

内部自由度を有する結晶のための第一原理密度汎関数法に基づく 高速局所擬似連続体法

DATABASE-ACCELERATED PARALLELIZED LOCAL QUASICONTINUUM METHOD BASED ON FIRST-PRINCIPLES DENSITY-FUNCTIONAL THEORY FOR CRYSTALS POSSESSING INTERNAL DEGREES OF FREEDOM

戸田 直大¹⁾, 君塚 肇²⁾, 尾方 成信³⁾

Naohiro TODA, Hajime KIMIZUKA and Shigenobu OGATA

- 1) 大阪大学大学院基礎工学研究科 (〒 560-8531 豊中市待兼山町 1-3, E-mail: n-toda@mbox.me.es.osaka-u.ac.jp)
住友電気工業 (株) (〒 664-0016 伊丹市昆陽北 1-1-1, E-mail: toda-naohiro@sei.co.jp)
- 2) 大阪大学大学院基礎工学研究科 (〒 560-8531 豊中市待兼山町 1-3, E-mail: kimizuka@me.es.osaka-u.ac.jp)
- 3) 大阪大学大学院基礎工学研究科 (〒 560-8531 豊中市待兼山町 1-3, E-mail: ogata@me.es.osaka-u.ac.jp)

We proposed a new finite-element analysis method based on a numerical stress-strain database to calculate the non-linear large elastic deformation for single crystals possessing internal degrees of freedom. The database is constructed during finite-element analysis on-the-fly based on the first-principles density functional theory, which is able to obtain high-precision stress without any empirical parameters even under finite strained conditions. The database significantly improves the total computational efficiency without loss of accuracy. We also carried out parallel-computational method for the database construction process to realize further improvement of computational efficiency. The effectiveness of the proposed inverse analysis method is demonstrated through numerical simulation for several example problems.

Key Words: Quasicontinuum Method, Stress-Strain Database, Finite Element Method, Parallel Computation, Diamond Crystal

1. 緒言

ナノテクノロジーに注目が集まる中, ナノインデンテーションに代表されるナノスケールでの力学特性を測る実験技術の向上はめざましい. それに伴って, これらのナノスケールの力学実験の詳細を理解するために, 計算機シミュレーションが用いられるようになり, 計算機シミュレーションにもナノスケールでの高精度な力学解析が求められている. 多結晶材料であっても, ナノインデンテーションのようにナノスケールの局所的な性質を調べる試験で結晶粒界以外を調べた場合には, 無欠陥の単結晶を測定していることとほぼ等価となる. 無欠陥の単結晶は, 永久変形 (塑性変形) をするまでに, 10%以上も弾性的に変形することがある⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾. このレベルのひずみでは, 材料はもはや線形弾性体として振舞わず, 弾性域であっても強い非線形性を呈することになる. また, 弾性域を超えて永久変形へと移行する力学条件も材料

や応力状態によって大きく変化する⁽²⁾. ナノレベルの実験を理解するための計算機シミュレーションではこれらをどこまで正確に評価できるかが重要である.

このようなナノレベルの解析対象に対して最も有効な力学解析手法は, 原子を直接扱う分子動力学法である. ただし, 経験的な原子間相互作用を用いる古典分子動力学法では, 10%もの変形に対して, 経験的な原子間相互作用が有効であるかどうかの疑問が常に残る. このような原子間相互作用の不確かさのない方法として, 密度汎関数法に代表される非経験的な第一原理計算法がある. 非経験的な第一原理計算法では, 原子間の相互作用を, 電子状態を解くことにより決定するため, 様々な材料の様々な変形状態に対して信頼できる結果を得ることができる. また, 非経験的に相互作用を計算できることから, 実験等から得られる知見を用いることなく計算が可能であり, 予測的な計算結果が得られることも大きな特徴である. しかしながら, 第一原理計算法は, このよ

うな利点と引き換えに、計算量が古典分子動力学法に比べて極めて多いという欠点を持っている。その結果、現実的に扱える原子数が少なくなり、モデルの大きさや境界条件に大きな制約がある。

一方、構造解析の手段として広く用いられている有限要素法は、本来多数の原子で構成されている材料を連続体として近似することにより、解析する際の自由度を原子団の自由度 $3N$ (N : 原子数) から、要素を結びつける節点の自由度 $3M$ (M : 節点数, $M \ll N$) に減らし、大幅な高速化を実現している手法とみなすことができる。そして、境界条件の自由度も高い。しかし、ナノスケールの非線形弾性問題を解くにあたり、有限要素法には 2 つの大きな問題点がある。一つは、一般的な連続体を対象とした計算ではスケールの概念がなく、原子スケールの現象の詳細を獲得することはできない点である。ただし、単結晶中の数ナノメートルを超える長さスケールをもつ現象では、連続体近似が有効であるとの解析もあり⁽⁴⁾、ナノインデンテーションを始めとするナノスケールの計算の多くに適用されている⁽⁵⁾。もう一つは、幾何学的な変形状態と力学的な応力状態を結びつける構成式が必要な点である。これまで材料の構成式は、その材料に対する力学実験から得られる知見に基づいて、経験的に決定されていたのが現状である。この方法はマクロな解析では極めて有効であるが、ナノスケールの構造解析に適用しようとする、10%を超えるひずみまであらゆる変形状態を実現したナノスケール実験を実施し、そこから構成式を構築する必要がある。しかし、実際このような実験は、現状の実験技術をもってしても極めて実行困難である。特に、非線形弾性の振る舞いをすべて考慮するのは不可能である。

そこで、我々は、これら第一原理計算法と有限要素法それぞれの長所を活かし、短所を互いに補う手法を開発した。構成関係(応力-ひずみ関係)を非経験的で高精度な第一原理密度汎関数計算手法に基づいて求めながら、有限要素法を実行する擬似連続体有限要素法である⁽⁴⁾。

Fago ら⁽⁶⁾ や、Hayes ら⁽⁷⁾ は、計算量の少ない Orbital Free 密度汎関数法を用いた、同様の手法を提案している。しかしながら、Orbital Free 密度汎関数法は、電子密度の運動エネルギー汎関数の正確な形が不明であり、通常の密度汎関数に比べて精度が劣る。これらの簡易な密度汎関数法が利用されている背景は、通常の密度汎関数法では計算時間が長く、有限要素計算全体の計算時間が現実的でなくなるためである。そこで我々は、通常の密度汎関数法の精度を保ちつつ、現実的な計算量の有限要素計算を実現するために、応力-ひずみ関係の学習型データベースを用いる方法を提案し、これを用いてアルミニウム単結晶の変形解析を実施した⁽⁴⁾。

アルミニウムは基本格子に原子をひとつだけしか含まないため内部自由度を持たないが、本論文ではこの手法をダイヤモンドのように基本格子内に 2 個以上の原子を含む内部自由度のある系に適用できるよう拡張する。内部自由度のある系の計算では計算量が内部自由度のない系に比べて多くなるため、計算のさらなる高速化が必要である。そこで本手法で

は、データベースを構築する際に並列処理を採用する。

2. 第一原理密度汎関数法に基づく局所擬似連続体法

連続体では、物体点の変形は、次式によって各物体点で定義される変形勾配 F によって一義的に表現できる。

$$F(x) = \frac{\partial x}{\partial X} \quad (1)$$

ここで、 x と X はそれぞれ現配置と基準配置での物体点の位置ベクトルを表す。外部からの力学的負荷に対する材料の力学応答は、力学的負荷によって引き起こされた変形に起因する材料内部の自由エネルギーの変化によって記述できる。固体結晶材料の温度一定の試験ではエントロピーの寄与が無視できるので、自由エネルギーの変化は主に材料を構成する原子間のポテンシャルエネルギーの変化に起因している。転位やき裂等の欠陥の生成・消滅のない弾性変形をする系では連続体近似を適用することができ、材料全体のひずみエネルギーは次式に示すように、変形勾配分布の汎関数として表現できる。

$$E_{\text{tot}}^{\text{strain}} \simeq \Delta U(F(x)) \quad (2)$$

ここで U は系に含まれる原子間のポテンシャルエネルギーであり、ここで、変形勾配が零の状態を結晶の平衡状態であると、そこを基準にポテンシャルエネルギーの変化を見積もっている。一方、材料全体のひずみエネルギーは、各物体点 x_0 で計算されるひずみエネルギー密度 $e(x_0)$ の積分で表現できる。

$$E_{\text{tot}}^{\text{strain}} = \int_V \int_{\Omega(r \neq 0)} e(F(x_0), F(x), r) dx_0 dr \quad (3)$$

ここで V は材料の体積を表す。また、 r は x_0 から x へのベクトルである。 $e(x_0)$ は一般的にその物体点 x_0 での変形勾配だけでなく、物体点周りの領域 Ω 中の変形勾配にも依存する。 Ω の大きさは、均一な結晶の場合、原子間相互作用の有効範囲によって決まる。尾方らの解析では、この有効範囲は面心立方金属で 2 ~ 3 原子層、体心立方金属で 8 ~ 9 原子層程度と見積もられている⁽⁴⁾。本解析で対象とするダイヤモンドは単一元素からなるため長距離のイオン性結合を持たず、かつ電子が局在した共有結合であるため、有効範囲は高々 2 ~ 3 原子層である。例えば、ダイヤモンドの解析に使用されている、経験的 Tersoff ポテンシャル⁽⁸⁾ では、ポテンシャルのカットオフ距離を 3 Å 程度にしていることからも理解できる。よって、3 Å に対して十分大きなスケールの現象を解析対象とする場合には、物体点のひずみエネルギーは、その物体点の変形勾配のみの関数と考えても差し支えない。これをここでは局所連続体近似と呼ぶ。

$$\int_{\Omega(r \neq 0)} e(F(x_0), F(x), r) dr \simeq e(F(x_0)) \quad (4)$$

この近似の下では次式のように、各物体点での変形勾配に起因する物体点のポテンシャルエネルギーの増加分 $\Delta U(F(x_0))$ によって全体のひずみエネルギーが記述できる。

$$E_{\text{tot}}^{\text{strain}} \simeq \int_V e(F(x_0)) dx_0 = \int_V \Delta U(F(x_0)) dx_0 \quad (5)$$

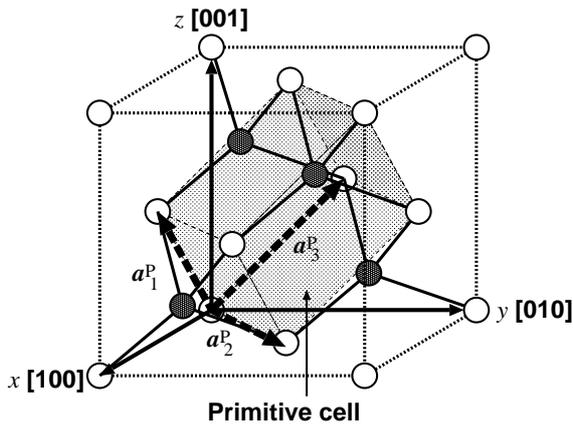


Fig. 1 Crystal coordinates and primitive cell of diamond lattice.

本手法では Cauchy-Born 則⁽⁹⁾を適用し、物体点の変形を原子配列のアフィン変形に置き換えることによってポテンシャルエネルギーの増加分を求める。Cauchy-Born 則の適用は、結晶の基本単位格子ベクトル \mathbf{a}_n^P ($n = 1, 2, 3$) を $\mathbf{a}_n^{P'}$ ($n = 1, 2, 3$) へ変形勾配を用いて次式で変換することに対応する。このように局所連続体近似の下で連続体と結晶構造を対応づける方法をここでは局所擬似連続体法と呼ぶ。

$$\mathbf{a}_n^{P'} = \mathbf{F} \mathbf{a}_n^P \quad (6)$$

本解析では、この結晶のアフィン変形によるポテンシャルエネルギーの増分を第一原理密度汎関数法によって見積もる。また、局所擬似連続体に対する数値力学解析は有限要素法によって実現する。

3. 計算手法

3.1. 第一原理密度汎関数法計算

第一原理計算法として、一般化密度勾配近似⁽¹⁰⁾ (GGA: Perdew-Wang らにより提唱された形) された密度汎関数法を用いる。電子の波動関数を平面波により展開し、電子と原子の相互作用はウルトラソフト擬ポテンシャル⁽¹¹⁾を用いて表現する。具体的には計算コード VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package⁽¹²⁾⁽¹³⁾)を用いて計算を行う。以下に示すダイヤモンドに対する計算では、ブリルアンゾーン内の積分を $5 \times 5 \times 5$ の Monkhorst-Pack の k 点メッシュ⁽¹⁴⁾によって実行し、平面波のカットオフエネルギーを 358.2 eV と設定する。また、計算対象モデルであるスーパーセルには炭素原子 2 個を含むダイヤモンドの基本単位格子を採用する(図 1 参照)。本計算条件で、計算される格子定数の実験値との誤差は 1% 程度、せん断弾性定数も 3% 程度と極めて高い精度を実現している。本第一原理計算法を用いて、有限要素法で与えられる変形勾配から単位体積あたりのポテンシャルエネルギー増加を求め、さらにそれから内部応力を計算する。応力を定義する座標系は図 1 に示した結晶座標系にとる。

3.2. 有限要素計算

有限要素解析には、ABAQUS/Standard (V6.4.1, 2004) を

用いる⁽¹⁵⁾。ABAQUS には、ユーザサブルーチンによって、構成関係式をカスタマイズできる機能がある。本解析ではこのユーザサブルーチンを作成し、本手法を ABAQUS 上で実現する。作成するユーザサブルーチンでは、入力される変形勾配 \mathbf{F} に対して、応力 $\boldsymbol{\sigma}$ と接線係数 $\mathbf{J} = \Delta \boldsymbol{\sigma} / \Delta \boldsymbol{\epsilon}$ を出力する。本手法では、与えられた変形勾配に対する応力のデータを、後に説明する第一原理計算法を用いて構築されるデータベースから検索し、さらには接線係数を算出した上で、これらを合わせてサブルーチンの出力とする。

サブルーチン内での具体的な計算は以下のとおりである。まず、本サブルーチンには、有限要素プログラムから、要素の変形に対応する変形勾配 \mathbf{F} が入力される。サブルーチン内で、変形勾配 \mathbf{F} を、回転テンソル \mathbf{R} と右ストレッチテンソル \mathbf{U} に極分解する。

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \mathbf{U} \quad (7)$$

第一原理計算を行う座標系を固定し、モデルの結晶方位を任意に選べるようにするためには、モデルの座標系から第一原理計算を行う座標系へ回転 \mathbf{Q} を施す必要がある。

$$\mathbf{U}' = \mathbf{Q} \mathbf{U} \mathbf{Q}^T \quad (8)$$

この変換後の右ストレッチテンソル \mathbf{U}' に対応する応力 $\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{U}')$ を、第一原理計算法によって構築した応力のデータベースから求める。そして、得られた $\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{U}')$ に対し、座標変換 $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{R}^T \mathbf{Q}^T \boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{U}') \mathbf{Q} \mathbf{R}$ を施し、モデルの座標系上での応力と接線係数に変換した上で、有限要素プログラムに引き渡す。

3.3. 学習型データベースの構築

本手法で最も計算時間を要するのが各ストレッチテンソルに対する応力の第一原理計算である。そこで、計算の高速化のために、一度求めた応力はデータベースとして蓄積し、繰り返し利用することを考える。2 節に記したように、対称テンソルである右ストレッチテンソル \mathbf{U} の 6 つの独立な成分を離散化し、6 次元の離散空間メッシュを作成する。そして、そのメッシュ点それぞれに第一原理計算によって評価された応力 6 成分を割り当て、これをデータベースとする。実際に必要な応力は離散化した点からの線形補間によって求める。本研究では、メッシュ間隔として、1% を採用する。線形補間には、各次元ごとに隣接するメッシュ上の応力が必要となるため、 2^6 個 (= 64 個) の隣接したメッシュ点上の応力を計算しておく必要がある。以前の計算で既に利用されたメッシュ点では応力が既にもとまっており、これがそのまま利用できるため、第一原理計算はこの 64 個のメッシュ点の内、いまだ計算に利用されていないものに限り新たに実行することで足りる。

解析の初期段階では、データベースの蓄積が不十分であり、多くの第一原理計算を必要とするが、解析が進むにつれデータベースが充実し、必要とする第一原理計算の回数が減り、その結果、計算時間が短縮される。また、データベースが充実した状態では、非線形有限要素計算で必要な繰り返し収束計算や、有限要素計算での要素数が増えても、同じデー

タを何度も参照することになるため、必要とする第一原理計算の回数はほとんど増加しない。

データベース化のもうひとつの利点は、それを主として構築した研究者だけでなく、同時に複数の研究者がアクセスできる場所に置くことで、グループとしての作業効率を上げることが可能な点にある。例えば、得られたデータベースを集中管理するサーバに置き、複数の研究者によって構成されるグループのメンバー全員が、参照およびデータ登録できる環境を作る。これにより、データベースへの登録の計算を分散することができるとともに、他の研究者が計算し登録したデータを、別の研究者がリアルタイムに利用することが可能となる。

3.4. 学習型データベースのデータ量の削減

多くの結晶は、対称性を有するため、これに基づくデータベースの削減が可能である。ダイヤモンドのように、基本格子が立方構造の場合、3つの基本格子ベクトルは等価であり、 x, y, z の三軸を交換してできる応力-ストレッチテンソル関係はすべて等価である。この関係を利用し、以下に示すダイヤモンドに関する計算では必要なデータベースを1/6に削減している。

3.5. 内部自由度がある系への拡張

例えばダイヤモンドは、面心立方構造を持つ2つの副格子によって構成されており、その相対位置ベクトルは、基本単位格子を規定する3つのベクトルを基底ベクトルとすると(0.25, 0.25, 0.25)であり、格子全体のひずみとは独立である。よって、あるひずみを与えた状態で、最も自由エネルギーが低くなるように、この相対位置(内部自由度)を最適化する必要がある。その際問題なのが、最適化計算の初期値依存性である。最適化計算を始める初期相対位置ベクトルによっては、最安定状態でない準安定状態に収束してしまう可能性がある。これをできるだけ回避するため、初期相対位置ベクトルを、基本セル内でいくつか用意し、そこから自由エネルギー最適化計算を実行し、最も低い自由エネルギーに収束した場合の応力値を、データベースに登録する。ダイヤモンドの場合では、この初期相対位置ベクトルに以下に示す8ケースを考えた。(0.25, 0.25, 0.25), (0.29, 0.29, 0.29), (0.21, 0.21, 0.21), (0.29, 0.29, 0.13), (0.46, 0.46, 0.46), (0.42, 0.50, 0.42), (0.54, 0.46, 0.38), (0.46, 0.38, 0.46)。ただし、基底ベクトルは基本単位格子を規定する3つのベクトルである。なお、この8ケースの相対位置ベクトルは、事前の様々なひずみ下の第一原理原子構造安定化計算結果から経験的に決定した。

3.6. 並列分散計算による高速化

本手法での計算速度の律速因子は、データベース構築時に必要な多数の第一原理計算であり、手法全体の高速化には、この部分の高速化が最も効果的である。特に内部自由度を有する結晶の場合は、3.5節に記したように多くの計算ケース数を必要とすることから、この傾向は一層強まる。

これらの一連の第一原理計算に際しては、各ケースが独立に扱えることから、複数プロセッサを用いて並列実行を行

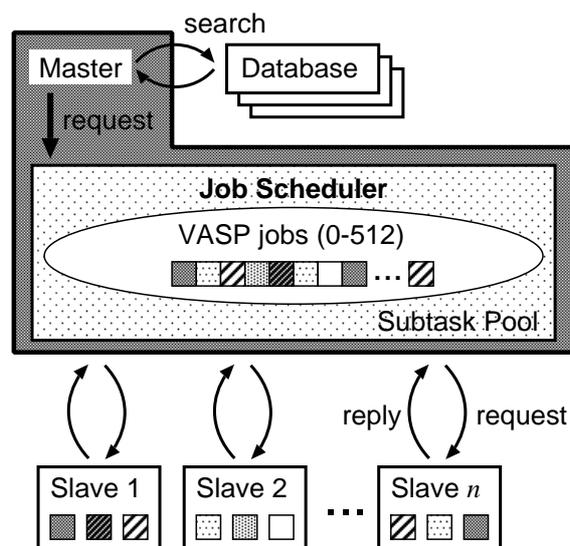


Fig. 2 Parallel task execution based on the master-slave model.

い高速化を図ることが可能である。このようなタスク単位による粗粒度の並列化においては、通信量が相対的に小さく抑えられるため並列性能にとっては有利に働く一方、負荷均衡(ロードバランス)に偏りが見られる場合はプロセッサ全体が有効に活用されずに並列化効率が抑制されることが多い。特に、第一原理計算による構造最適化においては、最安定状態に収束するまでに要する反復数は初期値に強く依存することから、各ジョブの負荷にはばらつきが存在する。このことは、負荷の少ない処理を担当したプロセッサに待ち時間が生じ、全体として並列性能が低減する要因となる。

そこで本研究においては、ジョブスケジューラを活用したタスクプール方式の並列化を採用することで、負荷分散を動的に行い、各プロセッサにおける負荷均衡を保つことに努めた(図2)。この方式では、必要となる64点の応力 σ の内、データベースに登録されていない σ のみを対象として、解析管理プロセッサ(マスター)が第一原理計算ジョブ群を単一キューのタスクプールに挿入する。そしてジョブスケジューラが空いたプロセッサに対してジョブを動的に割り当てることにより、全体としてマスター・スレーブ型の並列処理が実現される。本方式では、各ジョブの負荷およびプロセッサ性能が不均一であっても負荷分散が自動的に行われる利点があり、間断なく、空いたプロセッサで必要な第一原理計算を実行させることが可能となる。上述のように、結晶が内部自由度を持つ場合は、1組の応力-ひずみ関係を求めるに際して8種類の異なる初期値からの計算を行うため、最大512ケース(=64×8)の第一原理計算の試行を必要とする。スレーブ数 n が512に対して十分小さい場合では、各プロセッサに割り当てられる負荷のばらつきが平準化されるため、この並列分散処理手法を用いることで n の増加に対してほぼ線形に計算時間が短縮される。

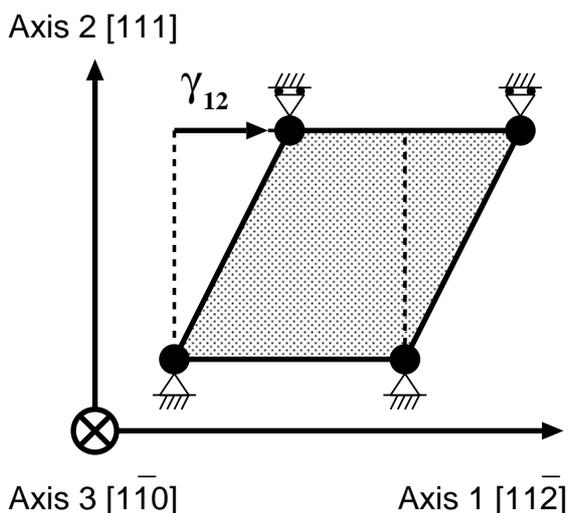


Fig. 3 Calculation element and boundary conditions for a diamond crystal.

4. 解析

4.1. ダイヤモンド単結晶の理想強度

以上の手法を用い、ダイヤモンド単結晶のすべり面 (111) 面内の $[11\bar{2}]$ 方向に、せん断ひずみを与えた場合の解析を行い、ダイヤモンドのせん断理想強度の評価を行った。

結晶の $[11\bar{2}]$, $[111]$, $[1\bar{1}0]$ 方向に 3 つの軸を取った立方体モデルを、同じ形状の 3 次元 8 節点 1 次要素 1 個で表現する。図 3 に示すように、この立方体の (111) 面の $[11\bar{2}]$ 方向に、工学せん断ひずみ γ_{12} を与える。ここですべての節点でせん断方向以外の変位を拘束する。

工学せん断ひずみ γ_{12} に対するせん断応力 σ_{12} の関係を図 4 に示す。図には本手法を用いた結果に加え、直接第一原理計算でせん断変形解析を実施した結果と線形弾性論に基づく構成式を用いた結果も示している。本解析がデータベースを介してリファレンスとしている第一原理計算の結果と、本手法による結果が一致しており、データベースが正常に機能していることを示している。

本手法および第一原理計算による結果は、ひずみが 5% を超えたあたりから強い非線形性を呈するようになり、このひずみ領域ではもはや線形弾性論が有効でないことがわかる。ただし、材料はまだ弾性的に変形しており、せん断負荷を除くと、もとの形状を回復する。

せん断変形をさらに続けると、応力はやがて最大値に達し、その後減少を始める。これは、永久変形が始まったことを意味しており、その開始応力を理想最大せん断応力と定義する。本手法を用いた場合、理想最大せん断応力は、約 32% のひずみで得られており、その値は 110 GPa である。直接第一原理計算による結果 101 GPa と比較すると、約 9% の誤差である。このように理想強度を非経験的に評価できるのが本手法の大きな特徴のひとつである。当然ではあるが線形弾性論ではそれが評価できない。この誤差は、本手法で得た応力-ひずみ曲線の微小なばらつきに起因している。これは、応力

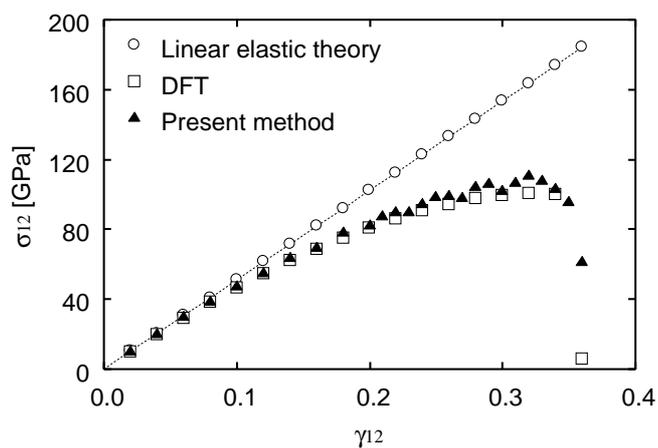


Fig. 4 Stress-strain relation under shear deformation of a diamond crystal. Triangles and squares represent the data obtained from the present method and density-functional-theory (DFT) calculations, respectively. For comparison, the data from the linear elastic theory are indicated as circles.

を応力-ひずみデータベースから線形補間で数値的に求めていることによるものである。よって、計算時間を問わなければ、データベースの離散値の間隔を細かくするか、高次の補間法などの高精度な補間方法を用いることで、誤差を減らすことは可能である。

4.2. データベース化による高速化の検討

同じく、ダイヤモンドによるせん断変形を通じて、データベース化による高速化の確認を行った。今回の計算で用いたシステムは、Linux 環境下において、デュアルコアを搭載した Intel® Pentium® D Processor 840 (3.20GHz) を 4 個使用している (計 8 PE (Processing Element))。データベース更新、ジョブスケジューリング等の解析管理および有限要素計算 (ABAQUS) のために 1 PE を使用し、残り 7 PE をデータベース構築のための第一原理計算 (VASP) に割り当てた。また、VASP コードや ABAQUS のユーザサブルーチンについては、Intel® FORTRAN Compiler 7.1 によりオブジェクトコードに変換している。

データベースの構築前と構築後の状態で、それぞれ 4.1 節と同じ方向に 10% のせん断ひずみを与えたモデルに対して本手法を適用し、所要計算時間を調べた。まず、データベースによる高速化のみを評価するために、第一原理計算に割り当てる PE 数を 1 としている (図 5)。データベース構築前において、応力値を第一原理計算から都度取得する場合は 31,683 秒を要するのに対し、データベース構築後は同解析が 42 秒に短縮され、754 倍の高速化が図られることが確認できた。ここで両者の差は、応力-ひずみデータベースを構築するために要する第一原理計算群の処理時間に相当する。3.6 節で述べたように、1 組の応力-ひずみ関係を求めるに際して 512 ケースの第一原理計算を必要とすることから、本過程において第一原理計算 1 ケース当たりの所要時間は 61.8 秒と見積もられる。それに対して応力-ひずみデータベース

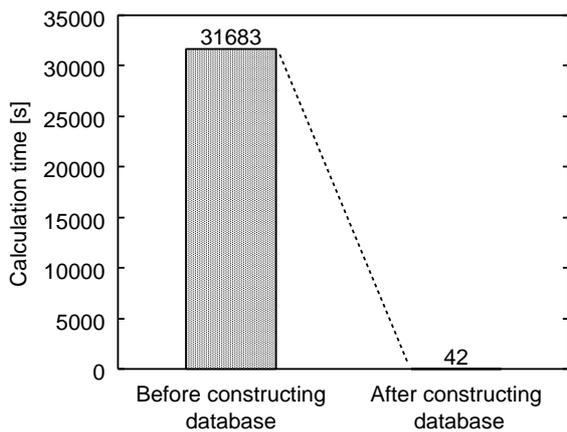


Fig. 5 Calculation time for a shear deformation analysis, before and after constructing the stress-strain database.

を利用する場合は、データベースが格納されている記憶装置へのアクセスと補間計算に要する時間のみで済むため、第一原理計算と比較して無視できるほどの所要時間となる。

本解析手法では、データベースへのヒット率が低く多数の第一原理計算の呼び出しを必要とする初期段階がオーバーヘッドとなるが、これらの第一原理計算群については上述の並列分散処理手法によりタスク分割が行えるため、本オーバーヘッドはPE数を増加させることでほぼ線形に減少した。

データベースの構築の前後における速度比は754倍に上ることから、並列分散処理による効果以上に、学習を終えた後のデータベースを利用することの利点は大きい。特に多数の要素からなる実際の有限要素計算モデルでは、隣接する要素は類似のひずみ状態（応力状態）になっている場合が多く、ある要素のひずみ状態に対して構築されたデータベースが、その他の要素の計算にも利用できる。そのため、非線形有限要素解析における収束計算の初期段階から、データベース化の効果が期待できる。

5. 結言

結晶内部自由度を有する単結晶の弾性非線形大変形問題を高精度かつ現実的な時間で計算できる第一原理密度汎関数法に基づく局所擬似連続体法を提案した。局所擬似連続体に対する数値計算法としては有限要素法を適用し、高速化手段には学習型データベースの適用および並列化計算を取り入れた。そして、この手法をダイヤモンド単結晶のせん断変形解析に適用し、解析精度ならびにその計算速度を評価した。

参考文献

- (1) S.Ogata, J.Li, S.Yip: Ideal Pure Shear Strength of Aluminum and Copper, *Science*, **298**(2002), pp. 807–811.
- (2) S.Ogata, J.Li, N.Hirosaki, Y.Shibutani, S.Yip: Ideal Shear Strain of Metals and Ceramics, *Phys. Rev. B*, **70**(2004), pp. 104104-1–104104-7.
- (3) M.I.Eremets, I.A.Trojan, P.Gwaze, J.Huth, R.Boehler, V.D.Blank: The strength of diamond, *Appl. Phys. Lett.*, **87**(2005), pp. 141902-1–141902-3.
- (4) 尾方成信, 磨矢一晃, 渋谷陽二: 第一原理密度汎関数法に基づく局所擬似連続体法, 日本機械学会論文集 A 編, **71**(2005), pp. 1653–1658.
- (5) 例えば, T.Zhu, J.Li, K.J.Van Vliet, S.Ogata, S.Yip, and S.Suresh: Predictive Modeling of Nanoindentation-Induced Homogeneous Defect Nucleation in Copper, *J. Mech. Phys. Solids*, **52**(2004), pp. 691–724.
- (6) M.Fago, R.L.Hayes, E.A.Carter, and M.Ortiz: Density-Functional-Theory-Based Local Quasicontinuum Method: Prediction of Dislocation Nucleation, *Phys. Rev. B*, **70**(2004), pp. 100102-1–100102-4.
- (7) R.L.Hayes, G.Ho, M.Ortiz and E.A.Carter: Prediction of Dislocation Nucleation during Nanoindentation of Al₃Mg by the Orbital-Free Density Functional Theory Local Quasicontinuum Method, *Phil. Mag.*, **86**(2006), pp. 2343–2358.
- (8) J.Tersoff: Empirical Interatomic Potential for Silicon with Improved Elastic Properties, *Phys. Rev. B*, **38**(1998), pp. 9902–9905.
- (9) J.L.Ericksen: Phase Transformations and Material Instabilities in Solids, (1984), Academic Press, New York.
- (10) J.P.Perdew, J.A.Chevary, S.H.Vosko, K.A.Jackson, M.R.Pederson, D.J.Singh, C.Fiolhais: Atoms, Molecules, Solids, and Surfaces: Applications of the Generalized Gradient Approximation for Exchange and Correlation, *Phys. Rev. B*, **46**(1992), pp. 6671–6687.
- (11) D.Vanderbilt: Soft Self-Consistent Pseudopotentials in a Generalized Eigenvalue Formalism, *Phys. Rev. B*, **54**(1990), pp. 7892–7895.
- (12) G.Kresse, J.Hafner: Ab-initio Molecular Dynamics for Liquid Metals, *Phys. Rev. B*, **47**(1993), pp. 558–561.
- (13) G.Kresse, J.Furthmüller: Efficient Iterative Schemes for Ab-initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set, *Phys. Rev. B*, **54**(1996), pp. 11169–11186.
- (14) H.J.Monkhorst, J.D.Pack: Special Points for Brillouin-Zone Integrations, *Phys. Rev. B*, **13**(1976), pp. 5188–5192.
- (15) ABAQUS Version 6.4, Hibbit, Karlson, and Sorensen Inc, (2004).