

固体材料解析における分子動力学とマクロ粒子法の接点

齋藤賢一, 赤木一太*, 岡田武史**

関西大学 システム理工学部 機械工学科

*大学院 理工学研究科, **システム理工学部 (学生)

Abstract : In this report, we are discussing on combination methodology between macroscopic and microscopic particle methods used in computational mechanics of solid materials. In the first part, we review some “multi-scale” methods where the atomistic simulation is conducted together with another macroscopic/mesoscopic computation or concept, such as FEM-MD(molecular dynamics) or QC method. In the second part, we introduce, as a macroscopic particle method, smoothed particle method (SPH) and point out current problem on it. In the third part, we propose and formulate a hybrid method between MD and SPH methods, i.e. SPH-MD. The hybrid method is applied to the model of nanoindentation of metal. The affinity between MD and SPH is good. We found that sophisticating as for stress-strain relation in SPH region based on MD properties is very effective.

1. はじめに

材料開発により生み出される新しい材料はその強度や機能の評価とその発現機構の理解を伴ってはじめて健全な実用化が為される。近年、バルクナノガラスや強加工により高靱化された金属材料が開発されてきているが、その好ましい特性の発現メカニズム自体が未知のまま利用に供されるケースが多い。そこで、数値シミュレーションによって予め材料挙動を予測し、背景に隠れているメカニズムの解明を行うことが必須となりつつある。数値的手法として、ミクロ（原子・分子）とマクロ（連続体）のアプローチが各々あり、機械設計パラメータなどの実用に直接関連するのは後者となるが、基本的なメカニズム発現は前者に基づいている。よって、固体材料を双方向から眺めることのできる数値モデリング/シミュレーション、すなわちマルチスケールモデリング/シミュレーションへの期待が高まる⁽¹⁾。

その一方で、基礎となる力学理論においてはミクロマクロ間の大きな溝があり、統計熱力学における Boltzmann 定数に代表される時間・空間スケールの開きに対応したスケールリング因子を導入しなければ、その溝に橋渡しがなされない。原子・

分子の離散系とマクロ連続系という相互に相容れない数学的モデルに対する最近の解決案が、マクロ系における離散粒子モデル、すなわち、粒子法によるメッシュレス的扱い方とそれとシームレスに繋がることのできる分子シミュレーション（分子動力学法：MD）との連携である。著者らのグループでは、そのような考えで構築したハイブリット型粒子法を開発しており⁽²⁾、本稿ではその結果を示していく。なお、それに先立ち、最近までの固体材料におけるマルチスケール解析の動向を若干レビューする。

2. 材料のマルチスケール解析の方法のレビュー

材料強度や力学的機能は材料構造と強い関連があり、その構造自体には階層性という特徴がある。原子スケールでの力学解析と連続体仮定によるマクロ力学解析との連携、さらにその間を埋めるメゾ構造の解析の利用も含めたい手法、いわゆるマルチスケール解析の検討が精力的に行われている。均質化法のように、(a)スケール下層での物性の情報を上層で必要な計算パラメータとして吸い上げる方法、(b)原子と連続体の領域を各々に分けて、コンカレントに（同時に）解析する方法、(c)統計

力学の位相空間で繰込み的理論や確率論を用いるもの、など多種多様で、優れたレビューもある⁽³⁾が、ここでは手法・方法の幾つかを紹介する。詳細は関連資料を参考にされたい。なお、時間方向についてのマルチスケール化（長期化、高速化）でも興味深い検討が進んでいる⁽⁴⁾が、ここでは割愛する。

[1]CLS(Coupling of Length Scale)⁽⁵⁾: 各スケールの手法をハミルトニアンで定式化して重ね合わせた系を設定し、各領域の運動方程式を求めて解析する。FEM（有限要素法）-MD-タイトバインディング（量子的計算）の同時解析も可能である。

[2]QC(Quasi-Continuum)法⁽⁶⁾: 連続体メッシュの中に原子構造を埋め込む。FEM 解析ならばその節点位置に選択された原子が配置し、原子間ポテンシャルから導かれる剛性方程式（力のつり合い式）が求められる⁽⁷⁾。

[3] VAC(Virtual Atomic Cluster)法⁽⁸⁾: エネルギー等価の原理とスケール間の投影原理⁽⁹⁾を用いている。クラスター型原子構造を連続体に仮定して変分原理で解く。原子間相互作用はクラスター内での相対的なものであり、計算ノードと実際の原子位置は一致せずとも良い。Non-local QC が類似していて、MD 法に近い。

[4] CGMD(Coarse-grain MD)⁽¹⁰⁾: MD の粗視化を行う。MD の原子間ポテンシャルを粗視化すること、統計力学原理を用いて原子運動を粗視化することが行われている。

[5] MD-FEM のハイブリッドの方法: き裂等を有する MD 領域と境界条件を与える FEM 領域に分けて、その連結（遷移）領域で変位や力のカップリングを行う^{(11),(12)}。

[6] MD-SPH のハイブリッドの方法: MD-FEM 同様に、MD と SPH の領域に分ける⁽¹³⁾。SPH ではメッシュがないので、MD も含めて粒子運動の時間発展を解くだけでよい⁽¹⁴⁾。

[7] その他: MD-タイトバインディング-第 1 原理計算⁽¹⁵⁾、フェーズフィールド-MD⁽¹⁶⁾、”Partition of Unity”の方法⁽¹⁷⁾、CGPM(Coarse-grained particle method)⁽¹⁸⁾および CGPM-MD⁽¹⁹⁾などがある。

3. マクロ粒子法の現状

3.1 SPH 法による固体材料の挙動解析

SPH(smoothed particle hydrodynamics)法⁽²⁰⁾では FEM での節点の代わりに粒子点（評価点）をおくため、要素の概念が無いメッシュレスであるが、

粒子間にカーネル関数（内挿関数）を設定することで連続体近似を行う。物理量 $A(\mathbf{r})$ は、カーネル関数 $W_{ij}(\mathbf{r})$ を用いることで、

$$A(\mathbf{r}) = \int A(\mathbf{r}')W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)d\mathbf{r}' \quad (1)$$

$$\approx \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b, h)$$

として表現される。質量保存式、運動量保存式を同時に解く際、状態方程式や構成方程式（応力-ひずみ関係）を加えることで、各粒子点の運動（密度、位置や速度）と力（圧力や応力）を求める。固体に用いられる質量保存式、運動方程式の離散化表現は式(2),(3)のようになる。

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_{j=1}^N m_j \mathbf{v}_{ji} \cdot \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (2)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\rho_i^2} + \frac{\boldsymbol{\sigma}_j}{\rho_j^2} - \boldsymbol{\Pi}_{ij} \right) \cdot \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (3)$$

ここで、 $\boldsymbol{\sigma}_i$, ρ_i , m_i は i 粒子の応力テンソル、密度、質量であり、 $\boldsymbol{\Pi}_{ij}$, \mathbf{v}_{ji} , W_{ij} は i, j 粒子間の人工粘性、速度差ベクトル、カーネル関数値である。

3.2 回転を伴う材料挙動

そもそも応力とは微小領域に生じる表面力の概念を持ち、無限小の扱いながら領域中心と表面には距離がある。よって、他粒子との相互作用によるせん断応力で回転トルクが生じ得るが、普通、SPH では回転については解かない。この原因から、Hoover らは、SPH の応力を用いた運動方程式(3)で回転物体を計算すると、角運動量保存則が満たされなくなることを指摘した⁽²¹⁾。そこで、赤木らは Hoover らのトルクスケーリングと呼ばれる修正方法で角運動量を保存させ、物体の継続的な回転が可能なることを示した⁽²²⁾。図 1 は円柱状物体 (Al の弾塑性体) を回転させたときの、上記の修正の有無を比較したものである。修正を加えないと SPH 粒子 (左) と剛体 (右: 回転中) の間で破壊する。修正を加えると SPH 粒子配置に乱れが増すものの、全体の回転は継続する。図 2 はその際の材料全体の相当応力の変化を比べており、高い応力状態になりつつ修正されていることが示されている。この非物理的な高応力状態が生じることについて今後検討が必要である。また、偶応力を設定して(3)式を修正し、構成式レベルで回転運動を組み込んで解くことにも検討の余地がある⁽²³⁾。

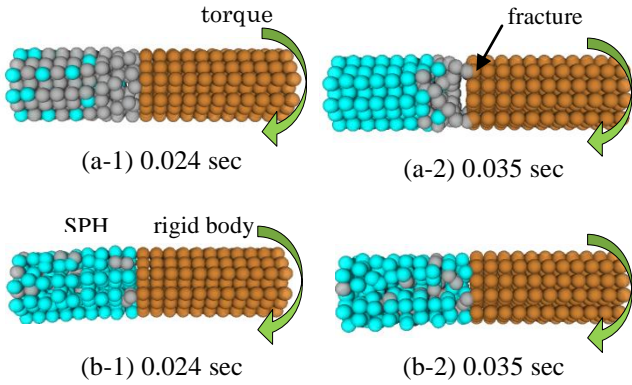


図1 SPHによる回転体の解析 (回転数=100 rad/s. (a-1,a-2)修正無し, (b-1,b-2)修正有り, での粒子配置のスナップショット)

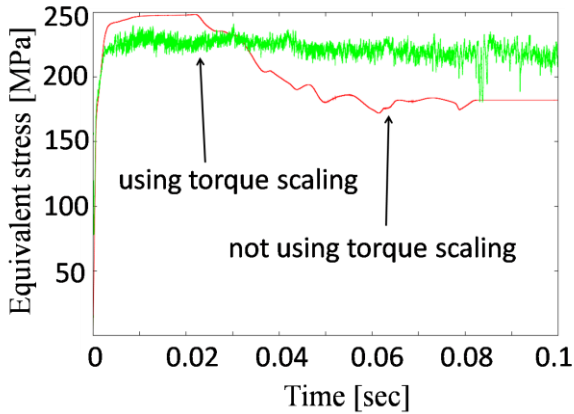


図2 SPHによる回転体の解析での相当応力変化 (応力には細かい振動が伴う. 角運動量の制御は高い応力状態で可能となる.)

4. 分子動力学 (MD) - SPHハイブリッドの方法による解析例

4.1 ハイブリッド計算のための定式化

上述のように, ミクロ粒子 (原子) を扱う MD 法とマクロな粒子法である SPH 法を結合する. そもそも, 両手法とも離散粒子を動力的に扱う方法なので, 計算実装や初期配置などの設定における親和性は非常に高い. ここでは双方をコンカレントに解くことを指向する. 図3のように, MD 領域と SPH 領域に粒子系を分ける. 両領域ともに粒子間の近接相互作用による運動方程式を解くことになるので, 間に遷移領域ができる. よって, MD 原子と SPH 粒子の間の相互作用評価に際して, 力の橋渡し (Force-Bridging) の方法⁽¹³⁾を採用する.

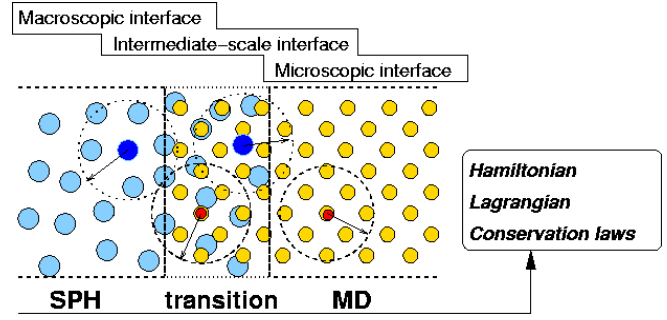


図3 MD-SPH ハイブリッドシミュレーション: Force-Bridging (力の橋渡し)の方法の概念

$$\begin{aligned}
 \text{(MD): } \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{N_{md}^{md}} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}_i} \\
 &+ \sum_{j=1}^{N_{sph}^{md}} m_j \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\rho_i^2} + \frac{\boldsymbol{\sigma}_j}{\rho_j^2} - \Pi_{ij} \right) \cdot \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (4) \\
 \text{(SPH): } \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \sum_{j=1}^{N_{sph}^{sph}} m_j \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\rho_i^2} + \frac{\boldsymbol{\sigma}_j}{\rho_j^2} - \Pi_{ij} \right) \cdot \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \\
 &+ \sum_{j=1}^{N_{md}^{sph}} m_j \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\rho_i^2} + \frac{\boldsymbol{\sigma}_j}{\rho_j^2} - \Pi_{ij} \right) \cdot \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (5)
 \end{aligned}$$

結果として, MD 原子と SPH 粒子の運動方程式は, 各々式(4),(5)のようにする. ここで, \mathbf{v}_i は各粒子の速度, r_{ij} は粒子間距離, $\phi(r_{ij})$ は MD の原子間ポテンシャルである. N_{md}^{md} と N_{sph}^{md} はある原子 i が相互作用する MD 原子数と SPH 粒子数であり, 逆に N_{sph}^{sph} と $N_{md}^{sph}(=N_{sph}^{md})$ はある SPH 粒子 i が相互作用する SPH 粒子数と MD 原子数である. 相互作用力における異種粒子からの寄与 (例えば, MD 原子の場合には隣接距離内部にある SPH 粒子からの相互作用力) は, 2 体間での作用反作用の法則を満たすために当該の粒子間で, SPH→MD と MD→SPH の寄与同士でつりあわせるべきと考えられる. その力には, (A)MD のポテンシャルによる保存力, (B)SPH の粒子間力, (C)それらの平均力, をそれぞれ用いる 3 方法が存在し得るが, MD ポテンシャルの影響を入れると原子振動が陽に表現され, 比較的ゆったりとした振動をする SPH 粒子系での不安定性を誘発してしまう. そこで, MD-SPH 間の相互作用には(B)の SPH 粒子間力を採用する. そのようにしても, 構造内での応力分布やその伝達, 全体の振動モードを表現することは十分に可能であることが確かめられている⁽²⁾.

4.2 ナノインデンテーションのモデル

硬度の発現をミクロな視点から理解する、ナノインデンテーション試験が行われている. nm レベルの曲率を持った圧子を材料の表面に負荷荷重で押し込み、サブミクロン領域の硬さおよび塑性変形挙動を調べるものである。その計算モデルを MD-SPH ハイブリッドの方法で構築し、計算結果を検討した⁽²⁴⁾。被験材は fcc 構造を持つアルミニウムを想定する。図 4 のように、剛体の条件とした球圧子を一定速度 $v=5 \text{ m/s}$ で下降させる。圧子が接触する上層側には MD 原子を(010)面にて 8 層分配置し、下層側には SPH 粒子を 18 層分配置し、さらに SPH 領域のうち底部 4 層には変位 0 となる完全固定条件を課す。また、圧下方向(-y)に対して垂直方向(x,z)には周期境界条件を適用する。

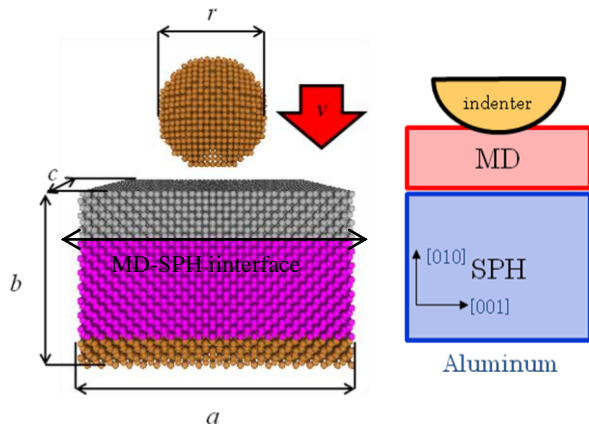


図 4 ナノインデンテーションの MD-SPH モデル

4.3 弾塑性構成式の導入と結果の検討

SPH 領域での材料モデルを MD 原子系の特性にできるだけ適合させれば、MD-SPH 間のずれが小さくなると予想される。過去に線形弾性体の SPH として計算したところ、変形が小さいときには良い一致を示した。しかし、MD 原子の領域が塑性変形挙動(すべり)や破壊(き裂)などを生じ始めると、MD-SPH 間の差異が顕著になり、それら界面での非物理的な(数値的/モデル的な)破壊が生じた。よって、今回は n 乗硬化則型の塑性構成式(ひずみ増分理論のもの)を用いる。まず、MD, SPH ともに 240 粒子系での単軸引張の計算を行い、そこでの応力-ひずみ線図をフィッティングし、表 1 のように SPH 用の降伏応力 σ_y と塑性係数(接線係数) F などの材料定数を得た。MD 側では仮想的な LJ ポテンシャルを用いるため、弾性係数の類の値は、実際の AI 材よりもかなり大きい値

となる。

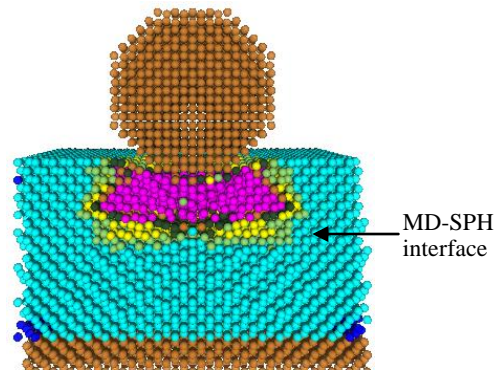
表 1 SPH 解析に要する材料定数(弾塑性)

$$\sigma_i = D^e(E, \nu) \varepsilon_i \quad (J_2(\sigma'_i) < \sigma_y^2/3 : \text{elastic})$$

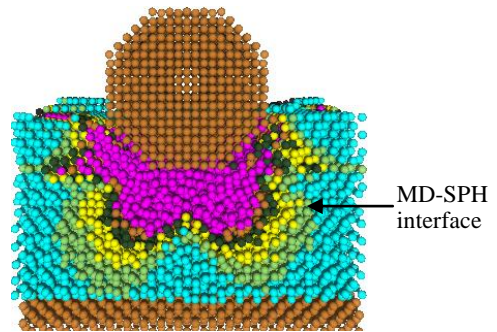
$$\sigma'_i = D^{ep}(E, \nu, F, (\varepsilon_i)^n) d\varepsilon_i \quad (J_2(\sigma'_i) \geq \sigma_y^2/3 : \text{elastic-plastic})$$

(J_2 : the 2nd invariant of deviatoric stress tensor)

parameter	unit	value
Young's modulus E	GPa	311.1
Poisson's ratio ν	-	0.361
work hardening index n	-	0.3605
yield stress (uniaxial) σ_y	GPa	7.002
plastic coefficient $F (g_i^{-1})$	GPa	56.47



(a) 圧子が表面に接触したとき(下降開始 200ps 後)



(b) 圧子が MD 領域内部に侵入した後(下降開始 350ps 後)

図 5 ナノインデンテーション時の相当応力分布

図 5 は圧子接触時(a), 進入時(b)の相当応力分布である。表面から 45° の角度をなしてせん断応力が最大になるが, fcc 構造のすべり面もそれに近い方位となっている。そのため, MD 領域ではその

方向に相当応力が高くなり、転位のすべりが生じている。また、応力増加は MD-SPH の界面を越えて SPH 側内部へ達している。しかしながら、MD 領域での転位構造は SPH 領域に入ることはなく、SPH 粒子自身が各々で硬化した塑性の挙動を示す。

図 6 は MD 領域と SPH 領域の応力値の時間変化を比較したもので、双方は比較的よく一致している。SPH 領域を線形弾性体としたときに、変形が進むにつれて各々大きく離れてしまうのが、MD 領域での性質を SPH の弾塑性として組み入れることで改善されている。

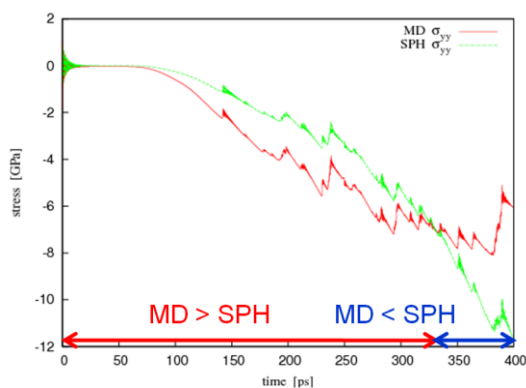


図 6 MD 領域と SPH 領域での圧子移動方向の応力（圧縮）の時間変化（変化の傾向は良く一致しており、お互いに交差するところで圧子が SPH 領域に達している。）

応力の伝達過程で、MD-SPH 界面上の MD 原子と SPH 粒子間での粒子位置にずれが生じるが、その方向に発生するせん断応力はほとんど 0 となっている。周期境界の影響、MD 領域で発生した転位構造の SPH 側での吸収メカニズムなどを今後吟味していく。

5. まとめと結論

本稿では、固体力学解析におけるマルチスケール手法のレビュー、SPH 法による回転物体の解析についての検討、MD-SPH のハイブリット手法によるナノインデンテーションモデルの検討について各々述べた。現在、急速に発展中であり、またロバスト性の高い各粒子法を、マルチスケールの枠組みの元で連携させ、有効に用いていくことが今後大きく期待される。

謝辞：本研究は、関西大学先端科学技術推進機構 SINET3 研究の一環として行われ、科学研究費補

助金(No.2156103)の支援を受けて行われた。ここに記し謝意を表す。

文献

- (1) W.K.Liu, E.G.Karpov, H.Park; Nano Mechanics and Materials-Theory, Multiscale Methods and Applications, (2006), Wiley.
- (2) 齋藤・新家; SPH-MD 結合シミュレーションによる材料界面の原子レベル解析", 日本計算工学会講演会論文集, Vol.10, (2005) pp.445-448.
- (3) J.Fish; Bridging the scales in nano engineering and science, J.Nanoparticle Res., Vol.8, (2006) pp.577-594.
- (4) A.F.Voter, F.Montalenti, T.C.Germann; Extending the time scale in atomistic simulation of materials, Ann.Rev.Mater.Res., Vol.32, (2002) pp.321-346.
- (5) J.Q. Broughton, F.F.Abraham, N.Bernstein, E.Kaxiras; Concurrent coupling of length scales: Methodology and application, Phys.Rev.,B, Vol.60, No.4, (1999) pp.2391-2403.
- (6) E.B.Tadmor, M.Ortiz, R.Phillips; Quasicontinuum analysis of defects in solids, Philos.Mag.,A, Vol.73, (1996) pp.1529-1563.
- (7) W.A.Curtin, R.E.Miller; Atomistic/continuum coupling in computational materials science, Model.Simul.Mater.Sci. Eng., Vol.11, No.3, (2004) R33-R68.
- (8) D.Qian, G.J.Wagner, W.K.Liu; A multiscale projection method for the analysis of carbon nanotubes, Comp.Methods Appl.Mech.Eng., Vol.193, No.17-20, (2004) pp.1603-1632.
- J.Knap, M.Ortiz; An analysis of the quasicontinuum method, J.Mech.Phys.Solids, Vol.49, (2001) pp.1899-1923.
- (9) W.K.Liu, H.S.Park, D.Qian, E.G.Karpov, H.Kadowaki, G.J.Wagner; Bridging scale methods for nanomechanics and materials, Comp.Methods Appl.Mech.Eng., Vol.195, No.13-16, (2006) pp.1407-1421.
- (10) T.Kinjo, S.Hyodo; Equation of motion for coarse-grained simulation based on microscopic description, Phys.Rev., E, Vol.75, (2007) pp. 051109.1-9.
- (11) P.Kohlhoff, P.Gumbsch, H.F.Fishmeister; Crack Propagation in b.c.c Crystals Studied with a Combined Finite-Element and Atomistic Model, Philos.Mag., Vol.64, No.4, (1991) pp.851-878.
- (12) 北川・中谷・渋谷; 結晶構造体に対する計算力学モデルの検討[III]モード II き裂先端場の原子構造の解析, 日本機械学会論文集 A 編, Vol.59, No.564, (1993) pp.1834-1841.

- (13) G.R.Liu and M.B.Liu.; Smoothed Particle Hydrodynamics; A Meshless Particle Method, pp.341, World Scientific 2003.
- (14) K.Saitoh; A Coarse Grain Molecular dynamics model of materials interface using SPH and DPD methods, Proceedings of 3rd International Conference on MMM, (2006) pp.518-521.
- (15) 釘宮・渋谷・P.Gumbsch; Tersoff ポテンシャル, TB 法, 第一原理計算によるシリコンき裂先端場の解析, 日本機械学会関西支部講演会講演論文集(第 76 回定時総会), (2001) pp.4.27-4.28.
- (16) M.Guerdane, F.Wendler¹, B.Nestler¹, H.Teichler; Crystal growth and melting in NiZr alloy: bridging the gap between molecular dynamics simulations and phase-field modeling, Fifth International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2010), (2010) pp.413-416.
- (17) J.Fish, Z.Yuan; Multiscale enrichment based on partition of unity, Int.J.Numer.Methods Eng., Vol.62, No.10, (2005) pp.1341-1359.
- (18) R.E.Rudd, J.Q.Broughton; Coarse-grained molecular dynamics and the atomic limit of finite element, Phys.Rev., B, Vol.58, (1998) R5893-5896.
- (19) R.Kobayashi, T.Nakamura, S.Ogata; Development and implementation of recursive Coarse-grained Particle Method for meso-scale simulation, Mater.Trans., Vol.49, No.11, (2008) pp.2541-2549.
- (20) 例 えば , J.J.Monaghan; Smoothed Particle Hydrodynamics, *Annu.Rev.Astron.Astrophys.*, Vol.30, (1992) pp.543-574. または, 越塚誠一, 粒子法, 丸善 2008.
- (21) W.G.Hoover, C.G.Hoover and E.C.Merritt; Smooth-particle applied mechanics: Conservation of angular momentum with tensile stability and velocity averaging, Phys.Rev.,E, Vol.69, (2004) pp.016702.1-10.
- (22) 赤木・齋藤・新家; SPH 法における回転を伴う物質間相互作用モデル, 日本機械学会講演論文集 (第 23 回計算力学講演会), (2010), CD-ROM(abstract)510. および, 赤木・齋藤・新家; SPH 法による回転運動を伴う材料挙動のモデリング, 第 15 回分子動力学シンポジウム, (2010) pp.76-77.
- (23) 大南; マイクロメカニクス入門, オーム社 1980.
- (24) K.Saitoh T.Okada and N.Shinke; Hybrid Simulation between Microscopic and Macroscopic Particle Methods: Application to Deformation and Fracture of Solid Materials, Fifth International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2010), (2010) pp.528.