

BaTiO₃系強誘電材料マルチスケール数値シミュレータ
クラック(亀裂)機能追加
チュートリアル(Version 2.0)

2015年2月5日
株式会社アドバンストアルゴリズム&システムズ
吾妻広夫

[0]はじめに

この文書は、Phase Field 法を用いたBaTiO₃系強誘電材料マルチスケール数値シミュレータの、追加・実装されたクラック(亀裂)成長シミュレーション機能に関するチュートリアルである。具体的な計算例について、入力ファイルと計算結果を示す。

なお、CD-ROM 中の examples という名前のフォルダ内に、関連するデータ・ファイルがまとめられている。ユーザーは、実際にシミュレーション計算を行う際、これらのファイルを利用すると良い。すなわち、自分が行いたいシミュレーション計算と条件に近い計算例を見つけて、入力ファイルの必要な部分だけ変更すれば、比較的容易にシミュレーションを実行することが可能である。

[1]example01 : 外部一様ひずみを印加した場合の、誘電分極のヒステリシス

外部一様印加ひずみ(externally applied homogeneous strain) $\varepsilon_{ij}^{(a)}$ を加えた場合の、誘電分極のヒステリシスを調べる。外部一様ひずみを以下のように設定する。

$$\varepsilon_{11}^{(a)} = 0.002,$$

$$\varepsilon_{22}^{(a)} = 0.002,$$

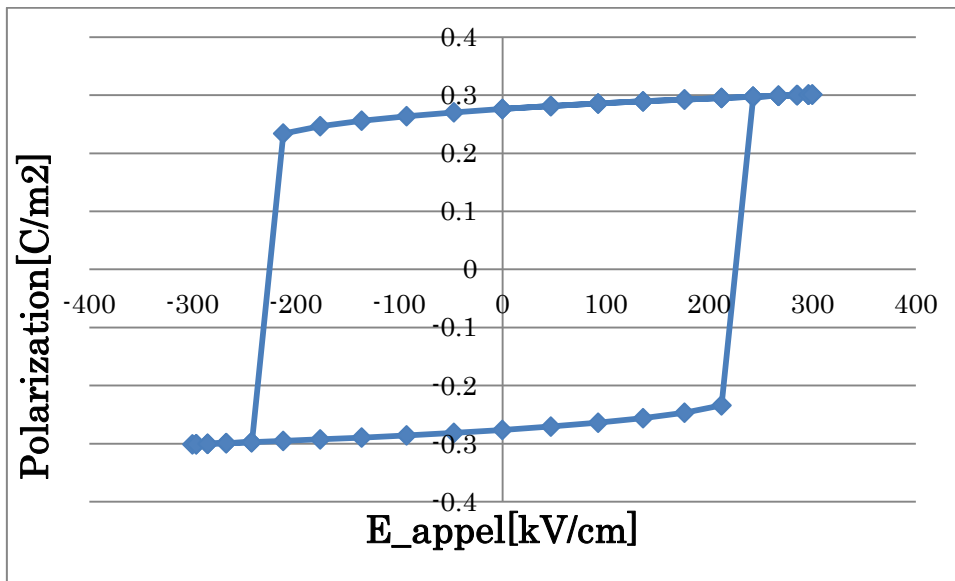
その他の $\varepsilon_{ij}^{(a)}$ 成分は全て0.0とする。なお、初期状態で誘電分極はx軸の正の方向に整列しているとする。

入力ファイル example01.input は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

```
Normalization of polarization (C m^-2) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of alpha_1 (10^5 C^-2 m^2 N) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
alpha_11 (10^7 C^-4 m^6 N) : -20.97
alpha_12 (10^7 C^-4 m^6 N) : 79.74
alpha_111 (10^7 C^-6 m^10 N) : 129.4
alpha_112 (10^7 C^-6 m^10 N) : -195.0
alpha_123 (10^7 C^-6 m^10 N) : -250.0
alpha_1111 (10^8 C^-8 m^14 N) : 386.3
alpha_1112 (10^8 C^-8 m^14 N) : 252.9
G_11 (10^-7 C^-2 m^4 N) : 0.6
C_11 (GPa) : 178.00
C_12 (GPa) : 96.399
C_44 (GPa) : 122.00
Q_11 (C^-2 m^4) : 0.10
Q_12 (C^-2 m^4) : -0.034
Q_44 (C^-2 m^4) : 0.029
kappa (non-dim) : 5000.0
```

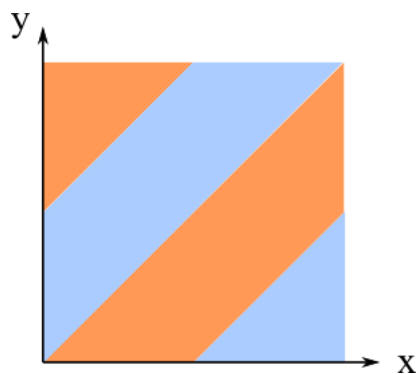
```
volume of unit cell (Ang^3) : 64.3195
polarization by an defect (C m^-2) : 0.515
defect mobility (m^2 s^-1 J^-1) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 32
division number for y direction : 32
division number for z direction : 1
periodic size of x direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of y direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of z direction (10^-6 m) : 3.3
file of grain structure (if exists) :
random seed : 123
Type of initial polarization pattern : single
Maximum size of initial polarization (C m^-2) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^-3) : 0.0
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 250
maximum applied electric field (kV/cm) : 300.0
direction of applied electric field : 1.0 0.0 0.0
number of applied electric field bin (5n+1, recommend) : 51
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 0
prefix of output files : example01
epsilon_11_a (external applied strain, non-dim) : 0.002
epsilon_22_a (external applied strain, non-dim) : 0.002
epsilon_33_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_12_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_23_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_31_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 0
length of crack (non-dim) : 0
K_app^* (non-dim) : 0.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 0
J-integral path x : 0
J-integral path y : 0
J-integral critical value : 0.0
L shape length (non-dim) : 0
```

誘電分極のヒステリシスに関するデータは、出力ファイル `example01_average.csv` に記入されている。このファイルを Excel で開いて、横軸を 'e_appel_norm (kV/cm)'、縦軸を 'polar_average_parallel (C m^-2)' としてグラフを描くと、以下が得られる。



[2]example02 : 初期状態の誘電分極の分布をランダムにして、外部一様ひずみを印加した場合

xy二次元平面上の正方形の格子を仮定する。この格子の上に、下図に示す分極ベクトルの分布パターンを、初期値として与える。



ただし、オレンジ色の領域では、分極ベクトルの初期値を、

$$P_x = \frac{4}{\sqrt{17}} P_0 \cos \theta,$$

$$P_y = \frac{1}{\sqrt{17}} P_0 + \frac{4}{\sqrt{17}} P_0 \sin \theta,$$

また、水色の領域では、分極ベクトルの初期値を、

$$P_x = -\frac{1}{\sqrt{17}} P_0 - \frac{4}{\sqrt{17}} P_0 \cos \theta,$$

$$P_y = -\frac{4}{\sqrt{17}} P_0 \sin \theta,$$

としている。上式で現れる角度変数 θ は、 $0 \leq \theta < 2\pi$ を満たす一様乱数とする。 P_0 は分極ベクトルの絶対値の初期値である。

上の初期条件の下で、外部一様印加ひずみ $\epsilon_{ij}^{(a)}$ を与えて、シミュレーションを実行する。

外部一様ひずみを以下のように設定する。

$$\epsilon_{11}^{(a)} = 0.0005,$$

$$\epsilon_{22}^{(a)} = 0.0005,$$

その他の ϵ_{ij} ^(a)成分は全て0.0とする。シミュレーション実行の際は、外部から電場を印加しないこととする。

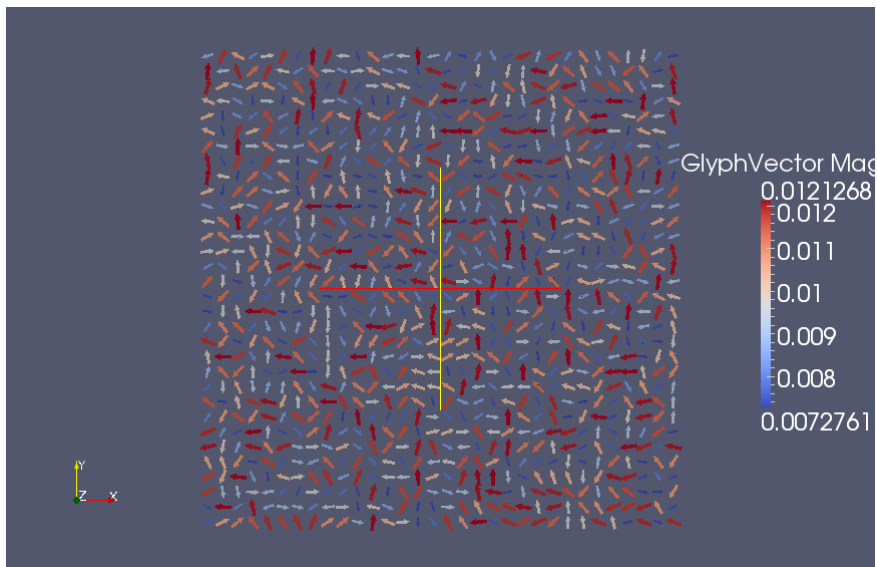
入力ファイル example02.input は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

```
Normalization of polarization (C m^-2) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of alpha_1 (10^5 C^-2 m^2 N) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
alpha_11 (10^7 C^-4 m^6 N) : -20.97
alpha_12 (10^7 C^-4 m^6 N) : 79.74
alpha_111 (10^7 C^-6 m^10 N) : 129.4
alpha_112 (10^7 C^-6 m^10 N) : -195.0
alpha_123 (10^7 C^-6 m^10 N) : -250.0
alpha_1111 (10^8 C^-8 m^14 N) : 386.3
alpha_1112 (10^8 C^-8 m^14 N) : 252.9
G_11 (10^-7 C^-2 m^4 N) : 0.6
C_11 (GPa) : 178.00
C_12 (GPa) : 96.399
C_44 (GPa) : 122.00
Q_11 (C^-2 m^4) : 0.10
Q_12 (C^-2 m^4) : -0.034
Q_44 (C^-2 m^4) : 0.029
kappa (non-dim) : 5000.0
volume of unit cell (Ang^3) : 64.3195
polarization by an defect (C m^-2) : 0.515
defect mobility (m^2 s^-1 J^-1) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 32
division number for y direction : 32
division number for z direction : 1
periodic size of x direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of y direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of z direction (10^-6 m) : 3.3
file of grain structure (if exists) :
random seed : 123
Type of initial polarization pattern : diagonal_rand2d
Maximum size of initial polarization (C m^-2) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^-3) : 0.0
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 2000
maximum applied electric field (kV/cm) : 0.0
direction of applied electric field : 1.0 0.0 0.0
number of applied electric field bin (5n+1, recommend) : 6
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
prefix of output files : example02
epsilon_11_a (external applied strain, non-dim) : 0.0005
epsilon_22_a (external applied strain, non-dim) : 0.0005
epsilon_33_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_12_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
```

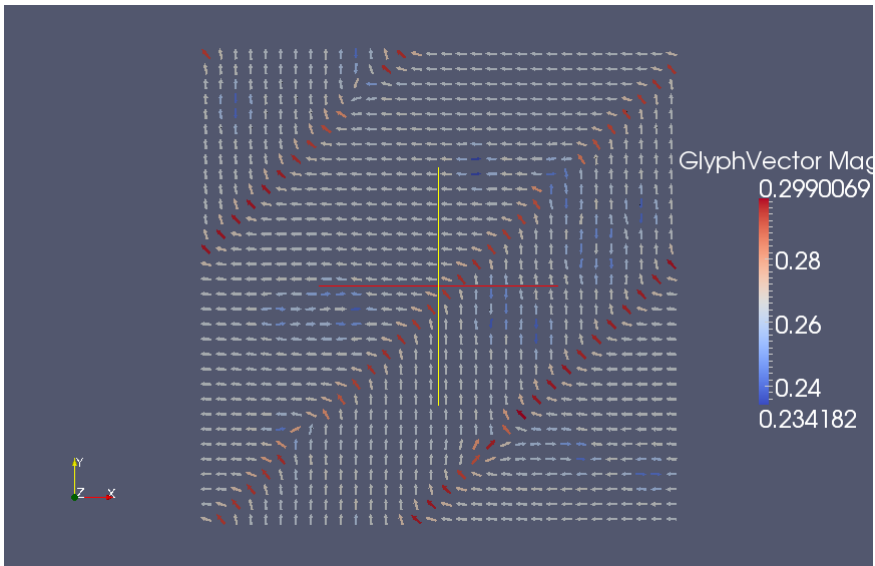
```
epsilon_23_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_31_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 0
length of crack (non-dim) : 0
K_app^* (non-dim) : 0.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 0
J-integral path x : 0
J-integral path y : 0
J-integral critical value : 0.0
L shape length (non-dim) : 0
```

最大 iteration 回数は 2000 としている。外部から印加される電場はゼロとしている。また、applied electric field bin の回数を 6 としている。これにより、シミュレーションでは、2000 回の iteration を 6 回行うことになり、全 iteration 数は 12000 となる。

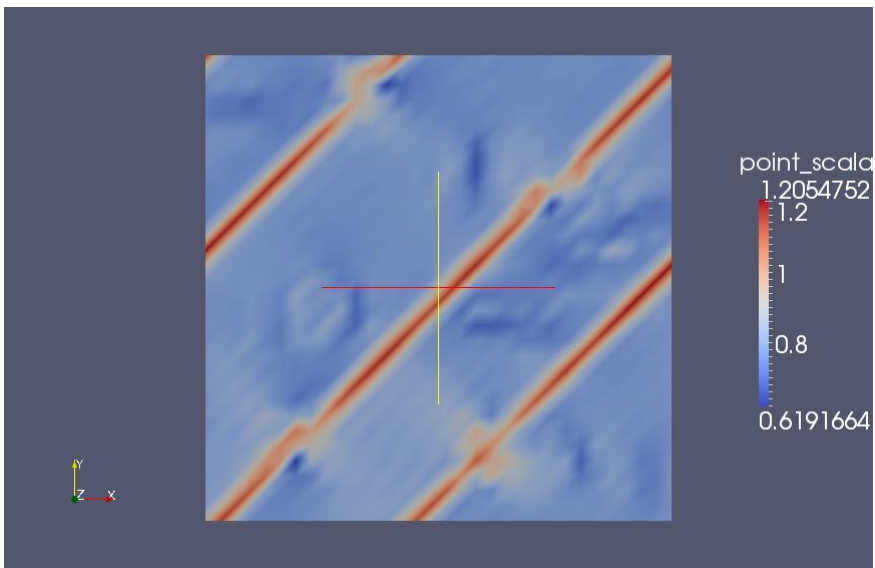
初期状態の誘電分極の分布は、以下のとおりとなる。



終状態の誘電分極の分布は、以下のとおりとなる。



終状態での internal stress tensor ($\sigma_{11}^{\text{int}} + \sigma_{22}^{\text{int}}$)の分布は、以下のとおりとなる。表示されている($\sigma_{11}^{\text{int}} + \sigma_{22}^{\text{int}}$)の単位は[GPa]である。



[3]example03 : 外部一様ひずみを印加し、かつ、酸素格子欠陥を導入した場合の、誘電分極のヒステリシス

32 × 32 × 1格子を考え、酸素格子欠陥を、平均欠陥数密度 0.005[nm⁻³]、最大欠陥数密度 0.01[nm⁻³]で、ランダムに分布させる。格子欠陥の移動度はゼロとしている。また、同時に、外部一様印加ひずみ(externally applied homogeneous strain) $\varepsilon_{ij}^{(a)}$ を加える。外部一様ひずみは以下のように設定する。

$$\varepsilon_{11}^{(a)} = 0.002,$$

$$\varepsilon_{22}^{(a)} = 0.002,$$

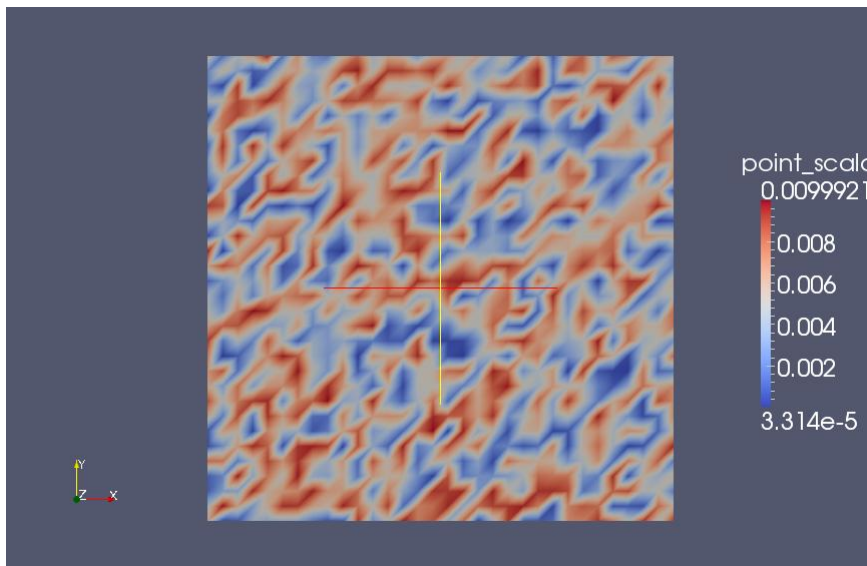
その他の $\varepsilon_{ij}^{(a)}$ 成分は全て0.0とする。さらに、初期状態で誘電分極はx軸の正の方向に整列しているとする。このような条件の下で、誘電分極のヒステリシスを調べる。

入力ファイル example03.input は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

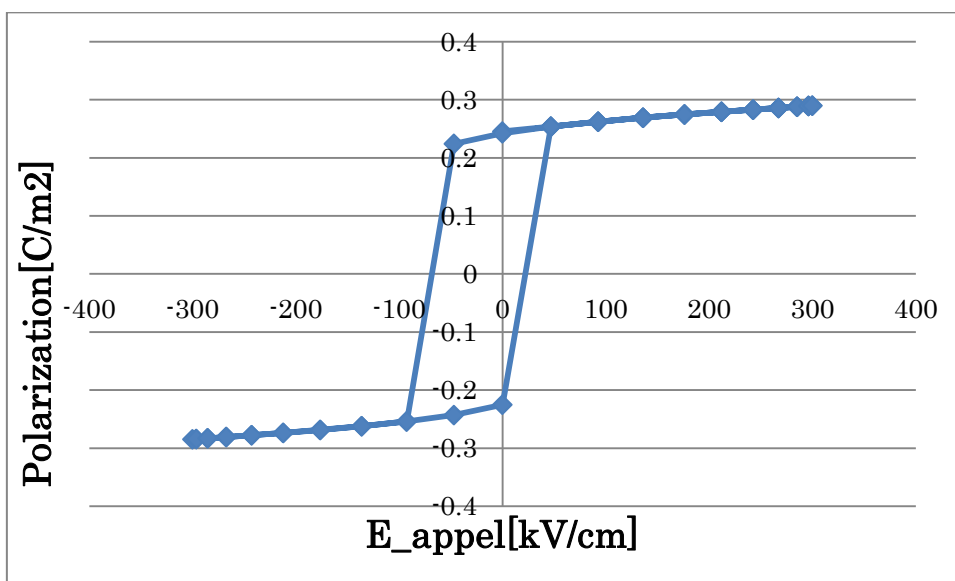
```
Normalization of polarization (C m^-2) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of alpha_1 (10^5 C^-2 m^2 N) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
alpha_11 (10^7 C^-4 m^6 N) : -20.97
alpha_12 (10^7 C^-4 m^6 N) : 79.74
alpha_111 (10^7 C^-6 m^10 N) : 129.4
alpha_112 (10^7 C^-6 m^10 N) : -195.0
alpha_123 (10^7 C^-6 m^10 N) : -250.0
alpha_1111 (10^8 C^-8 m^14 N) : 386.3
alpha_1112 (10^8 C^-8 m^14 N) : 252.9
G_11 (10^-7 C^-2 m^4 N) : 0.6
C_11 (GPa) : 178.00
C_12 (GPa) : 96.399
C_44 (GPa) : 122.00
Q_11 (C^-2 m^4) : 0.10
Q_12 (C^-2 m^4) : -0.034
Q_44 (C^-2 m^4) : 0.029
kappa (non-dim) : 5000.0
volume of unit cell (Ang^3) : 64.3195
polarization by an defect (C m^-2) : 0.515
defect mobility (m^2 s^-1 J^-1) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 32
division number for y direction : 32
division number for z direction : 1
periodic size of x direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of y direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of z direction (10^-6 m) : 3.3
file of grain structure (if exists) :
random seed : 123
Type of initial polarization pattern : single
Maximum size of initial polarization (C m^-2) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^-3) : 0.01
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 750
maximum applied electric field (kV/cm) : 300.0
direction of applied electric field : 1.0 0.0 0.0
number of applied electric field bin (5n+1, recommend) : 51
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 0
prefix of output files : example03
epsilon_11_a (external applied strain, non-dim) : 0.002
epsilon_22_a (external applied strain, non-dim) : 0.002
epsilon_33_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_12_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_23_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_31_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 0
```

```
length of crack (non-dim) : 0
K_app^* (non-dim) : 0.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 0
J-integral path x : 0
J-integral path y : 0
J-integral critical value : 0.0
L shape length (non-dim) : 0
```

初期状態での格子欠陥の分布を以下に示す。

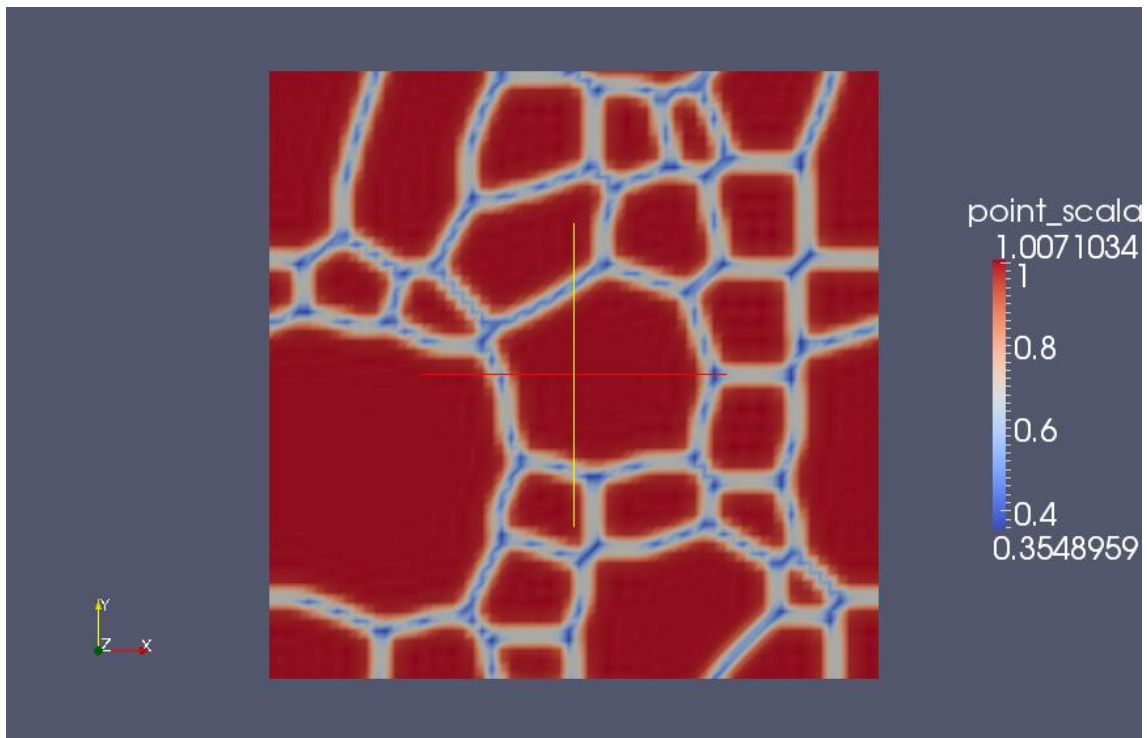


誘電分極のヒステリシスに関するデータは、出力ファイル `example03_average.csv` に記入されている。このファイルを Excel で開いて、横軸を 'e_appel_norm (kV/cm)'、縦軸を 'polar_average_parallel (C m⁻²)' としてグラフを描くと、以下のグラフが得られる。格子欠陥を導入したため、ヒステリシスのグラフは、全体的に、外部印加電場に関して負の方向にシフトしている。



[4]example04 : 多結晶系を導入し、 x 軸方向の外部一定電場、および、外部一様ひずみを印加した場合の、誘電分極分布

$64 \times 64 \times 1$ 格子を考え、以下の図に示される多結晶系を導入する。なお、この多結晶系の構造データは、sample_case1_grain_structure.dat という名前のファイルで与えられている。



x 軸方向に、 $100.0[\text{kV}/\text{cm}]$ の一定電場を外部から印加する。また、同時に、外部一様印加ひずみ(externally applied homogeneous strain) $\varepsilon_{ij}^{(a)}$ を加える。外部一様ひずみは以下のように設定する。

$$\varepsilon_{11}^{(a)} = 0.002,$$

$$\varepsilon_{22}^{(a)} = 0.002,$$

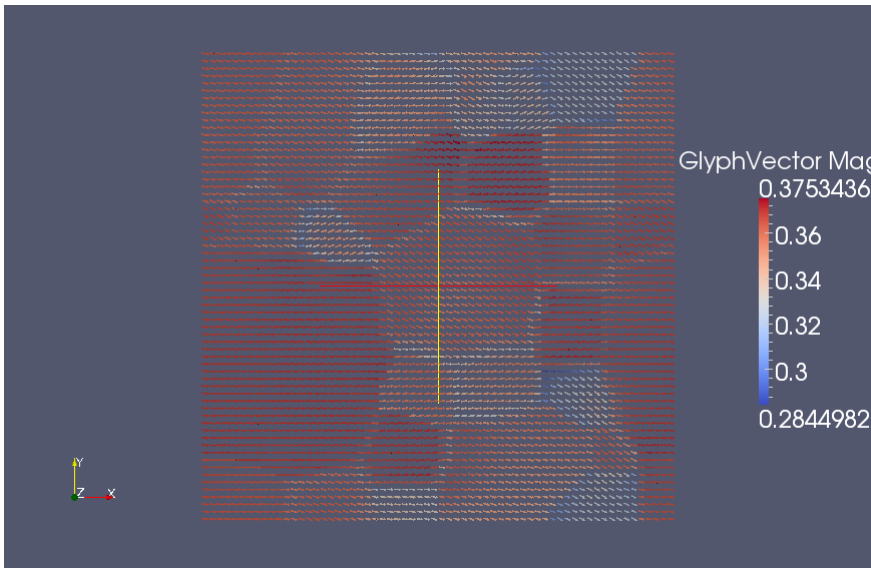
その他の $\varepsilon_{ij}^{(a)}$ 成分は全て0.0とする。さらに、初期状態で誘電分極は x 軸の正の方向に整列しているとする。このような条件の下で、誘電分極の分布を調べる。

入力ファイル example04.input は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

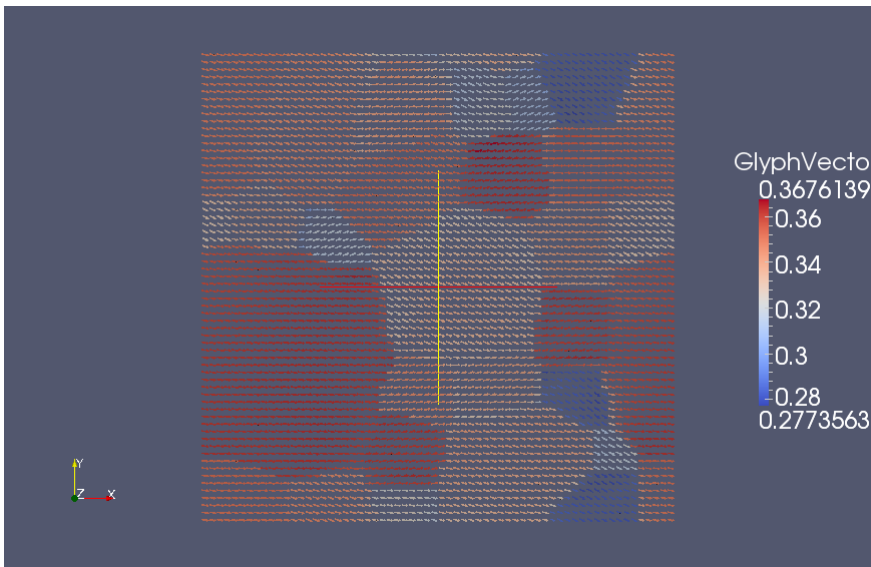
```
Normalization of polarization (C m^-2) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of alpha_1 (10^5 C^-2 m^2 N) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
alpha_11 (10^7 C^-4 m^6 N) : -20.97
alpha_12 (10^7 C^-4 m^6 N) : 79.74
alpha_111 (10^7 C^-6 m^10 N) : 129.4
alpha_112 (10^7 C^-6 m^10 N) : -195.0
alpha_123 (10^7 C^-6 m^10 N) : -250.0
alpha_1111 (10^8 C^-8 m^14 N) : 386.3
```

```
alpha_1112 (10^8 C^-8 m^14 N) : 252.9
G_11 (10^-7 C^-2 m^4 N) : 0.6
C_11 (GPa) : 178.00
C_12 (GPa) : 96.399
C_44 (GPa) : 122.00
Q_11 (C^-2 m^4) : 0.10
Q_12 (C^-2 m^4) : -0.034
Q_44 (C^-2 m^4) : 0.029
kappa (non-dim) : 5000.0
volume of unit cell (Ang^3) : 64.3195
polarization by an defect (C m^-2) : 0.515
defect mobility (m^2 s^-1 J^-1) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 64
division number for y direction : 64
division number for z direction : 1
periodic size of x direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of y direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of z direction (10^-6 m) : 3.3
file of grain structure (if exists) : sample_case1_grain_structure.dat
random seed : 123
Type of initial polarization pattern : single
Maximum size of initial polarization (C m^-2) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^-3) : 0.0
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 1000
maximum applied electric field (kV/cm) : 100.0
direction of applied electric field : 1.0 0.0 0.0
number of applied electric field bin (5n+1, recommend) : 3
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
prefix of output files : example04
epsilon_11_a (external applied strain, non-dim) : 0.002
epsilon_22_a (external applied strain, non-dim) : 0.002
epsilon_33_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_12_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_23_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_31_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 0
length of crack (non-dim) : 0
K_app^* (non-dim) : 0.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 0
J-integral path x : 0
J-integral path y : 0
J-integral critical value : 0.0
L shape length (non-dim) : 0
```

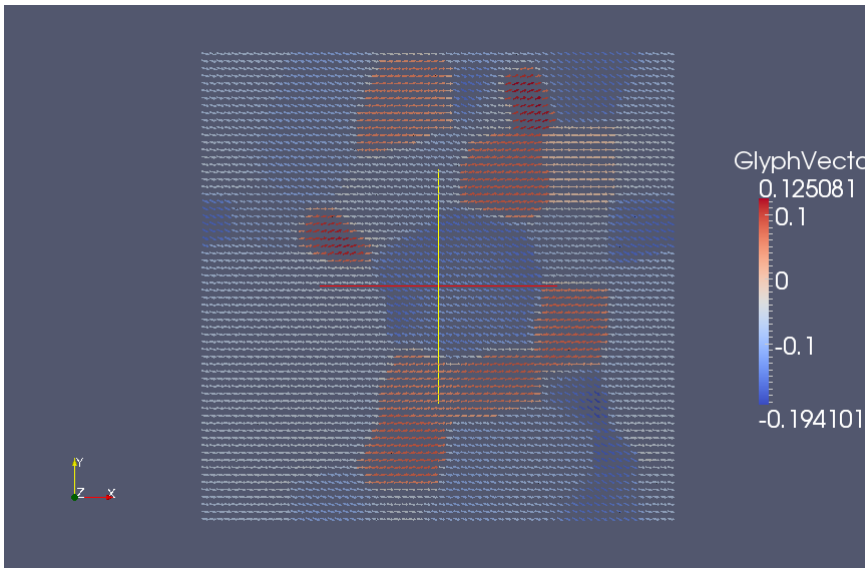
3000 回の iteration 後の誘電分極分布を以下の図に示す。分極ベクトルのノルムの大きさに応じて色分けしている。



誘電分極の分布を、分極ベクトルのx成分の大きさに応じて色分けしたのが以下の図である。

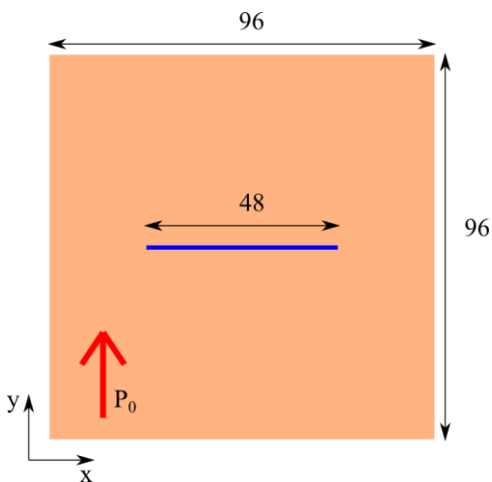


誘電分極の分布を、分極ベクトルのy成分の大きさに応じて色分けしたのが以下の図である。



[5]example05 : 直線状の亀裂(クラック)を仮定し、一様ひずみを負荷せず、 K_{app}^* のみを与えた場合の誘電分極分布

初期時刻において、 y 軸の正の方向に分極を整列させた状態で、 x 軸に平行な亀裂を仮定した場合の、誘電分極の分布を調べる。計算領域は、 96×96 の二次元正方格子として、幅1格子、長さ48格子の亀裂を設定する。



無次元化した定数 $K_{app}^* = 750.0$ を設定する。なお、 K_{app}^* の定義の仕方は、仕様書を参照のこと。また、一様ひずみ $\varepsilon_{ij}^{(a)}$ は印加しない。

入力ファイル example05.input は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

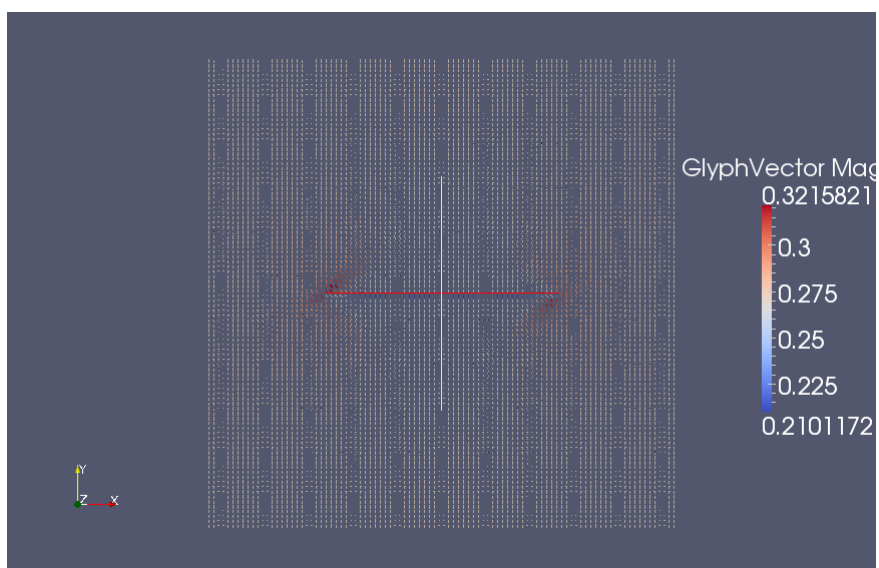
```

Normalization of polarization (C m^-2) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of alpha_1 (10^5 C^-2 m^2 N) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
alpha_11 (10^7 C^-4 m^6 N) : -20.97
alpha_12 (10^7 C^-4 m^6 N) : 79.74

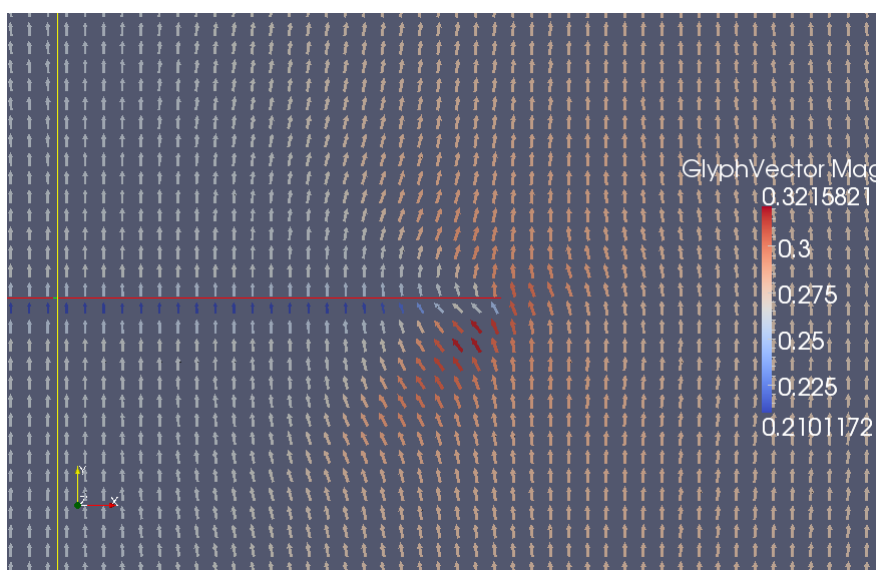
```

alpha_111 ($10^7 \text{ C}^{-6} \text{ m}^{10} \text{ N}$) : 129.4
alpha_112 ($10^7 \text{ C}^{-6} \text{ m}^{10} \text{ N}$) : -195.0
alpha_123 ($10^7 \text{ C}^{-6} \text{ m}^{10} \text{ N}$) : -250.0
alpha_1111 ($10^8 \text{ C}^{-8} \text{ m}^{14} \text{ N}$) : 386.3
alpha_1112 ($10^8 \text{ C}^{-8} \text{ m}^{14} \text{ N}$) : 252.9
G_11 ($10^{-7} \text{ C}^{-2} \text{ m}^4 \text{ N}$) : 0.6
C_11 (GPa) : 178.00
C_12 (GPa) : 96.399
C_44 (GPa) : 122.00
Q_11 ($\text{C}^{-2} \text{ m}^4$) : 0.10
Q_12 ($\text{C}^{-2} \text{ m}^4$) : -0.034
Q_44 ($\text{C}^{-2} \text{ m}^4$) : 0.029
kappa (non-dim) : 5000.0
volume of unit cell (Ang^3) : 64.3195
polarization by an defect (C m^{-2}) : 0.515
defect mobility ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ J}^{-1}$) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 96
division number for y direction : 96
division number for z direction : 1
periodic size of x direction (10^{-6} m) : 3.3
periodic size of y direction (10^{-6} m) : 3.3
periodic size of z direction (10^{-6} m) : 3.3
file of grain structure (if exists) :
random seed : 123
Type of initial polarization pattern : direction_y
Maximum size of initial polarization (C m^{-2}) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^{-3}) : 0.0
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 1000
maximum applied electric field (kV/cm) : 0.0
direction of applied electric field : 1.0 0.0 0.0
number of applied electric field bin ($5n+1$, recommend) : 1
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
prefix of output files : example05
epsilon_11_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_22_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_33_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_12_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_23_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_31_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 1
length of crack (non-dim) : 48
K_app^* (non-dim) : 750.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 0
J-integral path x : 0
J-integral path y : 0
J-integral critical value : 0.0
L shape length (non-dim) : 0

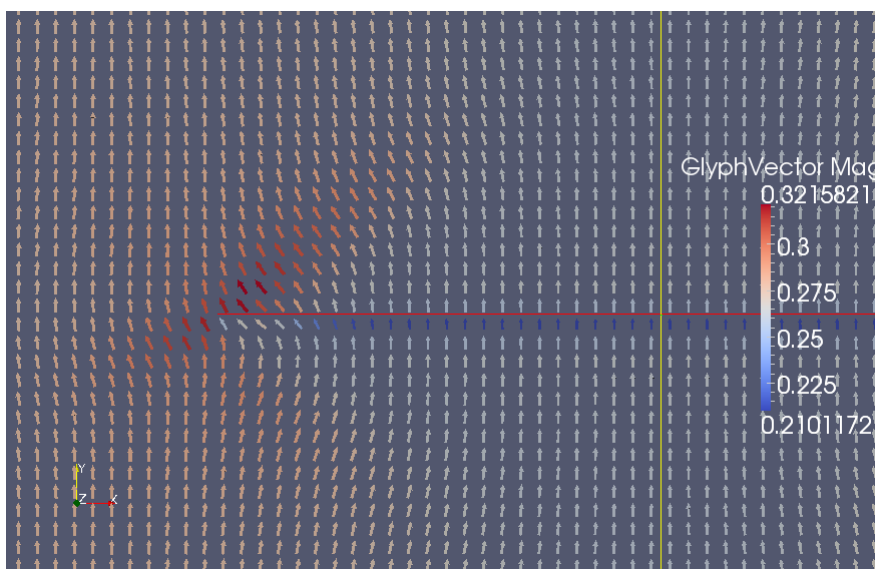
分極分布のシミュレーション結果は以下の図のようになる。



亀裂の右側の端点付近の誘電分極を拡大した図を、以下に示す。



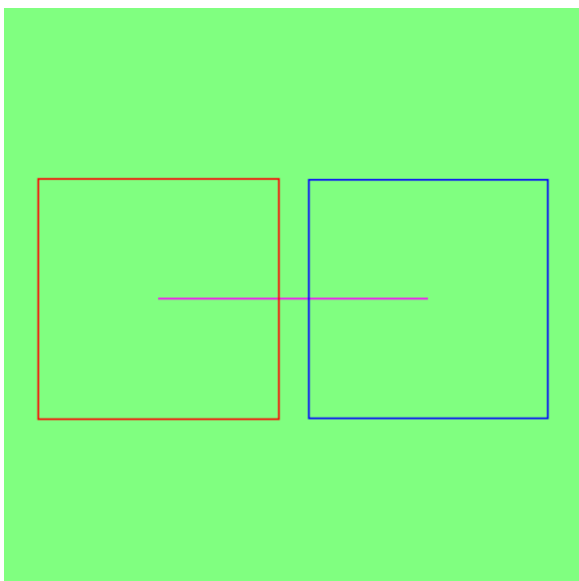
亀裂の左側の端点付近の誘電分極を拡大した図を、以下に示す。



[6]example06 : 直線状の亀裂の成長シミュレーション

計算領域は 136×136 の二次元正方格子として、幅 1 格子、長さ 64 格子の直線状の亀裂を設定する。計算条件としては、一様ひずみを負荷せず、 K_{app}^* のみを与えた場合を考えることとする。時刻 $t = 0$ において、 y 軸の正の方向に分極を整列させた状態で、シミュレーションを開始するものとする。無次元化した定数 $K_{app}^* = 600.0$ を設定する。外部電場は印加しない。亀裂が進行するか否かを判定するための J -integral の臨界値は、 $J_{critical} = 6.0$ と設定する。

J -integral を計算する際の積分路は以下の図のように取る。黄緑色の正方形が、シミュレーション領域全体を表す。紫色の線がクラック、赤色の経路がクラックの左側の端点の周りの積分路、青色の経路がクラックの右側の端点の周りの積分路を表している。

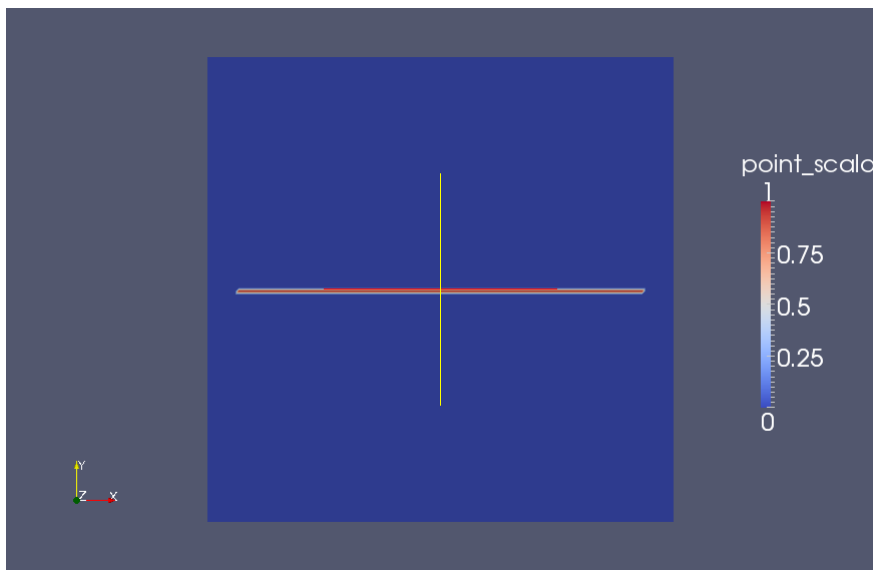


入力ファイル `example06.input` は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

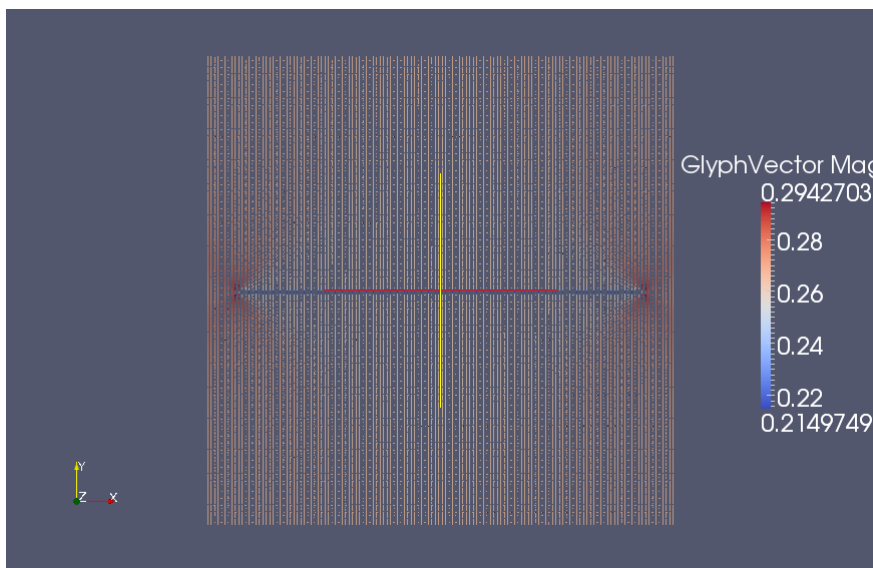
Normalization of polarization ($C\ m^{-2}$) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of α_1 ($10^5\ C^{-2}\ m^2\ N$) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
 α_{11} ($10^7\ C^{-4}\ m^6\ N$) : -20.97
 α_{12} ($10^7\ C^{-4}\ m^6\ N$) : 79.74
 α_{111} ($10^7\ C^{-6}\ m^{10}\ N$) : 129.4
 α_{112} ($10^7\ C^{-6}\ m^{10}\ N$) : -195.0
 α_{123} ($10^7\ C^{-6}\ m^{10}\ N$) : -250.0
 α_{1111} ($10^8\ C^{-8}\ m^{14}\ N$) : 386.3
 α_{1112} ($10^8\ C^{-8}\ m^{14}\ N$) : 252.9
 G_{11} ($10^{-7}\ C^{-2}\ m^4\ N$) : 0.6
 C_{11} (GPa) : 178.00
 C_{12} (GPa) : 96.399
 C_{44} (GPa) : 122.00
 Q_{11} ($C^{-2}\ m^4$) : 0.10
 Q_{12} ($C^{-2}\ m^4$) : -0.034
 Q_{44} ($C^{-2}\ m^4$) : 0.029
 κ (non-dim) : 5000.0
volume of unit cell (\AA^3) : 64.3195
polarization by an defect ($C\ m^{-2}$) : 0.515
defect mobility ($m^2\ s^{-1}\ J^{-1}$) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 136
division number for y direction : 136
division number for z direction : 1
periodic size of x direction ($10^{-6}\ m$) : 3.3
periodic size of y direction ($10^{-6}\ m$) : 3.3
periodic size of z direction ($10^{-6}\ m$) : 3.3
file of grain structure (if exists) :
random seed : 123
Type of initial polarization pattern : direction_y
Maximum size of initial polarization ($C\ m^{-2}$) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^{-3}) : 0.0
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 50
maximum applied electric field (kV/cm) : 0.0
direction of applied electric field : 1.0 0.0 0.0
number of applied electric field bin ($5n+1$, recommend) : 30
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
prefix of output files : example06
 ϵ_{11_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
 ϵ_{22_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
 ϵ_{33_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
 ϵ_{12_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
 ϵ_{23_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
 ϵ_{31_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 1
length of crack (non-dim) : 64

K_{app}^* (non-dim) : 600.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 1
J-integral path x : 28
J-integral path y : 28
J-integral critical value : 6.0
L shape length (non-dim) : 0

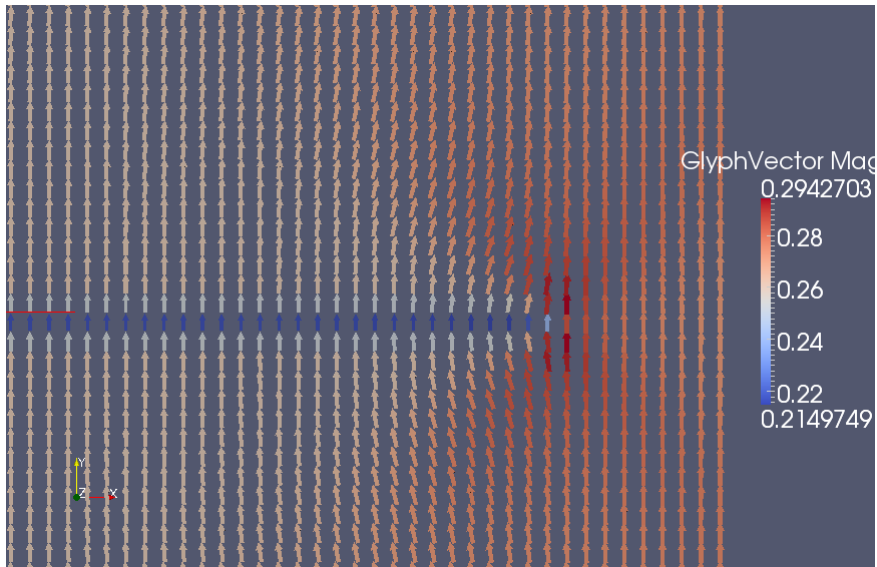
亀裂は最大で 30 ステップだけ成長可能なように設定されているが、28 ステップ目で亀裂は J-integral の積分路と交差し、シミュレーションはストップする。28 ステップ目の成長した亀裂の形状は以下の図のようになる。亀裂は、左右の方向に直線状で 28 ステップだけ進行していることが分かる。



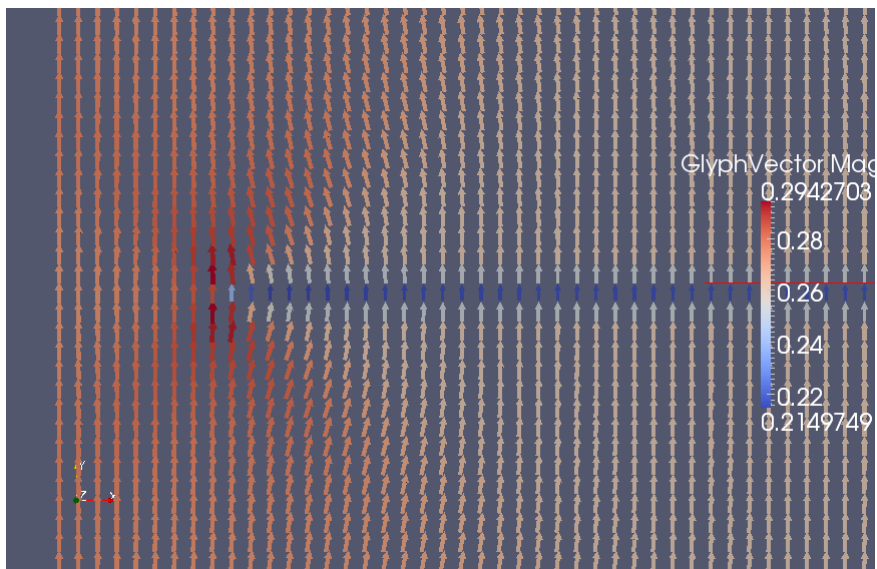
第 28 ステップでの、分極分布のシミュレーション結果を以下に示す。



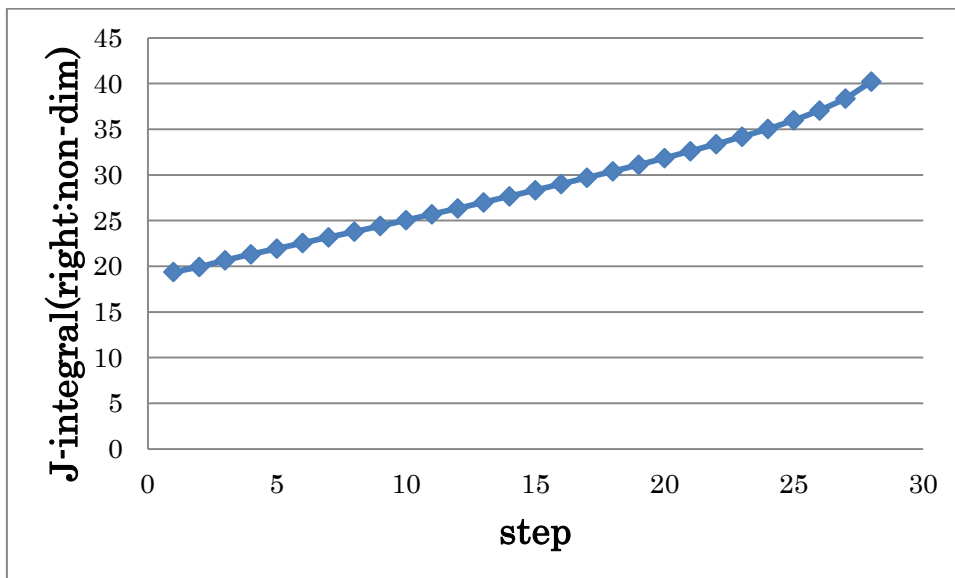
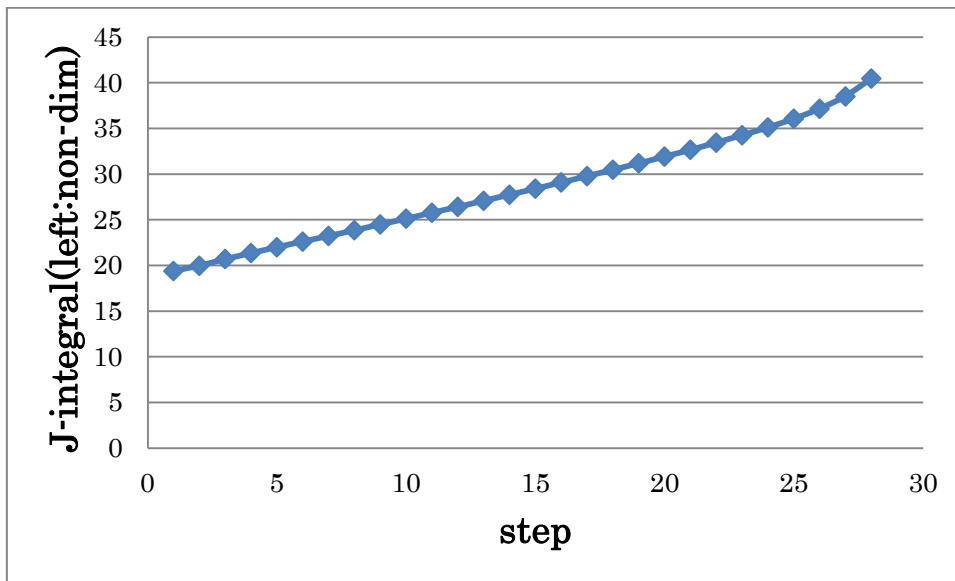
亀裂の右側の端点付近を拡大した図を、以下に示す。



亀裂の左側の端点付近を拡大した図を、以下に示す。

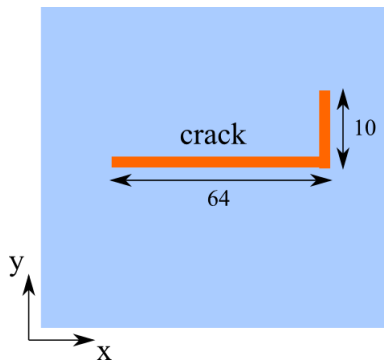


各ステップでのクラックの左右両端の J-integral の値は、example06_average.csv に記入されている。このファイルを Excel で開いて、J-integral の値の変化を以下のグラフに示すことができる。縦軸が J-integral の値、横軸がステップ数を示すとする。

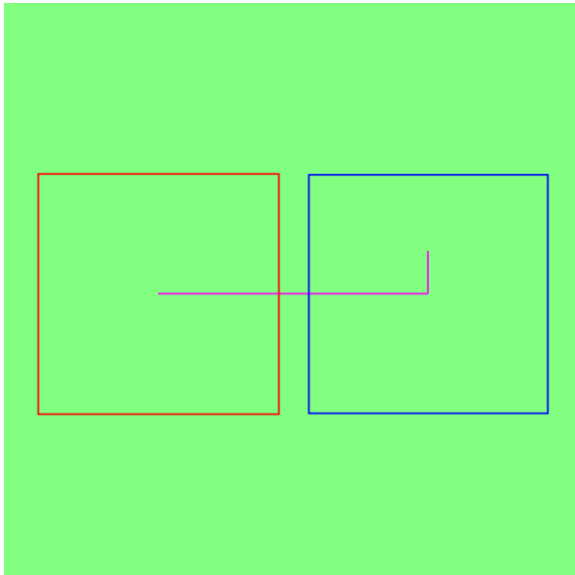


[7]example07 : L字状の亀裂の成長シミュレーション

計算領域は、 136×136 の二次元正方格子として、以下の図に示される幅1格子のL字型亀裂を設定する。計算条件としては、一様ひずみを負荷せず、 K_{app}^* のみを与えた場合を考えることとする。外部からの一定電場は印加しない。時刻 $t = 0$ において、 y 軸の正の方向に分極を整列させた状態で、シミュレーションを開始するものとする。無次元化した定数 $K_{app}^* = 250.0$ を設定する。亀裂が進行するか否かを判定するためのJ-integralの臨界値は、 $J_{critical} = 6.0$ と設定する。



J-integral を計算する際の積分路は以下の図のように取るとする。黄緑色の正方形が、シミュレーション領域全体を表す。紫色の線がクラック、赤色の経路がクラックの左側の端点の周りの積分路、青色の経路がクラックの右側の端点の周りの積分路を表している。



入力ファイル example07.input は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

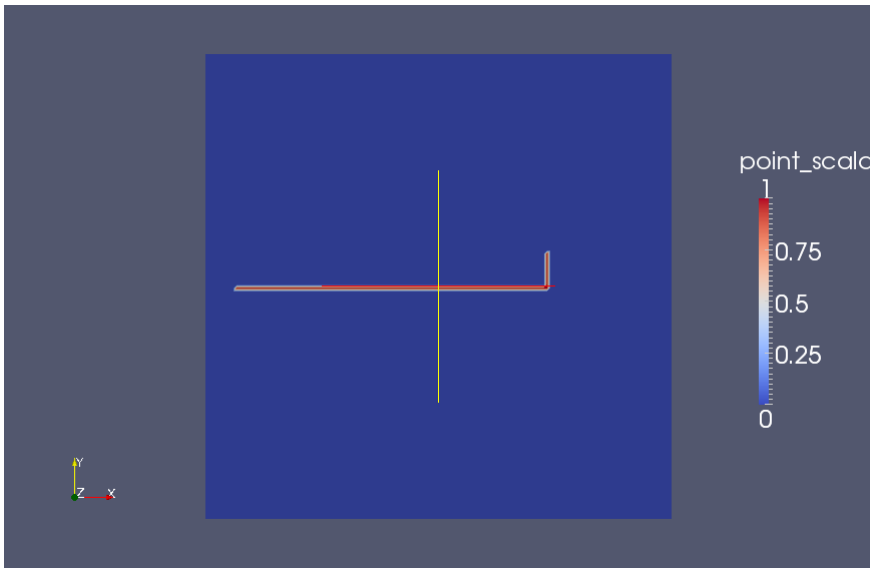
```

Normalization of polarization (C m^-2) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of alpha_1 (10^5 C^-2 m^2 N) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
alpha_11 (10^7 C^-4 m^6 N) : -20.97
alpha_12 (10^7 C^-4 m^6 N) : 79.74
alpha_111 (10^7 C^-6 m^10 N) : 129.4
alpha_112 (10^7 C^-6 m^10 N) : -195.0
alpha_123 (10^7 C^-6 m^10 N) : -250.0
alpha_1111 (10^8 C^-8 m^14 N) : 386.3
alpha_1112 (10^8 C^-8 m^14 N) : 252.9
G_11 (10^-7 C^-2 m^4 N) : 0.6
C_11 (GPa) : 178.00
C_12 (GPa) : 96.399
C_44 (GPa) : 122.00
Q_11 (C^-2 m^4) : 0.10

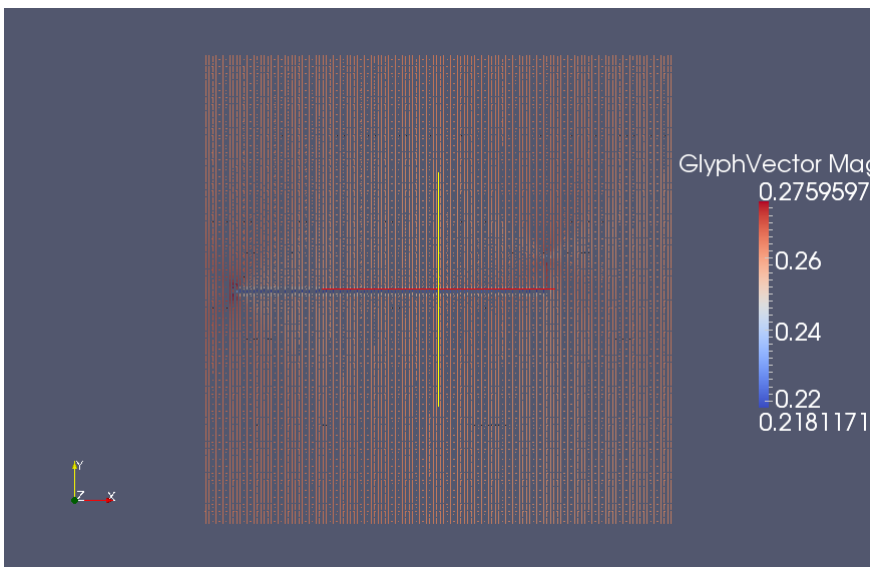
```

Q_12 (C⁻² m⁴) : -0.034
 Q_44 (C⁻² m⁴) : 0.029
 kappa (non-dim) : 5000.0
 volume of unit cell (Ang³) : 64.3195
 polarization by an defect (C m⁻²) : 0.515
 defect mobility (m² s⁻¹ J⁻¹) : 0.e5
 defect valency (non-dim) : 1.0
 division number for x direction : 136
 division number for y direction : 136
 division number for z direction : 1
 periodic size of x direction (10⁻⁶ m) : 3.3
 periodic size of y direction (10⁻⁶ m) : 3.3
 periodic size of z direction (10⁻⁶ m) : 3.3
 file of grain structure (if exists) :
 random seed : 123
 Type of initial polarization pattern : direction_y
 Maximum size of initial polarization (C m⁻²) : 0.01
 Maximum size of initial defect number density (nm⁻³) : 0.0
 time step for polarization (non-dim) : 0.03
 time step for defect number density (non-dim) : 0.10
 maximum number of iteration : 75
 maximum applied electric field (kV/cm) : 0.0
 direction of applied electric field : 1.0 0.0 0.0
 number of applied electric field bin (5n+1, recommend) : 30
 applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
 prefix of output files : example07
 epsilon_11_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
 epsilon_22_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
 epsilon_33_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
 epsilon_12_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
 epsilon_23_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
 epsilon_31_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
 crack simulation flag (off='0', on='1') : 1
 length of crack (non-dim) : 64
 K_app^* (non-dim) : 250.0
 crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 1
 J-integral path x : 28
 J-integral path y : 28
 J-integral critical value : 6.0
 L shape length (non-dim) : 10

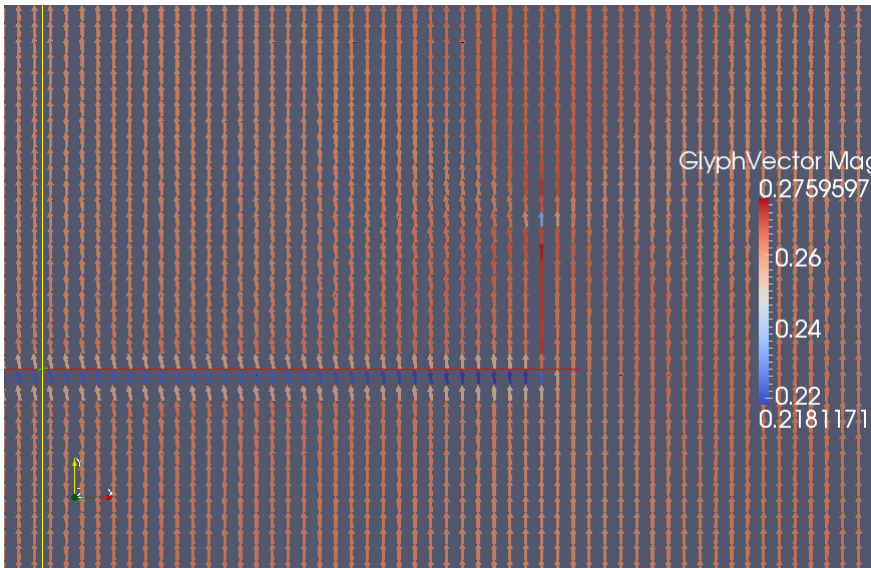
亀裂は最大で 30 ステップだけ成長可能なように設定されているが、28 ステップ目で亀裂の左側の端点は J-integral の積分路に達し、シミュレーションはストップする。28 ステップ目の成長した亀裂の形状は以下の図のようになる。亀裂は、左の方向に直線状で 28 ステップだけ進行していることが分かる。また、亀裂の右側の端点は、全く成長していないことも確認できる。



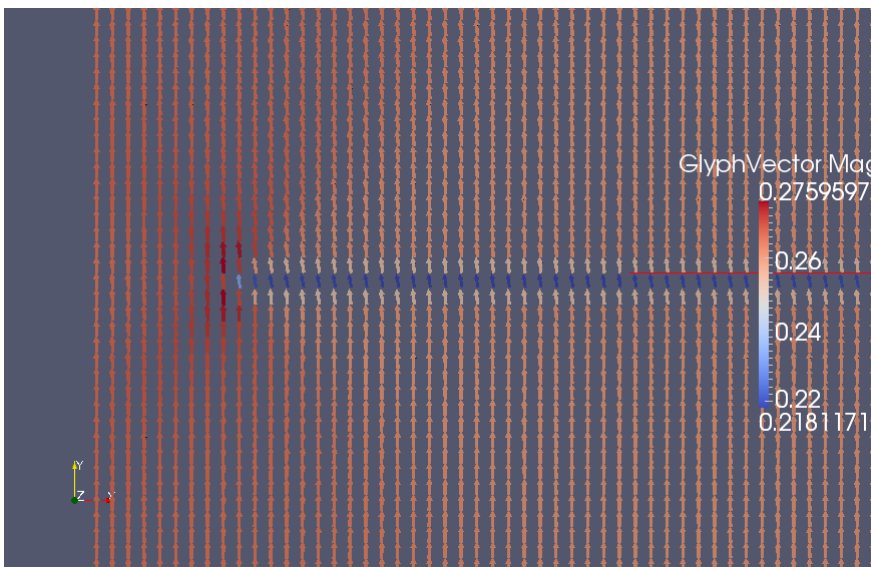
第 28 ステップでの、分極分布のシミュレーション結果を以下に示す。



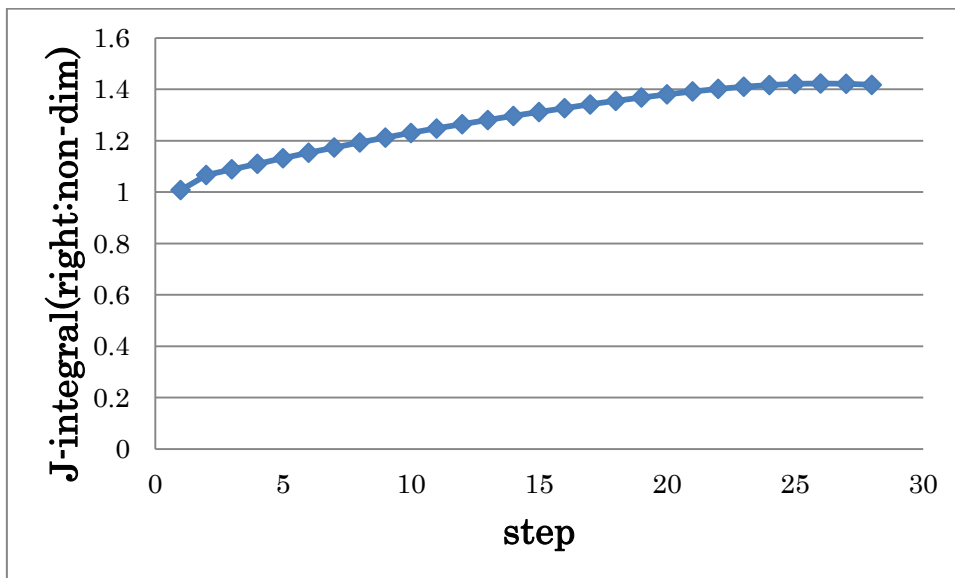
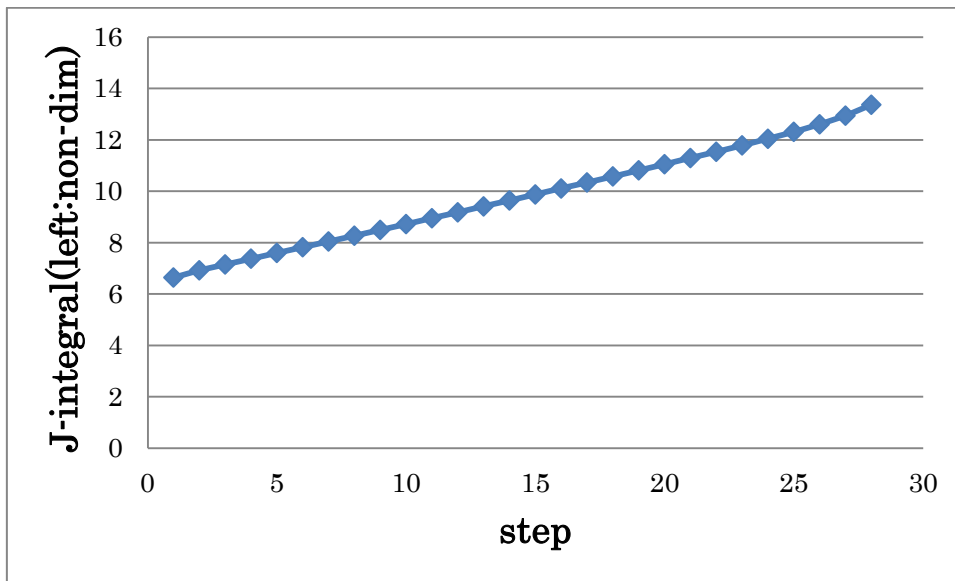
亀裂の右側の端点付近を拡大した図を、以下に示す。



亀裂の左側の端点付近を拡大した図を、以下に示す。



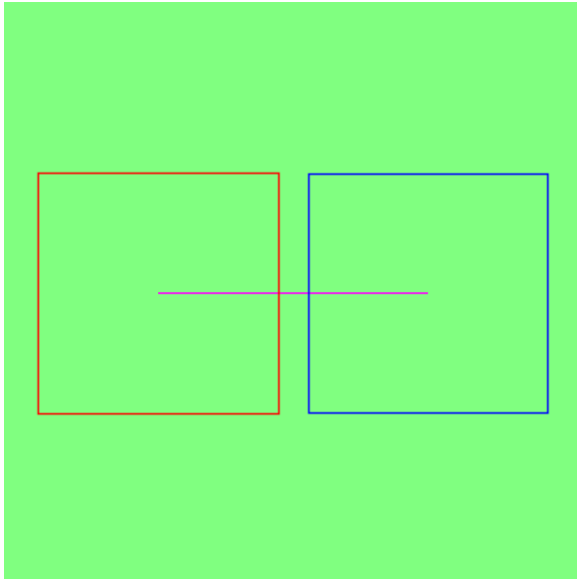
各ステップでのクラックの左右両端の J-integral の値は、example07_average.csv に記入されている。このファイルを Excel で開いて、J-integral の値の変化を以下のグラフに示すことができる。縦軸が J-integral の値、横軸がステップ数を示すとする。



[8]example08 : 外部一定電場がy軸方向に印加された場合の、直線状の亀裂の成長シミュレーション

計算領域は 136×136 の二次元正方格子として、幅 1 格子、長さ 64 格子の直線状の亀裂を設定する。計算条件としては、一様ひずみを負荷せず、 K_{app}^* のみを与えた場合を考えることとする。また、外部一定電場をy軸方向に印加するものとする。時刻 $t = 0$ において、y軸の正の方向に分極を整列させた状態で、シミュレーションを開始するものとする。無次元化した定数 $K_{app}^* = 600.0$ を設定する。外部印加電場は y 軸方向に $200.0[kV/cm]$ とする。亀裂が進行するか否かを判定するための J-integral の臨界値は、 $J_{critical} = 6.0$ と設定する。

J-integral を計算する際の積分路は以下の図のように取るとする。黄緑色の正方形が、シミュレーション領域全体を表す。紫色の線がクラック、赤色の経路がクラックの左側の端点の周りの積分路、青色の経路がクラックの右側の端点の周りの積分路を表している。



入力ファイル example08.input は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

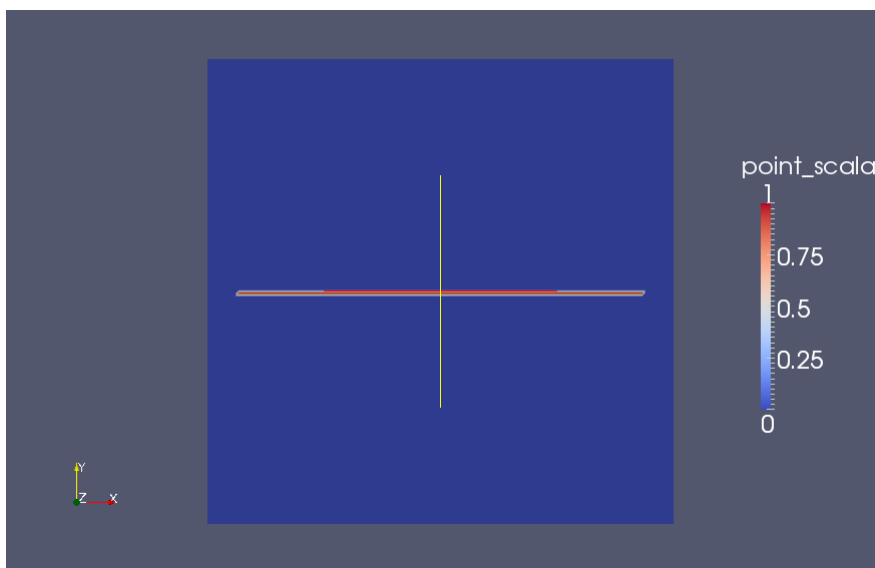
```
Normalization of polarization (C m^-2) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of alpha_1 (10^5 C^-2 m^2 N) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
alpha_11 (10^7 C^-4 m^6 N) : -20.97
alpha_12 (10^7 C^-4 m^6 N) : 79.74
alpha_111 (10^7 C^-6 m^10 N) : 129.4
alpha_112 (10^7 C^-6 m^10 N) : -195.0
alpha_123 (10^7 C^-6 m^10 N) : -250.0
alpha_1111 (10^8 C^-8 m^14 N) : 386.3
alpha_1112 (10^8 C^-8 m^14 N) : 252.9
G_11 (10^-7 C^-2 m^4 N) : 0.6
C_11 (GPa) : 178.00
C_12 (GPa) : 96.399
C_44 (GPa) : 122.00
Q_11 (C^-2 m^4) : 0.10
Q_12 (C^-2 m^4) : -0.034
Q_44 (C^-2 m^4) : 0.029
kappa (non-dim) : 5000.0
volume of unit cell (Ang^3) : 64.3195
polarization by an defect (C m^-2) : 0.515
defect mobility (m^2 s^-1 J^-1) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 136
division number for y direction : 136
division number for z direction : 1
periodic size of x direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of y direction (10^-6 m) : 3.3
periodic size of z direction (10^-6 m) : 3.3
file of grain structure (if exists) :
random seed : 123
```

```

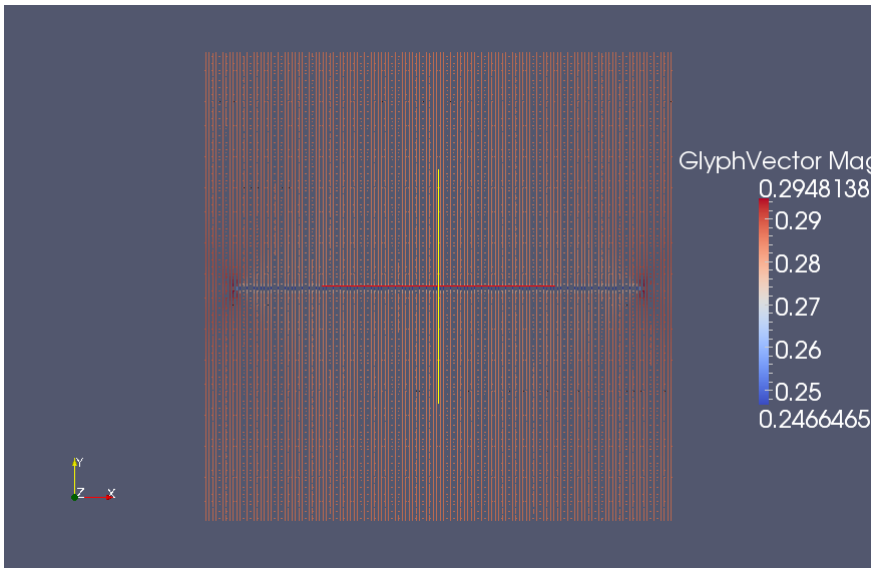
Type of initial polarization pattern : direction_y
Maximum size of initial polarization (C m^-2) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^-3) : 0.0
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 50
maximum applied electric field (kV/cm) : 200.0
direction of applied electric field : 0.0 1.0 0.0
number of applied electric field bin (5n+1, recommend) : 30
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
prefix of output files : example08
epsilon_11_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_22_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_33_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_12_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_23_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_31_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 1
length of crack (non-dim) : 64
K_app^* (non-dim) : 250.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 1
J-integral path x : 28
J-integral path y : 28
J-integral critical value : 6.0
L shape length (non-dim) : 0

```

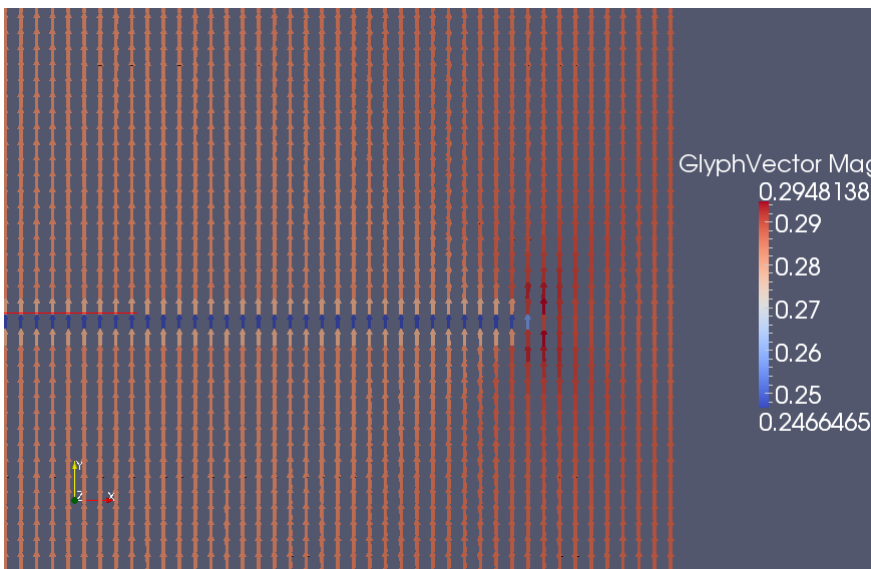
亀裂は最大で 30 ステップだけ成長可能なように設定されているが、28 ステップ目で亀裂は J-integral の積分路と交差し、シミュレーションはストップする。28 ステップ目の成長した亀裂の形状は以下の図のようになる。亀裂は、左右の方向に直線状で 28 ステップだけ進行していることが分かる。



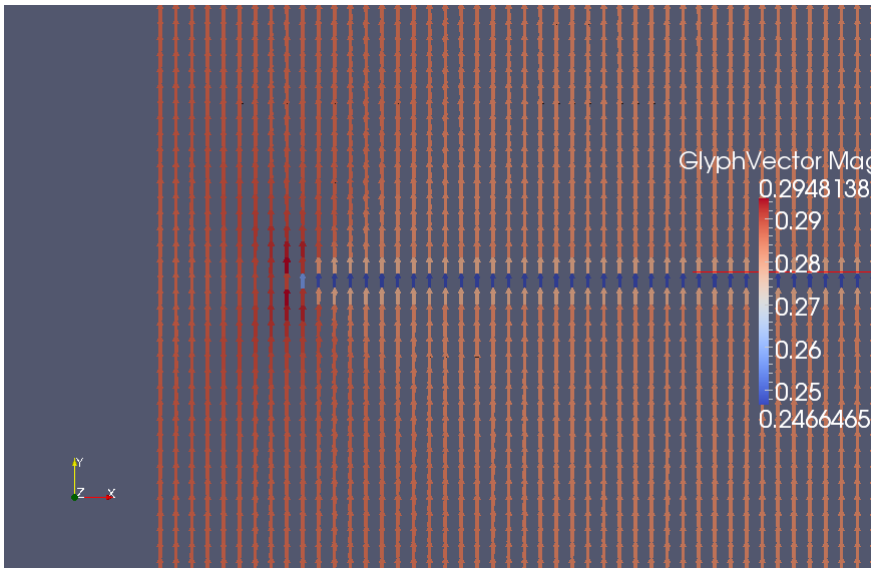
第 28 ステップでの、分極分布のシミュレーション結果を以下に示す。



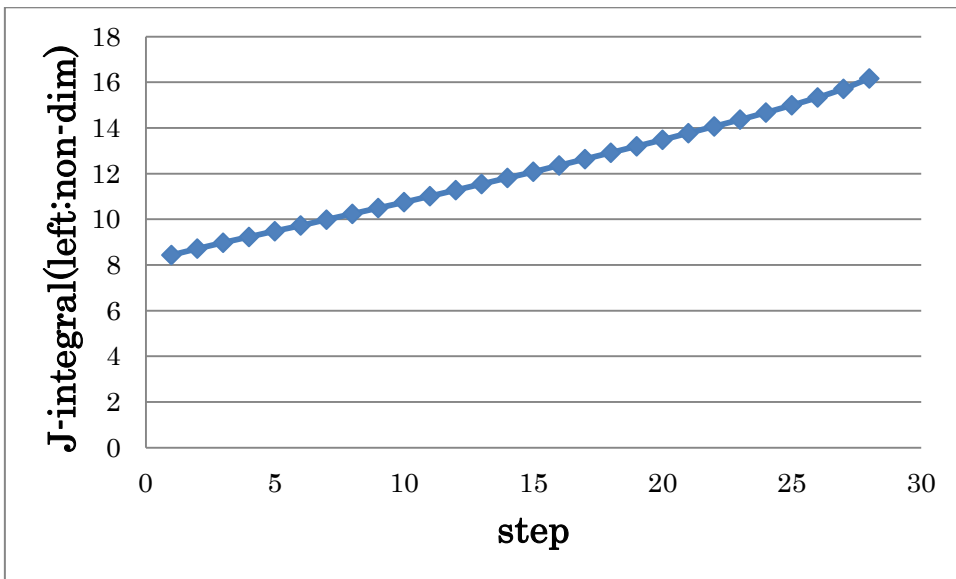
亀裂の右側の端点付近を拡大した図を、以下に示す。

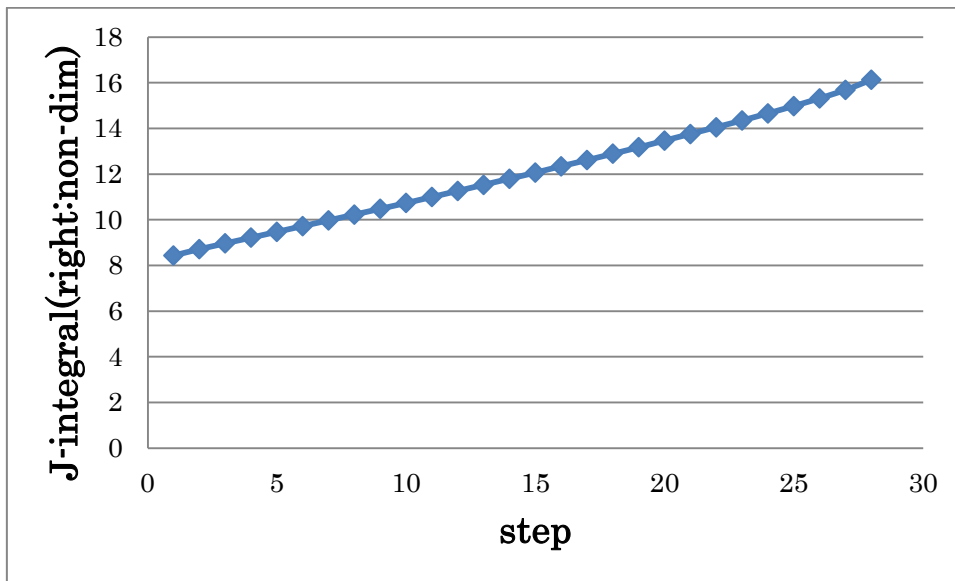


亀裂の左側の端点付近を拡大した図を、以下に示す。



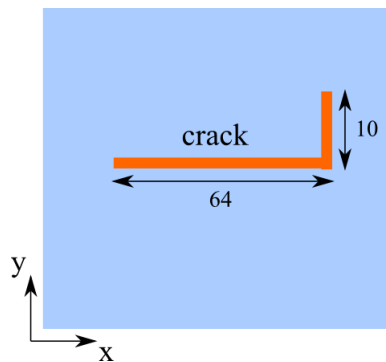
各ステップでのクラックの左右両端の **J-integral** の値は、`example08_average.csv` に記入されている。このファイルを **Excel** で開いて、**J-integral** の値の変化を以下のグラフに示すことができる。縦軸が **J-integral** の値、横軸がステップ数を示すとする。



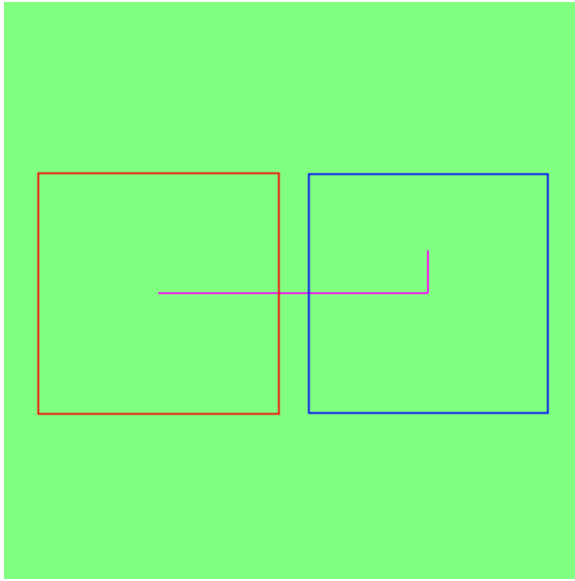


[9]example09 : 酸素欠陥を導入した場合の、L字状の亀裂の成長シミュレーション

計算領域は、 136×136 の二次元正方格子として、以下の図に示される幅 1 格子の L 字型亀裂を設定する。計算条件としては、一様ひずみを負荷せず、 K_{app}^* のみを与えた場合を考えることとする。また、酸素欠陥を導入する。外部からの一定電場は印加しない。時刻 $t = 0$ において、 y 軸の正の方向に分極を整列させた状態で、シミュレーションを開始するものとする。無次元化した定数 $K_{app}^* = 250.0$ を設定する。平均欠陥数密度 $0.005[\text{nm}^{-3}]$ 、最大欠陥数密度 $0.01[\text{nm}^{-3}]$ で、ランダムに欠陥を分布させる。格子欠陥の移動度はゼロとする。亀裂が進行するか否かを判定するための J -integral の臨界値は、 $J_{critical} = 6.0$ と設定する。



J -integral を計算する際の積分路は以下の図のように取る。黄緑色の正方形が、シミュレーション領域全体を表す。紫色の線がクラック、赤色の経路がクラックの左側の端点の周りの積分路、青色の経路がクラックの右側の端点の周りの積分路を表している。

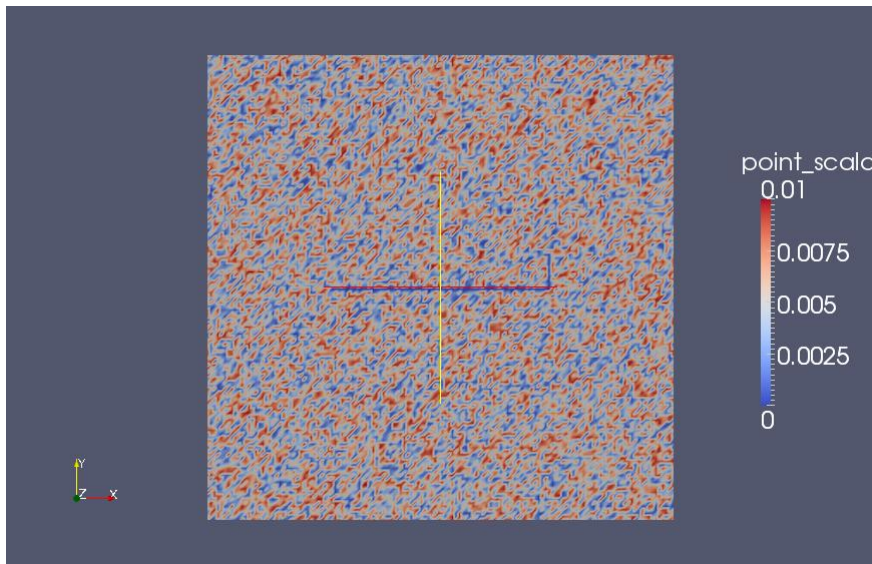


入力ファイル example09.input は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

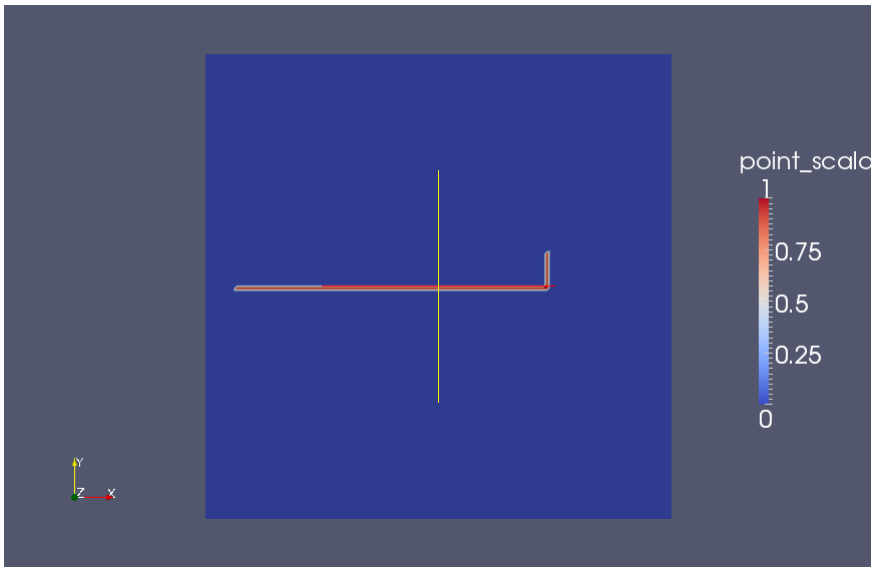
```
Normalization of polarization (C m-2) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of alpha_1 (105 C-2 m2 N) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
alpha_11 (107 C-4 m6 N) : -20.97
alpha_12 (107 C-4 m6 N) : 79.74
alpha_111 (107 C-6 m10 N) : 129.4
alpha_112 (107 C-6 m10 N) : -195.0
alpha_123 (107 C-6 m10 N) : -250.0
alpha_1111 (108 C-8 m14 N) : 386.3
alpha_1112 (108 C-8 m14 N) : 252.9
G_11 (10-7 C-2 m4 N) : 0.6
C_11 (GPa) : 178.00
C_12 (GPa) : 96.399
C_44 (GPa) : 122.00
Q_11 (C-2 m4) : 0.10
Q_12 (C-2 m4) : -0.034
Q_44 (C-2 m4) : 0.029
kappa (non-dim) : 5000.0
volume of unit cell (Ang3) : 64.3195
polarization by an defect (C m-2) : 0.515
defect mobility (m2 s-1 J-1) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 136
division number for y direction : 136
division number for z direction : 1
periodic size of x direction (10-6 m) : 3.3
periodic size of y direction (10-6 m) : 3.3
periodic size of z direction (10-6 m) : 3.3
file of grain structure (if exists) :
random seed : 123
```

```
Type of initial polarization pattern : direction_y
Maximum size of initial polarization (C m^-2) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^-3) : 0.01
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 50
maximum applied electric field (kV/cm) : 0.0
direction of applied electric field : 1.0 0.0 0.0
number of applied electric field bin (5n+1, recommend) : 30
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
prefix of output files : example09
epsilon_11_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_22_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_33_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_12_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_23_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_31_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 1
length of crack (non-dim) : 64
K_app^* (non-dim) : 250.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 1
J-integral path x : 28
J-integral path y : 28
J-integral critical value : 6.0
L shape length (non-dim) : 10
```

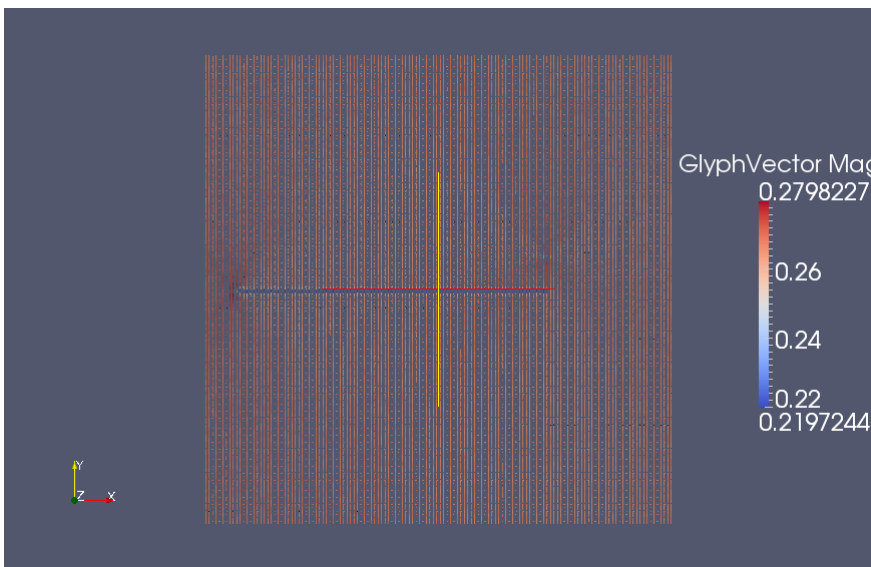
初期状態での、格子欠陥の分布図を示す。



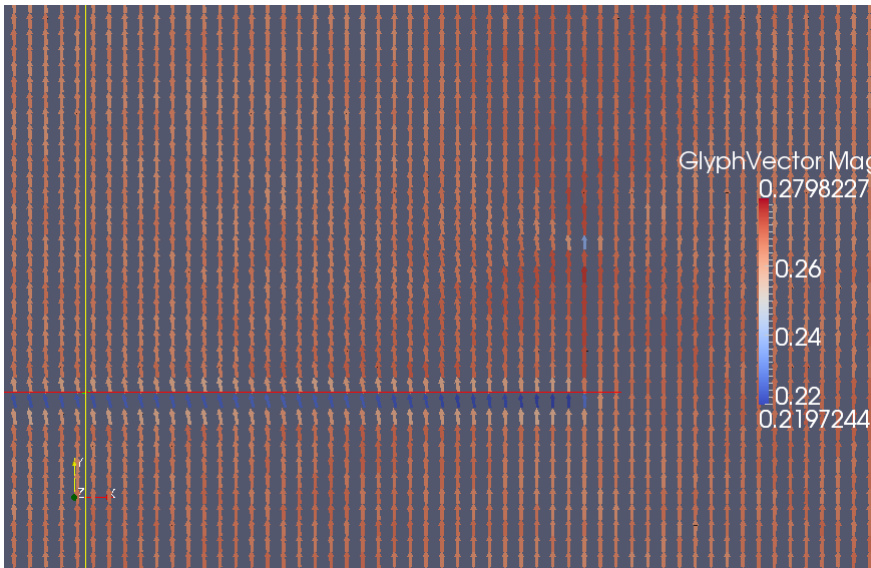
亀裂は最大で 30 ステップだけ成長可能なように設定されているが、28 ステップ目で亀裂の左側の端点は J-integral の積分路に達し、シミュレーションはストップする。28 ステップ目の成長した亀裂の形状は以下の図のようになる。亀裂は、左の方向に直線状で 28 ステップだけ進行していることが分かる。また、亀裂の右側の端点は、全く成長していないことも確認できる。



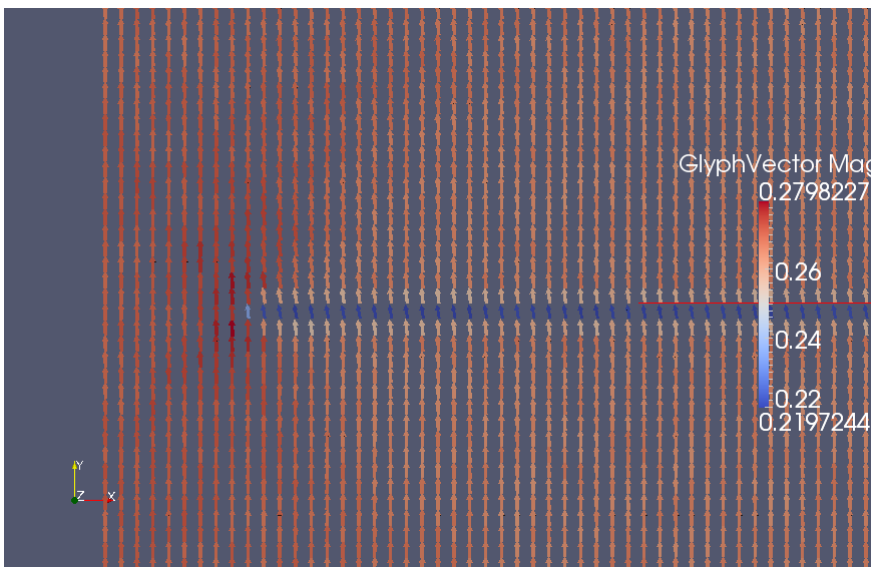
第 28 ステップでの、分極分布のシミュレーション結果を以下に示す。



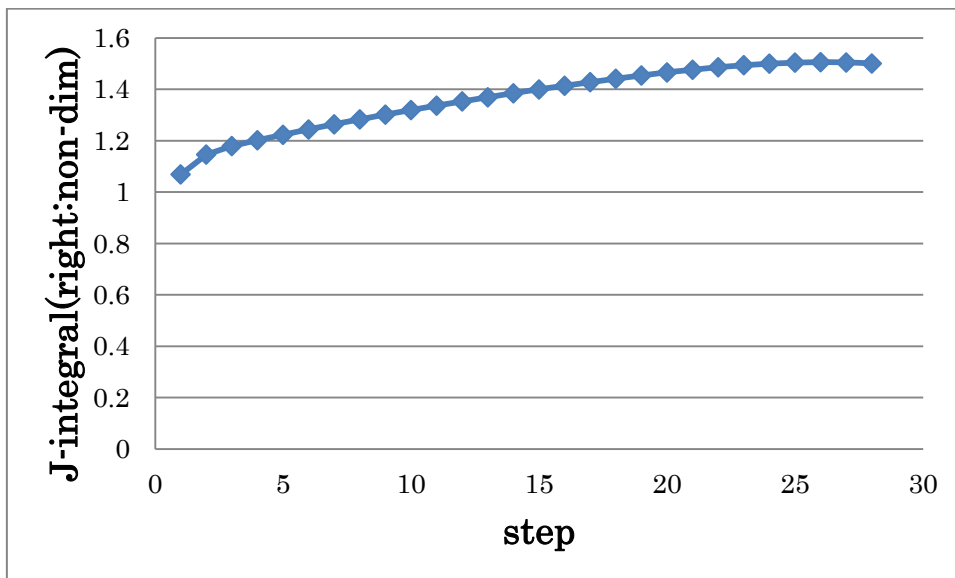
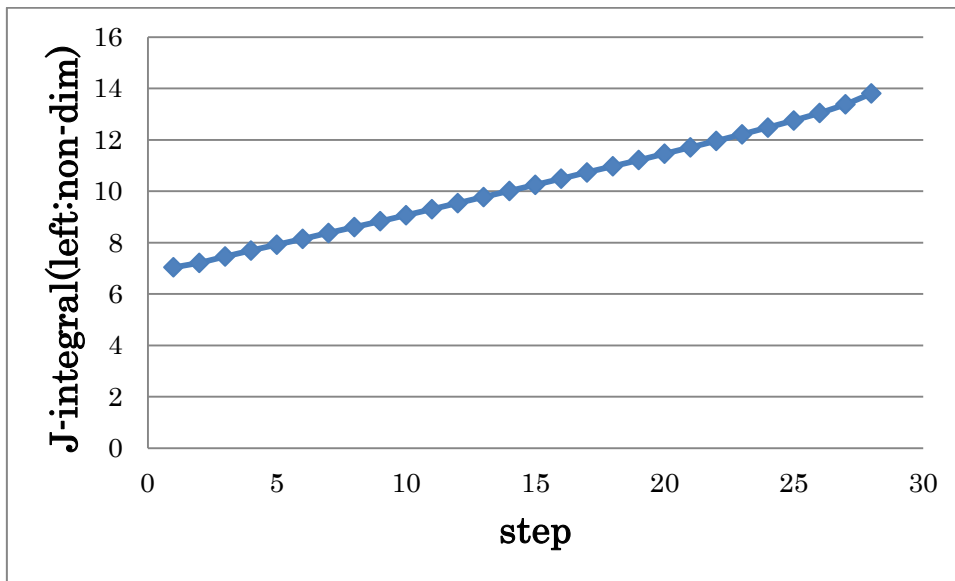
亀裂の右側の端点付近を拡大した図を、以下に示す。



亀裂の左側の端点付近を拡大した図を、以下に示す。

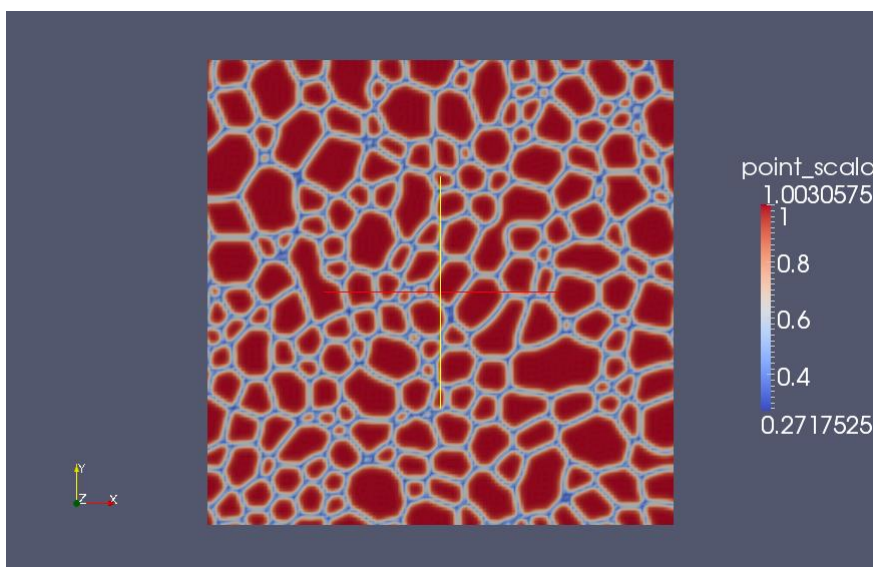


各ステップでのクラックの左右両端の J-integral の値は、example09_average.csv に記入されている。このファイルを Excel で開いて、J-integral の値の変化を以下のグラフに示すことができる。縦軸が J-integral の値、横軸がステップ数を示すとする。



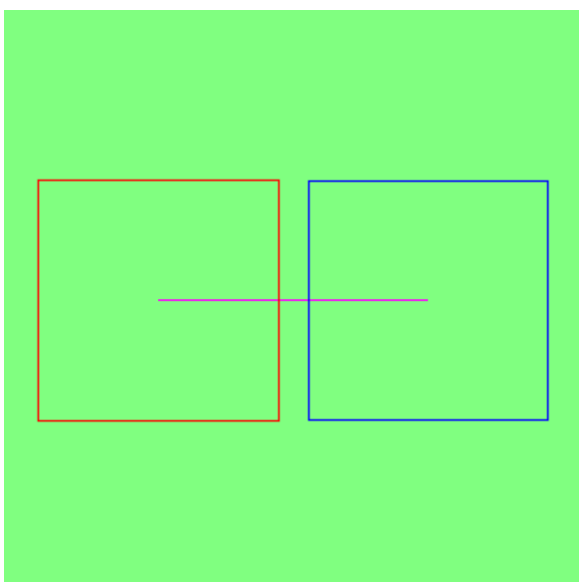
[10]example10 : 多結晶系を導入した場合の、直線状の亀裂成長シミュレーション

136 × 136 × 1格子を考え、以下の多結晶系を導入する。この多結晶系構造は、すでに納入されている結晶粒成長予測シミュレータ `phase_field_grain.exe` によって得ることができる。フォルダ `example10` の中に含まれているフォルダ `case2` 内に、多結晶系構造を得るための入力データ等がまとめられている。



計算領域は、 136×136 の二次元正方格子として、幅 1 格子、長さ 64 格子の直線状の亀裂を設定する。計算条件としては、一様ひずみを負荷せず、 K_{app}^* のみを与えた場合を考えることとする。時刻 $t = 0$ において、 x 軸の正の方向に分極を整列させた状態で、シミュレーションを開始するものとする。

J-integral を計算する際の積分路は以下の図のように取ったとする。無次元化した定数 $K_{app}^* = 250.0$ を設定する。亀裂が進行するか否かを判定するための **J-integral** の臨界値は、 $J_{critical} = 6.0$ と設定する。



入力ファイル `example10.input` は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

```

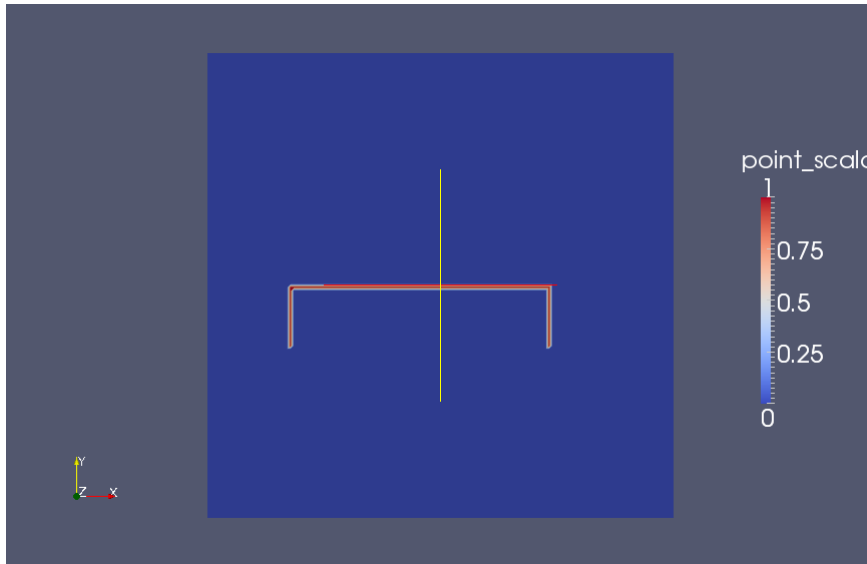
Normalization of polarization (C m-2) : 0.26
system temperature (K) : 300.0
coefficient of alpha_1 (105 C-2 m2 N) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0

```

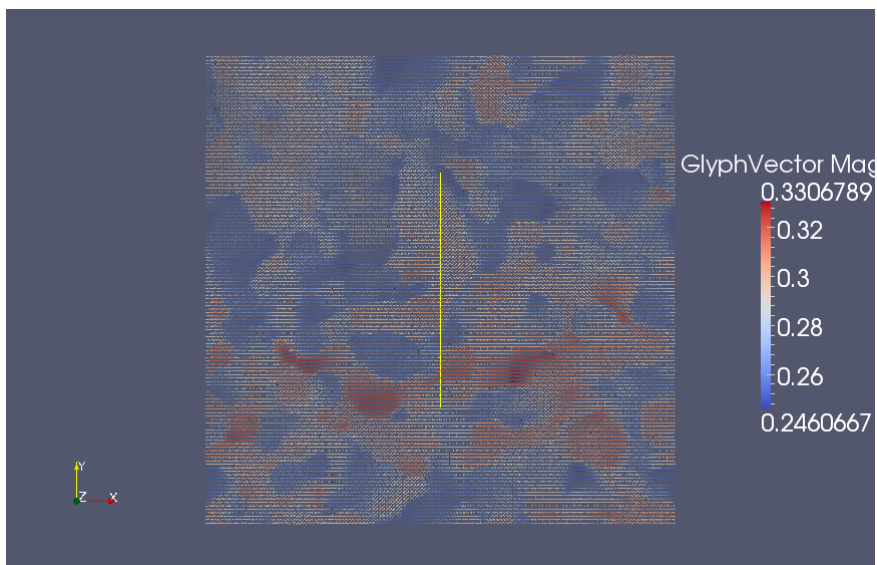
alpha_11 ($10^7 \text{ C}^{-4} \text{ m}^6 \text{ N}$) : -20.97
alpha_12 ($10^7 \text{ C}^{-4} \text{ m}^6 \text{ N}$) : 79.74
alpha_111 ($10^7 \text{ C}^{-6} \text{ m}^{10} \text{ N}$) : 129.4
alpha_112 ($10^7 \text{ C}^{-6} \text{ m}^{10} \text{ N}$) : -195.0
alpha_123 ($10^7 \text{ C}^{-6} \text{ m}^{10} \text{ N}$) : -250.0
alpha_1111 ($10^8 \text{ C}^{-8} \text{ m}^{14} \text{ N}$) : 386.3
alpha_1112 ($10^8 \text{ C}^{-8} \text{ m}^{14} \text{ N}$) : 252.9
G_11 ($10^{-7} \text{ C}^{-2} \text{ m}^4 \text{ N}$) : 0.6
C_11 (GPa) : 178.00
C_12 (GPa) : 96.399
C_44 (GPa) : 122.00
Q_11 ($\text{C}^{-2} \text{ m}^4$) : 0.10
Q_12 ($\text{C}^{-2} \text{ m}^4$) : -0.034
Q_44 ($\text{C}^{-2} \text{ m}^4$) : 0.029
kappa (non-dim) : 5000.0
volume of unit cell (Ang^3) : 64.3195
polarization by an defect (C m^{-2}) : 0.515
defect mobility ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ J}^{-1}$) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 136
division number for y direction : 136
division number for z direction : 1
periodic size of x direction (10^{-6} m) : 3.3
periodic size of y direction (10^{-6} m) : 3.3
periodic size of z direction (10^{-6} m) : 3.3
file of grain structure (if exists) : sample_case2_grain_structure.dat
random seed : 123
Type of initial polarization pattern : single
Maximum size of initial polarization (C m^{-2}) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^{-3}) : 0.0
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 150
maximum applied electric field (kV/cm) : 0.0
direction of applied electric field : 1.0 0.0 0.0
number of applied electric field bin ($5n+1$, recommend) : 30
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
prefix of output files : example10
epsilon_11_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_22_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_33_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_12_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_23_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
epsilon_31_a (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 1
length of crack (non-dim) : 64
K_app^* (non-dim) : 250.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 1
J-integral path x : 28
J-integral path y : 28
J-integral critical value : 1.0

L shape length (non-dim) : 0

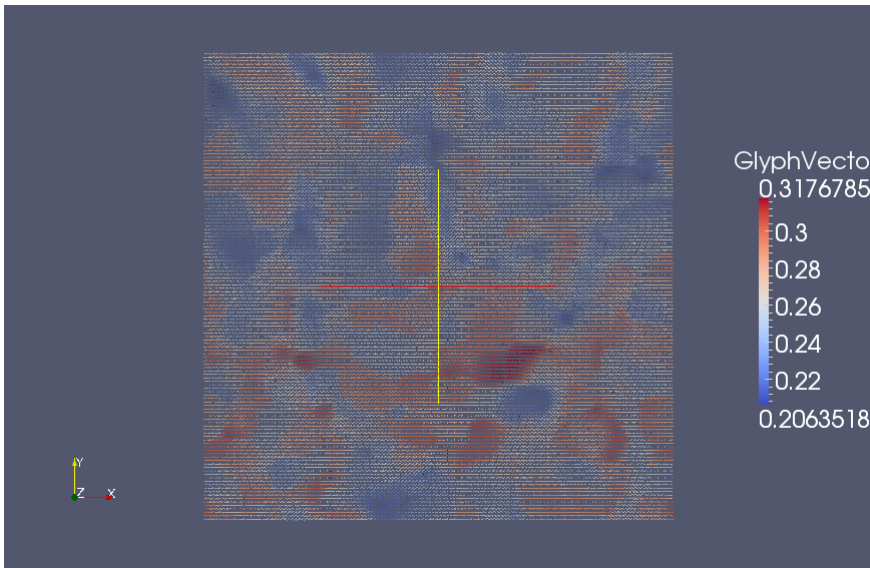
亀裂は最大で 30 ステップだけ成長可能なように設定されている。30 ステップ目の成長した亀裂の形状は以下の図のようになる。亀裂は、右端点は 18 ステップ、左端点は 30 ステップだけ進行していることが分かる。



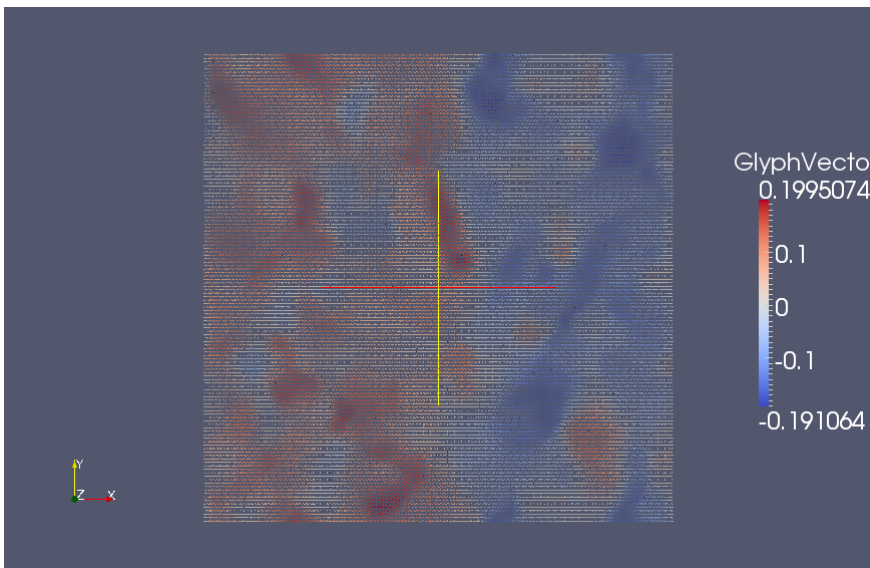
30 ステップ目の誘電分極分布を以下の図に示す。分極ベクトルのノルムの大きさに応じて色分けしている。



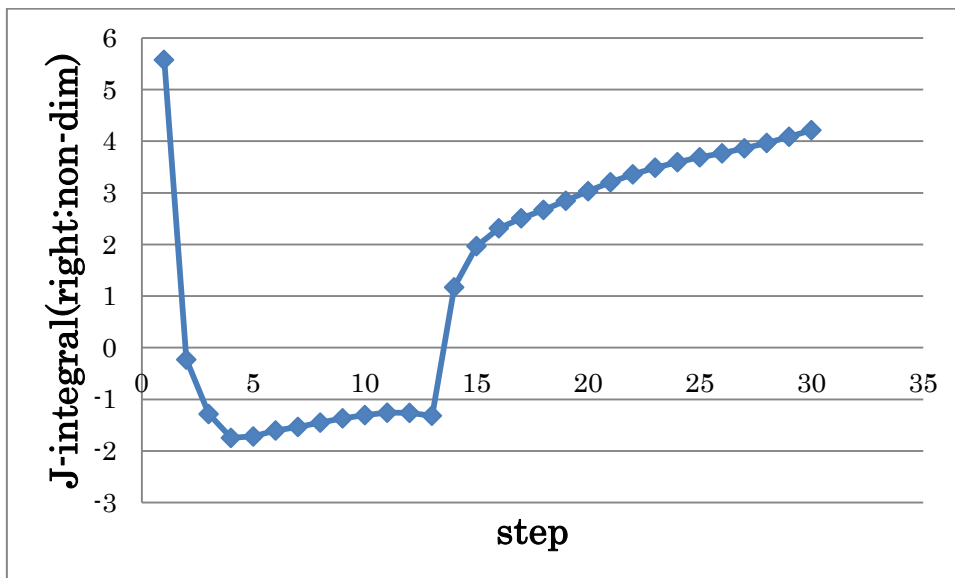
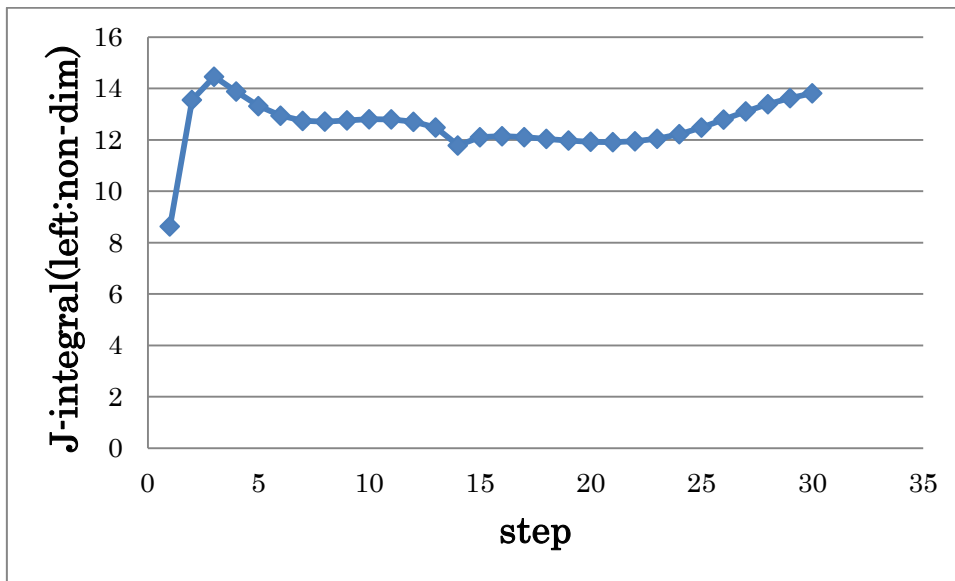
30 ステップ目の誘電分極の分布を、分極ベクトルのx成分の大きさに応じて色分けしたのが以下の図である。



30 ステップ目の誘電分極の分布を、分極ベクトルのy成分の大きさに応じて色分けしたのが以下の図である。

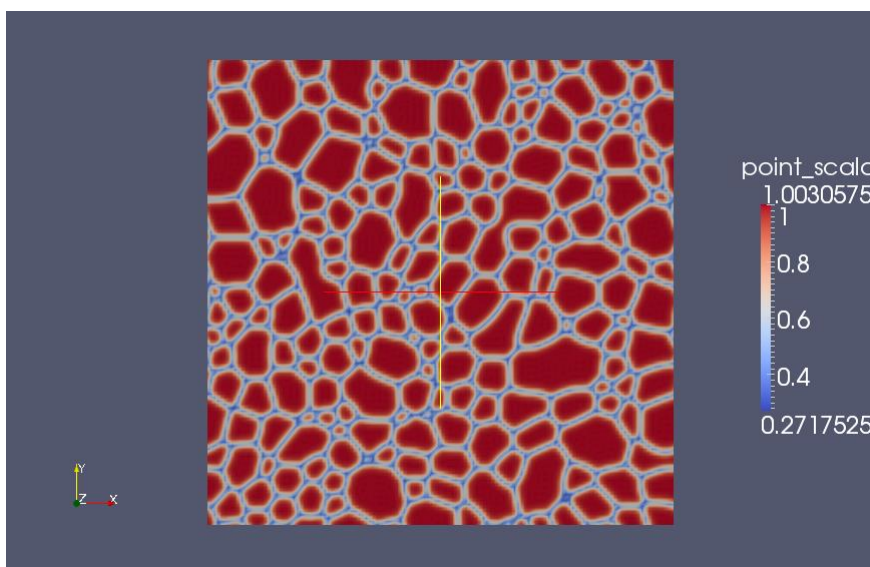


各ステップでのクラックの左右両端の J-integral の値は、example11_average.csv に記入されている。このファイルを Excel で開いて、J-integral の値の変化を以下のグラフに示すことができる。縦軸が J-integral の値、横軸がステップ数を示すとする。



[11]example11 : 多結晶系を導入し、 y 軸方向に外部一様ひずみを加え、かつ、 y 軸方向に外部一定電場を印加した場合の、直線状の亀裂成長シミュレーション

136 × 136 × 1格子を考え、以下の多結晶系を導入する。この多結晶系構造は、すでに納入されている結晶粒成長予測シミュレータ `phase_field_grain.exe` によって得ることができる。フォルダ `example11` の中に含まれているフォルダ `case2` 内に、多結晶系構造を得るための入力データ等がまとめられている。

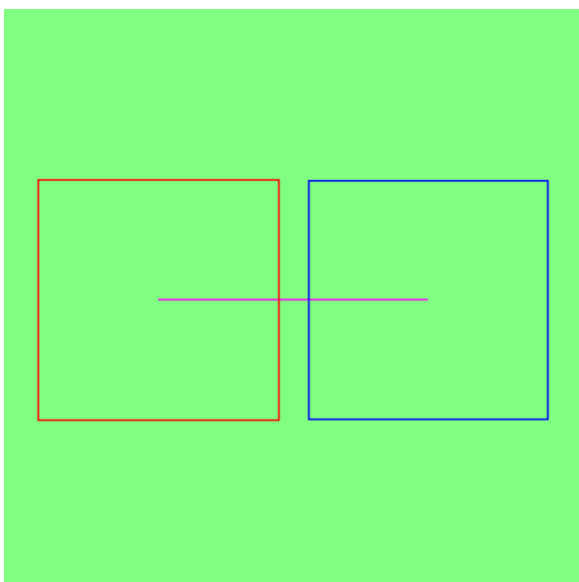


計算領域は、 136×136 の二次元正方格子として、幅 1 格子、長さ 64 格子の直線状の亀裂を設定する。計算条件は、以下のとおりとする。まず、外部一様ひずみを次のように与える。

$$\varepsilon_{22}^{(a)} = 0.002,$$

その他の $\varepsilon_{ij}^{(a)}$ 成分は全て0.0とする。また、 K_{app}^* を与えた場合を考えることとする。さらに、 y 軸の正の方向に $100[\text{kV/cm}]$ の外部電場を印加する。時刻 $t = 0$ において、 x 軸の正の方向に分極を整列させた状態で、シミュレーションを開始するものとする。

J-integral を計算する際の積分路は以下の図のように取ったとする。無次元化した定数 $K_{app}^* = 250.0$ を設定する。亀裂が進行するか否かを判定するための **J-integral** の臨界値は、 $J_{critical} = 6.0$ と設定する。



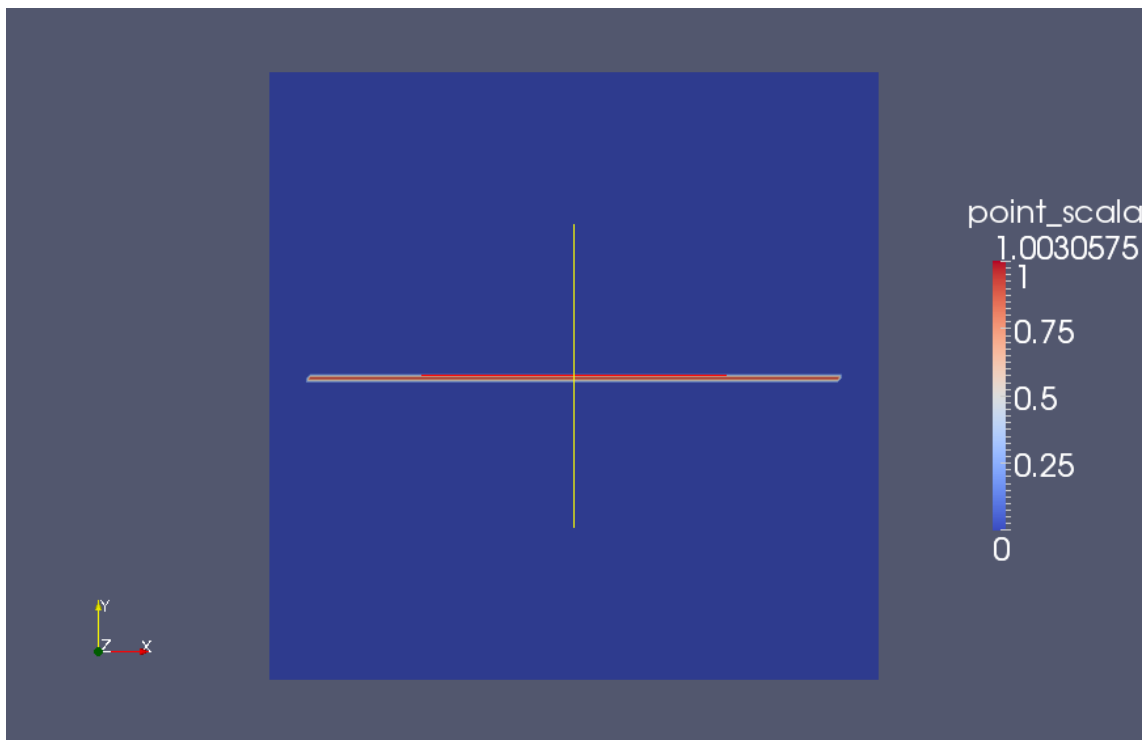
入力ファイル `example11.input` は、以下のように記入する。なお、重要と思われる項目は、赤い文字で示した。

Normalization of polarization (C m ⁻²) : 0.26

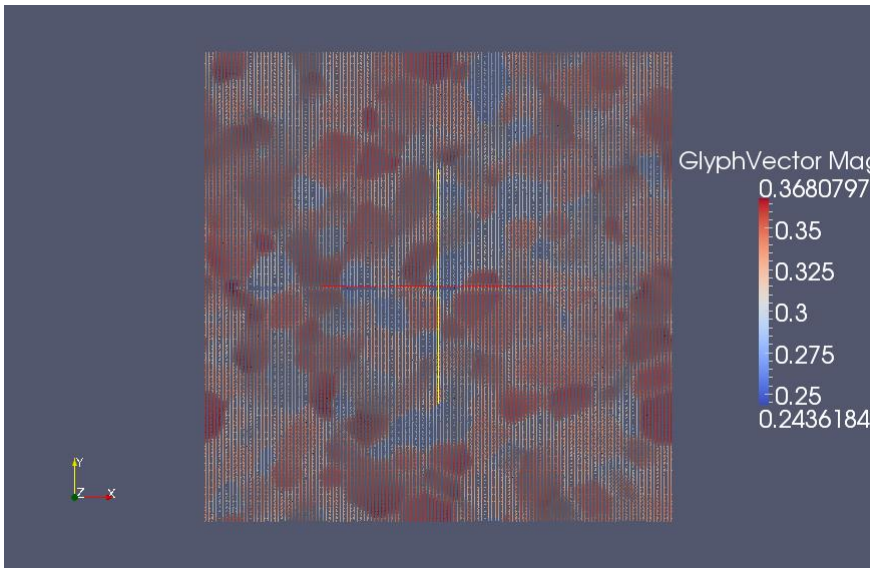
system temperature (K) : 300.0
coefficient of α_1 ($10^5 \text{ C}^{-2} \text{ m}^2 \text{ N}$) : 4.124
Curie temperature (K) : 388.0
 α_{11} ($10^7 \text{ C}^{-4} \text{ m}^6 \text{ N}$) : -20.97
 α_{12} ($10^7 \text{ C}^{-4} \text{ m}^6 \text{ N}$) : 79.74
 α_{111} ($10^7 \text{ C}^{-6} \text{ m}^{10} \text{ N}$) : 129.4
 α_{112} ($10^7 \text{ C}^{-6} \text{ m}^{10} \text{ N}$) : -195.0
 α_{123} ($10^7 \text{ C}^{-6} \text{ m}^{10} \text{ N}$) : -250.0
 α_{1111} ($10^8 \text{ C}^{-8} \text{ m}^{14} \text{ N}$) : 386.3
 α_{1112} ($10^8 \text{ C}^{-8} \text{ m}^{14} \text{ N}$) : 252.9
 G_{11} ($10^{-7} \text{ C}^{-2} \text{ m}^4 \text{ N}$) : 0.6
 C_{11} (GPa) : 178.00
 C_{12} (GPa) : 96.399
 C_{44} (GPa) : 122.00
 Q_{11} ($\text{C}^{-2} \text{ m}^4$) : 0.10
 Q_{12} ($\text{C}^{-2} \text{ m}^4$) : -0.034
 Q_{44} ($\text{C}^{-2} \text{ m}^4$) : 0.029
 κ (non-dim) : 5000.0
volume of unit cell (Ang^3) : 64.3195
polarization by an defect (C m^{-2}) : 0.515
defect mobility ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ J}^{-1}$) : 0.e5
defect valency (non-dim) : 1.0
division number for x direction : 136
division number for y direction : 136
division number for z direction : 1
periodic size of x direction (10^{-6} m) : 3.3
periodic size of y direction (10^{-6} m) : 3.3
periodic size of z direction (10^{-6} m) : 3.3
file of grain structure (if exists) : sample_case2_grain_structure.dat
random seed : 123
Type of initial polarization pattern : single
Maximum size of initial polarization (C m^{-2}) : 0.01
Maximum size of initial defect number density (nm^{-3}) : 0.0
time step for polarization (non-dim) : 0.03
time step for defect number density (non-dim) : 0.10
maximum number of iteration : 100
maximum applied electric field (kV/cm) : 100.0
direction of applied electric field : 0.0 1.0 0.0
number of applied electric field bin (5n+1, recommend) : 30
applied electric field flag (variable='0', constant='1') : 1
prefix of output files : example11
 ϵ_{11_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
 ϵ_{22_a} (external applied strain, non-dim) : 0.002
 ϵ_{33_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
 ϵ_{12_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
 ϵ_{23_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
 ϵ_{31_a} (external applied strain, non-dim) : 0.0
crack simulation flag (off='0', on='1') : 1
length of crack (non-dim) : 64
 K_{app}^* (non-dim) : 250.0
crack evolution simulation flag (off='0', on='1') : 1

J-integral path x : 28
J-integral path y : 28
J-integral critical value : 6.0
L shape length (non-dim) : 0

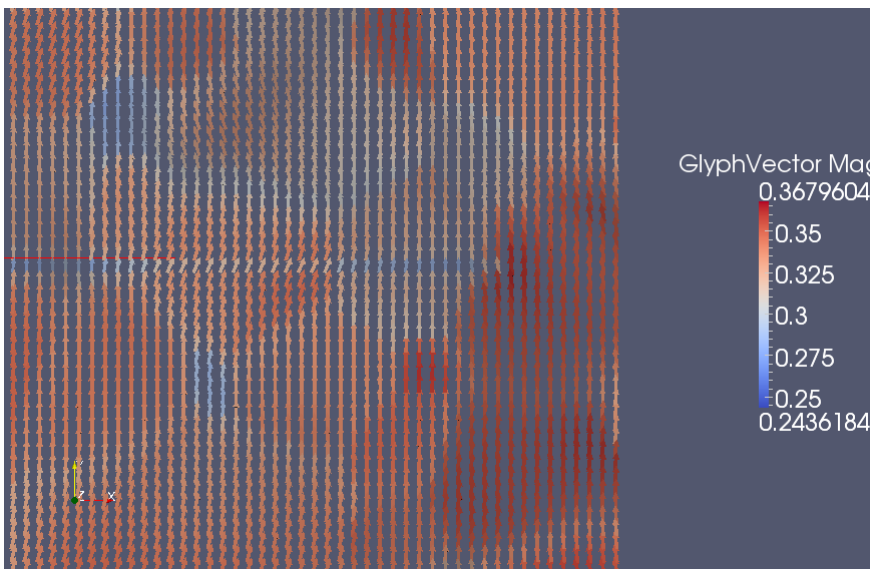
亀裂は最大で 30 ステップだけ成長可能なように設定されているが、28 ステップ目で亀裂の左右の端点は J-integral の積分路に達し、シミュレーションはストップする。28 ステップ目の成長した亀裂の形状は以下の図のようになる。亀裂は、左右両方向に直線状で 28 ステップだけ進行していることが分かる。



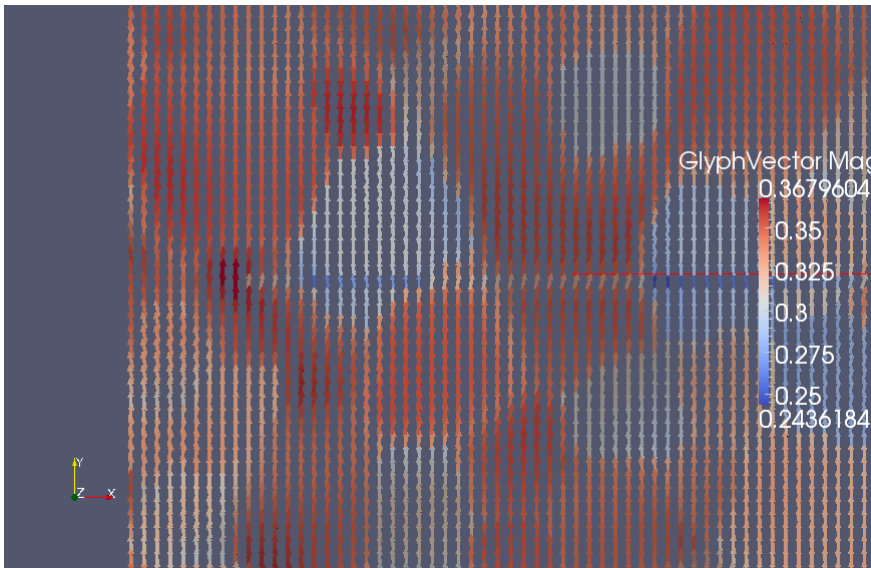
28 ステップ目の誘電分極分布を以下の図に示す。分極ベクトルのノルムの大きさに応じて色分けしている。



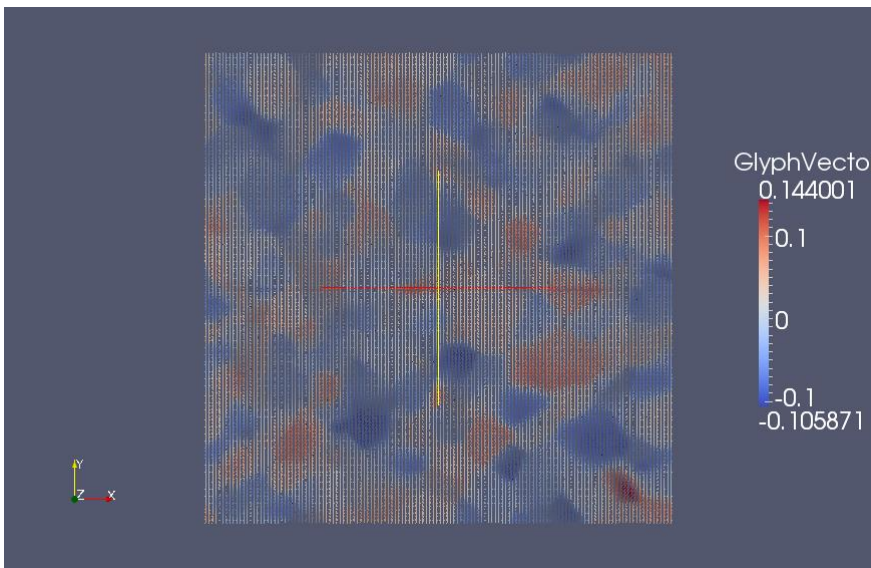
亀裂の右側の端点付近の誘電分極を拡大した図を、以下に示す。



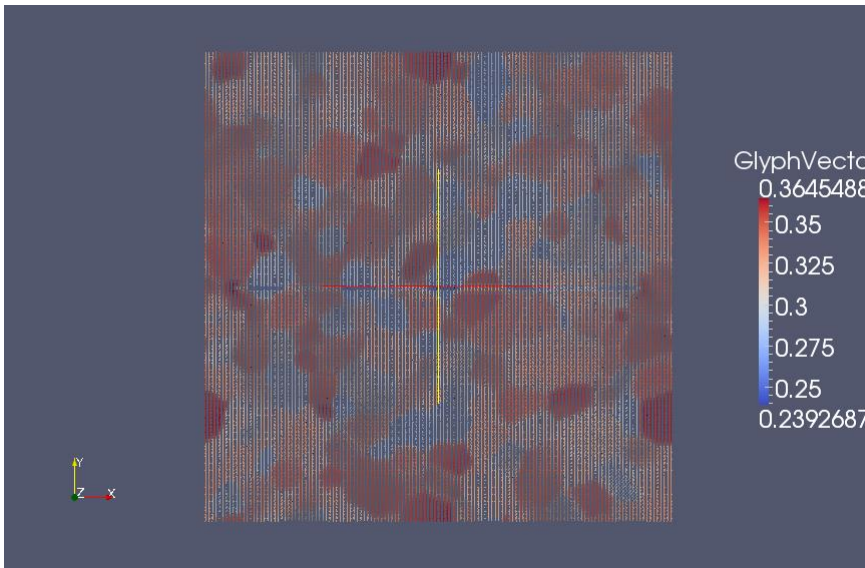
亀裂の左側の端点付近の誘電分極を拡大した図を、以下に示す。



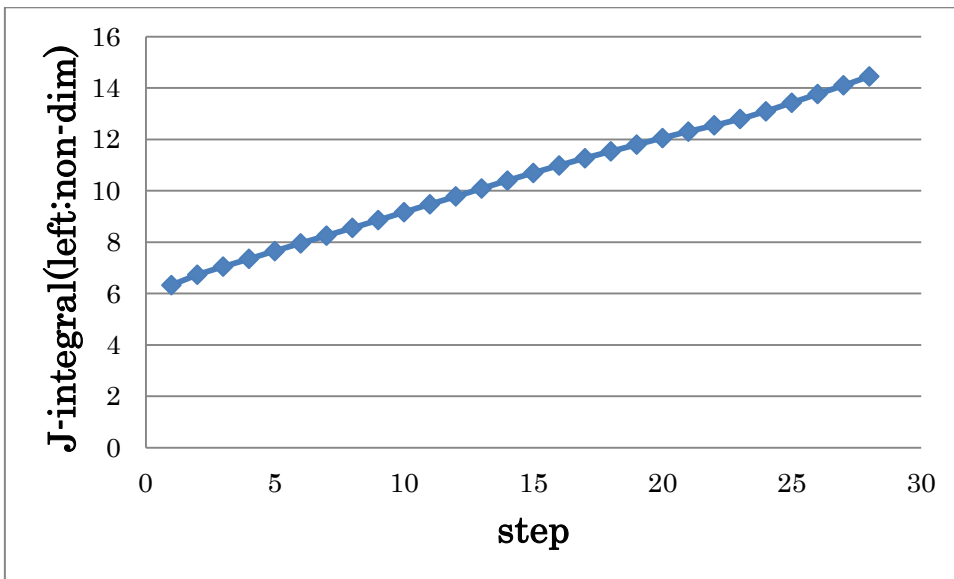
28 ステップ目の誘電分極の分布を、分極ベクトルのx成分の大きさに応じて色分けしたのが以下の図である。

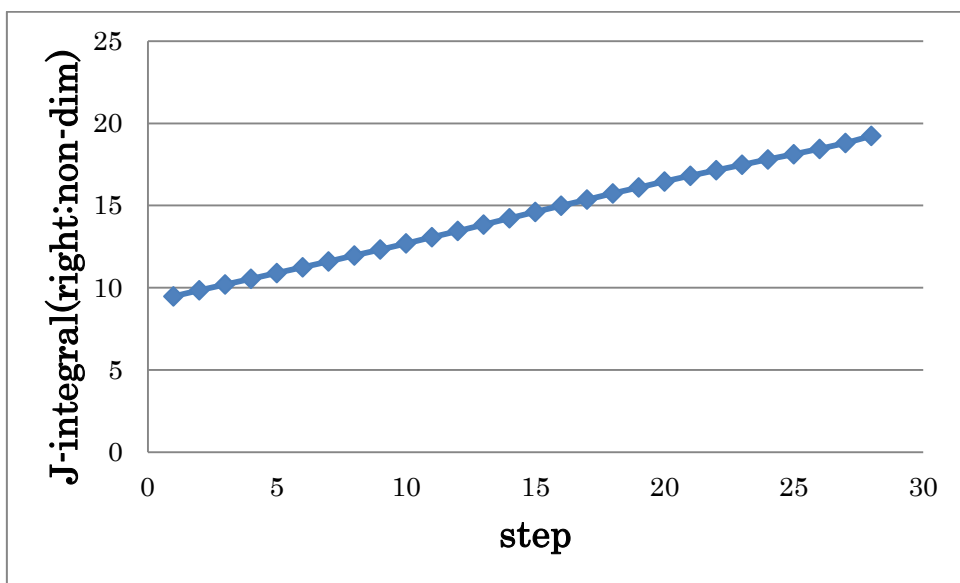


28 ステップ目の誘電分極の分布を、分極ベクトルのy成分の大きさに応じて色分けしたのが以下の図である。



各ステップでのクラックの左右両端の **J-integral** の値は、`example11_average.csv` に記入されている。このファイルを **Excel** で開いて、**J-integral** の値の変化を以下のグラフに示すことができる。縦軸が **J-integral** の値、横軸がステップ数を示すとする。





以上