繰り込み変換分子動力学の開発（第1報）*

— 理 論 編 —

水谷 朋 貴** 武澤 伸 浩*** 稲村 豊 四 郎†

Development of Renormalized Particle Molecular Dynamics (1'st Report)
-Theory-

Tomotaka MIZUTANI, Nobuhiro TAKEZAWA and Toyoshiro INAMURA

By applying a renormalization technique to atomistic models, it is shown that molecular dynamics (MD) can be extended to simulate mezzo-scale phenomena of arbitrary time scale. The particles in the extended MD are renormalized atomic clusters and their interactions can be obtained by multiplying a coefficient to atomic interactions. The coefficient value can be determined based on tensile fracture simulations of bars using the extended MD itself. The motions of the particles in the extended MD are described by a mixture of quasi-static and dynamic motions, their mixing rate being determined by the cluster size and strain rate. It is also shown that the quasi-static motion can be obtained by modifying the standard MD scheme so that the quasi-static motions are realized as the time average for arbitrarily specified time interval. Finally, the method of numerical simulations is presented based on these results.

Key words: molecular dynamics, renormalization, mezzo-scale, particle interaction, quasi-static motion, dynamic motion, continuum mechanics, multi-scale simulation.

1. 緒 言

分子動力学 (MD) はマイクロ高速現象の解明に役立つが, MD でシミュレートできる時間スケールは $10^{-15} \sim 10^{-9}$ s 程度, 空間スケールは最大でも数百 nm 程度である. しかし我々が解明したいマイクロ現象の多くは, 上記よりはるかに長い時間スケールで変化するマクロ場の中で生起する. この場合, ミクロ現象とマクロ場との相互作用が決定的に重要である. 例えば切込み 1nm の切削シミュレーションでも, 被削材のサイズは 1mm 角以上に設定すべきとされている¹⁾. したがってミクロ・マクロ間相互作用を考慮したマルチスケール解析が必要になる.

マルチスケール解析では, 注目するミクロ領域を MD で記述し, それに連続体静力学領域を接続する方法^{2)~4)}や, MD を連続体静力学領域内に埋め込む方法^{1) 5) 6)}等が行われる. しかし連続体静力学は, 無限小領域にも無限個の原子が含まれることを前提にする. また時間スケールは, (準) 静的記述であるから無限大まで延びる. いずれにしても MD で表現されるスケールとは, 時間的, 空間的に大きな隔たりがある. したがって両者を強引に連成させた上記の方法では, ミクロとマクロの中間で, 両者の橋渡しを本来担うべきメゾスケールの動的塑性現象を表現し得ない. このため上記の方法は, 転位生成や転位の運動がミクロ領域内に局在化している場合のき裂先端場^{5) 6)}や, 切削初期¹⁾などの場合にのみ有効であり, 塑性領域がさらに広がる定常切削場や一般の材料変形場に対しては適用できない.

メゾスケール解析の重要性は, 本来のミクロ・マクロ間の橋渡

し機構を表現するという目的のみならず, それ自身が未知の現象解明に役立つという点でも指摘できる. たとえば延性材料の切削における 1 次せん断域でのボイド発生や, 脆性材料の切削における脆性・延性遷移機構などは, 切削場内の一箇所の原子運動を見るよりは, メゾスケールモデルを連続体内に埋め込んで, より広い範囲の原子集団の運動を粗視化して見る方が理解は進むであろう. 必要ならその後に, メゾスケールモデル内に MD を埋め込んで局所の詳細観察を行えばよい. このようにメゾスケールモデルとそれを用いた解析法の重要性が明らかであるにもかかわらず, 現状ではこの要請に応える手法がない.

有効な解析手段が欠落したメゾ領域の現象を解明するために, MD の時間と空間スケールを拡大してメゾスケールに適用できるようにしたい. ただし単に原子数を増やすことは計算負荷の急激な増大を招き不可能である. したがって扱う粒子数を増やすことなくスケール拡大できる手法が欲しい. これは理論的にいくつかの仮定と近似を設ければ可能になる. 重要な点は, 導出過程のどの部分でどのような仮定や近似を行ったかを明確にすることであろう. 使った仮定や近似が明確であれば, 手法の実用性に関する詳細な検討評価も今後可能になる.

本研究は, 以上の趣旨の下で原子系に対する繰り込み概念の適用と繰り込み系への MD スキームの適用により, 上記の目的を達成しようとするものである. 第 1 報では, 用いる仮定と近似を明確にしながら手法を導出し, 最終的な計算スキームを提示する. 第 2 報では, サイズの異なる角棒試験片の準静的および各種速度での引張り破壊シミュレーションにこの手法を適用し, 試験片サイズや引張り速度の違いによる現象の変化を調べる. さらに得られた結果の中で既知の事実と対応可能なものについては対応を調べ, 手法の妥当性を検討する. ただし手法の実用性に関する詳

* 原稿受付 平成 23 年 8 月 30 日

** 学生会員 名古屋工業大学大学院 (現, アイシン精機 (株))

*** 正 会 員 名古屋工業大学大学院 (名古屋市昭和区御器所町)

† 正 会 員 名古屋工業大学大学院 (現, 静岡県三島市幸原町)

細な検討評価は、今後の事例研究にゆずる。

2. 空間スケールの拡大

2.1 繰り込み変換

さしあたり μm スケールの原子系を考える。これを N 個の原子で構成された原子クラスタの集団に粗分割して、系をクラスタの集合とみなす。各クラスタは構成原子の運動によって複雑に変形するが、この変形を無視してクラスタを粒子とみなす。これを粗視化と呼ぶ。さらに粒子の体積と質量を $1/N$ に再規格化する。この操作により元の原子系から粒子数 $1/N$ の粒子系が得られる。粒子の体積と質量は原子と同一になるが、シミュレーション結果を解釈する際は、後述のように再規格化の影響を考慮する。

2.2 粒子間相互作用の導出

議論を進めるため、繰り込む前の原子系の詳細がとりあえず知られているとする。原子系の全ポテンシャルを Φ 、それを繰り込んだ粒子系の全ポテンシャルを Φ^* とする。繰り込みは、クラスタ粒子系への粗視化と再規格化の2段階からなる。前段の粗視化では、原子系の持つ全ポテンシャルとその分布が、粒子内での分布消失を除き変化してはならない。後段の再規格化では、ひずみ分布と物性が変化しないから応力分布も変化しない。応力は単位体積あたりのエネルギーの次元をもつから、クラスタの体積が $1/N$ になればエネルギーも $1/N$ になる。したがって

$$\Phi^* = \frac{1}{N} \Phi \quad (1)$$

でなければならない。原子系に対しては、時々刻々の原子配置に対して Φ およびその分布が原子間相互作用を使って具体的に計算できるから、繰り込み後の粒子系が持つべき Φ^* とその分布も式 (1) を使って得られる。我々の目的は、逆にこの時々刻々の Φ^* 分布を与えるような粒子間相互作用を導出することである。仮にこのような粒子間相互作用が導出されれば、初期条件と境界条件が与えられた粒子の運動は相互作用によって一意に決まるから、繰り込み粒子系のシミュレーションは原子系の状態を粗視化した所望の結果を与える。

以下の議論では、しばらく原子系と粒子系をある時刻の状態で凍結して考える。上記の粒子間相互作用が存在するか否かさしあたって分からないが、粒子系の特定の瞬間に各粒子が持つべきポテンシャルを分配することは、原子間相互作用の式を利用すれば可能である。利用する式は、原子系で使っているものを流用すると議論が簡便になる。まず2体間ポテンシャルの場合について述べ、後で多体ポテンシャルに拡張する。いま原子系の原子 α , β 間、及び粒子 A, B 間に導入された2体間ポテンシャルをそれぞれ $\phi_{\alpha\beta}$, ϕ_{AB}^* とする。各系の全ポテンシャルは

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \phi_{\alpha\beta}, \quad \Phi^* = \frac{1}{2} \sum_A \sum_B \phi_{AB}^* \quad (2)$$

と書ける。2体原子間ポテンシャルは原子間距離の関数として通常は定義するが、ここでは原子や粒子間の相対位置ベクトルの汎関数と考える。すなわち $r_{\alpha\beta}$, r_{AB} を、それぞれ原子 α から β へ向かうベクトル、粒子 A から B へ向かうベクトルとして $\phi_{\alpha\beta} = \phi(r_{\alpha\beta})$, $\phi_{AB}^* = \phi^*(r_{AB})$ とする。粒子間ポテンシャルは後述のように粒子毎に異なるから、下添字 A をつける。この時デルタ関数を $\delta(r)$ として、式 (2) は

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \int \sum_{\beta} \delta(r - r_{\alpha\beta}) \phi(r) dr \quad (3)$$

$$\Phi^* = \frac{1}{2} \sum_A \int \sum_B \delta(r - r_{AB}) \phi_A^*(r) dr \quad (4)$$

と書ける。次に式 (3) の原子系をクラスタ A, B, C, ..., に属する集団ごとにグループ分けする。この時 A を改めて i とし、 i 内の原子 α を改めて q と書き直す。さらに原子 q の近傍の原子配置および粒子 i の近傍の粒子配置をそれぞれ

$$n_q(r) = \sum_{\beta} \delta(r - r_{q\beta}), \quad n_i(r) = \sum_B \delta(r - r_{iB}) \quad (5)$$

で表す。近傍としてはそれぞれの相互作用の及ぶ範囲を考える。式 (1) に式 (3), (4), (5) を代入すれば

$$\sum_i \left\{ \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N \int n_q(r) \phi(r) dr \right\} = \sum_i \int n_i(r) \phi_i^*(r) dr$$

ここでポテンシャルの分布が同一になるためには、各 i に対して等号の成立が要請されるから

$$\frac{1}{N} \sum_{q=1}^N \int n_q(r) \phi(r) dr = \int n_i(r) \phi_i^*(r) dr \quad (6)$$

式 (6) において

$$n_q(r) = n_i \left(([I] + [T_q])r \right) \quad (7)$$

とおく。 $[I] + [T_q]$ は $n_q(r)$ から $n_i(r)$ への配置変換を表す3次の座標変換マトリクス、 $[I]$ は3次の単位マトリクスである。配置変換を単一の3次マトリクスで厳密に表すことはできないが、ここでは近似表現とする。式 (7) を式 (6) に代入すれば

$$\frac{1}{N} \sum_{q=1}^N \int n_i \left(([I] + [T_q])r \right) \phi(r) dr = \int n_i(r) \phi_i^*(r) dr \quad (8)$$

式 (8) 左辺で $r' = ([I] + [T_q])r$ なる変数変換をおこなえば、式 (8) は

$$\frac{1}{N} \sum_{q=1}^N \int n_i(r') \phi \left(([I] + [T_q])^{-1} r' \right) \det \left(([I] + [T_q])^{-1} \right) dr' = \int n_i(r) \phi_i^*(r) dr$$

ただし $\det[\cdot]$ は行列式を表す。したがって

$$\int n_i(r) \left\{ \phi_i^*(r) - \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N \det \left(([I] + [T_q])^{-1} \right) \phi \left(([I] + [T_q])^{-1} r \right) \right\} dr = 0 \quad (9)$$

ここで系の時間凍結を解除する。このとき粒子 i の近傍の粒子配置 $n_i(r)$ 、および $n_q(r)$ から $n_i(r)$ への変換マトリクス $[I] + [T_q]$ は、ともに時々刻々変化する。しかし $n_i(r)$ がどのように変化しても

$$\phi_i^*(r) = \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N \det \left(([I] + [T_q(t)])^{-1} \right) \phi \left(([I] + [T_q(t)])^{-1} r \right) \quad (10)$$

であれば式 (9) は成り立つ。ただし式 (10) の $[I] + [T_q(t)]$ は、粒子配置の変換が時間 t の関数として時々刻々変化することを表す。式 (10) の変数 r は、粒子 i から相手粒子への位置ベクトルである。式 (5), (7) によれば、 r は原子 q から相手原子 β への位置ベクトルを $r_{q\beta}$ として $r = ([I] + [T_q(t)])r_{q\beta}$ なる関係にある。従って式 (10) 右辺で $\phi \left(([I] + [T_q(t)])^{-1} r \right) = \phi(r_{q\beta})$ である。すなわち原子 q が相手原子との間で持つポテンシャル値を、繰り込み後の粒子間で持つように座標変換が行われていると解釈できる。 $\det \left(([I] + [T_q(t)])^{-1} \right)$ は、座標変換に伴ってポテンシャルの (非明示的) 占有体積が変化しても、相手粒子との間で持つポテンシャルの総量は変化しないことから生じる係数である。

以上の議論により得られた式 (10) は、相手粒子の位置により値が定まり、かつ全ての粒子に対して適用できるという点で我々の求める粒子間ポテンシャルに見える。しかし式 (10) 中の $[I] + [T_q(t)]$ の構成には、粒子 i 内に繰り込まれた原子の配置に関する時々刻々の情報を必要とする。ところが繰り込み粒子系のシミュレーションはもとの原子系の情報なしに実行するもので

あるから、式 (10) をそのまま使ってシミュレーションすることは出来ない。そこで粒子間相互作用として使うために、式 (10) を近似表現する。いま式 (10) で $[T_q(t)] = [0]$ が粒子 i 内の総ての原子 q について任意の時刻で成立すれば

$$\phi_i^*(r) = \phi(r) \quad (11)$$

となる。式 (5), (7) によれば, $[T_q(t)] = [0]$ になるのはクラスタ内のすべての原子配置がクラスタ近傍のクラスタ配置と相似 (繰り込み後の近傍粒子配置と同一) になる場合である。式 (11) は、この場合の粒子間ポテンシャルが原子間ポテンシャルに一致することを主張している。この相似性が厳密に成立するのは、完全結晶の絶対零度における弾性変形の場合のみであるが、近似的には有限温度の弾性変形でも成立すると考えてよい。

一方、塑性変形が進行する結晶内では、複数のすべり面に沿った局所すべり帯が弾性変形領域内で次第に発達していく。この場合、個々のすべり帯内の原子配置は弾性変形時のそれとは大きく異なったものになる。一方で原子系をクラスタ分割した際の各クラスタの相対位置関係は、塑性変形初期には弾性変形時と大差がない。この事実はすべり帯内でのみ $[T_q(t)]$ の値が非常に大きくなることを意味する。そこで式 (10) 右辺において、原子 q がすべり帯内にあれば $\det[(I + [T_q(t)])^{-1}] \rightarrow 0$, それ以外は弾性変形領域とみなして $[T_q(t)] \rightarrow [0]$ と 2 値化近似する。このとき式 (10) は

$$\phi_i^*(r) = \lambda_i \cdot \phi(r), \quad 0 \leq \lambda_i \left(= \frac{N-n}{N} \right) \leq 1 \quad (12)$$

となる。ただし n はクラスタ i 内のすべり帯に含まれる原子総数である。なお上記の 2 値化の妥当性は、粒子配置が必ずしも弾性変形域にとどまっている場合だけでなく、粒子レベルでの転位生成によって粒子内全域が塑性変形域に入ったと解釈できる状態でも、粒子内での塑性変形量を 2 値化近似出来れば成り立つ。式 (12) は、繰り込み系の粒子間相互作用として原子間相互作用のスカラ (1 以下の正の定数) 倍したものが近似的に使えんことを意味している。各粒子に対するスカラ一定数 λ_i の具体的な決定法は後述する。

原子系のポテンシャルが多体ポテンシャルの場合、式 (2) に対応する表現は

$$\Phi = \sum_q \phi_q \quad \Phi^* = \sum_i \phi_i^* \quad (13)$$

となる。ここで原子 q の持つポテンシャル ϕ_q の具体的な表現は多様であるが、いずれも原子 q の近傍原子配置によって ϕ_q の値が定まる点は共通している。すなわち原子 q から近傍の原子に向かう位置ベクトルを $r_{q1}, r_{q2}, r_{q3}, \dots$ とすれば, $\phi_q = \phi_q(r_{q1}, r_{q2}, r_{q3}, \dots)$ である。 ϕ_i^* も同様の汎関数形で $\phi_i^* = \phi_i^*(r_{i1}, r_{i2}, r_{i3}, \dots)$ とする。ただし $r_{i1}, r_{i2}, r_{i3}, \dots$ は、粒子 i から近傍の粒子への位置ベクトルである。ところで前出の座標変換マトリクス $[I] + [T_q]$ は、原子 q および粒子 i の近傍の粒子位置によって定まるから $r_{ia} = ([I] + [T_q])r_{qb}$, $a = 1, 2, 3, \dots$, $b = 1, 2, 3, \dots$ が近似的に成り立つ。すると式 (10) の物理的解釈が式 (13) にそのまま適用可能で

$$\phi_i^*(r_{i1}, r_{i2}, r_{i3}, \dots) = \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N \det([I] + [T_q])^{-1} \phi([I] + [T_q])^{-1} r_{i1}, ([I] + [T_q])^{-1} r_{i2}, ([I] + [T_q])^{-1} r_{i3}, \dots) \quad (14)$$

とすれば良いことが分かる。これ以降の議論は 2 体ポテンシャルの場合とまったく同様で、繰り込み系のシミュレーションに使う粒子間ポテンシャルとして最終的に式 (12) が得られる。ただし

この場合の ϕ, ϕ_i^* はいずれも多体ポテンシャルである。

次に式 (12) の係数 λ_i の決定法について述べる。 λ_i は粒子内に含まれる塑性変形領域の割合 (より一般的には、粒子レベルのマクロ変形に比べより大きく変形している粒子内でのミクロ領域の割合) によって決まることが分かった。我々には粒子レベルのマクロ変形だけが評価できるから、マクロ変形を粒子内のミクロ変形と結びつける関係が必要になる。ところで材料は、マクロ的には相当ひずみが降伏ひずみに達すると塑性変形を始める。例を棒の引張り試験に採ろう。試験片両端に加わる引張りひずみがこの場合のマクロひずみと考えれば、試験片内部のひずみ分布がミクロひずみ分布になる。引張りひずみ (相当ひずみ) が降伏ひずみに達すると、試験片内部では転位やすべり帯が発達して塑性変形領域が増えていき、破断にいたる際は塑性領域がほぼ全域に広がってポイドやき裂が成長合体していく。したがってこの場合 λ_i は降伏にいたるまで 1, 降伏後は徐々に減少して破断時にゼロになる。この引張り試験で得られた降伏ひずみと破断ひずみの値は一般のひずみ状態に適用できるから、引張り試験で λ の曲線変化を得れば一般のひずみ状態にそれを適用できる。そこで引張り試験で相当ひずみ ε の関数としての $\lambda(\varepsilon)$ を得て、これを繰り込み系の各粒子に適用する。

具体的に $\lambda(\varepsilon)$ を記述するにあたって、降伏ひずみ ε_Y から破断ひずみ ε_B にいたる λ の変化を実測するのは困難が伴う。そこで降伏ひずみ ε_Y と破断ひずみ ε_B のみを使って、途中の変化は関数 $a(x)$ を

$$a(x) = \begin{cases} e^{-1/x} & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases} \quad (15)$$

により定義して

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{a(\varepsilon_B - \varepsilon)}{a(\varepsilon_B - \varepsilon) + a(\varepsilon - \varepsilon_Y)} \quad (16)$$

とする。式 (16) の $\lambda(\varepsilon)$ は、前述の条件をみたすなめらかな関数になる。シミュレーション時には、適切なステップ間隔で系内の各粒子点における相当ひずみ増分を文献⁷⁾の方法で評価し、それをその時点まで積算した相当ひずみの値に応じて、各粒子に関する式 (12) の係数 λ_i を変化させる。

なお式 (16) の降伏ひずみと破断ひずみには寸法効果がある。したがってこれらの値は、一つの粒子に繰り込まれる原子数に近い原子数を含む試験片で得なければならない。実験により値を測定するには、電子顕微鏡内で引張り試験を行う等の工夫が必要であろう。一方、引張りシミュレーションを繰り返して、任意の繰り込み比の値を求める方法もある。この場合、まず通常の MD で引張りシミュレーションを実行して降伏ひずみと破断ひずみを求める。次にこれを式 (16) さらに式 (12) に代入し、このようにして繰り込まれた粒子を使って再び引張りシミュレーションを実行する。このとき得られる降伏ひずみと破断ひずみは、各々の繰り込み比の積の繰り込み比における値になる。同様の手続きを繰り返すことにより、順次、スケールの大きい場合の値が求められる。このように任意のスケールにおけるシミュレーションに必要な基礎データも、本手法を使って自己生成できる点がこの手法の特徴である。

さらに降伏ひずみと破断ひずみには、ひずみ速度依存性も考えられる。これを考慮するためには、各スケールの引張りシミュレーションにおいて、後述の時間スケール拡大法を利用して各種ひずみ速度に対する降伏ひずみ、破断ひずみのデータを取得する。これらを式 (16) に代入し、各粒子周りの相当ひずみと相当ひずみ

速度によって係数 λ_i を決めればよい。

2.3 粒子運動記述

粒子系内に十分多数の粒子があるとする。またこの系に対応する原子系も考える。粒子間相互作用の式(12)の原形である式(10)によれば、任意の時刻における粒子のポテンシャルは、対応する原子クラスタ内の原子の持つポテンシャルの平均値である。したがってポテンシャルを微分して得られる粒子への作用力も平均値になる。さらに粒子と原子は質量が同一であるから、加速度したがって速度も同様の関係になる。原子クラスタを分子とみれば、分子の重心の速度すなわち分子速度⁸⁾が粒子速度に一致する。ところで原子系が熱平衡状態にあると仮定すれば、原子速度の分散で計算される温度と、分子速度の分散で計算される温度とが等しい⁸⁾。ただし原子系から分子系への変換で自由度が $1/N$ になるから自由度あたりの質量が N 倍になり、分子速度 (粒子速度) の分散は原子速度の分散の $1/N$ になる。これは統計学で標本定理が成立する場合に他ならない。

上記の議論で $N \rightarrow \infty$ になると粒子速度の分散がゼロになるから、領域内の粒子は同一の動きをする。同一の動きをする粒子間に働く粒子間相互作用力はつり合い状態にあるから、各粒子は (準) 静的運動をする。これが連続体静力学による表現の根拠である。また分散ゼロは温度零度ではなく、連続体では分散による温度表現ができないことに対応する。いずれにしても N が有限のときの粒子運動は、ニュートンの方程式に従う動的運動と力のつり合い方程式に従う (準) 静的運動との中間的運動になることが分かる。そこで時刻 t における粒子 i の速度 $v_{i\theta}(t)$ の表現として、(準) 静的運動記述による粒子速度 $v_{is}(t)$ と動的運動記述による粒子速度 $v_{id}(t)$ を用いて

$$v_{i\theta}(t) = (1 - \theta) \cdot v_{is}(t) + \theta \cdot v_{id}(t) \quad (17)$$

とする。 θ は 区間 $[0, 1]$ 上の N に依存するパラメータである。系が熱平衡状態にある場合は、前述の議論から $\theta = 1/\sqrt{N}$ とすれば良いことがわかる。

式(17)にしたがって粒子運動を記述する際、 $v_{id}(t)$ は、境界上で毎時間ステップ所定の変位増分を与えMDで計算する。ここでは速度の計算が基本になるので蛙とび法を使う。一方 $v_{is}(t)$ は、境界上で同様の変位増分を与え、力のつり合い方程式⁹⁾を解いて各粒子の変位増分を求めれば計算できる。しかしこの方程式は転位生成時につり合い位置の跳躍があるため不安定になり、求解困難になる場合が多い。そこで本研究では、MDを (準) 静的計算用に修正した以下の式(18)を使う。

$$m\ddot{r}_i = -\frac{\partial\Phi^*}{\partial r_i} + \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \frac{\partial\Phi^*}{\partial r_i} dt \quad (18)$$

式(18)で m は粒子の質量、 r_i は粒子 i の位置ベクトル、 T は時間間隔パラメータである。いま式(18)右辺第2項は定数であることに注意して、時刻 t から $t+T$ まで式(18)の時間平均を計算すると

$$\frac{1}{T} \int_t^{t+T} m\ddot{r}_i dt = 0 \quad (19)$$

が得られる。式(19)は、区間 $[t, t+T]$ 内では動的運動をするが、時間平均としては (準) 静的運動になることを示す。 $T \rightarrow 0$ の場合は $m\ddot{r}_i = 0$ すなわち厳密な (準) 静的運動になるが、前述したように転位生成時につり合い位置の跳躍により厳密な (準) 静的運動記述による追跡が困難になる。一方、実現象では熱振動によってこの跳躍を実現していることから、式(19)でも T を計算ステップの数倍から数十倍程度にとって実現象を模擬する。式(18)

右辺第2項は、この式にしたがって進む粒子 i の軌道上での力の積分値である。この項は右辺第1項の未来値を含むため、数値計算は後述のように自己無撞着的 (Self-Consistent) に行う。

3. 時間スケールの拡大

粒子系が (準) 定常状態にあるとみなせる時間長を考え、この時間内にMDの計算ステップが十分多数あるとする。各ステップで式(17)の $v_{id}(t)$ が得られるから、そのMステップごとの平均値の系列 $\bar{v}_{id}(t)$ を考える。このとき $v_{id}(t)$ の集合を母集団とすると、 $\bar{v}_{id}(t)$ はサイズMの標本平均の集合になる。したがって標本定理が成立すれば $\bar{v}_{id}(t)$ の分散は母分散の $1/M$ になる。そこで式(17)において θ を $\theta/\sqrt{M}$ に置き換えてみる。この置き換えによる動的運動の平均速度低下は $v_{is}(t)$ の増加で相殺するから、粒子の軌跡としては、置換前の軌跡上をMステップ跳びに辿るのと同等になる。これは時間軸方向の繰り込みであり、これによって同一ステップ数でM倍の時間長のシミュレーションができることになる。なお系が (準) 定常状態にあるとする本節冒頭の仮定は、上記の時間軸方向での標本定理の成立と同義とする。結局、系が時間 t に依存せず熱平衡状態にあるとみなせる条件下では、空間スケール (体積) の繰り込み比 N 、時間スケールの繰り込み比 M に対し $\theta = 1/\sqrt{N} \times 1/\sqrt{M}$ となる。 θ の値に対して空間繰り込みと時間繰り込みを同一処理で扱えるのは、繰り込みに含まれる平均化操作において、空間平均でアンサンブル平均を近似してエルゴード性を仮定しているためと解釈できる。

4. 再規格化に伴う物理量の変換

シミュレーション結果を実現象に対応させるため、実現象における長さ、力、時間、質量のシンボルをそれぞれ $[d]$, $[F]$, $[t]$, $[m]$ とし、式(17)の $v_{id}(t)$ の計算で使っている対応諸量を $[d^*]$, $[F^*]$, $[t^*]$, $[m^*]$ とする。本研究の議論では体積の繰り込み比が N だから、長さの繰り込み比は $\alpha = \sqrt[3]{N}$ したがって $[d] = \alpha[d^*]$ となる。これと応力のスケール不変性 $[F]/[d]^2 = [F^*]/[d^*]^2$ から $[F] = \alpha^2[F^*]$ が得られる。さらに $[F]$ を $[F] = [m][d]/[t]^2$ に書き換え $[m] = \alpha^3[m^*]$ を代入すると $[t'] = \alpha[t^*]$ が得られる。 $[t']$ は $v_{id}(t)$ の計算における実時間である。次に $v_{id}(t)$ を $v_{is}(t)$ と組み合わせて $v_{i\theta}(t)$ を計算する際、 $[t^*]$ のMステップ分が1ステップに繰り込まれる。したがって $[t] = \alpha M[t^*]$ であるから速度を $[v] = [d]/[t]$ とすれば $[v] = (1/M)[v^*]$ となる。例えば長さ 100 nm の棒の引張り破壊シミュレーションで、時間刻みを 10^{-15} s、引張り速度 10^9 m/s、 $N=10^{12}$ 、 $M=10^6$ として 10^5 ステップ計算すると、実現象としては長さ 1 mm の棒を時間刻み 10μ s、引張り速度 1 mm/s で 1 秒間観察することに相当する。なお熱平衡や (準) 定常状態の仮定の妥当性は、換算された実スケールでの現象やその変化速度に対して判断すべきものである。

5. 数値計算法

(1) 粒子の位置と速度の更新

時間ステップを進める度に境界上の所定の粒子に所定の変位増分を与えながら、すべての粒子 i について以下の手順で計算する。

$$v_{id}\left(t+\frac{1}{2}\Delta t\right)=v_{i\theta}\left(t-\frac{1}{2}\Delta t\right)-\frac{1}{m}\left(\frac{\partial\Phi^*}{\partial r_i}\right)_{(t)}\Delta t \quad (20)$$

$$r_i(t+\Delta t)=r_i(t)+v_{i\theta}\left(t+\frac{1}{2}\Delta t\right)\Delta t \quad (21)$$

ただし $t=0$ の時は

$$v_{id}\left(\frac{1}{2}\Delta t\right)=v_{i\theta}(0)-\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial\Phi^*}{\partial r_i}\right)_{(0)}\Delta t \quad (22)$$

とする。式(21)右辺の $v_{i\theta}(t+(1/2)\Delta t)$ は、式(20)左辺と (2) (準) 静的運動の計算で得られた $v_{is}(t+(1/2)\Delta t)$ を式(17)右辺に代入して計算する。式(21)で得られた $r_i(t+\Delta t)$, $i=1,2,3$, から $-(1/m)(\partial\Phi^*/\partial r_i)_{(t+\Delta t)}$, $i=1,2,3$, を求め、 $t+\Delta t$ を t に書き換えて次の時間ステップに進む。

(2) (準) 静的運動の計算

J ステップ分の時間刻みで構成される長さ T の時間区間単位で計算を進める。粒子 i に関する第 n 区間 $[nT, (n+1)T]$ の方程式は

$$m\ddot{r}_i(nT+k\Delta t)=-\left(\frac{\partial\Phi^*}{\partial r_i}\right)_{(nT+k\Delta t)}+\frac{1}{J}\sum_{j=0}^{J-1}\left(\frac{\partial\Phi^*}{\partial r_i}\right)_{(nT+j\Delta t)} \quad (23)$$

であり、区間内を以下の手順で計算する。

- 右辺第2項の初期値をゼロとする。粒子 i の初速度は前区間の収束時の終端速度を用いる。ただし第1区間では初速度ゼロとする。
- 時間ステップを進める度に境界上の所定の粒子に所定の変位増分を与えながら、式(23)を通常の蛙とび法で全粒子について解く。各粒子 i の軌跡上で粒子に働く力(右辺第1項)を順次計算し、その区間平均を求める。
- 粒子 i の区間平均速度を、到達位置と初期位置の差を T で除して求める。
- すべての粒子を区間の初期位置に戻し、(b)で得た値を負号反転して式(23)右辺第2項を更新し、(c)を初速度として(b)に戻る。
- 上記(b)-(d)の反復で区間終端におけるすべての粒子位置の変化が許容値(格子定数の1/2000程度)以下になったら、各ステップでの粒子位置と粒子速度を保存して次の区間に進む。

なお(準)静的運動の計算は区間単位で進めるから、新区間に移行する都度(1)の計算の前に実行する。

(3) 粒子間相互作用の更新

- 各区間での粒子運動の計算後、区間開始時と終了時における各粒子周りの粒子配置の変化から、直ひずみおよびせん断ひずみ増分を文献⁷⁾の方法で粒子ごとに求める。さらにこれをもとに各粒子周りの相当ひずみ増分を計算する。
- 現区間までに得られた相当ひずみ増分を積算して相当ひずみを求め、式(16)に代入して各粒子の相互作用を更新する。
- 上記(b)の更新により各粒子の力のつり合い位置が変化するため、境界を固定したまま(準)静的運動計算を行って全粒子を新しいつり合い位置に移動させた後、次区間の計算に移る。

6. 数値計算例

単結晶銅の引張り破壊シミュレーション結果を図1(a),(b)に示す。この結果は図と同数の原子で構成された通常のMDから始め、繰り込み操作を順次5回繰り返して得たものである。この

(a) Tensile speed: 361.5 m/s (cross sectional view)

(b) Tensile speed: quasi-static (cross sectional view)

Fig.1 Results for specimen length 69.82mm, tensile strain 0.26.

ときの引張り前の試験片の実サイズ長は両図とも 69.82mm, ひずみは 0.26 である。また(a)は引張り速度 361.5 m/s, (b)は(準)静的引張りである。(a)の結果は熱平衡の仮定等に議論の余地はあるが、ホプキンソン棒の実験でよく知られた固定端内側での衝撃波の重量による破壊が見られる。この結果は通常のMDでは観察できない。(b)は通常の引張り試験機による実験結果に対応するもので、複数のすべり帯の形成が観察できる。

7. 結 言

- 原子系への繰り込み概念の適用と繰り込み系へのMDスキームの適用により、所定の近似と仮定の下でMDの対象空間スケールをメゾスケールに拡大できる。
- 繰り込み系の粒子間相互作用に原子間相互作用のスカラ一倍したものが近似的に使える。スカラ一定数は引張りシミュレーションを繰り返すことにより、任意の繰り込み比に対して求められる。
- 繰り込み系の粒子運動は、動的運動と力のつり合いを保つ(準)静的運動との中間的運動になる。
- 粒子系が(準)定常状態にあれば時間軸方向の繰り込みができる。これによって任意の実時間長のシミュレーションができる。
- 以上をもとに繰り込み系の数値シミュレーション方法を示した。

本研究は平成20, 21, 22年度文部科学省科学研究費補助金「一般研究(C)」の交付を受けた。

参 考 文 献

- T.Inamura, Y.Shishikura, N.Takezawa: Digital microscope observation of the initial stage of cutting monocrystalline silicon, CIRP Annals **58**(2009)69.
- JQ.Broughton, FF.Abraham, N.Bernstein, E.Kaxiras: Concurrent coupling of length scales: methodology and application, Physical Review B **60**(1999)2391.
- SP.Xiao, T.Belytschko: A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **193**(2004)1645.
- LE.Shilkrot, WA.Curtin, RE.Miller: Coupled atomistic and discrete dislocation plasticity, Physical Review Letters **89**(2002)025501.
- T.Inamura, N.Takezawa, T.Miura, K.Yamada: Molecular dynamics simulation of dimple formation process on ductile fracture surface, CIRP Annals **54**(2005)507.
- T.Inamura, N.Takezawa, K.Shibuya, K.Yamada: Dynamic phenomena at mode-I crack front in silicon simulated by extended molecular dynamics, CIRP Annals **56**(2007)561.
- 稲村豊四郎, 武澤伸浩, 熊本保浩: 原子系/連続体変換とナノスケール切削の応力ひずみ解析, 精密工学会誌, **60**,4(1994)570.
- 小竹進: 分子熱流体, 丸善(1990).
- 稲村豊四郎, 鈴木裕幸, 武澤伸浩: 銅とダイヤモンドの原子配列モデルによる計算機内での切削実験, 精密工学会誌, **56**,8(1990)1480.