共同研究の内容	17
3. 学術講演会等の活動	73
3.1 原子力計算科学セミナー	73
3.2 計算力学に関する国際会議 2012 (WCCM2012)	74

Contents

1. Introduction	1
2. Large-Scale Simulation required for Complex Artifacts	3
2.1 Report of joint research (Theme A : Computational Science)	3
2.1.1 Overview	3
2.1.2 Achievement in fiscal year 2012	3
2.2 Report of joint research (Theme B : Computational Material Science)	17
2.2.1 Overview	17
2.2.2 Achievement in fiscal year 2012	17
3. Academic lecture and related activities	73
3.1 Seminar for computational science and engineering in nuclear science and engineering	73
3.2 10th World Congress on Computational Mechanics, WCCM2012	74

This is a blank page.

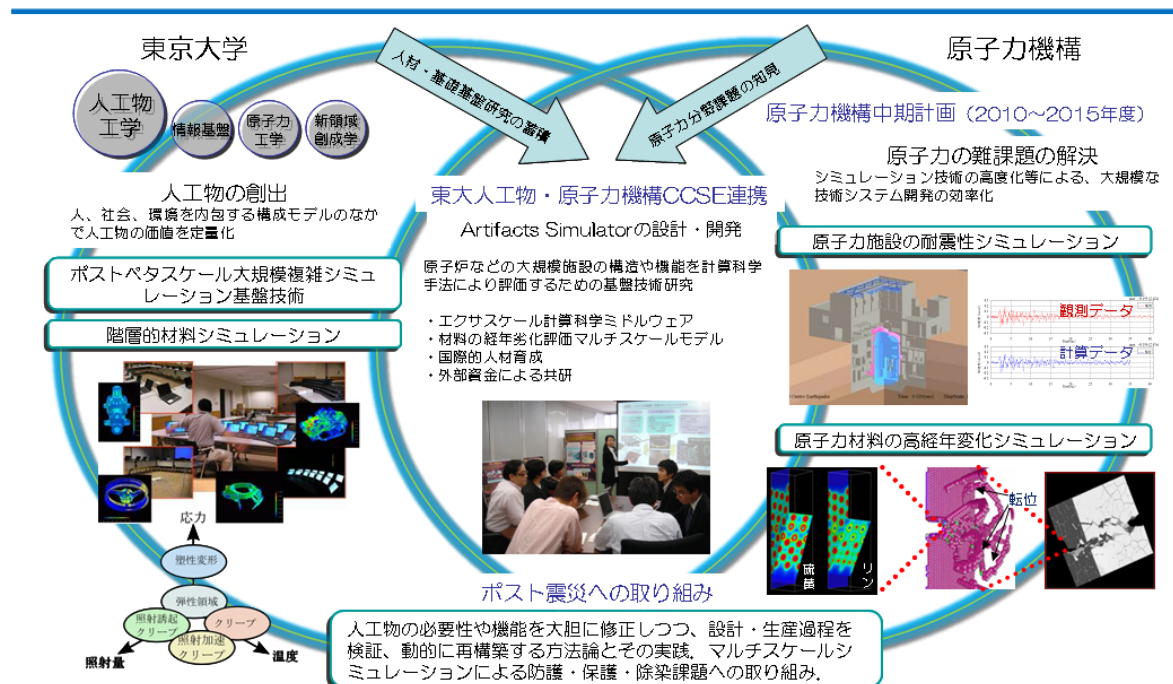
1. はじめに

2008年4月8日に締結された「国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構との間における連携協力の推進に係る協定書」第2条第2項に基づき、東大と原子力機構は、2011年1月31日付で「国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構との計算科学研究協力に関する覚書」を締結した。本覚書の締結により、計算科学の技術基盤強化と、その原子力研究開発への適用について、両法人の間の連携が一層強化され、我が国における学術と原子力利用の振興発展に大きく寄与することが期待されている。

本覚書をもとに、原子力機構の計算科学研究者が東大(柏キャンパス)に駐在し、東大における幅広い分野の研究者との日常的な知的交流の場を形成することにより、大学における新たな学術体系・技術基盤の構築と、原子力機構における原子力分野への難課題への速やかな適用展開とを両輪として進めることになった。これにより、世界の計算科学研究をリードする革新的なモデリングとシミュレーション技術の確立を目指し、さらに柏を拠点に全国的な連携の取り組みに努めることにより、我が国における学術と原子力利用の振興発展に大きく寄与していく。本研究協力の概略を図1.1に示す。

東京大学と日本原子力研究開発機構との計算科学研究協力(H23年度～)

『大規模複雑人工物の統合シミュレーション』



2012年度における研究者間の研究協力内容は、システム計算科学センターが中期計画に基づいて進めている原子力構造材料シミュレーションの分野の研究を加速できる研究と、中期計画推進上必要となる計算科学の基盤技術開発である。具体的には、以下の通りである。

①共同研究課題名：「大規模複雑人工物の統合シミュレーション環境構築」

(研究目的) 原子炉などの大規模施設の構造や機能を計算科学手法により評価するための基盤技術を開発する

(研究内容) 材料特性評価のためのモデル構築および大規模な構造解析などを高速かつ効率的に行うためのミドルウェアの開発を行う。

担当者： 東大：人工物工学研究センター 奥田洋司教授、沖田泰良准教授

原子力機構：システム計算科学センター 武宮博室長、板倉充洋研究副主幹

2. 大規模複雑人工物シミュレーション

2.1 共同研究報告 (テーマ A : 計算科学)

2.1.1 共同研究の概要

共同研究の1つとして、CRESTの研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」の内の1研究課題「自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境(研究代表者: 中島研吾教授、東京大学)」を共同提案し、これに基づいた研究課題を実施している^[1]。

本共同研究では、有限要素法(Finite-Element Method, FEM)によるアプリケーション部分についての研究開発が対象である。具体的にはFEMによるアプリケーションの開発を支援するために

- ・ 共通データ入出力インタフェース
- ・ 領域間通信
- ・ 係数マトリクス生成
- ・ 離散化手法の特性を考慮した前処理付き反復法
- ・ 適応格子、動的負荷分散

の機能に関する研究開発が対象である。

実際、FEMは様々な分野の科学技術アプリケーションで広く使用されており、ポストペタスケールシステムにおいても非常に重要なアプリケーションの1つになると考えられているが、FEMでは非構造的なデータであるため、計算手法の最適化が非常に困難である。しかし、FEM向けの自動チューニング環境を整備することで、FEMアプリケーション開発者は、最適化、チューニングの作業から解放され、科学技術計算における研究開発の効率を高めることができると考えられる。さらに、数百万以上のコア数を有し、さらにヘテロジニアスアーキテクチャと想定されているポストペタスケールシステムで効率的に高精度の計算を行うためには、必要に応じて計算精度を変化させる混合精度演算手法が有効であると考えられている。

本共同研究では、計算量が多く高速化が困難であるオペレーションである線形方程式の求解の高速化を研究の対象としている。

2.1.2 2012年度の共同研究の内容

2.1.2.1 4倍精度反復法による線形方程式の収束性の調査

有限要素法において係数行列が疎ではあるがクリロフ部分空間法に基づく反復法(以下、クリロフ反復法と略す)では安定に計算することのできない線形方程式が存在する。そこで、2011年度より人工物工学研究センターとシステム計算科学センターは、このような方程式を安定に計算する手法の共同研究開発を行っている^[1]。

クリロフ反復法での収束性や誤差は行列の条件数の大きさに大きく依存し、条件数が大きいと計算誤差の累積が大きくなり、反復計算が収束しないことや、たとえ収束したとしても非常に多くの反復を必要とすることなど、安定的に計算できなくなることが知られている。この問題を回避する1つの方法として、反復法内の演算を通常用いる倍精度ではなく4倍精度で行うことが提案されており、実際、収束性や精度が向上することが報告されている^[2,3,4]。本共同研究ではクリ

ロフ反復法のこの性質に注目し、システム計算科学センターが既に並列計算ライブラリ「PARCEL」として開発し、公開している非対称行列用の4種類の反復法（安定化双共役勾配法（BiCGStab法）、一般化最小残差法（GMRES法）、擬似的最小残差法（TFGMR法）、一般化積型双共役勾配法（GPBi-CG法））の4倍精度化を目指した。しかし、2011年度終了時においては開発したルーチンにバグがあり、収束性の向上を実現することができなかった^[1]。

2012年度はルーチンのデバッグを行うことで、4倍精度計算が可能になり、実際に Toeplitz 行列

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & & & \\ & 2 & 1 & & \\ \gamma & & 2 & 1 & \\ & \ddots & & \ddots & \ddots \\ & & \gamma & & 2 \end{pmatrix}$$

を係数とする行列の計算を行い、その有効性を調査した。この行列内の γ を変化させることで行列の条件数を変えることができる。収束性の調査対象は、次元が200の Toeplitz 行列を係数に持ち、右辺ベクトル b の要素がすべて1であるような方程式を対象とする。行列のサイズが200の時、 γ を1.3から2.5に変化させると、条件数は6.4から約700に変化し、また、行列の固有値は虚軸方向に分布するため、 γ が大きくなると収束しにくい問題になる^[4]。今回のテスト計算では、相対残差ノルムが 10^{-12} 以下になった場合に、収束したとみなして反復を停止する。この方程式を通常の倍精度版および今回開発した4倍精度版を用いて計算した際の収束回数の表2.1.1に示す。

この結果から、GMRES法を除きすべての解法において収束性が向上していることが確認できる。特に、TFQMR法およびGPBi-CG法においては倍精度版では収束しなかった方程式を収束することに成功している。また、GMRES法において収束性が向上しない理由としては、GMRES法は複数の反復ベクトル（今回の場合は10個）を保存し、計算の誤差が累積しないようにしているため、他の解法よりも誤差の影響を受けにくく、倍精度版と4倍精度版の収束性が同じになったと考えられる。以上のように、4倍精度化した反復法を用いることで、条件数の大きい問題に対して収束性が改善することを確認できた。

表 2.1.1 Toeplitz 行列を係数にもつ線形方程式に対する倍精度および 4 倍精度反復法による反復回数の比較。(1000 回の反復で収束しない場合、not convergence としている。また、GMRES のリスタート回数は 10 回としている。)

a) 倍精度反復法による反復回数

γ	BiCGstab	GMRES	TFQMR	GPBi-CG
1.3	171	90	not convergence	47
1.5	322	126	not convergence	96
1.7	508	180	not convergence	154
1.9	not convergence	258	not convergence	236
2.1	not convergence	391	not convergence	576
2.3	not convergence	759	not convergence	not convergence
2.5	not convergence	not convergence	not convergence	not convergence

b) 4 倍精度反復法による反復回数

γ	BiCGstab	GMRES	TFQMR	GPBi-CG
1.3	147	90	90	47
1.5	236	126	198	88
1.7	404	180	not convergence	139
1.9	not convergence	258	not convergence	192
2.1	not convergence	391	not convergence	267
2.3	not convergence	759	not convergence	509
2.5	not convergence	not convergence	not convergence	952

2.1.2.2 GPU を利用した 4 倍精度ライブラリの研究開発および公開

現在、計算機は急速に大規模化しており、その性能を極限まで利用したシミュレーションを実現するためにはこれまで以上に演算密度を大きくする必要がある。一方、計算機で演算を行う際には、本来無限桁である実数を有限桁で表現し、演算を行うことになるため、1 回の演算ごとに丸め誤差が混入し、演算の種類によっては演算量が増加するほど累積誤差が増大する。実際、(初代の) 地球シミュレータの 4096CPU を用いて 30 万次元の行列の固有値問題を解いた際、有効精度が数桁程度になることを観測している。このような状況の下、原子力機構システム計算科学センターシミュレーション技術開発室では、計算機シミュレーションにおいて頻繁に利用される基本演算ルーチン群である BLAS を 4 倍精度へ拡張することが高精度超大規模並列シミュレーションにおいて必要不可欠な研究開発項目であると考え、4 倍精度化したルーチン群を開発し、QPBLAS(Quadrature Precision BLAS)と名付けシステム計算科学センターのホームページで公開している^図。

最近、本来 3D グラフィックスの表示に必要な計算をする GPU(Graphics Processing Unit)と呼ばれるプロセッサに通常の演算を配分し、高速計算を実現することが可能となり、実際に実用化されてきた。実際、GPU は画像処理に利用する演算のみ処理可能だが、超高速に計算できるため、その機能は CPU と比較し制限はされるが、適切に利用することで高性能計算を実現す

ることが可能となるため、実際に GPU を用いた超大規模並列計算機が数多く出現してきている。

そこで、2012 年度の本共同研究においては、GPU を用いた超大規模な並列計算機の利用を想定し、表 2.1.2, 2.1.3, 2.1.4 に示した BLAS のルーチンを GPU 向きの命令を用いて 4 倍精度化し、そのルーチン群を公開している⁶⁾。本研究開発における BLAS の 4 倍精度化については、システム計算科学センターがこれまでに開発した Bailey の double-double アルゴリズムを利用した 4 倍精度 BLAS ルーチン (QPBLAS) およびその開発の際に得られた 4 倍精度化に関する知見を利用した。

表 2.1.2 対象ルーチン(レベル 1 : ベクトルの演算)

BLAS ルーチン	演算内容
SWAP	ベクトルの交換
SCAL	ベクトルにスカラーを積算
COPY	ベクトルのコピー
AXPY	ベクトル同士の和
DOT	ベクトル同士の内積
NRM2	ベクトルのノルム
ASUM	ベクトル成分の絶対値和
IDAMAX	最大の絶対値のインデックスを取得
ZDOTC	複素ベクトルの内積(共役転置)
ZDOTU	複素ベクトルの内積(単なる転置)
ROT	面における点の回転
ROTG	Givens 回転に対するパラメータを計算
ROTM	変形面における点の回転
ROTMG	Givens 回転に対する変形パラメータを計算

表 2.1.3 対象ルーチン(レベル 2 : 行列とベクトルの演算)(1/2)

BLAS ルーチン	演算内容
GEMV	一般行列とベクトルの積
SYMV	対称行列とベクトルの積
TRMV	三角行列とベクトルの積
TRSV	三角行列に関する逆行列の計算
SYR	ベクトルと転置の積で対称行列を作成
SYR2	2 つのベクトルから対称行列を作成
GBMV	一般バンド行列とベクトルの積
SBMV	対称バンド行列とベクトルの積

表 2.1.3 対象ルーチン(レベル 2 : 行列とベクトルの演算)(2/2)

TBMV	三角バンド行列とベクトルの積
TBSV	三角バンド行列を係数行列とする連立一次方程式を解く
GER	ベクトル同士の積 (列ベクトル×行ベクトル=行列)
ZGERU	ベクトル同士の積 (列ベクトル×行ベクトル(単なる転置)=行列)
ZGERC	ベクトル同士の積 (列ベクトル×行ベクトル(共役転置)=行列)
ZHEMV	エルミート行列とベクトルの積
ZHBMV	エルミートバンド行列とベクトルの積
ZHER	ベクトルと共役転置したものの積 (エルミート行列が返ってくる)
ZHER2	二つのベクトルで her_ をやる (エルミート行列が返ってくる)

表 2.1.4 対象ルーチン(レベル 3 : 行列の演算)

BLAS ルーチン	演算内容
GEMM	一般行列と一般行列の積
SYMM	対称行列と一般行列の積
SYR2K	対称行列の階数 2k の更新
SYRK	対称行列の階数 n の更新
TRMM	三角行列と一般行列の積
TRSM	三角行列を係数行列とする行列方程式を解く
ZHEMM	エルミート行列と一般行列の積
ZHERK	エルミート行列の階数 n の更新
ZHER2K	対称行列の階数 2k の更新

①4 倍精度 GPU 版 BLAS の開発

4 倍精度 GPU 版 BLAS ライブラリの開発に際しては、MAGMA BLAS を参考にした^[7]。MAGMA BLAS は倍精度までの BLAS ライブラリを GPU 化したオープンソースのライブラリである。MAGMA BLAS では、本作業の対象となる 40 ルーチン中 8 ルーチンに対応する倍精度(または単精度)の関数が実装されている。

入出力は、既に関済済みの 4 倍精度化 BLAS ルーチン DDBLAS に準拠した。ただし、行列、ベクトル及びスカラー量は GPU のメモリ上の配列とした。元の BLAS ルーチン及びこれまでに開発した 4 倍精度 BLAS ルーチンとの名称の衝突を避けるため、ルーチン名の先頭が gdd となるようにし、また、Fortran、C 言語の双方からの呼び出しが可能となるように関数名の最後に_(アンダースコア)を付与した。ファイル名も同様に先頭が gdd となるように変更した。例えば、BLAS ライブラリの関数 DGEMM ルーチンに対応する 4 倍精度 GPU 対応ルーチン名は gddgemm_ であり、ファイル名は gddgemm.cu である。

②Fortran および C 言語からの利用

開発を行った GDDBLAS ライブラリの全てのルーチンに対して、Fortran 及び C 言語から通常の BLAS 関数と同様に使用するためのインタフェースとなるラッパー関数を用意した。GPU は、通常 CPU がアクセスするメモリ(ホストメモリ)とは別のメモリ(デバイスメモリ)を持っている。GPU は、デバイスメモリに対してのみ、変数の参照や変更を行うことが可能である。このため、GDDBLAS ライブラリの関数を使用する場合にはあらかじめデバイスメモリ上に演算に使用するデータを転送しておく必要があり、BLAS 関数を呼び出すコードとは別にデータを転送するコードを追加する必要がある。

GDDBLAS 関数を通常の BLAS 関数と同様に使用するために Fortran 及び C 言語から利用可能なラッパー関数を用意した。ラッパー関数では、演算をする前に必要なデータをホストメモリからデバイスメモリに転送し、GPU での演算後、デバイスメモリからホストメモリに演算結果を転送する処理を実装した。ラッパー関数の名称は、対応する GDDBLAS ライブラリのルーチンに_host を付与し、ファイル名も同様に_host を付与した。例えば、GDDBLAS ライブラリの関数 gddgemm_ルーチンに対応するラッパー関数は gddgemm_host_であり、ファイル名は gddgemm_host.c である。

③マルチ GPU 化

開発を行った GDDBLAS ライブラリの全てのルーチンに対して、同一ノード内のマルチ GPU での実行に対応したマルチ GPU ルーチンの実装を行った。マルチ GPU 化では、OpenMP のスレッドを GPU デバイスと同数発生させ、OpenMP の各スレッドを各 GPU デバイスに割り当てている。マルチ GPU ルーチンでは、ホストメモリ上の行列(及びベクトル)を単純に GPU デバイスの数に分割し、それぞれの小行列(及び小ベクトル)をデバイスメモリに送信したうえで、GDDBLAS ライブラリを使用する。マルチ GPU ルーチンの名称は対応する GDDBLAS ライブラリのルーチンに_host_multigpu_を付与し、ファイル名も同様に_host_multigpu_を付与した。例えば、GDDBLAS ライブラリの関数 gddgemm_ルーチンに対応するマルチ GPU ルーチンは gddgemm_host_multigpu_であり、ファイル名は gddgemm_host_multigpu.cu である。BLAS ルーチンのうち ROTG 及び ROTMG は演算量が少なく並列化が困難なため、マルチ GPU 化を行っていない。

④性能評価

開発、動作確認及び性能評価に使用した計算機環境を表 2.1.5 に示す。また、今回は各レベルの代表的なルーチンとしてレベル 1 (ベクトルの演算)からは SCAL、AXPY、DOT の 3 つのルーチン、レベル 2 (行列とベクトルの演算)からは GEMV、SYMV の 2 つ、レベル 3 からは GEMM、SYMM の 2 つ、の合計 7 つのルーチンの GPU と CPU の計算時間を比較したものを図 2.1.1 から 2.1.7 に示す。この図内のデータサイズはベクトルまたは行列の次元を表している。

この結果から、データサイズが大きく、また、計算量がより多いほうが GPU での計算時間がより短いことが確認できる。これは、GPU で計算する際には、CPU からデータを移動する必要があるが、このコストが非常に大きいため、GPU の性能を引き出すためには、GPU に移動してきたデータをできる限り多くの演算に利用することが望まれているためである。そのため、演算量が少ないレベル 1 (ベクトルの演算) のルーチンでは計算量に対して移動すべきデータ量が多いため、CPU の数倍程度しか高速化しないが、行列とベクトルの演算であるレベル 2 のルー

チンにおいては演算量の比率が大きいいため約 10 倍の高速化を達成している。さらに、行列同士の演算で計算量が非常に多いレベル 3 のルーチンでは 1000 倍近い高速化を実現している。

表 2.1.5 開発、テスト環境

項目	スペック等
OS	Red Hat 4.1.2-51
CPU	Intel(R) Xeon(R) W3565 (3.20GHz)
GPU	Tesla C2075(448 cores 1.15GHz)×2
メモリ	24GB
Fortran コンパイラ	gfortran 4.1.2
C コンパイラ	gcc 4.1.2
GPGPU 開発環境	CUDA4.0

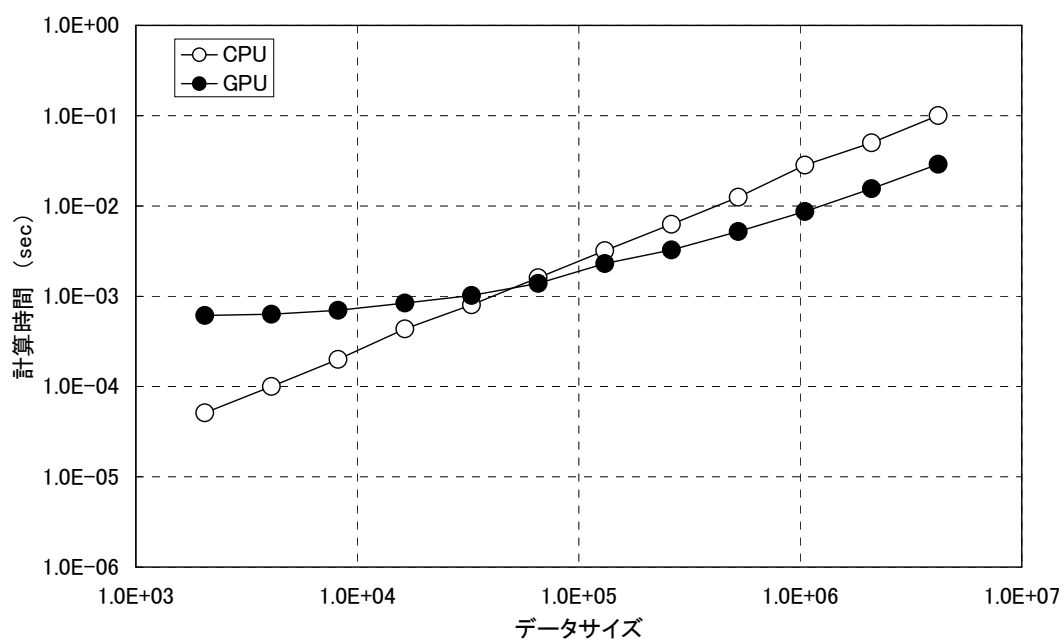


図 2.1.1 SCAL の計算時間の比較

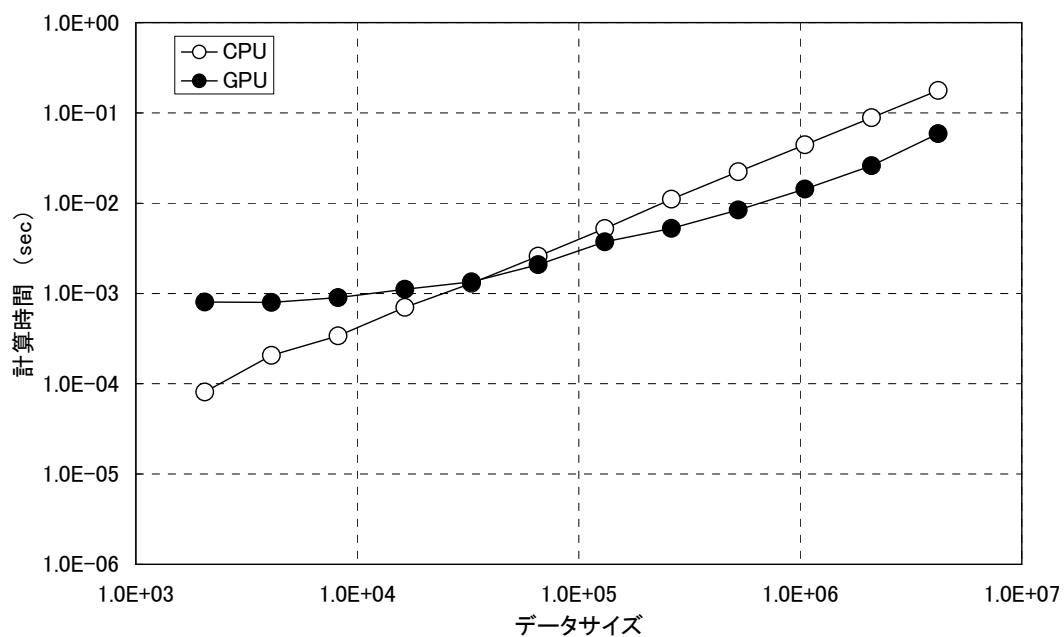


図 2.1.2 AXPY の計算時間の比較

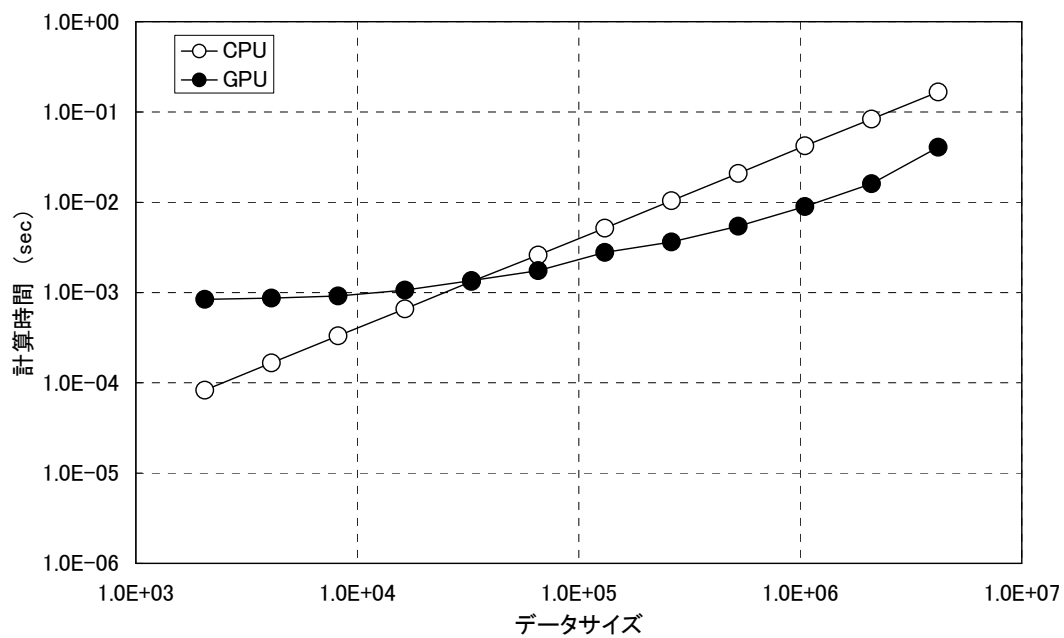


図 2.1.3 DOT の計算時間の比較

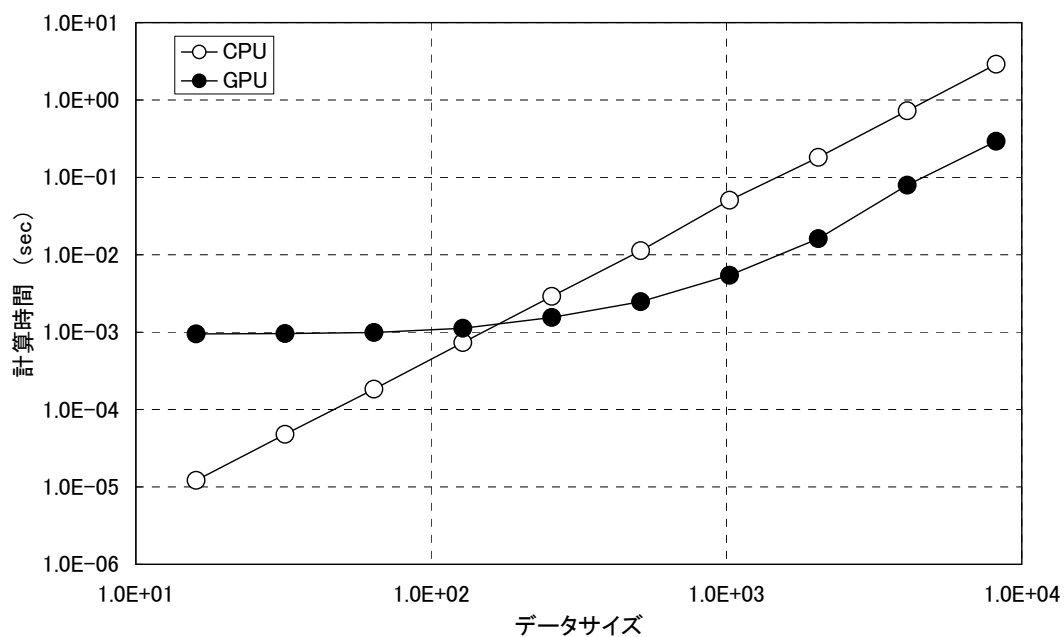


図 2.1.4 GEMV の計算時間の比較

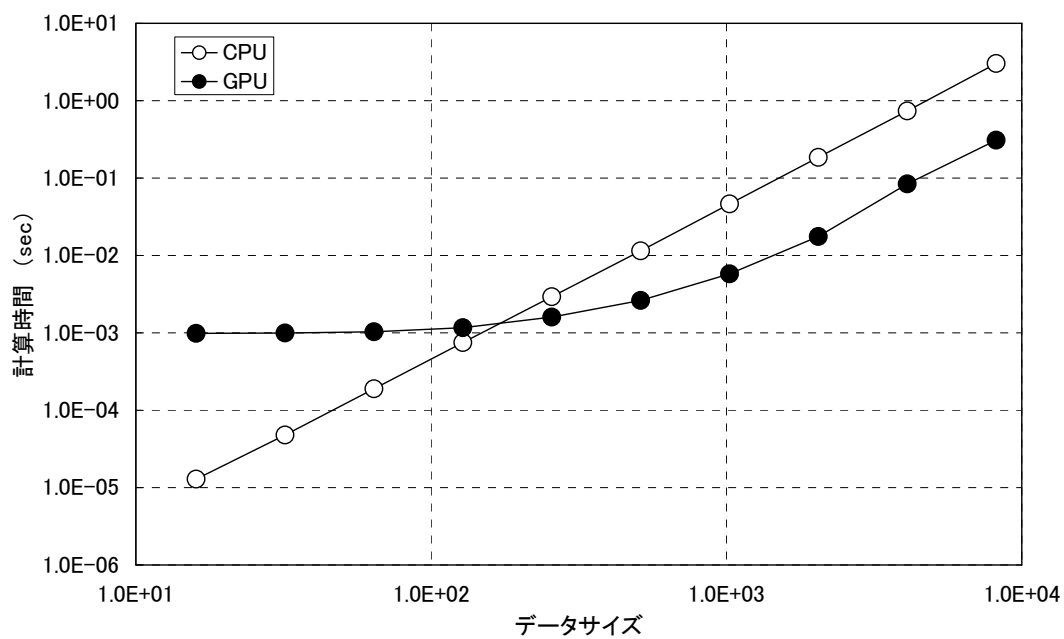


図 2.1.5 SYMV の計算時間の比較

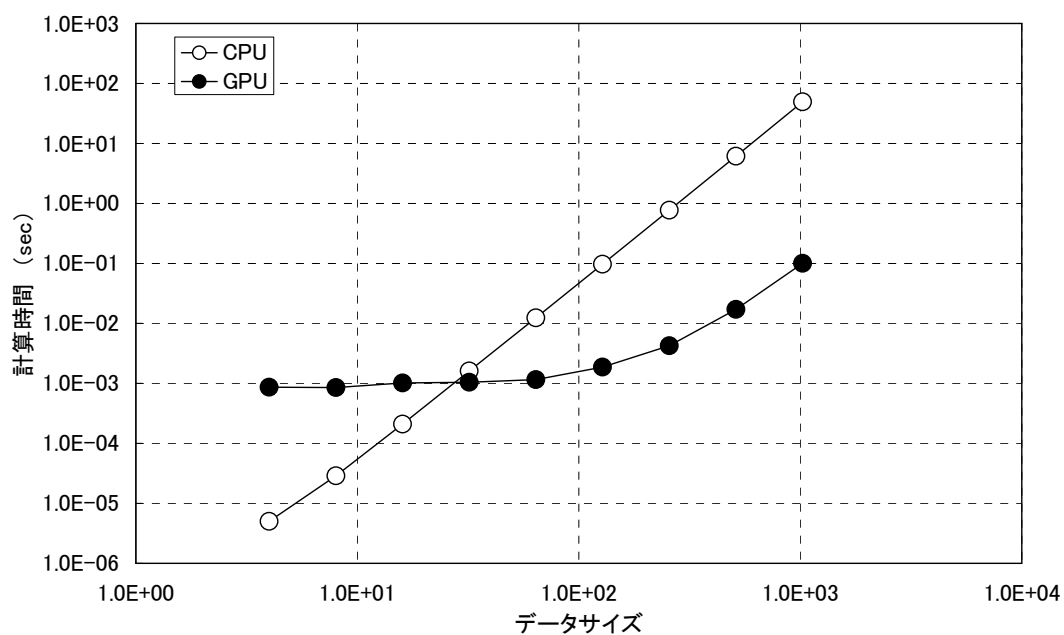


図 2.1.6 GEMM の計算時間の比較

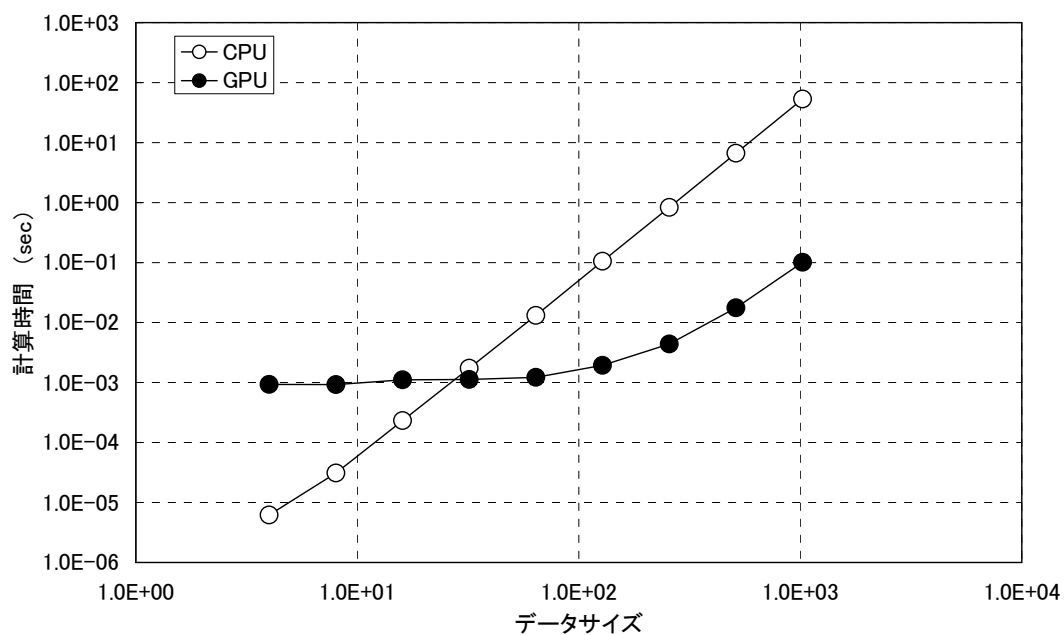


図 2.1.7 SYMM の計算時間の比較

Algorithm 2.1.1 Iterative Refinement

1. Take x_0 initial solution
 2. Until $\|r_k\|$ is small enough
 3. $r_k = b - Ax_{k-1}$
 4. Solve $Az_k = r_k$
 5. $x_k = x_{k-1} + z_k$
 6. Next $k = k+1$
 7. End
-

2.1.2.3 Mixed Precision Method

前節までに、条件数の大きな大規模計算問題について、従来の倍精度演算よりも精度のよい 4 倍精度演算を用いることで、解の収束性が改善することが示された。このような問題に対して、計算精度を維持したまま計算速度を向上させる研究が多く進められている。その中で、計算精度の維持と計算速度の向上を両立できる手法のひとつに、低精度演算と高精度演算を組合せた、混合精度計算が挙げられる。混合精度計算は、解の精度に影響が少ない計算には計算速度が高い低精度演算を行い、解の精度に大きく関与する部分に対しては高精度演算を行うというものである。本節では特に、混合精度計算と反復法を組み合わせた手法である、Mixed Precision Iterative Refinement について述べる。

①Mixed Precision Iterative Refinement

Moler によって提案された Iterative Refinement は、解の精度を向上させる反復改良法として非常に古典的な計算手法と知られている^[8]。

Iterative Refinement をアルゴリズム 2.1.1 に示す。このアルゴリズムは、残差 r が十分小さくなるまでである初期値 x_0 の更新を繰り返すというものである。ある有限桁の浮動小数点演算を行うことは丸め誤差の発生を伴うため、この影響を取り除き、解の精度を保証することを目的として本法が用いられる。つまり、Iterative Refinement によって低精度演算が有する、高精度演算と比較した場合の丸め誤差を除去することが可能となる。Langou らは Iterative Refinement について混合精度計算を考慮する場合の検討を行い、係数行列の条件数が単精度浮動小数点の精度に対して十分大きくならない場合、反復計算が収束する事を示した^[9]。

Mixed Precision Iterative Refinement をアルゴリズム 2.1.2 に示す。このアルゴリズムは、Outer ループとよばれる高精度演算による解の精度保証ループと、Inner ループとよばれる低精度演算のソルバループによって構成されている。Buttari らは、Mixed Precision Iterative Refinement の Inner ループに共役勾配法を適用させ、単精度演算による計算速度と倍精度演算による計算精度が両立し得る事を示した^[10]。このように、Mixed Precision Iterative Refinement は低精度演算によって解かれた反復解に対して精度保証を行うために使用される。

Algorithm 2.1.2 Mixed Precision Iterative Refinement

1. Set initial values and calculate initial defect (higher precision)

$$r_{hi} = b_{hi} - A_{hi}x_{hi}, \quad \delta_{hi}^0 = \|r_k\|, \quad x_{hi} = \text{initial guess}$$

2. Set initial values for inner solver and convert data (higher $\rightarrow$ lower precision)

$$A_{lo} = A_{hi}, \quad r_{lo} = r_{hi}, \quad c_{lo} = \text{initial guess}$$

3. Run inner solver $A_{lo}c_{lo} = r_{lo}$ (lower precision, inner loop)

4. Update outer solution $x_{hi} = x_{hi} + \alpha_{hi}c_{lo}$ (lower $\rightarrow$ higher precision)

5. Calculate defect $r_{hi} = b_{hi} - A_{hi}x_{hi}$ (higher precision)

6. Calculate norm of defect $\delta_{hi} = \|r_k\|$ (higher precision)

7. Check for convergence $\delta_{hi} \ll \delta_{hi}^0$

If NO, next iteration to go to 2, $r_{hi} = (1/\delta_{hi})r_{hi}$ (higher $\rightarrow$ lower precision)

If YES, stop

②条件数が与える Mixed Precision Iterative Refinement 付き共役勾配法への影響

Langou らが Iterative Refinement において示したように^[9]、混合精度計算を考慮する場合、係数行列の条件数に応じて反復計算の収束が大きく左右される。このことから Serban は、Mixed Precision Iterative Refinement 付き共役勾配法において、係数行列の条件数がソルバ反復回数に与える影響について検討を行った^[11]。

図 2.1.8 に、係数行列の条件数がソルバ反復回数に与える影響を示す。図 2.1.8 より、条件数が $O(10^8)$ より増大した場合に、反復解が発散する結果となる。この解析の場合 Inner ループを単精度で演算しているため、条件数の大きな問題を解く際に単精度 8 桁の演算では精度が不足し、丸め誤差や計算機イプシロンの影響で正しい解が得られないことが影響していると考えられる。

条件数の大きな問題を解く際の誤差を解消するために、Serban は Inner ループに対して条件数に合わせた誤差許容値を適用した^[11]。これは、Inner ループの計算で精度を維持できる限界を誤差許容値と定義したものであり、有効な桁数の範囲で反復計算を行えることが、結果的に反復回数増加の抑制につながる効果があると考えられる。

図 2.1.9 に、Inner ループの誤差許容値が反復回数の増加に与える影響を示す。図 2.1.9 より、それぞれ行列の条件数に対して適切な誤差許容値が存在し、その場合反復回数の増加が非常に少ないことがわかる。反対に、誤差許容値が条件数に対して適切な領域を外れると、反復回数が飛躍的に増加する。そのため問題に合わせた正しい誤差許容値の設定が必要になっている。

今後の展望として、Inner ループの誤差許容値を自動で設定するような手法を組み込むことで、十分安定した計算を行うことが可能となるアルゴリズムの開発が期待される。

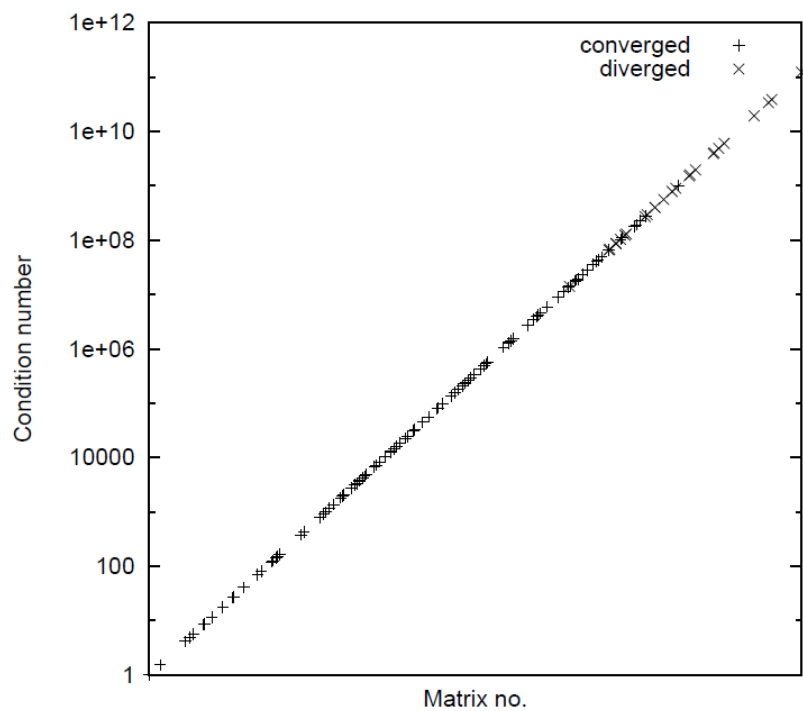


図 2.1.8 条件数が反復解の収束・発散に与える影響

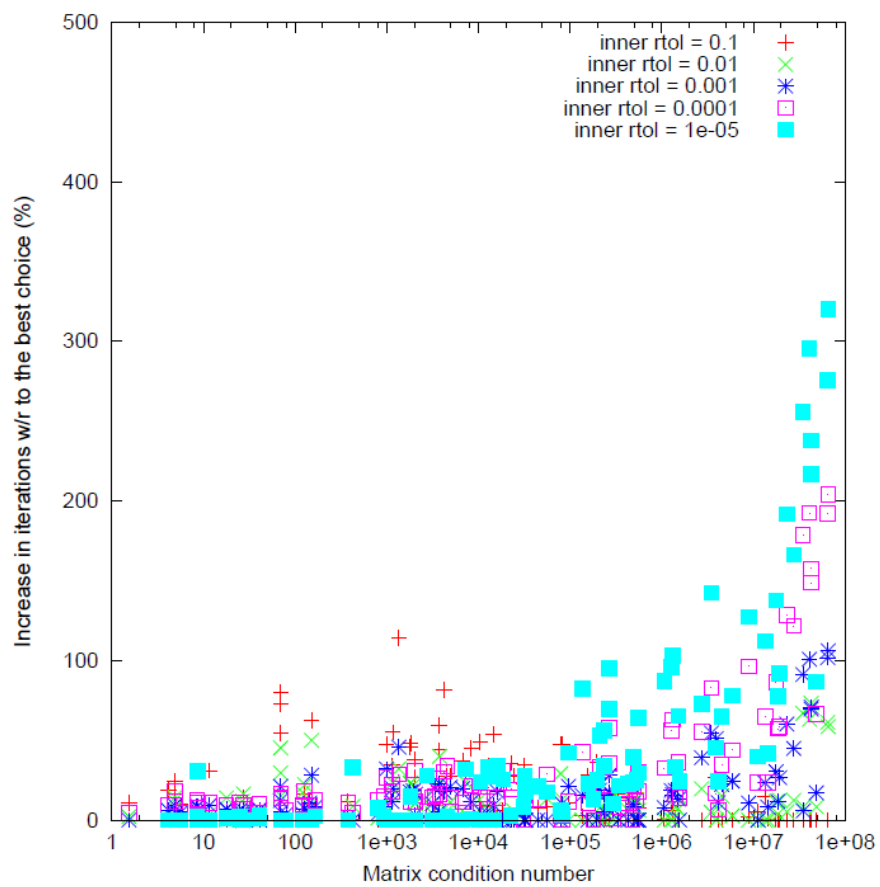


図 2.1.9 Inner ソルバの誤差許容値が反復回数の増加に与える影響

参考文献

- [1] 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター、東京大学 人工物工学研究センター、
“大規模施設の構造を計算科学手法により評価するための基盤技術に関する共同研究開発（共同研究）”、JAEA-Review 2013-030、2013.
- [2] 長谷川秀彦、阿部邦美、“クリロフ部分空間法に対する多倍長演算の効果”、第 29 回数値解析
シンポジウム、2000 年.
- [3] 小武守恒、藤井昭宏、長谷川秀彦、西田晃、“高速な 4 倍精度演算を用いたクリロフ部分空間
法の安定化”、計算工学講演会論文集、Vol. 12、2007 年.
- [4] 長谷川秀彦、小武守恒、“演算精度を変えれば見えてくる線形方程式の世界”、計算工学講演
会論文集、Vol. 12、2008 年.
- [5] QPBLAS 公開ホームページ：<http://ccse.jaea.go.jp/ja/download/qpblas.html>.
- [6] QPBLAS-GPU 公開ホームページ：http://ccse.jaea.go.jp/ja/download/qpblas_gpu.html.
- [7] MAGMA Project ホームページ：<http://icl.cs.utk.edu/magma/index.html>.
- [8] C. B. Moler, Iterative Refinement in Floating Point, *Journal of the Association for Computing
Machinery*, Vol. 14, No. 2, pp. 316-321 (1967).
- [9] J. Langou et. al., Exploiting the Performance of 32 bit Floating Point Arithmetic in
Obtaining 64 bit Accuracy, *Technical Report 175, LAPACK Working Note*, Knoxville, (2006).
- [10] A. Buttari et. al., Using Mixed Precision for Sparse Matrix Computations to Enhance the
Performance while Achieving 64-bit Accuracy, *ACM Trans. Math. Software*, Vol. 34, No. 4,
Article 17 (2008).
- [11] S. Georgescu, Krylov Solvers Accelerated by Manycore Processors, *Doctral thesis*,
Department of Quantum Engineering and Systems Science, the University of Tokyo
(2008).

2.2 共同研究報告 (テーマB : 材料計算科学)

2.2.1 共同研究の概要

原子力システム構造材料の経年劣化を把握する技術・予測する技術構築のため、東京大学人工物工学研究センターの沖田グループは、分子シミュレーション等による材料損傷評価モデルの構築と STM 等による実験的妥当性評価を行ってきた。一方、日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・シミュレーション技術開発室の原子力材料研究チームも、主に電子・原子スケールでのシミュレーションを行い、実験研究を行っている原子力機構の他部門と連携し劣化メカニズムの研究を行ってきた。システム計算科学センターの柏移転を機に、両研究チームは情報交換やゲスト研究者を招いての研究報告会を定期的に行う等本格的な共同研究を開始した。2012年度においては、二件の競争的外部資金共同申請、共著論文執筆等、様々な活動を行ってきた。以下ではこの共同研究の成果に関して概要を示す。

2.2.2 2012年度の共同研究の内容

2.2.2.1 Influence of stress and strain on change in direction of interstitial clusters

Change in direction of interstitial clusters was analyzed. Interstitial clusters formed by the cascade process can probably change their direction immediately after formation. Therefore, orientation of interstitial clusters formed during cascade process can be affected by a change in direction. To distinguish these processes, it is necessary to analyze behaviors of change in direction independently. This process has normally been recognized as thermal activation process, but a thermal activation barrier can be negligibly small at high temperature. From this aspect, stress effects on direction change of interstitial clusters were also analyzed in this chapter. Frequency of direction change has been investigated in previous studies to some extent. First, those studies were reviewed to model the influence of direction change on irradiation degradation. Second, direction change was investigated using MD method. The data obtained include behavior of interstitial clusters (1) without strain, (2) at a constant strain rate, and (3) under constant strain. Behaviors under those conditions were compared.

① Previous studies of rotation of interstitial clusters

(a) Influence of change in the direction of interstitial clusters

Interstitial clusters are found to diffuse one-dimensionally. Hereinafter, this diffusion is described as 1D motion. Influence of 1D motion has been extremely investigated recently [1–10]. Research to clarify the influence of 1D motion on microstructural evolution [1–5] and decoration of interstitial clusters [6–8] have been undertaken. Researches with experimental approaches have also been conducted [8–10].

Trinka et al. modeled the influence of 1D motion associated with the frequency of direction change [1]. When direction change does not occur, the path of diffusion can be treated as pure 1D motion. However, when interstitial clusters change direction frequently, then they diffuse almost three-dimensionally. These were summarized using three

parameters in their model: the diffusion range of these 1D motion in a certain microstructure λ_i , the mean length of 1D motion l , and the absorption radius of spherical sinks r . Figure 2.2.1 presents schematic pictures depicting typical three cases.

- a) For $l \gg \lambda_i$, 1D motion is limited mainly by the number density of obstacles. Therefore, the length of path for 1D motion is defined by the spaces among obstacles. (Correlated 1D)
- b) For $\lambda_i \gg l \gg r$, interstitial clusters can avoid obstacles by changing their direction. Therefore, the number of obstacles on a path of 1D motion is not a dominant factor.
- c) For $l \ll r$, the interstitial clusters can move freely as 3D motion because the frequency of direction change is sufficiently high.

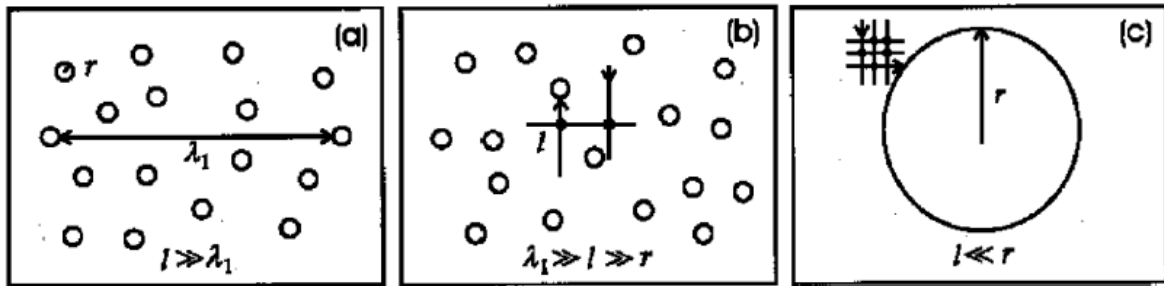


Figure 2.2.1 Schematic pictures showing of diffusion of interstitial clusters [10]

(b) Analysis of cluster rotation by MD simulations without strain

Behavior of direction change through cluster rotation has been recognized as an important factor because it can influence diffusion process of clusters. However, because of atomistic effects, analysis by dislocation theory has limitation for investigating the behavior of small clusters. Consequently, MD simulations have been conducted [8–15].

Osetsky et al. analyzed behavior of interstitial clusters by evaluating lattice distortion around them [11]. Soneda et al. conducted additional analysis for α -iron [13], and described behavior of direction change as a thermal activation process using Arrhenius plot based on the method suggested by Wirth et al. [12]. The analytical method to evaluate the direction change was developed using MD simulations, although only clusters of size 3 or smaller were treated in their analysis. Morishita et al. conducted similar analyses for various metals and various cluster sizes [14]. Arrhenius plots obtained from their study are presented in Figure 2.2.2.

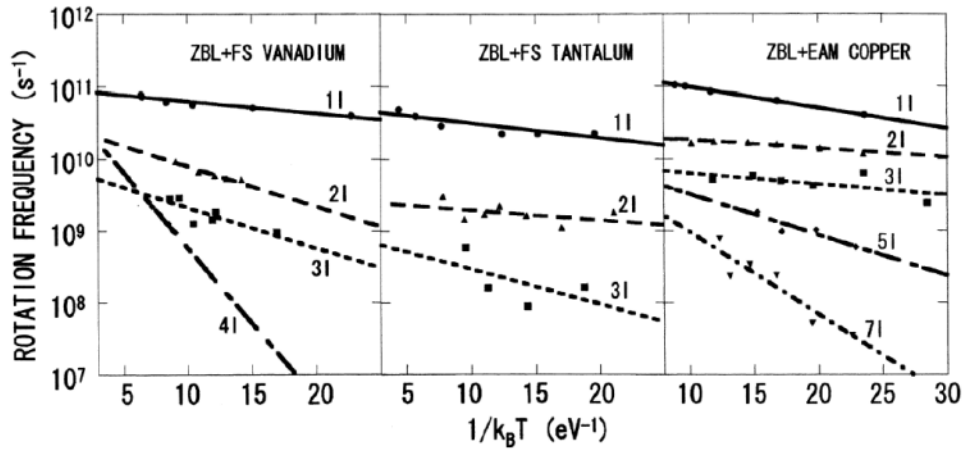


Figure 2.2.2 Rotation frequency of interstitial clusters [14]

② Method

(a) Emphasis of analysis

Analyses were conducted in this chapter from the following perspectives.

- a) Relation between MD results and the theoretical model
- b) Dependence of direction change on size of interstitial clusters

This study emphasized stress-induced preferential orientation of interstitial clusters rather than the frequency of direction change. By this theory, the number of cluster nuclei formed on the I th plane is given as

$$\frac{n_i}{N} = \frac{\exp\left(\frac{\Omega\sigma \cos^2 \theta n}{kT}\right)}{\sum_i \exp\left(\frac{\Omega\sigma \cos^2 \theta n}{kT}\right)} \quad (2.2.1)$$

This model can only be applied on a thermal equilibrium state. However, the process is assumed to be a thermal activation process. Hence, MD results can correspond to the expected value based on the thermal equilibrium model only when the frequency of direction change is high.

The direction change of small interstitial clusters has been well described using Arrhenius plot in previous studies. However, large interstitial clusters were not particularly emphasized in those studies, excepting one by Phythian et al., who examined large interstitial clusters of size 37 [11]. It is difficult to describe the direction change of large interstitial clusters using an Arrhenius plot because observations of few direction changes are insufficient for such analysis. In this study, the dependence of direction change on the cluster size was evaluated, with particular emphasis on large clusters at high temperature in high strain condition.

(b) Conditions of analysis

Interstitial clusters in FCC metals are known to exist as either $\langle 111 \rangle$ or $\langle 110 \rangle$ dislocation loops. Therefore, interstitial clusters change their direction through the path with

the red lines shown in Figure 2.2.3. There temperature was set to 1 K, 600 K and 1200 K respectively.

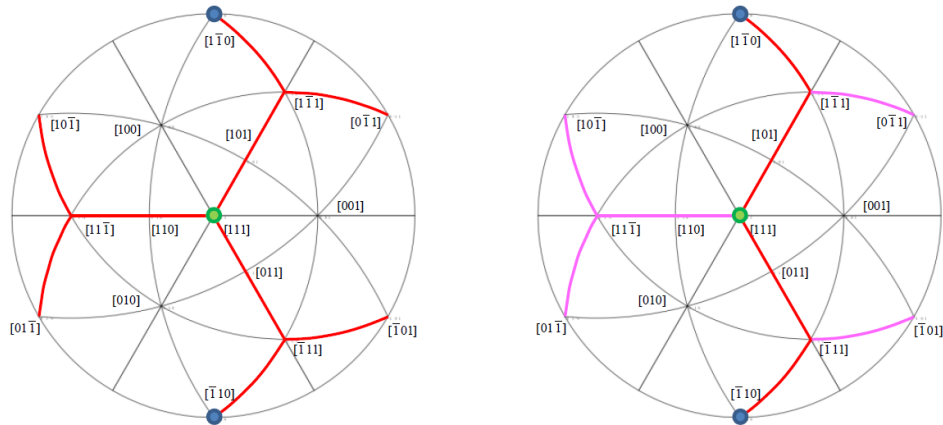


Figure 2.2.3 Preferential path of change in direction of clusters
(left) without stress; (right) under stress for $[1\ 1\ 1]$ axis

(c) Model of analysis

Simulation procedures are described below.

- (i) Interstitial clusters are inserted in a certain direction, $[1\ \bar{1}\ 0]$.
- (ii) The structure is relaxed using molecular statistical method.
- (iii) The structure is relaxed using MD method with the NVE ensemble for approximately 1000 steps.
- (iv) To set the temperature condition, all atoms in the simulation cells are accelerated.
- (v) Velocity is rescaled continuously to maintain the desired temperature for 1000 steps. It is because positions of atoms are changed from the lattice site to the position with higher potential by thermal vibration, and half of the kinetic energy given in (iv) is converted into potential energy, which causes to decrease temperature.
- (vi) Behavior of interstitial clusters is analyzed under a no-strain condition by MD with NVE ensemble for 50000 steps.
- (vii) Strain is applied at a constant rate, and behavior of interstitial clusters is analyzed under various strain value.
- (viii) Behavior of interstitial clusters is further analyzed under a constant strain condition using MD with NVE ensemble for 50000 steps.

Orientation without strain can be analyzed with steps (iv)–(vi). Then, the direction change under several strain conditions appears on step (vii), and that under constant strain appears on step (viii).

The following three points must be regarded for developing the system of simulations.

- a) The strain rate applied is extremely high that interstitial clusters may not reach their stable orientation for each strain level.
- b) Artificial thermal control has been conducted after insertion of interstitial clusters.

- c) Interstitial clusters are inserted without formation processes such as a diffusion process or cascade process.

To evaluate the dependence of the strain rate on direction changes of interstitial clusters, MD simulations were conducted with several strain rates. Fundamentally, data were obtained at a constant strain rate of 1.0×10^9 [1/s]. For some cases, additional data were obtained with a different strain rate. Results under several strain rates are shown in section ③(c).

③(c) Further analysis of change in direction.

Thermal control is necessary to avoid unexpected decrease in the temperature from the desired temperature. Its effect is validated and presented in section ③(d) **Validation of analysis model**. However, note that thermal control was not applied after step (v), although some applied strain energy can be dispersed as thermal energy. Nevertheless, this possible dispersion did not affect temperatures.

The sudden formation of interstitial cluster without any formation process is unlikely. The major effect of the sudden formation is the initial configuration. In this study, a cluster was inserted at a certain direction, namely $[1 \bar{1} 0]$, with the habit plane parallel to this Burgers vector. MD simulations were conducted 100 times for each condition in this study. Results obtained by 100 simulations are nothing but those with the same initial direction of $[1 \bar{1} 0]$. The initial direction might change the final orientation, which is discussed in section ③(d) **Validation of analysis model**. In summary, the MD simulations were conducted with analyses done in the following manner.

- (I) Data with constant strain rate of 1.0×10^9 [1/s] were obtained.
- (II) Additional data were obtained for the following cases.
 - A) When the strain rate of 1.0×10^9 [1/s] was too high to reach a stable orientation, simulations with a lower strain rate were conducted.
 - B) When waiting time at step (iv) or (viii) was too short to reach a stable orientation, simulations with longer waiting times were conducted.
- (III) Further analysis to validate the simulation condition
 - A) To evaluate the effects of the initial direction, analyses were conducted with other initial directions: $[1 \bar{1} 1]$, $[1 0 1]$ and $[1 1 1]$.
 - B) To ensure that thermal control does not affect results, simulations without thermal control were conducted.
- (IV) Data obtained through by (I) and (II) were categorized into several processes and analyzed.
 - A) Direction under 1.0% tensile strain and that without strain were compared.
 - B) Cluster directions at various strain levels were evaluated by analyzing data with a constant strain rate.

③ Influence of stress and strain on direction change

(a) Overview of analysis

- 1) Data analysis in association with simulation procedure

An example of data obtained using the MD method is shown in Figure 2.2.4. Dotted lines represent 1000 steps, 2000 steps, 52000 steps, 152000 steps and 202000 steps. These respectively correspond to the end of step (iii), (v), (vii), and (viii) shown in section ③ (c) **Further analysis of change in direction**. Interstitial clusters of size 3 changed their direction from $[1 \bar{1} 0]$ to other directions before the 52000 step. Strain levels changed during 52000–152000 steps, and were set to a constant level of 1.0% after 152000 step. Then the direction of interstitial clusters was changed to $[1 1 1]$ direction by application of strain. For interstitial clusters of size 3 at 600 K, no further change in orientation was observed after 15200 steps, which indicated that interstitial clusters have already reached their stable orientation at around 152000 step. Therefore, strain rate of 1.0×10^9 [s] was sufficiently low in this case, and orientation of interstitial clusters was presented to more likely stable orientation under each strain level. Note that some of small clusters divided into mono-interstitials or di-interstitials at high temperature, which cannot be defined direction. Those cases are plotted as 'Indeterminant', when their fraction is not negligible.

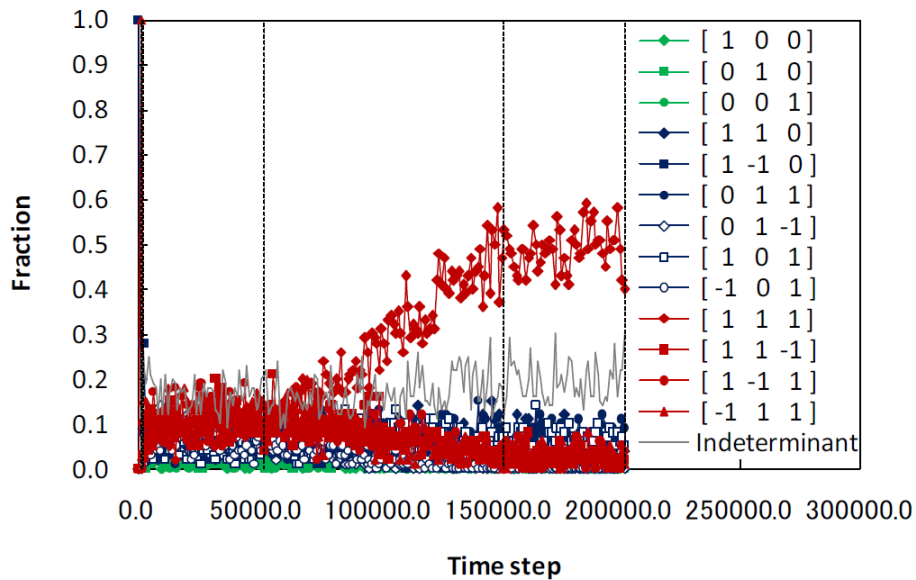


Figure 2.2.4 Directions of interstitial clusters of size 3 as a function of time step at 600 K

2) Display style of data

Various data are obtainable in this analysis by a set of simulations. Figure 2.2.5 presents the data shown in Figure 2.2.4 as a function of actual time. The first 1000 steps is not shown in Figure 2.2.5, since these steps are not time depending analysis. Therefore, 0 ps in Figure 2.2.5 correspond to 1000 step in Figure 2.2.4. All data will be shown with this style hereinafter. When a noteworthy particular behavior is observed before 1000 steps, it will be described.

Each region of Figure 2.2.5 corresponds to the following steps of the simulation procedure.

Area A (0.0 ps - 1.0 ps):

Analysis under thermal control corresponding to step (iii), (iv), and (v)

Area B (1.0 ps - 31.0 ps):

Analysis without applied strain corresponding to step (vi)

Area C (31.0 ps - 132.0 ps):

Analysis with a constant strain rate corresponding to step (vii)

Area D (132.0 ps - 162.0 ps):

Analysis under 1.0% uniaxial strain corresponding to step (viii)

Thermal control is applied on the simulation system at the first 1.0 ps, area A. No temperature control is applied on area B, C, and D. No temperature change caused by applied strain was observed, as described in section 3.3. The display style is the same for all data, although the lengths of area B, C, and D are changed to obtain additional data with lower strain rate of area C or longer waiting time of area B and C.

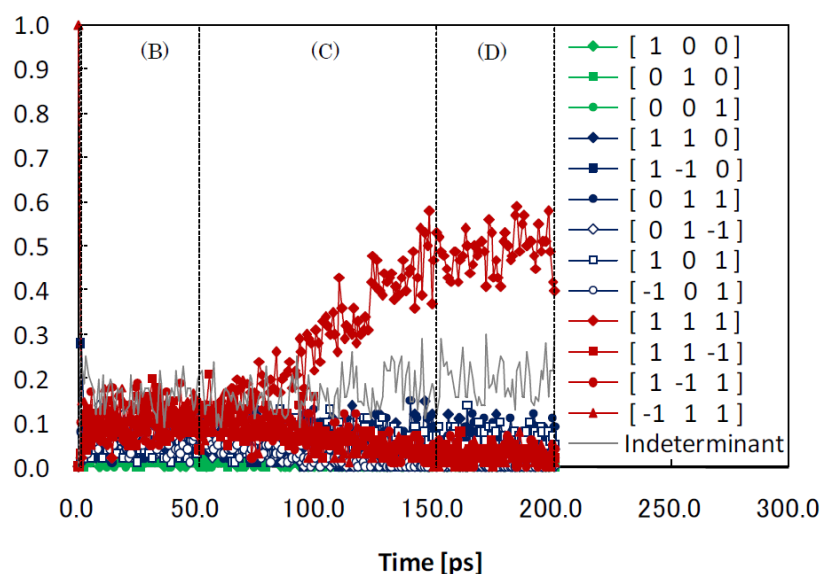


Figure 2.2.5 Directions of interstitial clusters as a function of time for size 3 at 600 K

(b) Change in directions of interstitial clusters

1) Change in directions of interstitial clusters at 1200 K

Direction changes at 1200 K are shown in Figure 2.2.6. The change in direction was enhanced by application of stress and strain. Change in the direction of interstitial clusters was not observed for size 37 or larger without strain, but clusters can change direction under 1.0% uniaxial strain even for size 37 at 1200 K. However, the probability of change becomes lower with larger cluster size. Direction change was not observed for size 91, even under 1.0%

strain.

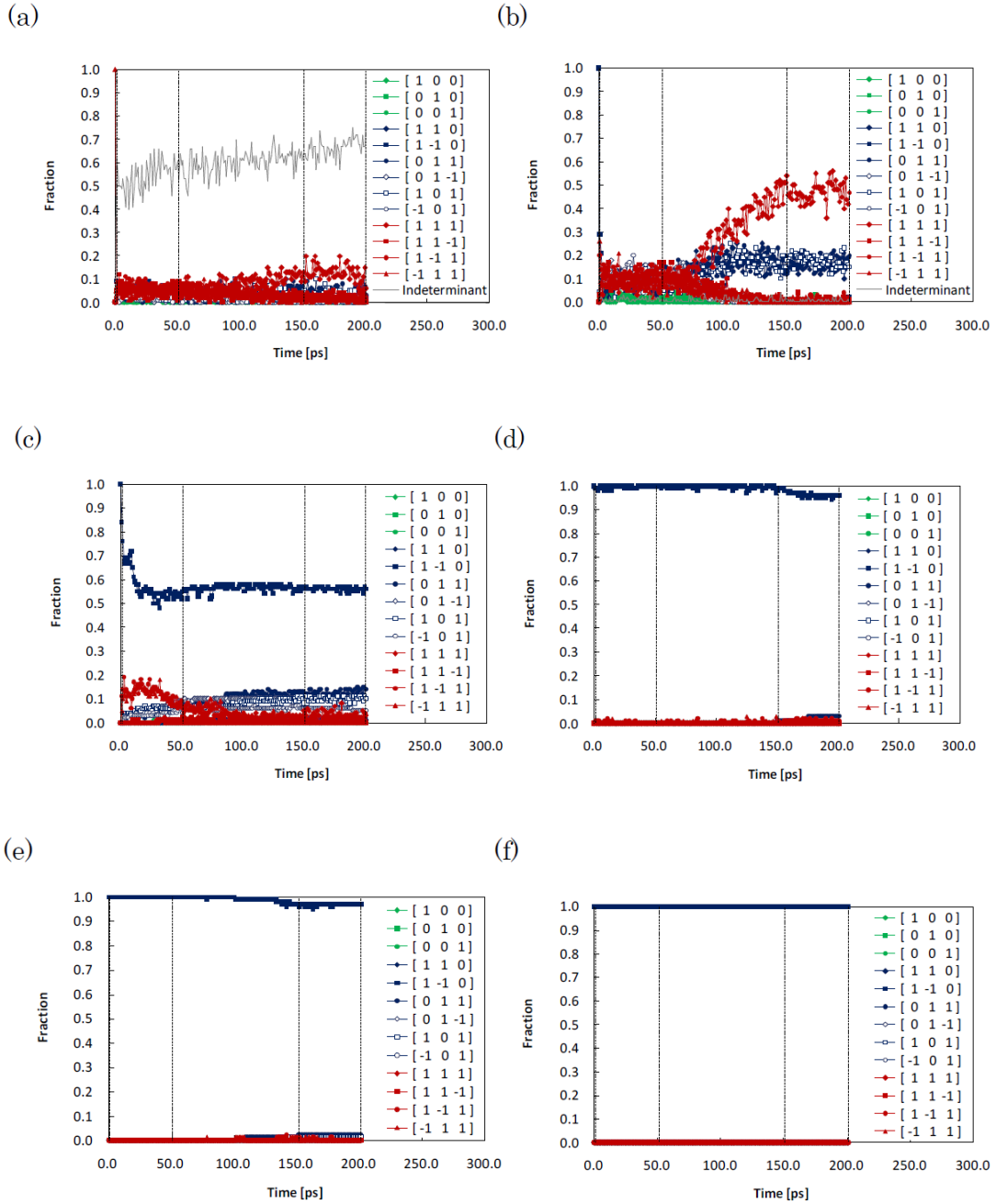


Figure 2.2.6 Direction of interstitial clusters as a function of time for each size at 1200K: (a) Size 3, (b) Size 7, (c) Size 19, (d) Size 37, (e) Size 61, and (f) Size 91

2) Change in directions of interstitial clusters at 600 K

Direction changes at 600 K are shown in Figure 2.2.7. Significant change in directions was not observed for size 37 even under 1% uniaxial tensile strain. Orientation of interstitial clusters was stable after 150 ps for size 3. Change in orientation, however, was observed even after 150 ps where the magnitude of strain is not changed for sizes 7 and 19,

which means that interstitial clusters were unable to reach a stable state of each strain level in these simulations. Therefore, additional simulations were conducted with lower strain rates. Results of these additional simulations are presented in the next section.

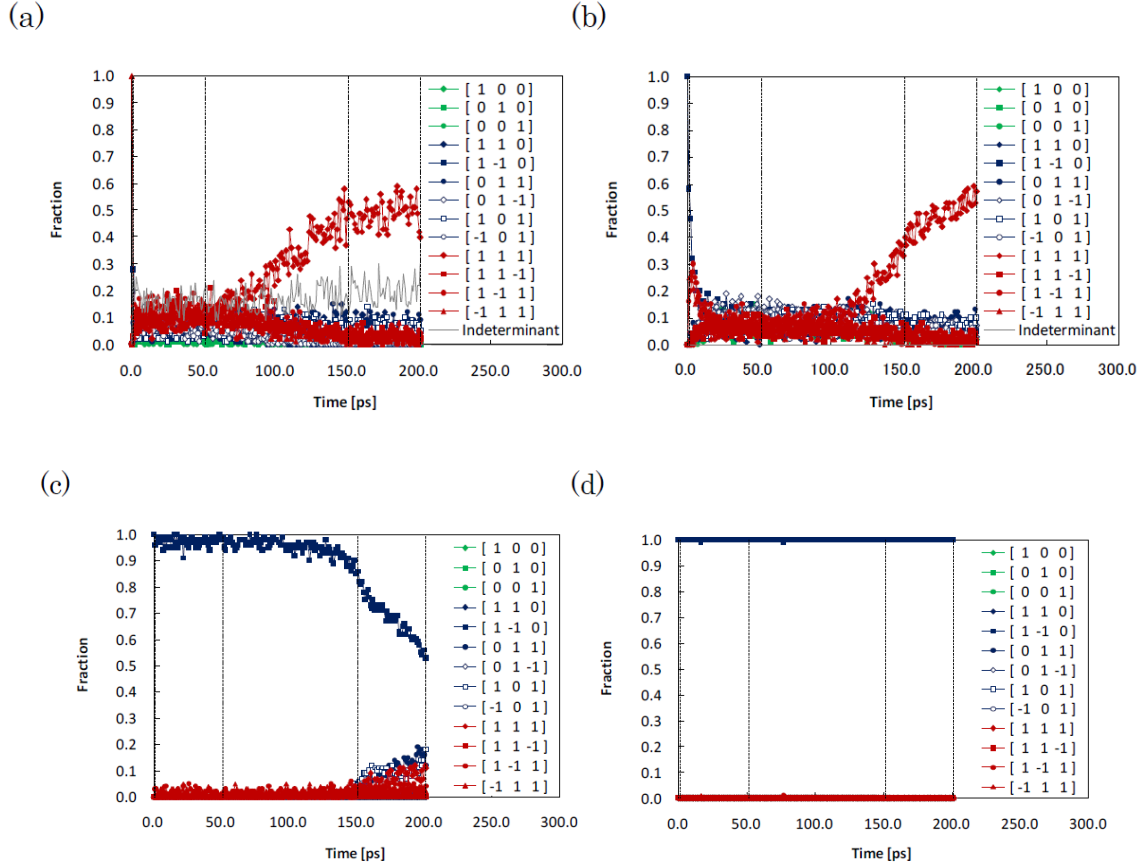


Figure 2.2.7 Direction of interstitial clusters as a function of time for each size at 600 K: (a) Size 3, (b) Size 7, (c) Size 19, and (d) Size 37

3) Change in directions of interstitial clusters at 1 K

Direction changes at 1 K are shown in Figure 2.2.8. These data were analyzed from the perspective of direction change without strong help of thermal vibration. Direction change was observed only for size 3, and no significant direction change was observed for size 7 or larger. For size 3, direction of interstitial clusters changed to various directions even under no strain condition, and tended to be parallel to the stress direction under uniaxial strain.

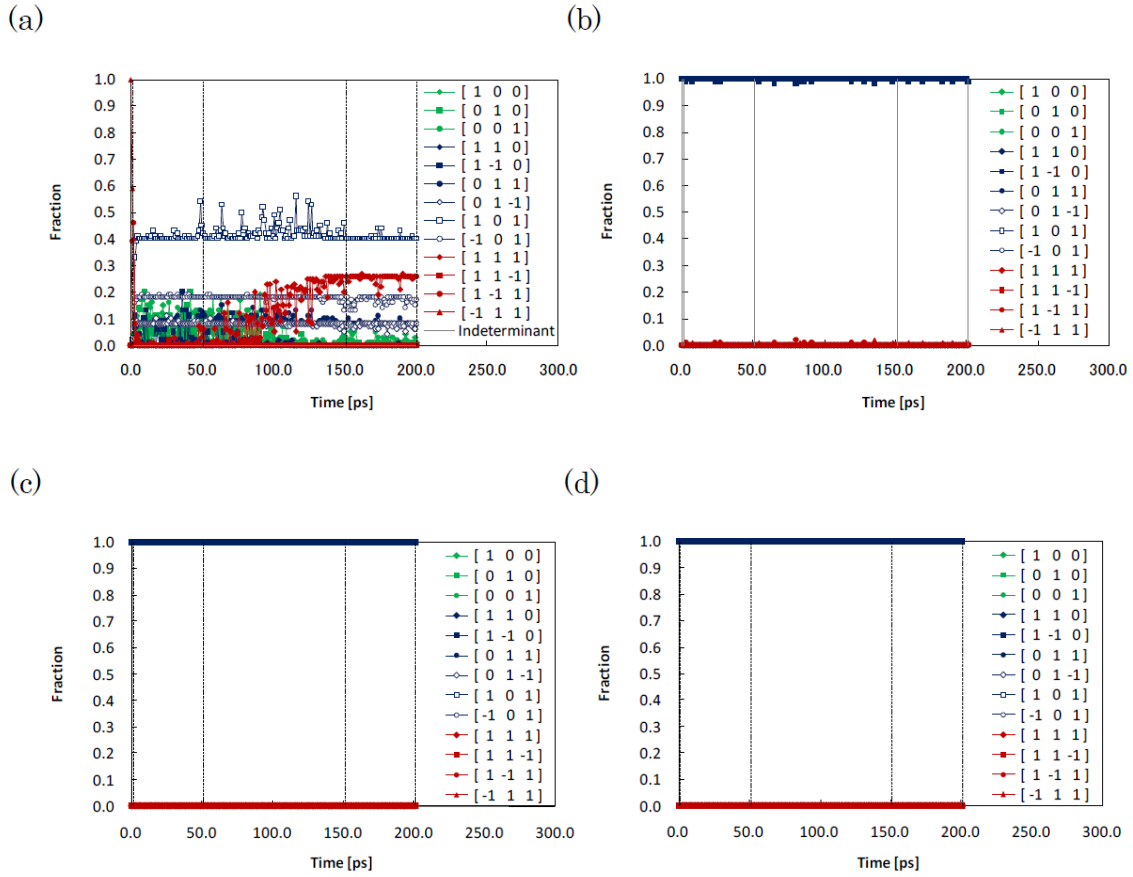


Figure 2.2.8 Direction of interstitial clusters as a function of time for each size at 1 K:
 (a) Size 3, (b) Size 7, (c) Size 19, and (d) Size 37

(c) Further analysis of change in direction

Additional data were obtained for some cases with a lower strain rate and longer waiting time. A list of the cases is presented below. Strain rates of all cases are revalidated. Waiting times without strain are also revalidated, especially for case (b).

- (a) Interstitial clusters with size 7 at 1200 K
- (b) Interstitial clusters with size 19 at 1200 K
- (c) Interstitial clusters with size 37 at 1200 K
- (d) Interstitial clusters with size 7 at 600 K
- (e) Interstitial clusters with size 19 at 600 K

The change in direction for size 7 at 1200 K is shown in Figure 2.2.9 with lower strain rate. The strain rate was set as 0.1×10^9 [1/s] in addition to 1.0×10^9 [1/s]. No marked dependence of the interstitial cluster direction on the strain rate was observed. The gradient of [1 1 1] increase was described not as a function of time, but as a function of strain. Fractions of [1 1 1] clusters are approximately 0.5 for each case when the strain reaches 1.0% uniaxial strain.

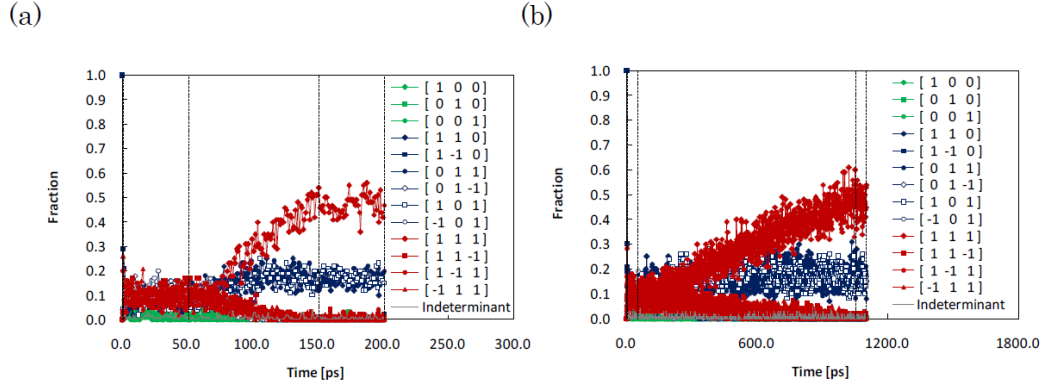


Figure 2.2.9 Direction of interstitial clusters as a function of time for size 7 at 1200 K, (a) at a strain rate of 1.0×10^9 [s], (b) at a strain rate of 0.1×10^9 [s]

Change in direction of interstitial clusters for size 19 with lower strain rate and longer waiting time at 1200 K is shown in Figure 2.2.10. Strain rates were set to be 1.0×10^9 [s], 0.5×10^9 [s], and waiting time was set as 100 ps in additional data. Orientation of interstitial clusters is stabilized at 100 ps after simulation was started. No marked dependence of the interstitial cluster direction on strain rate was observed.

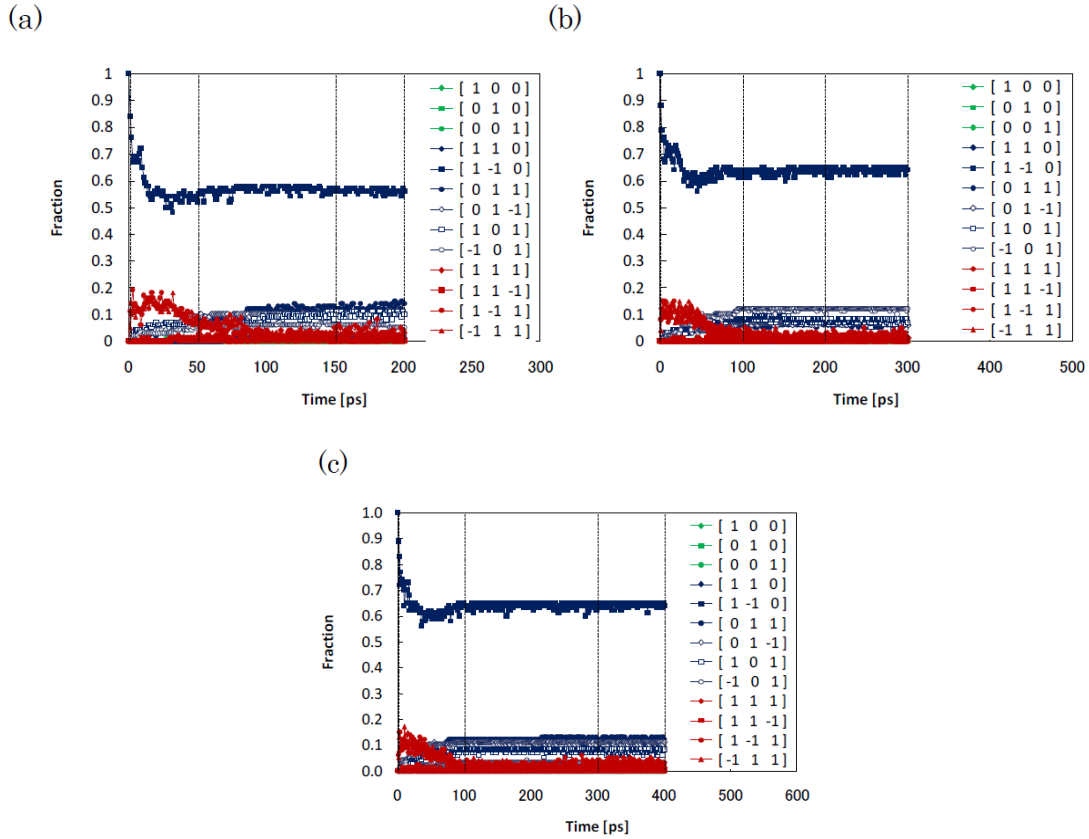


Figure 2.2.10 Direction of interstitial clusters as a function of time for size 19 at 1200 K, (a) at a strain rate of 1.0×10^9 [s] with waiting time 50 ps, (b) at a strain rate of 1.0×10^9 [s] with waiting time 100 ps, (c) at a strain rate of 0.5×10^9 [s] with waiting time 100 ps.

Change in the direction of interstitial clusters for size 37 with lower strain rate and longer waiting time at 1200 K is shown in Figure 2.2.11. The strain rate was set as 1.0×10^9 [s], 0.1×10^9 [s] in additional data. Interstitial clusters can change direction only at the time of uniaxial 1.0% strain: 150 ps in data Figure 2.2.11 (a) and 1000 ps in data Figure 2.2.11 (b). This result indicates that change in the direction of interstitial clusters with size 37 is induced only at a high-strain condition of 1.0% uniaxial tensile strain.

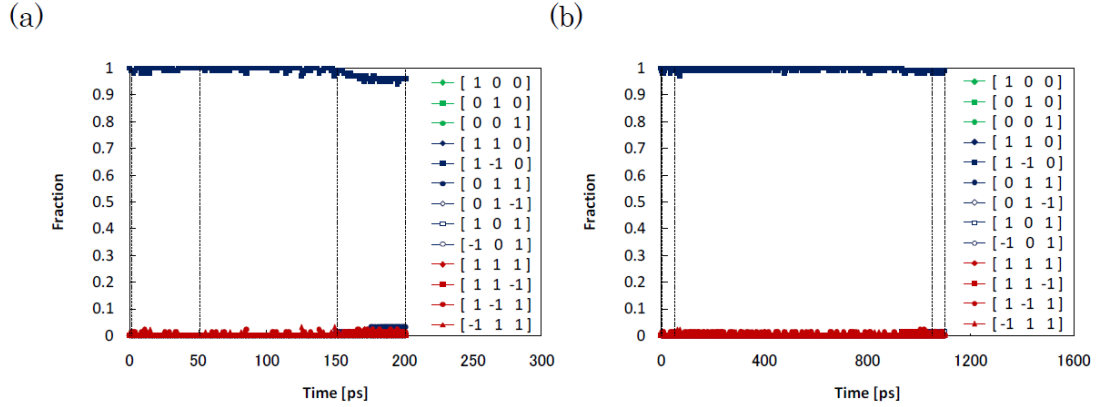


Figure 2.2.11 Direction of interstitial clusters as a function of time for size 37 at 1200K,
(a) at a strain rate of 1.0×10^9 [s], and (b) at a strain rate of 0.1×10^9 [s]

Change in direction of interstitial clusters for size 7 with a lower strain rate at 600 K is shown in Figure 2.2.12. The strain rate was set as 1.0×10^9 [s], 0.5×10^9 [s] and 0.2×10^9 [s] in additional data.

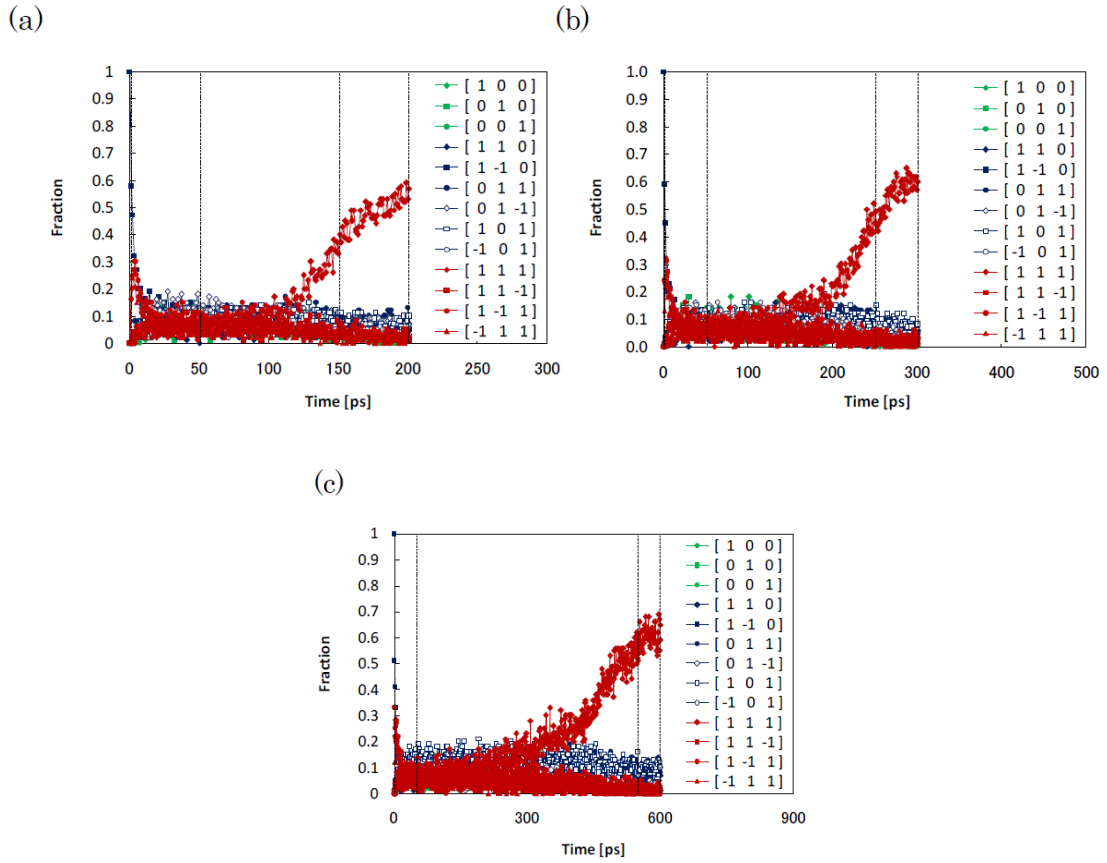


Figure 2.2.12 Direction of interstitial clusters as a function of time for size 7 at 600 K, (a) at a strain rate of 1.0×10^9 [1/s], (b) at a strain rate of 0.5×10^9 [1/s], and (c) at a strain rate of 0.2×10^9 [1/s]

A change in the direction of interstitial clusters for size 19 with lower strain rate at 600 K is shown in Figure 2.2.13. The change in direction depends strongly on the strain rate. However, a change in direction was observed under constant strain of at the last 50 ps even at a strain rate of 0.1×10^9 [1/s].

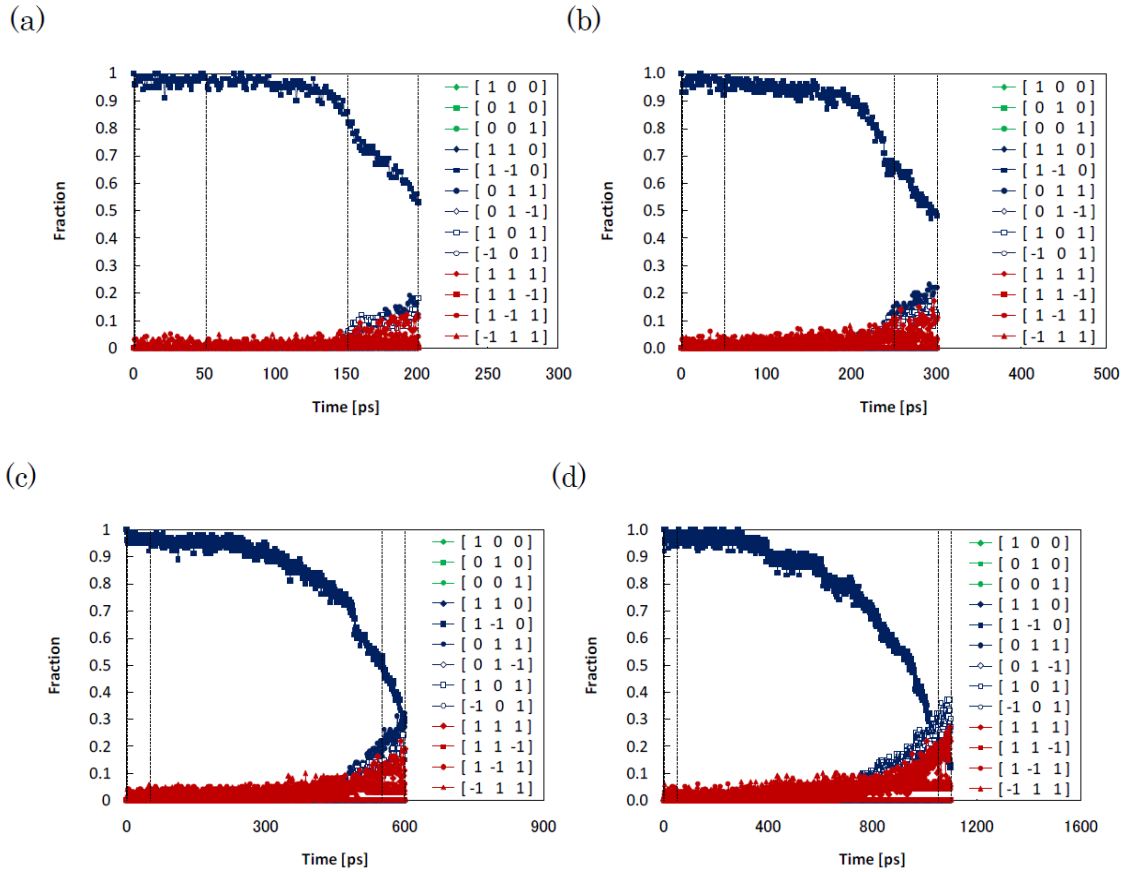


Figure 2.2.13 Direction of interstitial clusters as a function of time for size 19 at 600K,
 (a) at a strain rate of 1.0×10^9 [s], (b) at a strain rate of 0.5×10^9 [s],
 (c) at a strain rate of 0.2×10^9 [s], and (d) at a strain rate of 0.1×10^9 [s]

Analyses based on data at a strain rate of 1.0×10^9 [s] with waiting time of 50 ps will be discussed because data with different conditions cannot be compared simultaneously. As a further analysis, the change of cluster behavior is examined by comparing additional data and data at a strain rate of 1.0×10^9 [s] with waiting time of 50 ps. The following dataset is used as additional data for the additional analyses described below.

- (a) Figure 2.2.9 (b) at a strain rate of 0.1×10^9 [s] for the case of clusters with size 7 at 1200 K.
- (b) Figure 2.2.10 (c) at a strain rate of 0.5×10^9 [s] with waiting time 100 ps for the case of clusters with size 19 at 1200 K
- (c) Figure 2.2.11 (b) at a strain rate of 0.1×10^9 [s] for the case of clusters with size 37 at 1200 K
- (d) Figure 2.2.12 (c) at a strain rate of 0.2×10^9 [s] for the case of clusters with size 7 at 600 K
- (e) Figure 2.2.13 (d) at a strain rate of 0.1×10^9 [s] for the case of clusters with size 19 at 600 K

(d) Validation of analysis model

1) Validation of the influence attributable to thermal control

Change in the direction of interstitial clusters without temperature control at 1200K is shown in Figure 2.2.14. Half of the kinetic energy as thermal energy applied on the simulation cell is converted into potential energy because the positions of atoms are changed from their stable lattice sites as described above. Therefore, temperature control was applied to stabilize it at the target one. The simulation cell temperature is stabilized at half of the temperature corresponding to the applied kinetic energy without thermal control.

Interstitial cluster behavior at 1200 K was analyzed without thermal control, in comparison with the one with temperature control at 600 K and 1200 K. Behavior of interstitial clusters shown in Figure 2.2.14 resembles that in Figure 2.2.16 at 600 K, but it is quite different from that shown in Figure 2.2.15 at 1200 K. These results indicate that the simulation cell temperature was stabilized at half the desired temperature, 600 K, without thermal control. Moreover, thermal control does not affect results.

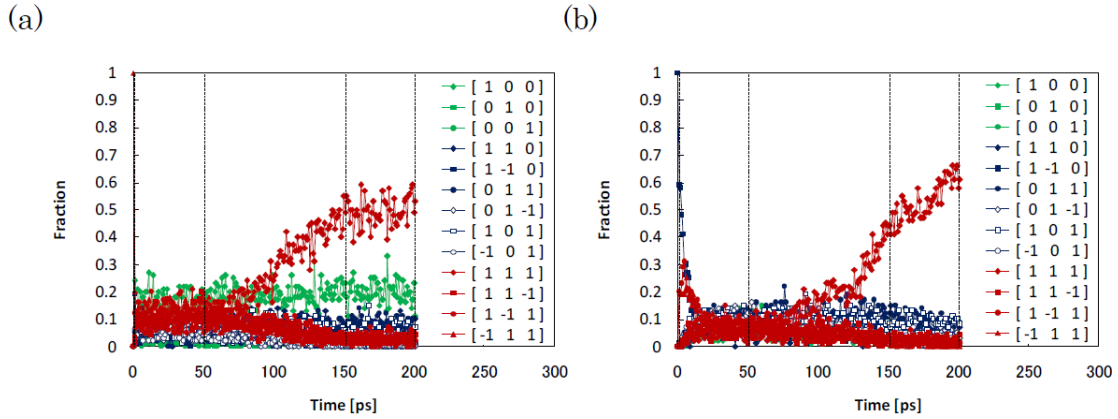


Figure 2.2.14 Direction of interstitial clusters as a function of time for each size at 1200 K without thermal control: (a)Size 3, (b)Size 7

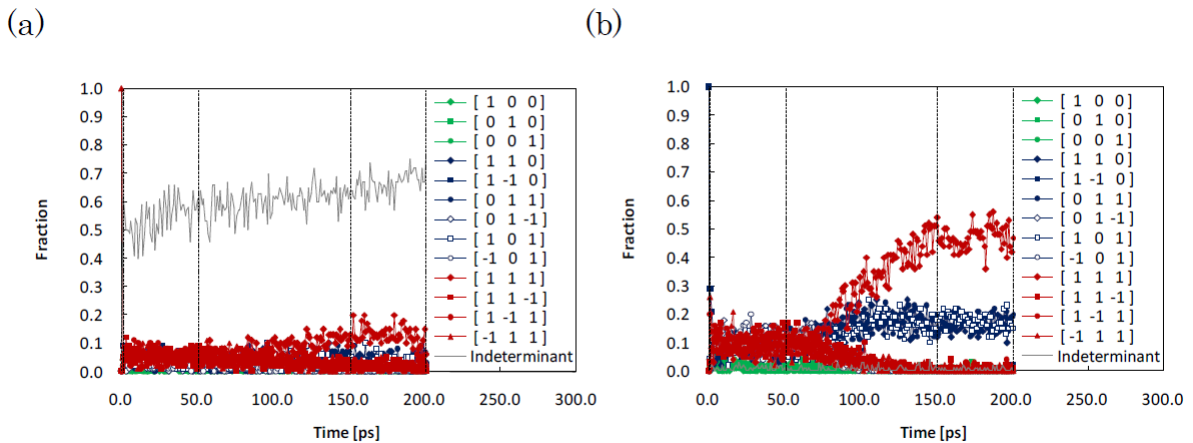


Figure 2.2.15 Direction of interstitial clusters as a function of time for each size at 1200 K: (a)Size 3 and (b)Size 7

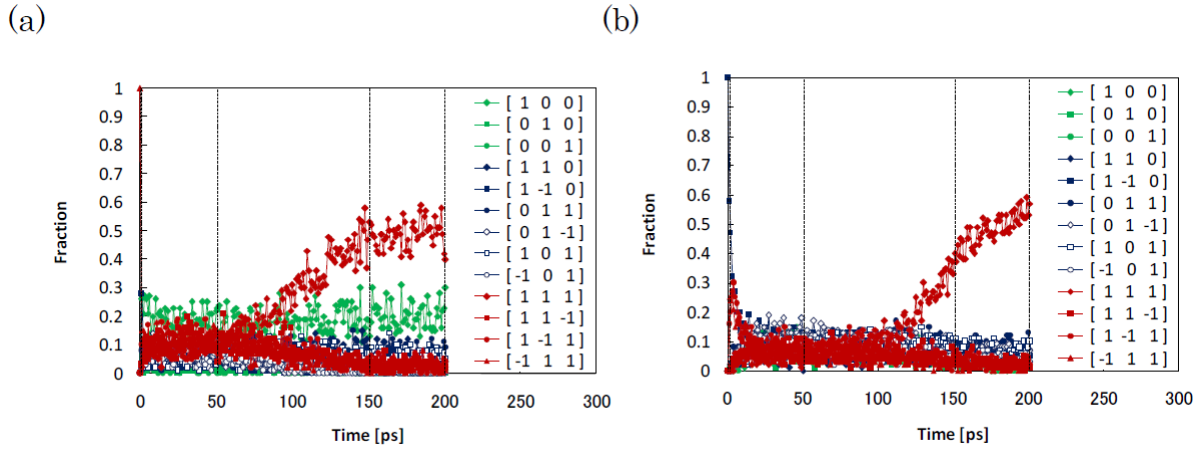


Figure 2.2.16 Direction of interstitial clusters as a function of time for each size at 600 K:
(a)Size 3 and (b)Size 7

2) The influence attributable to initial direction

Dependence of direction change on initial direction was evaluated for size 7 at 1200 K, as shown in Figure 2.2.17. No marked change was observed even with the clusters initially oriented parallel to the stress axis. These results show that insertion of interstitial clusters without formation process did not affect results of analysis for this case, although these results do not prove dependence of data on initial direction in all cases, as in the case with cluster for size 37 or larger. It cannot be always applicable for clusters with low probability of direction change.

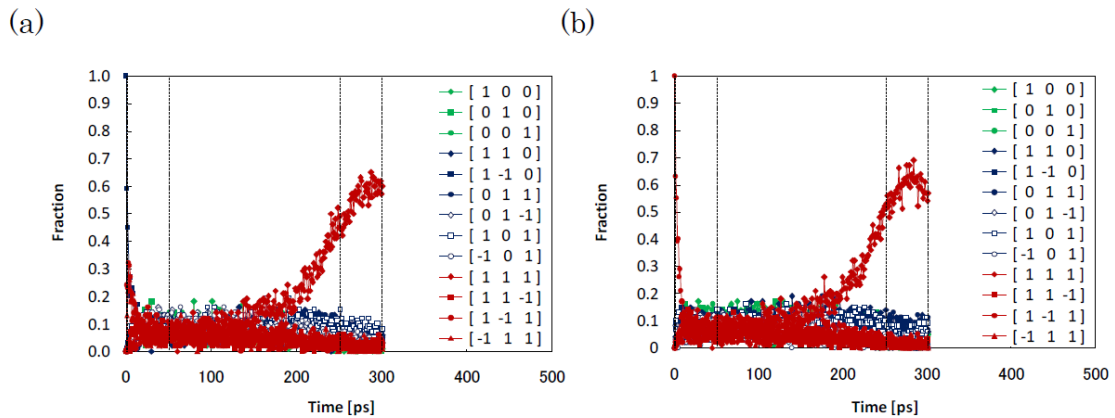


Figure 2.2.17 Direction of interstitial clusters as a function of time for size 7 at 1200 K: (a) $[1 \bar{1} 0]$, (b) $[1 \bar{1} 1]$, (c) $[1 0 1]$, and (d) $[1 1 1](1/2)$

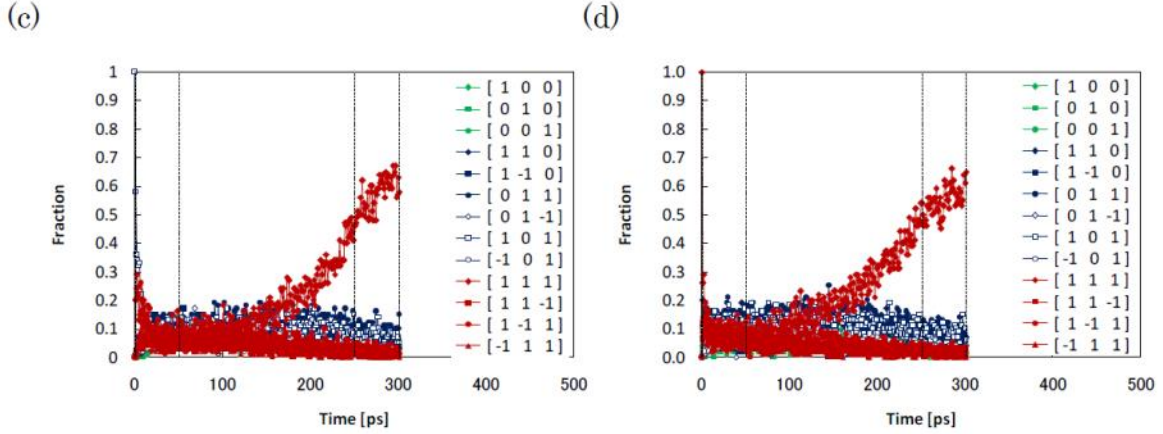


Figure 2.2.17 Direction of interstitial clusters as a function of time for size 7 at 1200 K: (a) $[1 \bar{1} 0]$, (b) $[1 \bar{1} 1]$, (c) $[1 0 1]$, and (d) $[1 1 1](2/2)$

(e) Orientation of interstitial clusters with a constant strain rate

1) Change in direction at 1200 K

Change in the direction with a constant strain rate of 1.0×10^9 [1/s] is shown in Figure 2.2.18. Figure 2.2.19 and Figure 2.2.21 respectively show the fractions affected most by $[1 1 1]$ strain: $[1 1 1]$ and $[1 1 0]$, $[0 1 1]$ $[1 0 1]$. Additional data obtained in section ③(c) **Further analysis of change in direction** are used in these analyses. Under uniaxial $[1 1 1]$ strain, $[1 1 1]$ is the favorable direction of $\langle 1 1 1 \rangle$ clusters, and $[1 1 0]$, $[0 1 1]$, $[1 0 1]$ are favorable directions and $\langle 1 1 0 \rangle$ directions, respectively. By inserting the angle between the stress axis and each cluster to equation (2.2.1), the fractions of $[1 1 1]$ interstitial clusters to $\langle 1 1 1 \rangle$ interstitial clusters are described as

$$p_{[1 1 1]} = \frac{\frac{1}{4} \exp\left(\frac{\Omega \sigma \cos^2(0^\circ) n}{k T}\right)}{\frac{1}{4} \exp\left(\frac{\Omega \sigma \cos^2(0^\circ) n}{k T}\right) + \frac{3}{4} \exp\left(\frac{\Omega \sigma \cos^2(70.5^\circ) n}{k T}\right)}, \quad (2.2.2)$$

and those of $[1 1 0]$, $[0 1 1]$, $[1 0 1]$ to $\langle 1 1 0 \rangle$ are described as

$$p_{[1 1 0][0 1 1][1 0 1]} = \frac{\frac{3}{6} \exp\left(\frac{\Omega \sigma \cos^2(35.3^\circ) n}{k T}\right)}{\frac{3}{6} \exp\left(\frac{\Omega \sigma \cos^2(35.3^\circ) n}{k T}\right) + \frac{3}{6} \exp\left(\frac{\Omega \sigma \cos^2(90.0^\circ) n}{k T}\right)}, \quad (2.2.3)$$

in thermal equilibrium condition. Theoretical values for the respective conditions are presented in Figure 2.2.20 and Figure 2.2.22. Directions of interstitial clusters differ greatly from theoretical value for cluster size 19 or larger, although similar results were obtained for sizes 3 and 7. It can be expected that the difference between MD results and theoretical values is caused by the low probability of rotation in the case of large clusters. Comparisons of MD values and theoretical values for sizes 3 and 7 for $\langle 1 1 1 \rangle$ and $\langle 1 1 0 \rangle$ clusters respectively are shown in Figure 2.2.23 and Figure 2.2.24. Theoretical values expected from equation (2.2.1) are also shown as dotted lines. MD results correspond well to the theoretical

values for $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters. However, some difference is apparent between the MD results and the theoretical values for $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ clusters. This difference is the same as that in the case of the lower strain condition 0.1×10^9 [s].

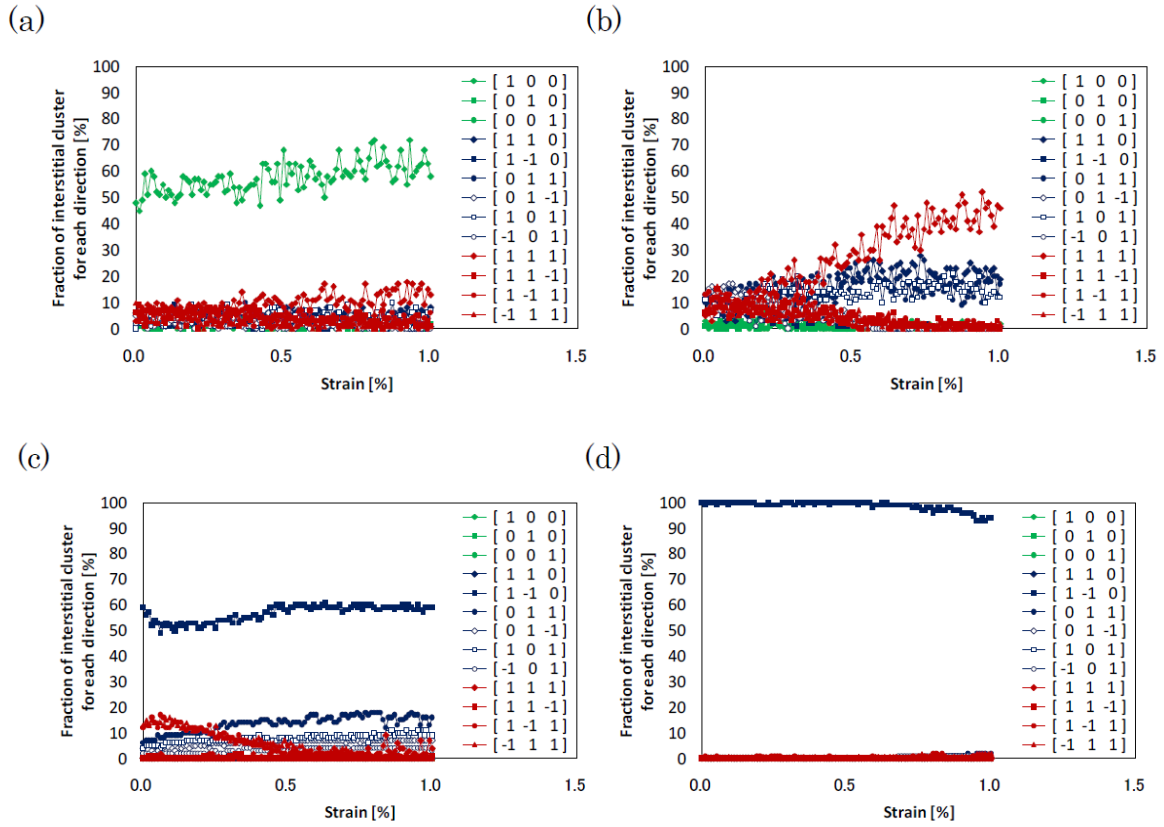


Figure 2.2.18 Direction of interstitial clusters as a function of uniaxial strain at 1200K: (a) Size 3, (b)Size 7, (c)Size 19, (d)Size 37

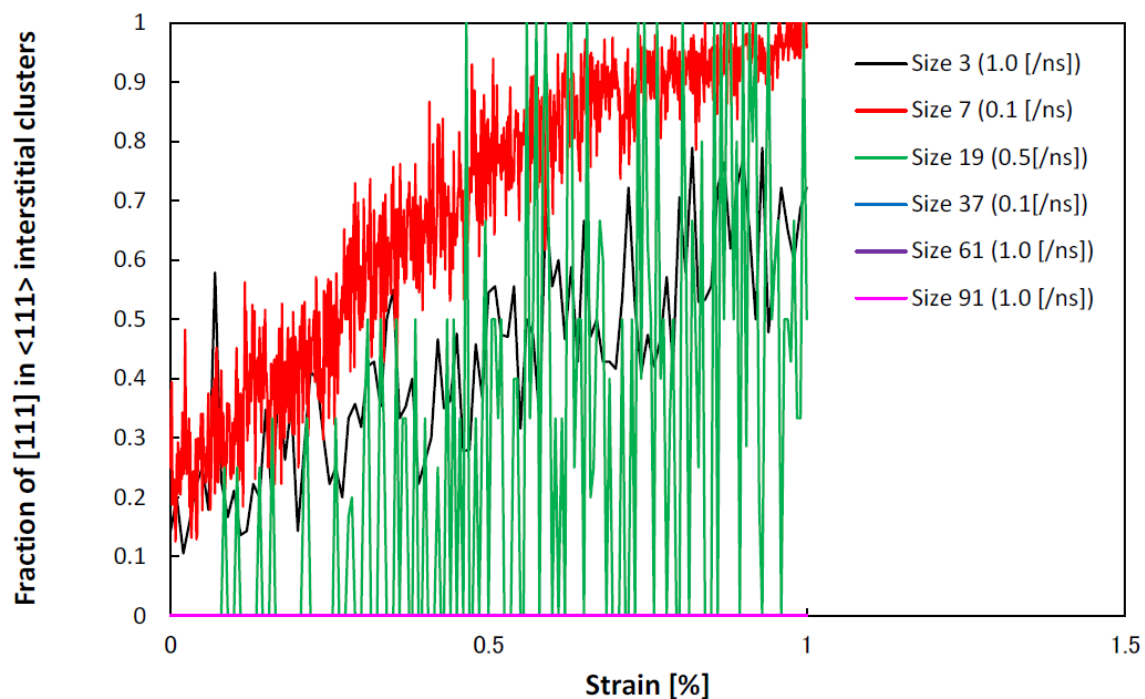


Figure 2.2.19 Fractions of $[1\ 1\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ clusters as a function of strain at 1200 K with additional data

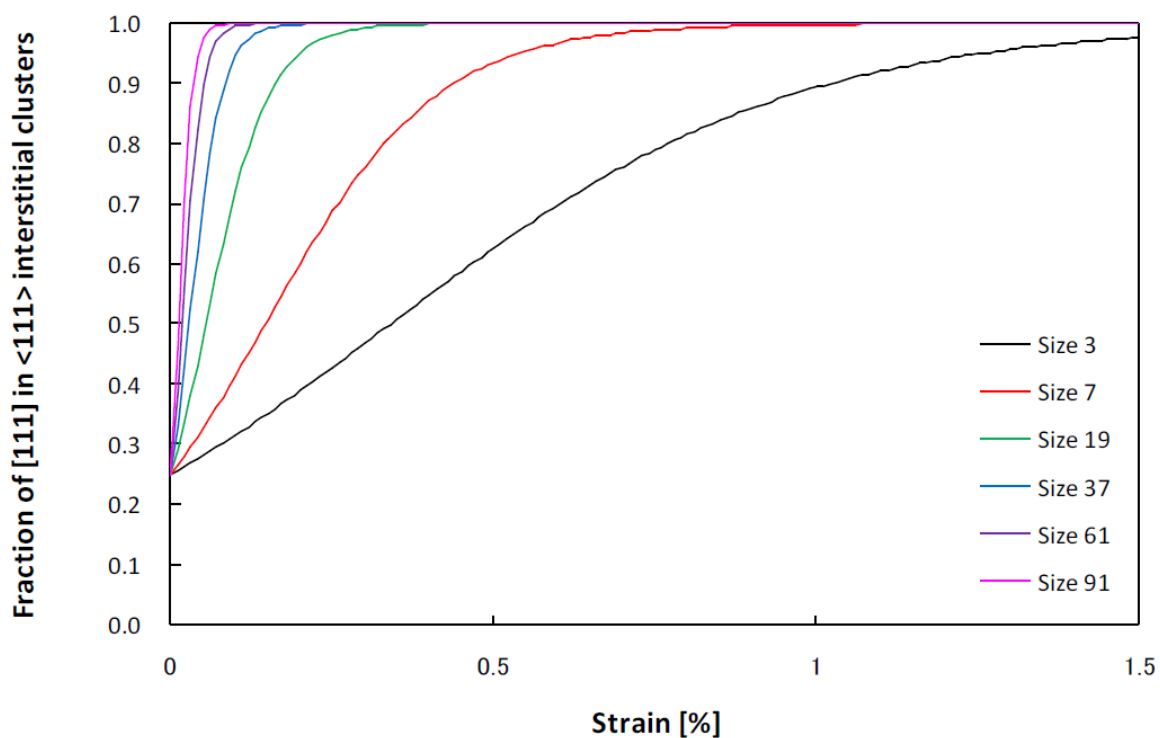


Figure 2.2.20 Theoretical values showing fractions of $[1\ 1\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ clusters as a function of strain at 1200 K

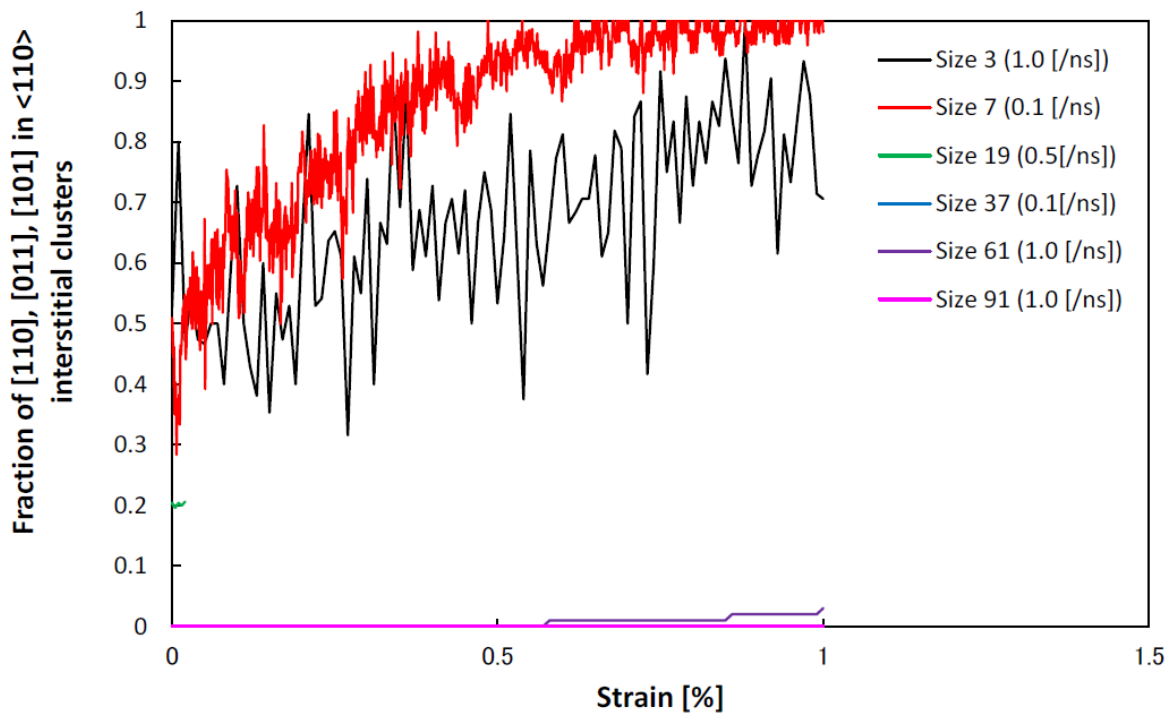


Figure 2.2.21 Fractions of $[1\ 1\ 0]$, $[0\ 1\ 1]$, $[1\ 0\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters as a function of strain at 1200 K with additional data

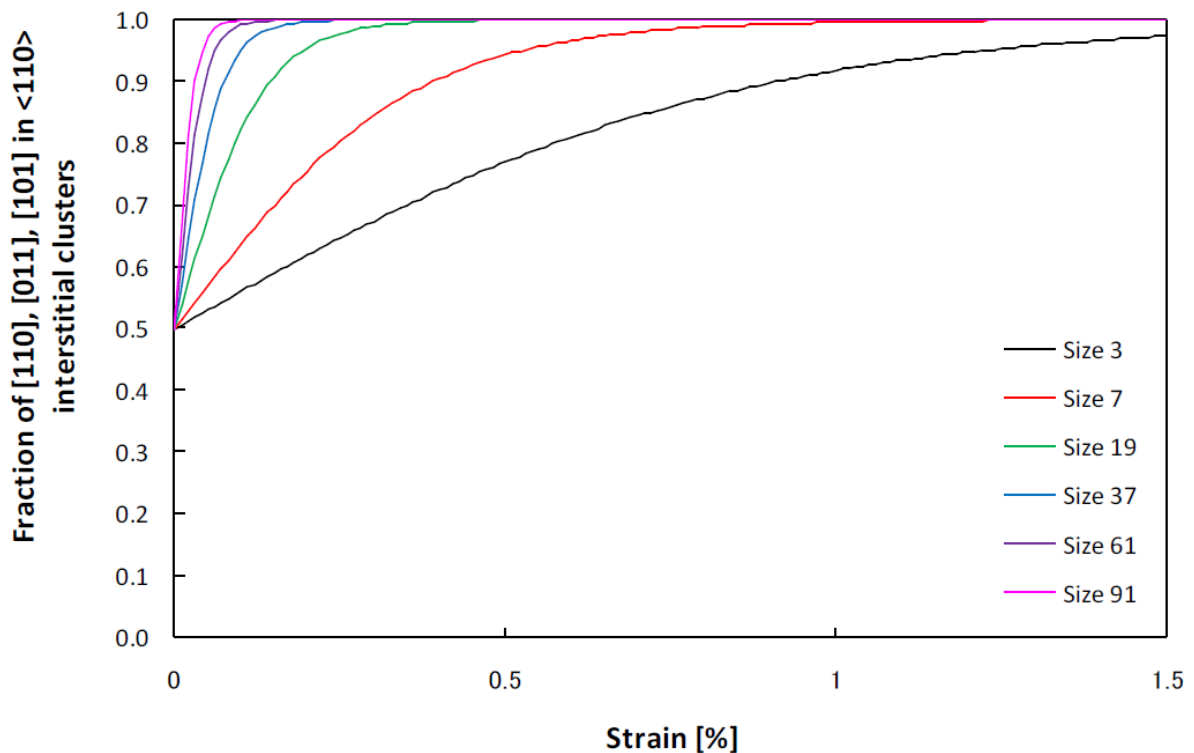


Figure 2.2.22 Theoretical values showing fractions of $[1\ 1\ 0]$, $[0\ 1\ 1]$, $[1\ 0\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters as a function of strain at 1200 K

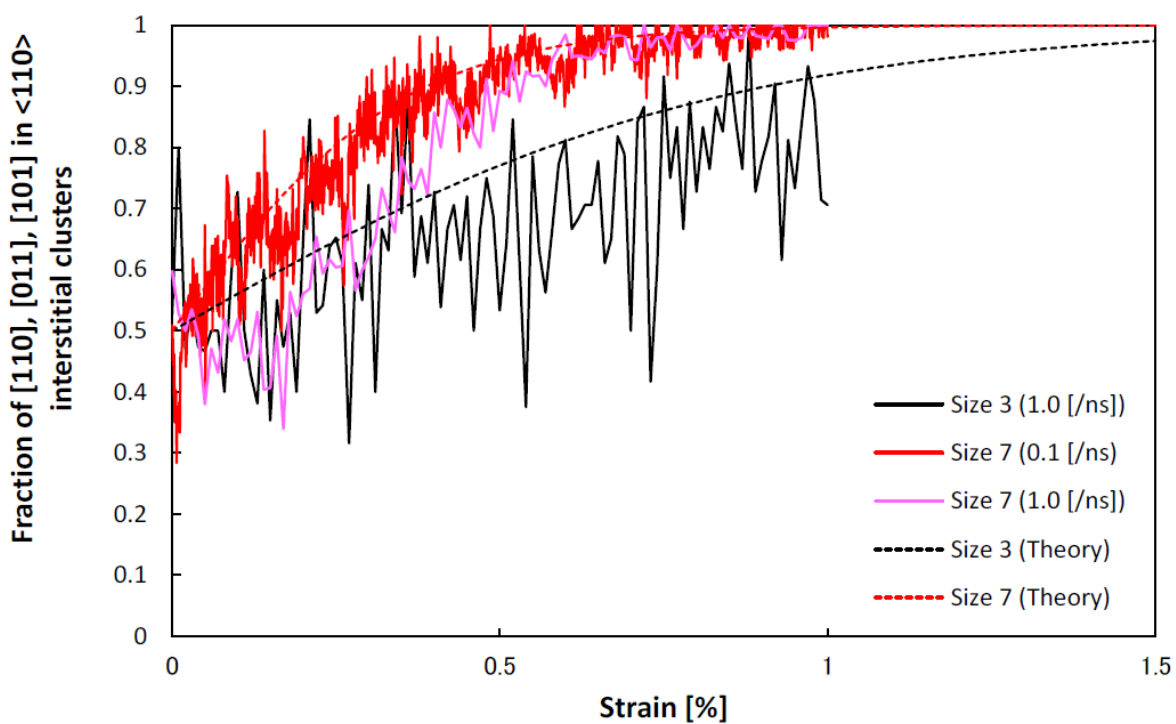


Figure 2.2.23 Comparison of theoretical values and MD results for <1 1 1> clusters at 1200 K

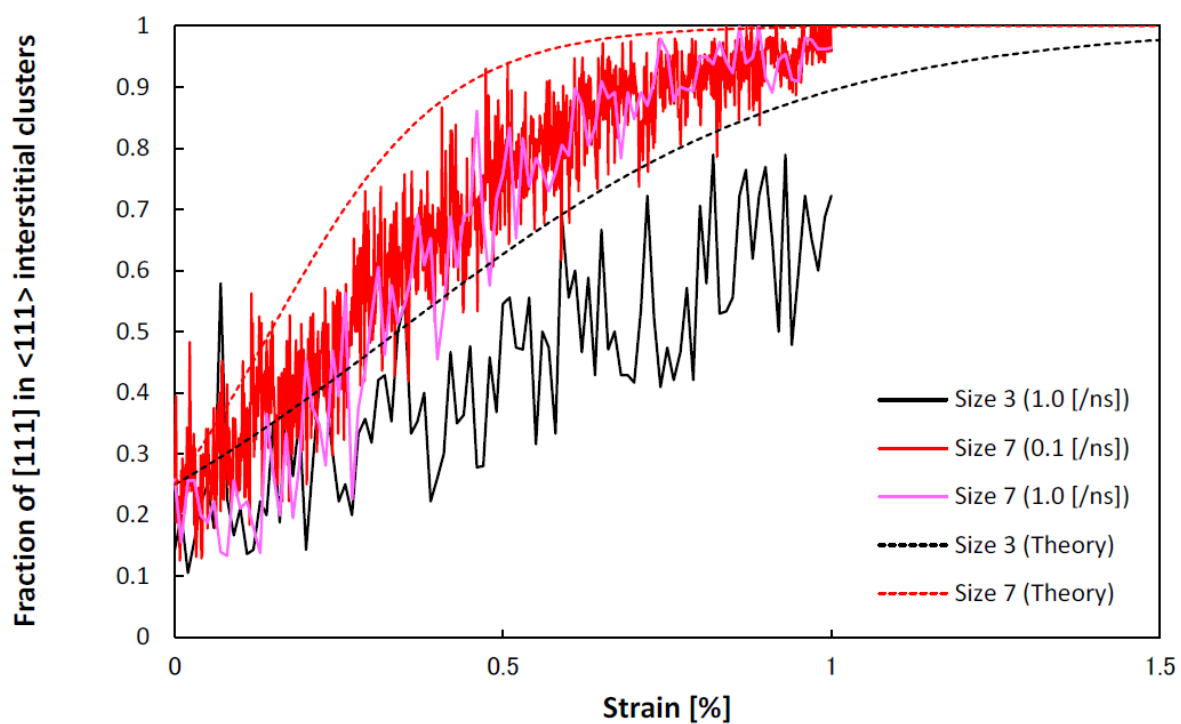


Figure 2.2.24 Comparison of theoretical values and MD results for <1 1 0> clusters at 1200 K

2) Change in directions at 600 K

Direction change with a constant strain rate is shown in Figure 2.2.25. Figure 2.2.26 and Figure 2.2.28 respectively show the fraction mostly affected by $[1\ 1\ 1]$ strain for $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ and $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters. The additional data obtained in paragraph ③(c) **Further analysis of change in direction** are used in this analysis. The theoretical values expected by equation (2.2.2) and equation (2.2.3) are also shown as dotted lines in Figure 2.2.27 and Figure 2.2.29.

Directions of interstitial clusters differ greatly from the theoretical values for cluster size 7 and larger. Difference between MD results and theoretical values are expected to arise from the low probability of rotation in the case of large clusters, because of the MD results corresponding closely to the theoretical values at the higher temperature of 1200 K, even for size 7, which indicates that large clusters cannot change direction freely even under high stress conditions, especially at lower temperatures.

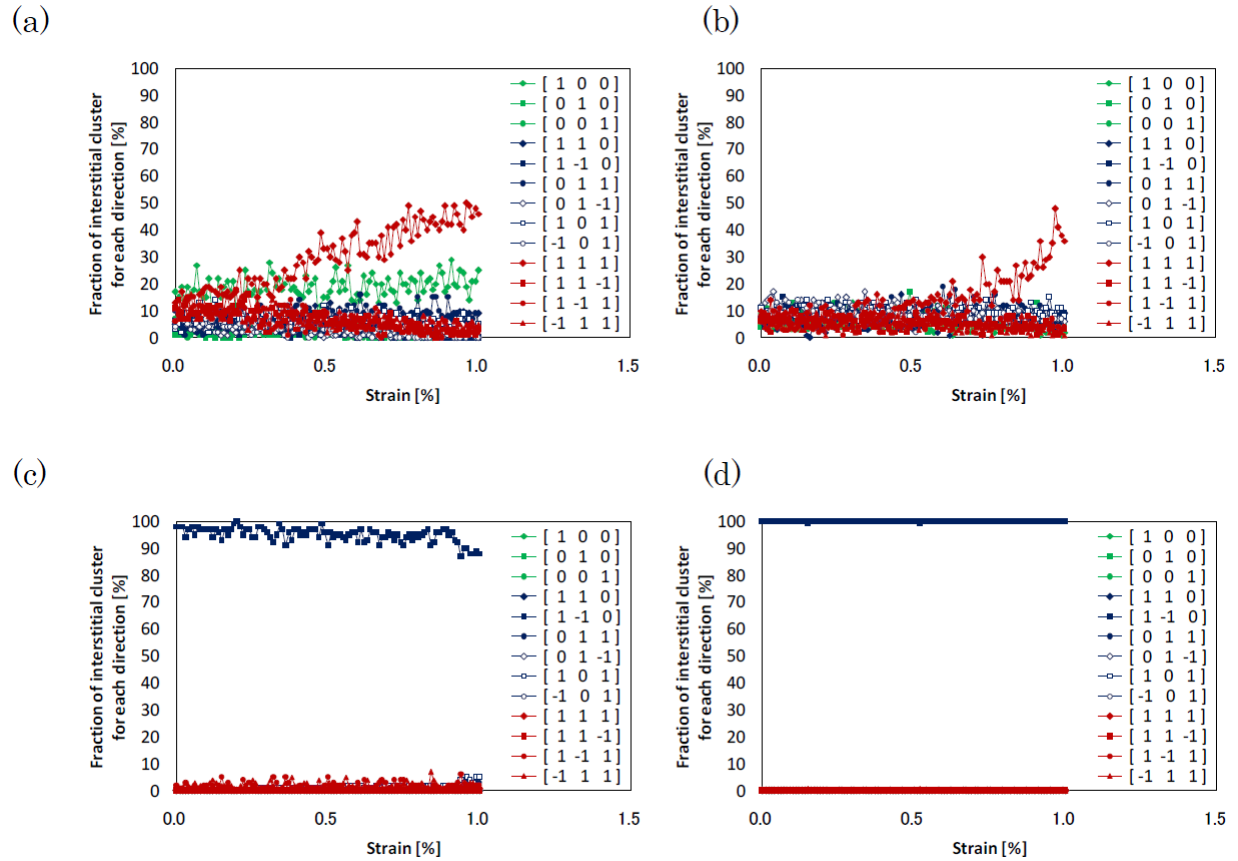


Figure 2.2.25 Directions of interstitial clusters with a constant strain rate as a function of uniaxial strain at 600 K: (a) Size 3, (b) Size 7, (c) Size 19, and (d) Size 37

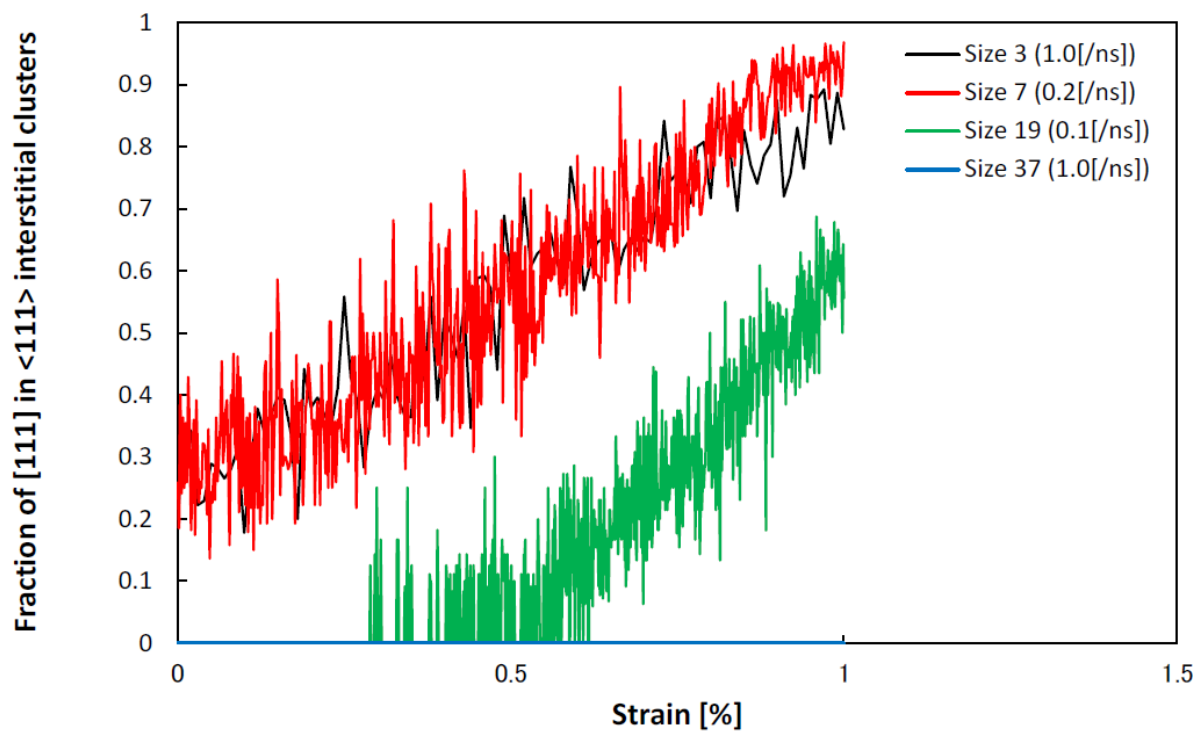


Figure 2.2.26 Fractions of $[111]$ clusters on $\langle 111 \rangle$ clusters as a function of strain at 600 K with additional data

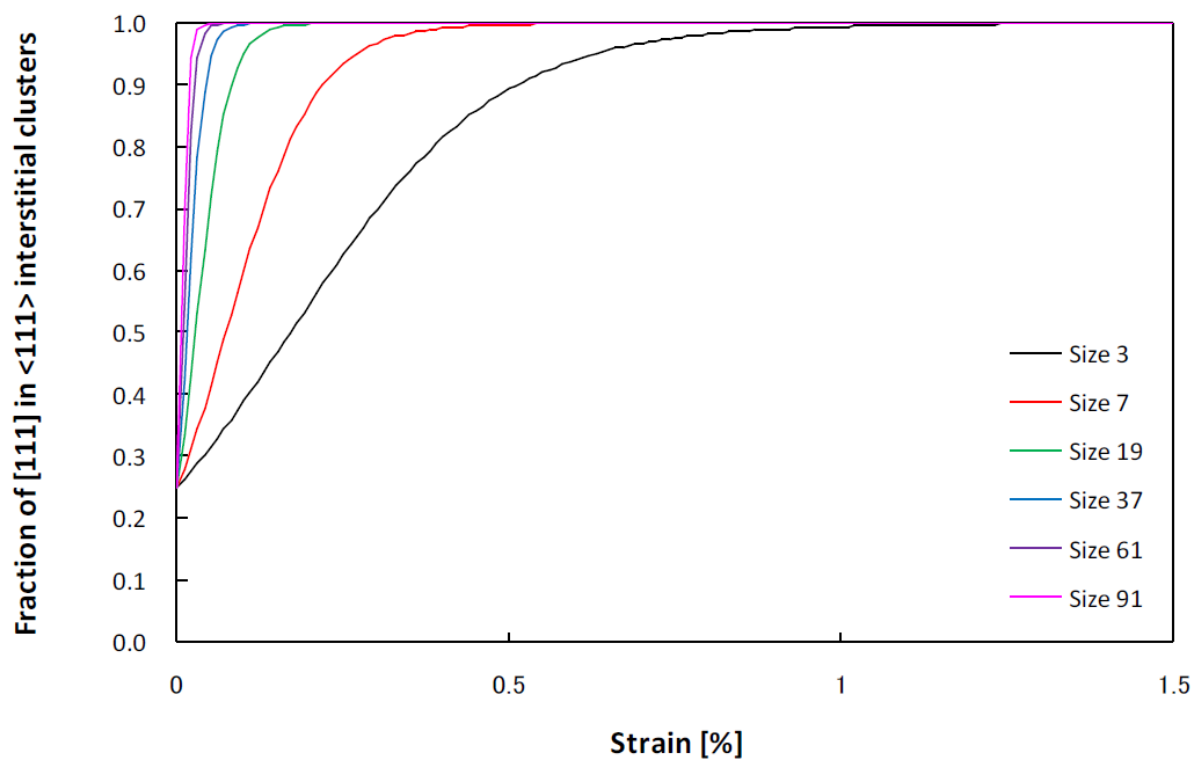


Figure 2.2.27 Theoretical values showing fractions of $[111]$ clusters on $\langle 111 \rangle$ clusters as a function of strain at 600 K

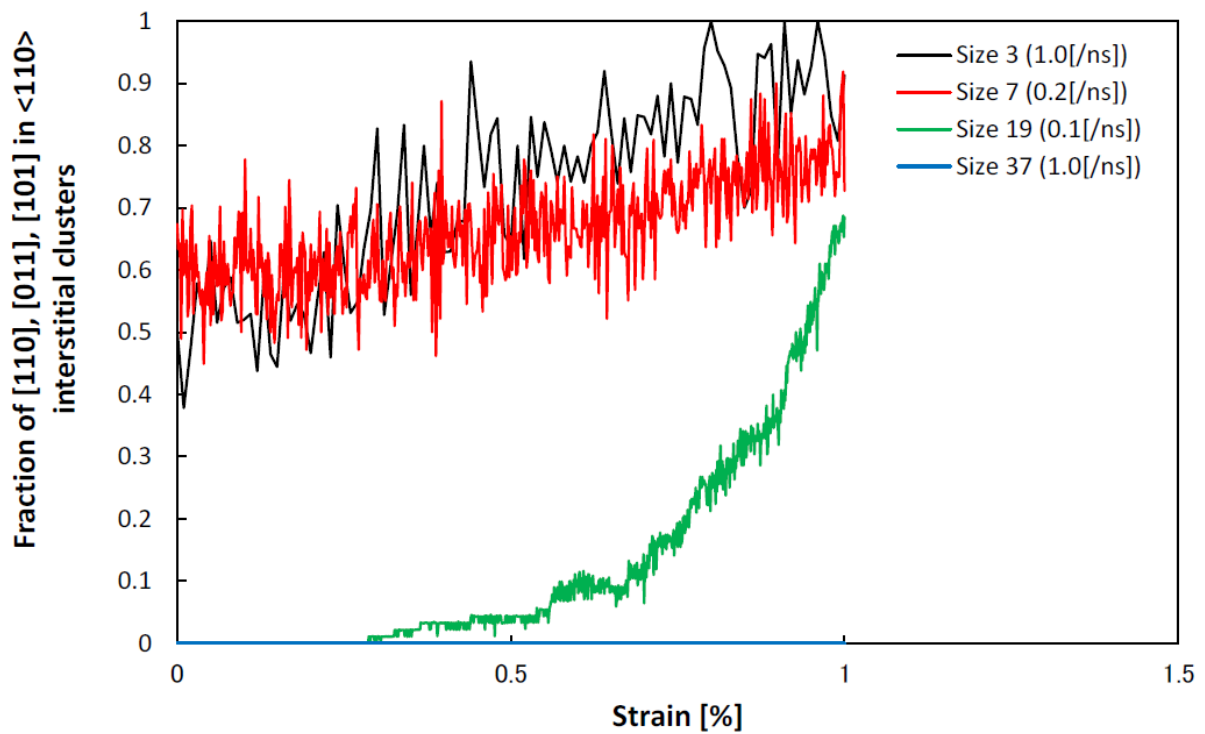


Figure 2.2.28 Fractions of $[1\ 1\ 0]$, $[0\ 1\ 1]$, $[1\ 0\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters as a function of strain at 600 K with additional data

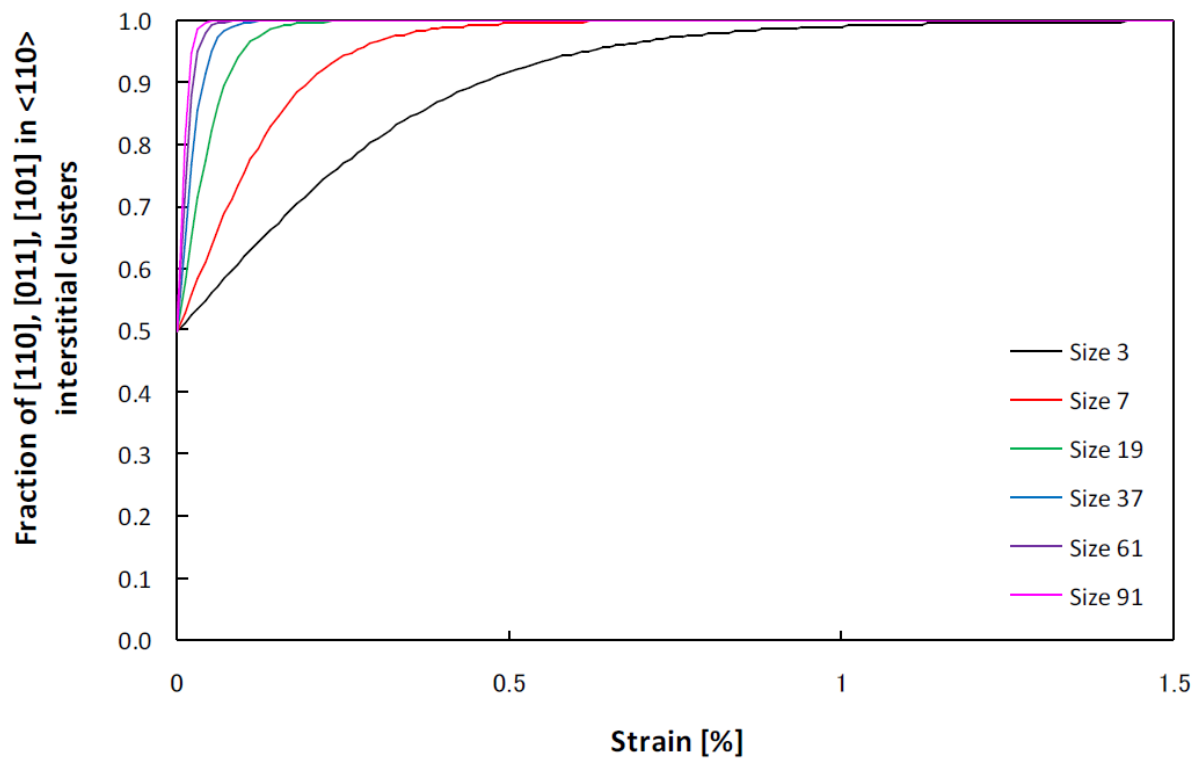


Figure 2.2.29 Theoretical values showing fractions of $[1\ 1\ 0]$, $[0\ 1\ 1]$, $[1\ 0\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters as a function of strain at 600 K

3) Discussion of the validity of the theoretical model based on direction change at 600 K and 1200 K

MD results for the orientation of $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters corresponded well to the theoretical values for small size clusters at 1200 K. This indicates that the theoretical model can be applicable when clusters can change direction easily. However, the orientation of $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ clusters differs from the theoretical value even at 1200 K. The main reason is the low probability of direction change because a greater significant difference is observed for size 19 or larger clusters. The following effects or approximations can be considered for the difference.

1. Stress exerted by uniaxial strain is approximated as a uniaxial stress in this study.
2. The theoretical model subsumes the interstitial clusters as planer defects. However, large clusters can be treated as line defects.
3. The theoretical model subsumes that the distorted area by inserting cluster is exactly the same size as the cluster. However, a difference exists between these two in reality, and the distorted area is larger.

However, the difference between theoretical values and MD values is not so great at high temperatures, which indicates that those three effects or approximations are expected not to be serious. Therefore, direction change is compared between 0% strain and a constant strain of 1% based on theoretical model to clearly describe its cluster size dependence in the next section.

(f) Comparison of orientation between non-strain and constant-strain conditions

1) Change in directions at 1200 K

Direction change is shown in Figure 2.2.30 as a function of time at 1200 K. The left column presents results without strain, while the right column under constant uniaxial 1.0% strain. The last 20 data points were averaged. The fractions most affected by applied stress for $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ and $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ are shown respectively in Figure 2.2.31 and Figure 2.2.32. The theoretical values obtained using equation (2.2.1) are also shown as dotted lines. The theoretical values for applied 1% strain are approximately 1 for almost all cluster sizes. The fraction of interstitial clusters with size 3 corresponded well to the theoretical values either with or without strain.

The fraction with size 7 also corresponded well to the theoretical values. For clusters larger than 7, however, the MD results differed greatly from the theoretical values.

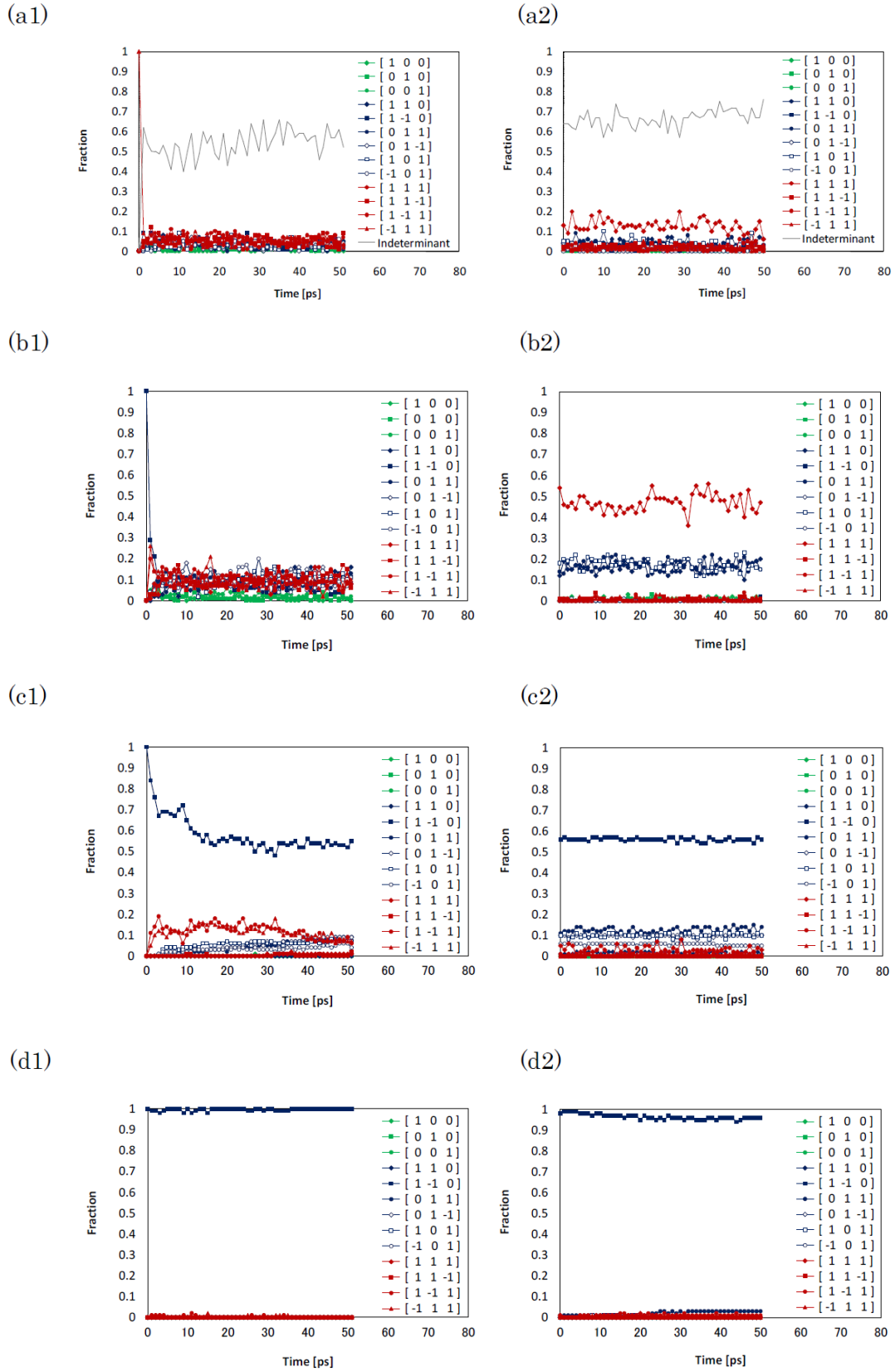


Figure 2.2.30 Directions of interstitial clusters as a function of time at 1200 K:
 (Left column) without strain; (Right column) under uniaxial 1.0% tensile strain;
 (a) Size 3, (b) Size 7, (c) Size 19, and (d) Size 37

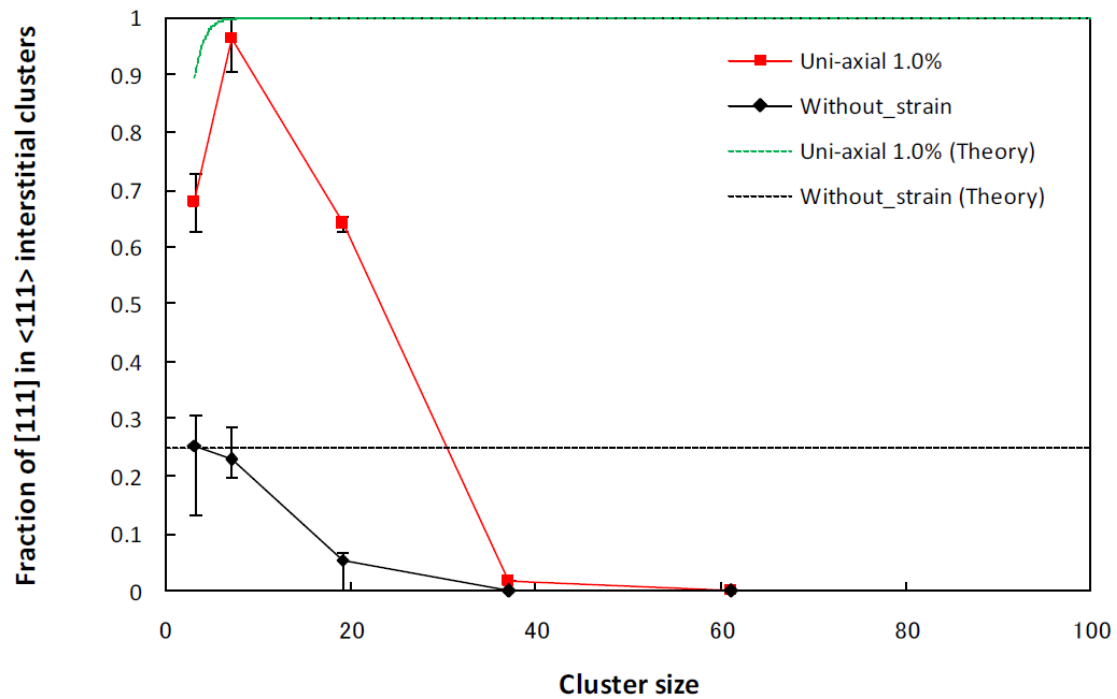


Figure 2.2.31 Fractions of $[111]$ clusters on $\langle 111 \rangle$ clusters as a function of cluster size at 1200 K

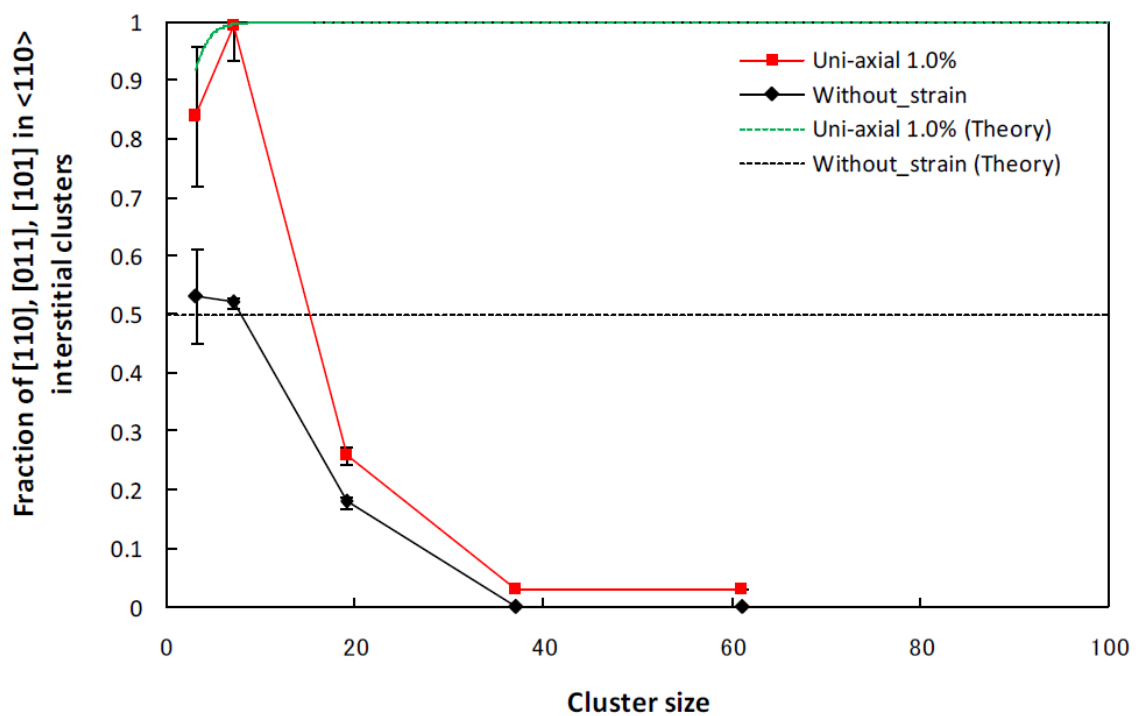


Figure 2.2.32 Fractions of $[110]$, $[011]$, $[101]$ clusters on $\langle 110 \rangle$ clusters as a function of cluster size at 1200 K

To clarify the effect of strain rate, further analysis was conducted using the two additional data presented in section ③(c) **Further analysis of change in direction.**

(b) Figure 2.2.10 (c) at a strain rate of 0.5×10^9 [s] with waiting time 100 ps is used for clusters of size 19 at 1200 K.

(c) Figure 2.2.11 (b) at a strain rate of 0.1×10^9 [s] is used for clusters of size 37 at 1200K

Direction change in those conditions is shown in Figure 2.2.33 and Figure 2.2.34. Figure 2.2.35 and Figure 2.2.36 respectively show the results of Figure 2.2.31 and Figure 2.2.32 with plots of those two additional data. Difference between MD results and the theoretical values did not change even with additional data at 1200 K.

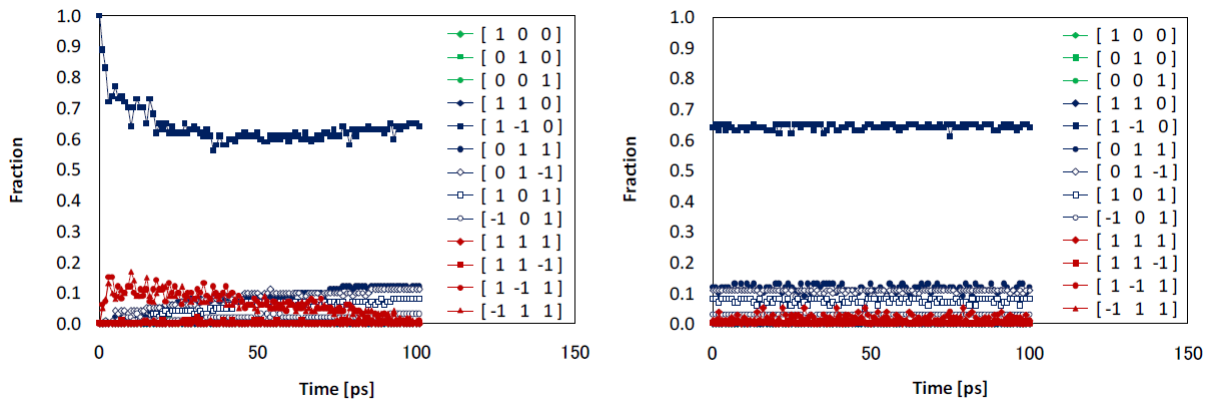


Figure 2.2.33 Directions of interstitial clusters as a function of time for size 19 at 1200 K at a strain rate of 0.5×10^9 [s] with waiting time 100 ps:

(Left column) without strain; (Right column) under uniaxial 1.0% tensile strain

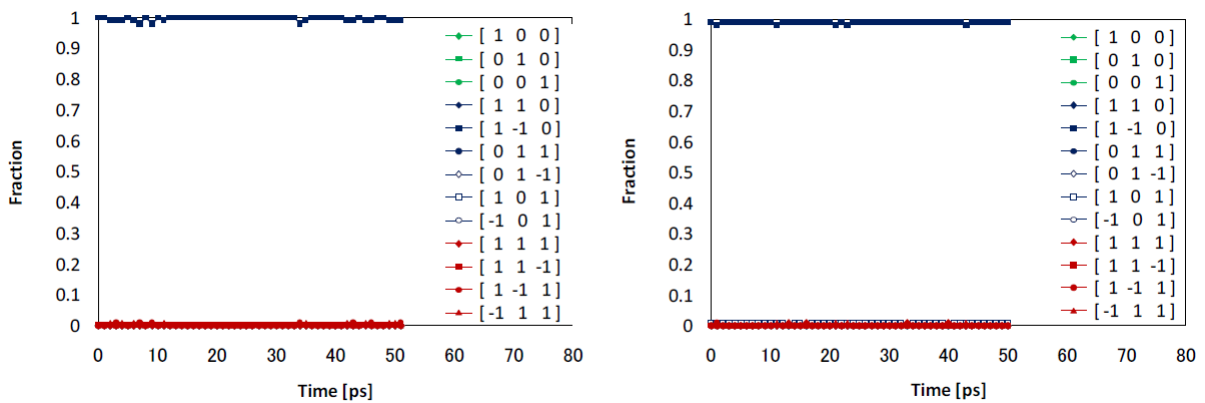


Figure 2.2.34 Directions of interstitial clusters as a function of time for size 37 at 1200K at a strain rate of 0.1×10^9 [s]:

(Left column) without strain; (Right column) under uniaxial 1.0% tensile strain

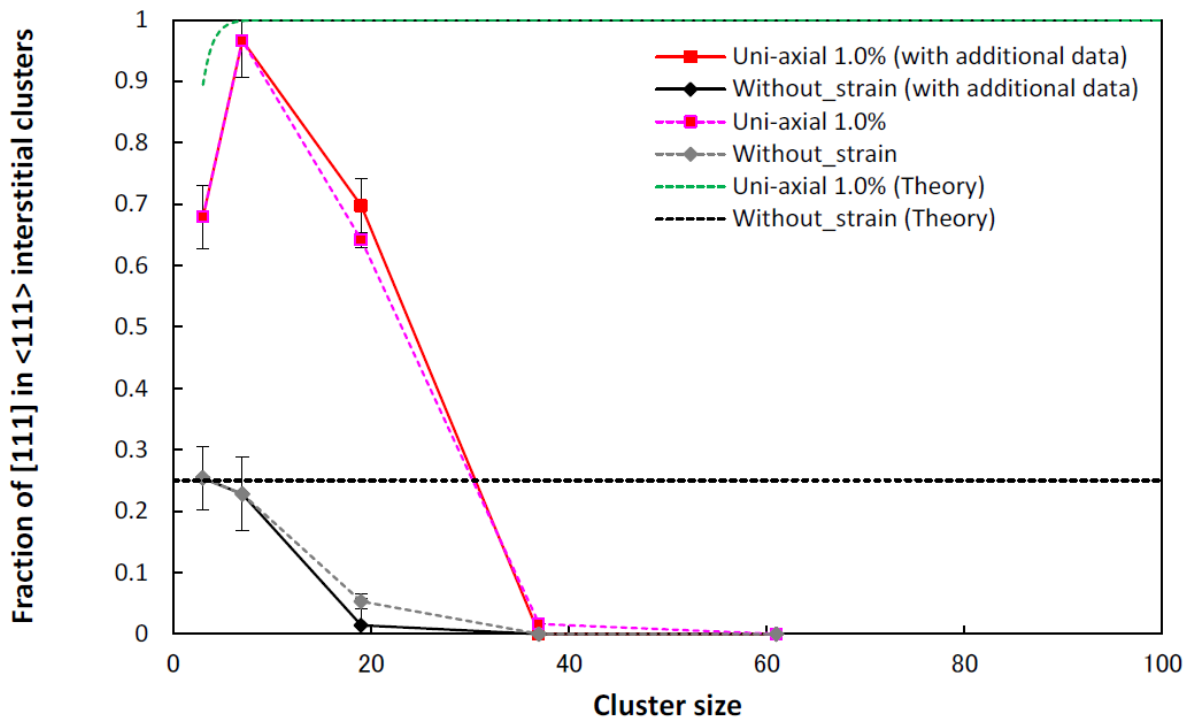


Figure 2.2.35 Fractions of $[1\ 1\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ clusters as a function of cluster size at 1200 K with the data obtained at different strain rate and/or waiting time

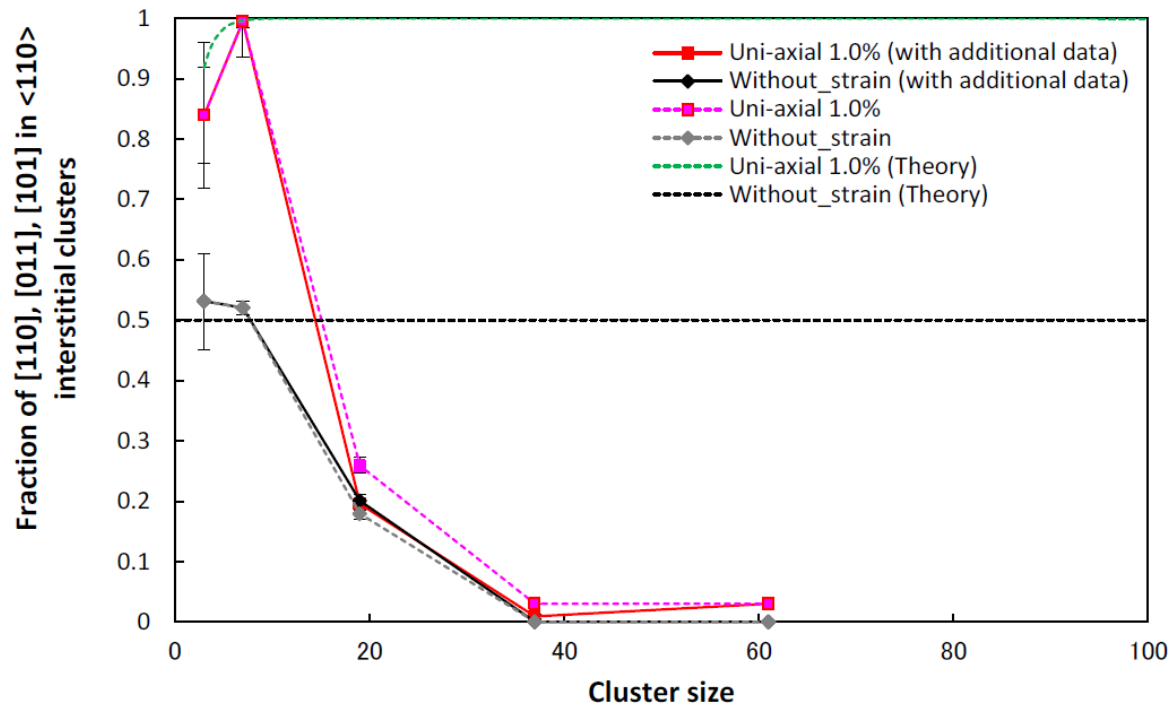


Figure 2.2.36 Fractions of $[1\ 1\ 0]$, $[0\ 1\ 1]$, $[1\ 0\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters as a function of cluster size at 1200 K with the data obtained at different strain rate and/or waiting time

2) Change in directions of interstitial clusters at 600 K

Direction change as a function of time at 600 K either with or without strain is shown in Figure 2.2.37. The left column shows results without strain, while the right column shows results under constant uniaxial 1.0% strain. The final 20 data points were averaged. Then the fractions mostly affected by applied stress are presented in Figure 2.2.38 and Figure 2.2.39. The theoretical values obtained using equation (2.2.1) are also shown as dotted lines.

Directions of interstitial clusters with size 3 corresponded well to the theoretical values either with or without strain. Directions of interstitial clusters with size 7 were also similar to the theoretical values for $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ clusters. This is the same tendency as that shown for the case at 1200K. However, the MD results did not correspond to the theoretical values for $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters, even for clusters with size 7. It can be expected that this result is attributable to limited rotation because the direction of $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ interstitial clusters with size 7 corresponded to the theoretical value at 1200 K. The MD results differ greatly from the theoretical values for 19 or larger.

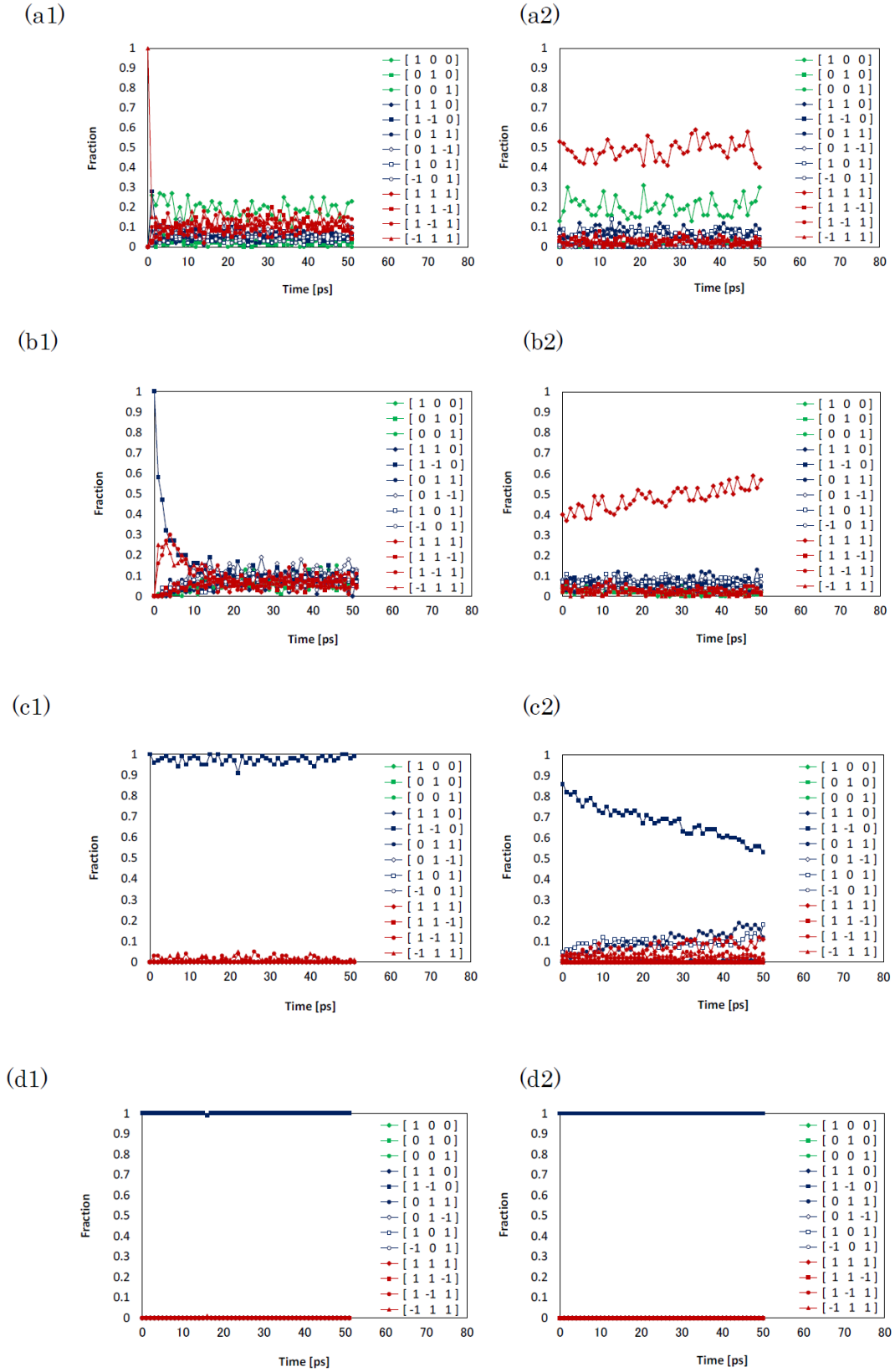


Figure 2.2.37 Directions of interstitial clusters as a function of time at 600 K:
 (Left column) without strain; (Right column) under uniaxial 1.0% tensile strain;
 (a) Size 3, (b) Size 7, (c) Size 19, and (d) Size 37

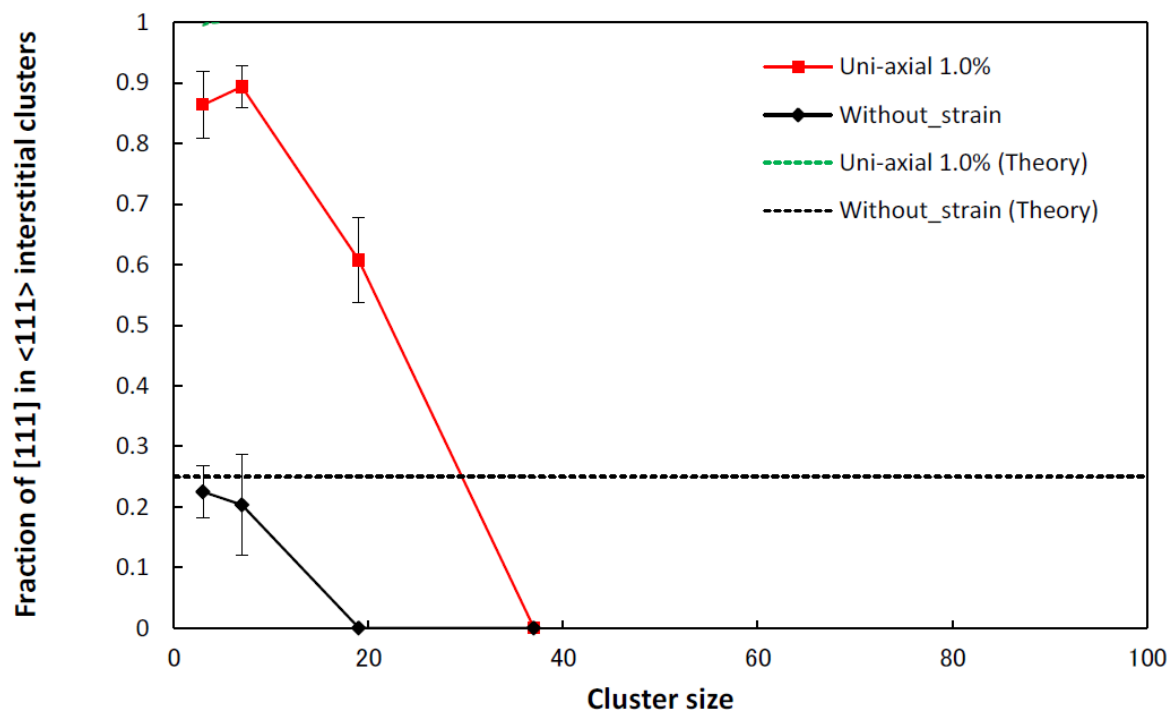


Figure 2.2.38 Fractions of $[1\ 1\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ clusters as a function of cluster size at 600 K

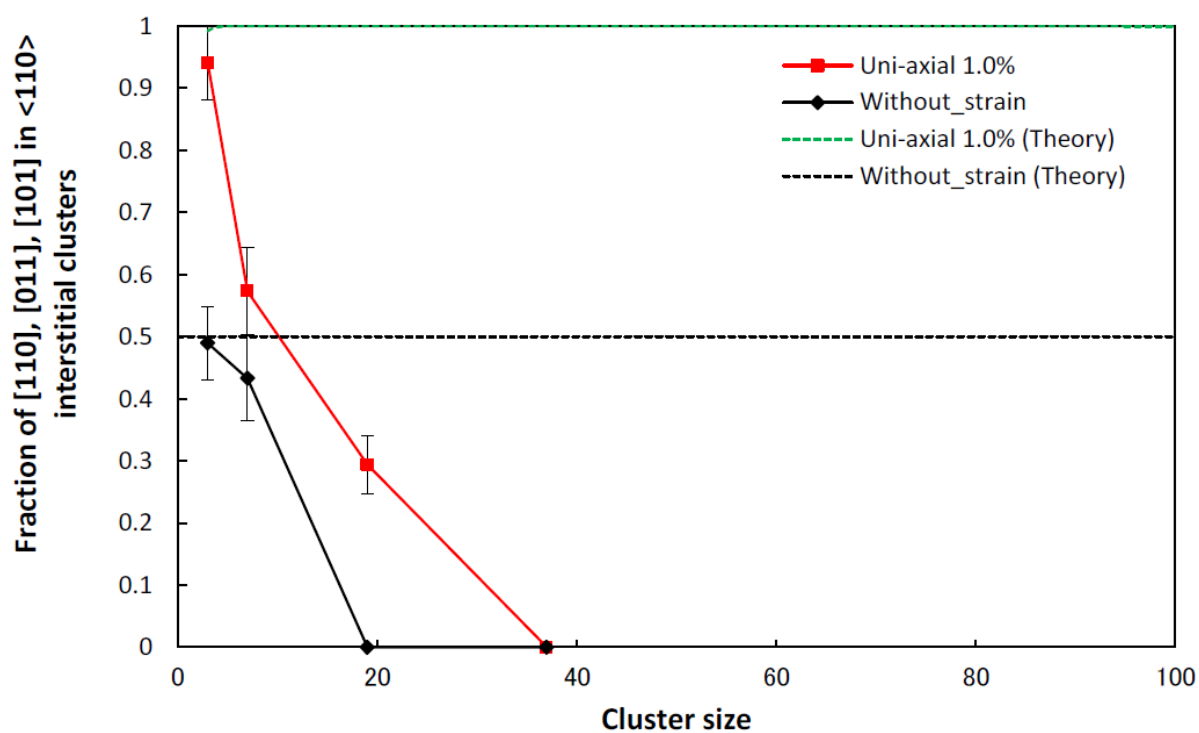


Figure 2.2.39 Fractions of $[1\ 1\ 0]$, $[0\ 1\ 1]$, $[1\ 0\ 1]$ clusters on $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters as a function of cluster size at 600 K

To clarify the effect of strain rate, further analysis was conducted using the two additional data presented in section 4.3.

(d) Figure 2.2.12 (c) at a strain rate 0.2×10^9 [s] is used for clusters with size 7 at 600 K

(e) Figure 2.2.13 (d) at a strain rate 0.1×10^9 [s] is used for clusters with size 19 at 600 K

Direction change of interstitial clusters in those conditions is portrayed in Figure 2.2.40 and Figure 2.2.41. Results shown in Figure 2.2.38 and Figure 2.2.39 with additional data are shown in Figure 2.2.42 and Figure 2.2.43. The difference between the MD results and theoretical values is smaller with additional data for $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ clusters. However, results for $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ did not change markedly even with additional data at a constant strain rate 0.1×10^9 [s].

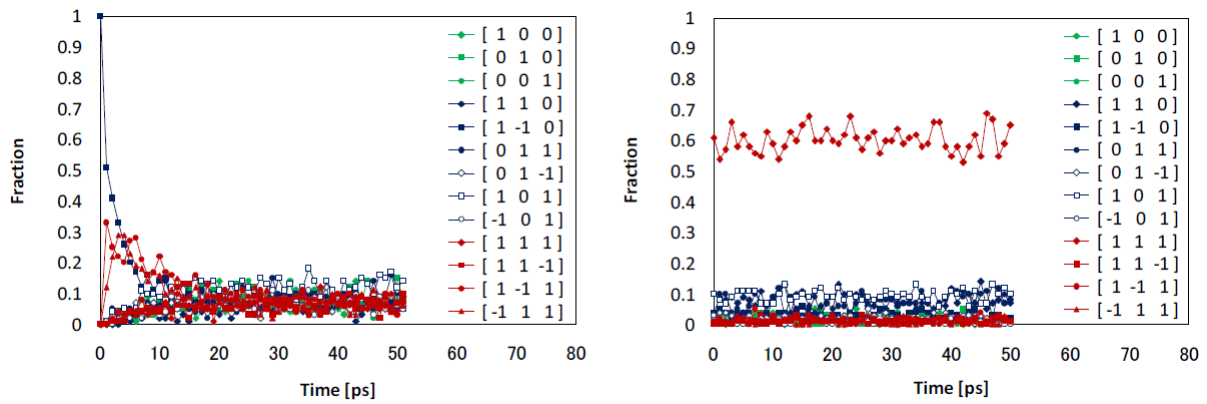


Figure 2.2.40 Directions of size 7 interstitial clusters as a function of time at 600K with additional data at a strain rate 0.2×10^9 [s]: (left column) without strain; (right column) under uniaxial 1.0% tensile strain

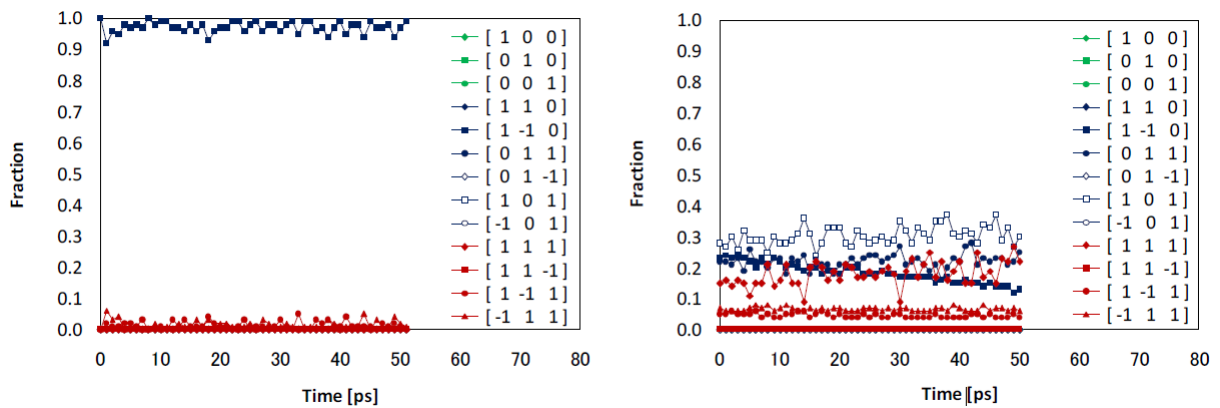


Figure 2.2.41 Directions of size 19 interstitial clusters as a function of time at 600K with additional data at a strain rate 0.1×10^9 [s]: (left column) without strain; (right column) under uniaxial 1.0% tensile strain

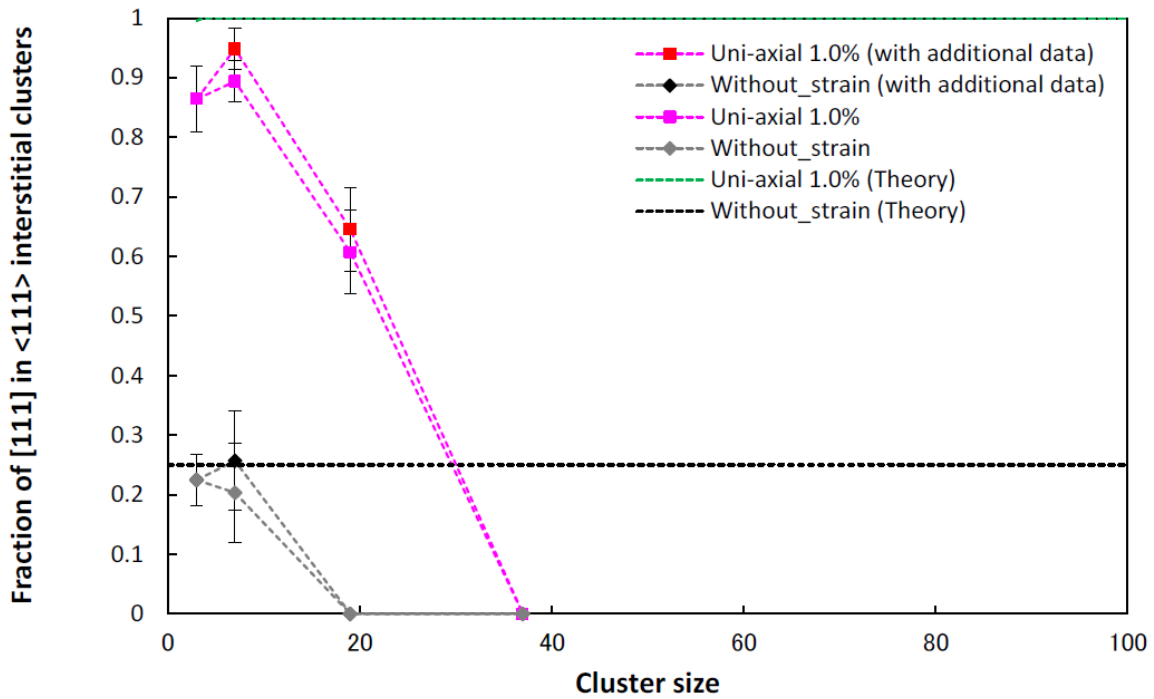


Figure 2.2.42 Fractions of $[111]$ clusters on $\langle 111 \rangle$ clusters as a function of cluster size at 600 K

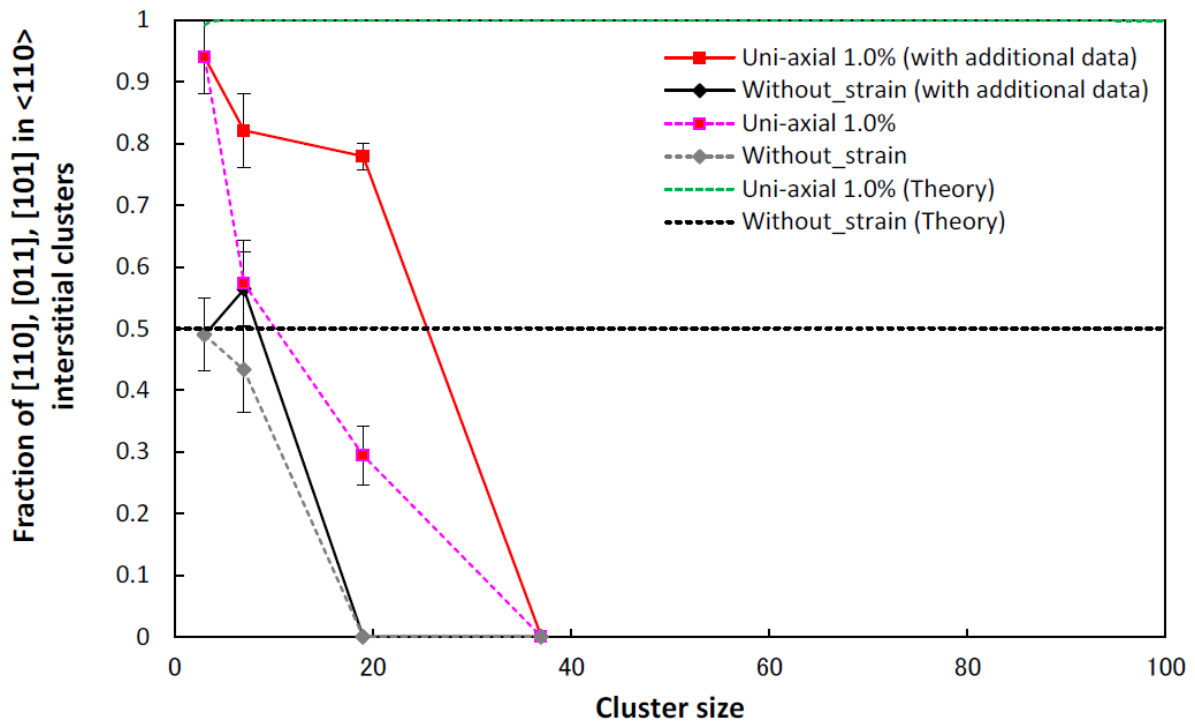


Figure 2.2.43 Fractions of $[110]$, $[011]$, $[101]$ clusters on $\langle 110 \rangle$ clusters as a function of cluster size at 600 K

④ Discussion of dominant parameters related to direction change

1) Dependence of direction change on various parameters

Direction change is enhanced considerably by the application of uniaxial strain. However, no marked change in direction was observed for size 37 or larger with high strain and high temperature conditions. These results indicate that the dependence of direction change on cluster size is considerably stronger than the dependence on stress or temperature. Therefore, it is expected that the direction change is limited for cluster size larger than a certain size. The orientation of interstitial clusters is maintained when they become larger than a certain size.

2) Role of SIPN and SIPO model to determine the orientation of interstitial clusters

There are two possible formation processes of interstitial clusters in irradiated materials, namely diffusion of mono-interstitials and direct formation during a cascade. Orientation of the clusters is determined through a change in direction, although the initial orientation depends on the formation process.

We clarified that large interstitial clusters cannot change direction easily even under high-stress and high temperature conditions. Therefore, when large clusters are formed directly during cascade process, the cluster orientation is maintained for a long time and grown with the initial direction, which indicates that the orientation of large clusters is determined mainly by the SIPN model.

However, results show that small clusters change their direction frequently. In this case, differences in their formation process and their initial direction do not affect the actual direction in materials. Interstitial clusters change their direction to stable direction depending on the stress at each size, and directions of interstitials are fixed from a certain size. This behavior is defined mainly by SIPO model.

Results obtained through this research contributed to the development of an integrated model of SIPN/SIPO mechanisms using the same method: MD method.

⑤ Summary

Change in directions of interstitial clusters were analyzed using the MD simulations, yielding the following results.

- 1) Change in orientation of interstitial clusters occurred by external stress and strain. The direction of interstitial clusters tends to be parallel to the stress direction.
- 2) MD results for orientation of $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ interstitial clusters well corresponded well to the theoretical values based on the thermal equilibrium model at 1200 K.
- 3) MD results for orientation of $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ interstitial clusters were slightly different from the theoretical values based on the thermal equilibrium model at 1200 K.
- 4) No marked change in directions of interstitial clusters was not observed for size 37 or larger clusters without strain at 1200 K.
- 5) No marked change in directions of interstitial clusters was observed for size 91 or larger

even under 1% uniaxial tensile strain at 1200 K.

6) Change in direction was limited even for size 3 at 600 K and lower temperatures.

2.2.2.2 ひずみ印加下のカスケード損傷過程について PKA エネルギーが与える影響

本項においては、MD 法を用いて、面心立方金属を対象としたひずみ印加下のカスケード損傷過程に対して PKA エネルギーが与える影響を評価する。

① 計算条件の概略

(a) 計算モデル

今回の計算においては、Mishin によって作成された EAM ポテンシャル[16]の近距離相互作用を修正したものを用いた。高 PKA エネルギーのカスケード損傷過程においては、はじき出し原子間の距離はより小さくなると考えられ、そのため近距離の相互作用をより厳密に評価する必要がある。今回、原子間距離が $0.5 \text{ \AA}$ 以下では遮蔽クーロンポテンシャルを参考にした値を用い、 $0.5 \sim 0.8 \text{ \AA}$ の領域においては五次関数を用いて線形近似を行った。

また、先行研究によると、ひずみ印加による欠陥増加率に対しては、PKA エネルギー依存性があり、またそれにはサブカスケードの影響があることが示唆されている[17]。今回の計算では、サブカスケード形成による欠陥生成効率の差についても包括的な知見を得るために、PKA エネルギーの値は 10keV、20keV、30keV の 3 条件を設定した。系の初期温度は、熱振動によるノイズが少ないと考えられる 100K に設定し、また計算には NVE アンサンブルを用いた。

MD 法における計算セル内の方位は x 軸方向を $[1\bar{1}0]$ 、y 軸方向を $[111]$ 、z 軸方向を $[\bar{1}\bar{1}2]$ とし、計算セルの全方位に対して周期境界条件を設定した。計算セルのサイズは、計算の最初に与えられる PKA エネルギーが系全体に伝播し、1 原子あたりに分配されるエネルギーを考えた時に同一になるように設定した。具体的には、PKA エネルギーが 10keV の条件下では各辺 19nm(総原子数は 56 万個)程度、20keV の条件下では 24nm(総原子数は 112 万個)程度、30keV の条件下では 27nm(総原子数は 168 万個)程度とした。また、結晶の初期配置を決定する段階で、y 軸方向に対して 0%、0.5%、1%の単軸ひずみを結晶全体に均一に印加した。周期境界条件により、結晶のひずみが維持されることから、本研究においては一定ひずみ下におけるカスケード損傷過程の再現が行われる。

各ひずみ印加条件についてそれぞれ 250 回の試行を行い、またそれぞれの試行において、PKA の速度を与える方向はランダムに決定し、結果を統計的に評価した。

(b) サブカスケード分枝の判定アルゴリズムの概略

先行研究では、カスケード領域のサブカスケードへの分枝が欠陥形成率に影響を及ぼすことが示唆された[17]。このため、ひずみ印加下のカスケード損傷過程に対する PKA エネルギーの影響を、特に欠陥生成効率に着目して考える時、サブカスケードに分枝の影響についても検討を行うことが必要となってくる。その解析を行うために、今回カスケード領域が複数のサブカスケードに分枝したかを判定するプログラムを開発した。

本プログラムでは、昨年度解析に用いた配向性判定プログラムによって導出された格子間原子

サイト、空孔サイトをサブカスケード分枝の解析に用いる。なお、この判定はカスケード領域が最大化した時点（今回はこれを欠陥サイト数が最も多くなった計算ステップと設定した）で行った。

本アルゴリズムでは、各欠陥サイトについて、一定の距離より近傍の位置にある欠陥サイトを列挙し、それらのサイト全てを同一のサブカスケード領域に所属しているとみなす。以上の演算を全ての欠陥サイトについて行うことで、最終的にカスケード領域がいくつに分枝したかが判定される。今回、同一のサブカスケードとみなすか否かの判定距離は、第3近接の原子までの距離（格子定数の1.23倍程度）とした。

また、先行研究において、PKAエネルギーが1keV程度の場合、その欠陥形成率はひずみの影響をほぼ受けないことが明らかとなっている[17]。カスケード損傷領域の大きさは、その領域に分配されたエネルギーの大きさに比例すると考えられ、本コードでは特にひずみ印加が各カスケード領域に与える影響を検討するため、あるカスケード領域に属する欠陥サイト数が全サイト数の一定比率(20分の1)を下回った際には、これをサブカスケード分枝とみなさないように設定した。

本手法の概略図を図2.2.44に、この手法を用いて可視化されたカスケード領域の概略図を図2.2.45に示す。

本手法では、図2.2.45(e)に示されているように、カスケード領域が完全に分割した時のみをサブカスケード分枝として取り扱っており、サブカスケードへの分枝という現象は、2つの独立したカスケード損傷過程の発生として捉える。これにより、カスケード領域同士の相互作用を無視して各過程を評価している。例えば図2.2.46のように、PKAの発生後、ある計算ステップにおいて損傷領域が2つに分かれ、その後カスケード領域の拡大とともに重ね合わせが起こったケースでは、それぞれのカスケード損傷領域同士が相互に影響しあって一つのカスケード損傷領域を形成したとみなし、今回の検討ではサブカスケード分枝とみなさない。

また、カスケード領域が同定された後、各カスケード領域に属する原子について、それぞれの持つエネルギーを合算し、カスケード領域に分配された総エネルギーを算出した。

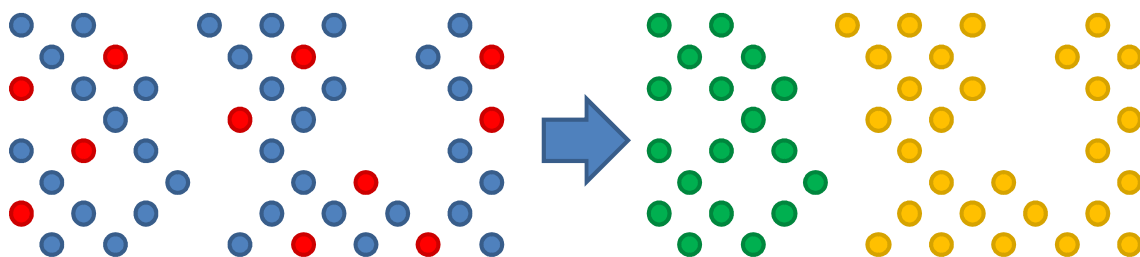


図 2.2.44 本手法によるサブカスケード判定の概略図

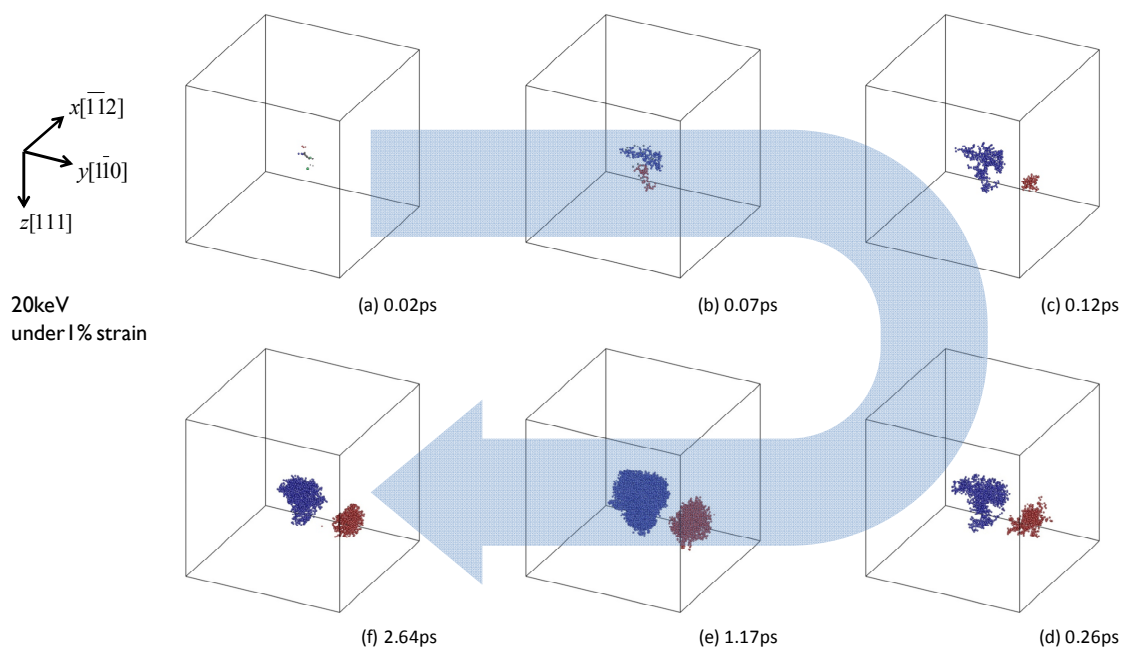


図 2.2.45 本手法を用いて可視化されたカスケード領域の概略図

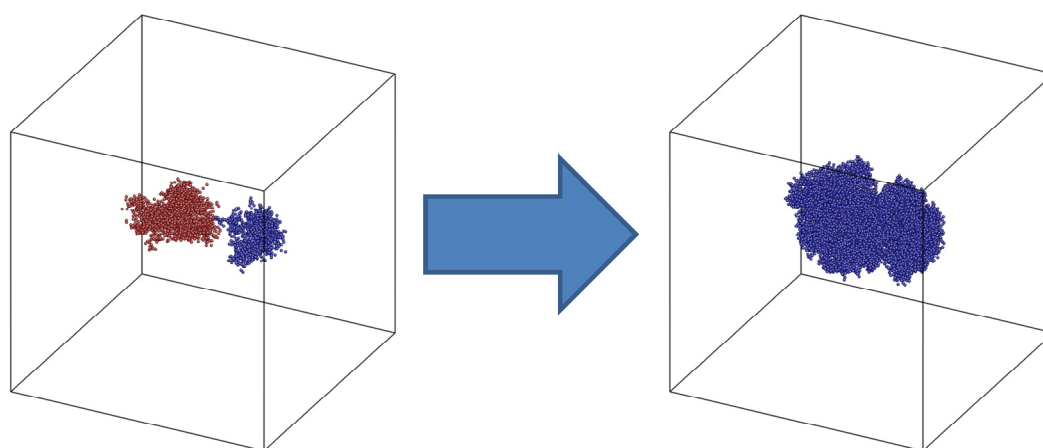


図 2.2.46 カスケード領域の重ね合わせが起こったケース

② 結果と考察

(a) カスケード損傷の形態

各 PKA エネルギー条件について、一つの大きなカスケード領域が形成されるケース、及びサブカスケードに分枝するケースそれぞれが観察された。1 例として、図 2.2.47 には一つの大きなカスケード損傷領域が形成されたケースの代表的なスナップショット、図 2.2.87 には複数のサブカスケード領域に分枝したケースの代表的なスナップショットを示す。

図 2.2.47 からは、(a) PKA の入射によりカスケード損傷が開始し、(b)(c) 衝突の連鎖によりカスケード損傷領域は徐々に拡大し、(d) やがて損傷領域は最大化し、(e) その後熱拡散により損傷領域は冷却され、(f) 最終的には格子間原子、空孔といった欠陥が結晶内に、集合体を形成しつつ残留する、といった一連のカスケード損傷の形態が確認された。

図 2.2.48 からは、(a) PKA の入射によりカスケード損傷が開始し、(b) 衝突の連鎖によってカスケード領域が拡大していく中で、一部の原子が別のサブカスケード領域へと分枝していき、(c) やがて各カスケード領域は最大化し、(d)(e) その後各領域は熱拡散によって冷却され、(f) 最終的には結晶中に欠陥が残留することとなる、一連のサブカスケード分枝を伴うカスケード損傷過程が確認できる。

一つの大きなカスケード領域が形成されたケースと、複数のサブカスケード領域に分枝したケースでは、後者のケースの方がカスケード領域の規模は小さくなり、またカスケード領域中に含まれる総エネルギーも少なくなる傾向が全体として観察された。この点については後ほど詳細な検討を行う。

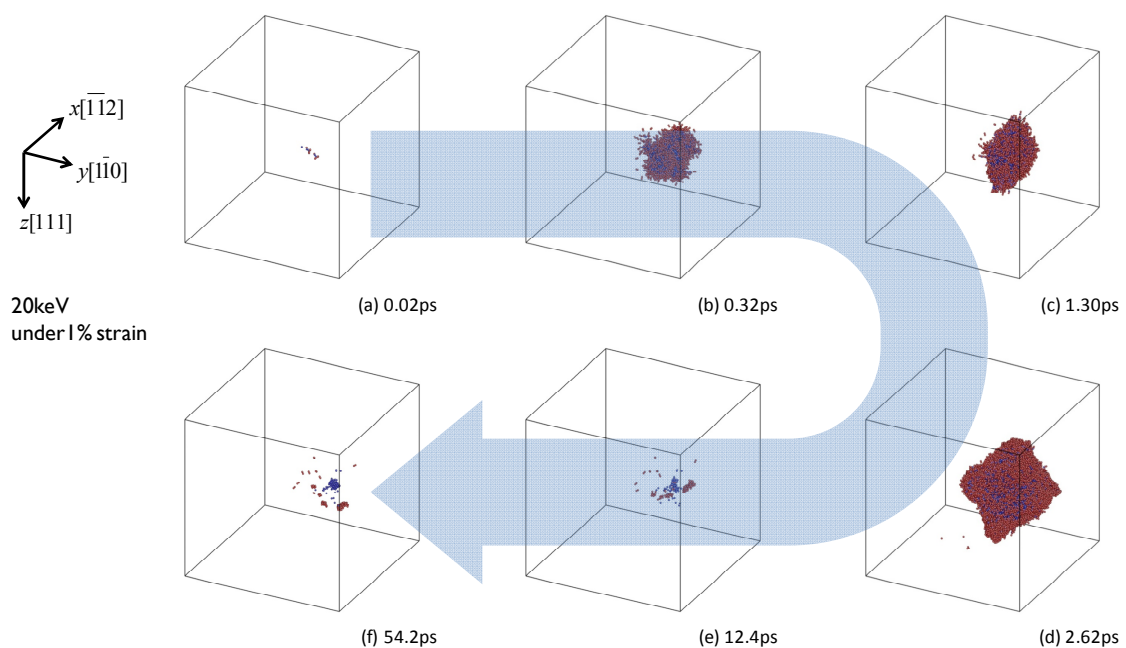


図 2.2.47 一つの大きなカスケード領域が形成されたケース

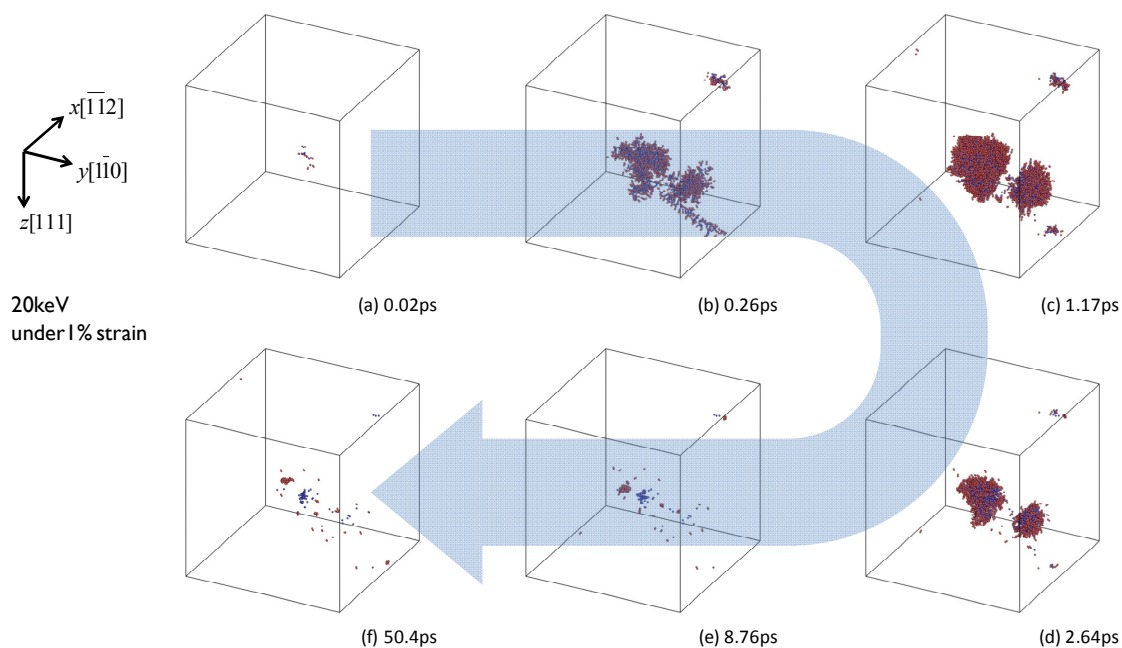


図 2.2.48 複数のサブカスケード領域に分枝したケース

(b) 点欠陥残存数への PKA エネルギーの影響

図 2.2.49 には、カスケード損傷一回あたりに形成される点欠陥残存数の PKA エネルギー依存性を各ひずみ条件について示しており、また赤線で先行研究[17]のデータを引用している。今回の結果は先行研究の結果と非常に良い一致を示している。PKA エネルギーが低い領域では原子間の近距離相互作用の頻度は少なくなると予想され、1keV、5keV の PKA エネルギー条件においては、ポテンシャル修正の影響はほぼないと考えられる。そのため、今回は計算を行っていないが、低 PKA エネルギーの影響評価に際しては、既往研究のデータを参照することが可能と考えられる。

PKA エネルギーが 10keV 以上の条件においては、ひずみ印加によって点欠陥残存数が増加することが明らかとなった。また、図 2.2.50 にはカスケード損傷一回あたりに形成される点欠陥残存数について、無ひずみ下での点欠陥残存数に対する 1.0%ひずみ印加下での点欠陥残存数の比の PKA エネルギー依存性を示しており、先行研究[17]において得られたデータを赤線で示している。PKA エネルギーが 10keV から 20keV へと変化した際には、点欠陥残存数の増加率は大きく増加する一方で、20keV から 30keV へと変化した際には増加率は一定の値へと飽和する傾向が観察された。

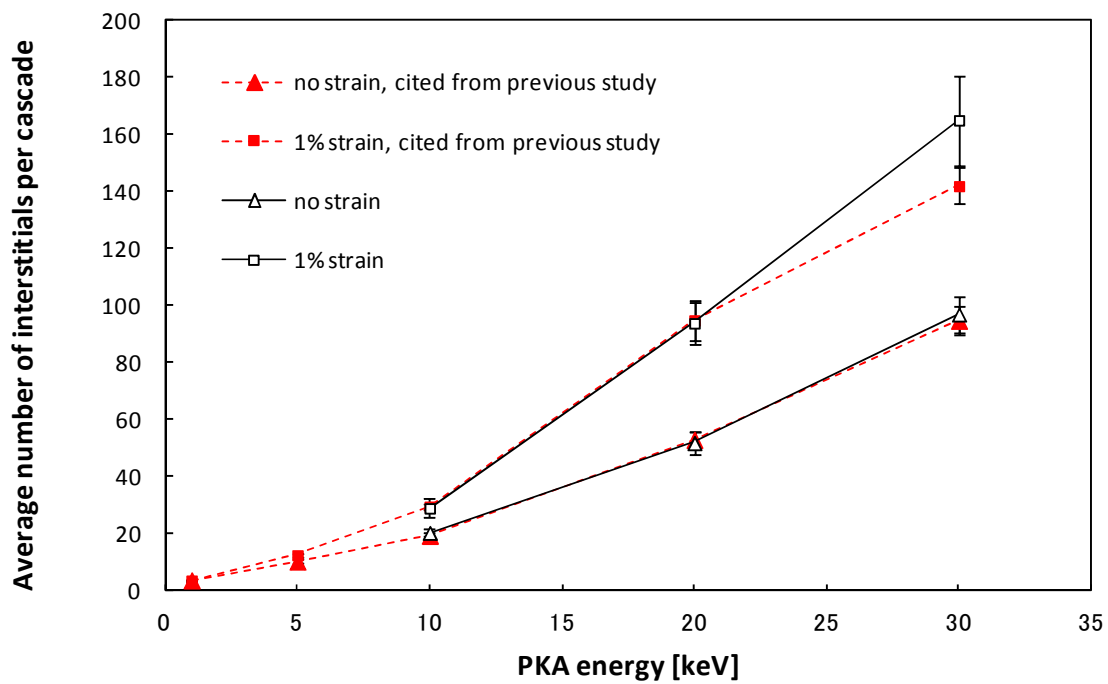


図 2.2.49 カスケード損傷一回あたりに形成される点欠陥残存数の PKA エネルギー依存性

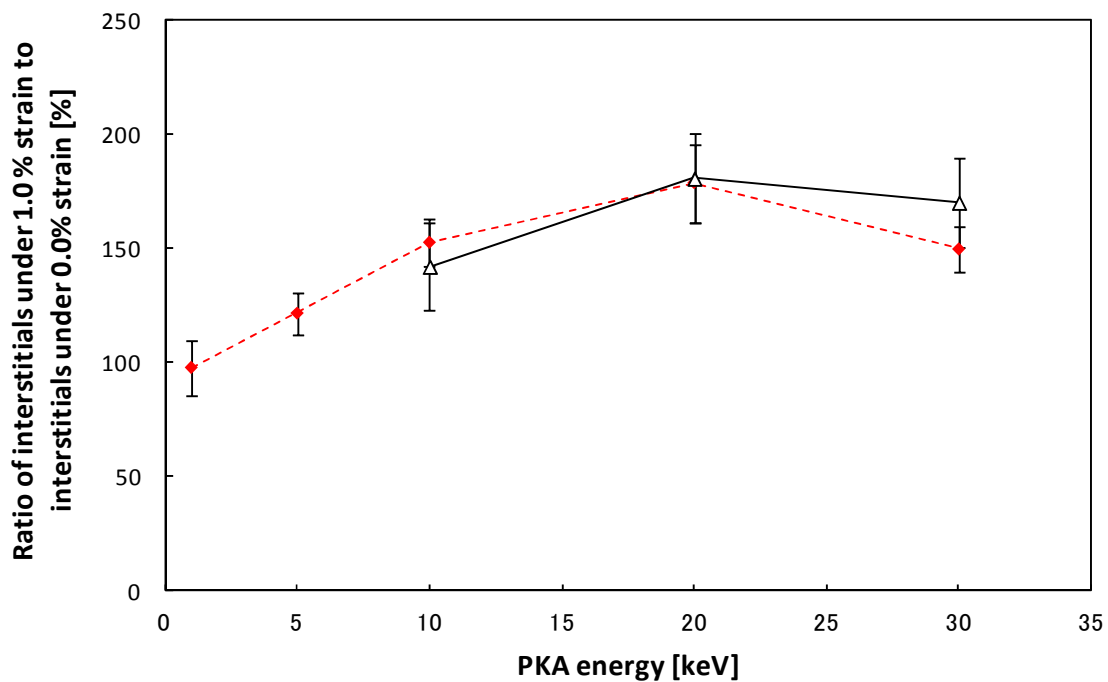


図 2.2.50 カスケード損傷一回あたりに形成される点欠陥残存数のひずみ印加による増加率、PKA エネルギー依存性

(c) 格子間原子集合体サイズへの PKA エネルギーの影響

図 2.2.51 には、各ひずみ、PKA エネルギー条件下において、カスケード損傷一回あたりに形成される格子間原子集合体のサイズ分布を示す。各 PKA エネルギー条件下において、ひずみ印加によって格子間原子集合体の形成密度が増加する傾向が観察された。また、ひずみ印加によってより大きな格子間原子集合体が形成することが確認され、またこの傾向は PKA エネルギーの値に依らないことが明らかとなった。

図 2.2.52 には、各サイズの格子間原子集合体について、無ひずみ下における格子間原子集合体形成個数に対する 1.0%ひずみ印加下における格子間原子集合体形成個数の比を示している。PKA エネルギーが 10keV の時には、20 個程度の原子を含む格子間原子集合体の形成が特に促進されており、また 20keV、30keV と PKA エネルギーが大きくなるにつれ、特に形成が促進される格子間原子集合体サイズも 50 程度、80 程度と増加している。ひずみ印加により、集合体の形成の促進がなされるが、その際に特に増加する集合体のサイズは PKA エネルギーの増加とともに大きくなることが明らかとなった。また、より大きな集合体の形成密度増加のみでなく、PKA エネルギーが 20keV のケースでは 10~40 個程度の原子を含む集合体、30keV では 10~70 個程度の原子を含む集合体など、より小さな集合体の形成密度も増加する傾向が観察された。この原因として、サブカスケード分枝による影響が考えられる。分枝によって発生したそれぞれのカスケード領域は、より小さな PKA エネルギーによるカスケード損傷過程に類似した現象となり、その結果形成される点欠陥集合体は小さなものとなり、結果としてサイズ分布に変化をもたらした可能性がある。この点に関しては、サブカスケード分枝による影響も踏まえた上で後ほど詳述する。

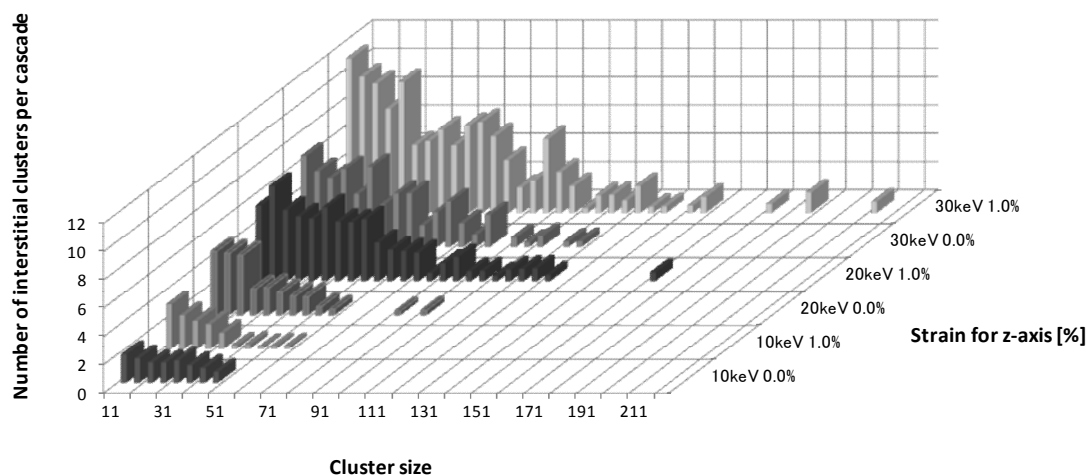


図 2.2.51 カスケード損傷一回あたりに形成される格子間原子集合体のサイズ分布

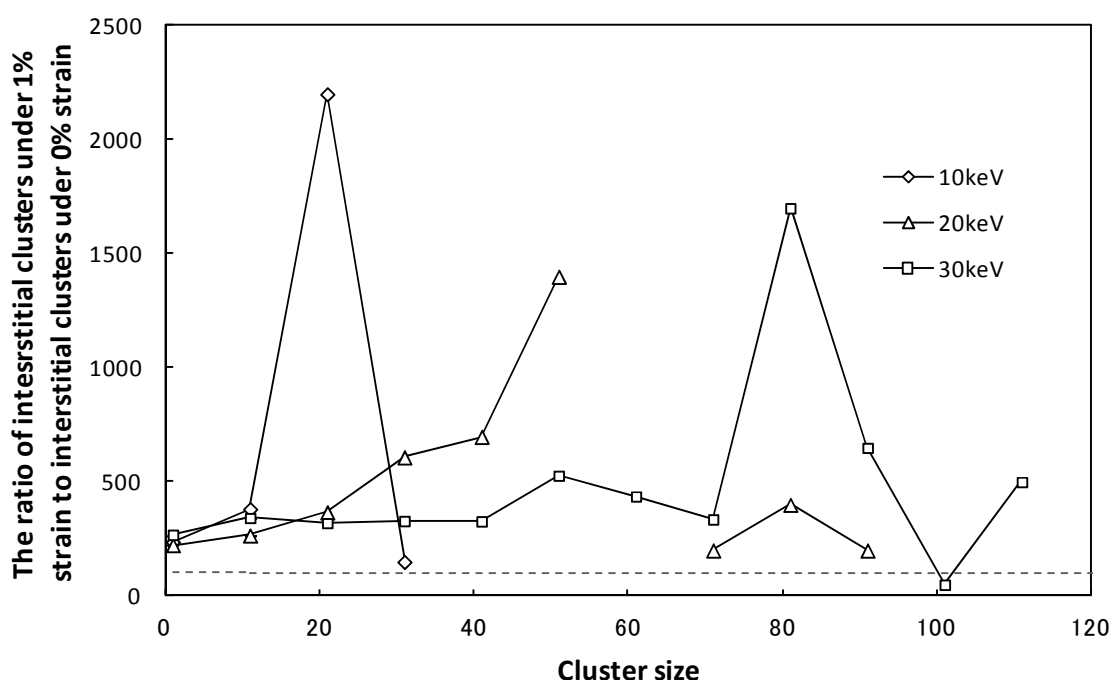


図 2.2.52 カスケード損傷一回あたりに形成される格子間原子集合体のひずみ印加による増加率

(d) サブカスケード分枝によるカスケード損傷過程への影響

本項以降は、サブカスケード分枝がカスケード損傷過程に対してどのような影響を与えたかの検討を中心に行う。各ケースにおいて、①(b)サブカスケード分枝の判定アルゴリズムの概略で述べたサブカスケード解析を実施したところ、形成されたカスケード損傷領域が1つのケースは平均210回程度、2つのケースは平均35回程度、3つ以上のケースは平均5回程度発生した。

図 2.2.53 には、カスケード領域が最大化した時点で形成された総欠陥サイト数を、各計算条件において形成されたカスケード領域数別に示している。また赤線は、全ケースにおける平均欠陥サイト数を示している。各計算条件とも、サブカスケード分枝によって欠陥サイト数が減少する傾向が観察された。カスケード領域内に含まれる欠陥サイト数の減少は、カスケード領域の体積が縮小したことに同義であり、カスケード領域が複数に分枝した際は溶融領域の全体としての空間的規模が縮小することが明らかとなった。

また、図 2.2.54 には、各計算条件において形成されたカスケード領域数別に、全カスケード領域中に含まれる原子の総エネルギーを示している。また赤線で、全ケースにおけるカスケード領域の総エネルギーの平均を示している。各計算条件とも、サブカスケード分枝によって総エネルギーが減少する傾向が等しく観察された。

いま、カスケード領域の体積表面積比を考えると、一つの大きなカスケード損傷領域が形成された場合に比べ、複数のより小さなカスケード損傷領域が形成された場合は表面積の比がより大きくなる。このため、サブカスケード分枝時には、カスケード領域の表面から系全体に散逸していくエネルギーの割合がより大きくなると考えられる。このようなエネルギー散逸により、系内の原子がはじき出しエネルギーに満たないエネルギーを受けとるなどして、結果的にカスケード領域内の総エネルギーが減少したと考えられる。

また全ケースにおける、全カスケード領域中に含まれる原子の総エネルギー平均は、各 PKA エネルギー条件とも、最初に与えられた PKA エネルギーのほぼ半分の値となることが明らかとなった。熱拡散によるエネルギーの散逸や、エネルギーを受けとったがはじき出されるには至らなかった原子の存在を考慮すると、実質的に原子のはじき出しに使われたエネルギーは、カスケード領域内に含まれる総エネルギーよりも低い値をとると考えられる。従来のキンチン・ピース機構においては、PKA エネルギーの半分がはじき出しに使われると仮定されていたが、今回の検討により、実質的に原子のはじき出しに使われるエネルギーは PKA エネルギーの半分よりも少なくなることが明らかとなった。

図 2.2.55 には、カスケード領域が 2 つのサブカスケードに分枝した際のカスケード領域発生件数を、各カスケード領域に含まれる総エネルギー別に示している。PKA エネルギーが大きくなるにつれ、サブカスケード領域の規模も大きくなる傾向が観察された。また、発生するサブカスケード領域に含まれるエネルギーは、最大でも PKA エネルギーの半分程度となることが明らかとなった。

図 2.2.56 には、カスケード領域が 2 つのサブカスケードに分枝した際、それぞれのカスケード損傷領域に含まれるエネルギーの分布を示す。白抜きの点には、より大きな損傷領域のエネルギーを、黒点にはより小さな損傷領域のエネルギーをプロットしており、また赤線で全カスケード領域のエネルギー最大値、平均値、最小値の変遷を示している。サブカスケード分枝時には、同等の大きさのカスケード領域が複数形成されるのではなく、より大きな損傷領域、より小さな損傷領域のそれぞれが形成する傾向があることが明らかとなった。また、特にカスケード領域のエネルギー平均値に着目すると、発生するカスケード領域の規模は、PKA エネルギーと比例関係を持つことが明らかとなった。

今回、高 PKA エネルギー付与時のカスケード損傷過程について、エネルギー的な解析を取り入れることにより、その形態に関して詳細な検討を行うことができた。サブカスケード分枝は従来経験的に把握されてきた現象であるが、今回、各条件において 250 回に及ぶ計算を行うことで、本現象について定量的な解析を行うことができた。これより得られた知見は、本研究の中でも特に重要なものであると言える。

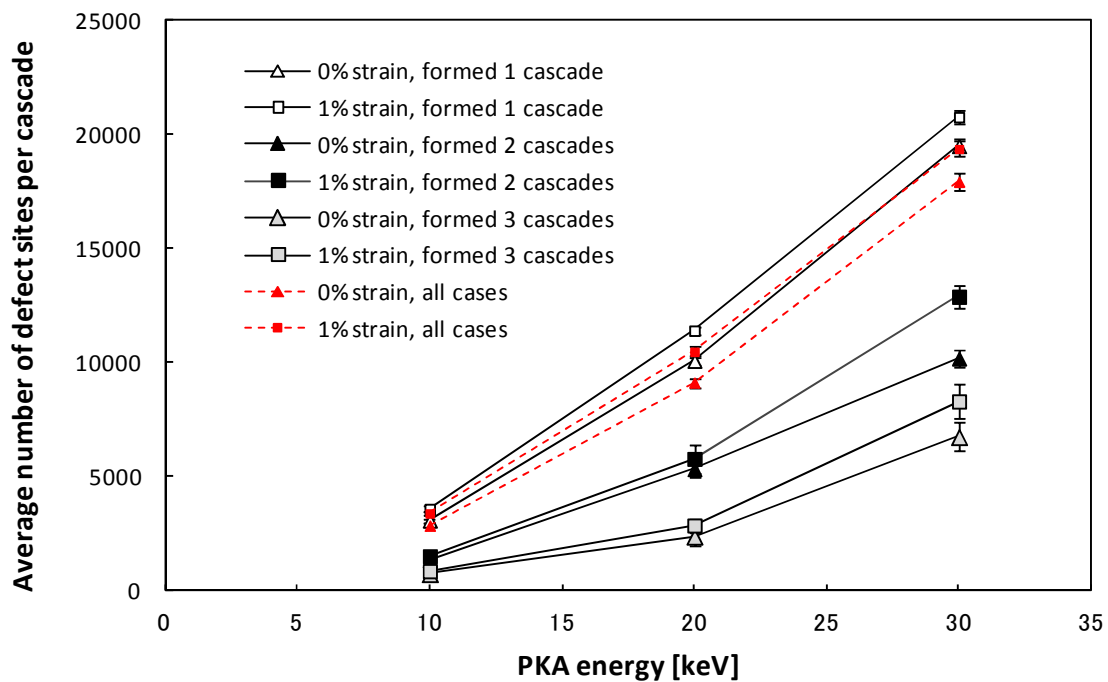


図 2.2.53 各計算条件において形成されたカスケード領域数別、総欠陥サイト数

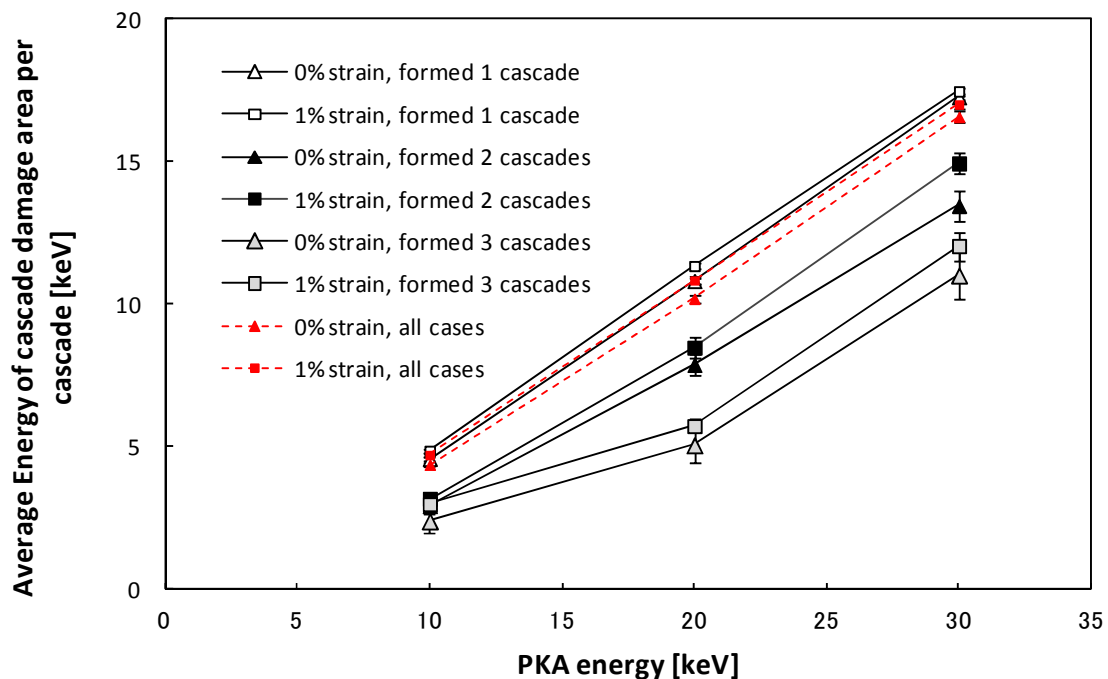


図 2.2.54 各計算条件において形成されたカスケード領域数別、全カスケード領域中に含まれる原子の総エネルギー

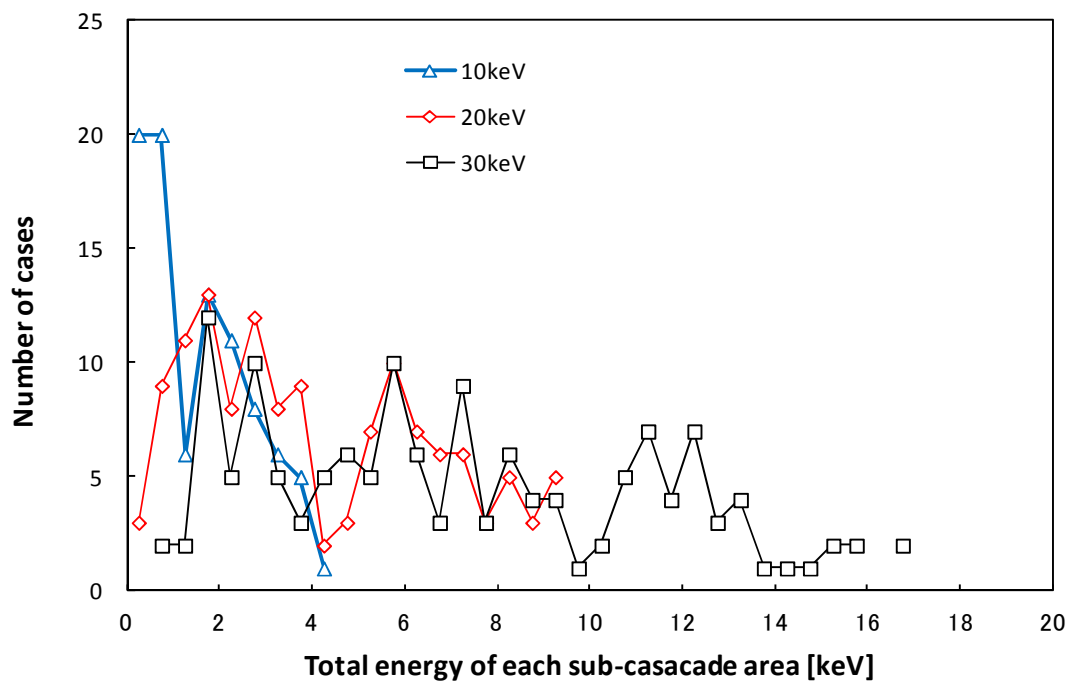


図 2.2.55 2つのサブカスケード領域に分枝した際の、各カスケード領域内の総エネルギー別、カスケード領域発生件数

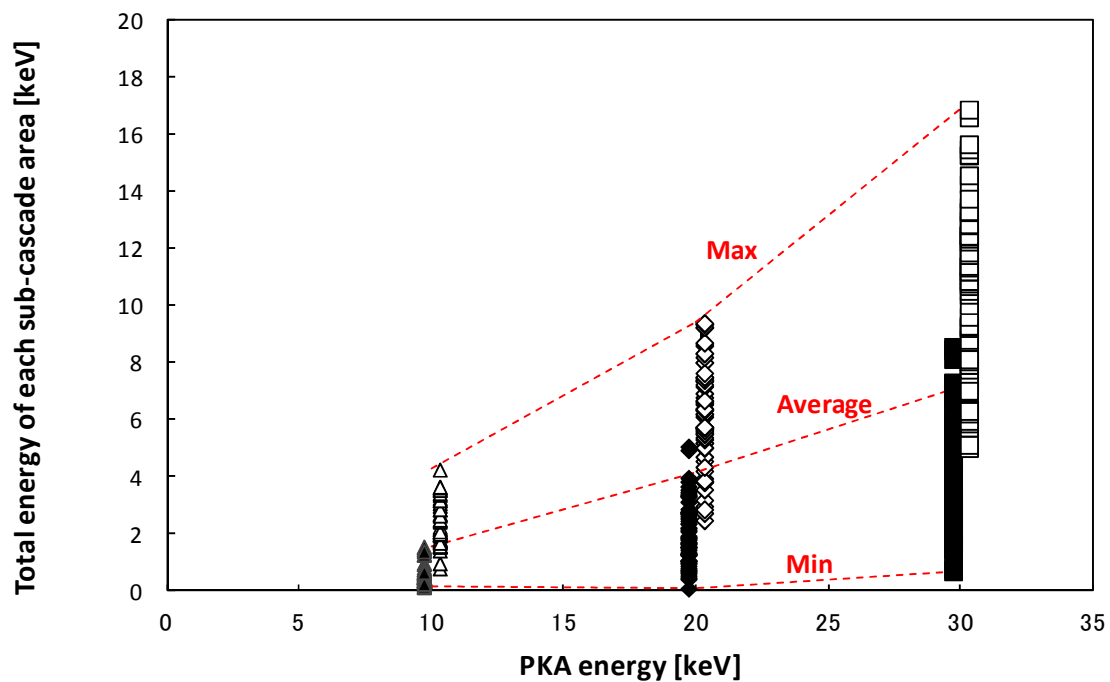


図 2.2.56 2つのサブカスケードに分枝した際の、各カスケード領域に含まれるエネルギーの分布

(e) サブカスケード分枝による点欠陥残存数への影響

本項以降では、一つの大きなカスケード領域が形成されたケースと、2つのサブカスケードに

分枝したケースについて検討を行う。3 つ以上に分枝したケースに関しては、サンプル数の少なさからここでは検討を行わない。

図 2.2.57 には、各ひずみ印加下における形成カスケード領域数別に平均点欠陥残存数の PKA エネルギーを示している。各計算条件・分枝数において、ひずみ印加によって残存点欠陥数が増加することが明らかとなった。一方で、サブカスケードに分枝したケースでは、一つの大きなカスケード領域を形成するケースに比べ、点欠陥残存数が減少する傾向が 20keV 以上の高 PKA エネルギー条件において観察された。

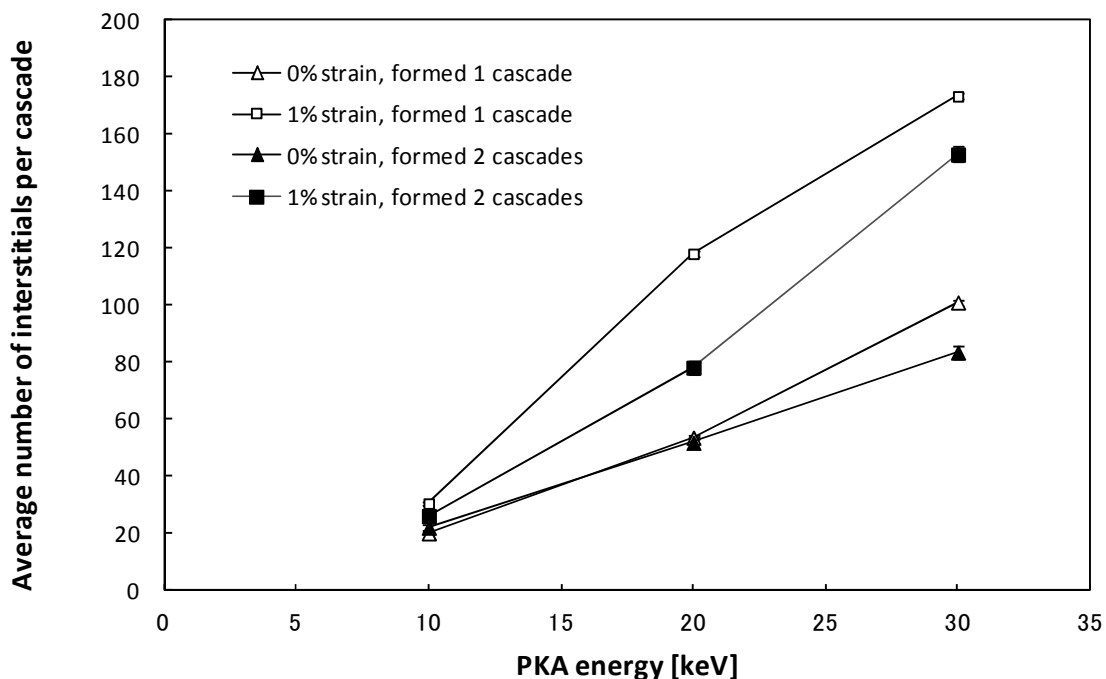


図 2.2.57 各ひずみ条件における形成カスケード領域数別、カスケード損傷一回あたりの点欠陥残存数の PKA エネルギー依存性

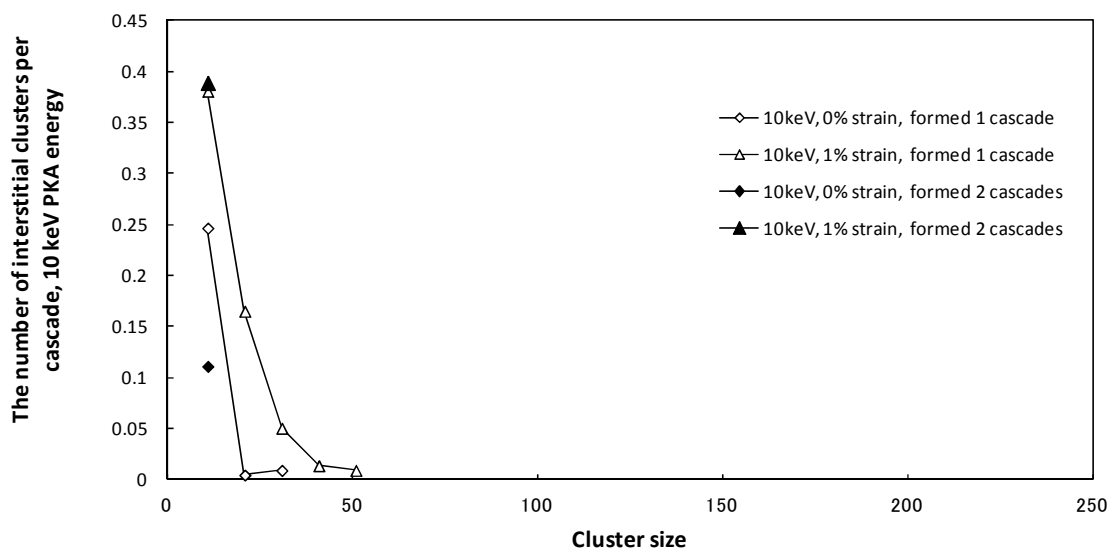
(f) サブカスケード分枝による格子間原子集合体サイズへの影響

図 2.2.58 には、各ひずみ条件におけるカスケード領域の形成数別の格子間原子集合体のサイズ分布を示す。ひずみ印加により、全ケースについて格子間原子集合体の形成が促進される傾向が確認され、PKA エネルギーが 10keV で、カスケード損傷過程が 2 つに分枝したケース以外では、ひずみ印加により集合体の最大サイズが増加する傾向が確認された。また、一つの大きなカスケード領域が形成されたケースに対して、2 つのカスケード領域に分枝したケースを比較すると、格子間原子集合体の形成が抑制され、また形成される集合体の最大サイズが減少する傾向が確認された。

図 2.2.59 には、形成されたカスケード領域数ごとに、1%のひずみを印加したことによる、無ひずみ下に対する格子間原子集合体形成数の増加率をサイズ別に示している。1%では集合体が形成されたが、無ひずみ下で形成が確認されなかった集合体サイズについては、その増加率は無限

大へと発散するため、この図においてそれらのデータは使用していない。一つの大きなカスケード領域が形成されたケースでは、より大きな格子間原子集合体の形成が促進され、またカスケード領域が複数に分枝した場合は、特にサイズの小さな格子間原子集合体の形成が促進される傾向が観察された。図 2.2.52 で観察された、PKA エネルギーが大きいケースでも小さな集合体が形成促進された原因は、サブカスケード分枝であることが明らかとなった。

(a)



(b)

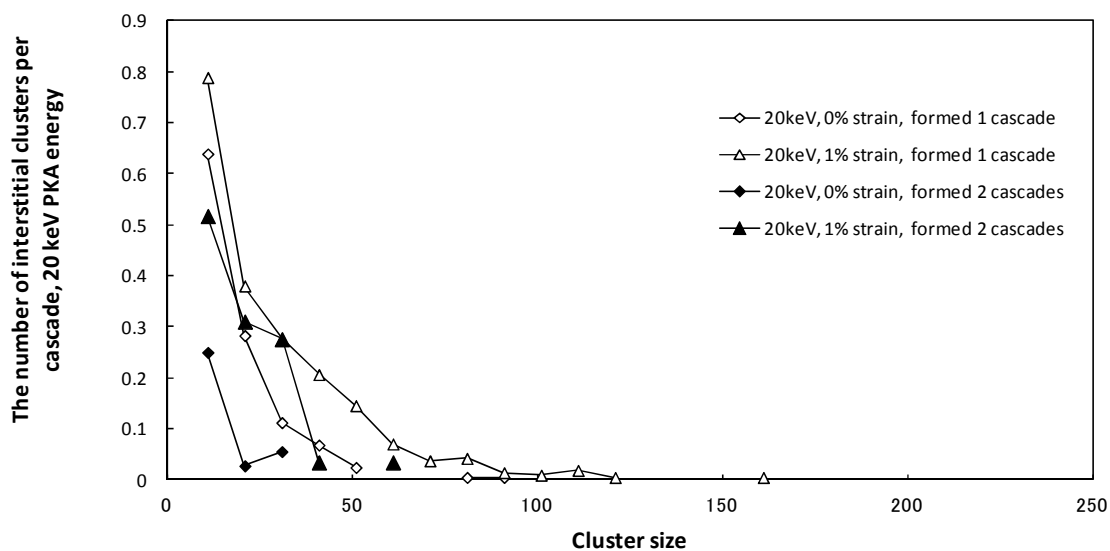


図 2.2.58 各ひずみ条件におけるカスケード領域数別、カスケード損傷一回あたりの格子間原子集合体サイズ別形成数(1/2)

(a) PKA エネルギー:10keV

(b) PKA エネルギー:20keV

(c)

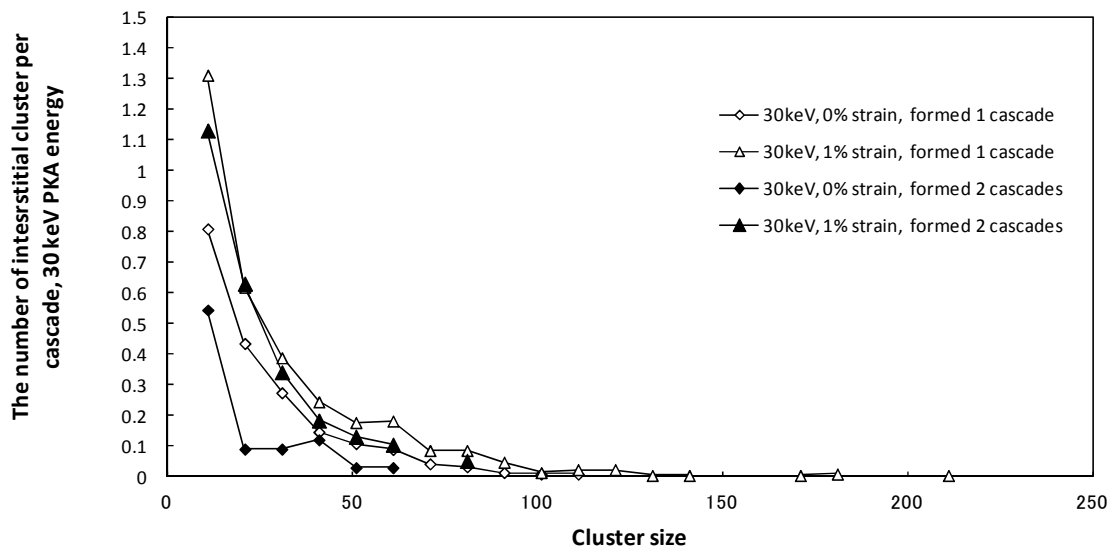


図 2.2.58 各ひずみ条件におけるカスケード領域数別、カスケード損傷一回あたりの格子間原子集合体サイズ別形成数(2/2)
(c) PKA エネルギー:20keV

(a)

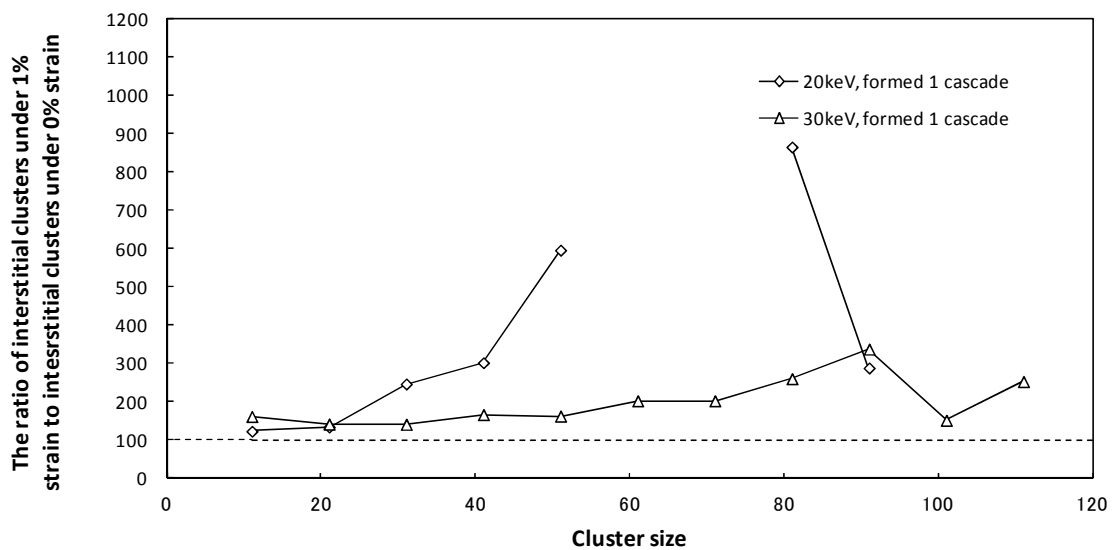


図 2.2.59 カスケード損傷一回あたりに形成される格子間原子集合体のひずみ印加による増加率、各サイズ別(1/2)

(a) 1つの大きなカスケード領域が形成されたケース

(b)

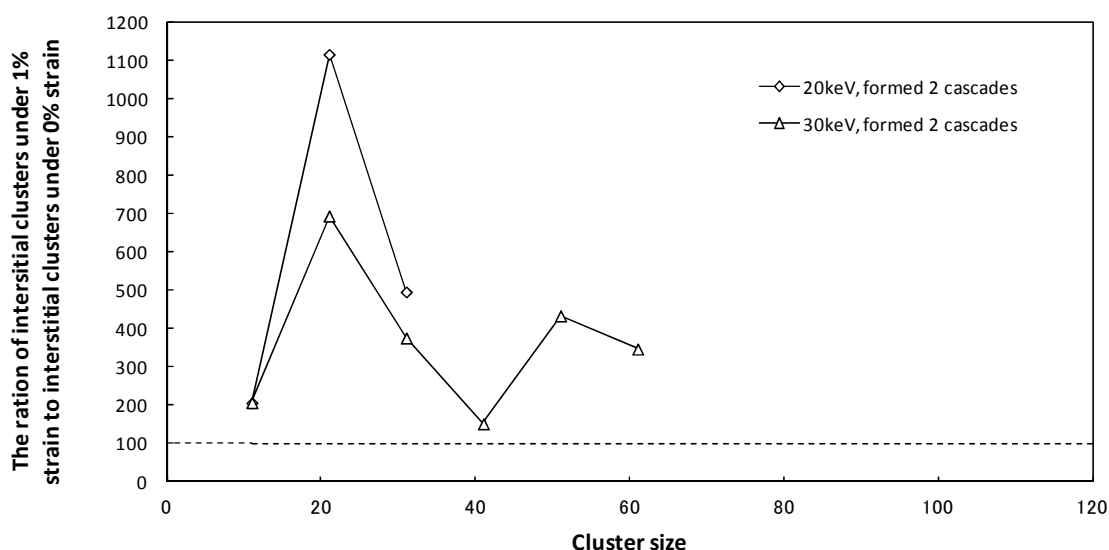


図 2.2.59 カスケード損傷一回あたりに形成される格子間原子集合体のひずみ印加による増加率、各サイズ別(2/2)

(b) 2つのカスケード領域に分枝したケース

(g) まとめ

MD法を用いて、10keV から 30keV 範囲の PKA エネルギーを変化させたはじき出し損傷計算を行い、また先行研究で得られたデータも比較検討に用いることで、ひずみ印加下のカスケード損傷過程での点欠陥残存率に対する PKA エネルギーの影響を定量的に評価した。また、独自の解析コードを用いることで、高エネルギー付与下のカスケード損傷過程の形態について、特にカスケード領域に含まれるエネルギーの観点からより詳細な検討を行うことができた。

結果として、PKA エネルギーの値に関わらず、ひずみ印加による欠陥形成率の増加が観察され、またこの増加は集合体の形成密度の増加、及び最大サイズの増加に起因することが明らかとなった。また、PKA エネルギーの値によって、ひずみ印加によって特に形成が促進される欠陥集合体のサイズが変化することが明らかとなり、また高エネルギーPKA 条件下ではより小さなサイズの集合体の形成も促進されることが明らかとなった。また高 PKA エネルギーでは、点欠陥残存数のひずみ印加による増加率が飽和することが明らかとなった。

エネルギー解析より、原子のはじき出しに使われるエネルギーは、PKA エネルギーの半分以下となることが明らかとなった。カスケード損傷領域が複数のサブカスケードに分枝した場合は、同等の大きさの領域が複数形成されるのではなく、より大きな領域とより小さな領域に分枝する傾向があることが明らかとなった。また、1つの大きなカスケードが形成された場合よりもカスケード領域の全体としての規模が縮小することが明らかとなった。また、サブカスケード形成により、点欠陥の残存率が減少すること、またそれは大きな格子間原子集合体の形成抑制に起因することが明らかとなった。一方で、より小さな格子間原子集合体の形成は促進される傾向が確認され、高 PKA エネルギーにおいて小さな集合体の形成が促進されている原因となることが明らかとなった。

従来、サブカスケード分枝は経験的に把握されてきた現象であるが、今回定量的な検討を行うことで、本現象に関して一定の知見を得ることができた。これは本研究において、特に重要なものである。

2.2.2.3 第一原理計算による BCC 鉄におけるらせん転位の移動特性と水素との相互作用の解明

① 研究の背景

水素脆化のメカニズムについてはいくつかの仮説が提唱されており、例を挙げると粒界脆化[18-20]、亀裂先端での転位生成の抑制[21]、ボイド生成[22]、また hydrogen enhanced localized plasticity (HELP)と呼ばれるメカニズム[23]がある。HELP メカニズムが提唱された背景として、純鉄に水素をチャージした場合に転位の速度が速くなる TEM 観察[24]および、引っ張り試験中に水素チャージすると応力が低下する実験[25]などがあげられる。各種の提唱されているメカニズムについては、どれもが定性的に水素脆化に寄与する可能性があるが、どれが主要なメカニズムとなるかは温度や水素濃度、引っ張り速度などに敏感に依存すると考えられ、それぞれの効果について様々な温度などの条件で定量的に評価することが必要となる。本研究では水素による転位運動の促進という HELP メカニズムの基礎となっている効果について、第一原理計算を用いて定量評価を行った。BCC 金属では転位の移動においてはらせん転位成分が動きにくく、ダブルキンの核生成という熱活性化過程が律速過程となる。ダブルキンの核はらせん転位の一部が 1nm 程度の幅で張り出した状態で、転位に吸着された水素が少ない場合でも、水素によりダブルキンの活性化エネルギーが下がるのであれば転位の移動速度に大きな影響を与える。したがって本研究では BCC 鉄のらせん転位と水素との相互作用を第一原理計算により計算し、らせん転位への水素の吸着エネルギーおよび水素によるダブルキン活性化エネルギーの低下を評価した[26]。

② 計算方法

第一原理計算は VASP[27]を用いて行った。転位は長距離に及ぶ格子ひずみを引き起こすため、十分に大きい計算体系が必要となるが、第一原理計算では原子数は数百程度が限界であり、計算資源の許す限り大きい体系を用い、かつ境界条件を最適化して有限サイズ効果を最小にする必要がある。鉄のみの場合の転位芯の原子構造はフレキシブル境界条件[28]を用いて 147 原子で構造緩和を行って求めた。これは芯から離れた場所の原子は線形弾性論の解の位置に固定し中心部のみを構造緩和する方法である。鉄のみの場合、転位線方向には並進対称性があるため原子一層のみでよい。一方、水素を導入し溶存エネルギーを計算する場合には転位線方向にもある程度の厚みが必要となる。しかし単純に転位の計算に用いた体系を何層か重ねる場合、原子数が計算限界を超えてしまうので工夫が必要である。本研究では水素を導入した場合にその近傍の鉄原子のみが緩和することに注目し、転位芯の構造から水素近傍の鉄原子のみを抜き出して三層重ね、外側の原子を固定して水素を導入し緩和するという方法を用いた(図 2.2.60)。

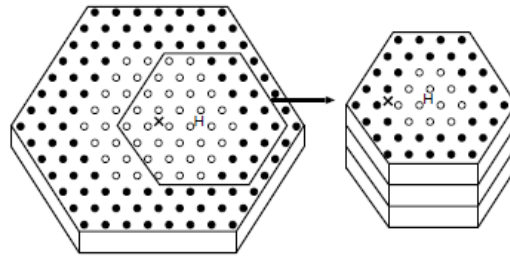


図 2.2.60 転位芯の構造緩和計算に用いる計算体系（左）と、転位＋水素の構造緩和計算に用いる計算体系（右）。白と黒の丸印は構造緩和を行う原子と緩和を行わず固定する原子を示している。
H と X はそれぞれ水素原子と転位芯の位置を表す。

③ 計算結果

らせん転位の芯の構造には安定な"easy core"と不安定な"hard core"構造があり、転位が移動する場合はこの二種類の構造を交互にとってエネルギー障壁を乗り越えつつ移動するので、この二種類の構造について様々な位置に水素を置いた場合の溶存エネルギーを計算し、バルク tetrahedral サイトの値を基準として吸着エネルギーを求めた。easy core の場合と hard core の場合を図 2.2.61 に示す。図中の色は鉄の電子密度を表している。吸着サイトは格子間空間が広く電子密度が低い場所にあり、密度が低いほど吸着エネルギーが大きいことが分かる。easy core の場合、転位芯から一原子離れた位置でもっとも強く吸着し、吸着エネルギーは 260meV 程度である。hard core の場合は芯の位置で格子間空間が easy core の場合より大きくなり、水素をより強く吸着しそのエネルギーは 390meV 程度である。これは easy core より 130meV 大きい。この結果は転位が移動する場合の移動障壁が水素によって 130meV ほど低下することを示唆している。

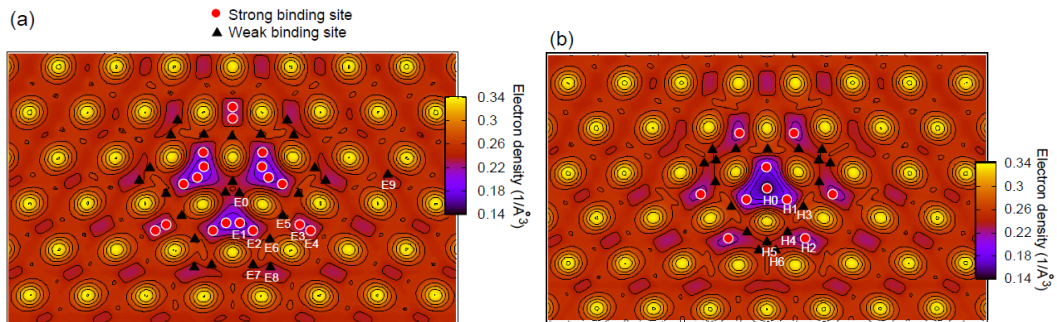


図 2.2.61 安定な転位芯構造（左）と不安定な構造（右）における水素吸着サイトの分布。赤い丸が強い吸着サイト、黒い三角が弱い吸着サイトを表す。色と等高線は鉄原子由来の電子密度を示している。

④ 考察

転位が移動する時の活性化エネルギーはダブルキンクの生成エネルギーで、その値は 650meV 程度であるため、水素によって活性化が促進されることになる。一方で低温において水素が高密度で転位に吸着している場合、逆に水素にピン止めされて転位の移動が阻害されるという効果もある。これらの効果の競合については熱力学的な枠組みでモデル化がなされている[29-32]。本研究で得られたエネルギーを用いてこれらの効果の定量評価を行った結果、温度・応力相図におい

て転位の運動が全体として促進され軟化が起こる範囲を水素濃度が 0.1appm の場合と 10appm の場合について得た (図 2.2.62)。いずれの場合にも低温において軟化と硬化のクロスオーバーがあり、これは実験の結果と定性的には一致する[25]。一方、高温では水素による促進がなくてもダブルキンクが活性化されるため水素による影響は少なく、また転位に吸着される水素の線密度も低いいためより影響が少なくなる。

これらの結果から、水素による軟化が起こるのは限定された温度領域であり、その温度は水素濃度により大きく変わる。HELP 機構の検証には様々な水素濃度と温度において実験により軟化の度合いを測定し、実際の使用条件においてどの程度の効果があるかを推定する必要がある。

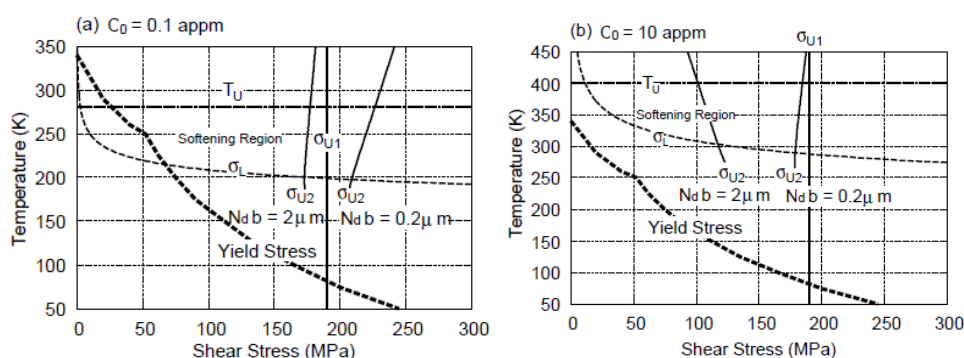


図 2.2.62 バルク中水素濃度が 0.1appm の場合 (左) と 10appm の場合 (右) の、温度-応力相図における水素による軟化が起こり得る領域。

テーマ B : 材料計算科学 研究業績リスト

- 1) Itakura M, Kaburaki H, Yamaguchi M, Okita T. “The Effect of Hydrogen Atom on the Screw Dislocation Mobility in BCC Iron : A First-Principle Study”, Acta Materialia 61, 6857 (2013).
- 2) K. Asari, O.S. Hetland, S. Fujita, M. Itakura, T. Okita, “The effect of stacking fault energy on interactions between an edge dislocation and a spherical void by molecular dynamics simulations”, Journal of Nuclear Materials 442, p.360 (2013).
- 3) S. Miyashiro, S. Fujita, M. Itakura, T. Okita, “Molecular dynamics simulations to evaluate the effect of applied strain on interstitial cluster formation and orientation under collision cascade damage”, Proceedings of 2012 20th International Conference on Nuclear Engineering, ICONE20 – POWER 2012 – 54840.
- 4) T. Horinouchi, S. Miyashiro, M. Itakura, T. Okita, “Molecular dynamics simulations to evaluate the effect of the difference in material properties on irradiation-induced defect formation under applied strain”, Proceedings of 2012 20th International Conference on Nuclear Engineering, ICONE20 – POWER 2012 – 54777.
- 5) K. Asari, S. Miyashiro, M. Itakura, T. Okita, “Fundamental study to evaluate mechanical property change associated to dislocation behavior in irradiated austenitic stainless steels by incorporating thermal fluctuation”, Proceedings of 2013 21th International Conference on Nuclear Engineering, ICONE21 – 16428.
- 6) T. Okita, M. Itakura, S. Fujita, S. Miyashiro, “A study to evaluate the interaction

between a line dislocation and glissile loops in BCC Fe”, 10th World Congress on Computational Mechanics, July 2012, Sao Paulo, Brazil.

7) M. Itakura, S. Miyashiro, T. Okita, M. Yamaguchi, “Development an EAM potential for Fe-Cr-Ni alloys”, 10th World Congress on Computational Mechanics, July 2012, Sao Paulo, Brazil.

8) 宮代聡, 藤田智, 板倉充洋, 沖田泰良, “動力学解析を用いたカスケード損傷過程による欠陥形成挙動に及ぼす応力影響の解明(2)”, 日本金属学会 2012 年秋の大会, 2012.9, 松山.

9) 堀之内利浩, 宮代聡, 板倉充洋, 沖田泰良, “分子動力学法を用いたひずみ印加下照射欠陥形成に及ぼす積層欠陥エネルギーの影響に関する研究“, 日本金属学会 2012 年秋の大会, 2012.9, 松山.

10) T. Horinouchi, S. Miyashiro, M. Itakura, T. Okita, “Molecular dynamics simulations to evaluate effects of SFE on defect production and formation under applied strain in FCC metals”, Poster session of Nuclear Materials 2012, 2012.10, Osaka, Japan.

11) 浅利圭亮, 堀之内利浩, 宮代聡, 板倉充洋, 沖田泰良: “分子動力学法を用いた FCC 金属中のボイドと刃状転位の相互作用に及ぼす SFE の影響”, 日本金属学会春期講演大会 2013, 2013.3.

12) 宮代聡, 沖田泰良, 板倉充洋: “動力学解析を用いた欠陥方位変化挙動に及ぼす応力影響の解明”, 日本金属学会春期講演大会 2013, 2013.3.

受賞

- (1) S. Miyashiro, S. Fujita, M. Itakura, T. Okita, Student Best Poster Competition for the 20th International Conference on Nuclear Engineering, 2012.8.

参考文献

Reference

- [1] H. Trinkaus, H.L. Heinisch, A.V. Barashev, S.I. Golubov, B.N. Singh, —1D to 3D diffusion-reaction kinetics of defects in crystals, Physical Review B, 66(2002) 060105.
- [2] B.N. Singh, S.I. Golubov, H. Trinkaus, A. Serra, Yu.N. Osetsky, A.V. Barashev, —Aspects of microstructure evolution under cascade damage conditions, Journal of Nuclear Materials, 251 (1997) pp.107-122.
- [3] A.A. Semenov, C.H. Woo, W. Frank, —Diffusion anisotropy and void development under cascade irradiation, Applied Physics A, 93 (2008) pp.365-377.
- [4] H.L. Heinisch, B.N. Singh, S.I. Golubov, —A kinetic Monte Carlo study of mixed 1D/3D defect migration, Journal of Computer-Aided Materials Design, 6 (1999) pp.277-282.
- [5] V.I. Dubinko, —Temporal and spatial evolution of dislocation and void structures under cascade damage production, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, 153 (1999) pp.116-121.
- [6] M. Wen, N.M. Ghoniem, B.N. Singh, —Dislocation decoration and raft formation in irradiated materials, Philosophical Magazine, 85 (2005) pp.2561-2580.

- [7] M. Wen, A. Takahashi, N.M. Ghoniem, —Kinetics of self-interstitial cluster aggregation near dislocations and their influence on hardening, *Journal of Nuclear Materials*, 392 (2009) pp.386-395.
- [8] I. Mukouda, Y. Shimomura, —Annihilation of interstitial atoms to dislocations in neutron-irradiated Cu and Ni at high temperature, *Materials Science and Engineering: A*, 309-310 (2001) pp.190-197.
- [9] Y. Satoh, H. Abe, S.W. Kim, —One-dimensional migration of interstitial clusters in SUS316L and its model alloys under electron irradiation, *Philosophical Magazine*, 92 (2012) pp.1129-1148.
- [10] H. Trinkaus, B.N. Singh, C.H. Woo, Defect accumulation under cascade damage conditions, *Journal of Nuclear Materials*, 212-215 (1994) pp.18-28.
- [11] Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon, A. Serra, B.N. Singh, S.I. Golubov, —Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals, *Journal of Nuclear Materials*, 276 (2000) pp.65-77.
- [12] B.D. Wirth, O.R. Odette, D. Maroudas, G.E. Lucas, Energetics of formation and migration of self-interstitials and self-interstitial clusters in α -iron, *Journal of Nuclear Materials*, 244 (1997) pp.185-194.
- [13] N. Soneda, T. Diaz de la Rubia, Migration kinetics of the self-interstitial atom and its clusters in bcc Fe, *Philosophical Magazine A*, 81 (2001) pp.331-343.
- [14] K. Morishita, T. Diaz de la Rubia, A. Kimura, Mobility of self-interstitial atom clusters in vanadium, tantalum and copper, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 180 (2001) pp.66-71.
- [15] N.V. Doan, Interstitial cluster motion in displacement cascades, *Journal of Nuclear Materials*, 283-287 (2000) pp.763-767.
- [16] Y. Mishin, M. J. Mehl, D. A. Papaconstantopoulos, A. F. Voter, J. D. Kress, *Phys. Rev. B*, 63 (2001) 224106.
- [17] S. Miyashiro, S. Fujita, T. Okita, H. Okuda, *Fusion. Eng. Des.* 87 (2012) pp.1352-1355.
- [18] J. R. Rice and J. S. Wang, *Mater.Sci.Eng. A*107, 23 (1989).
- [19] M. Yamaguchi, J. Kameda, K. Ebihara, M. Itakura and H. Kaburaki, *Philos.Mag.* 92, 1349 (2012).
- [20] J. J. Rimoli and M. Ortiz, *Philos. Mag.* 90, 2939 (2010).
- [21] Song J, Curtin WA. *Nat Mater* 2013;12:145.
- [22] Tiwari GP et al., *Mat Sci Eng A* 2000; 286: 269–281.
- [23] Birnbaum HK, Sofronis P. *Mater Sci Eng A* 1994;176:191.
- [24] Tabata T, Birnbaum HK. *Scripta Metal* 1983;17:947.
- [25] Matsui H, Kitamura H. *Mater Sci Eng A* 1979;40:207.
- [26] Itakura M, Kaburaki H, Yamaguchi M, Okita T. *Acta Mater Acta Materialia* 61, p.6857 (2013).
- [27] Kresse G, Hafner J. *Phys Rev B* 1993;47:558.
- [28] Woodward C, Rao SI. *Phys Rev Lett* 2002;88:216402.

- [29] Kirchheim R. Scripta Mater 2012;67:767.
- [30] Kirchheim R. Acta Mater 2007;55:5129.
- [31] Kirchheim R. Acta Mater 2007;55:5139.
- [32] Kirchheim R. Scripta Mater 2010;62:67.

3. 学術講演会等の活動

3.1 原子力計算科学セミナー

第5回；

【日時】2012年5月18日（金）15:00~17:30

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟 570 号室

講演者：

1. 北山健氏

東京大学大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻 特任研究員

「FEMアプリケーション開発支援ミドルウェアの開発」

2. Dr. Olav Aanes Fagerlund氏

東京大学大学院新領域創成科学研究科奥田研究室 Ph.D. candidate

「OpenCL acceleration of a Krylov solver library for finite element applications: Performance observations」

第6回；

【日時】2012年8月23日（木）14:00~17:00

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟 570 号室

講演者：

1. 南一生氏（招待講演）

理化学研究所 アプリケーション開発チーム チームリーダー

「「京」における実アプリの実効効率について」

2. 北山 健¹⁾、佐藤 陽平²⁾、奥田 洋司¹⁾

¹⁾ 東京大学大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻

²⁾ 東京大学生産技術研究所

「並列FEMプログラムの実効性能についての現状と課題」

第7回； 流体・構造連成シミュレーションにおける最先端の流体計算科学手法

【日時】2012年11月20日（火）14:00~17:30

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟 570 号室

講演者：

1. 加藤千幸氏（招待講演）

東京大学生産技術研究所 教授

「最先端の流体計算科学技術と格子法」

2. 越塚誠一氏（招待講演）

東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻 教授

「最先端の流体計算科学技術と粒子法」

3. 鶴沢憲、木野千晶

日本原子力研究開発機構システム計算科学センター 研究員

「3次元仮想振動台における流体解析機能の現状と課題」

第8回；

【日時】2012年12月3日（月）14:00~17:00

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟570号室

講演者：

1. Prof. Lasse Natvig

Norges Tekniske Hoegskole（ノルウェー工科大学）教授

「Energy Efficient Multicore Computing - Examples of HW/SW Interplay-」

第9回；

【日時】2013年2月20日（水）15:00~16:00

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟570号室

講演者：

1. Prof. Michael Mascagni

Florida State University 教授

「Scalable Parallel Random Number Generation」

3.2 計算力学に関する国際会議 2012 (WCCM2012)

ブラジル、サンパウロのホテル・トランスアメリカにて2012年7月8日から7月13日まで、計算力学に関する国際会議 2012（10th World Congress on Computational Mechanics, WCCM2012）が開催された。この会議は毎年世界中から五千人程度の計算力学関連の研究者が集まり最新成果を発表する会議である。この会議において東京大学人工物工学研究センターと原子力機構システム計算科学センターはシンポジウム「高度計算科学技術を用いたマルチスケールシミュレーション」を共催し、双方の研究成果を発表すると共に、国内外で同様のテーマで研究を行っている研究者にも参加・発表を依頼し、最新情報や動向および意見を交換した。シンポジウムにおいては、大規模な数値計算において重要となる、大規模並列行列計算ライブラリの開発と性能評価に関する発表が2件、構造・流体連成計算に関する発表が1件、および原子炉材料の脆化予測のための大規模分子動力学・転位動力学計算に関する発表が1件、第一原理計算によるオーステナイト合金の原子間ポテンシャルの開発に関して1件の発表があり、高度計算科学技術を用いたミクロからマクロスケールまでの様々なモデリング手法とそれらの結合手法に関して活発な情報交換が行われた。

以下に発表プログラムを記す。

MS – 059 - HPC POWERED MULTISCALE MATERIAL SIMULATION

オーガナイザー Hiroshi Okuda, Mitsuhiro Itakura, Francois Willaime, Osni Marques

A STUDY TO EVALUATE THE INTERACTION BETWEEN A LINE DISLOCATION AND GLISSILE LOOPS IN BCC FE

Taira Okita, Mitsuhiro Itakura, Satoshi Fujita, Satoshi Miyashiro

AN ALTERNATIVE MULTIREOLUTION CONTINUUM THEORY FOR ANALYSIS OF ANISOTROPIC POROUS MATERIALS

Moon-Ki Kim, Wing Kam Liu, Yoon-Suk, Chang Jae-Boong Choi, Dockjin Lee,

DEVELOPMENT OF AN EAM POTENTIAL FOR FE-CR-NI ALLOYS

M. Itakura, Satoshi Miyashiro, Taira Okita, Masatake Yamaguchi

EXAMINATION OF PARALLEL COMPUTING OF A LAGRANGIAN-EULERIAN COUPLING METHOD BASED ON LEVEL SETS

Gaku Hashimoto, Kenji Ono, Hiroshi Okuda

MOOSE, A MULTIPHYSICS OBJECT-ORIENTED SIMULATION ENVIRONMENT

Cody Permann, Derek Gaston, David Andrs, John Peterson

PARALLEL FINITE ELEMENT ANALYSIS FOR INCOMPRESSIBLE MATERIALS WITH HIERARCHICAL MESH

H. Okuda, Gaku Hashimoto

PERFORMANCE ANALYSIS OF PARALLEL SOFTWARE FOR SOLVING SYSTEMS OF LINEAR EQUATIONS

Beletti, Paulo de Mattos Pimenta, Osni Marques

This is a blank page.

国際単位系（SI）

表 1. SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質량	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表 2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体積	立法メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	毎メートル	m ⁻¹
密度, 質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m ²
比体積	立方メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度 ^(a) , 濃度	モル毎立方メートル	mol/m ³
質量濃度	キログラム毎立法メートル	kg/m ³
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
屈折率 ^(b)	(数字の) 1	1
比透磁率 ^(b)	(数字の) 1	1

(a) 量濃度 (amount concentration) は臨床化学の分野では物質濃度 (substance concentration) ともよばれる。
(b) これらは無次元量あるいは次元 1 をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の 1 は通常は表記しない。

表 3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン ^(b)	rad	1 ^(b)	m/m
立体角	ステラジアン ^(b)	sr ^(c)	1 ^(b)	m ² /m ²
周波数	ヘルツ ^(d)	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m kg s ⁻²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ kg s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m ² kg s ⁻²
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷, 電気量	クーロン	C		s A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ⁴ A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻²
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ³ A ²
磁束	ウェーバ	Wb	Vs	m ² kg s ⁻² A ⁻¹
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²	kg s ⁻² A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² kg s ⁻² A ⁻²
セルシウス度 ^(e)	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光束度	ルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd
照射度	ルクス	lx	lm/m ²	m ⁻² cd
放射性核種の放射能 ^(f)	ベクレル ^(d)	Bq		s ⁻¹
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ⁻²
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量	シーベルト ^(g)	Sv	J/kg	m ² s ⁻²
酸素活性化	カタール	kat		s ⁻¹ mol

(a) SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
(b) ラジアンとステラジアンは数字の 1 に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の 1 は明示されない。
(c) 測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
(d) ヘルツは周期現象についてののみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてののみ使用される。
(e) セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の大きさは同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
(f) 放射性核種の放射能 (activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
(g) 単位シーベルト (PV.2002,20,705) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表 4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘着力のモーメント	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²	m m ⁻¹ s ⁻² =s ⁻²
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m ² kg s ⁻² K ⁻¹
比エネルギー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m ² s ⁻² K ⁻¹
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² s ⁻²
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電荷密度	ジュール毎平方メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
表面電荷	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
誘電率	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m ⁻³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²
モルエネルギー	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル	J/mol	m ² kg s ⁻² mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹
吸収線量率	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A
放射線強度	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射輝度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ m ⁻² kg s ⁻³ =m ² kg s ⁻³
酵素活性濃度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² sr)	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³
	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ⁻³ s ⁻¹ mol

表 5. SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10 ²⁴	ヨ	Y	10 ⁻¹	デ	d
10 ²¹	ゼ	Z	10 ⁻²	セ	c
10 ¹⁸	エ	E	10 ⁻³	ミ	m
10 ¹⁵	ペ	P	10 ⁻⁶	マイ	μ
10 ¹²	テ	T	10 ⁻⁹	ナ	n
10 ⁹	ギ	G	10 ⁻¹²	ピ	p
10 ⁶	メ	M	10 ⁻¹⁵	フェ	f
10 ³	キ	k	10 ⁻¹⁸	ア	a
10 ²	ヘ	h	10 ⁻²¹	ゼ	z
10 ¹	デ	da	10 ⁻²⁴	ヨ	y

表 6. SIに属さないが、SIと併用される単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1h =60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	′	1′=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	″	1″=(1/60)′=(π/648000) rad
ヘクタール	ha	1ha=1hm ² =10 ⁴ m ²
リットル	L, l	1L=1l=1dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1t=10 ³ kg

表 7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位で表される数値
電子ボルト	eV	1eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダルトン	Da	1Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原子質量単位	u	1u=1 Da
天文単位	ua	1ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m

表 8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m
海里	M	1 M=1852m
バイン	b	1 b=100fm ² =(10 ⁻¹² cm) ² =10 ⁻²⁸ m ²
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的な関係は、 対数量の定義に依存。
ベール	B	
デジベール	dB	

表 9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
エル	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s
ストークス	St	1 St=1cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1cd cm ⁻² =10 ⁴ cd m ⁻²
フオット	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² 10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm ² =10 ⁻⁸ Wb
ガウス	G	1 G=1Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(c)	Oe	1 Oe ≡ (10 ³ /4π) A m ⁻¹

(c) 3 元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「 ≡ 」は対応関係を示すものである。

表10. SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位で表される数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R = 2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
フェルミ	f	1フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリ	cal	1cal=4.1858J (「15°C」カロリー) , 4.1868J (「IT」カロリー) 4.184J (「熱化学」カロリー)
マイクロン	μ	1 μ =1μm=10 ⁻⁶ m

