

Active volume を用いた温度並列 Simulated annealing による メゾ時間スケール原子シミュレーション

Mesoscale atomistic simulation using temperature parallel simulated annealing with active volume

*早川 頌¹, 沖田 泰良², 板倉 充洋³

¹東京大学大学院工学系研究科, ²東京大学人工物工学研究センター, ³日本原子力研究開発機構,

Active volume による局所領域活性化過程探索と温度並列 Simulated annealing を組み合わせたメゾ時間スケールシミュレーション手法を開発した. 本手法を用いて, 照射欠陥集合体の安定形態への変換を原子スケールの精度を保持し且つ分子動力学計算で取り扱い可能な時間スケールを超えて再現した.

キーワード: Simulated annealing, 照射誘起欠陥, メゾ時間スケールシミュレーション

1. 緒言

原子炉構造材の特徴として照射欠陥の形成が挙げられるが, これらの拡散や他の欠陥との相互作用を通して材料中マイクロ組織は著しく変化し, その結果機械的特性の劣化が引き起こされる. 従って原子スケールの精度を保持した欠陥挙動の把握が必須であるが, そのために分子動力学 (MD) 計算を用いた欠陥挙動解析が従来多く行われてきた. 一方 MD 計算で再現可能な時間スケールは~ns オーダーであるため, MD 計算による知見に基づいて機械的特性劣化を議論するためには複数の時間スケールに跨るマルチスケールシミュレーションが求められる. 本研究では, Active volume (AV) を用いた活性化過程探索と温度並列 Simulated annealing (TPSA) 法を組み合わせたメゾ時間スケール欠陥安定形態解析手法を開発する (TPSA/AV). また開発手法をカスケード損傷後に形成された3次元形状の自己格子間原子 (SIA) 集合体に適用しその安定形態への変換を再現する.

2. 計算方法

TPSA 法は Simulated annealing (SA) 法の並列アルゴリズムであり, SA 法の問題点である温度スケジュール設定の難しさ, 計算コストを克服したものである[1]. また TPSA 法においては評価関数の設定と次ステップ解候補の生成プロセスを要するが, 今回の場合評価関数は系のポテンシャルエネルギー曲面 (PES) に相当し, 現実の物理現象に合った解候補の効率的生成のためにはその適切なアルゴリズムが求められる. 本研究では, Dimer 法[2]により実際の PES に基づいた正確な活性化過程探索を行い, さらに計算効率化のために AV を用いて探索領域を制限した上でより効率的に探索を行う[3].

3. 結果・考察

TPSA/AV により計算した3次元 SIA 集合体の形態変化の様子を系のエネルギー変化とともに図1に示す.

3次元形状から安定形態であるフランクループへと形態変化しており ((a)→(b)), さらにその後別の安定形態である完全転位ループへと変換している ((c)). さらにこれらの変換過程では初期状態と比べて比較的高エネルギー状態 (+ ~1.0 eV) を経ており, このことから MD 計算で再現可能な時間スケールを超えた変換プロセスを再現できていると言える.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17H03518, JP17KT0039, JP18J12324 の助成による.

参考文献

- [1] K. Konishi et al., IPSJ. 36 (1995) 797.
[2] G. Henkelman et al., J. Chem. Phys. 111 (1999) 7010.
[3] H. Xu et al., Phys. Rev. B 84 (2011) 132103.

*Sho Hayakawa¹, Taira Okita², Mitsuhiro Itakura³.

¹School of Engineering, Univ. of Tokyo, ²RACE, Univ. of Tokyo, ³JAEA.

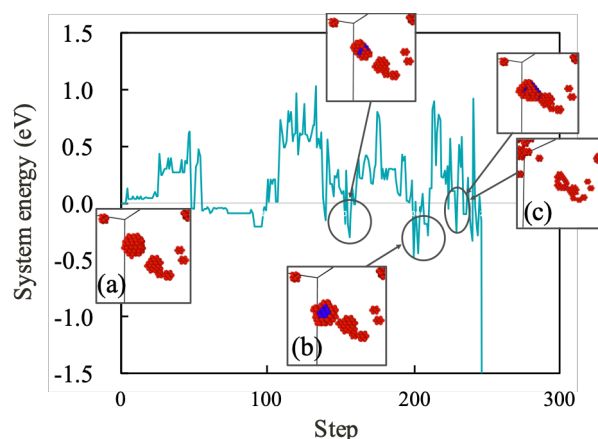


図1 系のエネルギー変化とそれに伴う欠陥形態変化の様子