



Title	微分幾何学に基づく格子欠陥の非線形力学解析
Author(s)	小林, 舜典
Citation	大阪大学, 2021, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/82306
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

微分幾何学に基づく格子欠陥の非線形力学解析

令和3年3月

小林 舜典

微分幾何学に基づく格子欠陥の非線形力学解析

博士（工学）論文提出先
大阪大学大学院基礎工学研究科

令和3年3月

小林 舜典

概要

格子欠陥は結晶性固体中の原子配列の不整であり、材料に内部応力場を形成する。この内部応力場は材料の強度特性と深く結びついており、これを明らかにすることは固体力学分野における重要な研究課題である。連続体力学に基づく格子欠陥のモデル化手法の代表例である Volterra 転位モデルにおいては、内部応力場の解析時に線形弾性理論を用いており、無限小変形の仮定が破綻する転位芯の近傍や塑性変形の進行に伴う材料の大変形を正確に記述できないという問題が知られている。この問題は、有限変形理論に基づいて定式化される幾何学的弾塑性理論を用いれば解決することができる。そこでは、転位の空間分布と連続体の運動学を結びつける際に Cartan の第一構造方程式を解く必要があるが、従来の研究で用いられてきた手法の適用範囲は連続体の形状、および転位の分布が軸対象な問題に限られているという問題があった。そこで本論文では、この理論的枠組みを (i) 数値計算の導入によって任意の形状の連続体へ拡張すること、および (ii) 任意の空間分布をもつ転位へ適用可能な新手法を開発し、この検証を行うことを目的とした。

幾何学的な弾塑性理論において連続体の運動学は参照状態、中間状態、そして現状態の三状態によって記述される。このとき Cartan の第一構造方程式は転位の空間分布から中間状態を決定する方程式と捉えることができる。本論文ではこの方程式を、(i) 従来のホモトピー演算子による積分法、および (ii) 新たに開発した残差ノルムを最小化する変分問題の停留条件により数値計算する方法の二種類の方法を用いて解いた。これによって中間状態を決定し、これを反映する弱形式の応力の平衡方程式をアイソジオメトリック解析によって数値計算することで、転位による連続体の変形と内部応力場の解析を行った。

本解析手法の妥当性の検証を行うため、(i) ホモトピー演算子による積分法を利用して直線状のらせん転位、および刃状転位に対する数値解析を行った。いずれの転位においても、Volterra 転位モデルと定性的に一致する応力場が得られ、本論文で構築した手法の妥当性が確認された一方で、幾何学的非線形性の影響により、らせん転位の芯近傍には局在化した静水圧が現れること、刃状転位においては応力場がすべり面を境に非対称に分布することが明らかとなった。続いて、(ii) 本論文で新たに開発した手法を用いて、転位ループ列によるキンク帯のモデル化と解析を行った。この結果、キンク帯に特徴的な折れ曲がり変形の再現に成功するとともに、転位列（転位ループ）の先端には応力が集中し、それが広範に分布することが明らかとなった。この応力場の分布は回位の応力場と定性的に一致することから、塑性変形時にキンク帯を形成する材料においては、キンク帯先端における回位が後続転位の運動障壁となり、これが材料強化に寄与していることが示唆された。

目次

1	序論	1
1.1	研究背景	1
1.2	研究の目的	6
1.3	論文構成	6
2	微分幾何学に基づく連続体の運動学	8
2.1	Riemann 計量とアフィン接続	8
2.2	Riemann 多様体による弾性体の運動学の定式化	17
2.3	格子欠陥を含む弾塑性体の運動学	23
3	転位による塑性変形の定式化	28
3.1	Riemann-Cartan 多様体を用いた転位の表現	28
3.2	結晶格子中の転位と Burgers ベクトル	28
3.3	ホモトピー演算子を用いた Cartan の第一構造方程式の解法	33
3.4	変分法を用いた Cartan の第一構造方程式の解法	36
4	アイソジオメトリック解析の基礎	44
4.1	アイソジオメトリック解析の概要	44
4.2	NURBS による物体の形状表現	44
4.3	アイソジオメトリック解析	51
4.4	領域分割と overlapped additive Schwarz 法	57
5	アイソジオメトリック解析の格子欠陥解析への応用	63
5.1	Cartan の第一構造方程式に対する数値解析	63
5.2	Riemann-Cartan 多様体上の弾性理論	67
5.3	応力の平衡方程式に対する数値解析	70
6	格子欠陥のモデル化と力学場の非線形力学解析	73
6.1	転位密度テンソル	73
6.2	塑性変形勾配の解析方法の比較	74
6.3	直線状らせん転位のモデル化と数値解析	77

6.4	直線状の刃状転位のモデル化と数値解析	83
6.5	キンク帯のモデル化と力学場の数値解析	88
7	結論	94
付録 A	多様体論の基礎	97
A.2	C^∞ 級多様体	97
A.3	多様体上の接空間と余接空間およびベクトル場と 1 形式	97
A.4	多様体上の k 形式	99
A.5	ベクトル束	99
参考文献		109
謝辞		118
発表論文リスト		119

1 序論

1.1 研究背景

1.1.1 結晶性固体中の格子欠陥

固体材料は、構造用材料としての役割に加え、その熱、電磁気的特性を応用した機能性材料としての役割も果たす我々の生活に不可欠な材料である。固体力学はこうした固体材料の力学特性に焦点を当てた学術領域であり、固体に加えた力とこれによって生じる変形の関係を様々な角度から検証し、その特性を明らかにすることを主な目的としている。固体材料の代表例に結晶性固体がある。結晶構造とは、ユニットセルの対称操作および原子の基本構造の組み合わせによって記述される原子配列の規則性のことであり、この結晶構造を有する固体材料のことを結晶性固体という [1]。金属や半導体、酸化物結晶、イオン結晶等はこうした結晶性固体の代表例である。

通常、実在する結晶性固体の多くは単一の結晶構造を有する単結晶が組み合わされてできた多結晶の状態で存在している。さらに、結晶構造による空間対称性を満たす単結晶は完全結晶と呼ばれているが、実在の単結晶が完全結晶であることはごく稀であり、通常は結晶構造の空間対称性を破る格子欠陥を無数に含んでいる。格子欠陥はその幾何学的な形態に応じて点欠陥、線欠陥および面欠陥に分類される [2]。点欠陥は結晶格子中に含まれる不純物原子や空孔等の 0 次元的な空間的広がりをもつ格子欠陥であり、線欠陥および面欠陥もこれと同様に空間対称性を破る領域が 1 次元的な曲線、または 2 次元的な曲面状に連なった領域となるものとされる。とりわけ、格子欠陥の中でも線欠陥に分類される転位は、すべり変形による結晶性固体の塑性変形を担うことから、特に重要視されている。

転位を含む結晶性固体は、完全結晶の一部がある方向にずれた形態をとっており、ずれの境界線となる曲線は転位線、ずれの大きさと方向を表すベクトルは Burgers ベクトルと呼ばれている [3]。ここで、転位線と Burgers ベクトルが垂直な転位は刃状転位、平行な転位はらせん転位、これら 2 つの成分を含む一般の転位は混合転位と呼ばれて区別されている。この三種類に分類される転位の近傍では結晶格子は弾性的にひずみ、自己平衡な内部応力場が形成された状態となる。この内部応力場は、転位同士、または転位とその他の格子欠陥の相互作用力として働くが、降伏や硬化、疲労、クリープといった材料の強度は、主にこの相互作用下での格子欠陥の運動の結果として生じることが知られている [3, 4]。したがって、結晶性固体の格子欠陥が形成する内部応力場を明らかにすることは、固体力学における重要な研究課題の一つである。

1.1.2 LPSO 型 Mg 合金のキンク帯と回位

キンク帯は、材料の内部が局部的に折れ曲がった形態であり、結晶性固体に広く見られる変形形態の一つである [5]。1940 年代はじめに Orowan によって Cd 単結晶におけるキンク帯の形成が発見され [6]、それ以来、金属では Zn、その他の材料ではセラミクスや高分子、鉱物、複合材料、そして紙の束などの多岐にわたる固体材料中でその存在が報告されてきた [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 12, 15, 16]。こうしたキンク帯を形成する材料は、ある種の層状構造を有しており、それと平行な方向へのすべり変形が生じやすいという共通の特徴がある。通常、キンク帯はこのすべり変形が生じやすい方向と垂直に形成される。またその幾何学的な形態としては、キンク変形による材料の折れ曲がり材料表面にまで達するオルソ型キンクと、正負の折れ曲がり材料内部で交わるリッジ型キンクの二種類が確認されている [7]。

近年開発された長周期積層構造（LPSO 構造）を有する Mg 合金（LPSO 型 Mg 合金）においてもキンク帯の形成が確認されている [17, 18, 18, 19, 20]。LPSO 型 Mg 合金は Mg と微量の Zn、および主に Y 等の希土類元素からなる合金であり、Zn と希土類元素のクラスターが強度の高い板状の積層構造をなしている [21]。この積層構造が双晶変形を抑制することにより、この合金における主要な塑性変形機構が底面すべりのみに制限される。これによって、キンク帯を形成する他の材料と同様に層状構造と平行方向への刃状転位の活動が容易に生じるため、この合金においてもキンク帯が形成されるものと考えられる。実際、LPSO 型 Mg 合金中のキンク帯の大半はミスオリエンテーション角が 15 度未満の小傾角粒界、すなわち刃状転位の集合によって形成されていることが実験観察によって明らかにされている [22]。こうした微視的構造を背景として、この合金の降伏強度は 600MPa を超える上に、10% 近くもの塑性伸びを示すことから、次世代の構造用部材としての応用が期待されている [23, 24]。この優れた機械特性は、従来提案されてきた固体材料の強化機構とは異なる新たな材料強化機構によって獲得されていることが示唆されている。すなわち、LPSO 型 Mg 合金の降伏強度を説明する上で従来の材料強化機構は不十分であり、またその不定分はキンク帯の体積分率と関連することが報告されている [25]。こうした背景から、現在、この合金系におけるキンク形成とそれに伴う材料強化機構を説明するための研究活動が活発に行われている。

キンク帯による新たな材料強化機構には回位が寄与している可能性が指摘されている。Inamura はキンク帯の構造を幾何学的に考察することにより、リッジ型キンクの先端に回位と呼ばれる線欠陥の一種が存在することを予想している [26]。転位が Burgers ベクトルによって特徴付けられる並進型の線欠陥であるのに対して、回位は Frank ベクトルによって特徴付けられる回転型の線欠陥であり、分子配向の自由度がある液晶や高分子において観察されてきた [27, 28]。一般に、結晶性固体中

に孤立した完全回位が存在する場合、孤立した転位を含む場合と比べて結晶性固体は著しく高い弾性ひずみエネルギーを蓄積することが知られている。したがって結晶性固体中における完全回位の存在可能性は極めて低く、通常は符号の異なる 2 つの回位の対（回位双極子）や、4 つの回位（回位四重極子）等、複数の回位が隣接した不完全回位を形成していると考えられている [29]。キンク帯による材料強化機構には回位と転位の相互作用が何らかの影響を及ぼしていることが示唆されていることから、転位と回位の双方を包括的に取り入れた理論の構築が求められている。

1.1.3 ナノ構造体中の格子欠陥

近年、ナノサイエンス・ナノテクノロジーに基づくナノ電気・電子デバイス、ナノフォトニックデバイス、ナノバイオセンサーの開発が進められている [30]。こうしたナノデバイスの形状は機能と深く結びついており、その形状をいかに制御しながら合成するか、デバイスを構成するナノ部材を所望の形状にどう合成するかが重要となる。

こうしたナノ部材にも転位が含まれる場合があり、この際にナノ部材に生じる変形量はバルク体における転位の変形と比べて著しく大きくなることが知られている。すなわち、転位の Burgers ベクトルの大きさ b に対するバルク体の代表長さ L の比 b/L と、ナノ部材の代表長さ l の比 b/l を比べると後者の方が大きくなる ($b/L < b/l$) ことに起因している。この現象の典型例として、PbS のナノワイヤ中の混合転位によるねじれ変形がある [31]。そこでは、蒸着時にスパイラル機構に基づく異方的な結晶成長が確認され、この結果として中央に混合転位を含んだナノワイヤが作成されている。このとき、ナノワイヤは軸方向に沿って結晶方位がねじれた形態をとっており、これは混合転位中のらせん成分によるねじれ、すなわち Eshelby ツイストによるものと考えられている。この現象は AlO ナノワイヤにおいても観察されており [32]、らせん転位を含むナノワイヤに普遍的なものであると考えられる。このことは、転位がナノ部材中に及ぼす変形の精密な評価を行う際には、有限変形理論を用いて取り扱う必要があることを示唆していると考えられる。

1.1.4 格子欠陥に対する力学解析手法

転位や回位等の格子欠陥は結晶性固体中で複雑な空間分布をとり、これと材料の力学特性の直接的な関係を実験的に明らかにすることは困難である。したがって、理論および数値実験と実験を駆使して、それらで得られた結果を相互に検討するが必要である。

格子欠陥の数理解析手法には大別して、原子配列の不整として微視的に捉えるミクروسケールの手法（分子動力学法や第一原理計算）[33, 34]、個々の転位を応力場を伴う曲線として直接モデリングしながら、その相互作用を弾性理論に基づいて時間発展を記述していくメゾスケールの手法（離散転

位動力学法) [35], そして転位の分布を粗視化して連続体上の分布へ還元し, 巨視的な連続体力学に基づいて力学場解析を行うマクロスケールの手法 (連続分布転位論や結晶塑性論) [36, 37, 38, 39] があり, 現象に応じて最も適した解析手法が選択される. 連続体力学に基づくマクロスケールの解析手法では, 連続体に負荷されている境界条件のモデル化が容易で, 原理的に時空間スケールが制限されにくく, かつ格子欠陥が形成する内部応力場を近似的に評価することができるという特徴がある. 一般に, 転位によって連続体に生じる変形量は Burgers ベクトルに比例しており, したがってマクロスケールでの連続体の変形を議論する際には, この変形量を無限小と仮定する線形弾性理論が用いられる.

線形弾性理論に基づいて転位の内部応力場評価を行うことが可能なモデルのうち, 最も古典的なものが Volterra 転位モデルである [40]. Volterra 転位モデルでは, 転位線と Burgers ベクトルを用いて連続体力学解析へ転位を導入する. この結果, 転位の遠方では内部応力場を良好に表現できるため, これまで転位を素過程とする様々な力学現象の解析に用いられてきた [3, 41, 2]. その一方で, Volterra 転位モデルに課されている無限小変形の仮定は, 転位芯の近傍, および塑性変形の進行の際には破綻していると考えられる [3, 42]. したがって, このモデルに基づく連続体の変形解析時には一定の誤差が含まれるものと考えられる. その上, Volterra 転位モデルでは連続体の内部応力場が転位線上で発散することが知られている [43]. これは, Volterra 転位モデルでは転位を連続体中の特異線としてモデル化することに起因している. その他, 線形弾性理論に立脚した固体材料の力学特性評価手法としては, Eshelby によって構築され, Mura によって様々な問題の解析へ応用された eigen ひずみ理論が挙げられる. eigen ひずみ理論では材料の非弾性変形, すなわち格子欠陥や熱膨張, 格子変態, 介在物等を eigen ひずみの分布として連続体力学解析へ導入することで, 複雑な非弾性変形が寄与する固体材料の力学特性評価を可能にしてきた [41]. その一方で, 線形弾性理論に基づくこの理論は原理的に Volterra 転位モデルと同様の問題を抱えており, 結晶性固体材料中のより広範な現象へ適用するには, 有限変形理論を導入する必要があると考えられる.

1.1.5 連続体力学と微分幾何学に基づく格子欠陥のモデル化

従来の格子欠陥力学解析手法の問題を解決可能な理論的枠組みの一つに, 連続分布転位論と有限変形理論に基づく弾塑性理論がある. 連続分布転位論では転位線と Burgers ベクトルの空間分布を用い, 転位の空間分布を転位密度テンソルとしてモデル化する [44]. これによって, Volterra 転位モデルが抱えていた応力場の特異性は原理的に解決することができるが, この際には転位密度テンソルと連続体力学解析の接続方法が問題となる.

1955 年, Kondo は転位密度テンソルが微分幾何学における捩率テンソルと等価であることを指摘

し、これを用いれば転位密度テンソルを連続体力学解析へ自然に導入できることを示した [45, 46]. Kondo ははじめ、転位によって変形した連続体の微小部分を切り出して弾性的に緩和させるという思考実験を行った. 次に、切り出された全ての微小部分を弾性変形しないように再結合させ、転位による結晶構造のずれのみを含んだ連続体の状態である自然状態^{*1}を構成した. この際、自然状態は弾性理論における適合条件式を満たさず、その残差である不適合度テンソルが自然状態の Riemann 曲率テンソルと等価であることを示した. この結果により Kondo は、自然状態が通常の 3 次元 Euclid 空間上には存在せず、仮想的な曲がった空間、すなわち Riemann 多様体として構成できることを指摘した. その後 Kondo とは独立して、Bilby 等と Kröner 等も Riemann 多様体を用いた格子欠陥を含む連続体の幾何学的定式化を行っている [47, 48]. これらの理論的な発見を契機に微分幾何学の立場に立った格子欠陥の解釈が進められ、以来、転位のみならず回位や点欠陥等の格子欠陥についても微分幾何学で用いられる曲率テンソルと非計量テンソル (Q テンソル) と対応付けられることが指摘されてきた [49, 50]. Kondo らの研究と同時期に Truesdel と Noll, Wang らは有理連続体力学の定式化を始め、Kondo らの理論を導入して格子欠陥を含む連続体力学の定式化を行った [51, 52]. 1990 年代には Le と Stumpf が、Truesdel と Noll らの理論を基礎とし、有限変形理論に基づく弾塑性理論の定式化を進めた [53, 39].

このような枠組みがありながらも、現在でもこの理論に基づく格子欠陥の力学解析に関する先行研究例は限られている. この原因の一つとして、結晶性固体中の転位の空間分布から中間状態を決定する方法が限られていることが挙げられる. 一般に、中間状態は Cartan の第一・第二構造方程式、および Bianchi の恒等式を解くことによって決定することができる、Edelen と Lagoudas、および Acharya はホモトピー演算子によってこれらの方程式の一般解を計算している [54, 55]. また、近年では Yavari と Goriely により半逆解法に基づく格子欠陥の応力場解析手法が確立され、非線形弾性理論の下で様々な格子欠陥の内部応力場を導いている [56, 57, 58, 59]. しかしながら、これらの研究で用いている Cartan の構造方程式の解放では共通して、連続体と格子欠陥の分布に高い対称性を課した問題設定をする必要があり、複雑な配置を取る現実の結晶性固体中の格子欠陥への適用は困難である. その一方で、中間状態を数値的に決定できれば、こうした複雑な問題にも広く適用可能な格子欠陥力学解析手法を確立できると考えられる.

^{*1} これは現在の弾塑性理論の文脈では中間状態と呼ばれている

1.2 研究の目的

以上の研究背景に基づいて、本論文では転位および転位組織によって連続体内部に形成される内部応力場の数値解析を可能とする理論と数値計算法を構築するとともに、これを用いて直線状らせん転位と刃状転位の力学場を解析し、これを先行研究で得られている結果と比較し検証することによって、本解析法の妥当性について検証することを目的とする。また、本論文で新たに構築した手法を転位を用いてモデル化したキンク帯へ応用し、キンク帯に特徴的な折れ曲がり変形の形態が再現できることを示すとともに、キンク帯における回位の存在とその応力場に関する議論を行う。

1.3 論文構成

本論文の構成は次の通りである。第 1 章では研究の背景および目的を述べた。

第 2 章では微分幾何学を用いた連続体の運動学について説明する。ここでははじめに、Riemann-Cartan 多様体の構成に必要な多様体上の Riemann 計量およびアフィン接続を導入する。続いて、Euclid 空間上の弾性理論を Riemann 幾何を用いて定式化するとともに不適合度テンソルを導入する。その後、本研究で中心的な役割を果たす幾何学的な弾塑性理論における連続体の運動学の説明を行う。ここでは Yavari-Goriely の理論と同様に、完全結晶、格子欠陥によって塑性変形した結晶、そして弾性的に緩和して力学的平衡状態にある結晶に対応する、参照状態 $\mathcal{R}$ 、中間状態 $\mathcal{B}$ 、および現状 $\mathcal{S}$ を連続体の 3 つの状態として導入する。

第 3 章では、転位密度テンソルと振率形式の等価性 (Kondo 理論) に基づき、与えられた転位密度テンソルから導かれる中間状態の Riemann 計量を決定する二種類の方法を示す。これらの方法では、共通して Cartan の第一構造方程式の解から塑性変形勾配を決定するという方針をとる。一つ目の方法では、この方程式系の積分に Edelen により導入されたホモトピー演算子を用いる。この方法を用いると、様々な形状の転位に対応した中間状態の Riemann 計量を解析的に求めることができるが、一方で複数の転位が含まれる問題に対して適用するのは困難であり、また自由表面の影響を境界条件として取り扱うことができないという欠点がある。そこで、本論文ではこれに代わる新しい解析法として、変分法に基づく数値解析法を導入する。これは解析対象の Cartan の第一構造方程式の残差ノルムを最小化することで、塑性変形勾配を決定するものである。この方法を用いると、自由に配置された複数の転位に対応する中間状態の Riemann 計量を決定することができる。

続く第 4 章では、変分問題の弱形式に対する数値計算に用いるアイソジオメトリック解析について説明する。アイソジオメトリック解析は、Galerkin 法に基づく平衡方程式の弱形式解析法の一つで

ある。その最大の特徴は、非一様有理 B-spline (NURBS) を基底関数とする点にあり、これによって解析対象の連続体の幾何形状を近似なしで表現することができ、またリファインメントによって基底関数の滑らかさを自由に変更することができる。第 4 章では、アイソジオメトリック解析の基礎的事項について説明した後に、大規模数値計算時に用いた領域分割法と additive Schwarz 法について説明する。

第 5 章では、アイソジオメトリック解析の格子欠陥力学解析への実装を行う。ここではまず、Catan の第一構造方程式を離散化し、数値解を求める一連の手順について説明する。これによって、与えられた任意の転位分布に対する中間状態 (Riemann-Cartan 多様体) を数値的に構成することができる。次に、この多様体を 3 次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^3$ へ埋め込むことで、弾性変形と塑性変形の双方を含む現状態を決定する。具体的には、連続体を St. Venant-Kirchhoff 超弾性体とし、中間状態と現状態の Riemann 計量の差で表された Green ひずみテンソルを用い、この連続体のひずみエネルギーを定式化する。その後、これと変分原理を用いて応力の平衡方程式を弱形式で導出する。最後にこの弱形式へアイソジオメトリック解析を適用することで、方程式の離散化と数値計算を行う。

第 6 章では、構築した解析手法をらせん転位、刃状転位、および転位ループが近接したすべり面上に平行に配置した転位組織へ適用する。これを従来の解析結果と定量的に比較することで、本解析手法の妥当性を検証する。

最後に第 7 章では、各章で得られた結果をまとめ、本研究の総括を行う。

2 微分幾何学に基づく連続体の運動学

2.1 Riemann 計量とアフィン接続

微分幾何学においては、Euclid 空間上の図形を一般化した多様体を対象として、幾何学的な諸量を局所的に定義し、その性質を議論する基盤が与えられる。多様体の開部分集合は Euclid 空間の開集合とみなすことができる^{*2}集合である。すなわち、多様体は抽象的な図形と解釈することができ、必ずしもその全体を同じ次元の Euclid 空間上で実現することはできないが、部分的には実現可能であるという性質を持っている。多様体論における諸概念とその定義を付録 A に示した。

本節では、この多様体上の構造として Riemann 計量およびアフィン接続を導入する [60, 61, 62]。Riemann 計量とアフィン接続は、それぞれ Euclid 空間上のベクトルの内積と平行移動を一般化する構造である。すなわち、Riemann 計量は多様体の接ベクトルの長さ、二つの接ベクトルの間の角度を定義し、またアフィン接続は各点での接ベクトルの平行性を定義する。これらの構造の導入により、連続体の局所的な変形を表すひずみは Riemann 計量を、格子欠陥のモデル化はアフィン接続を用いて行われる。本節ではまず、このモデル化の受け皿となる Riemann 計量、およびアフィン接続の一般的な性質を示す。その後、格子欠陥のモデル化時に重要な二つのアフィン接続を導入する。

2.1.1 Riemann 計量

M を d 次元のコンパクトな境界付き多様体とし、その上のある点 x の接空間を $T_x M$ とおく。 $T_x M$ に内積を与える構造 g を Riemann 計量とよび、 M と g の組 (M, g) を Riemann 多様体という。以下に、Riemann 計量 g の定義を示す [61]。

Definition 1 (Riemann 計量). 多様体 M 上の、対称かつ正值な双線型写像を $g_x: T_x M \times T_x M \rightarrow \mathbb{R}$ とする。 M 上の各点 x に対応 $x \mapsto g_x$ が与えられれば、 M 上の全ての点の接空間に内積が与えられる。この対応 $x \mapsto g_x$ が C^∞ 級であるとき、これを g と書いて M 上の Riemann 計量という。ここで g のなめからさは次のように定義される。 M 上の任意の C^∞ 級ベクトル場 $\forall X, Y \in \mathfrak{X}(M)$ に対して x における $X_x, Y_x \in T_x M$ の内積 $g_x(X_x, Y_x)$ は M 上の関数となる。この関数が C^∞ 級であるとき、 g は C^∞ 級であるという。

$T_x M$ の双対空間を $T_x^* M$ と書き、 x における余接空間と呼ぶ。 M 上のチャート $(U, z^1, \dots, z^d)$ 上で 1 次独立な余接ベクトルの組は、局所座標系 z を用いて $((dz^1)_x, \dots, (dz^d)_x)$ と表すことができる

^{*2} 数学的には微分同相であるという

る。これを用いれば、 g_x は次のように局所座標表示することができる。

$$g_x = g_{ij}(x)(dz^i)_x \otimes (dz^j)_x \quad (2.1)$$

上式以降では特に断らない限り重複する添字に総和規約を適用するものとする。上式において d^2 個の係数 g_{ij} は M 上の関数の組を表し、 $g_{ij}(x)$ は $x \in M$ におけるその値を表す。ベクトル空間の内積の定義から、任意の局所座標系に対して $g_{ij} = g_{ji}$ を満たす。

点 $x \in M$ を固定し、 $T_x M$ 上の内積 g_x が与える接ベクトルの初頭幾何学的な性質を見ていく。 $\forall X, Y \in \mathfrak{X}(M)$ を M 上の任意の C^∞ 級ベクトル場とする。各点 $x \in M$ では X_x, Y_x は $T_x M$ 上の接ベクトルとなる。定義より、接空間 $T_x M$ における X_x と Y_x の内積は $g_x: T_x M \times T_x M \rightarrow \mathbb{R}$ を用いて $g_x(X_x, Y_x)$ と書かれる。具体的な計算過程を見るために x の周りのチャートを $(U, z^1, \dots, z^d)$ とおけば、 $g_x(X_x, Y_x)$ は次のように計算される。

$$\begin{aligned} g_x(X_x, Y_x) &= g_{ij}(x) dz^i \left(X^k(x) \frac{\partial}{\partial z^k} \right) dz^j \left(Y^l(x) \frac{\partial}{\partial z^l} \right) \\ &= g_{ij}(x) X^k(x) \delta_k^i Y^l(x) \delta_l^j \\ &= g_{kl}(x) X^k(x) Y^l(x) \end{aligned} \quad (2.2)$$

g_x による内積を用いれば、 x の接ベクトル $X_x \in T_x M$ の大きさは $|X_x| = \sqrt{g_x(X_x, X_x)}$ と定義される。また、 x の二つの接ベクトルの間の角度は、 g_x による内積を用いて次のように定義される。

$$\theta_x(X_x, Y_x) := \cos^{-1} \left(\frac{g_x(X_x, Y_x)}{|X_x| |Y_x|} \right) \quad (2.3)$$

g_x の定める正規直交性を有する $T_x M$ の正規直交基底の組を $(e_1|_x, \dots, e_d|_x)$ とおく。正規直交性よりこれらは $g_x(e_i|_x, e_j|_x) = \delta_{ij}$ を満たす。 M 上の全点において、Riemann 計量 g に関して正規直交となるベクトル場の組 $(e_1, \dots, e_d)$ は、正規直交枠と呼ばれている [61]。また、1 形式の組 $(\vartheta^1, \dots, \vartheta^d)$ が、ベクトル場と間に定まる自然な積により $\vartheta^i(e_j) = \delta_j^i$ を満たすとき、これを正規直交枠 $(e_1, \dots, e_d)$ の双対枠という。この双対枠を用いれば、Riemann 計量 g は次のように表すことができる。

$$g = \delta_{ij} \vartheta^i \otimes \vartheta^j \quad (2.4)$$

上式は、 $g(e_i, e_j) = \delta_{kl} \vartheta^k(e_i) \otimes \vartheta^l(e_j) = \delta_{ij}$ を満たすことから確認できる。

2.1.2 アフィン接続

Riemann 多様体 (M, g) においては、各点の接ベクトルの内積を Riemann 計量 g によって与えることが可能となった。続いて、多様体におけるベクトル場の方向微分を定める構造であるアフィン接続を導入する。Euclid 空間の上では、異なる二点のベクトルを自由に平行移動することができるので、これを用いればベクトル場の方向微分が定義できる。一方、多様体においては接ベクトルの平行移動はアフィン接続によって定義され、ベクトル場の方向微分もアフィン接続を用いて定義される。

Definition 2 (アフィン接続). 次の性質を満たす写像 $\nabla: \mathfrak{X}(M) \times \mathfrak{X}(M) \rightarrow \mathfrak{X}(M)$ を M 上のアフィン接続という。

1. 第一引数に関して $C^\infty(M)$ 線型性がある: $\nabla(fX+hY, Z) = f\nabla(X, Z) + h\nabla(Y, Z), \forall X, Y, Z \in \mathfrak{X}(M), \forall f, h \in C^\infty(M)$
2. 第二引数に関して Leibnitz 則を満たす: $\nabla(X, fY) = X[f]Y + f\nabla(X, Y), X, Y \in \mathfrak{X}(M), a \in \mathbb{R}$

$\nabla(X, Y)$ を $\nabla_X Y$ のように表して用いることにする。多様体 M のチャート (U, z) において、座標基底 $(\partial/\partial z^i) = (\partial/\partial z^1, \dots, \partial/\partial z^d)$ をとる。一般に、アフィン接続 ∇ による接ベクトル $\partial/\partial z^i$ の $\partial/\partial z^j$ の方向への微分は次のようになる。

$$\nabla_{\partial/\partial z^i} \frac{\partial}{\partial z^j} = \Gamma_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z^k} \quad (2.5)$$

ここで Γ_{ij}^k は、接続係数と呼ばれる d^3 個の M 上の関数の組である。直感的に上式は、 $\partial/\partial z^i$ を $\partial/\partial z^j$ の方向へ微小に平行移動した接ベクトルを $(\partial/\partial z^i)$ の線型結合で表しており、 Γ_{ij}^k はその係数であることを意味している。逆に、この接続係数 Γ_{ij}^k の取り方に応じて、多様体 M には無数のアフィン接続が存在する。

接続係数 Γ_{ij}^k はテンソルではないため、座標変換の下で常に変化するという特徴がある。チャート (V, y) を、 $U \cap V \neq \emptyset$ となるようにとる。この共通部分 $U \cap V$ においては、二つの局所座標系 (z^i) および (y^i) が存在している。そこで座標基底 $(\partial/\partial y^i) = (\partial/\partial y^1, \dots, \partial/\partial y^d)$ と $(\partial/\partial z^i)$ の関係は次のように表すことができる。

$$\frac{\partial}{\partial y^i} = \frac{\partial y^j}{\partial z^i} \frac{\partial}{\partial y^j} \quad (2.6)$$

ここで $\partial y^j / \partial z^i$ は座標系 (z^i) と (y^i) の座標変換を特徴付ける Jacobi 行列の (i, j) 成分を表してい

る。この座標変換の下で, Eq. (2.5) は次のように計算される。

$$\nabla_{\partial/\partial y^i} \frac{\partial}{\partial y^j} = \frac{\partial y^k}{\partial z^i} \nabla_{\partial/\partial z^k} \left(\frac{\partial y^l}{\partial z^j} \frac{\partial}{\partial z^l} \right) = \frac{\partial y^k}{\partial z^i} \left(\frac{\partial^2 y^m}{\partial z^j \partial z^k} + \frac{\partial y^l}{\partial z^j} \Gamma_{kl}^m \right) \frac{\partial}{\partial z^m} = \tilde{\Gamma}_{ij}^m \frac{\partial}{\partial z^m} \quad (2.7)$$

これより, 異なる座標系 (z^i) および (y^i) に関する接続係数 Γ_{ij}^m および $\tilde{\Gamma}_{ij}^m$ は, この座標変換の下で係数 $\partial^2 y^m / \partial z^j \partial z^k$ の分だけテンソルの変換規則を破っている。したがって, 接続係数はテンソルではなく, 座標系に依存した関数の組であるとみなされる。

あるアフィン接続を他のアフィン接続と区別する際に, 座標系の選択に依存する接続係数を用いるのは困難である。したがって, アフィン接続を用いて座標系に依存しないテンソル量を構成することで, この区別が容易になる。アフィン接続を特徴付けるテンソル量としては, 次を示す捩率テンソルおよび曲率テンソルが知られている [61]。

Definition 3 (捩率テンソルと曲率テンソル). 多様体 M 上のアフィン接続を ∇ とし, $X, Y, Z \in \mathfrak{X}(M)$ を M 上の任意のベクトル場とする。このとき, 以下で定義される M 上の $(1, 2)$ 型テンソル場 T および $(1, 3)$ 型テンソル場 R を, アフィン接続 ∇ の捩率テンソルおよび曲率テンソルという。

$$T(X, Y) = \nabla_X Y - \nabla_Y X - [X, Y] \quad (2.8)$$

$$R(X, Y)Z = \nabla_X \nabla_Y Z - \nabla_Y \nabla_X Z - \nabla_{[X, Y]} Z \quad (2.9)$$

M 上の $(1, 3)$ 型テンソル場である曲率テンソル R の縮約により, $(0, 2)$ 型テンソル場である Ricci テンソル Ric , そして $(0, 0)$ 型テンソル場であるスカラー曲率 S を構成することができる。これらは次のように定義される。

$$\text{Ric}(X, Y) := \text{tr}(R(\cdot, X)Y) \quad (2.10)$$

$$S := \text{tr}(\text{Ric}) \quad (2.11)$$

ただし tr はトレース演算子を表し, 例えばスカラー曲率においては $S = \text{Ric} = \text{Ric}(e_i, e_j) \delta^{ij}$ のように作用する。Einstein テンソル E は次のように定義される $(0, 2)$ 型テンソル場である。

$$E = \text{Ric} - \frac{1}{2} g S \quad (2.12)$$

Eq. (2.13) における曲率テンソルの反対称性により, 曲率テンソルは一般の $(1, 3)$ 型テンソル場のなす空間の部分空間に含まれている。Einstein テンソルは, この部分空間と $(0, 2)$ 型テンソル場のなす空間の同型対応によって構成されており, 曲率テンソルのもつ全ての幾何学的な情報を含んでいることが知られている [62]。

定義より、任意のアフィン接続 ∇ の捩率テンソル T および曲率テンソル R は、次の関係を満たす M 上の反対称なテンソル場である。

$$T(X, Y) = -T(Y, X) \quad (2.13)$$

$$R(X, Y)Z = -R(Y, X)Z \quad (2.14)$$

この反対称性により、これらのテンソル場を多様体 M 上の 2 形式の組とみなすことができる。すなわち捩率テンソル T および曲率テンソル R に対応する 2 形式の組 τ^i , $(i = 1, \dots, d)$ および Ω_j^i , $(i, j = 1, \dots, d)$ は、それぞれ捩率形式および曲率形式と呼ばれている [61]。捩率形式および曲率形式は、次に示す Cartan の第一・第二構造方程式を満たすことが知られている。

$$\tau^i = d\vartheta^i + \omega_j^i \wedge \vartheta^j \quad (2.15)$$

$$\Omega_j^i = d\omega_j^i + \omega_k^i \wedge \omega_j^k \quad (2.16)$$

ただし、 ω_j^i , $(i, j = 1, \dots, d)$ は接続形式である。また、上式の両辺の外微分をとった次の方程式は Bianchi の恒等式と呼ばれている。

$$d\tau^i = \Omega_j^i \wedge \vartheta^j - \omega_j^i \wedge \tau^j \quad (2.17)$$

$$d\Omega_j^i = \Omega_k^i \wedge \omega_j^k - \omega_k^i \wedge \Omega_j^k \quad (2.18)$$

2.1.3 Levi-Civita 接続

前節で述べたように、アフィン接続は多様体上で接続係数によって定められ、その性質は捩率テンソルと曲率テンソルによって特徴付けられる。したがって接続係数の空間分布の自由度に応じて、一つの多様体には無数のアフィン接続を入れることができる。Riemann 多様体においては、Levi-Civita 接続と呼ばれるアフィン接続がユニークに定まる。

Riemann 多様体 (M, g) に関する Levi-Civita 接続を ∇ と書き、この定義と性質を示す。Levi-Civita 接続 ∇ は $X, Y, Z \in \mathfrak{X}(M)$ に対して次の条件を満たすアフィン接続である。

$$(\nabla_X g)(Y, Z) = 0 \quad (2.19)$$

$$T(X, Y) = \nabla_X Y - \nabla_Y X - [X, Y] = 0 \quad (2.20)$$

Eq. (2.19) を満たすアフィン接続は Riemann 計量と両立するという。アフィン接続の Riemann 計量との両立性は直感的に、Riemann 計量による多様体上の内積が一定に保たれることを表している。また、Eq. (2.20) を満たすアフィン接続は対称であるといい、このアフィン接続の捩率テンソルがゼ

ロであることを表している．すなわち，Levi-Civita 接続は Riemann 計量と両立し，振率テンソルがゼロとなるアフィン接続である．

この形式的な条件をより詳しく書き下すために，これらをチャート (U, z) 上で局所座標表示する．まず， $x \in U$ における座標基底 $(\partial/\partial z^i|_x)$ に関して，Riemann 計量 g を次のように局所座標表示する．

$$g = g_{ij}(x)(dz^i)_x \otimes (dz^j)_x \quad (2.21)$$

また，アフィン接続 ∇ による座標基底の方向微分を接続係数 Γ_{ij}^k を用いて次のように書く．

$$\nabla_{\partial/\partial z^i|_x} \frac{\partial}{\partial z^j} \Big|_x = \Gamma_{ij}^k(x) \frac{\partial}{\partial z^k} \Big|_x \quad (2.22)$$

これより，Eq. (2.19) は次のように表すことができる．

$$\begin{aligned} (\nabla_X g)(Y, Z) &= X(g(Y, Z)) - g(\nabla_X Y, Z) - g(Y, \nabla_X Z) \\ &= X^k \frac{\partial}{\partial z^k} (g_{ij} Y^i Z^j) - g_{ij} X^k \left(\frac{\partial Y^i}{\partial z^k} + \Gamma_{kl}^i Y^l \right) Z^j - g_{ij} X^k Y^i \left(\frac{\partial Z^j}{\partial z^k} + \Gamma_{kl}^j Z^l \right) \\ &= X^k Y^i Z^j \left(\frac{\partial g_{ij}}{\partial z^k} - g_{lj} \Gamma_{ki}^l - g_{il} \Gamma_{kj}^l \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.23)$$

これが $U \subset M$ 上の任意のベクトル場 X, Y, Z に対して成り立つので，Eq. (2.19) は次の方程式に帰着する．

$$\frac{\partial g_{ij}}{\partial z^k} - g_{lj} \Gamma_{ki}^l - g_{il} \Gamma_{kj}^l = 0 \quad (2.24)$$

次に Eq. (2.20) 中の各項は次のように局所座標表示できる．

$$\begin{aligned} \nabla_X Y &= X^i \left(\frac{\partial Y^l}{\partial z^i} + \Gamma_{ij}^l Y^j \right) \frac{\partial}{\partial z^l} \\ \nabla_Y X &= Y^j \left(\frac{\partial X^l}{\partial z^j} + \Gamma_{ji}^l X^i \right) \frac{\partial}{\partial z^l} \\ [X, Y] &= X^i \frac{\partial Y^j}{\partial z^i} \frac{\partial}{\partial z^j} - Y^j \frac{\partial X^i}{\partial z^j} \frac{\partial}{\partial z^i} \end{aligned} \quad (2.25)$$

したがって，Eq. (2.20) は次のようになる．

$$X^i Y^j (\Gamma_{ij}^l - \Gamma_{ji}^l) = 0 \quad (2.26)$$

これが任意のベクトル場 X, Y に対して成り立つので, Eq. (2.20) は次の方程式に帰着する.

$$\Gamma_{ij}^l = \Gamma_{ji}^l \quad (2.27)$$

上式より明らかなように, Eq. (2.20) は接続係数の添字の入れ替えに対する対称性の条件となっている. Eq. (2.24) および Eq. (2.27) より, Levi-Civita 接続の接続係数 Γ_{jk}^i はチャート (U, z) の下で次のように局所座標表示できる.

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{g^{ik}}{2} \left(\frac{\partial g_{kj}}{\partial z^i} + \frac{\partial g_{ki}}{\partial z^j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial z^k} \right) \quad (2.28)$$

ただし, g^{ik} は Eq. (2.21) の係数 g_{ij} と $g^{ki}g_{ij} = \delta_j^k$ の関係を有しており, g_{ij} を行列とみなしたとき, その逆行列を表している. 第二種 Christoffel 記号を用いると, Eq. (2.28) は次のように表される [62].

$$\Gamma_{ij}^l = \left\{ \begin{matrix} l \\ ij \end{matrix} \right\} \quad (2.29)$$

このように, チャート (U, z) における Levi-Civita 接続の接続係数 Γ_{ij}^l は, Eq. (2.19) および Eq. (2.20) によって Riemann 計量のみを用いて記述され, これにはいかなる不定性も含まれない. この意味で, Levi-Civita 接続は Riemann 多様体にユニークに定まると言える.

この Levi-Civita 接続の性質を特徴づける捩率テンソルおよび曲率テンソルは次のように局所座標表示される.

$$\begin{aligned} T &= T_{jk}^i \frac{\partial}{\partial z^i} \otimes dz^j \otimes dz^k = 0 \\ R &= R_{jkl}^i \frac{\partial}{\partial z^i} \otimes dz^j \otimes dz^k \\ R_{jkl}^i &= \frac{\partial \Gamma_{jl}^i}{\partial z^k} - \frac{\partial \Gamma_{kj}^i}{\partial z^l} + (\Gamma_{lj}^m \Gamma_{km}^i - \Gamma_{kj}^m \Gamma_{lm}^i) \end{aligned}$$

Levi-Civita 接続の対称性から, この捩率テンソルは常にゼロとなる一方, 曲率テンソルの係数は接続形式を用いて表される一般には非ゼロの $(1, 3)$ 型テンソル場である. Levi-Civita 接続の曲率テンソルを特に Riemann 曲率テンソルと呼ぶ. Riemann 曲率テンソル R に関する Ricci テンソルおよびスカラー曲率は次のように局所座標表示することができる.

$$\text{Ric} = \delta_i^k R_{jkl}^i dz^j \otimes dz^l \quad (2.30)$$

$$S = g^{kl} \delta_i^k R_{jkl}^i \quad (2.31)$$

これらより、Einstein テンソルの局所座標表示は次のようになる。

$$E = E_{ij} dz^i \otimes dz^j = \left(\delta_i^k R_{jkl}^i - \frac{g_{jl}}{2} S \right) dz^j \otimes dz^l \quad (2.32)$$

2.1.4 Weitzenböck 接続

Weitzenböck 接続は多様体上のアフィン接続であり、捩率テンソルが非ゼロ、曲率テンソルがゼロとなるという特徴がある。この Weitzenböck 接続は、平行化可能 (Parallelizable) な多様体に自然に定まるアフィン接続である。

いま、多様体 M の接束を TM とおくと、 TM と積束 $M \times \mathbb{R}^d$ の間に M 上の束同型 $\vartheta: TM \rightarrow M \times \mathbb{R}^d$ が存在するとき、多様体は平行化可能であるという。 M 上の束同型 ϑ は、接束 TM と積束 $M \times \mathbb{R}^d$ の切断の全単射である。 TM の切断 $X \in \mathfrak{X}(M)$ に対して、束同型 ϑ は X に対応する $M \times \mathbb{R}^d$ の切断 $\vartheta(X)$ を定める。また、 $M \times \mathbb{R}^d$ の切断 s に対して TM の切断 $\vartheta^{-1}(s)$ も定まる。

積束 $M \times \mathbb{R}^d$ の各点のファイバーは実空間 $\mathbb{R}^d$ であるため、 $\mathbb{R}^d$ 上の内積を用いてファイバー計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle: \Gamma(M \times \mathbb{R}^d) \times \Gamma(M \times \mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$ が自然に定まる。いま、 $\mathbb{R}^d$ の正規直交基底を $M \times \mathbb{R}^d$ の各点に割り当てることで、 $M \times \mathbb{R}^d$ にファイバー計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ に関する正規直交枠を与えることができる。これを $(\partial/\partial z^i) = (\partial/\partial z^1, \dots, \partial/\partial z^d)$ と書くことにする。定義より正規直交枠 $(\partial/\partial z^i)$ は $\langle \partial/\partial z^i, \partial/\partial z^j \rangle = \delta_{ij}$ を満たすファイバー計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ に関する正規直交基底をなしている。束同型の逆写像 ϑ^{-1} により、この正規直交枠を TM へ次のように写すことができる。

$$e_i = \vartheta^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial z^i} \right) = (\vartheta^{-1})_i^j \frac{\partial}{\partial z^j} \quad (2.33)$$

ここで第二式への変形においては、束同型が多様体上の各点 p で接空間 $T_p M \simeq \mathbb{R}^d$ とファイバー $\mathbb{R}^d$ の対応を与える線形同型であることから、多様体上の行列値関数 $\vartheta \in C^\infty(M, \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ となることを用いた。 $(\vartheta^{-1})_j^i$ は、この行列値関数としての ϑ の逆行列の (i, j) 成分を表している。このように接束 TM と積束の間に束同型が存在するとき、接束 TM 上には束同型に依存した大域的な枠 $(e_i) = (e_1, \dots, e_d)$ が定まる。

ファイバー計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を、束同型 ϑ を用いて引き戻すことで TM 上にもファイバー計量を誘導することができる。ファイバー計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ の誘導計量 $\tilde{g} = \vartheta^*(\langle \cdot, \cdot \rangle)$ は次のようにして与えられる。

$$\tilde{g} = \vartheta^*(\langle \cdot, \cdot \rangle) = \delta_{ij} \vartheta_k^i \vartheta_l^j dz^k \otimes dz^l \quad (2.34)$$

ファイバー計量と同様に、 $M \times \mathbb{R}^d$ のファイバーが実空間 $\mathbb{R}^d$ であることを用いれば、自明な接続を与えることができる。これは積束上の接続 $D: (TM) \times \Gamma(M \times \mathbb{R}^d) \rightarrow \Gamma(M \times \mathbb{R}^d)$ であり、次

のように特徴付けられる.

$$D_{e_i} \frac{\partial}{\partial z^j} = 0 \quad (2.35)$$

上式は幾何学的に, M 上で正規直交枠 (e_j) の方向へ座標枠 $\partial/\partial z^i$ を微小に移動させようとも, これが変化しないという条件を表している. これは絶対平行性 (absolute parallelism) または遠隔平行性 (teleparallelism) の条件と呼ばれている [63]. この性質は, 積束 $M \times \mathbb{R}^d$ が多様体 M と実空間 $\mathbb{R}^d$ の直積多様体として構成されていることから直感的に明らかである. ファイバー計量と同様にこの自明な接続 D を M へ引き戻すことで, M 上にアフィン接続 $\nabla: \mathfrak{X}(M) \times \mathfrak{X}(M) \rightarrow \mathfrak{X}(M)$ を誘導することができる. (e_i) に対して, 接続 D の引き戻しは次のようにして定義される.

$$\nabla_X Y := \vartheta^{-1}(D_X \vartheta(Y)) \quad (2.36)$$

アフィン接続 ∇ の正規直交枠 (e_i) に対する作用は次のように局所座標表示することができる.

$$\nabla_{e_i} e_j = \vartheta^{-1}(D_{e_i} \vartheta(e_j)) = \vartheta^{-1} \left(D_{e_i} \frac{\partial}{\partial z^j} \right) = 0 \quad (2.37)$$

このように誘導計量 $\tilde{g}$ に関する正規直交枠 (e_i) は, 引き戻し接続 ∇ に関して Eq. (2.35) と同様に絶対平行性の条件を満足し, 誘導計量とも両立する ($\nabla_X \tilde{g} \equiv 0$). こうして M 上に定義された, 絶対平行性をもつアフィン接続 ∇ は Weitzenböck 接続と呼ばれている [64].

この Weitzenböck 接続の幾何学的な特徴を明らかにするため, チャート (U, z) の下で振率テンソルおよび曲率テンソルの局所座標表示を行うと次のようになる.

$$\begin{aligned} T(e_i, e_j) &= \nabla_{e_i} e_j - \nabla_{e_j} e_i - [e_i, e_j] = - \left[(\vartheta^{-1})_i^k \frac{\partial}{\partial z^k}, (\vartheta^{-1})_j^l \frac{\partial}{\partial z^l} \right] \\ &= - \left((\vartheta^{-1})_i^k \frac{\partial (\vartheta^{-1})_j^l}{\partial z^k} \frac{\partial}{\partial z^l} - (\vartheta^{-1})_j^l \frac{\partial (\vartheta^{-1})_i^k}{\partial z^l} \frac{\partial}{\partial z^k} \right) \\ &= (\vartheta^{-1})_i^k (\vartheta^{-1})_j^l \left(\frac{\partial \vartheta_l^n}{\partial z^k} - \frac{\partial \vartheta_k^n}{\partial z^l} \right) (\vartheta^{-1})_n^m \frac{\partial}{\partial z^m} \\ &= \left(\frac{\partial \vartheta_l^n}{\partial z^k} - \frac{\partial \vartheta_k^n}{\partial z^l} \right) (\vartheta^{-1})_n^m \frac{\partial}{\partial z^m} \otimes dz^k \otimes dz^l (e_i, e_j) \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$R(e_i, e_j) e_k = \nabla_{e_i} \nabla_{e_j} e_k - \nabla_{e_j} \nabla_{e_i} e_k - \nabla_{[e_i, e_j]} e_k = 0 \quad (2.39)$$

上式より, Weitzenböck 接続の振率テンソルは束同型 ϑ を用いて表され, 曲率テンソルは常にゼロ

となる．ここで，上式の振率テンソルの式変形においては次の関係式を用いた．

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \delta_k^i}{\partial z^l} &= \frac{\partial (\vartheta_j^i (\vartheta^{-1})_k^j)}{\partial z^l} = \frac{\partial \vartheta_j^i}{\partial z^l} (\vartheta^{-1})_k^j + \vartheta_j^i \frac{\partial (\vartheta^{-1})_k^j}{\partial z^l} = 0 \\
\vartheta_j^i \frac{\partial (\vartheta^{-1})_k^j}{\partial z^l} &= - \frac{\partial \vartheta_j^i}{\partial z^l} (\vartheta^{-1})_k^j \\
\frac{\partial (\vartheta^{-1})_k^m}{\partial z^l} &= - \frac{\partial \vartheta_j^i}{\partial z^l} (\vartheta^{-1})_k^j (\vartheta^{-1})_i^m
\end{aligned} \tag{2.40}$$

これより振率形式は次のようになる．

$$\begin{aligned}
\tau &= \tau^i \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} = \sum_{j < k} T_{jk}^i dz^j \wedge dz^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \\
&= \sum_{j < k} \left(\frac{\partial \vartheta_j^l}{\partial z^k} - \frac{\partial \vartheta_k^l}{\partial z^j} \right) (\vartheta^{-1})_l^i dz^j \wedge dz^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \\
&= \frac{\partial \vartheta_j^l}{\partial z^k} (\vartheta^{-1})_l^i dz^j \wedge dz^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^i}
\end{aligned} \tag{2.41}$$

2.2 Riemann 多様体による弾性体の運動学の定式化

本節では，Euclid 空間上の連続体の運動学を Riemann 多様体を用いて記述する．後述するように，弾塑性体の運動学はこの拡張によって構成される．

2.2.1 材料多様体と連続体の参照状態

$\mathbb{R}^3$ を 3 次元実空間とし， $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を Euclid 計量とする．Euclid 計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を備えた $\mathbb{R}^3$ を組 $(\mathbb{R}^3, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ で表し，これを 3 次元 Euclid 空間と呼ぶ． $(\mathbb{R}^3, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ は 3 次元 Riemann 多様体の一例である．3 次元 Euclid 空間の正規直交座標系の座標関数を $x^i: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $(i = 1, 2, 3)$ とする．3 次元 Euclid 空間上の点 p の座標を，これを用いて $(x^1(p), x^2(p), x^3(p)) = (p^1, p^2, p^3)$ と表す．

Fig. 2.1 に，Riemann 幾何に基づく 3 次元連続体の運動学の概略を示す． M を向きづけられたコンパクトな境界付きの 3 次元 C^∞ 級多様体とする．連続体の状態 (state) または配置 (configuration) とは， C^∞ 級写像 $M \rightarrow \mathbb{R}^3$ による M の像である．連続体の変形を定める基準の状態を参照状態と呼ぶ．本研究で扱う連続体の参照状態は，常に多様体 M の次元と同じ次元の Euclid 空間上の開集合として表すことができるとする．この参照状態を与える写像を $\varphi_0: M \rightarrow \mathbb{R}^3$ ，参照状態を $\varphi_0(M)$ と書く．数学的には，写像 φ_0 は C^∞ 級であり，かつその逆写像 φ_0^{-1} も C^∞ 級の全単射として表すことができる．このような性質を持った多様体間の写像は C^∞ 級微分同相写像と呼ばれている．この仮定より， M 上の全ての点は参照状態 $\varphi_0(M) \subset \mathbb{R}^3$ 上の点と一対一に対応しており， M には大域的

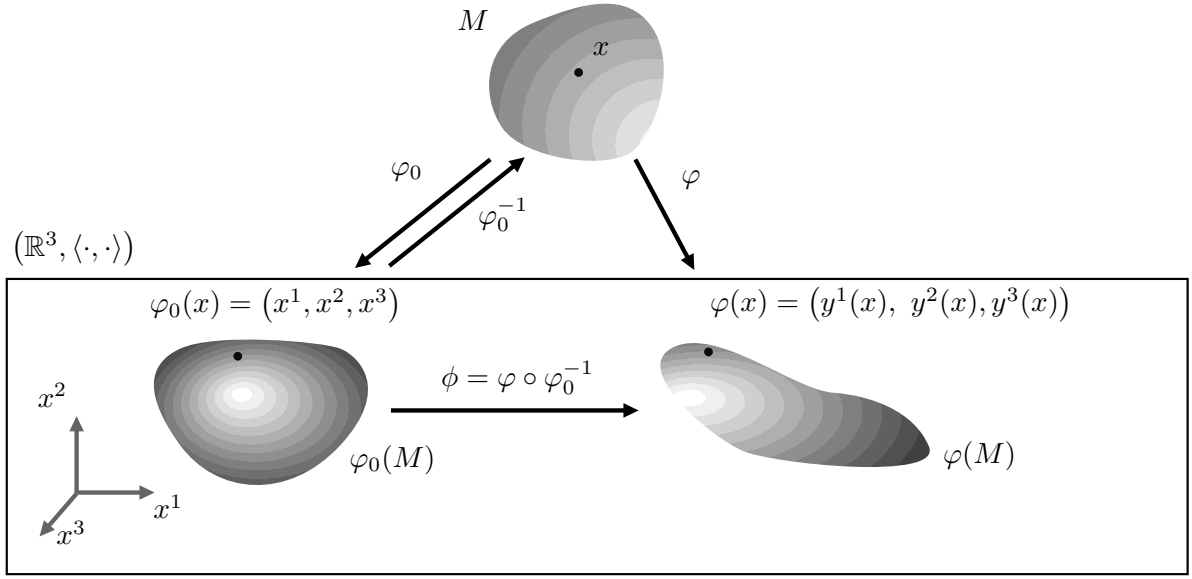


Fig. 2.1: Schematic illustration of Riemannian geometry of a continuous medium.

なチャート (M, φ_0) が存在していると考えることができる．多様体 M 上の任意の点 x を φ_0 によって参照状態 $\varphi_0(M)$ へ写したとき，この座標を $(x^1, x^2, x^3) = (x^1 \circ \varphi_0(x), x^2 \circ \varphi_0(x), x^3 \circ \varphi_0(x))$ と表す．

この M の大域的なチャートを用いることで， M に入る様々なテンソル場をこの参照状態上のテンソル場として扱うことができる．これにより以降で現れる全ての M 上のテンソル場は，Euclid 空間の開集合である参照状態 $\varphi_0(M)$ 上のテンソル場として扱うことができる．このテンソル場の基底は，多様体 M の接空間および余接空間の基底のテンソル積によって書かれる． M 上の点 x における接空間を $T_x M$ ，余接空間を $T_x^* M$ と書く．この接空間の基底を接ベクトルの組 $(\partial/\partial x^i|_x) = (\partial/\partial x^1|_x, \partial/\partial x^2|_x, \partial/\partial x^3|_x)$ で表す．同様に余接空間 $T_x^* M$ の基底を余接ベクトルの組 $(dx^i)_x = ((dx^1)_x, (dx^2)_x, (dx^3)_x)$ で表す．このとき $(dx^i)_x$ と $\partial/\partial x^j|_x$ は次の関係を満たす．

$$(dx^i)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^j} \Big|_x \right) = \frac{\partial x^i}{\partial x^j}(x) = \delta_j^i \quad (2.42)$$

M の大域的なチャート (M, φ_0) により， M 上の全ての点において，接空間 $T_x M$ の基底を割り当てることができる．これを枠といい， $(\partial/\partial x^i) = (\partial/\partial x^1, \partial/\partial x^2, \partial/\partial x^3)$ と書く．同様に， M 上の各点への余接空間の基底の対応 $(dx^i) = (dx^1, dx^2, dx^3)$ を双対枠という．連続体力学においては，双対枠 (dx^i) は線素と呼ばれている．

2.2.2 現状態の構成

はめ込み φ による M の像 $\varphi(M) \subset \mathbb{R}^3$ を連続体の現状態と呼ぶ. $\varphi_0^{-1}: \varphi(M) \rightarrow M$ と $\varphi: M \rightarrow \mathbb{R}^3$ の合成により, 参照状態から現状態への写像 $\phi = \varphi \circ \varphi_0^{-1}: \varphi_0(M) \rightarrow \varphi(M)$ を構成することができる. この合成写像 ϕ は, 連続体の運動と呼ばれている [65]. 運動 ϕ を用いれば, 参照状態の点 $\varphi_0(x)$ と現状態の点 $\varphi(x)$ の対応を $\varphi(x) = \varphi \circ \varphi_0^{-1} \circ \varphi_0(x) = \phi(\varphi_0(x))$ として定めることができる. これより, 参照状態の点の座標と現状態の点の座標は次のように対応させることができる.

$$y^i(\varphi_0(x)) := x^i \circ \phi(\varphi_0(x)) = x^i \circ \varphi(x) \quad (2.43)$$

現状態の線素は, 運動 ϕ によって参照状態の線素が変化したものであり, この関係は引き戻しと呼ばれる操作を通して決定できる. いま, 現状態の線素の ϕ による参照状態への引き戻しを $(dy^i) = (dy^1, dy^2, dy^3)$ と書くと, 参照状態の線素と現状態の線素の関係は次式のように表すことができる.

$$dy^i = F_j^i dx^j = \frac{\partial y^i}{\partial x^j} dx^j \quad (2.44)$$

ここで F_j^i は変形勾配であり, これは運動 ϕ による参照状態と現状態の線素の一次変換を与えている.

2.2.3 ひずみ

Eq. (2.44) から明らかなように, 運動 ϕ により線素のなす角や, その大きさは変形の過程で変化する. 線素の角度と大きさは内積によって測ることができる. 連続体力学においては, 連続体上の各点に定まる内積は右 (左) Cauchy-Green テンソルと呼ばれている. 右 (左) Cauchy-Green テンソルは, 微分幾何学では Riemann 計量と呼ばれるテンソル場に他ならない^{*3}. 運動 ϕ によって連続体に生じるひずみは, この右 (左) Cauchy-Green テンソルを用いて定められる.

右 Cauchy-Green テンソル g は, Eq. (2.44) を用いて次のように表すことができる.

$$g = \delta_{ij} dy^i \otimes dy^j = \delta_{ij} F_k^i F_l^j dx^k \otimes dx^l = \delta_{ij} \frac{\partial y^i}{\partial x^k} \frac{\partial y^j}{\partial x^l} dx^k \otimes dx^l \quad (2.45)$$

こうして参照状態上に定義された二つの内積 g および g_0 のそれぞれに対して正規直交枠が定まる. g_0 および g に関する正規直交枠を, それぞれ $(\partial/\partial x^i) = (\partial/\partial x^1, \partial/\partial x^2, \partial/\partial x^3)$ および

^{*3} 厳密には右 Cauchy-Green テンソルは, 現状態の Riemann 計量の, 運動 ϕ による参照状態への誘導計量である.

$(\partial/\partial y^i) = (\partial/\partial y^1, \partial/\partial y^2, \partial/\partial y^3)$ とおくと、定義よりこれらは次の関係を満たす。

$$\begin{aligned} g_0 \left(\frac{\partial}{\partial x^i}, \frac{\partial}{\partial x^j} \right) &= \delta_{kl} dx^k \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \right) dx^l \left(\frac{\partial}{\partial x^j} \right) = \delta_{ij} \\ g \left(\frac{\partial}{\partial y^i}, \frac{\partial}{\partial y^j} \right) &= \delta_{kl} dy^k \left(\frac{\partial}{\partial y^i} \right) dy^l \left(\frac{\partial}{\partial y^j} \right) = \delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.46)$$

上式より、 g に関する正規直交枠 $(\partial/\partial y^i)$ と g_0 に関する正規直交枠 $(\partial/\partial x^i)$ の間の関係は次のように表される。

$$\frac{\partial}{\partial y^i} = (F^{-1})^j_i \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (2.47)$$

ただし $(F^{-1})^j_i$ は、 F^i_j を 3×3 の行列としたときの、逆行列の各成分を表している。

Eq. (2.46) で見たように、 g および g_0 は参照状態上に二つの異なる内積を定めており、このうち g は運動 ϕ によって生じる参照状態上の内積の変化を表していると考えることができる。運動 ϕ によって連続体に生じるひずみは、この右 Cauchy-Green テンソル g と、参照状態における内積 $g_0 = \delta_{ij} dx^i \otimes dx^j$ の差として定めることができる。すなわち、Green ひずみテンソル E は次のように定義される。

$$E = \frac{1}{2}(g - g_0) \quad (2.48)$$

定義より明らかなように、Green ひずみテンソルは参照状態上の $(0, 2)$ 型テンソル場である。

2.2.4 体積形式

体積形式は、連続体力学においては体積素 (volume element) などと呼ばれ、連続体の上での積分に用いられる。幾何学的には、3 次元多様体の体積形式は連続体の微小要素の体積を表している。多様体論において、多様体上の体積形式とは多様体と同じ次元の微分形式 (3 次元多様体の場合は 3 形式) である。Riemann 多様体においては、Riemann 計量に関する正規直交枠が定まるが、この正規直交枠に関して 2 つの体積形式を自然に構成できる。この体積形式を引き戻すことで、向きづけられた多様体 M には、写像 φ_0 および φ からそれぞれ、ユニークな体積形式を誘導することができる。

Euclid 空間 $(\mathbb{R}^3, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ には Euclid 計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ に関して各点 x での正規直交基底 $(\partial/\partial x^i|_x)$ が定まる。この双対基底 $((dx^i)_x)$ を用いて、次の二つの 2 形式が構成できる。

$$\begin{aligned} (dx^1)_x \wedge (dx^2)_x \wedge (dx^3)_x &= (dx^3)_x \wedge (dx^1)_x \wedge (dx^2)_x = (dx^2)_x \wedge (dx^3)_x \wedge (dx^1)_x \\ (dx^3)_x \wedge (dx^2)_x \wedge (dx^1)_x &= (dx^1)_x \wedge (dx^3)_x \wedge (dx^2)_x = (dx^2)_x \wedge (dx^1)_x \wedge (dx^3)_x \end{aligned} \quad (2.49)$$

これらは Euclid 空間上の反対称な $(0, 2)$ 型テンソルであるため、2 つの接ベクトルより構成され

る $(2,0)$ 型テンソルに作用して実数を返す写像と見ることができる．正規直交基底 $(\partial/\partial x^i|_x) = (\partial/\partial x^1|_x, \partial/\partial x^2|_x, \partial/\partial x^3|_x)$ から構成されるテンソルに対して，この作用は次のように計算される．

$$\begin{aligned}
& (dx^1)_x \wedge (dx^2)_x \wedge (dx^3)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^1} \Big|_x \otimes \frac{\partial}{\partial x^2} \Big|_x \otimes \frac{\partial}{\partial x^3} \Big|_x \right) \\
&= (dx^1)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^1} \Big|_x \right) \cdot (dx^2)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^2} \Big|_x \right) \cdot (dx^3)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^3} \Big|_x \right) = 1 \\
& (dx^3)_x \wedge (dx^2)_x \wedge (dx^1)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^1} \Big|_x \otimes \frac{\partial}{\partial x^2} \Big|_x \otimes \frac{\partial}{\partial x^3} \Big|_x \right) \\
&= - (dx^1)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^1} \Big|_x \right) \cdot (dx^2)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^2} \Big|_x \right) \cdot (dx^3)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^3} \Big|_x \right) = -1
\end{aligned}$$

このうち計算結果の符号が正となる $(dx^1)_x \wedge (dx^2)_x \wedge (dx^3)_x$ を点 x における体積形式とする．すなわち，Euclid 空間の点 x における体積形式 $(v)_x$ を次のように定める．

$$(v)_x = (dx^1)_x \wedge (dx^2)_x \wedge (dx^3)_x \quad (2.50)$$

この Euclid 空間の体積形式から，多様体 M 上に体積形式を誘導することができる．写像 φ_0 および φ から誘導される体積形式 φ_0^*v および φ^*v は次のようになる．

$$\begin{aligned}
(\varphi_0^*v)_x &= \det \left(\frac{\partial x^i}{\partial x^j}(x) \right) (dx^1)_x \wedge (dx^2)_x \wedge (dx^3)_x = (dx^1)_x \wedge (dx^2)_x \wedge (dx^3)_x \\
(\varphi^*v)_x &= \det \left(\frac{\partial y^i}{\partial x^j}(x) \right) (dx^1)_x \wedge (dx^2)_x \wedge (dx^3)_x
\end{aligned} \quad (2.51)$$

これより運動 ϕ による参照状態と現状態の体積形式の間には， $(\varphi^*v)_x = J(x)(\varphi_0^*v)_x$ なる関係が成り立つ．これは，運動 ϕ によって生じる x の体積形式の変化を表しており，この係数 $J(x)$ は体積変化率を表している．Eq. (2.51) より体積変化率 $J(x)$ は次のようになる．

$$J(x) = \frac{\det \left(\frac{\partial y^i}{\partial x^j}(x) \right)}{\det \left(\frac{\partial x^i}{\partial x^j}(x) \right)} = \det \left(\frac{\partial y^i}{\partial x^j}(x) \right) \quad (2.52)$$

2.2.5 Levi-Civita 接続と不適合度テンソル

弾塑性理論の運動学は，Riemann 多様体を用いた連続体の運動学へ新たな状態を導入して拡張することで行われる．この拡張において，連続体の状態の記述には多様体のアフィン接続の構造を新たに追加し，連続体の状態をアフィン接続を備えた多様体，すなわち Riemann-Cartan 多様体によって記述することで，異なる状態を区別する [56]．本節ではこの動機となる連続体の適合条件式を導出

する．適合条件式は不適合度テンソルがゼロの条件で書かれるが，不適合度テンソルは Riemann 幾何における Riemann 曲率テンソルとみなすことができる [65]．この対応関係により適合条件の不成立は，その Riemann-Cartan 多様体の Riemann 曲率が非ゼロであり，多様体と同じ次元の Euclid 空間に等長的にはめ込むことができないことを表している．したがって，そのような Riemann 多様体を弾性変形の基準とすると，Euclid 空間へのはめ込みによって外力なしでもひずみ・そして応力が生じる．これを格子欠陥による内部応力場とすると，この Riemann-Cartan 多様体をいかに決定するかが，弾塑性理論において肝要となる．

いま，参照状態上の Riemann 計量 g および g_0 から，参照状態には二つの Levi-Civita 接続 $\nabla[\varphi_0]$ および $\nabla[\varphi]$ が誘導される．これらはいずれも $\varphi_0(M)$ 上のアフィン接続であり，Eq. (2.28) によって接続係数，Eq. (2.30) によって Riemann 曲率テンソルが定められる．参照状態および現状態の各点を適当な座標系を用いて記述すると，Eq. (2.45) および $g_0 = \delta_{ij} dx^i \otimes dx^j$ のように，Riemann 計量の係数が定数となることがわかる．このとき，この座標系の下では Levi-Civita 接続の接続係数は Eq. (2.28) より常にゼロとなり，したがって Eq. (2.30) より Riemann 曲率もまた常にゼロとなる．すなわち， $\nabla[\varphi_0]$ および $\nabla[\varphi]$ に関する Riemann 曲率をそれぞれ $R[\varphi_0]$ および $R[\varphi]$ と書くことにすると，これらは次の方程式を満たす．

$$\begin{aligned} R[\varphi_0] &= 0 \\ R[\varphi] &= 0 \end{aligned} \tag{2.53}$$

これらは連続体力学における適合条件式を表している [65]．多様体上の Riemann 曲率がゼロになるとき，この多様体は平坦であるといい，そのような多様体は局所的に多様体と同次元の Euclid 空間上に埋め込むことができる．すなわち上式は，参照状態 $\varphi_0(M)$ および現状態 $\varphi(M)$ が共に平坦であり，3 次元 Euclid 空間上に存在するとの仮定を反映している．

より一般的な連続体の変形においては，Riemann 曲率は必ずしもゼロとならない場合がある．例えば，2 次元開円板の半球面への変形では変形後の半球面の Riemann 曲率は非ゼロとなる．このことは，半球面が 2 次元 Euclid 空間へ等長的に埋め込むことが不可能であることを示唆している．したがって，連続体の変形がその連続体と同次元の Euclid 空間上で表すことができないとき，適合条件式は満足されない．このとき，適合条件式の残差を表す Riemann 曲率は，連続体力学の文脈では不適合度テンソルと呼ばれている^{*4}．

^{*4} Eq. (2.32) を定義する際に述べたように，Riemann 曲率テンソルよりもランクが低い Einstein テンソルを不適合度テンソルと定める場合もある [66]．

2.3 格子欠陥を含む弾塑性体の運動学

前節では連続体の状態を Riemann 計量を備えた多様体，すなわち Riemann 多様体として定式化することで，連続体の運動学を記述した．従来の Euclid 空間上の弾性理論との違いは，材料多様体 M を導入する点にあるが，参照状態 $\varphi_0(M)$ が M と微分同相である場合には，Euclid 空間上の弾性理論とほぼ同様にして，運動 ϕ によって連続体に生じる Green ひずみテンソル，および体積形式が得られることを示した．また，前節の最後には適合条件式の残差を表す不適合度テンソルが，Riemann 曲率テンソルで表されることを示した．格子欠陥を含む弾塑性体の運動学は，この不適合度テンソルと Riemann 曲率テンソルの等価性を出発点として定式化が進められる．すなわち，連続体のある状態に関する不適合度テンソルが非ゼロであるとき，その状態は連続体と同次元の Euclid 空間へ等長的に埋め込むことができないことを表すが，仮にこの連続体を変形させ，連続体と同次元の Euclid 空間へ埋め込む操作を考える．例えば，半球面を平面に押し付ける操作を行うと，幾何学的な拘束によって変形後の状態には内部応力場が生じる．したがって，不適合度テンソルが非ゼロの状態を連続体と同次元の Euclid 空間へ埋め込むと，連続体の現状態は常に内部応力場を伴う．

格子欠陥を含む連続体の運動学を記述する際には，この運動学の記述を拡張して行う．格子欠陥を含む結晶性固体には，格子欠陥の周囲でひずみと内部応力場が分布する．これは外力の負荷がない場合でも，現状態において格子欠陥の周囲に自己平衡な応力場が生じていると捉えることができる．弾塑性理論において，連続体の状態はアフィン接続を備えた Riemann 多様体，すなわち Riemann-Cartan 多様体として定式化することができる [56]．連続体の参照状態および現状態は，Riemann 多様体を用いた連続体の運動学と同様に，Euclid 空間上に存在しているとする．本論文で主として扱う転位や転位組織等の格子欠陥は，中間状態のアフィン接続 ∇ を特徴付ける振率・曲率テンソルとしてモデル化することができる．本章では，Riemann-Cartan 多様体を用いて連続体を 3 つの状態として表現するとともに，これらの多様体の微分同相性と変形勾配の乗算分解を用いることで，格子欠陥を含む連続体の運動学を表現する．

2.3.1 Riemann-Cartan 多様体による連続体の状態の定式化と Green ひずみテンソル

連続体の参照状態を $\mathcal{R}$ とし，現状態を $\mathcal{S}$ とする．また，参照状態 $\mathcal{R}$ に格子欠陥による塑性変形が生じた状態を $\mathcal{B}$ とし，これを中間状態と呼ぶ．Fig. 2.2 に示すように，参照状態は M と微分同相であり， M の 3 次元 Euclid 空間へのはめ込み φ を現状態 $\varphi(M)$ とする．いま，連続体の参照状態および現状態は，3 次元 Euclid 空間上に存在しており，これを Euclid 接続 D を備えた Riemann-Cartan 多様体 $\mathcal{R} = (\varphi_0(M), \langle \cdot, \cdot \rangle, D)$ および $\mathcal{S} = (\varphi(M), \langle \cdot, \cdot \rangle, D)$ とする．中間状態は，あるアフィン接続

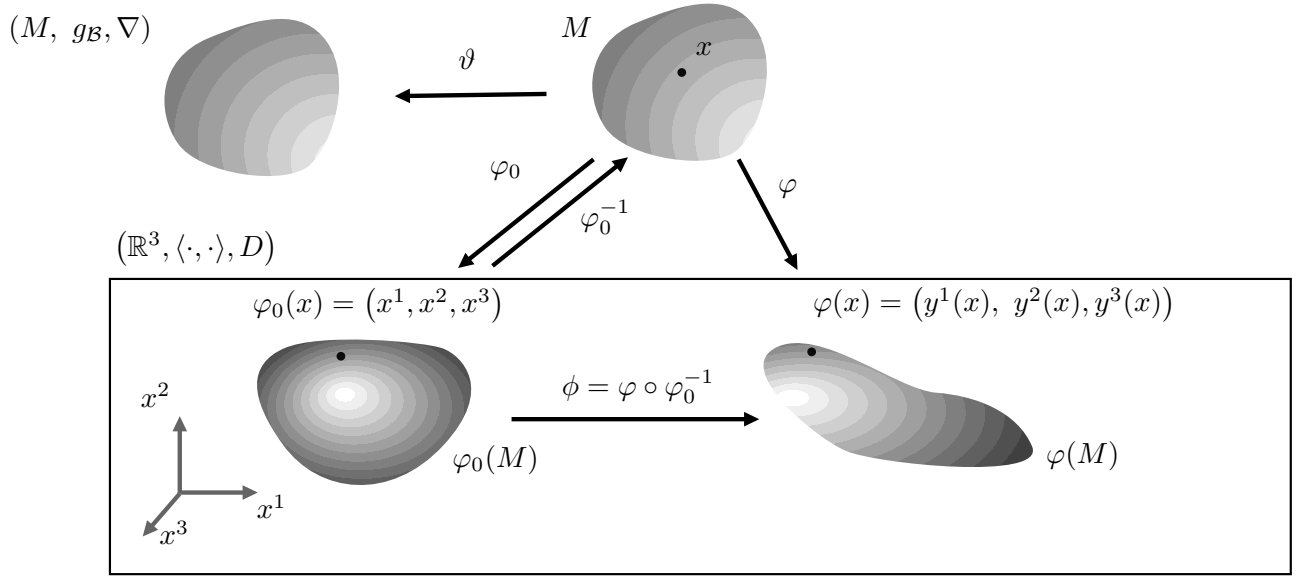


Fig. 2.2: Reference $\mathcal{R}$, intermediate $\mathcal{B}$ and current states $\mathcal{S}$ of a continuum.

∇ を備えた Riemann-Cartan 多様体 $\mathcal{B} = (M, g_B, \nabla)$ とする．Kondo らの理論に基づき，連続体に含まれる格子欠陥はこのアフィン接続の振率および曲率としてモデル化する．このとき，中間状態 $\mathcal{B}$ の Riemann 計量 g_B およびアフィン接続 ∇ は格子欠陥の空間分布を用いて決定することができる．中間状態 $\mathcal{B}$ は，これらを反映して参照状態 $\mathcal{R}$ や現状態 $\mathcal{S}$ のように必ずしも 3 次元 Euclid 空間の部分多様体とは限らず，参照状態から中間状態，そして中間状態から現状態への各点の座標の対応を陽に構成することは困難である．その一方で，中間状態も参照状態や現状態と同様に 3 次元多様体であるため，線素を用いて局所的に運動学の記述を進めることができる．

連続体の各状態の線素を，それぞれ $(dx^i) = (dx^1, \dots, dx^d)$ ， $(\vartheta^i) = (\vartheta^1, \dots, \vartheta^d)$ ，および $(dy^i) = (dy^1, \dots, dy^d)$ とおくと，これらの間には次の関係が成り立つ．

$$\vartheta^i = (F_p)_j^i dx^j \quad (2.54)$$

$$dy^i = (F_e)_j^i \vartheta^j \quad (2.55)$$

$$dy^i = F_j^i dx^j = (F_e)_k^i (F_p)_j^k dx^j \quad (2.56)$$

Eq. (2.56) 中の関係式 $F_j^i = (F_e)_k^i (F_p)_j^k$ は変形勾配が乗算分解されていることを表している [53, 67]．ここで，現状態の各点の座標は $y^i(p)$ と表される参照状態の各点の関数であることから，全変形

勾配 F の各成分 F_j^i は次のように表すことができる.

$$F_j^i = \frac{\partial y^i}{\partial x^j} \quad (2.57)$$

参照状態 $\mathcal{R}$, 中間状態 $\mathcal{B}$ および現状態 $\mathcal{S}$ の Riemann 計量 $g_{\mathcal{R}}$, $g_{\mathcal{B}}$ および $g_{\mathcal{S}}$ は, 変形勾配を用いて次のように表すことができる [65].

$$g_{\mathcal{R}} = \delta_{ij} dx^i \otimes dx^j \quad (2.58)$$

$$g_{\mathcal{B}} = \delta_{ij} \vartheta^i \otimes \vartheta^j = \delta_{ij} (F_p)_k^i (F_p)_l^j dx^k \otimes dx^l \quad (2.59)$$

$$g_{\mathcal{S}} = \delta_{ij} dy^i \otimes dy^j = \delta_{ij} (F_e)_k^i (F_e)_l^j \vartheta^k \otimes \vartheta^l = \delta_{ij} \frac{\partial y^i}{\partial x^k} \frac{\partial y^j}{\partial x^l} dx^k \otimes dx^l \quad (2.60)$$

ここで δ_{ij} は Kronecker デルタ, $\otimes$ はテンソル積を表している. また, 各式中の式変形の際には, Eq. (2.55) および Eq. (2.56) を用いた.

本節の冒頭で述べたように, 弾塑性理論では中間状態 $\mathcal{B}$ から現状態 $\mathcal{S}$ への写像を弾性変形として扱う. したがって, 剛体回転を除いた正味の弾性変形量を表す Green ひずみテンソルは, これらの状態における右 Cauchy-Green テンソル, すなわち Riemann 計量 $g_{\mathcal{B}}$ および $g_{\mathcal{S}}$ を用いて次のように表すことができる [53].

$$E = \frac{1}{2} (g_{\mathcal{S}} - g_{\mathcal{B}}) = \frac{\delta_{ij}}{2} \left((F_e)_k^i (F_e)_l^j - \delta_{kl} \right) \vartheta^k \otimes \vartheta^l = \frac{\delta_{ij}}{2} \left(F_k^i F_l^j - (F_p)_k^i (F_p)_l^j \right) dx^k \otimes dx^l \quad (2.61)$$

2.3.2 Weitzenböck 接続と振率

中間状態 $\mathcal{B}$ 上のベクトル場 $\forall X, Y \in \mathfrak{X}(\mathcal{B})$ に対して, Eq. (2.36) より定められる Weitzenböck 接続 $\nabla_{\mathcal{B}}$ を導入する [52, 64, 56].

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathcal{B}, X} Y &= (\vartheta^{-1}) (D_X \vartheta(Y)) = (\vartheta^{-1}) (D_X (\vartheta_j^i Y^j)) \\ &= X^l \frac{\partial (\vartheta^{-1})_j^i Y^j}{\partial z^l} (\vartheta^{-1}) \left(\frac{\partial}{\partial z^i} \right) \\ &= X^l \frac{\partial (\vartheta^{-1})_j^i Y^j}{\partial z^l} e_i \end{aligned} \quad (2.62)$$

ただし $(e_1, \dots, e_d)$ は $\mathcal{B}$ の正規直交枠, D は Euclid 接続であり, 第 2 式から第 3 式への式変形では, $\mathcal{B}$ のある点の周りのチャート (局所座標系) を $(U, z^1, \dots, z^d)$ にとって用いた. Eq. (2.36) に示したように, このアフィン接続は束同型 ϑ を用い積束上の自明接続を引き戻すことによって構成されている.

Eq. (2.38) に示したように, Weitzenböck 接続の振率テンソル T は一般に非ゼロで, 曲率テンソル R は常にゼロとなる [64, 68, 69]. Eq. (2.38) より, $\mathcal{B}$ 上の振率形式 τ^i は次のように表される.

$$\tau = \tau^i \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} = \frac{\partial \vartheta_j^l}{\partial z^k} (\vartheta^{-1})_l^i dz^j \wedge dz^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \quad (2.63)$$

上式に示すように, 本論文では振率形式を $\mathbb{R}^d$ 値 2 形式として扱う^{*5}. また, 曲率テンソルがゼロ ($R = 0$) になるという性質から, Weitzenböck 接続の曲率形式は常にゼロ ($\Omega_j^i = 0$) になる. これに加えて, Eq. (2.62) より Weitzenböck 接続は $\mathcal{B}$ の正規直交枠に関して次の遠隔平行性の条件を満足する.

$$\nabla_{\mathcal{B}, e_i} e_j = 0 \quad (2.64)$$

これは, この枠に関して Weitzenböck 接続 $\nabla_{\mathcal{B}}$ の接続形式がゼロ ($\omega = 0$) になることを表している. したがって, Weitzenböck 接続 $\nabla_{\mathcal{B}}$ に対する Cartan の第一構造方程式 (Eq. (2.15)) は次のように表される.

$$\tau^i \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} = d\vartheta^i \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \quad (2.65)$$

2.3.3 参照状態への引き戻し

ここでは, 中間状態 $\mathcal{B}$ 上の Cartan の第一構造方程式を, Euclid 空間の部分多様体である参照状態 $\mathcal{R}$ へ引き戻し, Euclid 空間上の外微分方程式として捉え直す.

いま, Fig. 2.2 に示したように, 参照状態 $\mathcal{R}$ と中間状態 $\mathcal{B}$ との間には, C^∞ 級微分同相写像 $\psi: \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{B}$ が存在している. これを用いると, $\mathcal{B}$ の双対枠 ϑ^i の $\mathcal{R}$ 上への引き戻しは次のようになる.

$$\psi^* \vartheta^i \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} = \psi^* (\vartheta_j^i dz^j) \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} = \vartheta_j^i \frac{\partial z^j}{\partial x^k} dx^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \quad (2.66)$$

上の関係式より, Eq. (2.54) で用いた塑性変形勾配 F_p の各成分は, 次のように ϑ_j^i と結びついている.

$$(F_p)_k^i = \vartheta_j^i \frac{\partial z^j}{\partial x^k} \quad (2.67)$$

^{*5} ここで示す振率形式 τ は $\mathcal{B}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値 2 形式である. 後述するように, 数値計算時にはこの振率形式を $\mathcal{R}$ へ引き戻すことで $\mathcal{R}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値 2 形式として扱う. $\mathcal{R}$ が d 次元 Euclid 空間の部分多様体であるとき, 振率形式は d 次元 Euclid 空間上の $\mathbb{R}^d$ 値 2 形式となり, Euclid 空間上の微分形式として簡便に扱うことができる.

また, Eq. (2.65) の左辺の振率形式 $\tau^i = T_{jk}^i dz^j \wedge dz^k$ を $\mathcal{R}$ へ引き戻すと, 次の $\mathcal{R}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値 2 形式を得る.

$$\psi^* \tau^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^k} = T_{ij}^k \frac{\partial z^i}{\partial x^m} \frac{\partial z^j}{\partial x^n} dx^m \wedge dx^n \otimes \frac{\partial}{\partial z^k} \quad (2.68)$$

同様に Eq. (2.65) の右辺は次のようになる.

$$\psi^* \left(d\vartheta^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^k} \right) = d\psi^* \left(\vartheta^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \right) = d((F_p)_i^k dx^i) \otimes \frac{\partial}{\partial z^k} \quad (2.69)$$

したがって Eq. (2.65) は次のようになる.

$$\psi^* \tau^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} = d((F_p)_i^k dx^i) \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \quad (2.70)$$

以上により, $\mathcal{B}$ 上の Cartan の第一構造方程式を $\mathcal{R}$ 上へ引き戻した外微分方程式 Eq. (2.70) を求めることができた. 上式は, $\mathcal{R}$ 上で与えられた振率形式 τ^i と塑性変形勾配 F_p の関係を定めており, 逆にこれを解くことで $\mathcal{R}$ 上の行列値関数である塑性変形勾配 F_p を決定することができる. 以降では表記の簡略化のため, 特に断らない限り $\mathcal{R}$ 上の Cartan の第一構造方程式を $\tau^i \otimes \partial/\partial z^i = d\vartheta^i \otimes \partial/\partial z^i$ と書いて用いることにする.

3 転位による塑性変形の定式化

3.1 Riemann-Cartan 多様体を用いた転位の表現

前章の議論から明らかなように、格子欠陥による塑性変形のみを含んだ中間状態 $\mathcal{B}$ は Euclid 空間 $\mathbb{R}^d$ 内には存在せず、したがって、その決定が格子欠陥の力学解析における実質的な出発点である。この際に必要となるのが、与えられた任意の転位分布に対応する塑性変形勾配 F_p である。後述するように、転位密度テンソル α は振率形式 τ^i と等価であることから、これは与えられた τ^i を積分して F_p を決定する問題として捉えることができる。

Le と Stumpf は τ^i に加えて中間状態から参照状態（または現状態）への誘導計量が既知であると仮定し、 F_p を求める方法を示している [70]。彼らの方法は、中間状態 $\mathcal{B}$ の Riemann 計量 $g_{\mathcal{B}}$ から Levi-Civita 接続の接続係数を計算し、Kontorsion の定義から Weizenböck 接続の接続係数を決定した上で、さらに Weizenböck 接続の接続係数を積分して F_p を求めるというものである。この方法は、中間状態の Riemann 計量 $g_{\mathcal{B}}$ が既知の場合にのみ適用可能であり、振率のみを既知とする立場をとる本研究の解析には適さない。そこで本研究では、Yavari と Goriely の提案した Cartan の第一構造方程式の積分を基本的な方針とする [56, 57, 58]。

まずは結晶学の立場での Burgers ベクトルの定義を確認し、それに対応させながら連続体力学の文脈で Burgers ベクトルを定義する。その後、Cartan の第一構造方程式の積分法としてホモトピー演算子を用いる方法と、変分法に基づく数値計算法の二つの方法を導入する。

3.2 結晶格子中の転位と Burgers ベクトル

微分幾何学を用いて転位と転位組織のモデル化を進めるにあたり、まず離散的な結晶格子中における転位とその Burgers ベクトルを定義する。Fig. 3.1 に、2 次元単純結晶格子中の完全結晶と刃状転位を含む不完全結晶を示す [3]。この結晶格子中では刃状転位の Burgers ベクトルは次の手順で計算される。

1. 不完全結晶 (Fig. 3.1(b)) で転位を囲う閉回路を設定する
2. 完全結晶 (Fig. 3.1(a)) で 1 の経路と対応する閉回路を設定する
3. Fig. 3.1(a) における閉回路の終点の原子と始点の原子を結ぶベクトルを Burgers ベクトルと定義する

なお、このとき Fig. 3.1 で Burgers ベクトルの計算のために導入した閉回路は Burgers 回路と呼ば

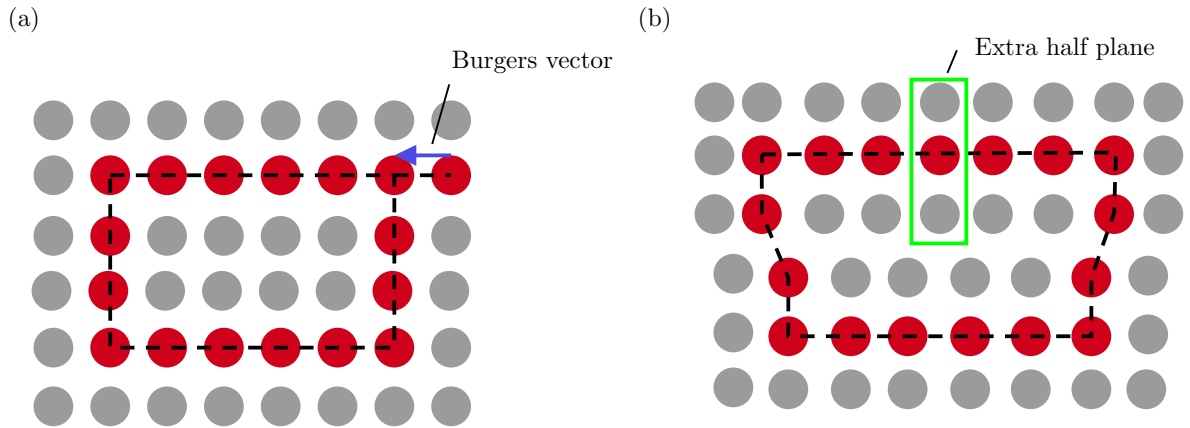


Fig. 3.1: Definition of the Burgers vector of an edge dislocation in a crystalline lattice. At first, an atom is taken in the imperfect crystal (b); here the red one at the upper right corner is chosen. Then the Burgers circuit, represented by the broken black path, is taken so as to enclose the edge dislocation. To discriminate the atoms on the Burgers circuit from the others, they are painted in red. Since an edge dislocation accompanies an extra half plane, the corresponding path of the perfect crystal, the broken black path shown in (a), fails to close. According to RH/FS(right-hand/finish-start) conversion, the closure failure defines the Burgers vector of the edge dislocation.

れている。また，Fig. 3.1 において余剰原子半面の下端が作る空間曲線は転位線と呼ばれている。これと同様の手続きにより，らせん転位や混合転位の Burgers ベクトルを決定することができる。

3.2.1 曲面を通過する曲線の本数の数え上げ

簡単のため，転位線が配置された参照状態 $\mathcal{R}$ の次元を 3 とする。Fig. 3.2 に示すように， $\mathcal{R}$ 上

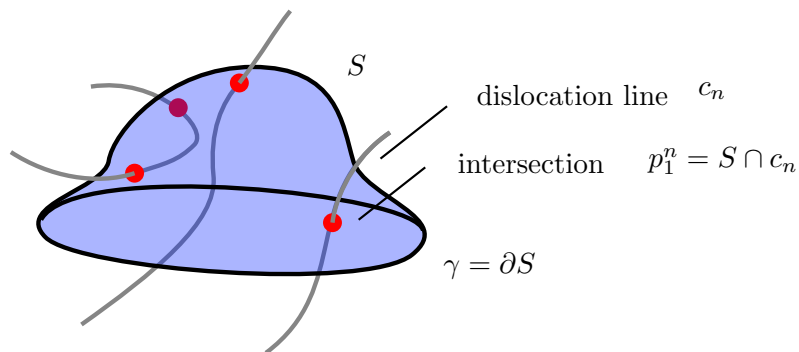


Fig. 3.2: Number of curves penetrating a surface $S \subset \mathcal{R}$.

の閉曲線を $\gamma: [0, 1] \rightarrow \mathcal{R}$ とし，その始終点を $p = \gamma(0) = \gamma(1) \in \mathcal{R}$ とする。ここで γ は写像であるが，曲線 $\gamma = \{p \in \mathcal{R} \mid p = \gamma(t), \forall t \in [0, 1]\}$ の意味でも用いる。次に，閉曲線 γ を境界とす

る $\mathcal{R}$ 中の曲面 S を考え、 $\partial S = \gamma$ とする。 $\mathcal{R}$ 上の N 本の曲線を $c_n: [0, 1] \rightarrow \mathcal{R}$, ($n = 1, \dots, N$) とする。ここで、各 c_n は転位線を表しており、閉曲線であるか、または端点が $\partial \mathcal{R}$ 上に位置している曲線とする。 $t \in [0, 1]$ に対応する曲線 c_n 上の点を $p = c_n(t)$ とおく。この点 p における c_n の接ベクトルは $\dot{c}_n(t) \in T_{c_n(t)} \mathcal{R}$ と表される。曲線 c_n の接ベクトル $\dot{c}_n(t)$ は、この曲線の速度ベクトルと呼ばれている [71]。この速度ベクトルの大きさは、 $\mathcal{R}$ の Riemann 計量 $g_{\mathcal{R}}$ を用いて $|\dot{c}_n(t)| = \sqrt{g_{\mathcal{R},p}(\dot{c}_n(t), \dot{c}_n(t))}$ と表される。ここでは、各 c_n は $|\dot{c}_n(t)| = 1$ となるようにパラメトライズされていると仮定する。以上の設定の下で、 S を通過する曲線の正味の本数 $b[S]$ を求める。

ここでは、転位線 c_n が S と交わっている m_n 個の点 $p_{k_n} \in S$, ($k = 1, \dots, m_n$) およびこれに対応する曲線のパラメーター $t_{k_n} = c_n^{-1}(p_{k_n})$ は既知であるものとして解析を進める。 S 上の点 p_{k_n} における S の単位法線ベクトルを $s_{p_{k_n}} \in T_{p_{k_n}} \mathcal{R}$ とおく。点 p_{k_n} における $\dot{c}_n(t_{k_n})$ と、法線ベクトル $s_{p_{k_n}}$ の内積を $b_{p_{k_n}}$ とおくと、これは $\mathcal{R}$ の Riemann 計量 g を用いて次のように表される。

$$b_{p_{k_n}} = g_{p_{k_n}}(\dot{c}_n(t_{k_n}), s_{p_{k_n}}) \quad (3.1)$$

これより、次式を用いて曲面 S を貫く転位線 c_n の数を数え上げることができる。

$$b[S] = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^{m_n} b_{p_{k_n}} = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^{m_n} g_{p_{k_n}}(\dot{c}_n(t_{k_n}), s_{p_{k_n}}) \quad (3.2)$$

このように、各転位線 c_n と曲面 S の交点 $p_{k_n} \in S$, ($k = 1, \dots, m_n$) が既知であれば、Eq. (3.2) を用いて曲面 S を貫く転位線の正味の本数が決まるが、このような点を全て求めるには煩雑な操作が必要になる。これに対して、各 c_n に対する S 上の関数 $f_n: S \rightarrow \mathbb{R}$ を導入し、これらの曲面 S 上の積分の総和が Eq. (3.2) と一致するようにすれば、 $b[S]$ を容易に計算することが可能になる。このとき、 f_n の最も単純な構成方法としては、 f_n は転位線 c_n 上で値をもち、それ以外の場合にはゼロとする場合が考えられる。このような性質を満たす関数 f_n^δ を次のようにおく。

$$\begin{aligned} f_n^\delta(q) &= \delta(d(q, c_n)) \\ d(q, c_n) &= \min \left\{ \int_{b'}^{a'} |\dot{c}'| dt', \quad c'(a') = q, c'(b') = c_n(t'), \forall t' \in [a, b] \right\} \end{aligned} \quad (3.3)$$

ここで δ は S 上の Dirac デルタである。関数 $d: \mathcal{R} \times \mathcal{R} \rightarrow \mathbb{R}$ は距離の公理を満たす $\mathcal{R}$ 上の距離関数であり、 S 上の任意の点 q に対して、転位線 c_n 上の最も近い点との距離を返す関数である。この定義を用いれば、Eq. (3.2) は次のように S 上の積分として与えることができる。

$$b^\delta[S] = \int_S \sum_{n=1}^N g(\dot{c}_n, q) f_n^\delta(q) v_S = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^{m_n} b_{p_{k_n}} \quad (3.4)$$

ここで v_S は曲面 S の体積形式である。

3.2.2 連続分布転位論を用いた転位の表現

前節のように, Dirac デルタを用いることで曲面 S と交わる転位線 c_n の本数 $b[S]$ を, S と c_n の交点を求めることなく直接計算できることが明らかとなった. ここではこの考え方を拡張し, 転位線 c_n の近傍に分布する転位の密度を連続関数 F を用いて次のように定義する.

$$f_n(p) = F(d(p, c_n)) \quad (3.5)$$

これ以降, 本論文では f_n を転位密度関数と呼ぶ. f_n は転位線 c_n によって生じる転位密度の空間分布を表している. このとき, 曲面 S を貫く転位線 c_n の数は次のように表すことができる.

$$b[S] = \int_S \sum_{n=1}^N g(\dot{c}_n, p) f_n(p) v_S = \sum_{n=1}^N \int_S g(\dot{c}_n, p) f_n(p) v_S \quad (3.6)$$

ここで, Eq. (3.4) で表された $b^\delta[S]$ は整数値を取るのに対して, Eq. (3.6) の $b[S]$ は関数 F の性質に依存しており, 一般に整数値とはならない.

いま転位線 c_n の Burgers ベクトルを, $\mathbb{R}^3$ の直交座標系に関する基底ベクトル $(\partial/\partial x^1, \partial/\partial x^2, \partial/\partial x^3)$ を用いて $b_n = b_n^i \partial/\partial x^i$ とする. これを用いて $\mathcal{R}$ 上の各点 p における 2 形式 $(\tau^1(p), \dots, \tau^d(p))$ を次のようにおく.

$$\tau^i(p) = \sum_{n=1}^N g(\dot{c}_n, p) f_n(p) v_S \otimes b_n = \sum_{n=1}^N b_n^i g(\dot{c}_n, p) f_n(p) v_S \quad (3.7)$$

τ^i の係数 $b_n^i g(\dot{c}_n, p) f_n(p)$ は, 各点 p における転位線 c_n の本数に Burgers ベクトルの成分 b_n^i をかけた値である. すなわち, τ^i は, この点における Burgers ベクトルの密度を表し, $\mathcal{R}$ 上の 2 形式 τ^i は転位密度を表している. 実際に, 連続分布転位論における Nye の転位密度テンソル $\alpha = b \otimes l$ と上式は次のように Hodge 双対の関係にある [44, 56].

$$\tau = *\alpha \quad (3.8)$$

以上より, 転位線 c_n とその Burgers ベクトル b が与えられたとき, Eq. (2.68) で導いた参照状態 $\mathcal{R}$ 上の転位密度を表す 2 形式 τ^i は Eq. (3.7) を用いて計算することができる.

3.2.3 連続分布転位の Burgers ベクトル

前節で構成した S 上の連続分布曲線の個数 Eq. (3.6) の定義を利用して, Burgers ベクトルを定義する. まず, Eq. (3.6) は次のように書ける.

$$b^i[S] = \int_S \tau^i \quad (3.9)$$

$b^i[S]$ は S を貫く曲線 c_n の $b^i f_n$ を合計した量であることがわかる. b^i を Burgers ベクトルの各方向への大きさ, $b^i[S]$ は曲面 S に関する Burgers ベクトルである. 被積分関数の τ^i は Eq. (2.68) で定義した $\mathcal{R}$ 上の 2 形式である. Eq. (2.70) より, Cartan の第一構造方程式は $\tau^i = d\vartheta^i$ となる. Eq. (3.6) と Stokes の定理 [60], および $\partial S = \gamma$ を用いれば Eq. (3.9) は次のように変形できる.

$$b^i[S] = \int_S \tau^i = \int_S d\vartheta^i = \int_{\partial S} \vartheta^i = \int_{\gamma} \vartheta^i \quad (3.10)$$

この結果から, Burgers ベクトル $b^i[S]$ は曲面 S には依らず, その境界 $\partial S = \gamma$ のみに依存することがわかる. この意味で, 以降では Burgers ベクトルを $b^i[\gamma]$ と書くことにする. これは, 閉曲線 γ に囲まれる領域を通過する転位の Burgers ベクトルの総和を表している.

3.2.4 転位線の転位密度テンソルの数値計算

転位線 $C \subset \mathcal{R}$ を C^∞ 級曲線とし, C 上の任意の点を C^∞ 級写像 $c: [0, 1] \rightarrow \mathcal{R}$ により表す. $p \in \mathcal{R}$ での振率形式の値 $\tau_p^i = T_{jk}^i(p) dx^j \wedge dx^k$ を, C , Burgers ベクトルの大きさ $b = (b^1, b^2, b^3)$, および Eq. (3.3) で定義した曲線 C に関する転位密度関数 $f_C(p)$ を用いて次のように表現する.

$$\tau_p^i = T_{jk}^i(p) dx^j \wedge dx^k$$

$$T_{jk}^i(p) = \begin{cases} b^i f_C(|p - p'|) \left\langle \frac{\dot{c}(c^{-1}(p'))}{|\dot{c}(c^{-1}(p'))|}, \epsilon_{jk}^l e_l \right\rangle_{\mathbb{R}^3} & \text{if } p' \in \mathcal{R} \text{ exists.} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.11)$$

ここで $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^3}$ は $\mathbb{R}^3$ の Euclid 内積, $\dot{c}$ は C の速度ベクトル, $p' \in \mathcal{R}$ は $\dot{c}(c^{-1}(p')) \cdot (p' - p) = 0$ を満たす C 上の点である. この条件は, $p' \in C$ がベクトル $\dot{c}(c^{-1}(p'))$, および $p' - p$ が直交するように決められていることを意味している. 式中の $|p - p'|$ は $\mathcal{R}$ 上の 2 点 p, p' の間の距離を表し, p における転位の分布関数の値 $f_C(|p - p'|)$ は C の接ベクトルを法線とする平面上において, 距離 $|p - p'|$ によって決めていることになる. また, $\left\langle \frac{\dot{c}(c^{-1}(p'))}{|\dot{c}(c^{-1}(p'))|}, \epsilon_{jk}^l e_l \right\rangle_{\mathbb{R}^3}$ は点 $c^{-1}(p') \in [0, 1]$ における転位線の単位接ベクトル $\dot{c}(c^{-1}(p'))/|\dot{c}(c^{-1}(p'))|$ と平面 $x^l = 0$ の単位法線ベクトル $\epsilon_{jk}^l e_l$ の内積を表している. 条件 $p' \in \mathcal{R}$ は $\dot{c}$ を法線とする平面を全て集めた集合 $\mathcal{R}' \subset \mathbb{R}^3$ と, $\mathcal{R}$ の共通部分

$\mathcal{R}' \cap \mathcal{R}$ に p' が含まれるか否かで判定することができる^{*6}.

数値計算の実行にあたり、各点 $p \in \mathcal{R}$ での振率形式の係数 $T_{jk}^i(p)$ を Eq. (3.11) を用いて計算するためには、 $\dot{c}(c^{-1}(p')) \cdot (p' - p) = 0$ を満たすように C 上の点 $p' = c(t^*)$ を決める必要がある。この問題は次の最適化問題として書き換えることができる。

$$\begin{aligned} \text{Minimize} \quad & J = \frac{1}{2} \delta_{ij} (c^i(t) - p^i)(c^j(t) - p^j) \\ \text{subject to} \quad & t \in [0, 1] \end{aligned} \quad (3.12)$$

実際、目的関数 J の t に関する停留条件は次のように計算される。

$$\frac{dJ}{dt} = \delta_{ij} \frac{dc^i}{dt} (c^j(t) - p^j) = 0 \quad (3.13)$$

これより $t^* \in [0, 1]$ は Eq. (3.12) の解として与えられることがわかる。一般に c は t に関する非線形関数となるので Eq. (3.13) は t に関する非線形方程式となる。

本研究では、Newton 法により $dJ/dt = 0$ を t に関して解くことで t^* を数値計算する。 i 反復目の t^* の近似値を $t^{(i)}$ 、 i 反復目の Eq. (3.13) の残差を $dJ/dt(t^{(i)})$ とおく。Newton 法では t の増分 $\Delta t^{(i)}$ を、 $t = t^{(i)}$ の周りでの残差 $dJ/dt(t^{(i)})$ の 1 次の Taylor 展開を用いて決定する。すなわち

$$\frac{dJ}{dt}(t^{(i)} + \Delta t^{(i)}) \simeq \frac{dJ}{dt}(t^{(i)}) + \Delta t^{(i)} \frac{d^2 J}{dt^2}(t^{(i)}) = 0 \quad (3.14)$$

より

$$\begin{aligned} \Delta t^{(i)} &= - \frac{dJ}{dt}(t^{(i)}) \bigg/ \frac{d^2 J}{dt^2}(t^{(i)}) \\ t^{(i+1)} &= t^{(i)} + \Delta t^{(i)} \end{aligned} \quad (3.15)$$

によって $i + 1$ 反復目の t^* の近似値 $t^{(i+1)}$ を計算する。この操作をある $\varepsilon > 0$ に対して $|dJ/dt(t^{(i)})| < \varepsilon$ を満たすまで繰り返すことにより、 t^* の近似値を求めるができる。

3.3 ホモトピー演算子を用いた Cartan の第一構造方程式の解法

Sec.2.3.3 で見たように、中間状態 $\mathcal{B}$ 上の Cartan の第一構造方程式は参照状態 $\mathcal{R}$ へ引き戻すことができ、 $\mathcal{R}$ 上の外微分方程式とみなすことができる。本節では、この外微分方程式を $\mathfrak{g}^i$ に関して解く方法の一つとしてホモトピー演算子を導入する。これにより、この方程式の一般解を解析的に導出

^{*6} 例えば辺の長さが 2 の立方体を $\mathcal{R}$ 、曲率半径が 1 よりも小さい円弧を C とし、端点が辺上になければ必ず $\mathcal{R}' \cap \mathcal{R} \neq \emptyset$ となる。すなわちある p に対して $p' = c(t^*)$ となる t^* が存在しない場合がある。Eq. (3.11) の場合分けはこのような存在しない解を探索しないための制限を与えている。

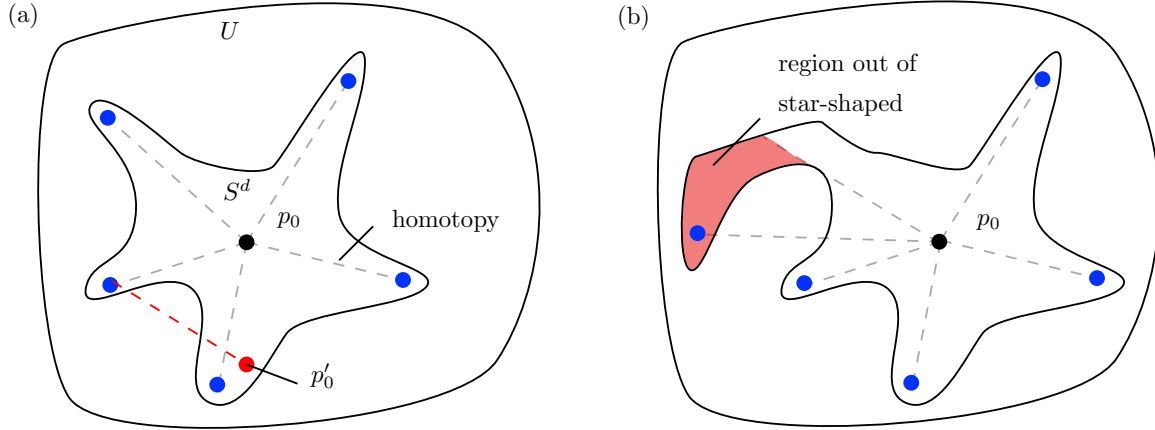


Fig. 3.3: Definition of the star-shaped domain $S_{p_0} \subset U$. In (a), since the straight line homotopy $h_{p_0}(p, \lambda)$, which is dashed grey lines, for all points in S_{p_0} are also contained in S_{p_0} , then S_{p_0} is the star-shape. However, if p'_0 is taken as the center of the homotopy, then the points on $h(p'_0)$ is not always contained in S_{p_0} as illustrated by the dashed red line. In (b), since $h_{p_0}(p, \lambda)$ is out of the original region for the points in the region colored by red, it is not a star-shaped domain.

する.

3.3.1 ホモトピー演算子の定義

Euclid 空間上の星状領域を次のように定義する [72, 73].

Definition 4 (直線ホモトピー). U を d 次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^d$ の開集合とする. U 上のある点を p_0 とし, p_0 を中心とするチャートを $(U, x^1, \dots, x^d)$ とおく. また任意の $p \in U$ をとり, p_0 と p の座標の各成分をそれぞれ $p_0^i = x^i(p_0)$, $p^i = x^i(p)$ と表す. p_0 を始点とする直線ホモトピーとは次のように定義される C^∞ 級写像 $h_{p_0}: U \times (0, 1) \rightarrow U$ である.

$$h_{p_0}(p, \lambda) = (1 - \lambda)p_0^i + \lambda p^i, \quad \lambda \in (0, 1) \quad (3.16)$$

定義より明らかのように, h_{p_0} は p_0 を始点, p を終点とする S_{p_0} 上の直線である. 星状領域はこの直線ホモトピーを用いて次のように定義される.

Definition 5 (星状領域). ある $p_0 \in U$ を含む U 上の開部分集合 S_{p_0} をとる. 任意の $p \in U$, $\lambda \in (0, 1)$ に対して直線ホモトピー上の点が S_{p_0} に含まれる, すなわち $h_{p_0}(p, \lambda) \in S_{p_0}$ を満たすとき, S_{p_0} は $p_0 \in S_{p_0}$ を中心とする星状領域という.

星状領域の例を Fig. 3.3 に図示した．図より明らかに，ある S_{p_0} が星状領域か否かは，中心 p_0 の選び方に依存する．ホモトピー演算子はある星状領域上に定義される次の写像である．

Definition 6 (p_0 を中心としたホモトピー演算子)． ω を U 上の k 形式とし， S_{p_0} を $p_0 \in U$ を中心とした星状領域とする． ω の S_{p_0} への制限を $\omega|_{S_{p_0}}$ とおき， $X = (x^i - p_0^i) \partial / \partial x^i$ を S_{p_0} 上のベクトル場とする． p_0 を中心としたホモトピー演算子は $H_{p_0} : \Omega^k(S_{p_0}) \rightarrow \Omega^{k-1}(S_{p_0})$ なる次の関係を満たす写像である．

$$H_{p_0}\omega := \left\langle X, \left(\int_0^1 h_{p_0,\lambda}^*(\omega|_{S_{p_0}}) \frac{1}{\lambda} d\lambda \right) \right\rangle \quad (3.17)$$

ここで $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathfrak{X}(S_{p_0}) \times \Omega^k(S_{p_0}) \rightarrow \Omega^{k-1}(S_{p_0})$ は微分形式とベクトル場の間の自然な積， $h_{p_0,\lambda}^* : \Omega^k(S_{p_0}) \rightarrow \Omega^k(S_{p_0})$ は p_0 を始点とした直線ホモトピーによる引き戻しである．

以下にホモトピー演算子を持ついくつかの性質を示す [73]．

Theorem 7. $\forall \omega \in \Omega^k(U)$ を U 上の k 形式とし， $S_{p_0} \subset U$ を $p_0 \in U$ を中心とした星状領域とする． p_0 を中心としたホモトピー演算子 H_{p_0} は次を満たす．

1. H_{p_0} は星状領域 S_{p_0} 上の線形写像である．
2. $k \geq 1$ のとき $H_{p_0} : \Omega^k(S_{p_0}) \rightarrow \Omega^{k-1}(S_{p_0})$ ， $k = 0$ のとき， $\forall f \in \Omega^0(S_{p_0})$ に対して $H_{p_0}f \equiv 0$ となる．
3. $k \geq 1$ のとき $dH_{p_0} + H_{p_0}d = \text{id}_{\Omega^k(S_{p_0})}$ ， $k = 0$ のとき $(dH_{p_0} + H_{p_0}d)(f) = H_{p_0}d(f) = f(p) - f(p_0)$ ，ただし $\text{id}_{\Omega^k(S_{p_0})}$ は $\Omega^k(S_{p_0})$ 上の恒等写像を表す．
4. $(H_{p_0}H_{p_0}\omega)(p) \equiv 0$ および $(H_{p_0}\omega)(p_0) \equiv 0$
5. $H_{p_0}dH_{p_0} = H_{p_0}$ および $dH_{p_0}d = d$

定理 7 の性質はいずれも，ホモトピー演算子 H_{p_0} が S_{p_0} 上で外微分 $d : \Omega^k(S_{p_0}) \rightarrow \Omega^{k+1}(S_{p_0})$ に対する逆であることを表している．3 つ目の性質から $\omega|_{S_{p_0}} \in \Omega^k(S_{p_0})$ ， $(k \geq 1)$ は次のように書くことができる．

$$\omega|_{S_{p_0}} = dH_{p_0}\omega|_{S_{p_0}} + H_{p_0}d\omega|_{S_{p_0}} \quad (3.18)$$

これより ω が閉形式であれば $d\omega|_{S_{p_0}} = 0$ より $\omega|_{S_{p_0}} = dH_{p_0}\omega|_{S_{p_0}}$ を得る．そこで， S_{p_0} 上で $\eta = H_{p_0}\omega|_{S_{p_0}}$ とおけば $\omega|_{S_{p_0}} = d\eta$ と表すことができる．

3.3.2 Cartan の第一構造方程式の一般解の導出

$\omega \in \Omega^k(M)$ を M 上の閉 k 形式 ($k \geq 1$) とすると, $d\omega = 0$ が成り立つ. もし ω が完全形式であれば $\omega = d\eta$ となる M 上の $k-1$ 形式が存在する. このとき $d\omega = dd\eta = 0$ が成り立ち, 完全形式は閉形式でもあることが分かる. 一般にこの逆は成り立たず, 閉形式は完全形式とは限らない. その一方, Poincaré の補題は閉形式が定義される領域を Euclid 空間のある部分集合に制限すれば, 閉形式は常に完全形式になることを主張するものである. この補題の証明の過程でホモトピー演算子が用いられる [54, 73, 63]. すなわち, 任意の閉 k 形式 ω にホモトピー演算子を作用させて $\omega = d\eta$ を満たす η を計算されることで, 補題の証明が行われるている.

これを Eq. (2.70) に適用して ϑ^i を計算していく. なお, 簡単のため以下では $\mathcal{R}$ を p_0 を中心とする星状領域と仮定する. $\mathcal{R}$ 上の 1 形式 ϑ^i は次のように表すことができる.

$$\vartheta^i = dH_{p_0}\vartheta^i + H_{p_0}d\vartheta^i \quad (3.19)$$

ここで Eq. (2.70) より右辺第二項は $H_{p_0}d\vartheta^i = H_{p_0}\tau^i$ となる. また, $\mathcal{R}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値関数 $\psi = (\psi^1, \dots, \psi^d): \mathcal{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ を用いて $H_{p_0}\vartheta^i = \psi^i$ とおくと上式は次のようになる.

$$\vartheta^i = d\psi^i + H_{p_0}\tau^i \quad (3.20)$$

この ϑ^i は, ある τ^i に対する Cartan の第一構造方程式 (Eq. (2.70)) の一般解となっている.

3.4 変分法を用いた Cartan の第一構造方程式の解法

前節では, $\mathcal{R}$ 上で適当な中心点をもつ星状領域をとれば, ホモトピー演算子を用いてこの外微分方程式の解が得られることが明らかとなった. ところが, この方法には次の点で問題がある.

- $\mathcal{R}$ 上のある点を中心とした星状領域でのみ有効であるが, $\mathcal{R}$ を一つの星状領域で覆うことができない場合には, それを被覆するいくつかの星状領域に分けて計算する必要がある.
- 複数の転位を対象とする場合には, 星状領域の中心点と転位線の中心を一致させることができない. この結果, Cartan の第一構造方程式の一般解を解析的に表すことが困難になる.
- ホモトピー演算子によって得られる Cartan の第一構造方程式の一般解には境界条件が考慮されていない.

本節ではこうした問題を解決するために, 任意個数の転位が含まれる問題で, $\mathcal{R}$ 上の外微分方程式の解を数値的に計算する手法を示す.

3.4.1 Cartan の第一構造方程式の残差ノルム最小化問題の定式化

Eq. (2.70) に示す $\mathcal{R}$ 上の Cartan の第一構造方程式 ($\tau^i = d\vartheta^i$) は $\mathcal{R}$ 上の振率形式 τ^i と双対枠 ϑ^i に関する外微分方程式である。これらは、 $\mathcal{R}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値 2 形式 $\tau^i \otimes \partial/\partial z^i = T_{jk}^i dx^j \wedge dx^k \otimes \partial/\partial z^i$ および $\mathbb{R}^d$ 値 1 形式 $\vartheta^i \otimes \partial/\partial z^i = (F_p)^i_j dx^j \otimes \partial/\partial z^i$ を係数として持ち、Euclid 空間 $\mathbb{R}^d$ の基底 $(\partial/\partial z^1, \partial/\partial z^2, \partial/\partial z^3)$ との線型結合で表されている。ここでは多様体 M 上でベクトル空間 V に値をとる k 形式 $\Omega^k(M)$ 、すなわち V 値 k 形式全体を集めた集合を $\Omega(M, V)$ と書くことにする [74]。これより、本節では $\mathbb{R}^d$ 値微分形式として捉えた振率形式および双対枠をそれぞれ次のように書いて用いることにする。

$$\tau = \tau^i \frac{\partial}{\partial x^i} \quad (3.21)$$

$$\vartheta = \vartheta^i \otimes \frac{\partial}{\partial x^i} \quad (3.22)$$

以下では、Cartan の第一構造方程式を $\mathcal{R}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値 2 形式の方程式と捉え、そこに適切なノルムをいれることによって、変分問題として定式化する。

まずはじめに、 ϑ に Helmholtz 分解を適用する [68, 69, 74]。この準備段階として、Helmholtz 分解で用いられる参照状態 $\mathcal{R}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値 1 形式の集合 $\Omega^1(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ 上にノルムを構成する。 $T_p^* \mathcal{R}$ を $\mathcal{R}$ 上の点 p における余接空間とし、 $\Lambda^k(T_p^* \mathcal{R})$ をこの余接空間 $T_p^* \mathcal{R}$ から構成される k 次反対称テンソルの全体がなす空間とする。 $\mathcal{R}$ は Euclid 空間の部分多様体とみなせるから、Euclid 計量を用いて $\mathcal{R}$ 上の各点 p に k 次反対称テンソルの内積 $\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle_p : \Lambda^k(T_p^* \mathcal{R}) \times \Lambda^k(T_p^* \mathcal{R}) \rightarrow \mathbb{R}$ が導入される。すなわち、 $\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle_p$ は $\forall \omega'_p, \eta'_p \in \Lambda^k(T_p^* \mathcal{R})$ に対して次のように定義される。

$$\langle\langle \omega'_p, \eta'_p \rangle\rangle_p := *(\omega'_p \wedge * \eta'_p) \quad (3.23)$$

ただし、 $*$ は $\mathcal{R}$ の Euclid 計量から定まる Hodge の星印作用素 $* : \Lambda^{k+1}(T_p^* \mathcal{R}) \rightarrow \Lambda^k(T_p^* \mathcal{R})$ である [60]。 $\mathcal{R}$ 上の任意の k 形式 $\omega', \eta' \in \Omega^k(\mathcal{R})$ に対して、各点 p にこの内積を割り当てる対応 $p \mapsto \langle\langle \omega', \eta' \rangle\rangle_p$ は $\mathcal{R}$ 上の C^∞ 級関数となる。したがって、 $\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle_{\mathcal{R}}$ は積束 $\mathcal{R} \times \Omega^k(\mathcal{R})$ のファイバー計量とみなすことできる [61, 75, 76]。

次に、この定義を $\mathcal{R}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値 k 次反対称テンソルに対して拡張する。 $\Lambda^k(T_p^* \mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ を $\mathbb{R}^d$ 値 k 次反対称テンソルのなす空間とする。 k 次反対称テンソルの内積 $\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle$ と同様にして、各点 p での $\mathbb{R}^3$ 値 k 次反対称テンソルの内積を、 $\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle_p$ と $\mathbb{R}^3$ の内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^d}$ を用いて次のように構成する。

$$\langle \omega_p, \eta_p \rangle_p := \left\langle \langle\langle \omega_p, \eta_p \rangle\rangle_p \right\rangle_{\mathbb{R}^d}, \quad \omega, \eta \in \Lambda^k(T_p^* \mathcal{R}, \mathbb{R}^d) \quad (3.24)$$

$\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle_{\mathcal{R}}$ と同様に $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{R}}$ は積束 $\mathcal{R} \times \Omega^k(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ のファイバー計量とみなすことができる. このファイバー計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{R}}$ を用いれば, $\Omega^k(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ に次のノルムを導入することができる.

$$(\omega, \eta) := \int_{\mathcal{R}} \langle \omega, \eta \rangle_{\mathcal{R}} \nu_{\mathcal{R}} \quad (3.25)$$

このノルムを用いると, $\mathcal{R}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値 1 形式の集合 $\Omega^1(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ は, 次に示すように直和分解される. これは Helmholtz 分解と呼ばれている [74, 68, 69].

Theorem 8 (Helmholtz 分解). $\mathcal{R}$ をコンパクトで向きづけられた境界付き d 次元 Riemann 多様体 (M, g) とする. ここで, g は M 上の Riemann 計量である. $\mathcal{R}$ 上の任意の $\mathbb{R}^d$ 値 1 形式 $\forall \omega \in \Omega^1(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ に対して, ノルム Eq. (3.25) に関する次の直和分解が存在する.

$$\Omega^1(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d) = dC^\infty(\mathcal{R}) \oplus \mathcal{D}(\mathcal{R}) \quad (3.26)$$

ここで, $dC^\infty(\mathcal{R})$ および $\mathcal{D}(\mathcal{R})$ はそれぞれ次のように定義される完全形式および双対完全形式全体のなす空間である.

$$\begin{aligned} dC^\infty(\mathcal{R}) &:= \{ \omega \in \Omega^1(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d) \mid d\omega = 0 \} \\ \mathcal{D}(\mathcal{R}) &:= \{ \omega \in \Omega^1(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d) \mid \delta\omega = 0, \omega(N) = 0 \} \end{aligned} \quad (3.27)$$

ただし $\delta: \Omega^k(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d) \rightarrow \Omega^{3-k}(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ は $\delta = *d*$ と定義される余微分である.

Helmholtz 分解により, Eq. (3.25) のノルム $(\cdot, \cdot)$ に関して, $\mathcal{R}$ 上の任意の $\mathbb{R}^d$ 値 1 形式の直交分解が一意的に与えられる. すなわち, ϑ は次のように一意的に表すことができる.

$$\vartheta = d\psi + \Theta, \quad \psi \in C^\infty(\mathcal{R}), \quad \Theta \in \mathcal{D}(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d) \quad (3.28)$$

上式は Eq. (3.25) のノルム $(\cdot, \cdot)$ に関する直和分解であり, $(d\psi, \Theta) \equiv 0$ となる. いま, ϑ の外微分をとると, 上式より $d\vartheta = d\Theta$ となり, Cartan の第一構造方程式は $\tau = d\vartheta = d\Theta$ と表される. すなわち, Cartan の第一構造方程式は振率形式 τ が双対完全形式 $\Theta \in \mathcal{D}(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ の外微分によって表されることを示している. なお本論文では, Cartan の第一構造方程式に直接影響しない完全形式 $d\psi$ について, 振率形式がゼロのときに中間状態 $\mathcal{B}$ が参照状態 $\mathcal{R}$ と一致するという仮定をおくことで, $d\psi = dx^i \otimes \partial/\partial z^i$ とおいて用いた.

続いて Eq. (3.25) を用いて Eq. (2.70) で表される Cartan の第一構造方程式の残差ノルム $\mathcal{G}$ を

次のように定義する.

$$\mathcal{G} := \frac{1}{2} (\tau - d\Theta, \tau - d\Theta) \quad (3.29)$$

$(\cdot, \cdot)$ は $\mathcal{G} \geq 0$ を満たすノルムであるから, $\mathcal{G} = 0$ となるための必要十分条件として $\tau - d\Theta = 0$ が与えられることがわかる. したがって $\mathcal{G}$ を最小化する Θ は Cartan の第一構造方程式 $\tau - d\Theta = 0$ を自動的に満足するため, $\mathcal{G}$ の最小化問題を解くことにより Θ を決定することができる.

ここで Helmholtz 分解により Θ は双対完全形式となるため, このことを表す拘束条件を課す必要がある. Eq. (3.27) より, $\mathcal{R}$ 上の双対完全形式 Θ は次の条件を満足する $\mathbb{R}^d$ 値 1 形式である.

$$\delta\Theta = 0 \quad (3.30)$$

$$\Theta|_{\partial\mathcal{R}}(N) = 0 \quad (3.31)$$

ここで N は, 参照状態 $\mathcal{R}$ の境界 $\partial\mathcal{R}$ で単位法線ベクトルを与える法線ベクトル場である. Eq. (3.30) を $\mathcal{G}$ の最小化問題の拘束条件として導入するには, Lagrange の未定乗数法を適用すれば良い. この際, 本研究では数値解析の安定化を測る目的で未定乗数の二乗を加える. すなわち, $\mathcal{R}$ 上の $\mathbb{R}^d$ 値関数 $\lambda \in C^\infty(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ と Euclid 計量を用いて次の汎関数を定義する.

$$\mathcal{L} := \int_{\mathcal{R}} \left(\langle \lambda, \delta\Theta \rangle_{\mathbb{R}^d} + \frac{\gamma}{2} \langle \lambda, \lambda \rangle_{\mathbb{R}^d} \right) v_{\mathcal{R}} \quad (3.32)$$

ここで γ は安定化の度合いを決める実数値である. Eq. (3.31) は, $\mathcal{R}$ の境界における Θ の各成分を固定する Dirichlet 境界条件として課される.

以上より, 与えられた振率形式 τ に対して, Cartan の第一構造方程式を満足する $\Theta \in \mathcal{D}(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ は次の最適化問題を解くことで得られる.

$$\text{Minimize } \mathcal{G} + \mathcal{L} \quad (3.33)$$

$$\text{subject to } \Theta|_{\partial\mathcal{R}}(N) = 0 \quad (3.34)$$

3.4.2 拘束条件つき最適化問題の局所座標表示

以下では、次節で行う離散化の準備として Eq. (3.33) の局所座標表示を求めておく． τ 、 Θ および $d\Theta$ の局所座標表示は次のようになる．

$$\tau = \sum_{j < k} T_{jk}^i dx^j \wedge dx^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \quad (3.35)$$

$$\Theta = (F_p)_j^i dx^j \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} d\Theta &= \frac{\partial(F_p)_j^i}{\partial x^k} dx^k \wedge dx^j \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \\ &= \sum_{j < k} \left(\frac{\partial(F_p)_k^i}{\partial x^j} - \frac{\partial(F_p)_j^i}{\partial x^k} \right) dx^j \wedge dx^k \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \end{aligned} \quad (3.37)$$

上式より Θ は行列値関数 $F_p: \mathcal{R} \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ の各係数の線型結合により表されるため、以降では F_p を未知数とする最適化問題を解くことにする．ここで簡単のため、 $c \in \Omega^2(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d)$ を次のようにおく．

$$c = \tau - d\Theta \quad (3.38)$$

$$c_{jk}^i = T_{jk}^i - \left(\frac{\partial(F_p)_k^i}{\partial x^j} - \frac{\partial(F_p)_j^i}{\partial x^k} \right) \quad (3.39)$$

Eq. (3.25) は c を用いて次のように表される．

$$\begin{aligned} \langle c, c \rangle_{\mathcal{R}} &= \langle \langle c, c \rangle \rangle_{\mathcal{R}}_{\mathbb{R}^3} \\ &= \langle * (c \wedge *c) \rangle_{\mathbb{R}^3} \end{aligned} \quad (3.40)$$

ここで $*c$ は次のように局所座標表示できる．

$$\begin{aligned} *c &= * \left(c_{mn}^l dx^m \wedge dx^n \otimes \frac{\partial}{\partial z^l} \right) = c_{mn}^l * (dx^m \wedge dx^n) \otimes \frac{\partial}{\partial z^l} \\ &= c_{mn}^l \operatorname{sgn}(I, J) dx^{j_1} \otimes \frac{\partial}{\partial z^l} \end{aligned} \quad (3.41)$$

ただし I, J は順序づけられた添字集合で、 $I = \{m, n\}$ ($m < n$)、 $J = \{j_1\}$ は添字の集合 $\{1, 2, 3\}$ において I の補集合となる．また $\operatorname{sgn}(I, J)$ は順列 $\{m, n, j_1\}$ の符号である．

例えば $\mathcal{R}$ の次元が $d = 3$ のとき、 $I = \{1, 2\}$ の場合は $J = \{3\}$ となるため $\operatorname{sgn}(I, J) = \operatorname{sgn}(\{1, 2, 3\}) = 1$ 、 $I = \{2, 3\}$ の場合は $J = \{1\}$ となるため $\operatorname{sgn}(I, J) = \operatorname{sgn}(\{2, 3, 1\}) = 1$ 、そして $I = \{1, 3\}$ の場合は $J = \{2\}$ となるため $\operatorname{sgn}(I, J) = \operatorname{sgn}(\{1, 3, 2\}) = -1$ となる．したがっ

て $*c$ の各成分は次のようになる.

$$\begin{aligned}
*c_{12}^l dx^1 \wedge dx^2 &= c_{12}^l \operatorname{sgn}(\{1, 2, 3\}) dx^3 = c_{12}^l dx^3 \\
*c_{23}^l dx^2 \wedge dx^3 &= c_{23}^l \operatorname{sgn}(\{2, 3, 1\}) dx^1 = c_{23}^l dx^1 \\
*c_{13}^l dx^1 \wedge dx^3 &= c_{13}^l \operatorname{sgn}(\{1, 3, 2\}) dx^2 = -c_{13}^l dx^2
\end{aligned} \tag{3.42}$$

これらより $c \wedge *c$ は次のように表すことができる.

$$\begin{aligned}
c \wedge *c &= c_{12}^i c_{12}^l \frac{\partial}{\partial z^i} \otimes \frac{\partial}{\partial z^l} = \sum_{j < k} c_{jk}^i c_{jk}^l v_{\mathcal{R}} \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \otimes \frac{\partial}{\partial z^l}, \quad (d = \dim \mathcal{R} = 2) \\
c \wedge *c &= (c_{12}^i c_{12}^l + c_{23}^i c_{23}^l + c_{13}^i c_{13}^l) \frac{\partial}{\partial z^i} \otimes \frac{\partial}{\partial z^l} = \sum_{j < k} c_{jk}^i c_{jk}^l v_{\mathcal{R}} \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \otimes \frac{\partial}{\partial z^l}, \quad (d = \dim \mathcal{R} = 3)
\end{aligned} \tag{3.43}$$

したがって Eq. (3.40) は次のようになる.

$$\begin{aligned}
\langle *(c \wedge *c) \rangle_{\mathbb{R}^3} &= \left\langle \sum_{j < k} c_{jk}^i c_{jk}^l \frac{\partial}{\partial z^i} \otimes \frac{\partial}{\partial z^l} \right\rangle_{\mathbb{R}^d} \\
&= \sum_{j < k} \delta_{il} c_{jk}^i c_{jk}^l
\end{aligned} \tag{3.44}$$

以上より $\mathcal{G}$ は次のように局所座標表示される.

$$\mathcal{G} = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{R}} \sum_{j < k} \delta_{il} c_{jk}^i c_{jk}^l v_{\mathcal{R}} \tag{3.45}$$

次に $\mathcal{L}$ の局所座標表示を求める. $d = \dim \mathcal{R} = 3$ のとき, 余微分 δ の定義にしたがって計算すると $\delta\Theta$ は次のように表すことができる.

$$\begin{aligned}
\delta\Theta &= (-1)^{3(1+1)+1} * d * ((F_p)_j^i) dx^j \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \\
&= - * d * ((F_p)_j^i dx^j) \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \\
&= - * d ((F_p)_1^i dx^2 \wedge dx^3 - (F_p)_2^i dx^1 \wedge dx^3 + (F_p)_3^i dx^1 \wedge dx^2) \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \\
&= - * \left(\frac{\partial(F_p)_1^i}{\partial x^1} + \frac{\partial(F_p)_2^i}{\partial x^2} + \frac{\partial(F_p)_3^i}{\partial x^3} \right) v_{\mathcal{R}} \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \\
&= - \delta^{jk} \frac{\partial(F_p)_j^i}{\partial x^k} \frac{\partial}{\partial z^i}
\end{aligned} \tag{3.46}$$

したがって $\mathcal{L}$ の局所座標表示は次のようになる。

$$\mathcal{L} = \int_{\mathcal{R}} \left(-\delta_{il} \lambda^l \delta^{jk} \frac{\partial (F_p)_j^i}{\partial x^k} + \frac{\gamma}{2} \delta_{il} \lambda^i \lambda^l \right) v_{\mathcal{R}} \quad (3.47)$$

最後に境界条件 $\Theta|_{\partial\mathcal{R}}(N)$ の局所座標表示を行う。 $\mathcal{R}$ の境界における単位法線ベクトル場 N は $N = N^i \partial/\partial x^i$ と局所座標表示でき、上式は次のように整理できる。

$$\begin{aligned} \Theta|_{\partial\mathcal{R}}(N^k \partial/\partial z^k) &= (F_p)_j^i dx^j \left(N^k \frac{\partial}{\partial x^k} \right) \otimes \frac{\partial}{\partial z^i} \\ &= (F_p)_j^i N^k \delta_k^j \frac{\partial}{\partial z^i} \\ &= (F_p)_j^i N^j \frac{\partial}{\partial z^i} \end{aligned} \quad (3.48)$$

したがって各 i に対して次式を得る。

$$(F_p)_j^i N^j = 0 \quad (3.49)$$

以上より Eq. (3.33) を局所座標表示すると次のようになる。

$$\begin{aligned} &\text{Minimize } \mathcal{G} + \mathcal{L} \\ &\text{subject to } F_p \in C^\infty(\mathcal{R}, \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d), \quad (F_p)_j^i N^j = 0 \end{aligned} \quad (3.50)$$

3.4.3 Cartan の第一構造方程式の変分問題の弱形式

Cartan の第一構造方程式の変分問題 Eq. (3.50) に変分原理を適用し、弱形式の Euler-Lagrange 方程式を求める。目的関数 $\mathcal{G} + \mathcal{L}$ は F_p および λ の汎関数として次のように表される。

$$\begin{aligned} \mathcal{G}[F_p] &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{R}} \sum_{j < k} \delta_{il} c_{jk}^i c_{jk}^l v_{\mathcal{R}} \\ \mathcal{L}[F_p, \lambda] &= \int_{\mathcal{R}} \left(-\delta_{il} \lambda^l \delta^{jk} \frac{\partial (F_p)_j^i}{\partial x^k} + \frac{\gamma}{2} \delta_{il} \lambda^i \lambda^l \right) v_{\mathcal{R}} \end{aligned} \quad (3.51)$$

上式より明らかなように、 $\mathcal{G}$ は F_p の汎関数、 $\mathcal{L}$ は F_p と λ の汎関数である。そこで変分原理を適用して、 $\mathcal{G} + \mathcal{L}$ を最小化する F_p, λ を求める。まず $\mathcal{G}[F_p]$ について考える。いま、 H を $H_j^i N^j = 0$ を満たす $\mathcal{R}$ 上の行列値関数、 ϵ を正の実数とする。Eq. (3.39) の右辺中の $(F_p)_j^i$ を $(F_p)_j^i + \epsilon H_j^i$ で置

き換えた各関数を $c_{jk}^i(\epsilon)$ とおくと, $\mathcal{G}[F_p]$ の第一変分は次のように求められる.

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{G}[F_p] &= \frac{d}{d\epsilon}\bigg|_{\epsilon=0} \frac{1}{2} \int_{\mathcal{R}} \sum_{j<k} \delta_{il} c_{jk}^i(\epsilon) c_{jk}^l(\epsilon) v_{\mathcal{R}} \\ &= \int_{\mathcal{R}} \sum_{j<k} \delta_{il} \frac{dc_{jk}^i}{d\epsilon}(0) c_{jk}^l(0) v_{\mathcal{R}}\end{aligned}\tag{3.52}$$

ここで $dc_{jk}^i/d\epsilon(\epsilon)$ は次のようになる.

$$\begin{aligned}\frac{dc_{jk}^i}{d\epsilon}(\epsilon) &= \frac{d}{d\epsilon} \left(T_{jk}^i - \left(\frac{\partial}{\partial x^j} ((F_p)_k^i + \epsilon H_k^i) - \frac{\partial}{\partial x^k} ((F_p)_j^i + \epsilon H_j^i) \right) \right) \\ &= - \left(\frac{\partial H_k^i}{\partial x^j} - \frac{\partial H_j^i}{\partial x^k} \right)\end{aligned}\tag{3.53}$$

したがって, Eq. (3.52) は次のようになる.

$$\mathcal{G}[F_p] = \int_{\mathcal{R}} - \sum_{j<k} \delta_{il} \left(\frac{\partial H_k^i}{\partial x^j} - \frac{\partial H_j^i}{\partial x^k} \right) \left(T_{jk}^l - \left(\frac{\partial (F_p)_k^l}{\partial x^j} - \frac{\partial (F_p)_j^l}{\partial x^k} \right) \right) v_{\mathcal{R}}\tag{3.54}$$

同様に, $\mathcal{L}[F_p, \lambda]$ の第一変分 $\delta\mathcal{L}[F_p, \lambda]$ を求める. について, η を $\mathbb{R}^d$ 値関数とすると, $\delta\mathcal{L}[F_p, \lambda]$ は次のように表される.

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L}[F_p, \lambda] &= \frac{d}{d\epsilon}\bigg|_{\epsilon=0} \int_{\mathcal{R}} \left(-\delta_{il}(\lambda^l + \epsilon\eta^l) \delta^{jk} \frac{\partial}{\partial x^k} ((F_p)_j^i + \epsilon H_j^i) + \frac{\gamma}{2} \delta_{il}(\lambda^i + \epsilon\eta^i)(\lambda^l + \epsilon\eta^l) \right) v_{\mathcal{R}} \\ &= \int_{\mathcal{R}} \left(-\delta_{il}\eta^l \delta^{jk} \frac{\partial (F_p)_j^i}{\partial x^k} - \delta_{il}\lambda^l \delta^{jk} \frac{\partial H_j^i}{\partial x^k} + \gamma \delta_{il}\eta^i \lambda^l \right) v_{\mathcal{R}}\end{aligned}\tag{3.55}$$

変分原理より, $\delta\mathcal{G} + \delta\mathcal{L} = 0$ を満たす $(F_p)_j^i, \lambda$ を求めることで, 目的関数を最小化することができる.

4 アイソジオメトリック解析の基礎

4.1 アイソジオメトリック解析の概要

アイソジオメトリック解析は、非一様有理 B-spline 基底関数 (NURBS 基底関数) を Galerkin 法の基底関数として用いて偏微分方程式の数値解析を行う手法である。NURBS 基底関数は通常、コンピュータ上で物体の形状表現に用いられ、曲線や曲面などの滑らかな物体を高精度に表現できるという特徴がある [77]。アイソジオメトリック解析は、コンピュータ援用設計において NURBS を用いてデザインされた物体に対し、そこで用いられている NURBS を物体の構造解析に直接応用することを目的として考案された手法である [78, 79]。NURBS はその滑らかさをリファインメントと呼ばれる操作によって簡便に変化させられるという特徴があり、この性質によって高精度に変分問題の解を求めることが可能となる。本章ではまず、NURBS の定義と NURBS を用いた物体の形状表現の方法を述べる。その後、この NURBS を基底としたアイソジオメトリック解析により変分問題を数値解析する方法を示す。

4.2 NURBS による物体の形状表現

4.2.1 B-spline 基底関数

NURBS 基底関数は B-spline 基底関数を用いて定義される。ここでは B-spline 基底関数の定義とその構成方法を説明する。

B-spline 基底関数は多項式をつないで構成される区分多項式の組である。この多項式次数を p とおき、 k 個の要素からなる有限実数列を $\xi = (\xi^1, \dots, \xi^k)$ とおく。この実数列 ξ は非減少であるとする。すなわち、 ξ の i 番目の要素 $\xi^i \in \mathbb{R}$ は $\xi^i \leq \xi^{i+1}$ を満たす。このとき、実数列の各要素 ξ^i のことをノット、 ξ のことをノット列という。

B-spline 基底関数はノット列で指定される区間 $[\xi^1, \xi^k]$ における、 $n = k - p - 1$ 個の区分多項式の組 $\{B_{(i,p,\xi)}\}_{i=1,\dots,n}$ である。各 B-spline 基底関数 $B_{(i,p,\xi)}$ の下付き添字 (i, p, ξ) は、それぞれ要素の番号 $i = 1, \dots, n$ とノット間の多項式次数 p 、およびノット列 ξ を表す。このとき、区間 (ξ^1, ξ^k) 上の任意の点 t における i 番目の B-spline 基底関数の値 $B_{(i,p,\xi)}(t)$ は次のように定義される。

$$B_{(i,0,\xi)}(t) = \begin{cases} 1 & \text{if } \xi^i \leq t < \xi^{i+1} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.1)$$
$$B_{(i,p,\xi)}(t) = \frac{t - \xi^i}{\xi^{p+i} - \xi^i} B_{(i,p-1,\xi)}(t) + \frac{\xi^{i+p+1} - t}{\xi^{p+i+1} - \xi^{i+1}} B_{(i+1,p-1,\xi)}(t)$$

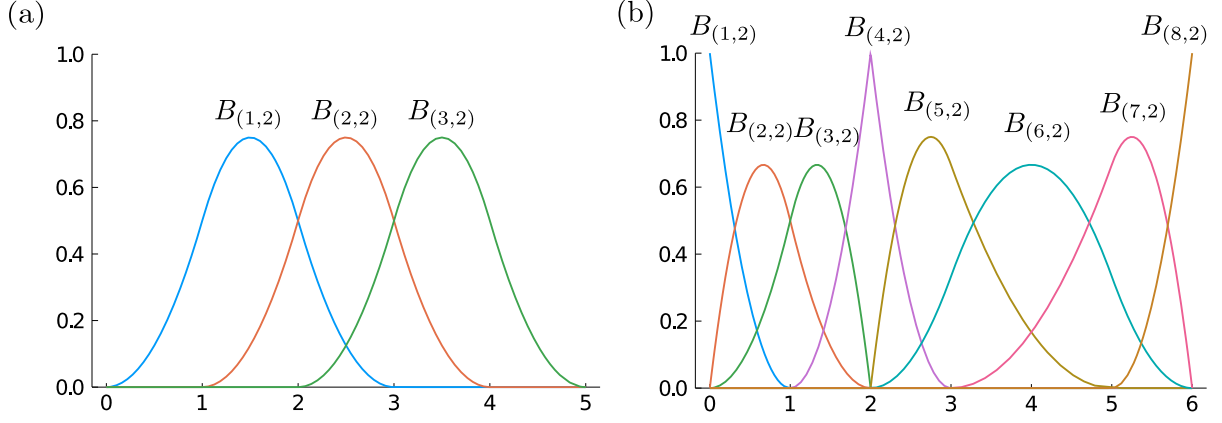


Fig. 4.1: 2nd order B-spline basis functions consisted of knot vectors (a) $\xi = (0, 1, 2, 3, 4, 5)$ and (b) $\xi = (0, 0, 0, 1, 2, 2, 3, 5, 6, 6, 6)$.

ただし、第 2 式の各項で分母がゼロとなる時、その項全体をまとめてゼロに置換する。上式は Cox-de Boor の公式と呼ばれている [77]。また B-spline 基底関数の定義域 $[\xi^1, \xi^k]$ のことをパラメータ空間と呼ぶ。

二種類の B-spline 基底関数を例にとり、B-spline 基底関数がついくつかの性質を示す。Fig. 4.1 に、(a) 次数 $p = 2$ 、ノット列 $\xi = (0, 1, 2, 3, 4, 5)$ および (b) 次数 $p = 2$ 、ノット列 $\xi = (0, 0, 0, 1, 2, 2, 3, 5, 6, 6, 6)$ によって構成される B-spline 基底関数を示す。Fig. 4.1(a) では、ノット列の要素数 $k = 6$ に対し、区間 $[\xi^1 = 0, \xi^k = 5]$ 上に $n = k - p - 1 = 3$ 個、Fig. 4.1(b) では、ノット列の要素数 $k = 11$ に対し、区間 $[\xi^1 = 0, \xi^k = 6]$ 上に $n = k - p - 1 = 8$ 個の B-spline 基底関数が存在している。

まず、B-spline 基底関数のコンパクト性を示す。ある集合 U を定義域とする関数 $f: U \rightarrow \mathbb{R}$ が、 U の部分集合 $V \subset U$ でのみ非ゼロで、それ以外ではゼロとなる時、すなわち $V = \{f(x) \neq 0 \mid x \in U\}$ となると、部分集合 V の閉包 $\bar{V}$ を f の台 (support) と呼び、 $\text{supp } f = \bar{V}$ と書く。また、関数 f の台がその定義域の部分集合となると、 f はコンパクトな関数であるという。いま、Fig. 4.1(a) の $B_{(i,p,\xi)}$ は 4 つのノット $(0, 1, 2, 3)$ から構成される区間 $[0, 3]$ の上でのみ非ゼロとなり、それ以外の区間では常にゼロとなっていることがわかる。これは、Fig. 4.1 の全ての B-spline 基底関数がつ一般的性質である。すなわち、ある B-spline 基底関数 $B_{(i,p,\xi)}$ は、区間 (ξ^i, ξ^{i+p+1}) 上でのみ非ゼロの値をとり、それ以外の区間では常にゼロになる。したがって、 $B_{(i,p,\xi)}$ は $\text{supp } B_{(i,p,\xi)} = [\xi^i, \xi^{i+p+1}]$ を台とするコンパクトな関数である。

次に、B-spline 基底関数の滑らかさが次数とノット列から決まることを示す。Fig. 4.1(a) の全ての B-spline 基底関数は、 $[\xi^1 = 0, \xi^k = 5]$ 上で滑らかであることが確認できる一方、Fig. 4.1(b) 中

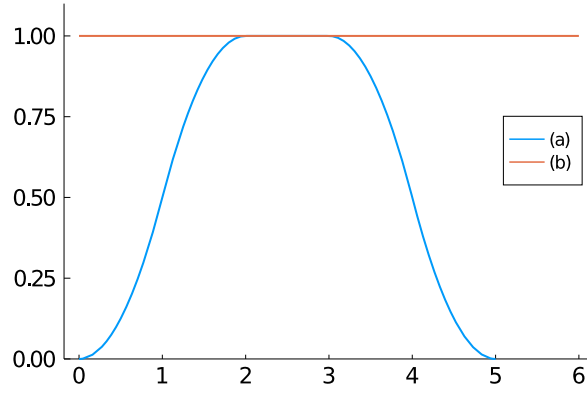


Fig. 4.2: Sum of all B-spline basis $\sum_{i=1}^n B_{(i,p,())}(t)$.

の B-spline 基底関数 $B_{(4,2,\xi)}$ は、ノット $\xi^5 = \xi^6 = 2$ 上で C^0 級となっていることがわかる。Eq. (4.1) より、この $B_{(4,2,\xi)}$ を構成するノットは $(\xi^3, \xi^4, \xi^5, \xi^6) = (1, 2, 2, 3)$ であり、重複するノット $\xi^4 = \xi^5 = 2$ を含んでいることがわかる。このように、 $B_{(i,p,\xi)}$ を構成するノット $(\xi^i, \dots, \xi^{i+p+1})$ の重複数を m_i とおくと、 $B_{(i,p,\xi)}$ は区間 $[\xi^1, \xi^k]$ 上の C^{p-m_i} 級関数となる。ただし、ノットが重複しないとき、すなわち $\xi^i \neq \dots \neq \xi^{i+p+1}$ のとき、ノットの重複数は $m_i = 1$ であるとする。したがって、Fig. 4.1(a) に示す各 B-spline 基底関数のノットの重複数は $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ であるため、これらはいずれも区間 $[0, 5]$ 上の C^1 級関数となる。一方、Fig. 4.1(b) に示す B-spline 基底関数 $B_{(3,2,\xi)}$ 、 $B_{(4,2,\xi)}$ および $B_{(5,2,\xi)}$ を構成するノットは、それぞれ $(0, 1, 2, 2)$ 、 $(1, 2, 2, 3)$ および $(2, 2, 3, 5)$ 、その重複数は $m_3 = m_4 = m_5 = 2$ であり、これらはいずれも区間 $[0, 6]$ 上の C^0 級関数となる。

最後に、B-spline 基底関数が 1 の分割となるための、ノット列が満たすべき十分条件の一例を示す。B-spline 基底関数のパラメーター空間を $I = [\xi^1, \xi^m]$ とおく。ある B-spline 基底関数 $B_{(i,p,\xi)}$ の台 $\text{supp } B_{(i,p,\xi)} = [\xi^i, \xi^{i+p+1}]$ は I の部分集合であり、B-spline 基底関数 $\{B_{(i,p,\xi)}\}_{i=1,\dots,n}$ の台の集合を $\{I_i = \text{supp } B_{(i,p,\xi)}\}_{i=1,\dots,n}$ とおくと、この和集合は $\bigcup_{i=1}^n I_i = I$ を満たすことがわかる。このような性質を満たす $\{I_i\}_{i=1,\dots,n}$ を I の被覆といい、任意の $t \in I$ に対して、 t を含む開被覆 $\{I_i\}_{i=1,\dots,n}$ の元が有限個であるとき、この被覆は局所有限であるという [72]。ノット列は有限数列であるので、B-spline 基底関数の台から構成される被覆 $\{I_i\}_{i=1,\dots,n}$ は常に局所有限となる。このとき、B-spline 基底関数 $\{B_{(i,p,\xi)}\}_{i=1,\dots,n}$ が任意の $\forall t \in I$ 上で $\sum_{i=1}^n B_{(i,p,\xi)}(t) = 1$ を満たすとき、この B-spline 基底関数は区間 I 上の 1 の分割 (partition of unity) であるという。Fig. 4.2 に Fig. 4.1(a) および Fig. 4.1(b) に示した B-spline 基底関数の各点での和を示した。図より明らかに、Fig. 4.1(a) の B-spline 基底関数は 1 の分割を満足しないが、Fig. 4.1(b) の B-spline 基底

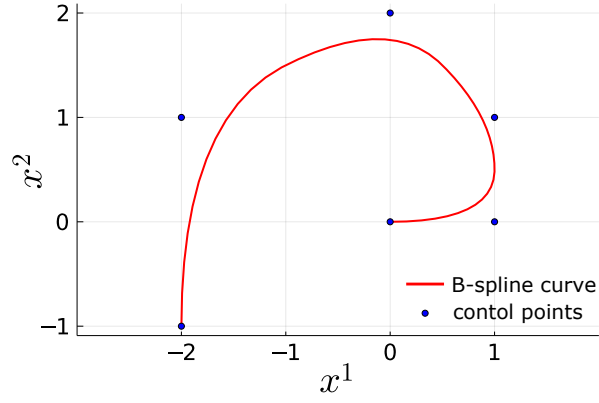


Fig. 4.3: B-spline curve consisted of the 2nd order B-spline basis $\{B_{(i,p,\xi)}\}_{i=1,\dots,6}$ with knot vector $\xi = (0, 0, 0, 1, 2, 3, 4, 4, 4)$ and control points $a_1 = (0, 0)$, $a_2 = (1, 0)$, $a_3 = (1, 1)$, $a_4 = (0, 2)$, $a_5 = (-2, 1)$, $a_6 = (-2, -1)$.

関数はこれを満足していることがわかる．ここで， p 次の B-spline 基底関数を構成するノット列 ξ の，最初と最後の $p+1$ 個のノットがそれぞれ等しいとき，すなわち $\xi^1 = \xi^2 = \dots = \xi^{p+1}$ かつ $\xi^{m-p-1} = \xi^{m-p} = \dots = \xi^m$ を満たすとき，このノット列 ξ は open であるという．open なノット列 ξ から構成される B-spline 基底関数は，この例のように，常に 1 の分割を満たす．

4.2.2 B-spline 曲線による曲線の形状表現

B-spline 基底関数を用いて実空間 $\mathbb{R}^d$ 上の曲線を表現する方法を示す． $\mathbb{R}^d$ 上の曲線を $C = \{c(t) = (c^1(t), \dots, c^d(t)) \in \mathbb{R}^d \mid t \in I\}$ とおく．ここで I は閉区間 $I \subset \mathbb{R}^d$ で， c は $c: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^d$ なる写像である．次数 p ， k 個の要素を持つノット列 ξ により構成される B-spline 基底関数 $\{B_{(i,p,\xi)}\}_{i=1,\dots,n}$ は，パラメータ空間 $[\xi^1, \xi^{n+p+1}]$ 上の区分局多項式であった．そこで， $\mathbb{R}^d$ 上の n 個の点 $\{a_i\}_{i=1,\dots,n}$ をとり，その座標 $a_i = (a_i^1, \dots, a_i^d)$ を用いて，写像 $c: [\xi^1, \xi^{n+p+1}] \rightarrow \mathbb{R}^d$ を次のように構成する．

$$c^j(t) = \sum_{i=1}^n B_{(i,p,\xi)}(t) a_i^j \quad (4.2)$$

このように，B-spline 基底関数と，それと同じ数の $\mathbb{R}^d$ 上の点 $\{a_i\}_{i=1,\dots,n}$ を用いることで， $\mathbb{R}^d$ 上の曲線 C を構成することができる．このとき，曲線の表現に用いる点 $\{a_i\}_{i=1,\dots,n}$ を制御点と呼ぶ．

Fig. 4.3 に，B-spline 基底関数と制御点を用いた $\mathbb{R}^2$ 上の曲線の例を示す．ここでは，次数 2，ノット列 $(0, 0, 0, 1, 2, 3, 4, 4, 4)$ により構成される 6 個の B-spline 基底関数と，これに対応する制御点を用いた．図に示すように，B-spline 曲線は必ずしも全ての制御点 a_i を通るとは限らず，制御点を通るのは $B_{(i,p,\xi)}(t) = 1$ となる場合に限られる．この例で用いた open なノット列の場合には，この条

件は区間の境界 $\xi^1 = 0$ および $\xi^9 = 4$ で常に満たされる．このため，端点 $t = 0, 4$ では B-spline 曲線は制御点に一致する．

4.2.3 多次元 B-spline 基底関数と連続体の形状表現

前節で構成した $\mathbb{R}^d$ 中の曲線のように，B-spline 基底関数と制御点を用いれば， $\mathbb{R}^d$ 中のより多次元の部分領域を表現することができる．ここでは $d = 3$ を例にとり，その部分領域である空間曲面やソリッドの表現方法を示す．

多項式次数 (p_1, p_2) ，ノット列 (ξ_1, ξ_2) から構成される 2 つの B-spline 基底関数を $\{B_{(i_1, p_1, \xi_1)}\}_{i_1=1, \dots, n_1}$ および $\{B_{(i_2, p_2, \xi_2)}\}_{i_2=1, \dots, n_2}$ とおく．これらの定義域を区間 $I_i = [\min \xi_i, \max \xi_i]$ で表し，これらの直積によって矩形領域 $I_1 \times I_2$ が構成できる．この集合は $I_1 \times I_2 := \{t = (t^1, t^2) \in \mathbb{R}^2 \mid t^1 \in I_1, t^2 \in I_2\}$ で定義される $\mathbb{R}^2$ の部分集合である．2 次元 B-spline 基底関数は， $I_1 \times I_2$ をパラメータ空間とする関数の組であり，その各点 $t = (t^1, t^2)$ における値は次のようにして定められる．

$$B_{(i, p, \xi)}(t) = B_{(i_1, p_1, \xi_1)}(t_1)B_{(i_2, p_2, \xi_2)}(t_2) \quad (4.3)$$

ここで $i = (i_1, i_2)$ および $p = (p_1, p_2)$ とおいた．

これにより， $\mathbb{R}^3$ への埋め込まれた 2 次元多様体である $\mathbb{R}^3$ 中の空間曲面 S は， S 上の各点とパラメータ空間 $I_1 \times I_2$ の対応を，この 2 次元 B-spline 基底関数と制御点を用いて表現することができる．すなわち， $\mathbb{R}^3$ 中の $n = n_1 n_2$ 個の制御点を $\{a_i = a_{(i_1, i_2)}\}_{i=1, \dots, n}$ ，その座標を $a_i^j = a_{(i_1, i_2)}^j$ とおき， S 上の各点の座標 (s^1, s^2, s^3) を次のように表す．

$$s^j(t) = \sum_{i=1}^n B_{(i, p, \xi)}(t) a_i^j = \sum_{i_1=1}^{n_1} \sum_{i_2=1}^{n_2} B_{(i_1, \xi_1, p_1)}(t^1) B_{(i_2, p_2, \xi_2)}(t^2) a_{(i_1, i_2)}^j \quad (4.4)$$

Eq. (4.3) を一般化して， d 次元 B-spline 基底関数は， $I_1 \times I_2 \times \dots \times I_d$ をパラメータ空間とする関数で，次のように定義される．

$$B_{(i, p, \xi)}(t) = B_{(i_1, p_1, \xi_1)}(t_1) B_{(i_2, p_2, \xi_2)}(t_2) \dots B_{(i_d, p_d, \xi_d)}(t_d) \quad (4.5)$$

ただし， $i = (i_1, \dots, i_d)$ および $p = (p_1, \dots, p_d)$ とおいた．Eq. (4.4) と同様にして， $\mathbb{R}^d$ 中の部分領域は $\mathbb{R}^d$ 中の制御点を用いて表現することができる．

4.2.4 NURBS 基底関数と NURBS による連続体の形状表現

非一様有理 B-spline 基底関数 (NURBS 基底関数) は、非一様なノット列から構成される B-spline 基底関数に有理化と呼ばれる操作を施すことで構成される関数である。一般に、B-spline 基底関数を用いた物体の形状表現の自由度は、有理化により向上する。 d 次元 NURBS 基底関数は、 d 次元 B-spline 基底関数 $\{B_{(i,p,\xi)}\}_{i=1,\dots,n}$ と、その各々に対応する実数値の組 $\{w_i\}_{i=1,\dots,n}$ を用いて次のように定義される。

$$N^i(t) = \frac{w_i B_{(i,p,\xi)}(t)}{\sum_{j=1}^n w_j B_{(j,p,\xi)}(t)} \quad (4.6)$$

以降では特に断らない限り w_i と B-spline 基底関数の積に対しては総和規約を適用しないことにする。ここで、各実数値 $\{w_i\}_{i=1,\dots,n}$ は重みと呼ばれる。上式より、NURBS 基底関数を構成する B-spline 基底関数がパラメータ空間上の 1 の分割であり、かつ全ての重みが $w_i = 1$ であるとき、 d 次元 NURBS 基底関数は d 次元 B-spline 基底関数と一致する。

いま、NURBS 基底関数のパラメータ空間を $\hat{\Omega} = I_1 \times \dots \times I_d$ とおくと、 $\mathbb{R}^d$ 中の部分領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ は一般に、上式で定義した NURBS 基底関数、および n 個の制御点 $\{a_i\}_{i=1,\dots,n}$ を用いて次のように構成することができる。

$$\Omega = \left\{ x(t) = (x^1(t), \dots, x^d(t)) \in \mathbb{R}^d \mid \forall t \in \hat{\Omega}, x^i(t) = \sum_{j=1}^n N^j(t) a_j^i \right\} \quad (4.7)$$

上式より、領域 Ω 上の各点 $x(t)$ は、パラメーター空間 $\hat{\Omega}$ 上の各点の、写像 $x: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$ による像として定められている。このように、NURBS 基底関数を用いて定められた領域 Ω は NURBS 表現されているといい、パラメーター空間 $\hat{\Omega}$ との対応を定める写像 $x: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$ を NURBS 写像という。前節までに示した Eq. (4.2) および Eq. (4.4) はいずれも、全ての重みが 1 の NURBS 基底関数による NURBS 写像である。また、Fig. 4.4 に NURBS 表現したトーラスと、その形状表現に用いた制御点を示す。

4.2.5 d 次元 NURBS 基底関数の偏導関数

NURBS 基底関数を用いて形状表現された物体上で各種の幾何学量を計算する際には、NURBS 基底関数の偏導関数を用いる必要がある。そのような幾何学量の例としては、物体表面の外向き法線ベクトルや空間曲面の Gauss 曲率、空間曲線の曲率や捩率等が該当する。また、連続体力学においてはひずみや応力等が例として挙げられる。

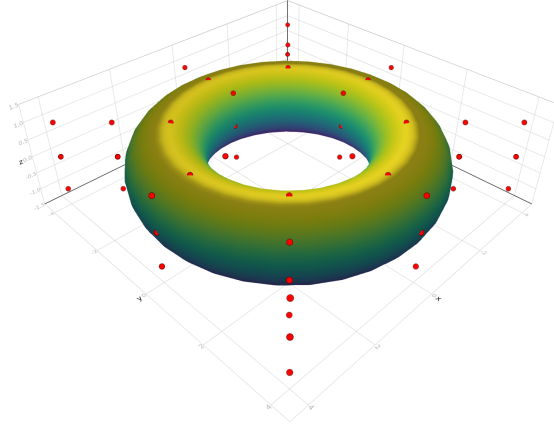


Fig. 4.4: Torus expressed by using NURBS.

簡単のため, Eq. (4.6) における d 次元 NURBS 基底関数の分子と分母の関数をそれぞれ次のようにおく.

$$\begin{aligned} F_i(t) &= w_i B_{(i,p,\xi)}(t) \\ D(t) &= \sum_{j=1}^n w_j B_{(j,p,\xi)}(t) \end{aligned} \quad (4.8)$$

これより, パラメータ空間上の点 $t \in I_1 \times I_2 \times \dots \times I_d$ における d 次元 NURBS 基底関数の t^α 方向への偏導関数 $\partial N^i / \partial t^\alpha(t)$ は, 偏微分の連鎖律を用いることで次のように計算できる.

$$\frac{\partial N^i}{\partial t^\alpha}(t) = \frac{1}{D^2(t)} \left(\frac{\partial F_i}{\partial t^\alpha}(t) D(t) - F_i(t) \frac{\partial D}{\partial t^\alpha}(t) \right) \quad (4.9)$$

ここで, $\partial F_i(t) / \partial t^\alpha(t)$ および $\partial D(t) / \partial t^\alpha(t)$ は次のようになる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i}{\partial t^\alpha}(t) &= w_i \frac{\partial B_{(i,p,\xi)}}{\partial t^\alpha}(t) = w_{i_1 \dots i_d} B_{(i_1, p_1, \xi_1)}(t_1) \dots \frac{dB_{(i_\alpha, p_\alpha, \xi_\alpha)}}{dt^\alpha}(t^\alpha) \dots B_{(i_d, p_d, \xi_d)}(t_d) \\ \frac{\partial D}{\partial t^\alpha}(t) &= \sum_{j=1}^n w_j \frac{\partial B_{(j,p,\xi)}}{\partial t^\alpha}(t) \\ &= \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_d=1}^{n_d} w_{i_1 \dots i_d} B_{(i_1, p_1, \xi_1)}(t_1) \dots \frac{dB_{(i_\alpha, p_\alpha, \xi_\alpha)}}{dt^\alpha}(t^\alpha) \dots B_{(i_d, p_d, \xi_d)}(t_d) \end{aligned} \quad (4.10)$$

また, 1 次元 B-spline 基底関数の l 階導関数 $d^l B_{(i,p,\xi)} dt^l(t)$ は, Eq. (4.1) より次のようにして求めることができる.

$$\frac{d^l B_{(i,p,\xi)}}{dt^l}(t) = \frac{p}{\xi_{i+p} - \xi_i} \left(\frac{d^{l-1} B_{(i,p-1,\xi)}}{dt^{l-1}}(t) \right) - \frac{p}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} \left(\frac{d^{l-1} B_{(i+1,p-1,\xi)}}{dt^{l-1}}(t) \right) \quad (4.11)$$

ただし, $d^0 B_{(i,p,\xi)}/dt^0(t) = B_{(i,p,\xi)}(t)$ とする. 以上より, Eq. (4.10) および Eq. (4.11) を Eq. (4.9) へ代入することで, d 次元 NURBS 基底関数の t^α 方向への偏導関数が定まる.

4.3 アイソジオメトリック解析

本節では, Galerkin 法の一つであるアイソジオメトリック解析 (isogeometric analysis) を導入する. 本節でははじめに, NURBS 表現された領域に対して, 領域の形状を変化させずに偏微分方程式の解析精度を高めるための方法の一つであるリファインメントと呼ばれる手法を示し, その後, 偏微分方程式の弱形式をアイソジオメトリック解析によって数値計算する方法を示す. 本節の後半では, 大規模自由度の問題を高速に解くための手法である, NURBS 表現された連続体の領域分割と, overlapped additive Schwarz 法による前処理付き共役勾配法を導入する.

4.3.1 リファインメント

アイソジオメトリック解析におけるリファインメントでは, NURBS 基底関数を構成する各 B-spline 基底関数を変化させる. B-spline 基底関数を変化させる方法には, p リファインメントと h リファインメント, そしてその両方を実行する k リファインメントがある. p リファインメントは B-spline 基底関数の多項式次数を増加させる操作であり, h リファインメントはノット列に新たなノットを追加する操作である. k リファインメントは p リファインメント, h リファインメントをこの順に実行する操作であり, これによって NURBS 基底関数の微分可能性が増加する. また, いずれの操作も B-spline 基底関数の個数はリファインメント後には増加するという性質がある.

ここで, リファインメントの前後における B-spline 基底関数を $B_{(i,p,\xi)}(t)$ および $\tilde{B}_{(i,\tilde{p}),\tilde{\xi}}(t)$ とおくと, これらは次の関係を満たす $n \times \tilde{n}$ の行列 $C_{ij}(t)$ で結び付けられる.

$$B_{(i,p)}(t) = \sum_j^{\tilde{n}} C_{ij}(t) \tilde{B}_{(j,\tilde{p})}(t) \quad (4.12)$$

これまでに示した方法により, NURBS 基底関数の個数は増加するため, リファインメントでは増加分に対応する制御点を決定する必要がある. この際, リファインメント後の制御点は, リファインメントの前後で領域の NURBS 表現が変化しないように決定する. すなわち, リファインメント前の NURBS 写像を $x: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$, リファインメント後の NURBS 写像を $\tilde{x}: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$ とおくと, NURBS 写像が各点で不変であるための条件は $x(t) = \tilde{x}(t)$ である. いま, リファインメント前の NURBS 基底関数および制御点を $\{N^i\}_{i=1,\dots,n}$ および $\{a_i\}_{i=1,\dots,n}$, リファインメント後の NURBS 基底関数

および制御点を $\{\tilde{N}^i\}_{i=1,\dots,\tilde{n}}$ および $\{\tilde{a}_i\}_{i=1,\dots,\tilde{n}}$ と表すと、この式は次のように表される。

$$\tilde{x}^i(t) = \sum_{j=1}^{\tilde{n}} \tilde{N}^j(t) \tilde{a}_j^i = \sum_{j=1}^n N^j(t) a_j^i = x^i(t) \quad (4.13)$$

ここで、リファインメント後の NURBS 基底関数には $\tilde{n}$ 個の重み $\{\tilde{w}_i\}_{i=1,\dots,\tilde{n}}$ が含まれるので、リファインメント時には $\tilde{n}$ 個の重みおよび制御点を、Eq. (4.13) を満たすように定める必要がある。

これは次の手順で実行できる。まずはじめにリファインメントの前後で NURBS 基底関数の分母 $D(t)$ および $\tilde{D}(t)$ が不変であるという条件を課す。これは次の式で表される。

$$\tilde{D}(t) - D(t) = \sum_{i=1}^{\tilde{n}_\alpha} \tilde{w}_i \tilde{B}_{(i,\tilde{p},\tilde{\xi})}(t) - \sum_{j=1}^{n_\alpha} w_j B_{(j,p,\xi)}(t) = 0 \quad (4.14)$$

いま、上式をパラメータ空間の各方向に分けると、各 B-spline 基底関数に対応する重みに関して、次の方程式を得る。

$$\begin{aligned} & \sum_{j_\alpha=1}^{\tilde{n}_\alpha} \tilde{w}_{j_\alpha} \tilde{B}_{(j_\alpha,\tilde{p},\tilde{\xi})}(t^\alpha) - \sum_{k_\alpha=1}^{n_\alpha} w_{k_\alpha} \left(\sum_{j_\alpha=1}^{\tilde{n}_\alpha} C_{k_\alpha j_\alpha}(t^\alpha) \tilde{B}_{(j_\alpha,\tilde{p},\tilde{\xi})}(t^\alpha) \right) \\ &= \sum_{j_\alpha=1}^{\tilde{n}} \left(\tilde{w}_{j_\alpha} - \sum_{k_\alpha=1}^n w_{k_\alpha} C_{k_\alpha j_\alpha}(t^\alpha) \right) \tilde{B}_{(j_\alpha,\tilde{p},\tilde{\xi})}(t^\alpha) = 0 \end{aligned} \quad (4.15)$$

これが任意の t^α に対して成り立つとき、 $\tilde{w}_{j_\alpha} = \sum_{k_\alpha=1}^n w_{k_\alpha} C_{k_\alpha j_\alpha}(t^\alpha)$ を得る。これを全ての i_α , ($\alpha = 1, \dots, d$) に実行することで、リファインメント後の重み $\{\tilde{w}_i\}_{i=1,\dots,\tilde{n}}$ を決める事ができる。

次に、リファインメントの前後での B-spline 基底関数の関係 Eq. (4.12) に重みを加え、 $n \times \tilde{n}$ の行列 $W_{ij}(t)$ を用いて次の関係が成り立つとする。

$$w_i B_{(i,p,\xi)}(t) = \sum_{j=1}^{\tilde{n}} W_{ij}(t) \tilde{w}_j \tilde{B}_{(j,\tilde{p},\tilde{\xi})}(t) \quad (4.16)$$

この左辺に Eq. (4.12) を代入すると次式を得る。

$$\sum_{j=1}^{\tilde{n}} (w_i C_{ij}(t) - W_{ij}(t) \tilde{w}_j) \tilde{B}_{(j,\tilde{p})}(t) = 0 \quad (4.17)$$

上式が各々の i, j , そして任意の $t \in \hat{\Omega}$ に対して成り立つ条件として次式を得る。

$$W_{ij} = \frac{w_i}{\tilde{w}_j} C_{ij} \quad (4.18)$$

ただし上式においては総和規約は適用しないものとする。

ここで、任意の $t \in \hat{\Omega}$ に対して、リファインメントの前後で NURBS 基底関数の分母が一致するようにリファインメント後の重み $\tilde{w}_i$ を定められたので、 $\tilde{D}(t) = D(t)$ とおき、リファインメント前の Eq. (4.6) へ代入すると次の関係式を得る.

$$F_i(t) = w_{i_1} \dots w_{i_d} B_{(i_1, p_1, \xi_1)}(t_1) \dots B_{(i_d, p_d, \xi_d)}(t_d) \quad (4.19)$$

$$= \sum_{j_1, \dots, j_d=1}^{\tilde{n}_1, \dots, \tilde{n}_d} W_{i_1 j_1} \dots W_{i_d j_d} \tilde{w}_{j_1} \dots \tilde{w}_{j_d} \tilde{B}_{(j_1, \tilde{p}_1, \tilde{\xi}_1)} \dots \tilde{B}_{(j_d, \tilde{p}_d, \tilde{\xi}_d)} \quad (4.20)$$

これを Eq. (4.13) へ代入すると次式を得る.

$$\sum_{i_1, \dots, i_d=1}^{n_1, \dots, n_d} \sum_{j_1, \dots, j_d=1}^{\tilde{n}_1, \dots, \tilde{n}_d} W_{i_1 j_1} \dots W_{i_d j_d} \tilde{N}^{(j_1 \dots j_d)}(t) a_{i_1 \dots i_d}^i = \sum_{j=1}^{\tilde{n}} \tilde{N}^j(t) \tilde{a}_j^i \quad (4.21)$$

したがって、任意の $t \in \hat{\Omega}$ に対して上式が成り立つには、 $\tilde{a}^j$ が次の関係を満足すれば良い.

$$\tilde{a}^j = \sum_{i_1, \dots, i_d=1}^{n_1, \dots, n_d} W_{i_1 j_1} \dots W_{i_d j_d} a_{i_1 \dots i_d}^i \quad (4.22)$$

これにより、リファインメント後の制御点を決定することができる.

Fig. 4.5 に、B-spline 曲線に対するリファインメントの様子を示す. Fig. 4.5(a) は元の B-spline 基底関数と制御点を用いて描かれる B-spline 曲線を示している. Fig. 4.5(b) は (a) の B-spline 曲線に p リファインメントを行うことで得られる B-spline 基底関数および B-spline 曲線、そしてその制御点を示している. 図より明らかに、B-spline 基底関数の個数は増えており、これに対応して制御点の個数も増加している様子が確認できる. その一方で、B-spline 曲線の形状は元の曲線のまま保たれており、リファインメント時の条件 Eq. (4.13) が満たされていることが確認できる. Fig. 4.5(c) は (b) の B-spline 曲線に h リファインメントを行うことで得られる B-spline 基底関数および B-spline 曲線、そしてその制御点を示している. B-spline 基底関数の様子を見ると、新たに挿入されたノット 3 の付近でゼロになる基底関数が現れていることがわかる. また、これに対応して制御点の個数も増加しているが、B-spline 曲線の形状は Fig. 4.5(a), (b) と同様であり、リファインメント時の条件 Eq. (4.13) が満たされていることがわかる.

4.3.2 NURBS を基底としたアイソジオメトリック解析

アイソジオメトリック解析では、 d 次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^d$ の部分領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 上の変分問題から導出される偏微分方程式の弱形式を、 Ω を NURBS 表現するとともに、Galerkin 法を基に、偏微分方程式の解を同じ NURBS 基底関数を作る関数空間の元として近似して求める.

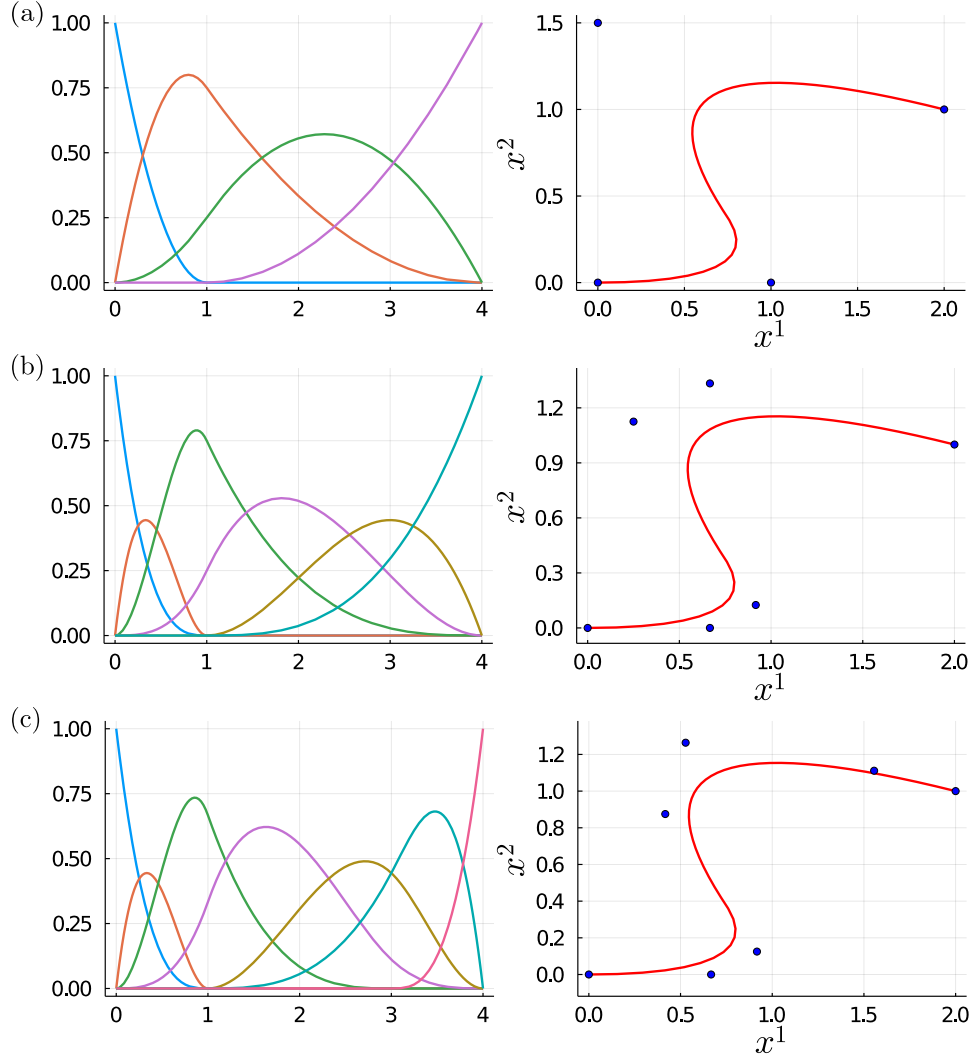


Fig. 4.5: (a) Original B-spline basis functions, B-spline curve and control points. (b) Those after the p-refinement with the polynomial order elevated by 1. (c) Those after the p- and h-refinement with inserting knot 3.

Galerkin 法ではまずはじめに、偏微分方程式を満たす関数を作る空間、すなわち関数空間を構成する。いま、 Ω 上の関数 $u: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ に対して、Lebegue 空間 $L^2(\Omega)$ は次のように定義される関数の集合である。

$$L^2(\Omega) = \left\{ u: \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid |u|_{L^2} := \sqrt{\int_{\Omega} u(x)^2 dx} < \infty \right\} \quad (4.23)$$

数学的には、この空間は完備なノルム $|\cdot|_{L^2}$ を備えた Banach 空間であるという。定義より明らかに、Lebegue 空間 $L^2(\Omega)$ は、 Ω 上の全ての二乗可積分な関数の集合である。これと同様にして、ある関数の偏導関数を用いて構成される関数空間を定める。いま、 $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}^d$ を 0 以上の

整数の組とし、 $|\alpha| = \sum_{i=1}^d \alpha_i$ を α の長さとする．また、 $D_j^{\alpha_i} = \partial^j / \partial (x^{\alpha_i})^j$ を偏微分演算子、そして $D^\alpha = D_1^{\alpha_1} \dots D_d^{\alpha_d}$ とおく．Sobolev 空間 $H^k(\Omega)$ は次のようにして定義される関数空間である．

$$H^k(\Omega) = \{ u: \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid D^s u \in L^2(\Omega), (\forall s, s \leq k) \} \quad (4.24)$$

ここで、 $D^s u \in L^2(\Omega)$ は、関数 u の全ての $s (\leq k)$ 階偏導関数が二乗可積分であることを意味する．これより、この空間も完備なノルム $|\cdot|_{H^k} = \left(\int_{\Omega} \left(\sum_{|s| \leq k} |D^s u|_{L^2}^2 dx \right)^{1/2} \right)$ を備えた Banach 空間である．一般に、変分問題の弱形式を扱うのに定義される関数空間 $\mathcal{S}$ および $\mathcal{V}$ は無限次元のベクトル空間であり、この空間を有限個の基底ベクトルで張ることはできない．Galerkin 法では、これらの関数空間を有限次元の関数空間で近似的に扱う [80]．すなわち、有限次元関数空間 $\mathcal{S}^h \subset \mathcal{S}$ および $\mathcal{V}^h \subset \mathcal{V}$ を構成し、この関数空間の中で変分問題の近似解を求める．

アイソジオメトリック解析では、この有限次元関数空間 $\mathcal{S}^h$ および $\mathcal{V}^h$ として、 Ω を NURBS 表現するのに用いた NURBS 基底関数を用いる．そこで、以降では一般の変分問題におけるアイソジオメトリック解析の方法を述べる．いま、 u を未知関数とする変分問題の弱形式が、最大で u の 1 階偏導関数 $D^1 u$ を含み、Dirichlet 境界条件が関数 $g: \Gamma_D \rightarrow \mathbb{R}$ を用いて $u|_{\Gamma_D} = g$ のように課されているとする．この変分問題に対して、関数空間 $\mathcal{S}$ および $\mathcal{V}$ を次のようにして構成する．

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= \{ u: \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid u \in H^1(\Omega), u|_{\Gamma_D} = g \} \\ \mathcal{V} &= \{ v: \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid v \in H^1(\Omega), v|_{\Gamma_D} = 0 \} \end{aligned} \quad (4.25)$$

また、変分問題の弱形式が次のようにおけると仮定する．

$$\delta W = \int_{\Omega} \mathcal{W}[u, v] dx = 0 \quad (4.26)$$

ただし、 $v \in \mathcal{V}$ 、 $u \in \mathcal{S}$ であり、 $\mathcal{W}[u, v]$ は関数 u および v の汎関数を表す．いま、 Ω が NURBS 基底関数 $\{ N^i \}_{i=1, \dots, n}$ を用いて、NURBS 写像 $x: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$ により NURBS 表現されているとする．このとき、 $\mathcal{S}^h$ および $\mathcal{V}^h$ をこの NURBS 基底関数を用いて構成することができる．関数 u および v を $\mathcal{S}^h$ および $\mathcal{V}^h$ で表した関数をそれぞれ u^h および v^h で表すとき、 $\forall x \in \Omega$ におけるこれらの値は、NURBS 基底関数 $\{ N^i \}_{i=1, \dots, n}$ と実係数 $\{ u_i \}_{i=1, \dots, n}$ および $\{ v_i \}_{i=1, \dots, n}$ を用いて次のように表すことができる．

$$\begin{aligned} u^h(x) &= \sum_{i=1}^n (N^i \circ x^{-1})(x) u_i \\ v^h(x) &= \sum_{i=1}^n (N^i \circ x^{-1})(x) v_i \end{aligned} \quad (4.27)$$

ここで、 x^{-1} は NURBS 写像 $x: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$ の逆写像である。Eq. (4.26) の変分問題の弱形式は $\hat{\Omega}$ 上の変分問題として次のように再定式化することが可能になる。

$$\delta \hat{W} = \int_{\hat{\Omega}} \mathcal{W}[u^h \circ x, v^h \circ x] \det J \hat{v} = 0 \quad (4.28)$$

このとき、 $\det J$ は NURBS 写像 $x: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$ による Jacobi 行列の行列式、 $\hat{v}$ はパラメーター空間 $\hat{\Omega}$ の体積形式であり、関数 $u^h \circ x$ および $v^h \circ x$ は次のように表されるパラメーター空間 $\hat{\Omega}$ 上の関数である。

$$\begin{aligned} u^h \circ x(t) &= \sum_{i=1}^n N^i(t) u_i \\ v^h \circ x(t) &= \sum_{i=1}^n N^i(t) v_i \end{aligned} \quad (4.29)$$

数学的には、 $u^h \circ x$ および $v^h \circ x$ はそれぞれ関数 u^h および v^h の、NURBS 写像 $x: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$ による引き戻しに他ならず、これは座標系 $x(t) = (x^1(t), \dots, x^d(t))$ から $t = (t^1, \dots, t^d)$ への座標変換とみなすことができる。したがって、この座標変換に伴う Jacobi 行列の各要素 $J_j^i(t)$ は次のように表される。

$$J_j^i(t) = \frac{\partial x^i}{\partial t^j}(t) = \sum_{k=1}^n \frac{\partial N^k}{\partial t^j}(t) a_k^i \quad (4.30)$$

したがって、Eq. (4.28) 中の $\det J$ はこの Jacobi 行列の行列式である。変分問題の弱形式 Eq. (4.28) に含まれると仮定した関数 u^h の 1 階偏導関数 $\partial(u^h \circ x)/\partial x^i(t)$ は、次のように計算することができる。

$$\frac{\partial(u^h \circ x)}{\partial x^i}(t) = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial N^k}{\partial t^j}(t) \frac{\partial t^j}{\partial x^i}(t) \right) u_k = \sum_{k=1}^n \left(\sum_{j=1}^d \frac{\partial N^k}{\partial t^j}(t) (J^{-1})_i^j(t) \right) u_k \quad (4.31)$$

ここで、 $(J^{-1})_i^j(t)$ は Eq. (4.30) の逆行列の各成分を表している。また上式に含まれる NURBS 基底関数の偏導関数は、Eq. (4.10) を用いて計算することができる。以上の方法を具体的な変分問題へ適用することにより、変分問題の弱形式を有限個の連立方程式に帰着させ、変分問題の解を数値解析によって求めることができるようになる。このとき、変分問題の解は構成した $\mathcal{S}^h$ から得られるため、 $\mathcal{S}^h$ の集合の次元が大きいくほど数値解析の精度も高くなる。これは、前節で示したリファインメントによって実現することができる。

4.4 領域分割と overlapped additive Schwarz 法

領域分割法は、主に大規模な問題を複数台のコンピューターを用いて高速に解くために用いられる手法である。そこでの主な方針は、ある領域で定式化された問題を、複数の部分領域上の問題に定式化し直し、これを別々のコンピューターで個別に解きながら、必要に応じてコンピューターの間で通信を行い、分割する前の問題の解を求めるというものである。

アイソジオメトリック解析における領域分割法には、複数のパラメータ空間を境界で貼り合わせて一つの領域を NURBS 表現する multiple patch と呼ばれる手法と、単一のパラメータ空間を複数の部分領域へ分割する手法の二種類が提案されている [79, 81, 82, 83]。前者は、複雑な物体の形状表現とそのアイソジオメトリック解析に適している一方で、パラメータ空間で貼り合わせを行う部分においてはノット列が重複し、NURBS 基底関数が C^0 級になるという欠点がある。その一方で、後者は単純な物体でのアイソジオメトリック解析の高速化に適しており、また初めに構成した基底関数の微分可能性が保たれる。

本論文で解析対象とする連続体は単純な形状であることから、後者の方法によって単一のパラメータ空間を領域分割する手法を採用する。これによって複数台のコンピューターによる並列計算が実現できる。さらに、アイソジオメトリック解析の結果得られる連立方程式を、領域分割を基礎とした overlapped additive Schwarz 法による前処理付き共役勾配法を用いて数値計算することで、さらなる高速化が実現できる [84, 82, 83]。

本節では初めに、NURBS 表現された物体の領域分割の方法を示す。その後、この領域分割を基に overlapped additive Schwarz 法に基づく前処理の方法を示す。

4.4.1 パラメータ空間の局所部分領域への分割と粗部分空間の構成

簡単のため、ここでは NURBS 表現が 1 次元の NURBS 曲線を例にとり、アイソジオメトリック解析における領域分割の方法を示す。多項式次数が p の、 n 個の B-spline 基底関数は、ノット列 $\xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n+p+1}\}$ により定まる。ただし、 $\xi_1 = \xi_2 = \dots = \xi_p = 0$ および $\xi_n = \xi_{n+1} = \dots = \xi_{n+p+1} = 1$ としてノット列 ξ は open であるとする。すべての B-spline 基底関数はパラメータ空間 $\hat{I} = (\xi_1, \xi_{n+p+1})$ 上の関数であり、ここではこれを参照区間と呼ぶことにする。制御点 a_i を決めることで、NURBS 写像 $x: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$ が定まる。

$$x(t) = \sum_{i=1}^n B_{(i,p,\xi)}(t) a_i, \quad \forall t \in \hat{\Omega} \quad (4.32)$$

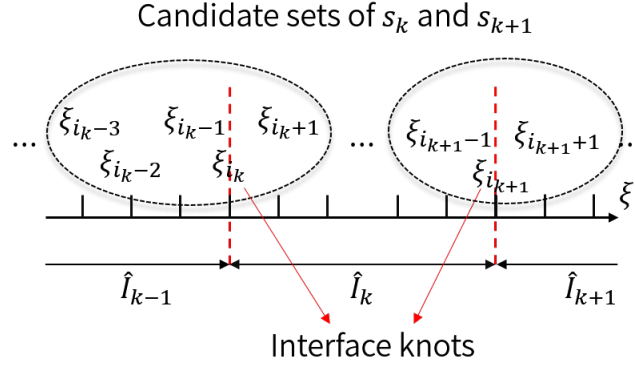


Fig. 4.6: Subdivision $\hat{I}_k$ of the parameter space I and interface knots ξ_{i_k} .

B-spline 基底関数から構成される多項式空間 $\hat{V}$ は次のようになる.

$$\hat{V} = \text{span} \{B_{(i,p,\xi)}\}_{i=1,\dots,n} \quad (4.33)$$

いま, ノット列 ξ から $N+1$ 個の要素 ξ_{i_k} , ($k=1, \dots, N+1$) を $\xi_{i_1} = \xi_p = 0$, $\xi_{i_{N+1}} = \xi_{n+p+1}$ となるように選択する. これを用いて, 部分区間 $\hat{I}_k$ を次のように定義する.

$$\hat{I}_k = (\xi_{i_k}, \xi_{i_{k+1}}). \quad (4.34)$$

これにより, 参照区間 $\hat{I}$ の閉包は次のように分解できる.

$$\overline{(\hat{I})} = [0, 1] = \overline{\bigcup_{k=1,\dots,N} \hat{I}_k} \quad (4.35)$$

この参照区間の, 部分区間への分割の境界を定めている $\xi_{i_1} = 0$, $\xi_{i_{N+1}} = 1$ 以外のノット ξ_{i_k} , ($k=2, \dots, N$) を境界ノットと呼ぶ. Fig. 4.6 に, パラメーター空間 I の, 部分区間 $\{\hat{I}_k\}_{k=1,\dots,N+1}$ への分割と, この分割を定める境界ノットの様子を示す.

この分割を元にして, $\hat{I}$ の重複を含む分解を定める. まず, 区間 $\hat{I}$ の内部の境界ノット ξ_{i_k} , ($k=2, \dots, N$) に対して, 整数 s_k を $s_k \leq i_k \leq s_k + p + 1$ となるように決める. この関係を満たす s_k は唯一とは限らず, その選択には自由度がある. s_k が決められたとき, B-spline 基底関数 $B_{(s_k,p,\xi)}$ の台は $\text{supp } B_{(s_k,p,\xi)} = [\xi_{s_k}, \xi_{s_k+p+1}]$ より, $\hat{I}_k$ および $\hat{I}_{k+1}$ 上で非ゼロとなる. s_k に加えて, 隣接する区間で共有される基底関数の数の指標として, 整数 r をとる. これらを用いて, 空間 $\hat{V}$ の部分空

間 $\hat{V}_k$ を次のように定義する.

$$\hat{V}_k = \begin{cases} \text{span} \{B_{(i,p)}\}_{1 \leq i \leq s_2+r}, & \text{if } k = 1 \\ \text{span} \{B_{(i,p)}\}_{s_N-r \leq i \leq n}, & \text{if } k = N \\ \text{span} \{B_{(i,p)}\}_{s_k-r \leq i \leq s_{k+1}+r} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.36)$$

これにより $\hat{V}$ は部分空間 $\hat{V}_k$ によって、重複部分を含んで分割される. すなわち、ノット列 ξ から境界ノット $\{\xi_{i_k} \mid i_1 = 1, i_{N+1} = n + p + 1\}_{i_k=1, \dots, N+1}$ を選択することでパラメーター空間を部分区間 $\{\hat{I}_k\}_{k=1, \dots, N+1}$ へ分割し、この部分区間に対して s_k および隣接する部分区間の間での基底関数の重複数 r を指定することにより、各部分区間に対応する B-spline 基底関数の作る空間の分割 (Eq. (4.36)) が定まる.

次に 2-level の overlapped additive Schwartz 法に用いる粗空間を定める. Eq. (4.34) で定めた境界ノット ξ_{i_k} を用いて、次の open なノット列をとる.

$$\xi_0 = \underbrace{\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{p+1}(=\xi_{i_1})\}}_{p+1}, \underbrace{\{\xi_{i_2}, \dots, \xi_{i_k}, \xi_{i_{k+1}}, \dots, \xi_{i_N}\}}_{N-1}, \underbrace{\{\xi_{n+1}(=\xi_{i_{N+1}}), \dots, \xi_{n+p+1}\}}_{p+1} \quad (4.37)$$

境界におけるノット列の重複数に着目すると、上式のノット列を用いて構成される B-spline 基底関数は、細空間 $\hat{V}$ を張るものと同一の多項式次数 p を持つ. これにより粗空間 $\hat{V}_0$ は次のように決められる.

$$\hat{V}_0 = \text{span} \{B_{0(i,p,\xi_0)}\}_{i=3, \dots, n_c-2} \quad (4.38)$$

このとき、 $\hat{V}_0$ を張る基底関数の数は $n_c = N + p$ となる.

4.4.2 多次元 NURBS 基底関数で表現される連続体への領域分割の拡張

d 次元 NURBS 基底関数 $\{N^i\}_{i=1, \dots, n}$ により構成される多項式空間 $\hat{V}$ は次のようになる.

$$\hat{V} := \text{span} \{N^i\}_{i=1, \dots, n} \quad (4.39)$$

また、領域 Ω を表現するための制御点 a^i を定めれば、Eq. (4.7) により NURBS 写像 $x: \hat{\Omega} \rightarrow \Omega$ が定まる.

いま、NURBS 基底関数はパラメーター空間の各方向に対応する B-spline 基底関数の積で定義されるため、 d 次元領域の分割では、各 B-spline 基底関数のパラメーター空間で境界ノットと重複指数 r を定め、各々の組み合わせに対して Eq. (4.36) のように部分空間を定めればよい. 例えば $d = 2$

の場合、各方向の局所空間 $\hat{V}_k^a, \hat{V}_l^a$ を定めれば次の空間が決まる.

$$\hat{V}_{kl} = \{ N^{ij} \mid B_{(i,p_1,\xi_1)} \in \hat{V}_k^1, B_{(j,p_2,\xi_2)} \in \hat{V}_l^1 \} \quad (4.40)$$

d 次元 NURBS 基底関数の粗空間もまた、各パラメーター空間の直積により次のように定めることができる.

$$\hat{V}_0 = \{ N_0^{ij} \mid B_{0(i,p_1,\xi_1)} \in \hat{V}_0^1, B_{(j,p_2,\xi_2)} \in \hat{V}_0^1 \} \quad (4.41)$$

4.4.3 Two-level overlapping additive Schwarz 演算子

写像 $V \rightarrow V_k$ と $V_k \rightarrow V$ の行列表現として、制限演算子 $R_k: V \rightarrow V_k$ と拡張演算子 $R_k^T: V_k \rightarrow V$ を定義する. また、細空間 V から粗空間 V_0 の写像の行列表現として、fine-to-coarse 演算子 $R_0: V \rightarrow V_0$ を定める. これらを用いて、two-level overlapping additive Schwarz 前処理演算子 B_{OAS} は次のように定義される.

$$B_{\text{OAS}} := R_0^T A_0^{-1} R_0 + \sum_{k=1}^N R_k^T A_k^{-1} R_k \quad (4.42)$$

ただし、 A_0 および A_k はそれぞれ $A_0 = R_0 A R_0^T$, $A_k = R_k A R_k^T$ によって定まる. これを前処理付き共役勾配法の前処理行列として用いることで、領域分割による大規模な並列計算を実行することが可能になる. 以下では、アイソジオメトリック解析において、この制限演算子 $R_k: V \rightarrow V_k$ と fine-to-coarse 演算子 $R_0: V \rightarrow V_0$ の構成方法を示す.

4.4.4 R_k の構成方法

簡単のため、 Ω が曲線である場合に R_k を構成する方法を示す. このとき、パラメーター空間 $\hat{\Omega}$ は 1 つの B-spline 基底関数の定義域となる. この B-spline 基底関数の多項式次数を $p = 2$ とし、ノット列を $\xi = \{0, 0, 0, 1/5, 2/5, 3/5, 4/5, 1, 1, 1\}$ とする. このとき、基底関数の個数 n は $n = 10 - p - 1 = 7$ となる. Eq. (4.35) より、境界ノット $i_1 = 3, i_2 = 5, i_3 = 8$ を用いて参照区間 $\hat{I} = (0, 1)$ の領域分割を行う. このとき、部分区間は $\hat{I}_1 = (\xi_{i_1}, \xi_{i_2}) = (0, 2/5)$, $\hat{I}_2 = (\xi_{i_2}, \xi_{i_3}) = (2/5, 1)$ となり、部分区間の個数は $N = 2$ である. 境界ノット $\xi_{i_2} = \xi_5$ に対して $s_2 = 4$, すなわち $\xi_{s_2} = \xi_4 = 1/5$ とする. いま、重複指数 r が $r = 0$ のとき、 $\hat{V}_k$, ($k = 1, 2$) は次のようになる.

$$\hat{V}_1 = \text{span} \{ B_{(i,p)} \}_{3 \leq i \leq 4} \quad (4.43)$$

$$\hat{V}_2 = \text{span} \{ B_{(i,p)} \}_{4 \leq i \leq 5} \quad (4.44)$$

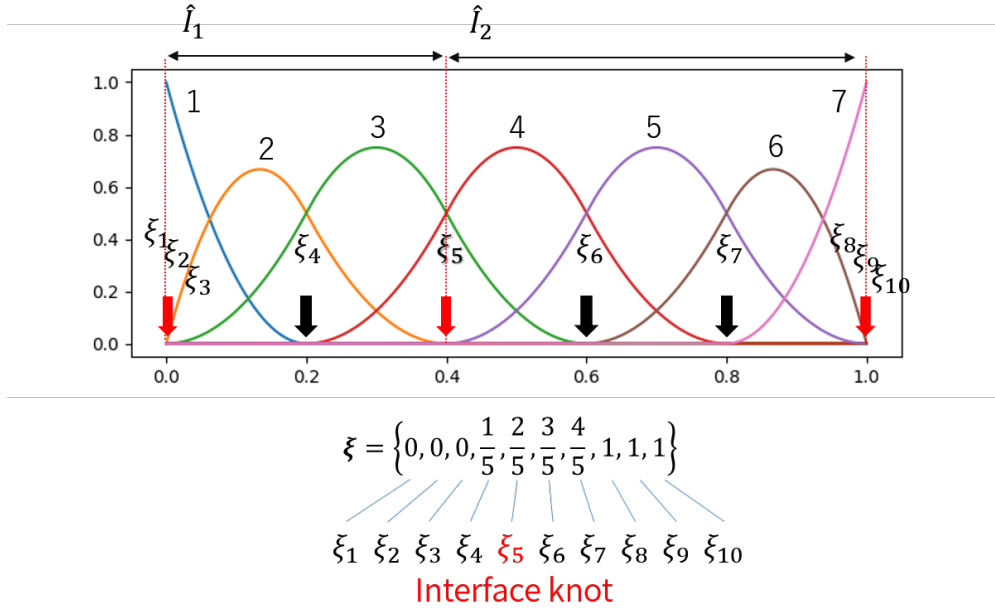


Fig. 4.7: B-spline basis functions with polynomial order $p = 2$ and knot vector $\xi = \{0, 0, 0, 1/5, 2/5, 3/5, 4/5, 1, 1, 1\}$ and its domain decomposition.

また, $r = 1$ のときは次のようになる.

$$\hat{V}_1 = \text{span} \{B_{(i,p)}\}_{3 \leq i \leq 5} \quad (4.45)$$

$$\hat{V}_2 = \text{span} \{B_{(i,p)}\}_{3 \leq i \leq 5} \quad (4.46)$$

Fig. 4.7 より, 重複指数が増えると, 各部分区間の関数空間 $\hat{V}_1$ および $\hat{V}_2$ を構成する B-spline 基底関数の個数が増加することがわかる. $r = 0$ の場合, $\hat{V}_k$ の定義から, 制限演算子 R_k は次のようになる.

$$R_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.47)$$

$$R_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.48)$$

拡張演算子 R_k^T は R_k の転置をとれば求まる.

$$R_1^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.49)$$

$$R_2^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.50)$$

実際, $\forall u = \{u_3, u_4, u_5\} \in V$ に対して,

$$R_1 u = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} \quad (4.51)$$

$$R_2 u = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} \quad (4.52)$$

となることから確かめられる. すなわち, 制限演算子 R_k は参照区間 $\hat{I}$ 上の基底関数の作る関数空間 $\hat{V}$ から, 各部分区間上の基底関数の関数空間 $\hat{V}_k$ への全射として, 拡張演算子 R_k^T は $\hat{V}_k$ から $\hat{V}$ への単写として構成できることがわかる.

4.4.5 R_0 の構成方法

coarse-to-fine 演算子 $R_0: \hat{V} \rightarrow \hat{V}_0$ の行列表現を $R_{0,ij}$ とおく. $\hat{V}$ および $\hat{V}_0$ の基底は B-spline 基底関数 $B_{(i,p,\xi)}$ および $B_{0(i,p,\xi_0)}$ によって張られており, 一般に $\dim \hat{V} > \dim \hat{V}_0$ であるから, $R_{0,ij}$ は次の関係を満たす.

$$B_{0(i,p,\xi_0)}(t) = \sum_{j=1}^n R_{0,ij} B_{(j,p,\xi)}(t) \quad (4.53)$$

上式は Eq. (4.12) と一致することに注意すると, $R_{0,ij}$ は $\hat{\Omega}_0$ 上の基底関数を $\hat{\Omega}$ 上の基底関数へとリファインメントする際に用いる行列 $R_{0,ij} = C_{ij}$ として構成できることがわかる. Ω が d 次元領域の場合にも, これと同様の方法で R_0 を構成することができる.

5 アイソジオメトリック解析の格子欠陥解析への応用

5.1 Cartan の第一構造方程式に対する数値解析

これまで議論してきたように、本論文では格子欠陥を数理的にモデル化するために Riemann-Cartan 多様体を導入した。具体的には、Riemann-Cartan 多様体が持つアフィン接続 ∇_B の振率形式 τ と、転位線の近傍に連続分布する転位密度テンソル α を Hodge の星印演算子を用いて同一視し、これより導かれる Cartan の第一構造方程式を積分することで塑性変形勾配 F_p を決定できることを示した。一方、第 4 章では変分問題の弱形式解法の一つであるアイソジオメトリック解析を導入し、その基礎について概説した。本章でははじめに、Cartan の構造方程式の変分問題へアイソジオメトリック解析を適用し、これは連立方程式へと帰着させる。これによって、任意の転位配置に対する中間状態を数値計算により求めることができる。次に、幾何学的な弾性理論に対しても同様に応力の平衡方程式を弱形式で導出し、これにアイソジオメトリック解析を適用することで非線形連立方程式へと帰着させる。これによって、中間状態 B に弾性変形を加えた現状態 S を求めることができる。

5.1.1 NURBS を用いた転位線の表現と転位密度テンソルの計算

Sec.3.2.4 は転位密度テンソルの係数の計算法について説明したが、本節では転位線を NURBS で表現し、これを用いて具体的な数値計算法を与える。参照状態 $\mathcal{R}$ 上の C^∞ 級曲線を C とし、これを用いて転位線を表現する。 $t \in [0, 1]$ に対応する C 上の点を $c(t) = (c^1(t), c^2(t), c^3(t))$ とおき、各 $c^i(t)$ を n_C 個の NURBS 基底関数 $\{N^\alpha(t) \mid \alpha = 1, \dots, n_C\}$ と制御点 $\{c_\alpha^i \in \mathbb{R} \mid \alpha = 1, \dots, n_C, i = 1, 2, 3\}$ を用いて次のように NURBS 表現する。

$$c^i(t) = \sum_{\alpha=1}^{n_C} N^\alpha(t) c_\alpha^i \quad (5.1)$$

第 4 章で説明したように、NURBS 基底関数 $N^\alpha_{\alpha=1, \dots, n_C}$ は、多項式次数 q と open なノットベクトル $k = \{k_j \mid j = 1, \dots, n_C + q + 1, k_j \leq k_{j+1}\}$ から作られる B-spline 基底関数 $\{B_{(\alpha, q, k)}\}_{\alpha=1, \dots, n_C}$ と、重み $w = \{w_\alpha\}_{\alpha=1, \dots, n_C}$ を用いて次のように定義される。

$$N^\alpha(t) := \frac{w_\alpha B_{(\alpha, q, k)}(t)}{\sum_{\beta} w_\beta B_{(\beta, q, k)}(t)} \quad (5.2)$$

転位線 C は結晶格子のずれの境界線を表しているため、一般に閉曲線になっている ($c(0) = c(1)$) か、または $\mathcal{R}$ の境界に端点を持つという性質がある。 C を NURBS で表現した場合、この条件は C

の端点の制御点 c_1, c_{n_C} に次のいずれかの条件を課すことにより実現できる.

$$c_1 = c_{n_C}, \quad c_1, c_{n_C} \in \partial\mathcal{R} \quad (5.3)$$

多項式次数 q , ノット列 k , 重み w , および上式を満たす制御点 $\{c_\alpha^i \in \mathbb{R} \mid \alpha = 1, \dots, n_C, i = 1, 2, 3\}$ を与えることで, NURBS 基底関数を用いて転位線 C を描くことが可能になる.

参照状態 $\mathcal{R}$ 上のある点 $p \in \mathcal{R}$ における転位密度テンソルの値 $T_{jk}^i(p)$ は, 第 Sec.3.2.4 で定式化した最適化問題 Eq. (3.12) の解を用いて計算することができる. Eq. (3.15) より, i 反復目での増分 $\Delta t^{(i)}$ の計算に必要な $s \in [0, 1]$ における J の 1, 2 階導関数はそれぞれ次のようになる.

$$\frac{dJ}{dt}(s) = \delta_{ij} \frac{dc^i}{dt}(c^j(t) - p^j) = \delta_{ij} \sum_{\alpha=1}^{n_C} c_\alpha^i \frac{dN^\alpha}{dt}(s) \left(\sum_{\beta=1}^{n_C} c_\beta^j N^\beta(s) - p^j \right) \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 J}{dt^2}(s) &= \delta_{ij} \left(\frac{d^2 c^i}{dt^2}(s)(c^j(s) - p^j) + \frac{dc^i}{dt}(s) \frac{dc^j}{dt}(s) \right) \\ &= \delta_{ij} \left(\sum_{\alpha}^{n_C} c_\alpha^i \frac{d^2 N^\alpha}{dt^2}(s) \left(\sum_{\beta}^{n_C} c_\beta^j N^\beta(s) - p^j \right) + \sum_{\alpha, \beta=1}^{n_C} c_\alpha^i \frac{dN^\alpha}{dt}(s) c_\beta^j \frac{dN^\beta}{dt}(s) \right) \end{aligned} \quad (5.5)$$

このとき, NURBS 基底関数の分母多項式を $D(s) = \sum_{\alpha} w_{\alpha} B_{(\alpha, q, k)}(s)$ とおくと, ここで計算が必要な NURBS 基底関数の 2 階導関数は次のようになる.

$$\frac{d^2 N^\alpha}{dt^2}(s) = w_{\alpha} \frac{\ddot{B}_{(\alpha, q, k)}(s) D^2(s) - B_{(\alpha, q, k)}(s) \ddot{D}(s) D(s) - 2\dot{B}_{(\alpha, q, k)}(s) \dot{D}(s) D(s) + 2B_{(\alpha, q, k)}(s) \dot{D}^2(s)}{D(s)^3} \quad (5.6)$$

これを用いて i 反復目での増分 $\Delta t^{(i)}$ を決定することができる.

5.1.2 Cartan の第一構造方程式に対する数値解析

Sec.3.4 で変分問題として導入した Cartan の構造方程式の残差ノルム最小化問題へ Galerkin 法を適用し, Eq. (3.54) および Eq. (3.55) を離散化する. 行列値関数の各成分 $(F_p)_j^i$, H_j^i および $\mathbb{R}^d$ 値関数の各成分 λ^i , y^i が入る無限次元関数空間を次のようにとる.

$$\mathcal{V}_m = \{ (F_p)_j^i \in H^1(\mathcal{R}) \mid (F_p)_j^i \mid_{\partial\mathcal{R}} N^j = 0 \} \quad (5.7)$$

$$\mathcal{W}_m = \{ H_j^i \in H^1(\mathcal{R}) \mid H_j^i \mid_{\partial\mathcal{R}} N^j = 0 \} \quad (5.8)$$

$$\mathcal{V}_v = \{ y^i \in L^2(\mathcal{R}) \} \quad (5.9)$$

$$\mathcal{W}_v = \{ \delta y^i \in L^2(\mathcal{R}) \} \quad (5.10)$$

ここで $H^1(\mathcal{R})$, $L^2(\mathcal{R})$ はそれぞれ $\mathcal{R}$ 上の Sobolev 空間および Lebesgue 空間である.

次に, Galerkin 法に基づいて, これらの関数空間の有限次元への制限をそれぞれ $\mathcal{V}_m^h$, $\mathcal{W}_m^h$, $\mathcal{V}_v^h$, $\mathcal{W}_v^h$ とする. これらの関数空間はいずれも, $\mathcal{R}$ 上の n 個の基底関数 N^α , $\alpha = 1, \dots, n$ で張られているとする. すなわち, $(F_p)_j^i$, H_j^i および λ^i , y^i は, それぞれ $\mathcal{V}_m^h$, $\mathcal{W}_m^h$, $\mathcal{V}_v^h$, $\mathcal{W}_v^h$ の NURBS 基底関数の線型結合として次のように表すことができる.

$$(F_p)_j^i = \sum_{\alpha=1}^n N^\alpha (f_\alpha)_j^i \quad (5.11)$$

$$H_j^i = \sum_{\alpha=1}^n N^\alpha (h_\alpha)_j^i \quad (5.12)$$

$$\lambda^i = \sum_{\alpha=1}^n N^\alpha \lambda_\alpha^i \quad (5.13)$$

$$y^i = \sum_{\alpha=1}^n N^\alpha y_\alpha^i \quad (5.14)$$

これらを Eq. (3.54), および Eq. (3.55) へ代入すると次のようになる.

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{G}[F_p] = & \int_{\mathcal{R}} - \sum_{j < k} \delta_{il} \sum_{\alpha=1}^n \left(\frac{\partial N^\alpha}{\partial x^j} (h_\alpha)_k^i - \frac{\partial N^\alpha}{\partial x^k} (h_\alpha)_j^i \right) \\ & \times \left(T_{jk}^l - \sum_{\beta=1}^n \left(\frac{\partial N^\beta}{\partial x^j} (f_\beta)_k^l - \frac{\partial N^\beta}{\partial x^k} (f_\beta)_j^l \right) \right) v_{\mathcal{R}} \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{L}[F_p, \lambda] = & \int_{\mathcal{R}} \sum_{\alpha, \beta=1}^n \left(-\delta_{il} N^\alpha y_\alpha^l \delta^{jk} \frac{\partial N^\beta}{\partial x^k} (f_\beta)_j^i - \delta_{il} N^\alpha \lambda_\alpha^l \delta^{jk} \frac{\partial N^\beta}{\partial x^k} (h_\beta)_j^i \right. \\ & \left. + \gamma \delta_{il} (N^\alpha y_\alpha^l) (N^\beta \lambda_\beta^l) \right) v_{\mathcal{R}} \end{aligned} \quad (5.16)$$

$\partial N^\alpha / \partial x^j = N_{,j}^\alpha$ とおくと, $d = 3$ のとき $\delta \mathcal{G}[F_p]$ および $\delta \mathcal{L}[F_p, \lambda]$ を次のように変形することができる.

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{G}[F_p] &= - \int_{\mathcal{R}} \delta_{il} \sum_{\alpha=1}^n (N_{,1}^{\alpha}(h_{\alpha})_2^i - N_{,2}^{\alpha}(h_{\alpha})_1^i) \left(T_{12}^l - \sum_{\beta=1}^n (N_{,1}^{\beta}(f_{\beta})_2^l - N_{,2}^{\beta}(f_{\beta})_1^l) \right) v_{\mathcal{R}} \\
&\quad - \int_{\mathcal{R}} \delta_{il} \sum_{\alpha=1}^n (N_{,2}^{\alpha}(h_{\alpha})_3^i - N_{,3}^{\alpha}(h_{\alpha})_2^i) \left(T_{23}^l - \sum_{\beta=1}^n (N_{,2}^{\beta}(f_{\beta})_3^l - N_{,3}^{\beta}(f_{\beta})_2^l) \right) v_{\mathcal{R}} \\
&\quad - \int_{\mathcal{R}} \delta_{il} \sum_{\alpha=1}^n (N_{,1}^{\alpha}(h_{\alpha})_1^i - N_{,3}^{\alpha}(h_{\alpha})_3^i) \left(T_{31}^l - \sum_{\beta=1}^n (N_{,3}^{\beta}(f_{\beta})_1^l - N_{,1}^{\beta}(f_{\beta})_3^l) \right) v_{\mathcal{R}} \\
&= \int_{\mathcal{R}} \delta_{il} \sum_{\alpha=1}^n \begin{pmatrix} (h_{\alpha})_1^i & (h_{\alpha})_2^i \end{pmatrix} \left(-T_{12}^l \begin{pmatrix} -N_{,2}^{\alpha} \\ N_{,1}^{\alpha} \end{pmatrix} + \sum_{\beta=1}^n \begin{pmatrix} N_{,2}^{\alpha}N_{,2}^{\beta} & -N_{,2}^{\alpha}N_{,1}^{\beta} \\ -N_{,1}^{\alpha}N_{,2}^{\beta} & N_{,1}^{\alpha}N_{,1}^{\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (f_{\beta})_1^l \\ (f_{\beta})_2^l \end{pmatrix} \right) v_{\mathcal{R}} \\
&\quad + \int_{\mathcal{R}} \delta_{il} \sum_{\alpha=1}^n \begin{pmatrix} (h_{\alpha})_2^i & (h_{\alpha})_3^i \end{pmatrix} \left(-T_{23}^l \begin{pmatrix} -N_{,3}^{\alpha} \\ N_{,2}^{\alpha} \end{pmatrix} + \sum_{\beta=1}^n \begin{pmatrix} N_{,3}^{\alpha}N_{,3}^{\beta} & -N_{,3}^{\alpha}N_{,2}^{\beta} \\ -N_{,2}^{\alpha}N_{,3}^{\beta} & N_{,2}^{\alpha}N_{,2}^{\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (f_{\beta})_2^l \\ (f_{\beta})_3^l \end{pmatrix} \right) v_{\mathcal{R}} \\
&\quad + \int_{\mathcal{R}} \delta_{il} \sum_{\alpha=1}^n \begin{pmatrix} (h_{\alpha})_3^i & (h_{\alpha})_1^i \end{pmatrix} \left(-T_{31}^l \begin{pmatrix} -N_{,1}^{\alpha} \\ N_{,3}^{\alpha} \end{pmatrix} + \sum_{\beta=1}^n \begin{pmatrix} N_{,1}^{\alpha}N_{,1}^{\beta} & -N_{,1}^{\alpha}N_{,3}^{\beta} \\ -N_{,3}^{\alpha}N_{,1}^{\beta} & N_{,3}^{\alpha}N_{,3}^{\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (f_{\beta})_3^l \\ (f_{\beta})_1^l \end{pmatrix} \right) v_{\mathcal{R}} \\
&= \delta_{il} \sum_{\alpha=1}^n \begin{pmatrix} (h_{\alpha})_1^i & (h_{\alpha})_2^i & (h_{\alpha})_3^i \end{pmatrix} \int_{\mathcal{R}} \left(\begin{pmatrix} T_{12}^l N_{,1}^{\alpha} - T_{13}^l N_{,3}^{\alpha} \\ T_{23}^l N_{,3}^{\alpha} - T_{12}^l N_{,1}^{\alpha} \\ T_{31}^l N_{,1}^{\alpha} - T_{23}^l N_{,3}^{\alpha} \end{pmatrix} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\beta=1}^n \begin{pmatrix} N_{,2}^{\alpha}N_{,2}^{\beta} + N_{,3}^{\alpha}N_{,3}^{\beta} & -N_{,2}^{\alpha}N_{,1}^{\beta} & -N_{,3}^{\alpha}N_{,1}^{\beta} \\ -N_{,1}^{\alpha}N_{,2}^{\beta} & N_{,1}^{\alpha}N_{,1}^{\beta} + N_{,3}^{\alpha}N_{,3}^{\beta} & -N_{,3}^{\alpha}N_{,2}^{\beta} \\ -N_{,1}^{\alpha}N_{,3}^{\beta} & -N_{,2}^{\alpha}N_{,3}^{\beta} & N_{,1}^{\alpha}N_{,1}^{\beta} + N_{,2}^{\alpha}N_{,2}^{\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (f_{\beta})_1^l \\ (f_{\beta})_2^l \\ (f_{\beta})_3^l \end{pmatrix} \right) v_{\mathcal{R}} \tag{5.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{L}[F_p, \lambda] &= \int_{\mathcal{R}} \sum_{\alpha, \beta=1}^n \left(-\delta_{il} y_{\alpha}^i N^{\alpha} \begin{pmatrix} N_{,1}^{\beta} & N_{,2}^{\beta} & N_{,3}^{\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (f_{\beta})_1^l \\ (f_{\beta})_2^l \\ (f_{\beta})_3^l \end{pmatrix} + \gamma \delta_{il} y_{\alpha}^i N^{\alpha} N^{\beta} \lambda_{\beta}^l \right. \\
&\quad \left. - \delta_{il} \begin{pmatrix} (h_{\alpha})_1^i & (h_{\alpha})_2^i & (h_{\alpha})_3^i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_{,1}^{\alpha} \\ N_{,2}^{\alpha} \\ N_{,3}^{\alpha} \end{pmatrix} N^{\beta} \lambda_{\beta}^l \right) v_{\mathcal{R}} \tag{5.18}
\end{aligned}$$

ここで $A^{\alpha\beta}, b^{\alpha l}, h_\alpha^i, x_\beta^l$ をそれぞれ次のようにおく.

$$A^{\alpha\beta} = \int_{\mathcal{R}} \begin{pmatrix} N_{,2}^\alpha N_{,2}^\beta + N_{,3}^\alpha N_{,3}^\beta & -N_{,2}^\alpha N_{,1}^\beta & -N_{,3}^\alpha N_{,1}^\beta & N^\alpha N_{,1}^\beta \\ -N_{,1}^\alpha N_{,2}^\beta & N_{,1}^\alpha N_{,1}^\beta + N_{,3}^\alpha N_{,3}^\beta & -N_{,3}^\alpha N_{,2}^\beta & N^\alpha N_{,2}^\beta \\ -N_{,1}^\alpha N_{,3}^\beta & -N_{,2}^\alpha N_{,3}^\beta & N_{,1}^\alpha N_{,1}^\beta + N_{,2}^\alpha N_{,2}^\beta & N^\alpha N_{,3}^\beta \\ N^\alpha N_{,1}^\beta & N^\alpha N_{,2}^\beta & N^\alpha N_{,3}^\beta & \gamma N^\alpha N^\beta \end{pmatrix} v_{\mathcal{R}} \quad (5.19)$$

$$b^{\alpha l} = \int_{\mathcal{R}} \begin{pmatrix} T_{12}^l N_{,1}^\alpha - T_{13}^l N_{,3}^\alpha \\ T_{23}^l N_{,3}^\alpha - T_{12}^l N_{,1}^\alpha \\ T_{31}^l N_{,1}^\alpha - T_{23}^l N_{,2}^\alpha \\ 0 \end{pmatrix} v_{\mathcal{R}} \quad (5.20)$$

$$h_\alpha^i = \begin{pmatrix} (h_\alpha)_1^i & (h_\alpha)_2^i & (h_\alpha)_3^i & y_\alpha^i \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

$$x_\beta^l = \begin{pmatrix} (f_\beta)_1^l \\ (f_\beta)_2^l \\ (f_\beta)_3^l \\ \lambda_\beta^l \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

これらを用いると $\delta\mathcal{G} + \delta\mathcal{L} = 0$ は次のように表される.

$$\delta\mathcal{G} + \delta\mathcal{L} = \delta_{il} \sum_{\alpha, \beta=1}^n h_\alpha^i (b^{\alpha l} + A^{\alpha\beta} x_\beta^l) = 0 \quad (5.23)$$

上式は任意のテスト関数の組 h_α^i に対して成り立たなければならないため、第一変分ゼロの停留条件
は連立方程式 $b^{\alpha l} + \sum_{\beta=1}^n A^{\alpha\beta} x_\beta^l = 0$, $l = 1, 2, 3$ に帰着する. この連立方程式は、ある l に対して
合計 $(d+1)n = 4n$ 個の未知係数の組 x_β^l に関する線形方程式である. したがって、各 l に対して独
立にこれらの連立方程式の解を求めることで、目的関数 Eq. (3.33) を最小化する解を数値計算する
ことができる.

5.2 Riemann-Cartan 多様体上の弾性理論

中間状態 $\mathcal{B}$ が決定されると、これを Euclid 空間 $\mathbb{R}^3$ へ埋め込むことで現状態が決定され、これに
よって格子欠陥の力学場が決定される. この埋め込み写像は弾性変形に他ならないため、超弾性体の
変分原理を用いて解析することができる.

本研究では、格子欠陥を含む連続体を St. Venant-Kirchhoff 型超弾性体とする. このとき、ひず
みエネルギー密度 $\mathcal{W}$ は中間状態における Green ひずみ $E_{\mathcal{B}}$ の関数として、次のように表すことがで
きる [65, 53].

$$\mathcal{W}(E_{\mathcal{B}}) = \frac{1}{2} (\lambda E_{\mathcal{B},ii}^2 + \mu E_{\mathcal{B},ij} E_{\mathcal{B},ij}) \quad (5.24)$$

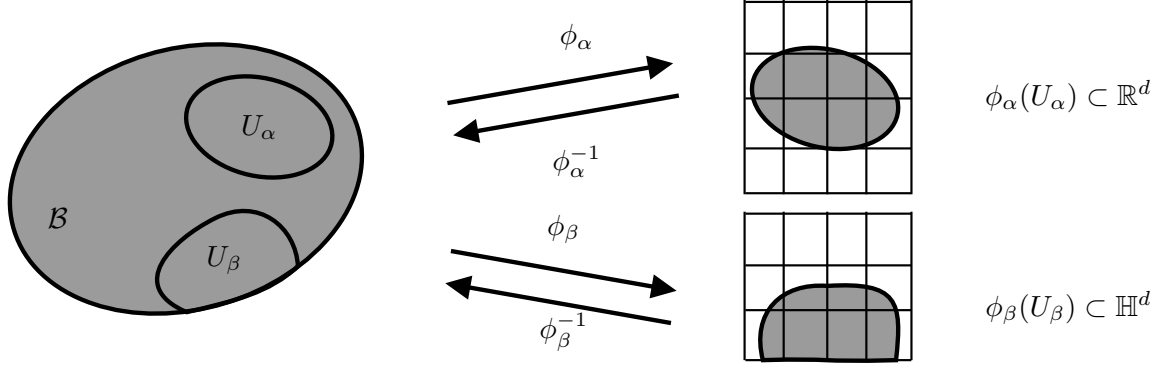


Fig. 5.1: Local diffeomorphism between charts $\phi_\alpha: U_\alpha \rightarrow \mathbb{R}^d$ and $\phi_\beta: U_\beta \rightarrow \mathbb{H}^d$ in a manifold with boundary $\mathcal{B}$.

ただし λ および μ は Lamé 定数である．これより，第二 Piola-Kirchhoff 応力テンソル $S_{\mathcal{B}} = \partial \mathcal{W} / \partial E_{\mathcal{B}}$ は次のようになる [53].

$$S_{\mathcal{B}} = (\lambda E_{\mathcal{B}, ii} \delta^{kl} + \mu E_{\mathcal{B}, ij} \delta^{ik} \delta^{jl}) e_k \otimes e_l \quad (5.25)$$

ただし $(e_1, \dots, e_d)$ は $\mathcal{B}$ の正規直交枠である．

連続体に外力が負荷されてていないとき，塑性変形によって連続体に生じる弾性ひずみエネルギー W は次のようになる．

$$W = \int_{\mathcal{B}} \mathcal{W}(y) v_{\mathcal{B}} \quad (5.26)$$

ここで $v_{\mathcal{B}} \in \Omega^d(\mathcal{B})$ は $\mathcal{B}$ の体積形式である．向きづけられた境界付き多様体 $\mathcal{B}$ の上での積分は， $\bigcup_{\alpha \in A} U_\alpha = \mathcal{B}$ なるチャートの族 $\{ (U_\alpha, \phi_\alpha^1, \dots, \phi_\alpha^d) \}_{\alpha \in A}$ を用いて次のように定義される [60].

$$W = \int_{\mathcal{B}} \mathcal{W}(E) v_{\mathcal{B}} = \sum_{\alpha \in A} \int_{U_\alpha} \mathcal{W}(E) v_{\mathcal{B}} \quad (5.27)$$

ここで，各チャート U_α の上での積分は，Fig. 5.1 のように座標系（各チャートと $\mathbb{R}^d$ または $\mathbb{H}^d$ の間の微分同相写像） ϕ_α を用いて $\mathbb{R}^d$ 上，または境界付近の点については $\mathbb{H}^d$ 上の積分として次のように計算される．

$$\int_{U_\alpha} \mathcal{W}(E) v_{\mathcal{B}} = \int_{\phi_\alpha(U_\alpha)} (\phi_\alpha^{-1})^* (\mathcal{W}(E) v_{\mathcal{B}}) \quad (5.28)$$

しかしながら，この定義にしたがって中間状態 $\mathcal{B}$ 上の積分を実行するためには，チャートの族 $\{ (U_\alpha, \phi_\alpha^1, \dots, \phi_\alpha^d) \}_{\alpha \in A}$ を具体的に構成する必要がある，Euclid 空間にない中間状態 $\mathcal{B}$ に対してこれを実行するのは容易ではない．この問題は，微分同相写像 $\psi: \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{B}$ を用いてひずみエネルギー

ギー W を Euclid 空間上の参照状態 $\mathcal{R}$ へ写すことで解決することができる.

このとき, Eq. (5.27) は次のように表すことができる.

$$\begin{aligned} W &= \psi^* W = \psi^* \left(\int_{\mathcal{B}} \mathcal{W}(E_{\mathcal{B}}) v_{\mathcal{B}} \right) \\ &= \int_{\mathcal{R}} \psi^* (\mathcal{W}(E_{\mathcal{B}})) \psi^* v_{\mathcal{B}} \end{aligned} \quad (5.29)$$

$E_{\mathcal{R}} = \psi^* E_{\mathcal{B}}$ は次のようになる.

$$E_{\mathcal{R}} = E_{\mathcal{R},ij} dx^i \otimes dx^j = \frac{\delta_{ij}}{2} \left(\frac{\partial y^i}{\partial x^k} \frac{\partial y^j}{\partial x^l} - (F_p)_i^k (F_p)_j^l \right) dx^i \otimes dx^j \quad (5.30)$$

また, 第二 Piola-Kirchhoff 応力テンソル $S_{\mathcal{R}}$ は次のように表される.

$$S_{\mathcal{R}} = S_{\mathcal{R}}^{kl} \frac{\partial}{\partial x^k} \otimes \frac{\partial}{\partial x^l} = (\lambda E_{\mathcal{R},ij} (C_p^{-1})^{ij} (C_p^{-1})^{kl} + 2\mu E_{\mathcal{R},ij} (C_p^{-1})^{ik} (C_p^{-1})^{jl}) \frac{\partial}{\partial x^k} \otimes \frac{\partial}{\partial x^l} \quad (5.31)$$

同様にして, 中間状態の体積形式 $\psi^* v_{\mathcal{B}} = \vartheta_{\mathcal{B}}^1 \wedge \cdots \wedge \vartheta_{\mathcal{B}}^d$ は, $\mathcal{R}$ の体積形式 $v_{\mathcal{R}}$ を用いて次のように表すことができる.

$$\begin{aligned} \psi^*(v_{\mathcal{B}}) &= \psi^*(\vartheta_{\mathcal{B}}^1 \wedge \cdots \wedge \vartheta_{\mathcal{B}}^d) \\ &= \psi^* \vartheta_{\mathcal{B}}^1 \wedge \cdots \wedge \psi^* \vartheta_{\mathcal{B}}^d \\ &= ((F_p)_{i_1}^1 dx^{i_1}) \wedge \cdots \wedge ((F_p)_{i_d}^d dx^{i_d}) \\ &= \det F_p v_{\mathcal{R}} \end{aligned} \quad (5.32)$$

ただし $\det: \mathbb{R}^{d \times d} \rightarrow \mathbb{R}$ は行列式を表している.

以上より, Eq. (5.29) は現状態における座標を表す関数 $(y^i) = (y^1, \dots, y^d)$ の汎関数 $W[y]$ として次のように表すことができる.

$$W[y] = \int_{\mathcal{R}} \frac{1}{2} S_{\mathcal{R}}^{ij} E_{\mathcal{R},ij} \det F_p v_{\mathcal{R}} \quad (5.33)$$

ここで, 中間状態の体積形式 $v_{\mathcal{B}}$ と現状態の体積形式 $v_{\mathcal{S}}$ は次のように表される.

$$v_{\mathcal{B}} = J v_{\mathcal{S}} \quad (5.34)$$

ただし, J は中間状態から現状態への体積変化率で, 次のように定めることができる.

$$J = \det(F_e) = \frac{\det(F)}{\det F_p} \quad (5.35)$$

これと第二 Piola-Kirchhoff 応力テンソル $S_{\mathcal{R}}$, および変形勾配 F を用いれば, Cauchy 応力テンソル

σ は次のように定めることができる [85].

$$\sigma = \sigma^{ij} \frac{\partial}{\partial y^i} \otimes \frac{\partial}{\partial y^j} = \frac{1}{J} S_{\mathcal{R}}^{kl} F_k^i F_l^j \frac{\partial}{\partial y^i} \otimes \frac{\partial}{\partial y^j} \quad (5.36)$$

5.2.1 応力の平衡方程式

前節で導かれた参照状態 $\mathcal{R}$ 上のひずみエネルギー汎関数 $W[y]$ は、現状態 S の座標 $(y^i) = (y^1, \dots, y^d)$ を $\mathcal{R}$ 上の未知関数の組とする汎関数 $W[y]$ とみることができる. この W は参照状態 $\mathcal{R}$ 上で定義されていることから、積分領域 $\mathcal{R}$ は既知であり、したがってアイソジオメトリック解析による数値計算を実行することができる. ここでは $W[y]$ に変分原理を適用することで、連続体の弾性変形の支配方程式を導出する.

参照状態 $\mathcal{R}$ の境界 $\partial\mathcal{R}$ を、 $\partial\mathcal{R} = \overline{\Gamma_D \cap \Gamma_N}$ のように二つの領域 Γ_D および Γ_N の和の閉包で表す. ただし Γ_D および Γ_N は、それぞれ現状態 S での座標が $y^i = D^i$ により指定された Dirichlet 境界、および表面力が付与された Neumann 境界を表しており、 $\Gamma_D \cap \Gamma_N \neq \emptyset$ を満たすものとする. いま、 d 個の未知関数 (y^i) およびテスト関数 $(h^i) = (h^1, \dots, h^d)$ が入る関数空間を次のようにとる.

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \{ y^i \in H^1(\mathcal{R}) \mid y^i|_{\Gamma_D} = D^i \} \\ \mathcal{W} &= \{ h^i \in H^1(\mathcal{R}) \mid h^i|_{\Gamma_D} = 0 \} \end{aligned} \quad (5.37)$$

ただし $H^1(\mathcal{R})$ は $\mathcal{R}$ 上の Sobolev 空間である. y の変分を $h = (h^1, \dots, h^d)$ とする. h の各成分は $h^i|_{\Gamma_D} = 0$ を満たすとする.

変分原理より、応力の平衡方程式はひずみエネルギー汎関数の第一変分 $\delta W[y]$ がゼロの停留条件として与えられる. Eq. (5.33) より、 $W[y]$ の第一変分は次のように計算される.

$$\delta W[y] = \int_{\mathcal{R}} S_{\mathcal{R}}^{ij} \delta_{kl} \frac{\partial h^k}{\partial x^i} \frac{\partial y^l}{\partial x^j} \det(F_p) \quad (5.38)$$

これより応力の平衡方程式（弱形式）は次のようになる.

$$f(y) = \int_{\mathcal{R}} S_{\mathcal{R}}^{ij} \delta_{kl} \frac{\partial h^k}{\partial x^i} \frac{\partial y^l}{\partial x^j} \det F_p \nu_{\mathcal{R}} = 0 \quad (5.39)$$

$f(y) = 0$ は d 個の未知関数の組 (y^i) に関する 1 本の非線形微積分方程式である.

5.3 応力の平衡方程式に対する数値解析

前節で得た弾性変形を支配する応力の平衡方程式に対して、アイソジオメトリック解析を用いて数値計算する方法を示す.

5.3.1 弾性変形のアイソジオメトリック解析

弱形式の応力の平衡方程式 (Eq. (5.39)) をアイソジオメトリック解析により数値計算する方法について説明する. $\mathcal{R}$ を n 個の NURBS 基底関数 $\{N^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,n}$ を用いて NURBS 表現し, $\{N^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,n}$ によって張られる有限次元関数空間を $\mathcal{V}^h$ および $\mathcal{W}^h$ と表す. これらが Eq. (5.37) の関数空間の部分空間となるよう, $\{N^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,n}$ は少なくとも C^0 級となるようにする. $\mathcal{V}^h$ および $\mathcal{W}^h$ の基底関数と実係数を用いて, y^i および h^i を次のように表す.

$$\begin{aligned} y^i &= \sum_{\alpha=1}^n N^\alpha y_\alpha^i \\ h^i &= \sum_{\alpha=1}^n N^\alpha h_\alpha^i \end{aligned} \quad (5.40)$$

これを Eq. (5.39) へ代入することで次式を得る.

$$\delta_{kl} \frac{h_\alpha^k}{2} \int_{\mathcal{R}} S_{\mathcal{R}}^{ij} \frac{\partial N^\alpha}{\partial x^i} \frac{\partial N^\beta}{\partial x^j} y_\beta^l \det F_p v_{\mathcal{R}} = 0 \quad (5.41)$$

ここで, 定数係数 $1/2$ を除いて f_k^α を

$$f_k^\alpha = \delta_{kl} \int_{\mathcal{R}} S_{\mathcal{R}}^{ij} \frac{\partial N^\alpha}{\partial x^i} \frac{\partial N^\beta}{\partial x^j} y_\beta^l \det F_p v_{\mathcal{R}} \quad (5.42)$$

とおくと, Eq. (5.41) は $h_\alpha^k f_k^\alpha = 0$ と表すことができる. いま, y のテスト関数 (h^i) は $\mathcal{R}$ 上の任意関数の組なので, この方程式は任意の係数 h_α^i に対して成り立つ. したがって, 上式は nd 個の非線形微積分方程式 $f_i^\alpha = 0$ に帰着する. この方程式に Newton-Raphson 法などの非線形最適化を適用することで未知係数 y_α^i を決定することができる.

5.3.2 Newton 法と線形化

前節で導出した y に関する非線形微積分方程式 $f_i^\alpha = 0$ を Newton 法によって数値解析する. いま, 第 I 反復における解の推定値を $y_{(I)}$, $I = 1, 2, \dots$ とおく. また $y_{(I+1)} = y_{(I)} + \Delta y_{(I)}$ とおき, これを Eq. (5.39) へ代入した値を $f(y_{(I+1)})$ とおく. 第 I 反復における解の増分 $\Delta y_{(I)}$ は理想的には $f(y_{(I+1)}) = 0$ を満たすようにとれば良い. Newton 法では $f(y_{(I+1)})$ を $y_{(I)}$ の周りで Taylor 展開を 1 次で打ち切って得られる線形方程式系の解として与える. すなわち, $f(y_{(I+1)})$ の $y_{(I)}$ の周り

での Taylor 展開は次のようになる．

$$f(y_{(I+1)}) = f(y_{(I)}) + \frac{\partial f}{\partial \Delta y_{(I),s}^r}(y_{(I)}) \frac{\partial \Delta y_{(I)}^s}{\partial x^r} + \dots \quad (5.43)$$

ここで $\partial f / \partial \Delta y_{(I),r}$ は各 $\partial y_{(I)}^i / \partial x^r$, $i = 1, \dots, d$ に関する f の偏導関数である．これより第 I 反復での増分 $\Delta y_{(I)}$ が次の線形方程式の解として定まることがわかる．

$$f(y_{(I)}) + \frac{\partial f}{\partial \Delta y_{(I)}}(y_{(I)}) \Delta y_{(I)} = 0 \quad (5.44)$$

なお，本研究で解析対象とする格子欠陥は，ひずみの大部分が転位線に沿って集中しており，他の領域は未変形状態に近い形状となっている．そのため，Newton 法の初期値は参照状態の座標として解析を行う．

6 格子欠陥のモデル化と力学場の非線形力学解析

6.1 転位密度テンソル

Volterra 転位は最も古典的な転位モデルとして知られている [3]. この転位モデルは, 連続体中に特異な応力場を構成するが, これと同様に転位密度テンソルも次の特異な関数となる. 一例として, x^3 軸に平行な転位線を持ち, Burgers ベクトルが $(b, 0, 0)$ の刃状転位について考えると, その転位密度テンソルの α_{12} 成分は次のように表される [43].

$$\alpha_{12}(x) = b\delta(x^1)\delta(x^2) \quad (6.1)$$

ここで δ は Dirac デルタ, b は刃状転位の Burgers ベクトルである.

連続転位分布論における転位モデルとしてよく知られているものに, Peierls-Nabarro モデルがある [86, 87]. このモデルでは, 結晶性固体はすべり面を挟んでそれぞれ上下の二原子層を境界とする半無限の線形弾性体としてモデル化され, 転位の連続分布はこの二原子層に局在化した Burgers ベクトルの分布に対応する変位を用いて記述される. この変位は, 二原子層を構成する原子配列の周期ポテンシャル (Peierls ポテンシャル) を反映する応力と, 連続分布させた Burgers ベクトルから計算される Volterra 転位の応力の平衡条件によって決められる. すべり面上下の二原子層に離散モデルを導入することで, 強い非線形性を有する転位芯近傍での結晶格子の変形を記述することが可能となり, この結果得られる転位の連続分布は, 結晶格子の Peierls ポテンシャルを反映したものとなる. このとき, Peierls-Nabarro モデルの転位密度テンソルは, すべり面に局在化した関数として次のように表される [43].

$$\alpha_{12}(x) = \frac{b}{\pi} \frac{\zeta}{(x^1)^2 + \zeta^2} \delta(x^2) \quad (6.2)$$

ここで $\zeta = d/(2(1 - \nu))$ は転位芯のサイズを特徴付けるパラメータであり, 原子配列の間隔 d および Poisson 比 ν を用いて表される.

その他の研究報告としては, 分子動力学法を用いて, 連続分布した転位の Burgers ベクトルを計算する方法が知られている [88, 89, 90, 91]. また, 第一原理計算により高精度に計算された一般化積層欠陥エネルギー (Peierls ポテンシャル) に Peierls-Nabarro モデルを組み合わせた計算も知られている [92]. 一方, 連続体力学の枠組みを用いたものとしては, 1 次および 2 次ひずみ勾配弾性理論を用いて滑らかで有界な転位密度テンソルが導出されている [93, 94]. これら一連の報告から明らかなように, すると, 転位密度テンソル α は一般化積層欠陥エネルギーと密接に結びついており, したがっ

て材料やその状態に応じて大きく異なっていると言える．つまり，材料やその状態に依存しない普遍的な転位密度テンソル α は存在せず，したがってここでの転位のモデル化には一定の仮定が不可欠である．

そこで本研究では，数値計算に用いる転位密度テンソルの関数形として単純な動径分布関数を用いる．具体的には，ある転位線の周辺に分布する転位密度を，次式で定義された連続分布関数 f_q を用いて表す．

$$f_q(r) = \begin{cases} \frac{3}{\pi R^2} \left(1 - \frac{r}{R}\right) & (r \leq R) \\ 0 & (r > R) \end{cases} \quad (6.3)$$

ここで，正の実数 R は転位芯の幅を定めるパラメーターである．この関数 f_q は， $r \leq R$ で転位線上の点 q からの距離 r に比例してその値が減少していき， $r > R$ ではゼロとなる区分 1 次多項式を表している．なお，係数 $3/\pi R^2$ は，半径 $R_0 > R$ の円板上でこの関数を積分した際に， $\int_0^{2\pi} \int_0^{R_0} f_q(r) r dr d\theta = 1$ を満たすように定めている．

6.2 塑性変形勾配の解析方法の比較

幾何学的な弾塑性理論において，塑性変形勾配 F_p は Cartan の第一構造方程式の解として定めることができる．本論文では，Cartan の第一構造方程式の積分法として，ホモトピー演算子を用いて解析的に計算する方法と，変分問題として数値計算する方法の 2 種類を導入した．本節では，これら 2 種類の方法を平面ひずみ問題として定式化した 2 次元平面上の刃状転位に対して適用し，両者の特徴について検証する．

6.2.1 問題設定

連続体の参照状態 $\mathcal{R} \subset \mathbb{R}^2$ を矩形領域 $\mathcal{R} = \{(x^1, x^2) | -L/2 < x^i < L/2, L = 1\}$ とし， $\mathcal{R}$ の中央 $q = (0, 0)$ に Burgers ベクトルが $b = (0.1, 0)$ で表される刃状転位が存在するとする．この刃状転位の分布関数を Eq. (6.3) で定義される動径分布関数 $f_q: \mathcal{R} \rightarrow \mathbb{R}$ とし，転位芯の幅を定めるパラメーターを $R = 0.1$ とおく．Fig. 6.1(a) に参照状態の形状を，Eq. (6.3)(b) に分布関数 f_q の様子を示す．このとき， $\mathcal{R}$ 上の転位密度テンソル α ，およびこれと Hodge 双対な参照状態 $\mathcal{R}$ 上の振率形式 τ は次のようになる．

$$\begin{aligned} \alpha &= b^1 f_q \frac{\partial}{\partial z^1} \otimes dx^2 \\ \tau &= b^1 f_q \frac{\partial}{\partial z^1} \otimes dx^1 \wedge dx^2 \end{aligned} \quad (6.4)$$

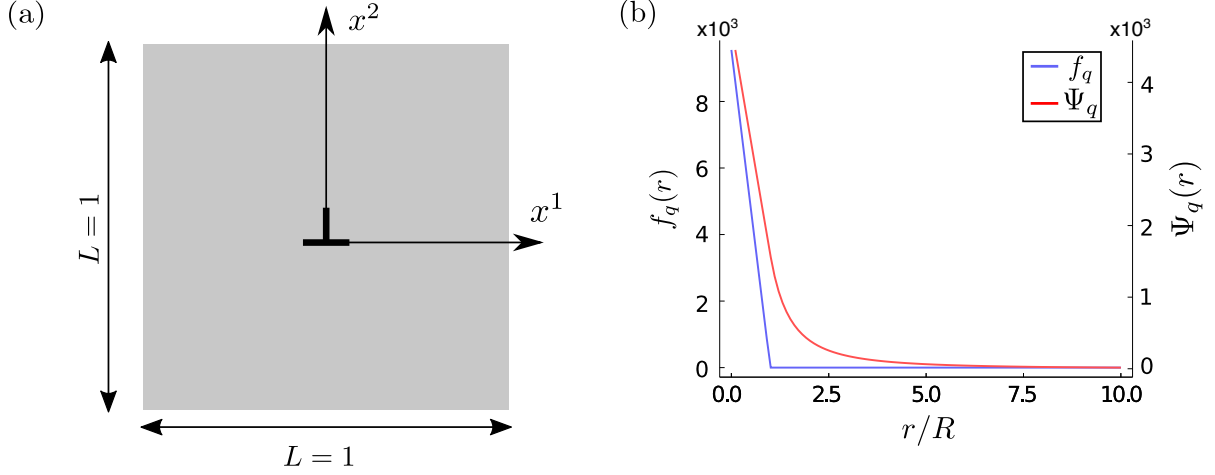


Fig. 6.1: (a) Reference state $\mathcal{R}$ of the continuum and position of the edge dislocation. (b) Function f_q and Ψ_q .

6.2.2 ホモトピー演算子による Cartan の構造方程式の解

はじめに、ホモトピー演算子を用いて Eq. (6.4) で与えられる刃状転位の塑性変形勾配を求める。参照状態 $\mathcal{R}$ はそれ自身が星状領域であるので、この全域で q を中心とするホモトピー演算子 H_q を構成することができる。Eq. (3.19) より、中間状態 $\mathcal{B}$ の双対枠 ϑ^i は $\vartheta^i = dH_q\vartheta^i + H_q d\vartheta^i$ と表すことができる。 $dH_q\vartheta^i$ は、振率形式と無関係に決まる $\mathcal{R}$ 上の 1 形式の組であり、本研究では振率形式がゼロ ($\tau = 0$) である場合に、中間状態 $\mathcal{B}$ が参照状態 $\mathcal{R}$ と一致するよう $dH_q\vartheta^i = dx^i$ とおいた。これは、転位が存在しない場合に弾塑性理論が通常の弾性理論と一致するという物理的に自然な仮定である。ここで、Eq. (2.70) より $d\vartheta^i = \tau^i$ となることから、 $H_q d\vartheta^i = H_q(\tau^i)$ を計算すれば良い。ホモトピー演算子の性質より、この計算は次のようになる。

$$\begin{aligned}
H(\tau^1) &= \left\langle (x^i - q^i) \frac{\partial}{\partial x^i}, \int_0^1 h_q^*(\tau^1) \frac{1}{\lambda} d\lambda \right\rangle \\
&= \left\langle (x^i - q^i) \frac{\partial}{\partial x^i}, \int_0^1 h_q^* (b^1 f_q dx^1 \wedge dx^2) \frac{1}{\lambda} d\lambda \right\rangle \\
&= \left\langle (x^i - q^i) \frac{\partial}{\partial x^i}, b^1 \int_0^1 (f_q(\lambda r) \lambda^2 dx^1 \wedge dx^2) \frac{1}{\lambda} d\lambda \right\rangle \\
&= b^1 \int_0^1 (f_q(\lambda r) \lambda d\lambda) \left\langle (x^i - q^i) \frac{\partial}{\partial x^i}, dx^1 \wedge dx^2 \right\rangle \\
&= b^1 \int_0^1 (f_q(\lambda r) \lambda d\lambda) \epsilon_{3ij} (x^i - q^i) dx^j
\end{aligned} \tag{6.5}$$

ここで上式内の積分は次のように計算することができる.

$$\begin{aligned}\Psi_q(r) &= \int_0^1 f_q(\lambda r) \lambda d\lambda \\ &= \begin{cases} -\frac{(3R(R-r)^2 - 2(R-r)^3 - R^3)}{2\pi R^3 r^2} & (r \leq R) \\ \frac{1}{2\pi r^2} & (r > R) \end{cases} \end{aligned} \quad (6.6)$$

この関数 $\Psi_q(r)$ の様子を Fig. 6.1 に示す. これより, $f_q(r)$ は C^0 級の区分 1 次多項式であり, その傾きは $r = R$ で不連続となる一方で, $\Psi_q(r)$ は C^1 級の区分関数であり, $r = R$ でも滑らかであることがわかる. 以上より, ϑ^i は次のように表すことができる.

$$\vartheta^i = dx^i + b^1 \Psi_q(r) \epsilon_{3ij} (x^i - q^i) dx^j \quad (6.7)$$

これより, Eq. (2.54) を用いると塑性変形勾配の各成分 $(F_p)_j^i$ は次のようになる.

$$F_p = \begin{pmatrix} 1 - (x^2 - q^2)b^1 \Psi_q(r) & (x^1 - q^1)b^1 \Psi_q(r) \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

6.2.3 数値計算による Cartan の構造方程式の解

次に, 同じ問題設定に対して, Sec.3.4 で構築した Cartan の第一構造方程式の変分問題をアイソジオメトリック解析にを用いて数値計算し, 塑性変形勾配 F_p を求めた. このとき, Eq. (3.32) に含まれるペナルティ項の係数は $\gamma = 100$ とおいた. また, 矩形領域 $\mathcal{R}$ は $n_1 = 250$ および $n_2 = 250$ 個の 2 次の B-spline 基底関数を用いて表現し, ノット列は一様とした. アイソジオメトリック解析によって得られる線形連立方程式 Eq. (5.23) は, 直接法により数値解を求めた.

6.2.4 解析結果と考察

Fig. 6.2 に, ホモトピー演算子を用いて得られた F_p の解析結果と, (c), (d) にアイソジオメトリック解析により得られた F_p の解析結果を示す. Fig. 6.2(a) と Fig. 6.2(c), および Fig. 6.2(b) と Fig. 6.2(d) をそれぞれ比較すると, 異なる手法によって求めた結果は境界付近を除いて定量的にほぼ一致することがわかる. その一方で, 境界付近の分布はいずれの成分も大きく異なっている. すなわち, ホモトピー演算子を用いて求めた Fig. 6.2(a), (b) では, 境界付近でもその等高線は円弧上に広がっているのに対して, 数値計算により求めた Fig. 6.2(a)(b) を見ると, 境界付近で等高線が境界と直交している様子が確認できる. これは, 変分問題の定式化における塑性変形勾配には, Eq. (3.34) で表される境界条件が課されているためである. 一般に, ホモトピー演算子を用いた解析的手

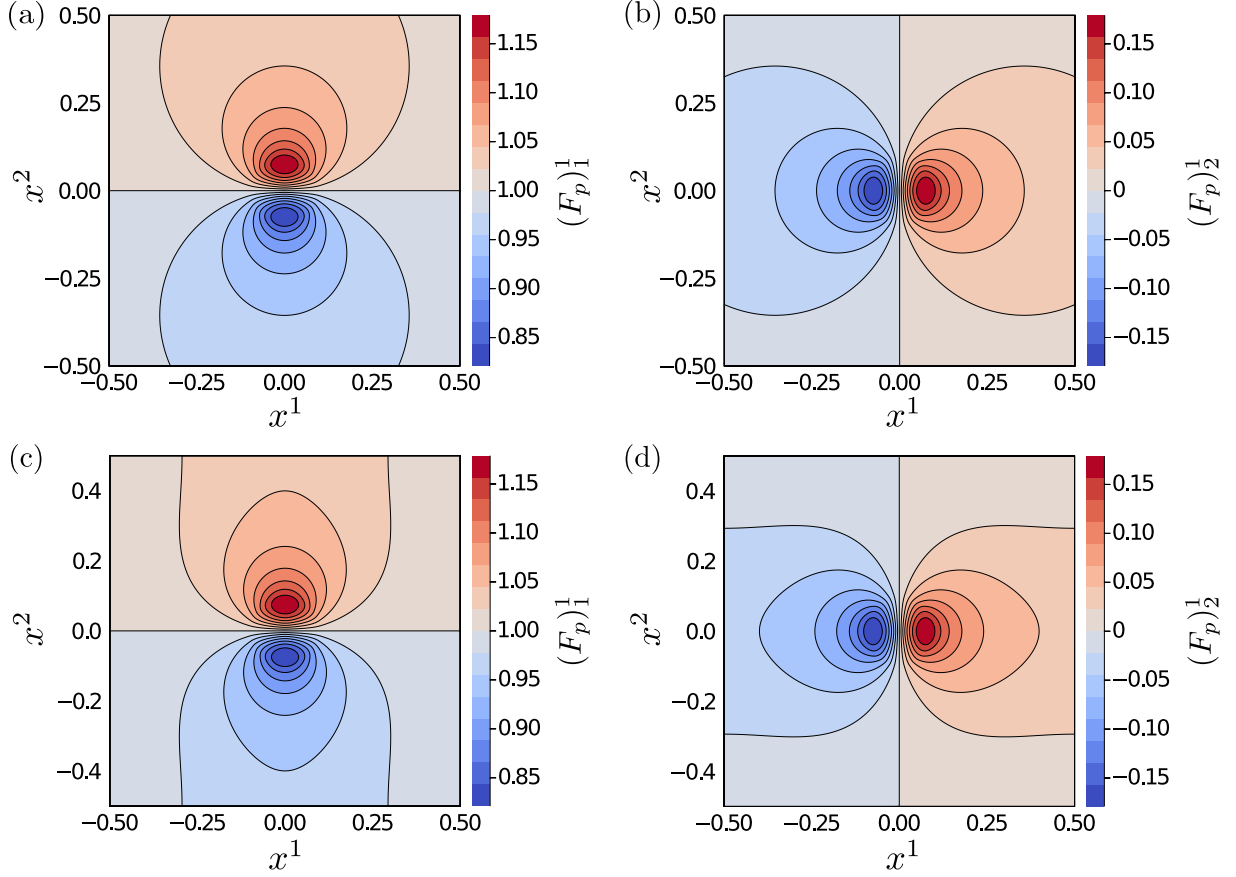


Fig. 6.2: Plastic distortion components $(F_p)_1^1$ and $(F_p)_2^1$ calculated by using the homotopy operator for (a) and (b) and the numerical method for (c) and (d).

法に対して同様の境界条件を課するのは難しく、転位が境界付近に配置している問題や、複数の転位が配置された現実の問題の場合には、変分問題による定式化を用いた F_p の決定法が適していると考えられる。この一方で、変分問題による定式化では弾性変形を計算する以前に予め塑性変形勾配を求めるための数値計算を実行する必要がある、計算時間の側面ではホモトピー演算子を用いる手法が高速である。また、Eq. (6.6) および Eq. (6.8) より、塑性変形勾配の各成分は転位の中心からの距離に反比例しており、境界から十分遠方に転位が配置されている場合には、ホモトピー演算子によって十分高い精度で塑性変形勾配を計算することができる。

6.3 直線状らせん転位のモデル化と数値解析

6.3.1 問題設定と数値解析の条件

連続体の参照状態 $\mathcal{R} \subset \mathbb{R}^3$ を矩形領域 $\mathcal{R} = \{(x^1, x^2, x^3) | -L/2 < x^i < L/2, L = 1\}$ とし、転位線 C を x^3 軸に沿った直線 $C = \{(x^1, x^2, x^3) | x^1 = x^2 = 0, -L/2 < x^3 < L/2\}$ とおく。この転位

線の Burgers ベクトルを $b = (0, 0, b_s)$ とおくと, C の接ベクトルと Burgers ベクトルは常に平行となり, らせん転位をモデル化することができる. このらせん転位の分布関数を Eq. (6.3) で定義される動径分布関数 f_q とし, 転位芯の幅を定めるパラメーター R を $R = 1.0 \times 10^{-2}$ とおく. Fig. 6.3

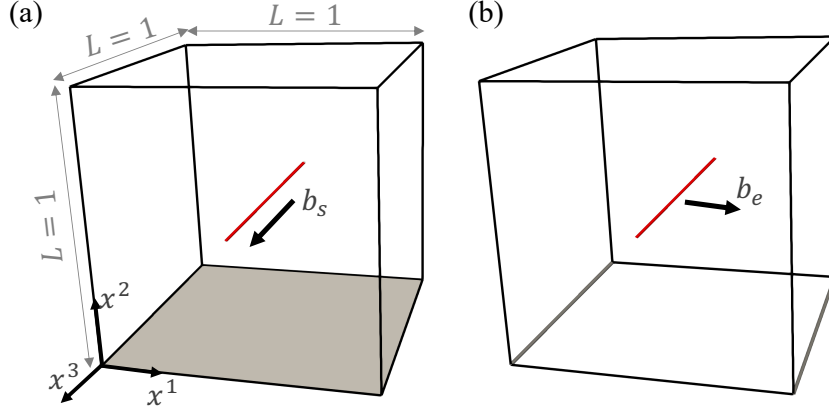


Fig. 6.3: Reference state $\mathcal{R}$ and (a) screw dislocation and (b) edge dislocation.

に参照状態 $\mathcal{R}$ およびらせん転位の形状を示す. このらせん転位の転位密度テンソル α , およびこれと Hodge 双対な振率形式 τ は次のようになる.

$$\begin{aligned}\alpha(x) &= b_s f_q(x) n^3 \frac{\partial}{\partial z^3} \otimes dx^l \\ \tau(x) &= b_s f_q(x) \frac{\partial}{\partial z^3} \otimes dx^1 \wedge dx^2\end{aligned}\tag{6.9}$$

ただし, n^3 は C の単位接ベクトル $n = (0, 0, 1)$ の x^3 方向成分である.

弱形式の応力の平衡方程式は, アイソジオメトリック解析により数値計算した. 境界条件としては, $x^2 = -1/2$ の面の変位を固定する Dirichlet 境界条件を, それ以外の境界では表面力ゼロの Neumann 境界条件を課した. 弾性定数は Lamé 定数を $\lambda = 1.5 \text{ MPa}$ および $\mu = 1.0 \text{ MPa}$ とおいた. $\mathcal{R}$ の形状表現とアイソジオメトリック解析の基底関数として, 多項式次数が 2, 重みが 1 の 3 次元 B-spline 基底関数を $200 \times 200 \times 50$ 個とった. このとき, 転位線の近傍における数値解の精度を高めるため, x^1 および x^2 方向には非一様なノット列を使用した. 領域分割法により連続体を $4 \times 4 \times 4 = 64$ 領域へ等分割し, 重複指数を $(1, 1, 1)$ として数値計算を行った. 応力の平衡方程式に対応する非線形連立方程式は Newton 法を用いて数値解を求めた. Newton 法の初期値としては, 変形前の参照状態の形状表現に用いた係数を使用し, 収束判定条件は, 相対残差ノルムが 1.0×10^{-6} 未満とした. また, Newton 法のイテレーション時に解くべき数値解の増分に関する線形連立方程式は, two-level overlapped additive Schwarz 法による前処理付き共役勾配法を用いて数値計算した. この収束判定条件は, 相対残差ノルムが 1.0×10^{-6} 未満とした.

6.3.2 らせん転位の塑性ディストーションと右 Cauchy-Green テンソル

ホモトピー演算子を用いてらせん転位線 C によって生じる塑性ディストーション F_p を計算する．まず，らせん転位線 C 上の各点 q で Cartan の第一構造方程式 $\tau^i = d\vartheta^i$ ，およびホモトピー演算子 H_q を用いると，双対枠 ϑ^i は次のように表される．

$$\vartheta^i = dx^i + H_q \tau^i \quad (6.10)$$

上式の右辺第二項は次のように計算することができる．

$$\begin{aligned} H_q(\tau^3) &= \left\langle (x^i - q^i) \frac{\partial}{\partial x^i}, \int_0^1 h_q^*(\tau^3) \frac{1}{\lambda} d\lambda \right\rangle \\ &= b_s \Psi_q(r) \epsilon_{3kl} (x^k - q^k) dx^l \end{aligned} \quad (6.11)$$

ここで，関数 Ψ_q は Eq. (6.6) である．これより，このらせん転位の塑性ディストーション F_p は次のようになる．

$$F_p = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -b_s \Psi_q(r)(x^2 - q^2) & b_s \Psi_q(r)(x^1 - q^1) & 1 \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

$\det F_p = 1$ より，らせん転位による塑性変形においては連続体の体積が不変になることがわかる．また，上式は x^1 および x^2 のみに依存した関数であり，転位線と平行な方向 x^3 には依存しないことがわかる．いま，転位線 C を軸方向とした円筒座標系 (r, θ, z) を用いて中間状態 $\mathcal{B}$ の右 Cauchy-Green テンソル C_p の各成分を表示すると次のようになる．

$$C_p = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + (b_s \Psi_q(r)r)^2 & b_s \Psi_q(r)r \\ 0 & b_s \Psi_q(r)r & 1 \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

上式より， C_p の各成分は F_p の場合と同様に x^1 および x^2 のみに依存しており，転位線と平行な方向 x^3 には依存しない． $b_s = 1.0 \times 10^{-2}$ に対して $(C_p)_{\theta\theta}$ および $(C_p)_{\theta z}$ をプロットした結果を Fig. 6.4 に示す．

eigen ひずみ理論では，らせん転位による eigen ひずみの非ゼロ成分は $\epsilon_{23}^* = \epsilon_{32}^* = b/2\delta(x^2)H(-x^1)$ のみが非ゼロ成分となり，それ以外の成分は常にゼロとなる [41]．ただし $H(x)$ は Heaviside の階段関数である．これを Eq. (6.13) と比較すると， $(C_p)_{\theta z}$ は eigen ひずみ ϵ_{23}^* と同じく Burgers ベクトル b_s に関して 1 次の関数であり，eigen ひずみを滑らかな関数で置き換えた関数とみなすことができる．その一方で，Burgers ベクトル b_s に関して 2 次の関数である $(C_p)_{\theta\theta}$ は

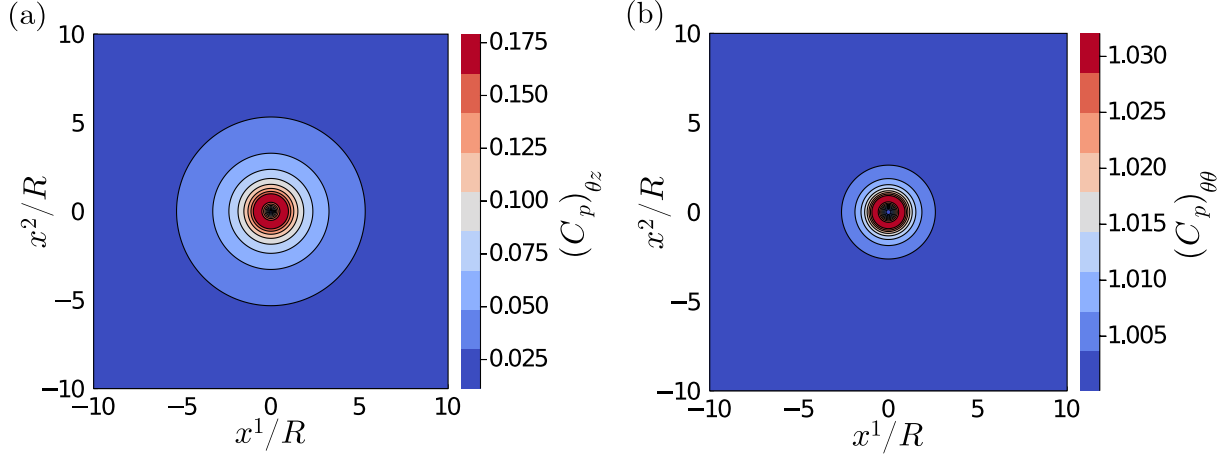


Fig. 6.4: Right Cauchy-Green tensor components $(C_p)_{\theta\theta}$ and $(C_p)_{\theta z}$ of the straight screw dislocation.

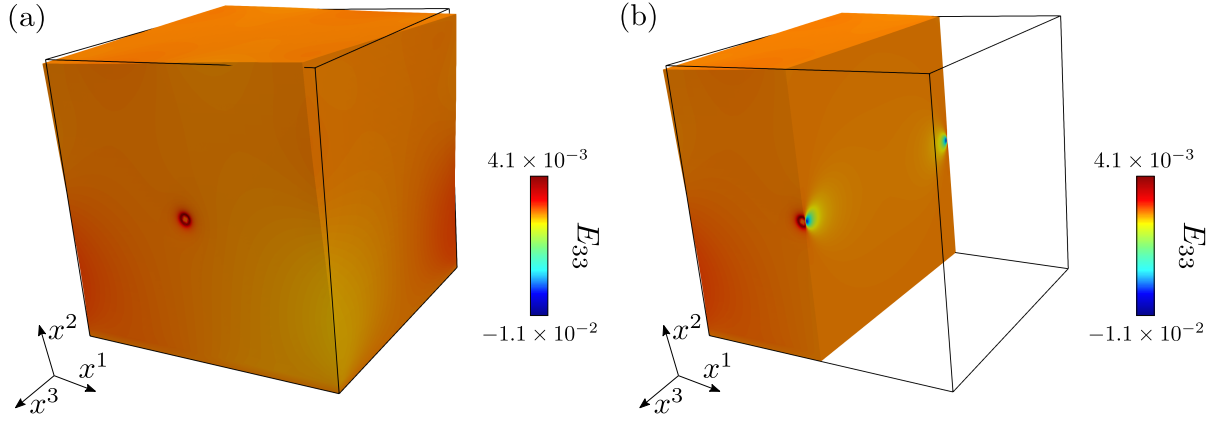


Fig. 6.5: (a) Current state $\mathcal{S}$ of the continuum with the straight screw dislocation C . (b) The section including the screw dislocation C .

eigen ひずみ理論では現れない。これは、eigen ひずみ理論が線形弾性理論に基づいており、 b_s が十分小さいとして近似的に b_s の一次項のみを考慮していることで生じる差異であると考えられる。

$x^3 = 0$ の中央断面において、 $b_s = R = 1.0 \times 10^{-2}$ とおいて得られる $(C_p)_{\theta\theta}$ および $(C_p)_{\theta z}$ をプロットした結果を Fig. 6.4 に示す。図より明らかなように、これらの成分はいずれも面内で点対称な動径分布関数となっており、それらの最大値は $r = R$ 付近でとっていることがわかる。また、 b_s の二乗に比例する成分 $(C_p)_{\theta\theta}$ は、 $(C_p)_{\theta z}$ と比べて分布の広がり方は急で、最大値も小さいことがわかる。

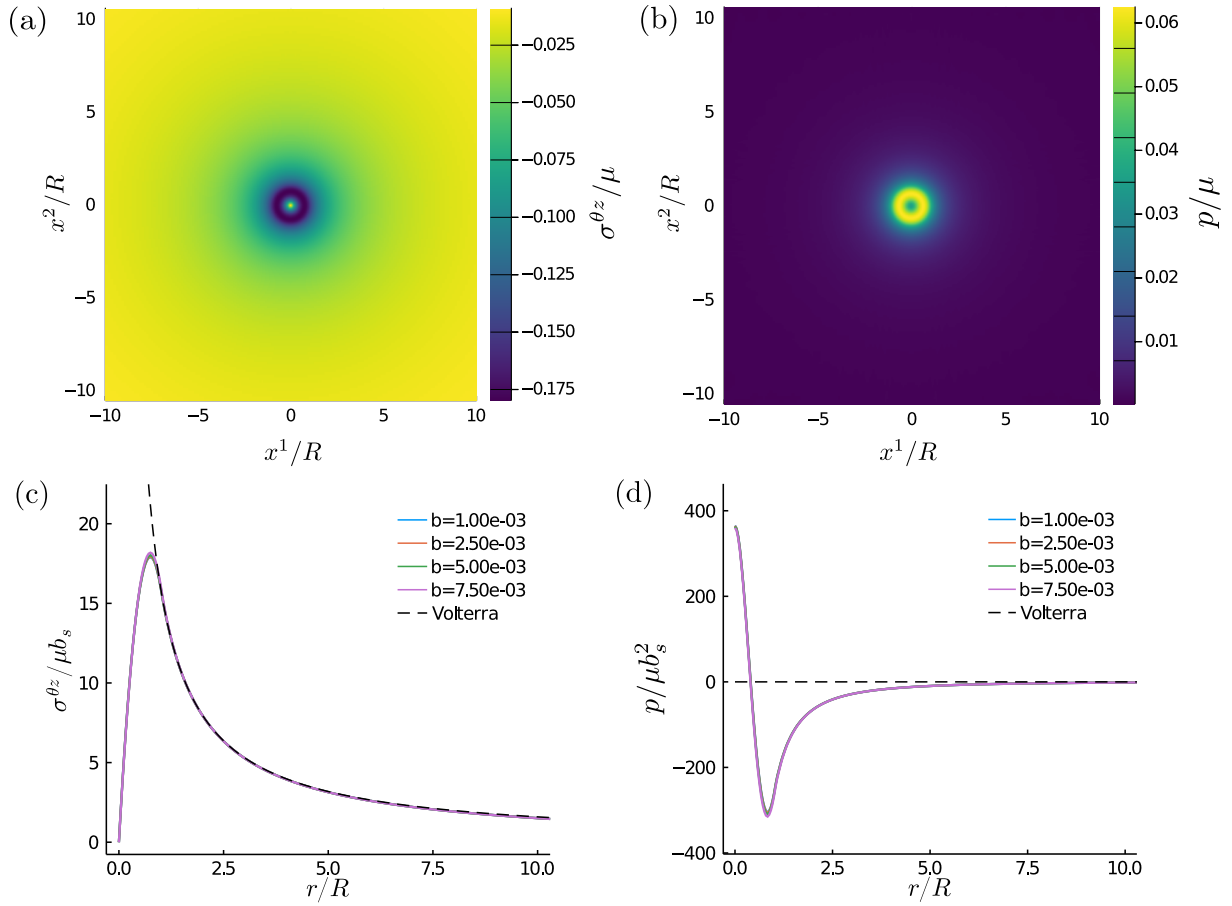


Fig. 6.6: (a) Shear stress component $\sigma^{\theta z}$ and (b) hydrostatic pressure p of the straight screw dislocation.

6.3.3 らせん転位の応力場と外形変化

$b_s = 1.0 \times 10^{-2}$ とした際に得られた連続体の現状態の様子を Fig. 6.5 に示す. なお, 外形変化をわかりやすくするため, 変形量は 10 倍にスケーリングしている. 図より, 連続体にはらせん転位によるねじり変形が生じていることがわかる. また, 転位線 C の方向への Green ひずみテンソルの成分 E_{33} は, 自由表面 $x^3 = \pm 1/2$ 付近で分布しているものの, 連続体の内部ではほぼ一様に分布している.

$b_s = 1.0 \times 10^{-2}$ とした際に, $x^3 = 0$ の連続体の中央断面で得られた Cauchy 応力のせん断応力成分 $\sigma^{\theta z}$ および静水圧 $p = -\sigma^{ii}/3$ を Fig. 6.6(a), (b) に示す. これらの結果より, いずれの成分も Fig. 6.4 と同様に周方向へ一様の動径分布をとっていることがわかる. また, せん断応力成分 $\sigma^{\theta z}$ の絶対値は静水圧 p のそれと比べて約 3 倍程度となり, また等値線の間隔に着目すると, 分布の広がり方は p と比べて緩やかであることがわかる. 逆に, 静水圧 p の分布の広がり方はせん断応力と比べ

て急である．この傾向は，Fig. 6.4 の右 Cauchy-Green テンソルの各成分の分布の傾向と一致している．

$b_s = 2.5 \times 10^{-3}, \dots, 1.0 \times 10^{-2}$ に対して，中央断面 $x^3 = 0$ の x^1 軸上におけるせん断応力 $\sigma^{\theta z}$ ，および x^2 軸上における静水圧 p をプロットした結果を Fig. 6.6(c), (d) に示す．ただし，応力成分はそれぞれ μb_s および μb_s^2 で規格化している．Fig. 6.6(c), (d) より，この規格化により数値計算の結果得られた曲線は全て同一の曲線としてプロットされていることがわかる．この結果から，らせん転位の応力成分 $\sigma^{\theta z}$ および p はいずれも，ここで用いた規格化定数である μb_s および μb_s^2 を係数にもつことがわかる．Fig. 6.6(c) より，せん断応力成分 $\sigma^{\theta z}$ は，転位の遠方 ($r > R$) で Volterra 転位モデルと極めて良好な一致を示しており，転位の近傍 ($r \leq R$) では Volterra 転位モデルが発散する傾向にある一方で，本数値解析の結果は有界であり，かつ転位線ではゼロをとることがわかる．せん断応力成分のこの傾向より，ここで定式化したらせん転位モデルおよび数値計算の結果は定量的にも妥当であると言える．

一方，Fig. 6.6(d) より，Volterra 転位モデルの静水圧 p は常にゼロであるのに対して，本数値計算の結果は常に正の値を示している．また，静水圧 p は転位の遠方 ($r > R$) ではせん断応力 $\sigma^{\theta z}$ と比べて急速に減少していき，転位の近傍 ($r \leq R$) では減少しつつ，転位線上でも正の値をとっていることがわかる．この傾向は Fig. 6.4 の傾向とほぼ一致しており，また p の係数が μb_s^2 に比例していることから，この静水圧成分は C_p で見られた幾何学的非線形性の影響で生じたものと考えられる．

6.3.4 Eshelby ツイスト

本論文で構築した手法は，転位を含む連続体に生じる有限変形の解析を可能にする．そこで本節では，連続体の代表長さと転位芯の幅の比を変化させることで連続体に有限変形を発生させ，本解析手法の妥当性を検証する．

いま，連続体の参照状態 $\mathcal{R} \subset \mathbb{R}^3$ を矩形領域 $\mathcal{R} = \{(x^1, x^2, x^3) | -L/2 < x^1, x^2 < L/2, -5 < x^3 < 5, L = 1\}$ とし，転位線 C を x^3 軸に沿った直線 $C = \{(x^1, x^2, x^3) | x^1 = x^2 = 0, -5 < x^3 < 5\}$ とおく．この転位線の Burgers ベクトルを $b = (0, 0, b_s)$ ，その分布関数を Eq. (6.3) で定義される動径分布関数 f_q ，そして転位芯の幅を定めるパラメーター R を $R = b_s$ とし，連続体の長手方向の断面の辺の長さとの比を $b_s/L = 0.025, 0.05, 0.75, 0.1$ と変化させて連続体に生じる外形の変化を数値計算した．塑性変形勾配はホモトピー演算子を用いて計算された Eq. (6.12) を用いた．境界条件としては， $x^3 = 0$ の断面の 4 つの縁で変位を固定する Dirichlet 境界条件を課し，それ以外の境界では表面力ゼロの Neumann 境界条件を課した．弾性定数として，Lamé 定数を $\lambda = 3/2$ MPa および $\mu = 1$ MPa とおいて用いた． $\mathcal{R}$ の形状表現とアイソジオメトリック解析の基底関数として，多項式次

数が 2, 重みが 1 の 3 次元 B-spline 基底関数を $100 \times 100 \times 50$ 個とり, ノット列は非一様にとった.

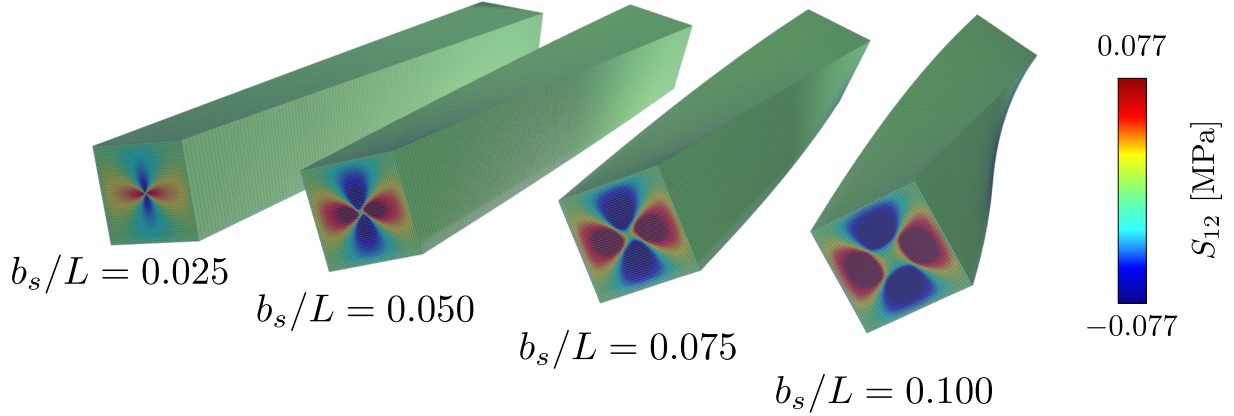


Fig. 6.7: Deformation due to screw dislocations with $b_s/L = 0.025, 0.05, 0.075, 0.1$.

この計算の結果得られた連続体の現状態 S , およびその第二 Piola-Kirchhoff 応力テンソルの成分 S_{12} を Fig. 6.7 に示す. 図より明らかに, 連続体の全体がねじれる外形変化が生じていることが確認できる. また図より明らかなように, このねじり変形による連続体の外形変化は $b_s = R$ の変化に合わせて大きくなる傾向にあり, これと同様にらせん転位と交わる自由境界面 $x^3 = 5$ においてはせん断応力成分 S_{12} の分布も徐々に大きく広がっていく様子が確認できる.

ここで生じた連続体のらせん転位による外形変化は, らせん転位の内部応力場自身で表面力ゼロの自由境界面における Nuemann 境界条件を満足できず, これをする応力場が加わる結果として生じたものと考えられる. らせん転位を含む有限の連続体には, その全体がねじれる外形変化が生じることが知られており, これは Eshelby ツイストと呼ばれている [87]. すなわち, Fig. 6.7 で見られる連続体の外形変化は, この Eshelby ツイストによるものと考えられる. このことは, ここで構築した連続体中の転位の力学解析手法が, 転位を含む有限サイズの連続体に生じる外形変化を正確に評価可能であることを示している.

6.4 直線状の刃状転位のモデル化と数値解析

6.4.1 問題設定と数値解析の条件

連続体の参照状態 $\mathcal{R} \subset \mathbb{R}^3$ を矩形領域 $\mathcal{R} = \{(x^1, x^2, x^3) | -L/2 < x^i < L/2, L = 1\}$ とし, 転位線 C を x^3 軸に沿った直線 $C = \{(x^1, x^2, x^3) | x^1 = x^2 = 0, -L/2 < x^3 < L/2\}$ とおく. この転位線の Burgers ベクトルを $b = (b_e, 0, 0)$ とおくと, C の接ベクトルと Burgers ベクトルは常に垂直となり, 刃状転位をモデル化することができる. この刃状転位の分布関数を Eq. (6.3) で定義される動径分布関数を f_q とする. この刃状転位の転位密度テンソル α , およびこれと Hodge 双対な振率形式

τ は次のようになる.

$$\begin{aligned}\alpha(x) &= b_e f_q(x) n^3 \frac{\partial}{\partial z^1} \otimes dx^l \\ \tau(x) &= b_e f_q(x) \frac{\partial}{\partial z^1} \otimes dx^1 \wedge dx^2\end{aligned}\tag{6.14}$$

ただし, n^3 は C の単位接ベクトル $n = (0, 0, 1)$ の x^3 方向成分である.

弱形式の応力の平衡方程式は, アイソジオメトリック解析により数値計算した. 境界条件としては, $x^2 = -1/2$, $x^1 = -1/2$ の辺の変位を固定し, $x^2 = -1/2$, $x^1 = 1/2$ の辺の x^2 , x^3 方向の変位を固定する Dirichlet 境界条件を, それ以外の境界では表面力ゼロの Neumann 境界条件を課した. 弾性定数は Lamé 定数を $\lambda = 3/2$ MPa および $\mu = 1$ MPa とおいた. $\mathcal{R}$ の形状表現とアイソジオメトリック解析の基底関数として, らせん転位と同様に多項式次数が 2, 重みが 1 の 3 次元 B-spline 基底関数を $200 \times 200 \times 50$ 個とった. このとき, 転位線の近傍における数値解の精度を高めるため, x^1 および x^2 方向には非一様なノット列を使用した. Dirichlet 境界条件の課せられた係数を除くと, 数値計算の自由度は 6.00×10^6 となる. 領域分割法により連続体を $4 \times 4 \times 4 = 64$ 領域へ等分割し, 重複指数を $(1, 1, 1)$ として数値計算を行った. 応力の平衡方程式に対応する非線形連立方程式は Newton 法を用いて数値解を求めた. Newton 法の初期値としては, 変形前の参照状態の形状表現に用いた係数を使用し, 収束判定条件は, 相対残差ノルムが 1.0×10^{-6} 未満とした. また, Newton 法のイテレーション時に解くべき数値解の増分に関する線形連立方程式は, two-level overlapped additive Schwarz 法による前処理付き共役勾配法を用いて数値計算した. この収束判定条件は, 相対残差ノルムが 1.0×10^{-6} 未満とした.

6.4.2 刃状転位の塑性変形勾配と右 Cauchy-Green テンソル

ホモトピー演算子を用いて刃状転位線 C によって生じる塑性変形勾配 F_p を計算する. まず, 刃状転位線 C 上の各点 q で Cartan の第一構造方程式 $\tau^i = d\vartheta^i$, およびホモトピー演算子 H_q を用いると, 双対枠 ϑ^i は次のように表される.

$$\vartheta^i = dx^i + H_q \tau^i\tag{6.15}$$

上式の右辺第二項は次のように計算することができる.

$$\begin{aligned}H_q(\tau^1) &= \left\langle (x^i - q^i) \frac{\partial}{\partial x^i}, \int_0^1 h_q^*(\tau^1) \frac{1}{\lambda} d\lambda \right\rangle \\ &= b_s \Psi_q(r) \epsilon_{3kl} (x^k - q^k) dx^l\end{aligned}\tag{6.16}$$

ここで、関数 Ψ_q は Eq. (6.6) である．これより、この刃状転位の塑性変形勾配 F_p は次のようになる．

$$F_p = \begin{pmatrix} 1 - b\Psi_q(r)x^2 & b\Psi_q(r)x^1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

らせん転位の塑性変形勾配 Eq. (6.12) と同様に、上式は x^1 および x^2 のみに依存した関数であり、転位線と平行な方向 x^3 には依存しないことがわかる． $\det F_p = 1 - b\Psi_q(r)x^2 \neq 1$ より、刃状転位による塑性変形においては、連続体の体積が不変に保たれないことがわかる．この傾向はらせん転位の場合と異なっている．このとき、参照状態 $\mathcal{R}$ と中間状態 $\mathcal{B}$ は互いに微分同相であるため、これらの向き付けは不変であり、塑性変形勾配は $\mathcal{R}$ 上の全ての点で $\det F_p > 0$ を満たしている．この条件を満たす Burgers ベクトル b および転位のサイズ R の関係を調べるため、 $\det F_p$ の最小値を計算すると次のようになる．

$$\min(1 - b\Psi_q(r)x^2) = 1 - \frac{3b}{\pi R^2} \frac{9R}{64} = 1 - \frac{b}{\pi R} \left(\frac{3}{4}\right)^3 \quad (6.18)$$

したがって、 $\det F_p > 0$ より向き付け不変の条件が保たれるための条件として次式を得る．

$$\frac{b}{R} < \pi \left(\frac{4}{3}\right)^3 \simeq 7.45 \quad (6.19)$$

分布関数が f_q で表される刃状転位モデルでは、Burgers ベクトルと転位のサイズの比が少なくとも上式の制限を満たしていなくてはならない．

いま、転位線 C を軸方向とした円筒座標系 (r, θ, z) を用いて中間状態 $\mathcal{B}$ の右 Cauchy-Green テンソル C_p の各成分を表示すると次のようになる．

$$C_p = \begin{pmatrix} 1 & b_e\Psi_q(x)r \cos \theta & 0 \\ b_e\Psi_q(x)r \cos \theta & 1 + (b_e\Psi_q(x)r)^2 - 2(b_e\Psi_q(x)r) \sin \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.20)$$

上式より、 C_p の各成分は F_p の場合と同様に x^1 および x^2 のみに依存しており、転位線と平行な方向 x^3 には依存しない．この一方で、らせん転位の C_p の各成分は全て、転位線からの距離にのみ依存した動径分布関数であったのに対して、刃状転位の C_p の各成分は転位線からの距離 r だけでなく、角度 θ にも依存している．

$x^3 = 0$ の中央断面において、 $b_e = -R = -1.0 \times 10^{-2}$ とおいて得られる $(C_p)_{r\theta}$ および $(C_p)_{\theta\theta}$ をプロットした結果を Fig. 6.8 に示す．図より明らかなように、刃状転位の解析結果はらせん転位の

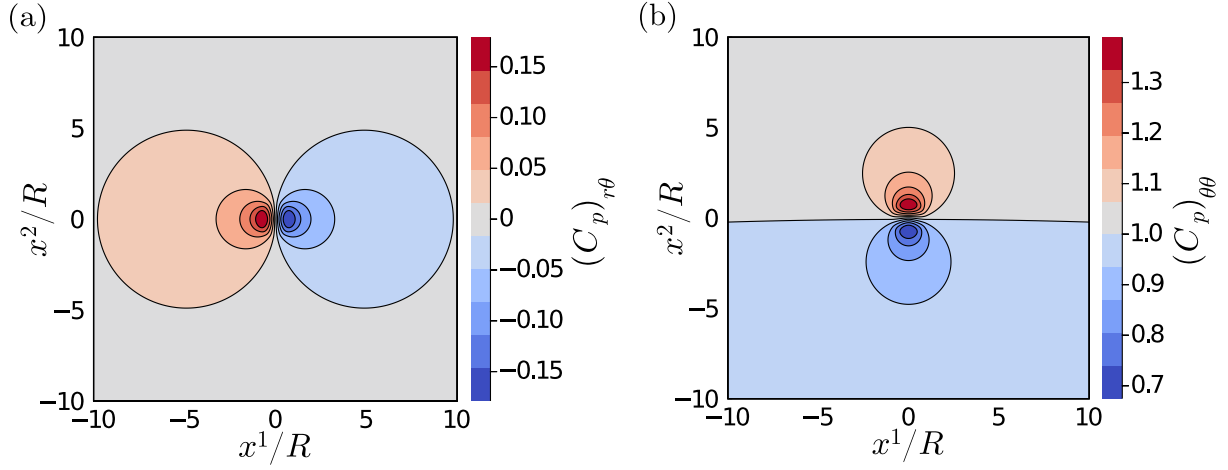


Fig. 6.8: Right Cauchy-Green tensor components $(C_p)_{r\theta}$ and $(C_p)_{\theta\theta}$ of the straight edge dislocation.

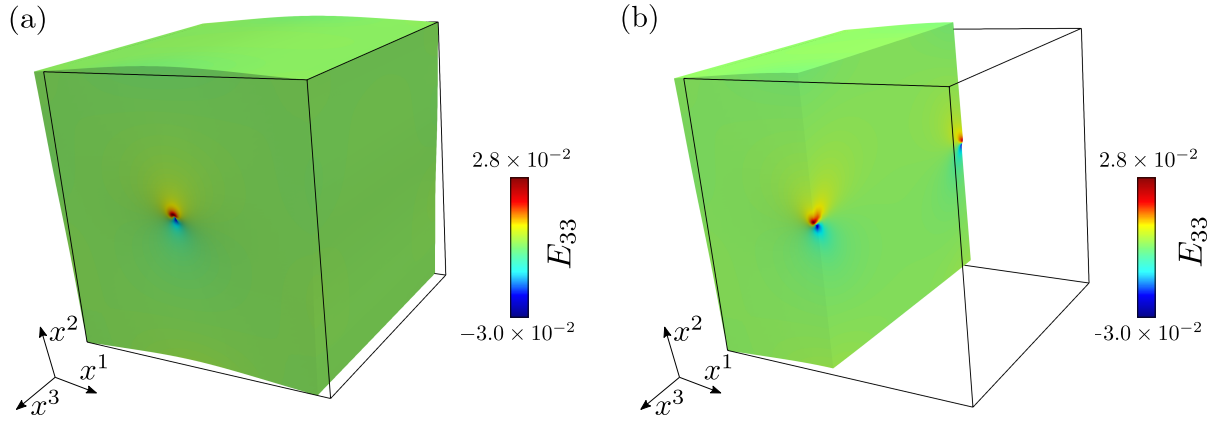


Fig. 6.9: (a) Current state $\mathcal{S}$ of the continuum with the straight edge dislocation C . (b) The section including the edge dislocation C .

結果 Fig. 6.4 とは異なり, C_p の各成分は転位からの距離だけでなく角度にも依存していることがわかる. また, $(C_p)_{r\theta}$ の最大値と最小値の絶対値はほぼ一致する一方で, $(C_p)_{\theta\theta}$ の最大値と最小値の 1 からの差は異なっていることがわかる. これは, $(C_p)_{\theta\theta}$ に含まれる $(b\Psi_q(x)r)^2$ の項が常に正の値となるのに対して, $-2(b_e\Psi_q(x)r)\sin\theta$ が角度に応じて符号を変えるためである.

6.4.3 刃状転位の応力場と外形変化

Fig. 6.9 に, $b_e = -1.0 \times 10^{-2}$ とした際に得られた連続体の現状態の様子を示す. なお, 変形の外形をわかりやすくするため, 変形量は 10 倍にスケールしている. 図より, 連続体には刃状転位による曲げ変形が生じていることがわかる. また, 転位線 C の方向への Green ひずみテンソルの成分 E_{33} は, 自由表面 $x^3 = \pm 1/2$ 付近で分布しているものの, 連続体の内部ではほぼ一様に分布し

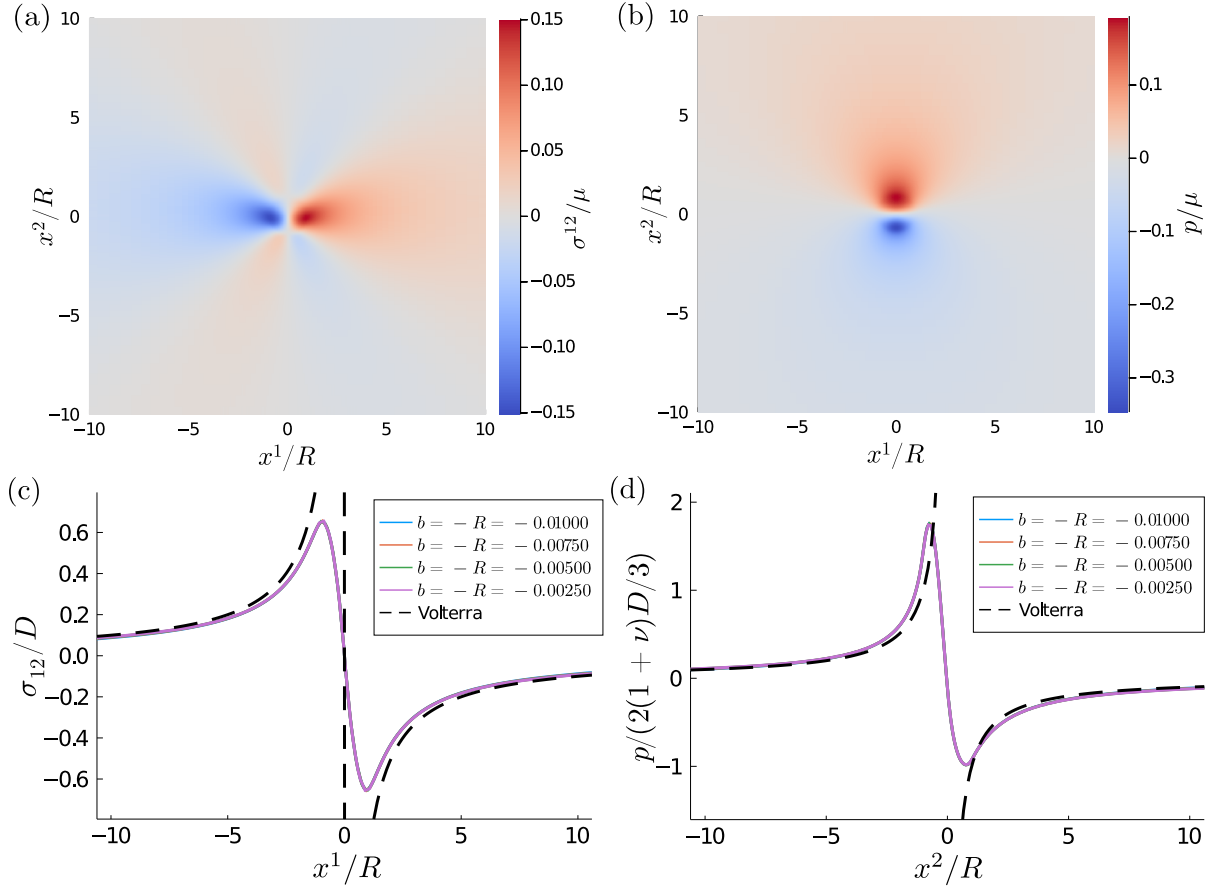


Fig. 6.10: (a) Shear stress component σ^{12} and (b) hydrostatic pressure p of the straight edge dislocation. (c) σ^{12} on the horizontal axis x^1 and (d) p on the vertical axis x^2 .

ている。これは、刃状転位による変形が内部では平面ひずみ状態であることを表しており、この性質は Volterra 転位と一致する結果である [3]。

$b_e = -R = -1.0 \times 10^{-2}$ とした際に、 $x^3 = 0$ の連続体の中央断面で得られた Cauchy 応力のせん断応力成分 σ^{12} および静水圧 $p = -\sigma^{ii}/3$ を Fig. 6.10(a), (b) に示す。これらの結果より、いずれの成分も刃状転位の Volterra 転位モデルの応力場の分布と定性的に一致している [3]。 $b_e = -R = -2.5 \times 10^{-3}, \dots, -1.0 \times 10^{-2}$ に対して、中央断面 $x^3 = 0$ の x^1 軸上におけるせん断応力、および x^2 軸上における静水圧をプロットした結果を Fig. 6.10(c), (d) に示す。ただし $D = \mu(b/R)/(2\pi(1-\nu))$ は規格化定数である。Fig. 6.10(c), (d) より、いずれの成分も Burgers ベクトルと転位のサイズの比 $b/R = 1$ を一定に保ったままその双方を変化させても、常に同一の曲線となることがわかる。このことは、ここで用いた転位のモデルの応力場が、 b/R に依存した関数形で書けることを示している。また、Fig. 6.10(c) よりせん断応力成分 σ^{12} に着目すると、転位線より遠方 ($r > R$) で Volterra 転位モデルとほぼ一致するとともに、転位線の近傍 ($r \leq R$) では Volterra

転位モデルが発散する傾向にあるのに対して、数値解析の結果得られた結果は有界であり、発散する傾向がないことがわかる。Fig. 6.10(d) より静水圧成分 p に着目すると、転位芯からの距離に応じて Volterra 転位モデルとほぼ一致する傾向、および転位線の近傍で有界であり、かつ発散する傾向にならない点はせん断応力と同じ傾向である。以上の結果から、ここで定式化した刃状転位モデルとその数値解析方法は定量的にも妥当であると言える。

この一方で、静水圧成分の正圧と負圧の絶対値はそれぞれ異なるという点で、Volterra 転位モデルおよび数値計算の結果得られたせん断応力とは異なる傾向を示している。前節でも述べたとおり、この傾向は Fig. 6.8 に示した右 Cauchy-Green テンソルにおいても確認でき、この正圧と負圧の絶対値の最大が異なるという非対称性を示すのは、右 Cauchy-Green テンソルにおける同様の傾向に起因するものであることがわかる。右 Cauchy-Green テンソルにおいては、この非対称性は Burgers ベクトルに対して 1 次の、 x^2 方向に対して奇関数となる項 $-2(b_e \Psi_q(r)r) \sin \theta$ と、Burgers ベクトルに対して 2 次の、 x^2 方向に対して偶関数となる項 $(b \Psi_q(x)r)^2$ によって生じたものであった。したがって、静水圧場においても見られたこの x^2 方向への非対称性は、塑性変形に幾何学的非線形性が考慮されたことによって生じたものと結論づけられる。

6.5 キンク帯のモデル化と力学場の数値解析

6.5.1 問題設定と数値解析の条件

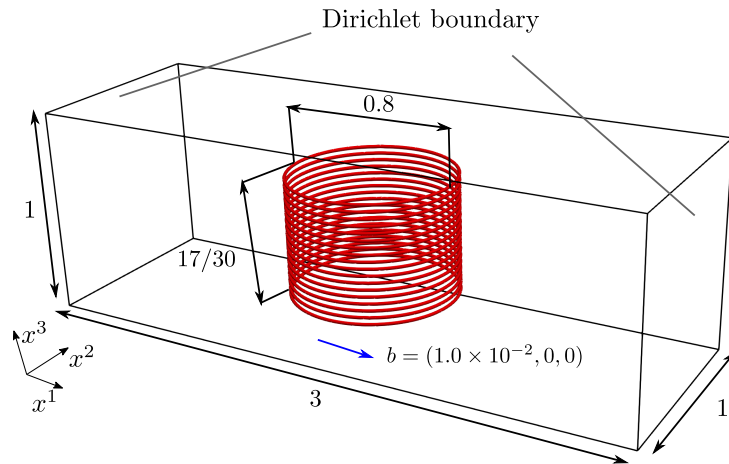


Fig. 6.11: Analysis condition of the dislocation loop-based kink model.

本節では、これまでに構築した幾何学的な弾塑性理論の枠組みを用いて、キンク帯を複数の転位ループによってモデル化するとともに、このキンク帯モデルによって生じる連続体の内部応力場の数値計算を行う。本節で扱う連続体の参照状態および転位ループの配置の様子を Fig. 6.11 に示す。

図のように、連続体の参照状態 $\mathcal{R} \subset \mathbb{R}^3$ を矩形領域 $\mathcal{R} = \{(x^1, x^2, x^3) | -3/2 < x^1 < 3/2, -1/2 < x^2, x^3 < 1/2\}$ とし、直径 0.8 の円形の転位ループを合計 18 個、 $x^1 x^2$ 平面と平行に配置する。このとき、直線 $x^1 = x^2 = 0$ 上で $x^3 = -3/10$ を起点に $1/30$ の間隔で 16 個の転位ループが並ぶように配置した。全ての転位ループの Burgers ベクトルは $b = (1.0 \times 10^{-2}, 0, 0)$ とし、転位芯の幅を表すパラメーターは $R = 1.0 \times 10^{-2}$ とおいた。弾性定数は Lamé 定数を $\lambda = 3/2$ MPa および $\mu = 1$ MPa とおいて用いた。

塑性変形勾配および弱形式の応力の平衡方程式は、アイソジオメトリック解析により数値計算した。NURBS 基底関数としては、多項式次数が 2、重みが 1 の 3 次元 B-spline 基底関数を $140 \times 140 \times 140$ 個とり、転位ループ近傍の解析精度を高めるため、ノット列は非一様にとった。領域分割法により連続体を $4 \times 4 \times 2 = 32$ 領域へ分割し、重複指数を $(1, 1, 1)$ として数値計算を行った。

塑性変形勾配の数値計算時には Eq. (3.32) の係数を $\gamma = 1.0 \times 10^8$ とし、連立方程式を解く際には最小残差法を用いた。また、応力の平衡方程式の数値計算時には、 $x^1 = \pm 3/2$ の表面の変位を固定する Dirichlet 境界条件を課し、その他の境界は表面力がゼロの Neumann 境界条件を課した。アイソジオメトリック解析により得られる非線形連立方程式は、Newton 法を用いて数値解を求めた。Newton 法の初期値は変形前の連続体の形状表現に用いた制御点を取り、収束判定条件は相対残差ノルムが 1.0×10^{-5} 未満とした。Newton 法の各イテレーション時には two-level overlapped additive Schwarz 法に基づく前処理付き共役勾配法を用いて数値計算した。この際の収束判定条件としては、相対残差ノルムが 1.0×10^{-4} 未満とした。

6.5.2 キンク帯の転位ループモデルによる変形の外形

数値計算の結果得られた、中央に配置された複数の転位ループによって変形した連続体の現状態の様子を Fig. 6.12(a) に示す。また、 x^2 軸の負の方向から見た連続体の現状態と参照状態の外形線を Fig. 6.12(b) に示す。この図より、連続体は転位ループのなす平面の法線方向 (x^3 軸方向) へ向かって折れ曲がる変形を呈していることがわかる。各転位ループの Burgers ベクトルは x^1 軸方向 (紙面右方向) を向いているが、Fig. 6.9 に示した 1 本の直線状の刃状転位による変形の外形と比べると、この変形は折れ曲がり変形が生じている直下の転位ループに含まれる刃状転位成分によって生じたものであると考えられる。すなわち、実際に観察されているキンク帯と同様の変形が、転位ループを用いたキンク帯のモデル化によっても生じることが確認できる。次に、 x^1 軸の正の方向から見た連続体の現状態を Fig. 6.12(c) に示す。この図では、Fig. 6.12(b) で見られた曲げ変形による $x^3 = \pm 1/2$ の境界面が変形している様子が確認できるとともに、 $x^2 = \pm 1/2$ の境界面には、面外方向への変形がほとんど生じていない。

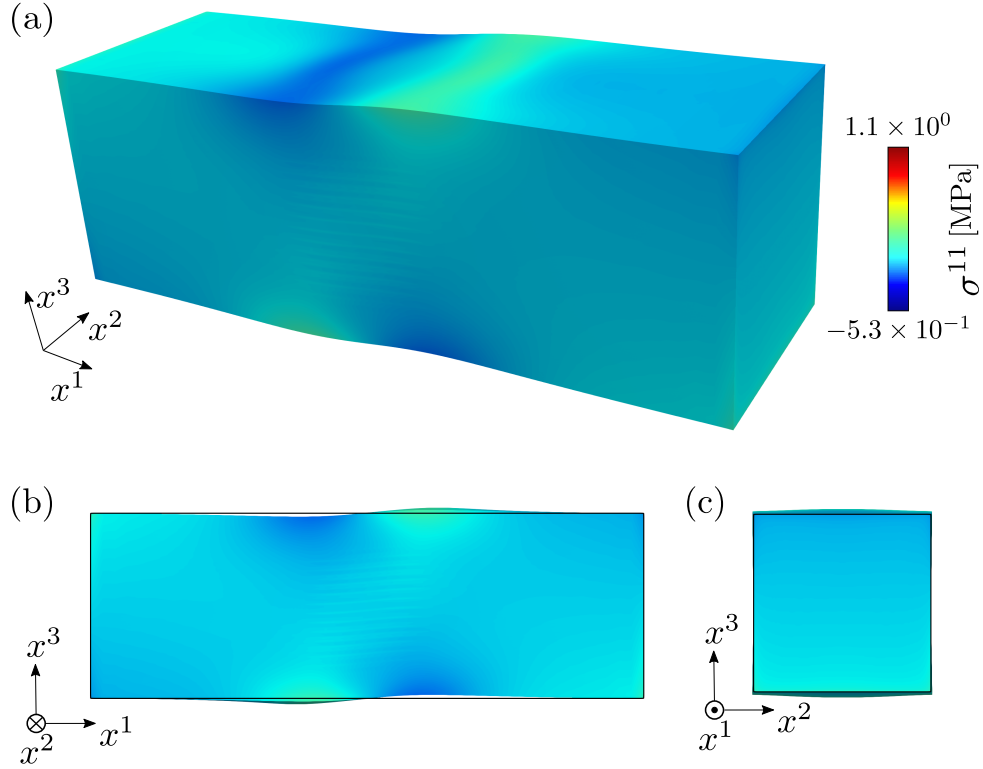


Fig. 6.12: (a) Outline of the deformation due to the dislocation loops. (b) and (c) show frontal and side views of (a), respectively.

6.5.3 キンク帯の転位ループモデルの内部応力場

連続体の中央断面 $x^2 = 0$ において、数値計算の結果得られた Cauchy 応力テンソルの非ゼロ成分を Fig. 6.13 にプロットする．この断面 $x^2 = 0$ では、転位ループのなす列は、紙面水平方向の刃状転位成分のみを持つ刃状転位列と考えることができる．Fig. 6.13(a)-(d) より、刃状転位（転位ループ）がなす列の間では、応力場が互いに打ち消し合い、転位のごく近傍でのみ応力場が分布していることがわかる．この一方で、Fig. 6.13(a), (b) および (d) の応力成分 σ^{11} , σ^{13} , および σ^{33} においては、転位列の先端で個々の刃状転位のものと比べて広範囲に分布する応力場が生じていることが見てとれる．また、Fig. 6.13(c) では転位列で囲まれた領域においてほぼ一様に応力場が分布することがわかる．

分子動力学法に基づく数値計算において、刃状転位列は、その先端に広範囲に分布する応力場を形成することが確認されている [95]．また、Volterra 転位モデルを用いると、近接した刃状転位の距離が無限小になるとき、その応力場はくさび型回位の作る応力場と等しくなることが知られている [96]．すなわち、この数値計算時にモデル化した転位ループ列の刃状転位成分は、くさび型部分回位

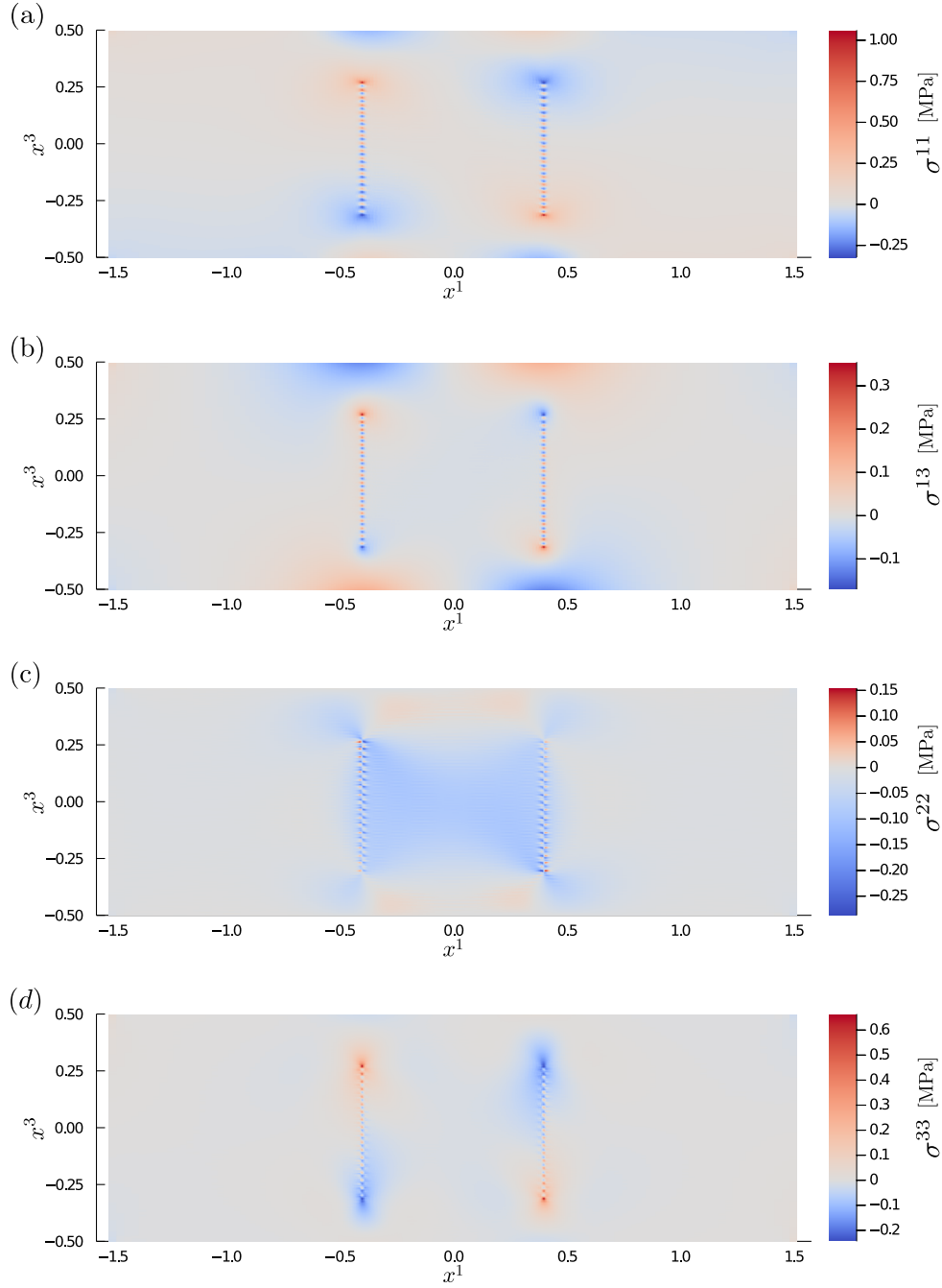


Fig. 6.13: Cauchy stress components (a) σ^{11} , (b) σ^{13} , (c) σ^{22} and (d) σ^{33} at the section $x^2 = 0$.

と解釈することができる．実際に，Fig. 6.13 の転位列の先端に現れる各応力成分の分布は，くさび型回位の応力分布と定性的に一致している [97]．また，このくさび型部分回位の広範囲に分布する内部応力場は，材料の内部で孤立した転位に対する運動障害となることを示唆している．

次に，連続体の中央断面 $x^1 = 0$ における Cauchy 応力テンソルの各成分を Fig. 6.14 に示す．この断面では，転位ループは紙面垂直方向のらせん転位成分のみを持ち，Fig. 6.14 に示されている応力

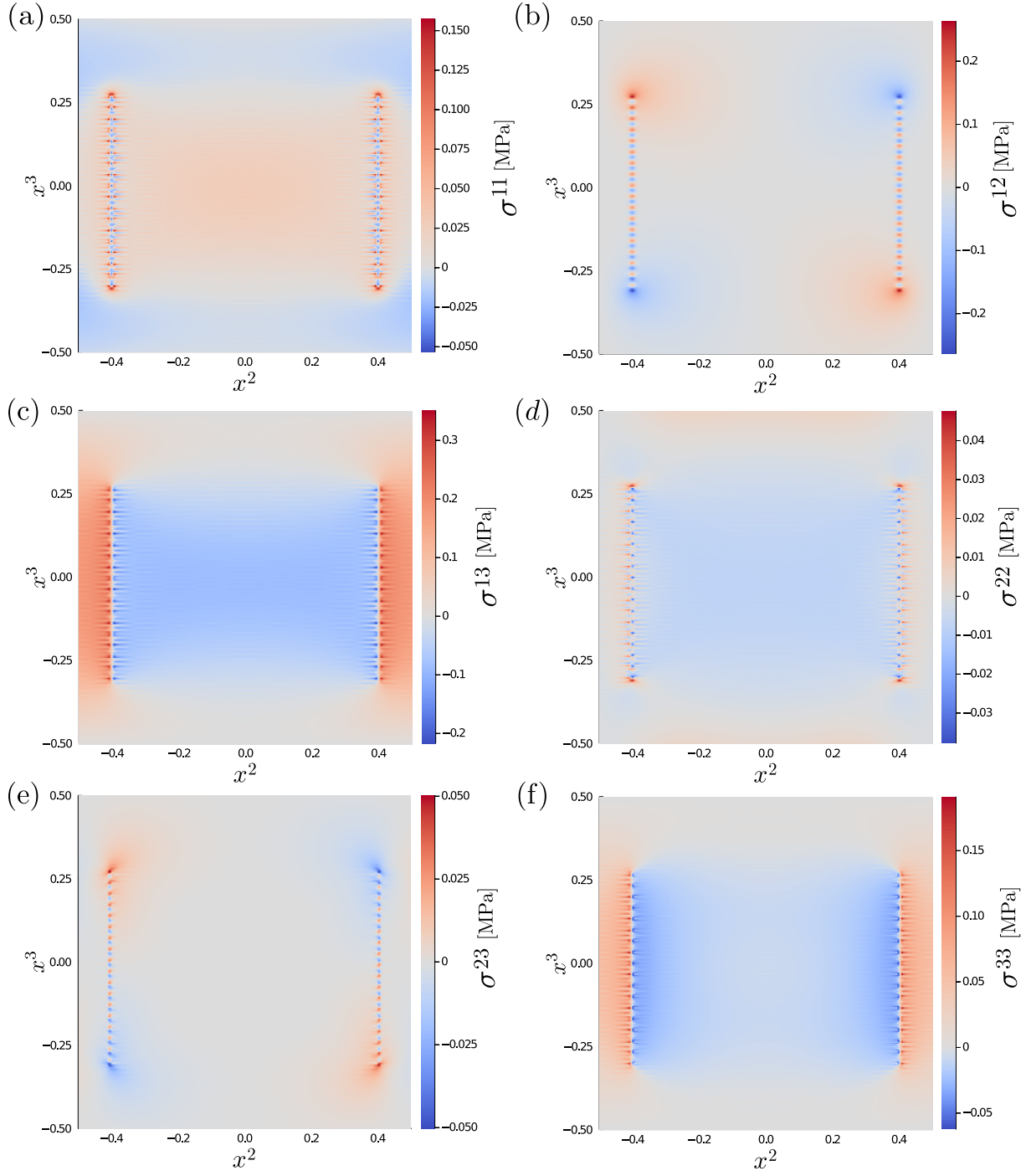


Fig. 6.14: Cauchy stress components (a) σ^{11} , (b) σ^{12} , (c) σ^{13} , (d) σ^{22} , (e) σ^{23} and (f) σ^{33} at the section $x^1 = 0$.

場は、同一符号のらせん転位によって形成された二つのらせん転位列によるものと解釈できる。Fig. 6.14(b) および (e) の応力成分 σ^{12} および σ^{23} においては、転位列の先端で列を形成する個々のらせん転位のものと比べて広範囲に分布する応力場が生じていることが見てとれる。また、Fig. 6.14(a),

(c), (d) および (f) の応力成分 σ^{11} , σ^{13} , σ^{22} , および σ^{33} では転位列で囲まれた領域において, 応力場はほぼ一様に分布している.

以上の結果から, 本論文で構築した手法により, 複数の転位を含む連続体の力学解析の妥当性が確認された.

7 結論

本研究では、格子欠陥の弾塑性力学解析の基盤となる枠組みを微分幾何学を用いて構築し、これを応用して格子欠陥の力学場解析を行うという研究目的を設定し、Cartan の第一構造方程式と応力の平衡方程式の数値解析によってこの枠組みを構築した。また、直線状らせん転位、直線状刃状転位、およびキンク帯の転位ループモデルに対してこの枠組みに基づく数値解析を実行し、これらの格子欠陥によって生じる外形変化と応力場が、従来の線形弾性理論で得られる結果と定性的にはほぼ一致したことから、この枠組みの妥当性を確認することができた。本研究により得られた結論は次のようにまとめられる。

- 幾何学的な弾塑性理論の枠組みに基づき、連続体の参照状態 $\mathcal{R}$ 、中間状態 $\mathcal{B}$ 、および現状態 $\mathcal{S}$ を、Riemann 計量とアフィン接続を備えた Riemann-Cartan 多様体として導入した。また、変形勾配の乗算分解に基づき、塑性変形勾配 F_p 、弾性変形勾配 F_e 、および全変形勾配 $F = F_e \cdot F_p$ を導入し、3つの状態における Riemann 計量がこれらを用いて記述されることを示した。(第2章)
- 連続体中の転位の空間分布を Burgers ベクトルを備えた空間曲線を用いて振率形式として定式化し、これが Hodge の星印作用素により連続分布転位論における転位密度テンソルと等価であることを示した。また、これらの等価性を軸に、中間状態 $\mathcal{B}$ の幾何学的構成に必要な塑性変形勾配 F_p が、Cartan の第一構造方程式を解くことで定まることを示した。また、任意に配置された連続分布転位の振率形式(転位密度テンソル)を数値的に計算する方法を定式化した(第3章)
- 塑性変形勾配 F_p を定める Cartan の第一構造方程式の積分法として、ホモトピー演算子を用いて解析的に決定する方法と、任意に配置された転位に対して境界条件を含めて数値的に決定する Cartan の第一構造方程式の残差ノルム最小化問題を定式化した。(第3章)
- 本論文において、変分問題の平衡方程式(弱形式)を数値計算する方法として、NURBS を基底とするアイソジオメトリック解析の基礎を導入した。これとともに、大規模並列計算のための領域分割法と overlapped additive Schwarz 法を導入した。(第4章)
- 第3章で定式化した任意に配置された転位線から転位密度テンソルを決定する手法において、転位線を NURBS で表現し、これを数値的に決定する方法を示した。また、ここで得られた振率に対する塑性変形勾配 F_p を数値的に決定できる、Cartan の第一構造方程式の残差ノルム最小化問題を NURBS によって離散化し、この結果が線形連立方程式に帰着することを示

した。(第5章)

- 第2章で定式化した弾塑性体の運動学に基づき、この弾塑性体の現状体を決定する応力の平衡方程式(弱形式)を導入した。そして、これをNURBSを用いて離散化すると、この方程式が非線形連立方程式に帰着することを示した。(第5章)
- 既往の研究結果を参照し、転位の分布を与える関数として、有界かつコンパクトな動径分布関数 f_q を導入した。この後、2次元平面上の刃状転位に対して、第2章および第5章で定式化したホモトピー演算子を用いる方法、および残差ノルム最小化問題をアイソジオメトリック解析により数値計算する方法の2つを別々に解いて塑性変形勾配を導出した。この結果、両者とも転位芯の近傍では定量的にも定性的にも一致する結果が得られた一方で、転位芯の遠方では両者で違いが現れることを示した。この結果、転位が境界から十分遠方に位置している場合には、Cartanの構造方程式の解を解析的に導出することが可能なホモトピー演算子を用いる手法が適しており、複数の転位のモデル化が必要な場合や、転位が境界付近に配置されている場合には、後者の方法を用いることが必須になることが明らかとなった。(第6章)
- 直線状らせん転位によって連続体に生じる弾塑性変形と力学場に対するアイソジオメトリック解析を行った。この際、塑性変形勾配はホモトピー演算子を用いて決定した。解析的な表現として得られた中間状態のRiemann計量 g_B は、eigen ひずみ理論におけるらせん転位のeigen ひずみと概ね一致していた。その一方で、らせん転位のBurgersベクトルの2乗に比例する幾何学的な非線形性を含む成分が現れることが明らかとなった。この違いは、eigen ひずみ理論が線形弾性理論に基づいているため、この項を線形近似によって近似的に無視していることで生じたものとする。その後、応力の平衡方程式のアイソジオメトリック解析を実行した。この結果、Cauchy 応力のせん断応力成分は、Volterra 転位モデルとほぼ一致しながらも、転位芯の近傍でも有界になるという結果が得られた一方で、Volterra 転位モデルでは見られない静水圧成分が転位芯の近傍に生じることが明らかとなった。(第6章)
- 直線状刃状転位によって連続体に生じる弾塑性変形と力学場に対するアイソジオメトリック解析を行った。この際、塑性変形勾配はホモトピー演算子を用いて決定した。この結果、幾何学的な非線形性により、中間状態のRiemann計量 g_B にはすべり面の上下で非対称となることが明らかとなった。応力の平衡方程式のアイソジオメトリック解析を実行した結果、らせん転位と同様に、Cauchy 応力のせん断応力成分はVolterra 転位モデルとほぼ一致し、転位芯の近傍でも有界になるという結果が得られた。また、静水圧成分に着目すると、Riemann計量 g_B の非対称性に起因するものと見られる非対称性が生じることが明らかとなった。(第6章)
- キンク帯を転位ループを用いてモデル化し、これによって生じる弾塑性変形と、力学場に対す

るアイソジオメトリック解析を行なった。この際、Cartan の第一構造方程式の最小化問題および応力の平衡方程式をアイソジオメトリック解析によって数値計算して求めた。この結果、連続体の現状態 S の外形は、キンク帯の特徴である折れ曲がり変形を再現し、キンク帯の転位ループによるモデル化が妥当であることが示唆された。これとともに、転位ループ列の先端には、個々の転位によって生じるものと比較して広範囲に広がる応力場が生じることが見られた。この応力場は回位の内部応力場と定性的に一致するものであり、キンク帯の先端に生じた回位の内部応力場が、材料内部の塑性変形を支配している可能性が示唆された。（第 6 章）

付録 A 多様体論の基礎

A.2 C^∞ 級多様体

位相空間 $(M, \mathcal{T})$ が d 次元位相多様体であるとは, $(M, \mathcal{T})$ が次の条件を満たすことを言う.

1. $(M, \mathcal{T})$ は Hausdorff 空間である.
2. $(M, \mathcal{T})$ は第二可算公理を満たす.
3. $(M, \mathcal{T})$ の任意の開集合 $\forall U \in \mathcal{T}$ に, $\mathbb{R}^d$ 上の開集合 $\hat{U} \subset \mathbb{R}^d$ への位相同型 $\phi: U \rightarrow \hat{U}$ が存在する. この組 (U, ϕ) をチャートと呼ぶ.

d 次元位相多様体は, 任意の開集合を実空間 $\mathbb{R}^d$ 上の開集合とみなせる部分集合 U と実空間への写像 ϕ の入った Hausdorff 空間のことである. d 次元位相多様体 $(M, \mathcal{T})$ において, M 全体を覆うチャートの族 $\{(U_\alpha, \phi_\alpha)\}_\alpha$ をアトラスと呼ぶ. また, アトラスに含まれる二つの共通部分をもつチャート (U, ϕ) および (V, ψ) に対して, 合成写像 $\phi \circ \psi^{-1}$ および $\psi \circ \phi^{-1}$ が $U \cap V$ 上の C^∞ 級写像であるとき, これらのチャートは適合しているという. このようなアトラスに含まれる全てのチャートが互いに適合し, かつ別のアトラスに含まれないとき, これを極大アトラスという. 極大アトラスを備えた d 次元位相多様体 $(M, \mathcal{T})$ を C^∞ 級多様体という. 本論文では, C^∞ 級多様体を単に多様体と呼び, これを M と書いて用いる. $\mathbb{R}^3$ に含まれる滑らかな空間曲線や空間曲面は多様体の代表例である.

関数 $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ が多様体上の各点 p において C^∞ 級であるとは, p を含むチャート (U, ϕ) において関数 $f \circ \phi^{-1}: \phi(U) \rightarrow \mathbb{R}$ が $\mathbb{R}^d$ 上の C^∞ 級関数であることをいう. 以降で示されるように, ベクトル場やテンソル場の滑らかさも, このようにしてチャート上へ写し Euclid 空間上のベクトル場やテンソル場を考えることにより定義される.

M, N を d 次元多様体とする. これらの間の写像 $F: M \rightarrow N$ が C^∞ 級であるとは, M と N の全てのチャート (U, ϕ) および (V, ψ) に対して $\psi \circ F \circ \phi^{-1}: \phi(U \cap F^{-1}(V)) \rightarrow \mathbb{R}^d$ が $\mathbb{R}^d$ 上の関数として C^∞ 級であることをいう. この逆像 F^{-1} も C^∞ 級であるとき, 写像 F を C^∞ 級微分同相写像であるという.

A.3 多様体上の接空間と余接空間およびベクトル場と 1 形式

多様体 M 上の任意の C^∞ 級関数 f, g に対して, 写像 $v_p: C^\infty(M) \rightarrow \mathbb{R}$ が Leibnitz 則 $v_p(fg) = f v_p(g) + g v_p(f)$ を満たすとき, これを M 上の点 p における接ベクトルと呼ぶ. p における全ての接ベクトルの集合を $T_p M$ と書き, これを M の p における接空間と呼ぶ.

接空間 $T_p M$ の基底ベクトルを $(\partial/\partial x^i|_p) = (\partial/\partial x^1|_p, \dots, \partial/\partial x^d|_p)$ とおくと、この接ベクトルは、 M 上の関数 f に対して次のように作用する。

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \Big|_p f := \frac{\partial f}{\partial x^i}(p) := \frac{\partial(f \circ \phi^{-1})}{\partial r^i}(\phi(p)) := \frac{\partial}{\partial r^i} \Big|_{\phi(x)} f \circ \phi^{-1} \quad (\text{A.2})$$

上式において、左の二式は M 上での接ベクトル $\partial/\partial x^i|_p$ による関数 f の方向微分が、関数 f の x^i 方向への偏微分によって定義されることを示している。また残りの二式は、 M 上での関数 f の偏微分 $\partial f/\partial x^i(p)$ は、 $\phi(M) \subset \mathbb{R}^3$ における関数 $f \circ \phi^{-1}$ の r^i 方向への偏微分として定義されていることを示している。このことからチャート (U, ϕ) により、 U 上での関数の偏微分は d 次元 Euclid 空間の開集合 $\phi(U)$ における通常の偏微分によって計算できることがわかる。

M, N を d 次元多様体とし、 $F: M \rightarrow N$ を C^∞ 級写像とする。 $p \in M$ における接ベクトル $v \in T_p M$ の押し出しは $F_{*,p}: T_p M \rightarrow T_{F(p)} N$ なる写像であり、 v を次のように写す。

$$\begin{aligned} (F_{*,p}v)f &= v(f \circ F(p)) = v^i \frac{\partial}{\partial x^i} \Big|_p (f \circ F(p)) \\ &= v^i \frac{\partial(f \circ F)}{\partial x^i}(p) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

ただし f は N 上の C^∞ 級関数である。

多様体 M 上の各点 p に接ベクトル v_p を定める対応を $p \mapsto v_p$ とし、任意の関数 $f \in M$ に対して $v_p(f)(p)$ が全ての点で C^∞ 級関数となるとき、この対応 $p \mapsto v_p$ を M 上の C^∞ 級ベクトル場と呼ぶ。また、 M 上の全ての C^∞ 級ベクトル場の集合を $\mathfrak{X}(M)$ と書く。ベクトル場に対する $\mathbb{R}$ 線形写像 $[\cdot, \cdot]: \mathfrak{X}(M) \times \mathfrak{X}(M) \rightarrow \mathfrak{X}(M)$ を Lie かけこ積という。チャート (U, ϕ) 上のベクトル場 $X = X^i \partial/\partial x^i$ および $Y = Y^i \partial/\partial x^i$ に対して Lie かけこ積は次のように振舞う。

$$\begin{aligned} [X, Y] &= \left[X^i \frac{\partial}{\partial x^i}, Y^j \frac{\partial}{\partial x^j} \right] \\ &= X^i \frac{\partial Y^j}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial x^j} - Y^j \frac{\partial X^i}{\partial x^j} \frac{\partial}{\partial x^i} \\ &= \left(X^i \frac{\partial Y^k}{\partial x^i} - Y^i \frac{\partial X^k}{\partial x^i} \right) \frac{\partial}{\partial x^k} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

定義より $[X, Y] = -[Y, X]$ が成り立つ。

写像 $(\omega)_p: T_p M \rightarrow \mathbb{R}$ を p における余接ベクトルと呼ぶ。 C^∞ 級ベクトル場と同様に、 M 上の各点 p に余接ベクトル $(\omega)_p$ を定める対応 $p \mapsto (\omega)_p$ を、 M 上の微分 1 形式、または単に 1 形式と呼ぶ。 M 上の全ての 1 形式を全て集めた集合を $\Omega^1(M)$ と書く。いま、 $F: M \rightarrow N$ を C^∞ 級写像、 $(\omega)_p \in T_p^* M$ を p における余接ベクトルとする。

A.4 多様体上の k 形式

線形空間 V 上の k 重線形写像 $f: V \times \cdots \times V \rightarrow \mathbb{R}$ のことを V 上の k 次テンソルと呼ぶ。いま、 S_k を k 次対称群とすると、 $\forall \sigma \in S_k$ に対して

$$f(v_{\sigma(1)}, \dots, v_{\sigma(k)}) = \text{sign}(\sigma) f(v_1, \dots, v_k) \quad (\text{A.5})$$

が成り立つとき、 f を k 次交代テンソルと呼ぶ。ただし sign は $\sigma \in S_k$ の符号である。 V 上の k 次交代テンソル全体の集合を $\Lambda^k(V)$ と書く。

$V = T_p^*M$ とするとき、 $\Lambda^k(T_p^*M)$ は T_p^*M 上の k 次交代テンソルの集合をなす。 M 上の全ての p に対して $\Lambda^k(T_p^*M)$ の元 $(\omega)_p$ を割り当てる対応 $p \mapsto (\omega)_p$ を M 上の k 形式といい、この全体の集合を $\Omega^k(M)$ と書く。いま、 M のチャート (U, ϕ) における余接空間 T_p^*M の座標基底を $(dx^i) = (dx^1, \dots, dx^d)$ とおくと、 k 形式は U 上で次のように局所座標表示することができる。

$$\omega = \omega_{i_1, \dots, i_k} dx^{i_1} \wedge \cdots \wedge dx^{i_k} \quad (\text{A.6})$$

ただし $\wedge: \Omega^k(M) \times \Omega^l(M) \rightarrow \Omega^{k+l}(M)$ はウェッジ積である。 ω の外微分 $d: \Omega^k(M) \rightarrow \Omega^{k+1}(M)$ は次のように定義される。

$$d\omega = \frac{\partial \omega_{i_1, \dots, i_k}}{\partial x^j} dx^j \wedge dx^{i_1} \wedge \cdots \wedge dx^{i_k} \quad (\text{A.7})$$

A.5 ベクトル束

A.5.1 接束とベクトル束

Fig. 1.2(a) に 1 次元多様体 S^1 と、そのいくつかの点の上の接空間を図示した。このように、 C^∞ 級多様体 M の各点 p には接空間 T_pM が付随しているので、全ての p と T_pM の非交和^{*7} を取ることで、集合 $TM = \bigsqcup_{p \in M} T_pM$ を構成する。定義より集合 TM の任意の要素は $p \in M$ および $v \in T_pM$ を用いて対 $(p, v) \in TM$ で表される。 TM は各要素 $(p, v) \in TM$ に対して $\pi(p, v) = p$ のように作用する全射 $\pi: TM \rightarrow M$ を備えている。組 (TM, M, π) には位相と可微分構造を与えることができ、これにより $m = (\dim M)$ を M の次元とすると、 TM は $2m$ 次元多様体となる

^{*7} 集合 S の部分集合の族を $\{A_i\}_{i \in I}$ としたとき、 $\bigsqcup_{i \in I} A_i := \bigcup_{i \in I} \{i\} \times A_i$ を非交和 (disjoint union) という。非交和 $\bigsqcup_{i \in I} A_i$ の要素は $j \in I$, $a \in A_j$ に対して順序付きの対 $(j, a) \in \bigsqcup_{i \in I} A_i$ で表される。

通常の和集合 $\bigcup_{i \in I} A_i$ との違いを見るために、共通部分 $A_i \cap A_j \neq \emptyset$ を持つ A_i と A_j を考えよう。 $\bigcup_{i \in I} A_i$ において、 $\forall s \in A_i \cap A_j$ は $\bigcup_{i \in I} A_i$ の一つの要素である。一方、非交和 $\bigsqcup_{i \in I} A_i$ における $\forall s \in A_i \cap A_j$ は (i, s) と (j, s) に区別して扱われるという違いがある。

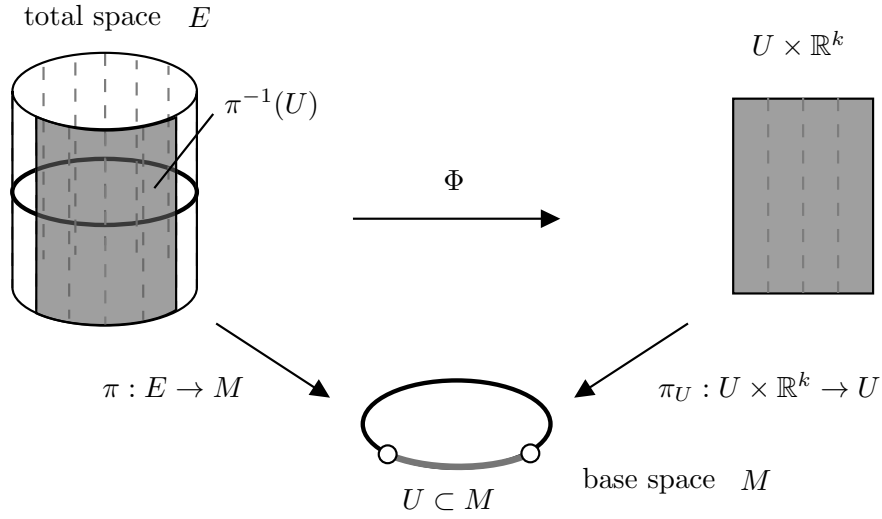


Fig. 1.1: Local trivialization of vector bundle.

[72]. 組 (TM, M, π) は接束 (tangent bundle) と呼ばれる. しばしば表記を簡略化して接束を TM とする.

接束 (TM, M, π) の構成時には, 各点 $p \in M$ の接空間 $T_p M$ の和集合で集合 TM を構成した. これを一般化して各点 $p \in M$ に, $T_p M$ の代わりに k 次元実ベクトル空間 V_p を付随させた集合 $E = \bigsqcup_{p \in M} V_p$ を考える. M を C^∞ 級多様体とすると, 次の条件を満たす C^∞ 級全射 $\pi: E \rightarrow M$ を備えた組 (E, M, π) を M 上の k 階 C^∞ 級ベクトル束という.

Definition 2 (C^∞ 級ベクトル束). $p \in M$ 上のベクトル空間を $\pi^{-1}(p) \in E$ と表す.

1. 各 $p \in M$ に対して, $E_p = \pi^{-1}(p)$ は k 次元ベクトル空間の構造を有する.
2. 各 $p \in M$ に対して, M の近傍 U に C^∞ 級微分同相写像 $\Phi: \pi^{-1}(U) \rightarrow U \times \mathbb{R}^k$ が存在して, 次の条件を満たす.
 - $\pi_U: U \times \mathbb{R}^k \rightarrow U$ を直積集合 $U \times \mathbb{R}^k$ の U への全射とすると, Φ は $\pi_U \circ \Phi = \pi$ を満たす.
 - 各 $q \in U$ に対して, Φ の $E_q = \pi^{-1}(q)$ への制限 $\Phi|_{E_q}: E_q \rightarrow \{q\} \times \mathbb{R}^k$ はベクトル空間 $E_q, \{q\} \times \mathbb{R}^k$ の間の同型写像を与える.

このとき, 各点 p でのベクトル空間 $E_p = \pi^{-1}(p)$ を p におけるファイバーという. また近傍 U に定まる C^∞ 級微分同相写像 Φ を U 上での E の C^∞ 級局所自明化という. C^∞ 級多様体 E, M および C^∞ 級全射 π はそれぞれ全空間, 底空間および射影という.

Fig. 1.1 にファイバーと局所自明化を示す. 左上の全空間 E の鉛直方向中央における黒色の円

が底空間 M であり、これらの中には射影 $\pi: E \rightarrow M$ が存在する。一方、 M の開近傍 $U \subset M$ に着目すると、 $\pi^{-1}(U) \subseteq E$ は C^∞ 級局所自明化 Φ により $\pi^{-1}(U) \simeq U \times \mathbb{R}^k$ となる。また射影 $\pi_U: U \times \mathbb{R}^k \rightarrow U$ により、そのベクトル空間が局所的には $\mathbb{R}^k$ と同一視できる [61]。

次に底空間を円 (1 次元球面) S^1 に固定したベクトル束の例を挙げる。

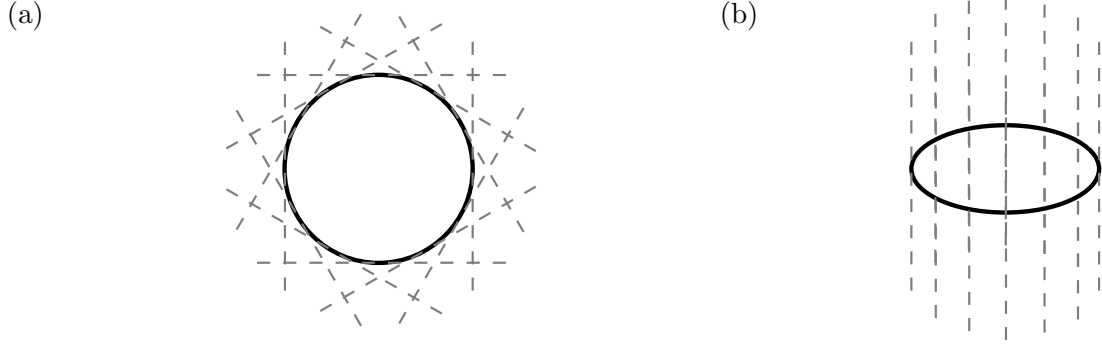


Fig. 1.2: Schematic description of (a) the tangent bundle TS^1 and (b) the trivial bundle $S^1 \times \mathbb{R}$. The black solid circles in (a) and (b) represent the base space S^1 and the broken grey lines represent the fibers (a) $T_p S^1$ and (b) $\{p\} \times \mathbb{R}$ at each $p \in S^1$.

example 1 (接束). Fig. 1.2(a) に円 (一次元球面) S^1 から構成される接束 TS^1 の模式図を示す。図中に灰色の破線で示したように、各点 $p \in S^1$ のファイバーは $\pi^{-1}(p) = T_p S^1$ のように接空間を与える。

example 2 (積束). Fig. 1.2(b) に円 (一次元球面) S^1 から構成されるベクトル束 $S^1 \times \mathbb{R}$ の模式図を示す。図中に灰色の破線で示したように、各点 $p \in S^1$ のファイバーは $\pi^{-1}(p) = \{p\} \times \mathbb{R}$ のように 1 次元実ベクトル空間になる。

この例のように、ある C^∞ 級多様体 M を底空間とし、全空間が $M \times \mathbb{R}^k$ 、射影が $\pi: M \times \mathbb{R}^k \rightarrow M$ で与えられる k 階 C^∞ 級ベクトル束 $(M \times \mathbb{R}^k, M, \pi)$ のことを積束という。積束の局所自明化は、全空間の全域に与えられる恒等写像 $\text{id}_{M \times \mathbb{R}^k}: M \times \mathbb{R}^k \rightarrow M \times \mathbb{R}^k$ である。このように、全空間 E の全域に局所自明化が与えられるとき、特にそれを自明化という。

S^1 以外に多様体を底空間とするベクトル束の例として以下に示す余接束やテンソル束が挙げられる。

example 3 (余接束). $\dim M$ 階 C^∞ 級ベクトル束 (T^*M, M, π) が余接束であるとは、各 $p \in M$ のファイバーが余接空間 T_p^*M になるものをいう。逆に接束と同様に集合 $T^*M = \bigsqcup_{p \in M} T_p^*M$ に、 C^∞ 級写像 $\pi: T^*M \rightarrow M$ を通して位相と微分構造が与えることができ、組 (T^*M, M, π) を余接束

という.

example 4 (テンソル束). C^∞ 級 (r, s) 型テンソル束 $(\mathbf{T}_s^r, M, \pi)$ の各 $p \in M$ のファイバーは (r, s) 型テンソル空間 $\mathbf{T}_s^r(T_p M)$ である. $\dim M = m$ とおくと, 全空間 $\mathbf{T}_s^r = \bigsqcup_{p \in M} \mathbf{T}_s^r(T_p M)$ は $m + m^{r+s}$ 次元 C^∞ 級多様体になる. $(r, s) = (1, 0)$ の場合, C^∞ 級 $(1, 0)$ 型テンソル束は接束と同一視できる ($\mathbf{T}_0^1 = TM$). 同様に, $(r, s) = (0, 1)$ の場合, C^∞ 級 $(0, 1)$ 型テンソル束は余接束と同一視できる ($\mathbf{T}_1^0 = T^*M$).

A.5.2 ベクトル束の間の写像

任意の正数 $k, r \geq 1$ に対し, $(E, M, \pi_E), (F, N, \pi_F)$ をそれぞれ k 階, r 階 C^∞ 級ベクトル束とする. これらの間の束写像または束準同型とは写像の組 $(f, \tilde{f})$, $f: M \rightarrow N$, $\tilde{f}: E \rightarrow F$ で次の二つの条件を満たすものである.

- $\tilde{f} \circ \pi_F = \pi_E \circ f$ が成り立つ

$$\begin{array}{ccc} E & \xrightarrow{\tilde{f}} & F \\ \downarrow \pi_E & & \downarrow \pi_F \\ M & \xrightarrow{f} & N \end{array}$$

- 各点 $p \in M$ のファイバーに対して $\tilde{f}: E_p \rightarrow F_{f(p)}$ が線形写像 (準同型写像) になる

また全単射な束準同型を束同型という. 特に束同型が微分同相写像であるとき, 滑らかな束同型という.

example 5 (接束の間の束準同型). C^∞ 級多様体 M, N の間の C^∞ 写像 $f: M \rightarrow N$ は接束 $(TM, M, \pi_M), (TN, N, \pi_N)$ に束準同型 $(f, \tilde{f})$ を誘導する. ここで, $\tilde{f}$ は次のように決まる.

$$\tilde{f}(p, v) = (f(p), f_{*,p}(v)) \in \{f(p)\} \times T_{f(p)}N \quad (\text{A.8})$$

ここで, $f_{*,p}: T_p M \rightarrow T_{f(p)} N$ は $p \in M$ における押し出し (接写像) である.

同一の底空間 M に対して, 二つの k 階 C^∞ 級ベクトル束 (E, M, π_E) と (F, M, π_F) が与えられたとき, 束準同型は (id_M, φ) , $\varphi: E \rightarrow F$ となる. このような束準同型を M 上の束準同型という. また, M 上の束準同型 (id_M, ψ) , $\psi: F \rightarrow E$ が存在して, $\psi \circ \varphi = \text{id}_E$, $\varphi \circ \psi = \text{id}_F$ を満足するとき, φ を M 上の束同型といい, E と F は M 上で同型であるという.

Definition 3 (自明ベクトル束 (trivial bundle)). k 階 C^∞ 級ベクトル束 (E, M, π) が自明である

とは、 M 上で積束 $M \times \mathbb{R}^k$ と同型となることをいう。自明なベクトル束を自明ベクトル束と呼ぶ。

A.5.3 ベクトル束の切断

(E, M, π) を k 階 C^∞ 級ベクトル束とする。 U を M 上の開集合とすると、 (E, M, π) の U 上の局所切断とは、 C^∞ 級写像 $s: U \rightarrow E$ で、 $\pi \circ s = \text{id}_U$ を満たすものである。 M の全域での C^∞ 級写像 $s: M \rightarrow E$ は、局所切断と区別して大域切断といい、陽に区別する必要がない場合は単に切断という。

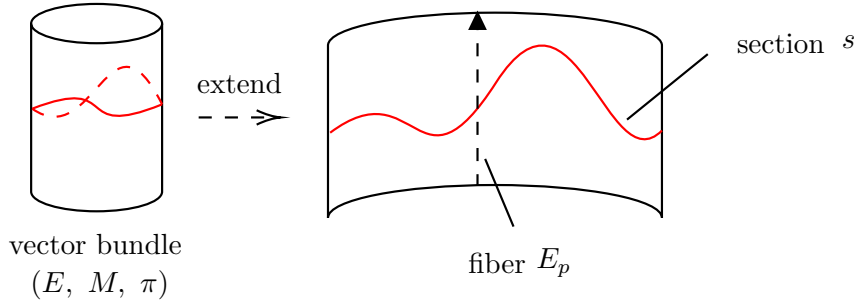


Fig. 1.3: Schematic illustration of a section s of a vector bundle (E, M, π) .

切断 s の模式図を Fig. 1.3 に示す。図中の円筒はベクトル束 (E, M, π) であり、この展開図中での赤色の曲線がこのベクトル束の切断 $s: M \rightarrow E$ である。切断 s は底空間 M の各点 p にファイバー E_p の元を対応させる写像で、 $s(p)$ はファイバー E_p の元になる。

次に C^∞ 級多様体間の写像 s が C^∞ 級であることについて説明する。 (U, ϕ) を $p \in U$ の周りのチャートとし、 (V, Φ) を $s(p) \in E_p$ の周りのチャートとする。写像 $s: U \rightarrow E$ が $p \in U$ で C^∞ 級であるとは、実ベクトル空間 $\phi(U) \subset \mathbb{R}^{\dim M}$ から $\Phi(E_p) = \{p\} \times \mathbb{R}^k \simeq \mathbb{R}^k$ への写像 $\Phi \circ s \circ \phi^{-1}: \phi(U) \rightarrow \mathbb{R}^k$ が $\phi(p)$ において C^∞ 級であることである。全ての $p \in U$ で s が C^∞ 級であるとき、 s は U 上の C^∞ 級写像であるという。

U 上の全ての C^∞ 級切断の集合を $\Gamma(E, U)$ と書く。 U が M 全域になる場合には単に $\Gamma(E)$ と書く。

example 6 (線束の C^∞ 級切断). 1 階ベクトル束のことを線束という。 (E, M, π) を C^∞ 級線束とする。 $U \subset M$ を M の開集合とし、 $\Gamma(E, U)$ を U 上の C^∞ 級切断の集合とすると、 $\forall s \in \Gamma(E, U)$ は $s(p) = (p, f(p))$ のように表される。ここで f は U 上の C^∞ 級写像 $f: U \rightarrow \pi^{-1}(U)$ である。特にこの線束が積束である場合、全空間は $E = M \times \mathbb{R}$ のように表され、 f は C^∞ 級関数 $f: U \rightarrow \mathbb{R}$ になる。すなわち、 $\Gamma(M \times \mathbb{R}, U)$ と U 上の C^∞ 級関数の集合 $C^\infty(U)$ は同一視できる。

example 7 (接束の C^∞ 級切断). (TM, M, π) を C^∞ 級接束とする. この C^∞ 級切断の集合 $\Gamma(TM)$ は C^∞ 級ベクトル場の集合 $\mathfrak{X}(M)$ と同一視される. 実際, $\forall s \in \Gamma(TM)$ は M 上の各 $p \in M$ に $s(p) \in T_p M$ を対応させる C^∞ 級写像である.

example 8 (余接束の C^∞ 級切断). (T^*M, M, π) を C^∞ 級余接束とする. この C^∞ 級切断の集合 $\Gamma(T^*M)$ は余接ベクトル場 (微分 1 形式) の集合 $\Omega^1(M)$ と同一視される. 実際, $\forall s \in \Gamma(T^*M)$ は M 上の各 $p \in M$ に $s(p) \in T_p^*M$ を対応させる C^∞ 級写像である.

A.5.4 枠

(E, M, π) を k 階 C^∞ 級ベクトル束とする. M 上の開集合を U とし, $p \in U$ でのファイバー $E_p = \pi^{-1}(p)$ は局所自明化により k 次元実ベクトル空間 $\mathbb{R}^k$ と同型になるので, $\mathbb{R}^k$ の基底との同一視により, k 個の線形独立な要素を与えることができる. M 上の開集合 U における E の C^∞ 級局所枠とは, U 上の各 $p \in U$ のファイバー E_p 上で, 互いに線形独立な k 個の C^∞ 級局所切断の組 $(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ である. U 上の各 E_p で k 個の C^∞ 級局所切断の組 $(\sigma_1(p), \dots, \sigma_k(p))$ が互いに線形独立な基底になっているとき, $(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ は E を張るという. $U = M$ のとき, k 個の C^∞ 級大域切断の組 $(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ を C^∞ 級大域枠といい, 局所切断との区別が陽に必要ない場合は単に C^∞ 級枠という.

C^∞ 級局所自明化 $\Phi: \pi^{-1}(U) \rightarrow U \times \mathbb{R}^k$ は C^∞ 級微分同相写像なので, 逆写像 $\Phi^{-1}: U \times \mathbb{R}^k \rightarrow \pi^{-1}(U)$ も C^∞ 級写像である. これと $\mathbb{R}^k$ のある基底の組 $(e_1, \dots, e_k)$ を用いれば, 各 $p \in U$ において, 次のような C^∞ 級局所切断を考えることができる.

$$\sigma_i(p) = \Phi^{-1}(p, e_i) \quad (\text{A.9})$$

同時に, 組 $(\sigma_1(p), \dots, \sigma_k(p))$ はベクトル空間の間の同型写像を与える Φ の逆写像 Φ^{-1} によって構成されるため, 互いに線型独立である. したがって, このようにして構成された U 上の C^∞ 級局所切断の組 $(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ は C^∞ 級局所枠になる. このようにして構成される C^∞ 級局所枠は, E の C^∞ 級局所自明化 Φ と関連するという. 全ての C^∞ 級局所枠はある C^∞ 級局所自明化と関連することが示されている [60]. また, このことを用いれば, ベクトル束に C^∞ 級大域枠が存在するための必要十分条件は, そのベクトル束が自明ベクトル束であると言える [60]. これをある C^∞ 級多様体 M の接束 TM に適用すると, TM が自明ベクトル束である場合に限り C^∞ 級大域枠が存在すると言える. このように, TM が自明ベクトル束であり, C^∞ 級大域枠が存在する M は平行化可能であるという. 平行化可能な多様体の例として, $\mathbb{R}^n, n > 0$ の部分多様体や S^1 , Lie 群 G が挙げられる. 一

方, 平行化可能でない多様体の代表例が S^2 である. これは毛玉定理 (hairy ball theorem) として知られている.

枠の例としては接束や余接束の局所座標系から定まる座標枠や正規直交枠がある.

example 9 (接束と余接束の座標枠). (TM, M, π) を接束とし, $(U, x^1, \dots, x^d)$ を底空間 M のチャートとすると, U 上に C^∞ 級局所枠 $(\partial/\partial x^1, \dots, \partial/\partial x^d)$ が定まる. これと同様に (T^*M, M, π) を余接束とすると, U 上に C^∞ 級局所枠 $(dx^1, \dots, dx^d)$ が定まる. このように底空間 M のチャート $(U, x^1, \dots, x^d)$ に定まる C^∞ 級局所枠を特に座標枠と呼ぶ.

A.5.5 ベクトル束のファイバーに付随する内積

Riemann 多様体 (M, g) の Riemann 計量 g は M の各点 $p \in M$ の接空間 $T_p M$ に内積を与える $(2, 0)$ 型テンソル場である. 見方を変えれば, Riemann 計量は接束 TM の各点のファイバーに内積を与えるとみることができる. これと同様に k 階 C^∞ 級ベクトル束 (E, M, π) の各点のファイバーに内積を与えることで, これを内積空間にすることができる.

Definition 4 (ベクトル束の Riemann 計量). k 階 C^∞ 級ベクトル束 (E, M, π) の Riemann 計量とは, 各点 $p \in M$ のファイバー E_p の内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_p : E_p \times E_p \rightarrow \mathbb{R}$ で, それが次の意味で C^∞ 級であるものをいう: M の開集合 U 上の局所切断 $\forall s, t \in \Gamma(E, U)$ について, U 上の各点 $p \in U$ での対応 $p \mapsto (\langle s, t \rangle)_p := \langle s(p), t(p) \rangle_p$ が C^∞ 級関数である.

ここでベクトル束 (E, M, π) の Riemann 計量が C^∞ 級関数であることの意味を復習する. M のあるチャート (U, ϕ) と局所自明化による各点の対応 $\psi: \pi^{-1}(U) \rightarrow \mathbb{R}^k$ について, $\langle \psi \circ s, \psi \circ t \rangle_{\mathbb{R}^k} : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ が $\mathbb{R}^k$ 上の C^∞ 級関数であることをいう.

ベクトル束に Riemann 計量が導入されることで, この内積に関する正規直交性を満足する枠を構成することができる.

example 10 (正規直交枠). (E, M, π) を Riemann 計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を備えた k 階 C^∞ 級ベクトル束とする. M の開集合 U 上の C^∞ 級局所切断の組 $(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ を, U のある C^∞ 級局所自明化 $\Phi: \pi^{-1}(U) \rightarrow U \times \mathbb{R}^k$ と関連した C^∞ 級局所枠とする. $(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ が局所正規直交枠であるとは, U 上の各点 p で $\langle \sigma_i(p), \sigma_j(p) \rangle_p = \delta_{ij}$, $(i, j = 1, \dots, k)$ を満たすことをいう. ただし δ_{ij} は Kronecker デルタである.

A.5.6 ベクトル束上の接続

C^∞ 級多様体 M 上のあるベクトル場 $X \in \mathfrak{X}(M)$ に対して, あるベクトル場 $Y \in \mathfrak{X}(M)$ による方向微分をアフィン接続 $\nabla: \mathfrak{X}(M) \times \mathfrak{X}(M) \rightarrow \mathfrak{X}(M)$ を用いて定義することができる.

いま, C^∞ 級多様体 M 上のベクトル場 $X \in \mathfrak{X}(M)$ を接束 TM の切断 $X, Y \in \Gamma(TM)$ と見れば, アフィン接続を M 上のベクトル場による切断の方向微分とみなすことができる. すなわち, ベクトル束上の接続は, 接束上のアフィン接続をベクトル束に一般化した概念である.

Definition 5 (ベクトル束上の接続). (E, M, π) を M 上の C^∞ 級ベクトル束とする. E 上の接続とは C^∞ 級写像 $\nabla: \mathfrak{X}(M) \times \Gamma(E) \rightarrow \Gamma(E)$ であって, M 上のある C^∞ 級ベクトル場 $X \in \mathfrak{X}(M)$ および E 上のある C^∞ 級切断 $s \in \Gamma(E)$ に対して次の条件を満たすものである.

- $\nabla_{fX}(as) = af\nabla_X s$, $f \in C^\infty(M)$, $a \in \mathbb{R}$ (ベクトル場 X に関して $C^\infty(M)$ 線形, 切断 s に関して $\mathbb{R}$ 線形)
- $\nabla_X(fs) = X(f)s + f\nabla_X s$ (Leipnitz 則)

ベクトル束上の接続の一例が接束上のアフィン接続である. これ以外に, 自明ベクトル束上に自明化から誘導される接続がある.

Definition 6 (自明な接続). (E, M, π) を自明ベクトル束とする. 自明ベクトル束 E には自明化 Φ に関連する C^∞ 級大域枠 $(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ が存在する. $\forall X \in \mathfrak{X}(M)$ に対して写像 $\nabla: \mathfrak{X}(M) \times \Gamma(E) \rightarrow \Gamma(E)$ を $\nabla_X \sigma_i = 0$ と定義する. これを自明化 Φ に関する自明な接続という.

example 11 (自明ベクトル束に誘導される接続). C^∞ 級 k 階ベクトル束 (E, M, π) を自明ベクトル束とすると, M 上に E の C^∞ 級大域枠 $(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ が存在する. ここで $\mathbb{R}^k$ の基底を $(e_1, \dots, e_n)$ とおくと, 各 $p \in M$ での $\sigma_i(p)$ は, $(p, e_i) \in M \times \mathbb{R}^k$ と自明化の逆写像 $\Phi^{-1}: M \times \mathbb{R}^k \rightarrow E$ を用いて

$$\sigma_i(p) = \phi^{-1}(p, e_i) \quad (\text{A.10})$$

と表される. これを用いれば, 任意の M 上の E の切断 $\forall s \in \Gamma(E)$ は

$$s = \sum_{l=1}^k s^l \sigma_l \quad (\text{A.11})$$

と表すことができる. ここで各 $s^l: M \rightarrow \mathbb{R}$ は M 上の C^∞ 級関数である.

∇ を自明化 Φ に関する自明な接続とする． M 上の任意のベクトル場 $\forall X \in \mathfrak{X}(M)$ に対して自明ベクトル束の大域枠 $(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ の各成分は $\nabla_X \sigma_i = 0$ を満たす．したがって任意の $s \in \Gamma(E)$ の X による共変微分は次のようになる．

$$\nabla_X s = \sum_{l=1}^k \nabla_X (s^l \sigma_l) = \sum_{l=1}^k (X(s^l) \sigma_l + s^l \nabla_X \sigma_l) = \sum_{l=1}^k ds^l(X) \sigma_l \quad (\text{A.12})$$

アフィン接続によって多様体の曲率テンソルが特徴付けられたのと同様に，ベクトル束上の接続に対しても曲率テンソルを定義することができる^{*8}． ∇ を C^∞ 級ベクトル束 (E, M, π) の接続とする．この ∇ に関する $\mathbb{R}$ 多重線形写像 $R: \mathfrak{X}(M) \times \mathfrak{X}(M) \times \Gamma(E) \rightarrow \Gamma(E)$ を， $\forall X, Y \in \mathfrak{X}(M)$ ， $\forall s \in \Gamma(E)$ に関して次のように定義する．

$$R(X, Y)s := \nabla_X \nabla_Y s - \nabla_Y \nabla_X s - \nabla_{[X, Y]} s \quad (\text{A.13})$$

また定義より $R(X, Y)s = -R(Y, X)s$ である．したがって M 上の各点に反対称な $\mathbb{R}$ 多重線形写像 $R_p: T_p M \times T_p M \rightarrow \text{Hom}(E_p, E_p) = \text{End}(E_p)$ が定まる．

Definition 7 (ベクトル束の接続の曲率テンソル)． R_p をベクトル束の接続 ∇ の曲率テンソルという．

example 12 (自明な接続の曲率テンソル)． ∇ を自明ベクトル束 E の自明な接続とする．任意の $X, Y \in \mathfrak{X}(M)$ を任意のベクトル場， $s \in \Gamma(E)$ を任意の切断とすると，

$$\begin{aligned} R(X, Y)s &= \nabla_X \nabla_Y s - \nabla_Y \nabla_X s - \nabla_{[X, Y]} s \\ &= \nabla_X \left(\sum ds^l(Y) \sigma_l \right) - \nabla_Y \left(\sum ds^l(X) \sigma_l \right) - \sum ds^l([X, Y]) \sigma_l \\ &= \sum d(ds^l(Y)) (X) \sigma_l - \sum d(ds^l(X)) (Y) \sigma_l - \sum ds^l([X, Y]) \sigma_l \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

となる．

A.5.7 接続形式と曲率形式

k 階 C^∞ 級ベクトル束 (E, M, π) 上の接続 ∇ は M の任意の開集合 U へ制限することができる．この制限は次のようにして得られる． U 上の部分ベクトル束を $E|_U$ とおき， $X \in \mathfrak{X}(M)$ と $s \in \Gamma(E)$ を任意のベクトル場，切断とする．これらの U 上への制限をそれぞれ $X|_U$ ， $s|_U$ とおく．

^{*8} 定義よりベクトル束の接続に，アフィン接続と同様に曲率テンソルを定義することはできない．

$E|_U$ 上の接続 $\nabla^U: \mathfrak{X}(U) \times \Gamma(E, U) \rightarrow \Gamma(E, U)$ はこれらを用いて次のようにして与えられる.

$$\nabla_{X|_U}^U s|_U := (\nabla_X s)|_U \quad (\text{A.15})$$

E の U 上の C^∞ 級局所枠を $(e_1, \dots, e_k)$ とおく. U 上の任意の局所切断 $\forall s \in \Gamma(E, U)$ は $(e_1, \dots, e_k)$ の線型結合 $s = s^i e_i$ で表されるから, $\forall X \in \mathfrak{X}(U)$ に対して $\nabla_X^U s$ は次のようになる.

$$\begin{aligned} \nabla_X^U s &= \nabla_X^U (s^i e_i) \\ &= (\nabla_X^U s^i) e_i + s^i (\nabla_X^U e_i) \\ &= X(s^i) e_i + s^i (\nabla_X^U e_i) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

ここで第1項の $X(s^i) = ds^i(X)$ はベクトル場 X による関数 s^i の微分で, ここに接続 ∇^U の特徴は現れないことがわかる. 一方, 第2項の $\nabla_X^U e_i$ は定義より再び E の U 上の局所切断を与えることから, X に依存した U 上の関数の組 $\omega_i^j(X) \in C^\infty(U)$ および $(e_1, \dots, e_k)$ の線型結合で表すことができる.

$$\nabla_X^U e_i = \omega_i^j(X) e_j \quad (\text{A.17})$$

ここで ∇ の定義 (定義5) より $\nabla_X^U e_i$ は第一引数の X に関して $C^\infty(U)$ 線型性がある. したがって右辺の係数 $\omega_i^j(X)$ は $C^\infty(U)$ 線型性を有し, $C^\infty(U)$ 線形写像 $\mathfrak{X}(U) \rightarrow C^\infty(U)$ とみなすことができる. すなわち, 各 ω_i^j は U 上の1形式である. このように, U の局所枠 $(e_1, \dots, e_k)$ と接続 ∇^U に依存する U 上の1形式 $\omega_i^j \in \Omega^1(U)$ を接続形式という.

∇^U の曲率テンソルを $R: \mathfrak{X}(U) \times \mathfrak{X}(U) \times \Gamma(E, U) \rightarrow \Gamma(E, U)$ とおくと $\forall X, Y \in \mathfrak{X}(U)$, $s \in \Gamma(E, U)$ に対して $R(X, Y)s \in \Gamma(E, U)$ となる. ここで $C^\infty(U)$ 線型性より $R(X, Y)s = s^i R(X, Y)e_i$ なので $R(X, Y)e_i$ を調べる. $R(X, Y)e_i$ を X, Y に依存した U 上の関数の組 $\Omega_i^j(X, Y) \in C^\infty(U)$ および $(e_1, \dots, e_k)$ の線型結合で次のように表される.

$$R(X, Y)e_i = \Omega_i^j(X, Y)e_j \quad (\text{A.18})$$

定義7より $R(X, Y)$ は X, Y に関して $C^\infty(U)$ 線型性と反対称性 $R(X, Y) = -R(Y, X)$ を有することから, 各 Ω_i^j は U 上の2形式 $\mathfrak{X}(U) \times \mathfrak{X}(U) \rightarrow \mathbb{R}$ とみなすことができる. そこで U 上の局所枠 $(e_1, \dots, e_k)$ と接続 ∇^U に依存する U 上の2形式 $\Omega_i^j \in \Omega^2(U)$ を曲率形式という.

ベクトル束の接続に関する曲率形式と接続形式は定義より第二構造方程式に従う [61].

$$\Omega_j^i = d\omega_j^i + \omega_k^i \wedge \omega_j^k \quad (\text{A.19})$$

参考文献

- [1] 今野 豊彦, 物質の対称性と群論, 東京: 共立出版, 2001.
- [2] 竹内 伸, 結晶塑性論 : 多彩な塑性現象を転位論で読み解く, 東京: 内田老鶴圃, 2013.
- [3] D. Hull and D. J. Bacon, Introduction to dislocations Fourth Edition, Butterworth Heine-mann, 2001.
- [4] R. Phillips and M. Kuczma, Crystals, Defects and Microstructures: Modeling Across Scales, *Applied Mechanics Reviews*, **55** (2002), B42–B43. DOI: 10.1115/1.1470666.
- [5] 鈴木 秀次, 転位論入門, 東京: アグネ, 1967.
- [6] E. Orowan, A type of plastic deformation new in metals, *Nature*, **149** (1942), pp. 643–644. DOI: 10.1038/149643a0.
- [7] J. B. Hess and C. S. Barrett, Structure and nature of kink bands in zinc, *JOM*, **1** (1949), pp. 599–606. DOI: 10.1007/BF03398902.
- [8] D. C. Jillson, Quantitative stress-strain studies on zinc single crystals in tension, *JOM*, **2** (1950), pp. 1129–1133. DOI: 10.1007/BF03399110.
- [9] D. C. Jillson, An experimental survey of deformation and annealing processes in zinc, *JOM*, **2** (1950), pp. 1009–1018. DOI: 10.1007/BF03399099.
- [10] J. J. Gilman, Mechanism of ortho kink-band formation in Compressed Zinc Monocrystals, *JOM*, **6** (1954), pp. 621–629. DOI: 10.1007/BF03398884.
- [11] R. E. Robertson, Formation of kink bands in oriented polymers, *Journal of Polymer Science Part A-2: Polymer Physics*, **7** (1969), pp. 1315–1328. DOI: 10.1002/pol.1969.160070803.
- [12] M. S. Paterson and L. E. Weiss, Experimental Folding in Rocks, *Nature*, **195** (1962), pp. 1046–1048. DOI: 10.1038/1951046a0.
- [13] F. Hörz, Static and dynamic origin of kink bands in micas, *Journal of Geophysical Research*, **75** (1970), pp. 965–977. DOI: 10.1029/JB075i005p00965.
- [14] D. A. Zaukelies, Observation of Slip In Nylon 66 and 610 and Its Interpretation in Terms of a New Model, *Journal of Applied Physics*, **33** (1962), pp. 2797–2803. DOI: 10.1063/1.1702552.

- [15] T. Nizolek, M. Begley, R. McCabe, J. Avallone, N. Mara, I. Beyerlein and T. Pollock, Strain fields induced by kink band propagation in Cu-Nb nanolaminate composites, *Acta Materialia*, **133** (2017), pp. 303–315. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.04.050.
- [16] G. W. Hunt, M. A. Peletier and M. Wadee, The Maxwell stability criterion in pseudo-energy models of kink banding, *Journal of Structural Geology*, **22** (2000), pp. 669–681. DOI: 10.1016/S0191-8141(99)00182-0.
- [17] Y. Kawamura and M. Yamasaki, Formation and Mechanical Properties of Mg₉₇Zn₁RE₂ Alloys with Long-Period Stacking Ordered Structure, *MATERIALS TRANSACTIONS*, **48** (2007), pp. 2986–2992. DOI: 10.2320/matertrans.MER2007142.
- [18] K. Hagihara, A. Kinoshita, Y. Sugino, M. Yamasaki, Y. Kawamura, H. Yasuda and Y. Umakoshi, Plastic deformation behavior of Mg₈₉Zn₄Y₇ extruded alloy composed of long-period stacking ordered phase, *Intermetallics*, **18** (2010), pp. 1079–1085. DOI: 10.1016/j.intermet.2010.02.011.
- [19] K. Hagihara, M. Honnami, R. Matsumoto, Y. Fukusumi, H. Izuno, M. Yamasaki, T. Okamoto, T. Nakano and Y. Kawamura, In-Situ Observation on the Formation Behavior of the Deformation Kink Bands in Zn Single Crystal and LPSO Phase, *MATERIALS TRANSACTIONS*, **56** (2015), pp. 943–951. DOI: 10.2320/matertrans.MH201412.
- [20] M. Noda, T. Mayama and Y. Kawamura, Evolution of Mechanical Properties and Microstructure in Extruded Mg₉₆Zn₂Y₂ Alloys by Annealing, *MATERIALS TRANSACTIONS*, **50** (2009), pp. 2526–2531. DOI: 10.2320/matertrans.M2009214.
- [21] E. Abe, Structural Characteristics and Crystallography of the Synchronized LPSO-Mg Alloys, *Materia Japan*, **54** (2015), pp. 50–54. DOI: 10.2320/materia.54.50.
- [22] T. Matsumoto, M. Yamasaki, K. Hagihara and Y. Kawamura, Configuration of dislocations in low-angle kink boundaries formed in a single crystalline long-period stacking ordered Mg-Zn-Y alloy, *Acta Materialia*, **151** (2018), pp. 112–124. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.03.034.
- [23] Y. Kawamura, K. Hayashi, A. Inoue and T. Masumoto, Rapidly Solidified Powder Metallurgy Mg₉₇Zn₁Y₂ Alloys with Excellent Tensile Yield Strength above 600 MPa, *MATERIALS TRANSACTIONS*, **42** (2001), pp. 1172–1176. DOI: 10.2320/matertrans.42.1172.

- [24] T. Itoi, T. Seimiya, Y. Kawamura and M. Hirohashi, Long period stacking structures observed in Mg₉₇Zn₁Y₂ alloy, *Scripta Materialia*, **51** (2004), pp. 107–111. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2004.04.003.
- [25] K. Hagihara, Z. Li, M. Yamasaki, Y. Kawamura and T. Nakano, Strengthening mechanisms acting in extruded Mg-based long-period stacking ordered (LPSO)-phase alloys, *Acta Materialia*, **163** (2019), pp. 226–239. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.10.016.
- [26] T. Inamura, Geometry of kink microstructure analysed by rank-1 connection, *Acta Materialia*, (2019), S1359645419303052. DOI: 10.1016/j.actamat.2019.05.023.
- [27] 丸川 健三郎, 金属結晶のディスクリネーション, 日本金属学会会報, **13** (1974), pp. 597–603. DOI: 10.2320/material1962.13.597.
- [28] M. Klemm and J. Friedel, Disclinations, dislocations, and continuous defects: A reappraisal, *Reviews of Modern Physics*, **80** (2008), pp. 61–115. DOI: 10.1103/RevModPhys.80.61.
- [29] 北野 保行, 結晶中の回位 (ディスクリネーション) とその分布, 電子顕微鏡, **25** (1990), pp. 2–10. DOI: 10.11410/kenbikyo1950.25.2.
- [30] M. Wilson, 薫. 小園井, K. Kannangara, G. Smith, M. Simmons and B. Raguse, ナノテクノロジーの基礎科学, 東京: エヌ・ティー・エス, 2003.
- [31] M. J. Bierman, Y. K. A. Lau, A. V. Kvit, A. L. Schmitt and S. Jin, Dislocation-Driven Nanowire Growth and Eshelby Twist, *Science*, **320** (2008), p. 1060. DOI: 10.1126/science.1157131.
- [32] Y. Chu, J. Li and J. Chen, Solid Conical Cap-closing Hollow Tube Growth by Axial Screw Dislocations, *Scientific Reports*, **7** (2017), p. 2803. DOI: 10.1038/s41598-017-03109-w.
- [33] C. Hartley and Y. Mishin, Characterization and visualization of the lattice misfit associated with dislocation cores, *Acta Materialia*, **53** (2005), pp. 1313–1321. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.11.027.
- [34] S. Das and V. Gavini, Electronic structure study of screw dislocation core energetics in Aluminum and core energetics informed forces in a dislocation aggregate, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **104** (2017), pp. 115–143. DOI: 10.1016/j.jmps.2017.03.010.
- [35] R. B. Sills, W. P. Kuykendall, A. Aghaei and W. Cai, Fundamentals of Dislocation Dynamics Simulations, Multiscale Materials Modeling for Nanomechanics. Ed. by C. R. Wein-

- berger and G. J. Tucker. Vol. 245. Cham: Springer International Publishing, 2016, pp. 53–87. DOI: 10.1007/978-3-319-33480-6_2.
- [36] F. Roters, P. Eisenlohr, T. R. Bieler and D. Raabe, Crystal Plasticity Finite Element Methods: In Materials Science and Engineering, Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010. DOI: 10.1002/9783527631483.
- [37] R. J. Asaro and J. R. Rice, Strain localization in ductile single crystals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **25** (1977), pp. 309–338. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(77\)90001-1](https://doi.org/10.1016/0022-5096(77)90001-1).
- [38] J. Simo, A framework for finite strain elastoplasticity based on maximum plastic dissipation and the multiplicative decomposition: Part I. Continuum formulation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **66** (1988), pp. 199–219. DOI: 10.1016/0045-7825(88)90076-X.
- [39] K. Le and H. Stumpf, Nonlinear continuum theory of dislocations, *International Journal of Engineering Science*, **34** (1996), pp. 339–358. DOI: 10.1016/0020-7225(95)00092-5.
- [40] V. Volterra, Sur l'équilibre des corps élastiques multiplément connexes, *Annales scientifiques de l'École normale supérieure*, **24** (1907), pp. 401–517. DOI: 10.24033/asens.583.
- [41] T. Mura, Micromechanics of defects in solids, 2nd, rev. ed. Mechanics of elastic and inelastic solids. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1991.
- [42] R. Arora and A. Acharya, Dislocation pattern formation in finite deformation crystal plasticity, *International Journal of Solids and Structures*, (2019). DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2019.02.013.
- [43] M. Lazar, Non-singular dislocation continuum theories: strain gradient elasticity vs. Peierls–Nabarro model, *Philosophical Magazine*, **97** (2017). DOI: 10.1080/14786435.2017.1375608.
- [44] J. F. Nye, Some geometrical relations in dislocated crystals, *Acta Metallurgica*, **1** (1953), p. 10.
- [45] K. Kondo, Geometry of elastic deformation and incompatibility, vol. 1. 4 vols. RAAG Memoirs of the Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Sciences by Means of Geometry. Devision C-I. Gakujutsu Bunken Fukyukai, 1955.
- [46] K. Kondo, Non-Riemannian geometry of imperfect crystals from a macroscopic viewpoint, vol. 1. 4 vols. RAAG Memoirs of the Unifying Study of Basic Problems in Engineering

- and Physical Sciences by Means of Geometry. Division D-I. Gakujutsu Bunken Fukyukai, 1955.
- [47] B. A. Bilby, R. Bullough and E. Smith, Continuous distributions of dislocations: a new application of the methods of non-Riemannian geometry, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, **231** (1955), pp. 263–273. DOI: 10.1098/rspa.1955.0171.
 - [48] E. Kröner and A. Seeger, Nicht-lineare Elastizitätstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen, **3** (1959), p. 23.
 - [49] H. Anthony Karl, Die theorie der disklationen, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **39** (1970), pp. 43–88. DOI: 10.1007/BF00281418.
 - [50] E. Kröner, The differential geometry of elementary point and line defects in Bravais crystals, *International Journal of Theoretical Physics*, **29** (1990), pp. 1219–1237. DOI: 10.1007/BF00672933.
 - [51] W. Noll, Materially uniform simple bodies with inhomogeneities, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **27** (1967), p. 32.
 - [52] C. C. Wang, On the geometric structures of simple bodies, a mathematical foundation for the theory of continuous distributions of dislocations, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **27** (1967), p. 62.
 - [53] K. C. Le and H. Stumpf, Constitutive equations for elastoplastic bodies at finite strain: thermodynamic implementation, *Acta Mechanica*, **100** (1993), pp. 155–170. DOI: 10.1007/BF01174787.
 - [54] D. Edelen and D. Lagoudas, Gauge theory and defects in solids, Mechanics and Physics of Discrete Systems. Burlington, MA: Elsevier, 1988.
 - [55] A. Acharya, A model of crystal plasticity based on the theory of continuously distributed dislocations, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **49** (2001), pp. 761–784. DOI: 10.1016/S0022-5096(00)00060-0.
 - [56] A. Yavari and A. Goriely, Riemann–Cartan Geometry of Nonlinear Dislocation Mechanics, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **205** (2012), pp. 59–118. DOI: 10.1007/s00205-012-0500-0.

- [57] A. Yavari and A. Goriely, Riemann–Cartan geometry of nonlinear disclination mechanics, *Mathematics and Mechanics of Solids*, **18** (2013), pp. 91–102. DOI: 10.1177/1081286511436137.
- [58] A. Yavari and A. Goriely, The geometry of discombinations and its applications to semi-inverse problems in anelasticity, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **470** (2014), pp. 20140403–20140403. DOI: 10.1098/rspa.2014.0403.
- [59] A. Ozakin and A. Yavari, Affine development of closed curves in Weitzenböck manifolds and the Burgers vector of dislocation mechanics, *Mathematics and Mechanics of Solids*, **19** (2014), pp. 299–307. DOI: 10.1177/1081286512463720.
- [60] J. M. Lee, Introduction to Smooth Manifolds, 2nd ed. Graduate texts in mathematics. Springer-Verlag New York, 2012. 708 pp.
- [61] L. W. Tu, Differential geometry: connections, curvature, and characteristic classes, New York, NY: Springer Science+Business Media, 2017.
- [62] M. Nakahara, Geometry, Topology and Physics, Second Edition, Taylor & Francis, 2003. DOI: 10.1201/9781420056945.
- [63] R. Aldrovandi and J. G. Pereira, An Introduction to Geometrical Physics, WORLD SCIENTIFIC, 2016. 844 pp. DOI: 10.1142/10202.
- [64] O. E. Fernandez and A. M. Bloch, The Weitzenböck connection and time reparameterization in nonholonomic mechanics, *Journal of Mathematical Physics*, **52** (2011), p. 012901. DOI: 10.1063/1.3525798.
- [65] J. E. Marsden, T. J. R. Hughes and D. E. Carlson, Mathematical Foundations of Elasticity, *Journal of Applied Mechanics*, **51** (1984), p. 946. DOI: 10.1115/1.3167757.
- [66] R. de Wit, A view of the relation between the continuum theory of lattice defects and non-euclidean geometry in the linear approximation, *Dedicated to Prof. K. Kondo on the occasion of his seventieth birthday*, **19** (1981), pp. 1475–1506. DOI: 10.1016/0020-7225(81)90073-2.
- [67] S. Sadik and A. Yavari, On the origins of the idea of the multiplicative decomposition of the deformation gradient, *Mathematics and Mechanics of Solids*, **22** (2017), pp. 771–772. DOI: 10.1177/1081286515612280.

- [68] J. Wenzelburger, A kinematic model for continuous distributions of dislocations, *Journal of Geometry and Physics*, **24** (1998), pp. 334–352. DOI: 10.1016/S0393-0440(97)00016-8.
- [69] E. Binz, G. Schwarz and J. Wenzelburger, On the dynamics of continuous distributions of dislocations, *Quarterly of Applied Mathematics*, **59** (2001), pp. 225–239. DOI: 10.1090/qam/1827812.
- [70] K. Le and H. Stumpf, On the determination of the crystal reference in nonlinear continuum theory of dislocations, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **452** (1996), pp. 359–371. DOI: 10.1098/rspa.1996.0019.
- [71] K. Tapp, Differential Geometry of Curves and Surfaces, Undergraduate Texts in Mathematics. Cham: Springer International Publishing, 2016. DOI: 10.1007/978-3-319-39799-3.
- [72] L. W. Tu, An introduction to manifolds, 2nd ed. Universitext. New York: Springer, 2011.
- [73] D. G. B. Edelen, Applied Exterior Calculus, Google-Books-ID: GUkViODKZ2oC. Courier Corporation, 2005.
- [74] 森田 茂之, 微分形式の幾何学, 岩波オンデマンドブックス. 東京: 岩波書店, 2016.
- [75] 茂木 勇 and 伊藤 光弘, 復刊 微分幾何学とゲージ理論, 共立出版, 2007.
- [76] 小林 昭七, 接続の微分幾何とゲージ理論, 裳華房, 1989.
- [77] P. Les and T. Wayne, The NURBS Book, 2nd. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1997.
- [78] T. Hughes, J. Cottrell and Y. Bazilevs, Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **194** (2005), pp. 4135–4195. DOI: 10.1016/j.cma.2004.10.008.
- [79] C. J. Austin, H. Thomas J. R. and B. Yuri, Isogeometric Analysis: Toward Integration of CAD and FEA, 1st. Wiley Publishing, 2009.
- [80] 吉田 善章, 応用のための関数解析 : その考え方と技法, 新版. SGC books : for senior & graduate courses. 東京: サイエンス社, 2006.
- [81] V. P. Nguyen, P. Kerfriden, M. Brino, S. P. A. Bordas and E. Bonisoli, Nitsche’s method for two and three dimensional NURBS patch coupling, *Computational Mechanics*, **53** (2014), pp. 1163–1182. DOI: 10.1007/s00466-013-0955-3.

- [82] L. Beirão da Veiga, D. Cho, L. Pavarino and S. Scacchi, Isogeometric Schwarz preconditioners for linear elasticity systems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **253** (2013), pp. 439–454. DOI: 10.1016/j.cma.2012.10.011.
- [83] D. Cho, L. F. Pavarino and S. Scacchi, Isogeometric Schwarz preconditioners for the biharmonic problem, *ETNA - Electronic Transactions on Numerical Analysis*, **49** (2018), pp. 81–102. DOI: 10.1553/etna_vol49s81.
- [84] V. Dolean, P. Jolivet and F. Nataf, An Introduction to Domain Decomposition Methods, Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2015. DOI: 10.1137/1.9781611974065.
- [85] N. Grubic, P. G. LeFloch and C. Mardare, The equations of elastostatics in a Riemannian manifold, *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, **102** (2014), pp. 1121–1163. DOI: 10.1016/j.matpur.2014.07.009.
- [86] R. Peierls, The size of a dislocation, *Proceedings of the Physical Society*, **52** (1940), pp. 34–37.
- [87] L. Shaofan and W. Gang, Introduction to micromechanics and nanomechanics, Toh Tuck Link, Singapore: World Scientific Publishing, 2008.
- [88] V. Vitek, R. C. Perrin and D. K. Bowen, The core structure of $1/2(111)$ screw dislocations in b.c.c. crystals, *Philosophical Magazine*, **21** (1970), pp. 1049–1073. DOI: 10.1080/14786437008238490.
- [89] V. Vitek and M. Yamaguchi, Core structure of nonscrew $1/2(111)$ dislocations on (110) planes in b.c.c. crystals. II. Peierls stress and the effect of an external shear stress on the cores, *Journal of Physics F: Metal Physics*, **3** (1973), pp. 537–542. DOI: 10.1088/0305-4608/3/3/011.
- [90] M. Yamaguchi and V. Vitek, Core structure of nonscrew $1/2(111)$ dislocations on (110) planes in b.c.c. crystals. I. Core structure in an unstressed crystal, *Journal of Physics F: Metal Physics*, **3** (1973), pp. 523–536. DOI: 10.1088/0305-4608/3/3/010.
- [91] D. J. Bacon and J. W. Martin, The atomic structure of dislocations in h.c.p. metals I. Potentials and unstressed crystals, *Philosophical Magazine A*, **43** (1981), pp. 883–900. DOI: 10.1080/01418618108239498.
- [92] H. Mori, H. Kimizuka and S. Ogata, Dislocation Properties and Peierls Stress of BCC Iron Based on Generalized-Stacking-Fault Energy Surface by Using First Principles Cal-

- culations, *Journal of the Japan Institute of Metals*, **73** (2009), pp. 595–600. DOI: 10.2320/jinstmet.73.595.
- [93] M. Lazar and G. A. Maugin, Dislocations in gradient elasticity revisited, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **462** (2006), pp. 3465–3480. DOI: 10.1098/rspa.2006.1699.
- [94] M. Lazar, G. A. Maugin and E. C. Aifantis, Dislocations in second strain gradient elasticity, *International Journal of Solids and Structures*, **43** (2006), pp. 1787–1817. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2005.07.005.
- [95] T. Shimokawa, T. Yamashita, T. Niiyama and N. Tsuji, Grain Subdivision Mechanism Related to Partial Disclinations in Severe Plastic Deformation: A Molecular Dynamics Study, *MATERIALS TRANSACTIONS*, **57** (2016), pp. 1392–1398. DOI: 10.2320/matertrans.MH201518.
- [96] J. Li, Disclination model of high angle grain boundaries, *Surface Science*, **31** (1972), pp. 12–26. DOI: 10.1016/0039-6028(72)90251-8.
- [97] M. Lazar and G. A. Maugin, Nonsingular stress and strain fields of dislocations and disclinations in first strain gradient elasticity, *International Journal of Engineering Science*, **43** (2005), pp. 1157–1184. DOI: 10.1016/j.ijengsci.2005.01.006.

謝辞

本研究は、著者が大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻在学中に、大阪大学大学院基礎工学研究科 垂水 竜一 教授のご指導のもと行ったものであります。熱心なご指導とご支援、ご助言をいただき、材料学、力学、および数学をはじめとした数多くの専門知識をご教示賜りました 垂水 竜一 教授に心より感謝の意を表します。また、本論文の執筆にあたり、大阪大学大学院基礎工学研究科 尾方 成信 教授、後藤 晋 教授、大阪大学工学研究科機械工学専攻 澁谷 陽二 教授にはご丁寧なご助言と激励を賜りました。先生方各位には、本論文のご校閲とご指導を賜りましたことを心よりお礼申し上げます。

本研究の遂行にあたり、大阪大学基礎工学研究科機能創成専攻 中村 暢伴 准教授には、ご多忙の中、懇切なご指導とご助言を賜りましたことを心よりお礼申し上げます。大阪大学サイバーメディアセンター 鈴木 厚 招へい准教授には、大規模数値計算の遂行にあたり、数々のご意見とご助言を賜りましたことを深く感謝いたします。また、数多くの貴重なご意見と激励、研究発表の機会を賜りました先生方に心よりお礼申し上げます。

研究活動を行う中で、多岐にわたる御助力を賜り、快適な研究環境を整えて下さいました 富田 香 菜恵 事務補佐員に深く感謝申し上げます。また、著者の学業活動に高等学校在学時から長年に渡りご支援賜りました 公益財団法人 堀内浩庵会 様に心より感謝申し上げます。そして、著者に学外での幅広い活動の機会を与えて下さいました 株式会社アジルネットワーク 河田 紘一 様、新山 ひとみ 様、熱い激励とご助言を賜りました株式会社 JSOL 岡村 昌浩 様、瀧 宣博 様に心より感謝申し上げます。研究室の卒業生の堀川由人さんには本論文で用いた微分幾何学やその他の数学の基礎知識をご教示下さいました。また研究室の皆様方は関連研究を遂行する上で有意義な議論をしてくださいました。ここに記して感謝申し上げます。

最後に、著者の学業生活を支えて下さいました家族、父 敬二、母 久美子、弟 幸聖、そして入江 星 香さんとそのご家族の皆様方に最深の謝意を表します。

令和2年3月

発表論文リスト

発表論文

- Shunsuke Kobayashi and Ryuichi Tarumi, “Dislocation-Based Modeling and Numerical Analysis of Kink Deformations on the Basis of Linear Elasticity”, *Materials Transactions*, **61** (2020), pp. 862–869.
- Shunsuke Kobayashi and Ryuichi Tarumi, “Weitzenböck 多様体によるらせん転位のモデル化と数値解析”, 日本機械学会論文集, **87** (2021), p.20-00409.

国際会議

- Ryuichi Tarumi, Shunsuke Kobayashi, Atsushi Suzuki and Masao Ogino “Isogeometric analysis for long-time diffusion of solute atoms around lattice defects”, International symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity (October 25th, 2018, The University of Tokyo, Japan).
- Shunsuke Kobayashi, Ryuichi Tarumi, Atsushi Suzuki, Masao Ogino and Yoji Shibutani, “Isogeometric modeling and large-scale computation for stress field around lattice defects”, The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (October 29th, 2018, Osaka International Convention Center, Japan).
- Ryuichi Tarumi Shunsuke Kobayashi and Yoji Shibutani, “Group-theoretical construction for constitutive equation of the first strain gradient elasticity”, The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (November 1st, 2018, Osaka International Convention Center, Japan).
- Shunsuke Kobayashi and Ryuichi Tarumi, “Extended isogeometric analysis for two-dimensional kink deformations” The 4th International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Mille-feuille Structure (December 3th, 2018, Hotel Mielparque Kumamoto, Japan).

国内学術講演会

- 垂水竜一, 小林舜典, 微分幾何学を用いた格子欠陥力学場の表現, 日本機械学会第 31 回計算力学講演会 (2018 年 11 月 24 日 徳島大学 常三島キャンパス)
- 小林舜典, 垂水竜一, 鈴木厚, 荻野正雄, 刃状転位対を用いたキンク変形モデルのアイソジオメトリック解析, 日本機械学会第 31 回計算力学講演会 (2018 年 11 月 24 日 徳島大学 常三島キャンパス)
- 小林舜典, 堀川由人, 垂水竜一, 微分幾何学的に定式化された格子欠陥へのアイソジオメトリック解析, 日本物理学会 第 74 回年次大会 (2019 年 3 月 17 日 九州大学)
- 垂水竜一, 小林舜典連続体力学に基づくキンク変形のモデリングと数値解析日本繊維学会年次大会 (2019 年 6 月 7 日 タワーホール船堀)
- 垂水竜一, 小林舜典, 連続体力学に基づくキンク形成機構の検証へ向けて, 新学術領域研究「ミルフィュー構造の材料科学」夏季研究会 (2019 年 9 月 15 日 淡路島夢舞台国際会議場)
- 丹治大輝, 堀川由人, 小林舜典, 垂水竜一, Riemann 多様体上の弾性論を用いた不均一変形のモデル化と数値解析, 日本機械学会 第 32 回計算力学講演会 (CMD2019) (2019 年 9 月 17 日 東洋大学川越キャンパス)
- 小林舜典, 垂水竜一, 鈴木厚, 荻野正雄, 微分幾何学を用いた転位ループのモデル化と数値解析, 日本機械学会 第 32 回計算力学講演会 (CMD2019) (2019 年 9 月 17 日 東洋大学川越キャンパス)
- 山田翔, 小林舜典, 垂水竜一, 鈴木厚, 荻野正雄, 拡張アイソジオメトリック解析を用いた転位ループのモデル化と数値解析, 日本機械学会 第 32 回計算力学講演会 (CMD2019) (2019 年 9 月 17 日 東洋大学川越キャンパス)
- 垂水竜一, 小林舜典, 格子欠陥の微分幾何学とキンク解析への応用, 日本物理学会 第 75 回年次大会 (2020 年 3 月 16 日, 名古屋大学)
- 垂水竜一, 小林舜典, 微分幾何学による格子欠陥のモデリングと数値解析, 日本金属学会 2020 年春期 (第 166 回) 講演大会 (2020 年 3 月 17 日, 東京工業大学)