

メソスケール現象モデル化のための分子動力学—有限要素法連成解析

MD-FEM coupling method for modelling mesoscale phenomena

*田川 秀明¹, 沖田 泰良¹, 板倉 充洋², 後藤 和哉³

¹ 東京大学, ² 日本原子力研究開発機構, ³ 合同会社 PExProCS

分子動力学 (MD) 法と有限要素 (FEM) 法の境界領域に二重解像度要素を配置する手法は, MD 法の精度を保ちつつ, 空間スケールを大幅に拡張できる連成解析法として期待されている. 同手法を設定した系の外力応答を解析し, MD 法のみの場合との比較においてその精度を検証した.

キーワード: 固体材料, 分子シミュレーション, マルチスケール

1. 緒言

照射脆化や局所化塑性変形等, 原子配列変化を伴う結晶性材料の理論的解析には分子動力学 (MD: Molecular Dynamics) に代表される原子論的分析が必要となるが, 課題として計算量の大きさが挙げられる. MD-FEM 連成解析は, 計算量に依る空間スケールでの課題を解決するために, 系の中でも原子配列が乱れている結晶欠陥の中心付近のみを MD により計算し, 周辺は有限要素法 (FEM: Finite Element Method) を適用することで, MD と材料挙動変化の観点で同等の精度を保ったまま計算量を大きく削減する手法である. この連成解析の方法の一つとして, 2 領域の境界に二重解像度要素 (DRE: Dual Resolution Element) を配置する手法は, 計算上の制約条件を大きく削除した汎用性の高い手法であると考えられる. 本研究では, DRE を実際に配置した系を用いて, 外力応答を解析し, MD 計算のみの系と比較により, その精度並びに計算速度を検証した.

2. 検証

MD-FEM 連成解析では, x 方向に中心付近を MD 領域, その他を FE 領域, さらに境界として DRE 領域を設定した $1000\text{\AA} \times 100\text{\AA} \times 50\text{\AA}$ の 3 次元計算セルにおいて x 方向に縦波振動を導入した時の挙動を解析した. なお, 導入振動の振幅は対象原子の格子定数の 0.2 倍とした. MD 計算のみの系では, 同じ大きさのセルにおいて, 計算速度とともに, 中心付近の原子の変位からその計算精度を比較した. 対象を Cu とし, MD 領域における原子間ポテンシャルとして既往研究[2]を, 更に FEM では同ポテンシャルの弾性定数を用いることで整合性を保った. また, 温度を 0.1K, タイムステップを $5.0 \times 10^{-16}\text{s}$ として Velocity Verlet アルゴリズムにより時間を進展させた.

3. 結果

DRE を用いた MD-FEM 連成解析は, MD のみの解析とほぼ同等の精度で, 計算量を大幅に削減できることが示された. 本技術を, 軽水炉圧力容器鋼等, 特に重要な原子炉機器に対して適用することにより, 劣化挙動をより精緻に把握することが期待される.

参考文献

[1] 藤田智, 東京大学博士論文 (2010), [2] S.M. Foiles et al., Physical Review B 37, 10378 (1988)

*Hideaki Tagawa¹, Taira Okita¹, Mitsuhiro Itakura² and Kazuya Goto³

¹University of Tokyo., ²Japan Atomic Energy Agency, ³PExProCS, LLC.