

原子モデルによる塑性のマルチスケールモデリングに関する一考察

Study on Multi-scale Modeling of Plasticity by Atomic Model

斉木 功*, 菅家 茂理**, 中島 章典***, 寺田賢二郎****

Isao SAIKI, Shigeri KANKE, Akinori NAKAJIMA and Kenjiro TERADA

*正会員 博(工) 宇都宮大学助手 工学部建設学科 (〒321-8585 宇都宮市陽東 7-1-2)

**学生員 宇都宮大学大学院 工学研究科 (〒321-8585 宇都宮市陽東 7-1-2)

***正会員 工博 宇都宮大学大学院教授 工学研究科情報制御システム科学専攻 (〒321-8585 宇都宮市陽東 7-1-2)

****正会員 Ph.D. 東北大学大学院助教授 工学研究科土木工学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 06)

By virtue of the development of metallurgy and the theory of dislocation, one can qualitatively anticipate mechanical properties of a material from its microstructure. Moreover, not qualitative but quantitative and precise anticipation is more beneficial for efficient development of new materials. In this context, we utilize a multi-scale method with atomic model, which is a particle system that has potential, and discuss the possibility of quantitative anticipation of material properties including plastic deformation through several representative numerical examples.

Key Words : multi-scale modeling, atomic model, molecular dynamics, plastic deformation, dislocation

1. はじめに

連続体力学の範疇における塑性体の研究は、18世紀後半のCoulombによる地盤材料の降伏条件の研究を一つの起源と見ることができよう。金属塑性については19世紀半ばのTrescaの実験的研究に端を発する。以来、St. Venant, von Mises, Prandtlをはじめとする数多くの研究者によって、降伏条件、さらには応力-ひずみ関係を決定する数学モデルが構築され、塑性論は確立されてきた¹⁾。今日では、塑性論に基づく材料特性を安定して追跡する方法が利用できる状況にある²⁾。加えて、多くの研究者の地道な努力により、様々な材料に対する応力-ひずみ関係を決定する有用な構成モデルが提案されており、有限要素法を中心とした非線形解析手法の発展と相まって、現代の産業活動に計り知れない恩恵を与えるに至った。

一方、金属学の分野においては、塑性変形の微視的なメカニズム、すなわち原子配置の変化に関する研究が行われてきた。完全結晶の理想強度と実験により観測される臨界分解せん断応力の矛盾を解決する転位の概念は、1934年にTaylor, Orowan, Polanyiがそれぞれ独立に提唱したとされている。20世紀半ばに登場した電子顕微鏡をはじめとする観測技術の進歩により、転位は実際に観測することが可能となり、様々な実験事実に基づき転位論³⁾が体系化されてきた。

先に述べたように、金属の微視的な変形メカニズムが明らかにされたことにより、スーパーメタル⁴⁾のような新材料の開発も試みられている。新材料の開発過程において、目標とする微視構造の指針は、微視的な変形メカ

ニズムから定性的にしか与えられないため、完成までかなりの試作、実験の試行錯誤を要する。また、そのような新材料の構成モデルは、現状では現象学的に決定せざるを得ない。ある微視構造を有する材料の特性を定量的に予測する手法が確立されていれば、新材料の開発過程の試行錯誤や、その材料特性のモデル化のための労力を削減することが期待できる。

原子レベルの微視構造から材料の特性を予測する手法としては、近年、急速に発展を遂げてきた分子動力学法⁵⁾によるシミュレーションが最も有力な方法の一つである。固体の塑性に着目した適用例については、中谷のレビュー論文⁶⁾などにまとめられている。しかしながら、連続体力学で扱う物体の大きさと原子モデルの大きさと乖離、分子動力学法では極めて短時間の現象を扱うことなどが障害となって、分子動力学法の結果から連続体の平均的な物性を関連付ける方法は確立されたとは言えない状況である。連続体力学と分子動力学を結びつけるマルチスケール法に関する研究も報告されているが⁷⁾、Quasicontinuumモデル^{8),9)}に代表されるように、クラックの進展問題などで対象となる局所的な領域に分子動力学法を用いる方法が主流であり¹⁰⁾、巨視的な物性を介して両者を結びつけるための方法は十分検討されていない。原子モデルから巨視的な物性を導くという目的に関しては、統計力学は有用な理論であるが、巨視的な構造の変形と微視的な構造の変形の相互作用を考慮したい場合には、付加的な工夫が必要である。また、Liu et al.¹¹⁾により、巨視、微視の相互作用を考慮した非均質材料の解析と設計について、母材と介在物の剥離などを考慮した具体的な階層型解析手法の提案がなされ

ており、原子レベルの挙動と巨視的な構造を結びつける手法の重要性についても触れられているが、これに関する具体的な例題は1次元問題に限られている。そこで、著者らは、原子レベルの微視構造の変形と巨視的な材料特性を結びつけ、巨視、微視構造の相互作用を考慮した解析を行うために、分子動力学法で用いられるポテンシャルを有する粒子系、すなわち原子モデルを静的な微視問題として、均質化理論¹²⁾を適用したマルチスケール解析法¹³⁾の定式化を行った¹⁴⁾。

本論文では、結晶のすべりに起因する塑性変形を、著者らの文献¹⁴⁾で提案したマルチスケール解析手法によりモデル化することの可能性について検討する。具体的には、代表体積要素に含まれる単位周期構造の数、結晶欠陥の程度を検討項目として、巨視変形制御の微視スケール解析を行い、それらの結果について考察する。

2. 非線形マルチスケール解析

分子動力学法で扱われるポテンシャルは、一般的に凸性が保証されない。非凸ポテンシャル問題のための Γ -収束論による均質化法の理論整備はMüller¹⁵⁾によりなされ、著者らにより力学問題に適用された。ここでは、著者らの文献¹⁶⁾で示された Γ -収束論による大変形超弾性体の2変数境界値問題の定式化の結果のみを示す。

2.1 境界値問題の設定

図-1のように、非常に小さい ϵ によって規定される大きさ ϵY の微小なユニットセルにより、周期的に埋め尽くされた領域 Ω^ϵ を解析対象とする。ここで ϵ に依存する変数には Ω^ϵ のように上付き添え字の ϵ を付すものとする。大変形超弾性体の境界値問題は

$$\nabla_X \cdot P^\epsilon + \rho^\epsilon b = 0 \quad (1)$$

$$u^\epsilon = \underline{u} \quad \text{on } \Gamma_u, \quad P^{\epsilon T} \cdot N = \underline{t} \quad \text{on } \Gamma_\sigma \quad (2)$$

と表される。ここに、 P^ϵ は第1Piola-Kirchhoff応力、 ρ は密度、 b は単位質量当たりの物体力、 $\underline{u}$ 、 $\underline{t}$ はそれぞれ境界 Γ_u 、 Γ_σ において与えられる変位および表面力、 N は初期配置における単位外向き法線ベクトル、 ∇ は下付きの変数による勾配を取る演算子であり、 X は物質座標を表す。

2.2 非凸均質化法による2変数境界値問題の定式化

マクロ構造での座標系 X に対して、ミクロ構造における非均質さを測るためのミクロスケール $Y = X/\epsilon$ を導入する。すると、領域 Ω^ϵ は X の属する Ω と Y の属する ϵY の2つの空間の直積として $\Omega^\epsilon = \Omega \times \epsilon Y$ と表すことができる。これにより、オーダーの異なる X と Y の2つの空間測度で変位、応力といった場の変数が表されるため、それぞれのスケールにおける支配方程式が定義される。

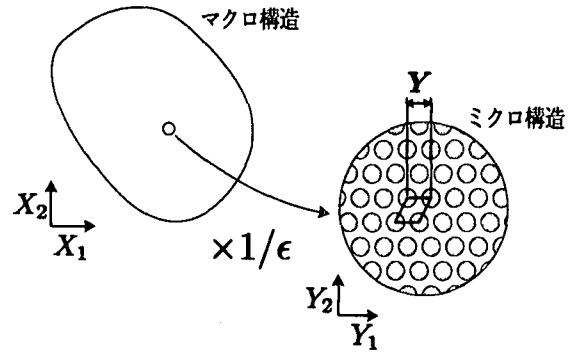


図-1 マルチスケール法概念図

前節の境界値問題を2変数表示し、非凸均質化理論を適用すると、ミクロ、マクロ、両スケールでの弱形式の釣合式

$$g(P^0, \eta^1) := \langle P^0 : \nabla_Y \eta^1 \rangle_{NY} = 0 \quad (3)$$

$$G(\bar{P}, \eta^0) := \int_{\Omega} \nabla_X \eta^0 : \bar{P} dv - \int_{\Omega} \rho^H b \cdot \eta^0 dv - \int_{\Gamma_\sigma} \underline{t} \cdot \eta^0 ds = 0 \quad (4)$$

を得る¹⁶⁾。ここに、 η^0 はマクロスケール変位 u^0 の許容変分、 η^1 は NY 周期性を有するミクロスケール変位 u^1 の許容変分である。また、 P^0 は全応力、 F^0 は全変形勾配、 $\bar{P}$ は平均応力、 ρ^H は平均密度であり、それぞれ

$$P^0 := \frac{\partial W}{\partial F^0} \quad (5)$$

$$F^0 := 1 + \nabla_X u^0 + \nabla_Y u^1 \quad (6)$$

$$\bar{P} := \langle P^0 \rangle_{NY}, \quad \rho^H := \langle \rho \rangle_{NY} \quad (7)$$

により定義した。ここに、 W はひずみエネルギー関数である。ここで注目すべきことは、ミクロ問題の対象となる代表体積要素として複数(N 個)の単位周期構造を考えなくてはならないことである。また、このとき代表体積要素内の全変形に起因する実変位 w は、式(6)より一様変形に起因する成分と周期成分 u^1 の和として

$$w(X, Y) = \nabla_X u^0(X) \cdot Y + u^1(X, Y) \quad (8)$$

により与えられる¹³⁾。

3. 粒子系ミクロスケール問題の設定

ミクロスケール問題は、マクロスケール問題を解いて得られるマクロ変形を受けたときのミクロ構造の自己釣合問題であり、マクロ変形という入力情報から代表体積要素の平均応力としてのマクロ応力を出力として与える。すなわち、ミクロスケール問題は、マクロスケール問題に対して陰的構成関係を与える。

マクロスケール変形-応力関係において等価となる粒子系の境界値問題は著者ら¹⁴⁾により既に発表されているので、ここではその概要を示す。

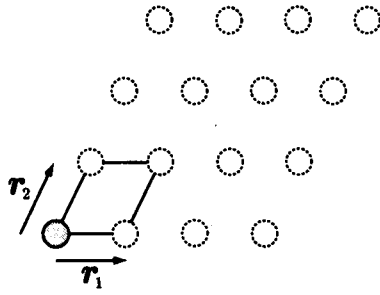


図-2 周期微視構造と単位周期構造

元のマイクロ境界値問題 (式 (3)) と等価なマイクロ粒子問題は、境界上の粒子同士にマクロ変形に相当する相対変位を与え通常の粒子系の釣合を解く問題に帰着する。粒子群から構成されるマイクロ構造のポテンシャルを U とすれば、各粒子 i に作用する内力 t_i は付録 I, II より

$$t_i = -\frac{\partial U}{\partial w_i} \quad (9)$$

となる。したがって、ミクロスケール粒子群の実変位表示の弱形式釣合式は

$$\sum_{i=1}^n t_i \cdot \delta w_i = \sum_{i=1}^n -\frac{\partial U}{\partial w_i} \cdot \delta w_i = 0 \quad (10)$$

となる。ここに n は代表体積要素内の粒子の総数、 w_i は粒子 i の実変位である。ここで、ミクロスケール Y の原点が属する境界上のある粒子の実変位を w^i 、周期境界によりこの粒子に対応する粒子、すなわちこの粒子を $N_i r_i$ (i に関する和は取らない) 並進させた位置の粒子の実変位を w^d とする¹。ただし N_i は代表体積要素の i 方向に含まれる単位周期構造の数、 r_i は図-2 に実線で示す単位周期構造を規定する基本並進ベクトルである。このとき、マクロ変形 $\nabla_X u^0$ に起因する両粒子間の相対変位 d は

$$d := w^d - w^i = \{\nabla_X u^0(X)\} \cdot N_i r_i \quad (11)$$

により与えられる (i に関する和は取らない)。

具体的な解析手順は、非線形釣合式 (10) を実変位表示の周期境界条件 (11) のもとに、仮定したマクロ変形 $\nabla_X u^0$ を漸増し、通常の Newton-Raphson 法により準静的に解析する。ただし、繰り返し計算が収束しない場合に限り、当該ステップ分のマクロ変形増分を動的な効果が表れない程度の低い速度で与え、仮想的な減衰を与えつつ動的に解析し、最終的に静的釣合状態を求めた。

ところで、本研究で扱っている離散体モデルでは局所的な応力は定義できないが、代表体積要素の平均応力は

¹ w などの上付の添字は、それぞれ

i: ミクロスケール Y の原点が属する境界上の粒子 (independent)

d: i を $N_i r_i$ だけ並進させた点にある境界上の粒子 (dependent) を意味する。

単位時間当たり、単位面積当たりの運動量変化量として

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{v} \sum_i^n t_i \otimes w_i \quad (12)$$

と表すことができる¹⁷⁾。ここに、 $\bar{\sigma}$ は平均 Cauchy 応力、 v は代表体積要素の体積である。

なお、粒子の変位 w_i は、平均変形勾配 $\bar{F} := \langle F^0 \rangle_{NY}$ とマイクロ境界値問題を陰関数として関係付けられている。この関連付けは均質化理論によってなされていることに注意されたい。したがって、ひずみエネルギー $\mathcal{W}$ は粒子間ポテンシャル U で陽に表すことはできないものの、均質化理論に基づき粒子間ポテンシャル U により陰的に定義されていることになる。

4. 塑性変形のマルチスケールモデリングに関する数値的検討

前節までに示した非凸均質化理論に基づく粒子系ミクロ解析を用いた以下の平面問題の数値解析結果より、本手法による塑性変形のモデル化の可能性を主として検討する。また、得られた応力-ひずみ関係の勾配から、弾性変形についても若干のコメントを記す。

以下のすべての解析例において、ポテンシャルには代表的な2体間ポテンシャルである Lennard-Jones ポテンシャルを用いた。2体間ポテンシャルでは立方晶の異方性を表現できないといった制約が知られており、また、通常、金属材料に適用されることはないが、本研究の目的である塑性変形のモデル化の検討には不都合はないと考えた。Lennard-Jones ポテンシャルの詳細は付録 I に述べる。

単位周期構造は1粒子を含み、粒子間ポテンシャルがゼロとなる距離で無次元化した基本周期ベクトルを $r_1 = \{1.1125, 0\}$ 、 $r_2 = \{0.55625, 0.96345\}$ とした。この基本周期ベクトルは、無限周期構造において初期配置の応力がほぼゼロとなるように試行錯誤により決定した。載荷荷重に相当する載荷ひずみ経路は、その選択について著者らの主張はないが、ここでは単純せん断を仮定し、 $\partial u_1^0 / \partial X_1 = \partial u_2^0 / \partial X_1 = \partial u_2^0 / \partial X_2 = 0$ 、 $\partial u_1^0 / \partial X_2 = f$ のようなマクロ変形を静的に与えてミクロスケール解析を行った。ここに、 f は荷重パラメタである。

4.1 完全系における単位周期構造数の影響

マルチスケールモデリングにおいて単位周期構造の数が結果に与える影響を検討するために、 8×8 、 16×16 、 32×32 個の単位周期構造を含む代表体積要素 (以後 RVE と呼ぶ) に対して前述のように単純せん断変形を与え解析を行った。用いた 16×16 個の単位周期構造を含む RVE を図-3 (a) に示す。 8×8 はこれを4分の1に、 32×32 はこれを4倍にしたモデルである。得られた無次



図-3 完全系 (完全結晶) の代表体積要素

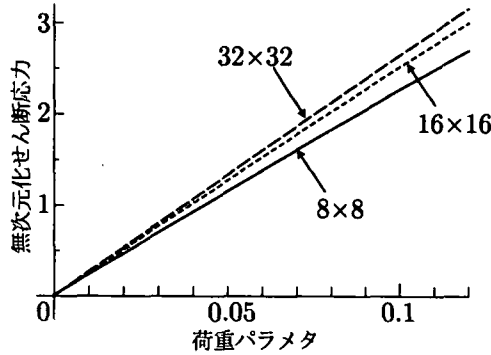


図-4 完全系 RVE の応力 - ひずみ関係

元化応力成分 $\bar{\sigma}_{12}\sigma^2/\varepsilon$ - 平均変位勾配成分 $\partial u_1^0/\partial X_2(=$ 荷重パラメタ $f)$ 関係 (以後, 単に応力 - ひずみ関係と呼ぶ) を図-4 に示す。単位周期構造数の増加に伴い, 若干, 剛性が増加しているが, $8 \rightarrow 16$, $16 \rightarrow 32$ の変化では後者の方が小さく, 収束する傾向が見られる。荷重パラメタ f が 0.02 における無次元化割線剛性 (以後, 単に割線剛性と呼ぶ) は, 8×8 , 16×16 , 32×32 においてそれぞれ 22.99, 25.43, 26.68 であった。なお, 図-4 に示した範囲では釣合経路上に特異点あるいは分岐点は発見されなかった。

ここで扱っているようないわゆる完全結晶については, ポテンシャルエネルギーが単位のひずみ量の周期関数になるということが分かっている¹⁸⁾。ここで仮定しているような単純せん断を受ける RVE において, 最下段とすぐ上のレプリカセル (付録 II 参照) の最下段の対応する粒子に格子間隔と等しい相対変位が生じた場合, すなわち $\nabla_X u^0 \cdot r_2$ の大きさが格子間隔と等しくなった場合, 全体的に弾性変形する釣合状態と, 図-3 (b) に示すようにある面にすべりが生じ, その結果それ以外の変形がゼロとなる釣合状態と, 2通りの解が存在する。後者の釣合状態となる場合, ポテンシャル, 応力は初期の無変形状態と等価になる。この事実を反映した応力 - ひずみ関係を図-5 に示す。同図中 (a), (b) は図-3 の変形図に対応する。

例えば, 16×16 個の単位周期構造を含む代表体積要素において, 格子 1 つ分のすべりと等価な単純せん断は $\partial w_1/\partial y_2 = 0.0722$ である。図-5 において, 16×16 個の単位周期構造を含む RVE に対する応力 - ひずみ関係はこの間隔の周期性を有する。塑性変形がこのすべりに

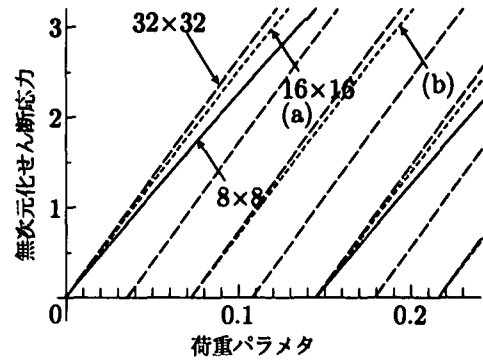
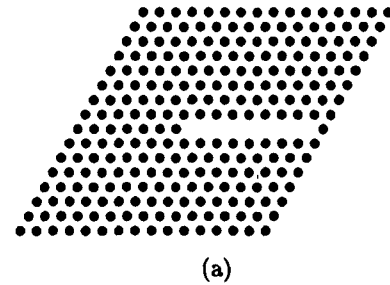
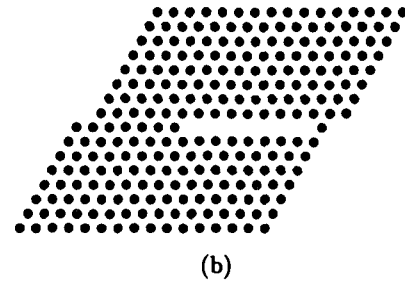


図-5 周期性を反映した完全系 RVE の応力 - ひずみ関係



(a)



(b)

図-6 r_1 方向に欠陥を有する RVE とその変形

よるものとすれば, このひずみは塑性変形の最小単位とみなすことができる。すると, この最小単位は RVE 内の粒子数に反比例することになる。実際の塑性変形量は実質的に連続な量として扱えることから, 本手法で塑性変形をモデル化するためには相当数の粒子を用いなければならないことになる。ただし, この議論はあくまで単結晶かつ完全結晶に対してのみ成り立つ。例えば実際の鋼は, 多結晶であり, 通常の鋼材の一つの結晶粒に含まれる原子数は 1 方向あたり高々 10^5 個である²⁾ こと, かつ転位のような結晶欠陥を有することから, 必ずしも将来的にも計算不可能なほど多数の粒子を RVE に含めなければならないという結論には至らない。

4.2 結晶欠陥とその方向の影響

周期領域を扱う問題において, 線欠陥である転位をどのようにモデル化すべきかは自明ではない。そこで, 16×16 個の単位周期構造を含む RVE に, 転位を模擬す

²⁾ 結晶粒の大きさを $100\mu\text{m}$, 原子間隔を 0.3nm とすれば, この結晶粒に含まれる原子数は $100 \times 10^{-6}/0.3 \times 10^{-9} \simeq 3.3 \times 10^5$ と見積もられる。

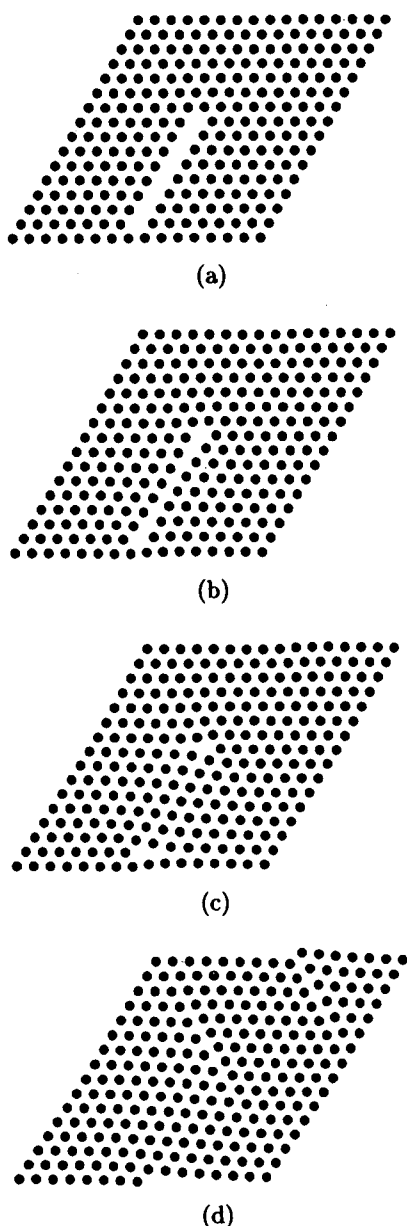


図-7 r_2 方向に欠陥を有する RVE とその変形

るために 8 粒子の結晶欠陥を導入し、その線欠陥の方向を r_1 , r_2 , $r_3 := r_1 - r_2$ と変化させ解析を行った。この 3 タイプの RVE をそれぞれ図-6~8 に (a) として示す。また、得られた結果を応力 - ひずみ関係として図-9 に示す³。図中、実線は完全系、□, ○, △の順に r_1 , r_2 , r_3 方向に欠陥を有する RVE の結果である。ただし、図が煩雑となるのを防ぐため、これらのマークは解析により得られた点をいくぶん間引いて表示してある。また、経路が不連続になっている点では、静的繰り返し計算過程において、偶然、他の経路上の釣合点が見つかるケースと、静的繰り返し計算過程で発散が生じ、前述の動的過程を経て他の経路上の釣合点が見つかる

³ 初期配置は、完全系において応力がゼロとなるように設定したが、結晶欠陥の影響で、若干の初期応力が存在する場合がある。

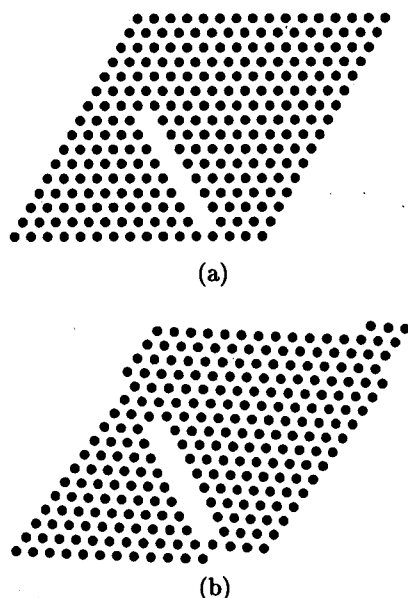


図-8 r_3 方向に欠陥を有する RVE とその変形

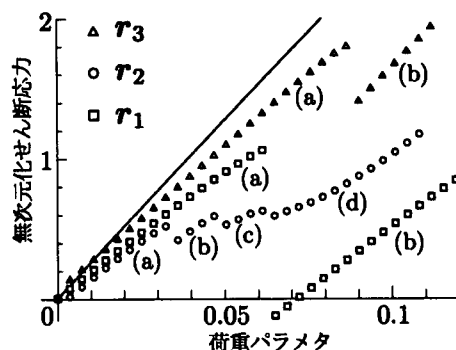


図-9 各方向に欠陥を有する RVE の応力 - ひずみ関係

ケースがあった。ただし、釣合経路上で接線剛性が負の固有値を有する点も数点見られたが、同一系路上で固有値が正から負に変化する、いわゆる分岐点は発見されなかった。図-9 には、このようにして追跡した釣合点をすべて含めた。また、図-9 における (b), (c) などの記号は、釣合経路の該当区間での RVE のが図-6~8 における (b), (c) で示すような形態になっていることを意味する。

結晶欠陥が r_1 , r_3 方向の RVE では、荷重パラメタがそれぞれ 0.063, 0.088 付近で応力 - ひずみ関係が不連続になっている。この点において、静的解析は不可能となり、前述の動的過程を経て、欠陥に沿う方向にすべりが生じた変形形状が得られたためである。ただし、結晶欠陥が r_1 方向の RVE では、せん断方向とすべり方向が同一のため、4.1 節の完全系におけるすべりと同じように、すべり変形を生じた直後は、原点が 0.0722 だけシフトしただけですべりを生じる以前とまったく同様の応力 - ひずみ関係を示す。一方、結晶欠陥が r_3 方向の RVE では、生じたすべりは欠陥に沿う方向である

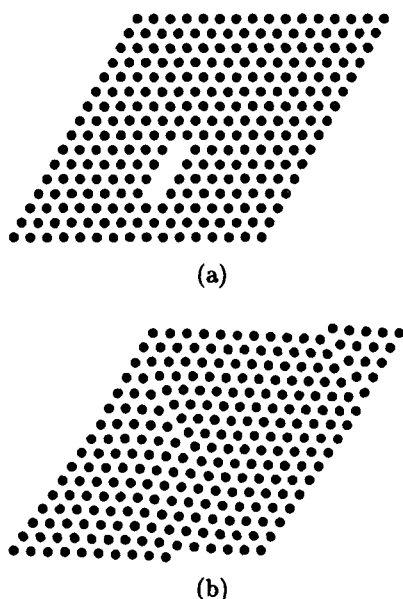


図-10 4粒子分の結晶欠陥を有するRVEとその変形

が、せん断方向とすべり方向が一致しないために、すべりを生じた後の応力-ひずみ関係は、すべりを生じる以前の関係と異なっている。いわゆる転位論では、欠陥(転位)の位置が移動し、最終的に結晶を横切ることによりすべり変形を生じるとされる。 r_1 、 r_3 方向に欠陥を有するRVEについては、結果としてすべり変形が得られたが、マクロ変形を漸増させる過程において転位が移動する過程は観察されなかった。

結晶欠陥が r_2 方向のRVEでは、他の2ケースと異なり、やや複雑である。荷重パラメタが0.034、0.050、0.064で応力-ひずみ関係が不連続になっている。最初の不連続点を除き、動的過程を経ている。最初の不連続点で図-7(b)に示すように、欠陥の間隔が若干狭まる。次の不連続点では、図-7(c)に示すように両端の2粒子分を除き、欠陥が消失している。次の不連続点以後は、図-7(d)に示すようにすべりが生じているが、前述の2ケースのようにすべり面に属するすべての粒子が一樣に変位しているわけではない。また、この解析においても、転位の移動する過程は観察されなかった。

なお、割線剛性は、 r_1 、 r_2 、 r_3 方向に欠陥を有するRVEそれぞれに対し18.63、18.45、19.88であった。 r_3 は他の2方向と比較して、せん断方向とのなす角が大きいので、剛性が少し高くなっていると考えられる。

4.3 結晶欠陥の程度の影響

引き続き、結晶欠陥の程度が応力-ひずみ関係に与える影響を考察する。解析に用いたモデルは、図-10(a)に示す 16×16 個の単位周期構造を含むRVEに r_2 方向に4粒子分の欠陥を有するモデルであり、前節で扱った r_2 方向に8粒子分の欠陥を有するRVE、および欠陥のない完全系と比較を行う。

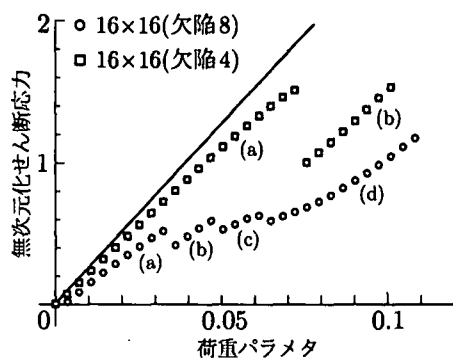


図-11 欠陥を有するRVEの応力-ひずみ関係(欠陥の程度による比較)

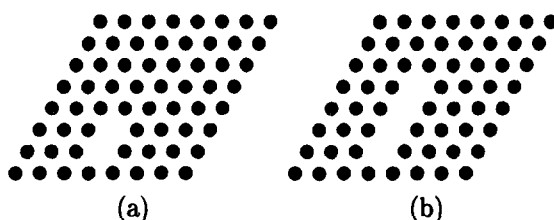


図-12 欠陥を有する 8×8 単位周期構造を含む代表体積要素

得られた応力-ひずみ関係を図-11に示す。図中、実線は完全系に対する結果であり、4および8粒子分の結晶欠陥を有するRVEの結果はそれぞれ□、○のマークにより示す。図の書式については、前節で示した図-9に準ずる。4粒子分の欠陥を有するRVEに関しては、不連続点で動的過程を経ている。また、経路上の接線剛性はすべて正であった。不連続点以後、(b)の経路上の変形は、図-10(b)に示すように欠陥を消失しつつすべりが生じており、8粒子の欠陥を含むRVEの(d)の経路上の変形と類似した結果が得られたが、中間の(b)、(c)の経路上の変形は、4粒子分の欠陥を有するRVEには見られなかった。

また、図-11中の3モデルの結果の比較より、結晶欠陥が増加するに伴い剛性が低下していることが分かる。割線剛性は、完全系、4および8粒子の結晶欠陥を含むRVEそれぞれに対し25.43、22.94、18.63であった。

4.4 結晶欠陥の程度と単位周期構造数の相互の影響

結晶欠陥の程度と単位周期構造数の相互の影響を考察するために、図-12(a)、(b)に示す 8×8 個の単位周期構造を含むRVE(以下、RVE8とする) r_2 方向に2および4粒子分の結晶欠陥を有するRVEの解析を行った。得られた応力-ひずみ関係を図-13に示す。図中、2粒子、4粒子の結晶欠陥を有するRVE8の結果をそれぞれ□、■で示し、比較のために前述の r_2 方向に8粒子の結晶欠陥を有する 16×16 個の単位周期構造からなるRVE(以下、RVE16とする)の結果を○により示す。今回の解析の範囲内では、図-12(a)、(b)に示す2

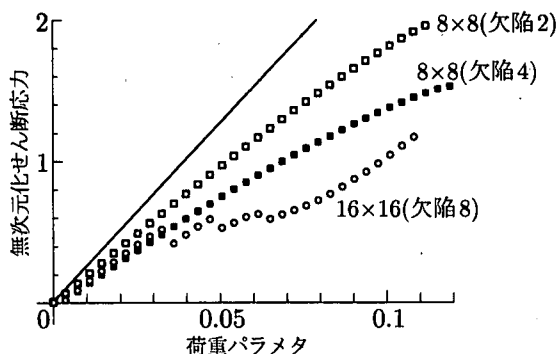


図-13 欠陥を有する RVE のせん断応力 - ひずみ関係 (欠陥の程度と単位周期構造数による比較)

タイプの RVE に対して、すべりを生じる結果は得られなかった。

8 粒子の結晶欠陥を有する RVE16 は、2 次元領域の欠陥の密度としては 2 粒子の欠陥を有する RVE8 と等価であり、1 方向の粒子数の比においては 4 粒子の欠陥を有する RVE8 と等価である。割線剛性は、2 粒子、4 粒子の結晶欠陥を有する RVE8、8 粒子の結晶欠陥を有する RVE16 においてそれぞれ 19.81, 16.45, 18.63 であった。RVE8 に対する 2 つの結果からも、4.3 節で得られた考察と同様に、結晶欠陥の程度が増すにつれ剛性が低下している。また、4.1 節においては、RVE 内の単位周期構造数が増えるほど剛性が高くなっていたので、単純せん断の弾性変形に結晶欠陥が与える影響としては、密度よりも 1 方向の粒子数の比によるところが大きいと思われる。

5. おわりに

マルチスケール解析手法により、原子レベルの微視構造の変形、結晶格子のすべりから、直接的に塑性変形のモデル化を行うための基礎的検討を行った。完全結晶に対しては、ポテンシャルエネルギーが単位のひずみ量の周期関数になるという既往の理論的報告をマルチスケールモデリングの枠組みで数値的に再現できた。結晶欠陥を有するモデルに対しては、転位論との整合性に関しては課題は残すものの、すべりによる塑性変形を解析結果として得ることができた。

謝辞：この研究は土木鋼構造教育助成金 (日本鉄鋼連盟) の補助を得た。

付録 I ポテンシャル関数

分子動力学法においてシミュレーションを行う場合、用途に応じて様々なポテンシャル関数が用いられている。ポテンシャル関数は連続体力学における構成関係に相当し、分子動力学法による解析の結果に支配的な影

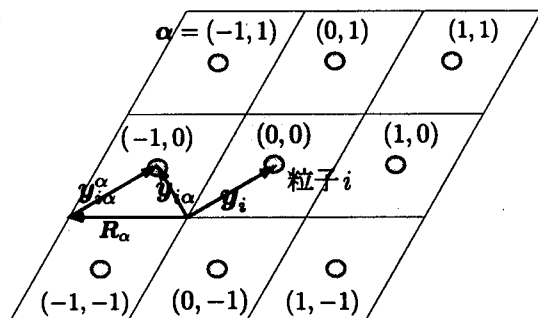


図-14 レプリカセル

響を与える。第一原理分子動力学により、非経験的にポテンシャルを決定することも不可能ではないが、計算機負荷が高いため、経験的あるいは半経験的に決定されるポテンシャルを用いることが一般的である。経験的ポテンシャルは 2 体間ポテンシャルと多体間ポテンシャルとに大別される。2 体間ポテンシャルは、関数形そのものが単純でアルゴリズム上の取り扱いも単純であるが、結晶格子による異方性を表現できないという欠点が知られている。この欠点を克服するために、密度項を付加した Finnis-Sinclair ポテンシャルなども考案されている。本研究では、ポテンシャル粒子系の格子のすべりにより塑性変形を表現することの可能性を検討することが目的であり、その対象は固体ではあるが特定の材料に限定しないため、もっとも基本的な 2 体間ポテンシャルの一つである Lennard-Jones ポテンシャル関数を用いることとした⁴。2 粒子 i, j 間の距離を r_{ij} としたとき、この 2 粒子間の Lennard-Jones ポテンシャル U_{ij} は

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right\} \quad (I.1)$$

と定義される。ここに、 $-\epsilon$ はポテンシャルの最小値、 σ はポテンシャルがゼロとなる距離である。粒子 j が粒子 i から受ける相互作用力 $\mathbf{f}_{ij}$ は、ポテンシャル関数の勾配として

$$\mathbf{f}_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) = -\frac{\partial U_{ij}}{\partial \mathbf{r}_{ij}} \quad (I.2)$$

と表される。ここに、 $\mathbf{r}_{ij}$ は

$$\mathbf{r}_{ij} := \mathbf{w}_j - \mathbf{w}_i \quad (I.3)$$

で定義される粒子 i を基準とした粒子 j の位置ベクトルである。

付録 II レプリカセル

いわゆる局所理論に基づく連続体の範疇では、まず代表体積要素を決定し、式 (10) に周期境界条件 (11) を考慮することで問題を解くことができる。しかし本研究で扱っているようなポテンシャルによる非局所的な相互

⁴ ポテンシャル選定に関しては、分子動力学に関する成書^{10), 19)}を参照されたい。

作用を及ぼし合う粒子系においては、代表体積要素内の粒子はその外の粒子からも相互作用を受ける。ただし、分子動力学法において用いられる粒子の相互作用を表すポテンシャルは、一般的には粒子間距離の逆数の6乗程度に比例するとされている⁵⁾ので、代表体積要素に加え、数値解析上無視できる程度の相互作用を及ぼす周辺の範囲までを考慮すればよい。このため、分子動力学法では、代表体積要素の周囲にレプリカセルと呼ばれる代表体積要素と形状が同じセルを考慮する⁵⁾。レプリカセル内の粒子の実変位は、周期境界条件より対応する(基本並進ベクトルの距離にある)代表体積要素内の粒子の変位と式(11)の関係を有することになる。代表体積要素とレプリカセルの幾何学的な関係を図-14に示す。図中、網掛けの領域が代表体積要素であり、周辺を囲むように配置されている8つの領域がレプリカセルである。

本手法においてもレプリカセルを用いているが、その取り扱いについては一般的な分子動力学法の専門書に詳しく記述されているので、ここでは結果のみを述べる。レプリカセルを考慮した粒子系の全ポテンシャルエネルギー U は、レプリカセルを含めた任意の組み合わせの2粒子間ポテンシャルの総和として

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_i^n \sum_j^n U_{ij}(|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{R}_{\alpha}|) \quad (\text{II.1})$$

と表される。ここに、 $U_{ij}(r)$ は2粒子間距離 r をパラメータとする任意の2粒子間ポテンシャル、 α はレプリカセルの識別子、 $\mathbf{R}_{\alpha}$ は代表体積要素の基準点からレプリカセル α の基準点へのベクトルである。

参考文献

- 1) Hill, R.: *The mathematical theory of plasticity*, Clarendon Press, Oxford, 1950.
- 2) Simo, J.C. and Hughes, T.J.R.: *Computational inelasticity*, Springer, 1998.
- 3) Hull, D. and Bacon, D.: *Introduction to Dislocations 3rd edition*, Vol.37 of *International Series on Materials Science and Technology*, Pergamon, 1984.
- 4) 第4回スーパーメタルシンポジウム講演集, 2001.
- 5) Haile, J.M.: *Molecular Dynamics Simulation: elementary methods*, John Wiley & Sons, 1997.

- 6) 中谷彰宏: 分子動力学法による塑性変形のシミュレーション, 材料, Vol.48, pp.1328-1334, 1999.
- 7) 中谷彰宏: 分子動力学法と連続体力学的手法の結合による材料の力学挙動のマルチスケール解析, 日本ゴム協会誌, Vol.72, pp.659-665, 1999.
- 8) Ortiz, M. and Phillips, R.: Nanomechanics of defects in solids, *Advances in Applied Mechanics*, Vol.36, pp.1-79, 1999.
- 9) 半谷禎彦, 吉川暢宏: QC 重合メッシュ法によるマクロ-メゾマルチスケール解析, 計算力学講演会, pp.299-300, 2002.
- 10) 北川 浩, 北村 隆行, 渋谷 陽二, 中谷 彰宏: 初心者のための分子動力学法, 養賢堂, 1997.
- 11) Liu, W.K., Hao, S., Franck, J.V., Kadowaki, H., Harold, P. and Dong, Q.: Multiscale analysis and design in heterogeneous systems, *Proc. VII Int. Conf. Comp. Plasticity*, pp.1-22, 2003.
- 12) Bensoussan, A., Lions, J.L. and Papanicolaou, G.: *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North-Holland Publishing Company, 1978.
- 13) Terada, K. and Kikuchi, N.: A class of general algorithm for nonlinear multi-scale analyses for heterogeneous media. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, Vol.190, pp.5427-5464, 2001.
- 14) 菅家茂理, 斉木 功, 中島章典, 寺田賢二郎: ポテンシャルを有する離散体のマルチスケールモデリング, 応用力学論文集, Vol.5, pp.167-173, 2002.
- 15) Müller, S.: Homogenization of nonconvex integral functionals and cellular elastic materials, *Arch. rat. mech. anal.*, 99, pp.189-212, 1987.
- 16) Saiki, I., Terada, K., Ikeda, K. and Hori, M.: Appropriate number of unit cells in a representative volume element for microstructural bifurcation encountered in a multi-scale modeling, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, Vol.191, pp.2561-2585, 2002.
- 17) 日本機械学会: 原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション, コロナ社, 1996.
- 18) 加藤雅治: 入門転位論, 裳華房, 1999.
- 19) 川添良幸, 三上益弘, 大野かおる: コンピュータ・シミュレーションによる物質科学—分子動力学とモンテカルロ法, 共立出版, 1996.

(2003年4月18日受付)