

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 5 月 31 日現在

機関番号：34416

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2009～2011

課題番号：21560103

研究課題名（和文）

ユニバーサルな粒子法の開発と固体力学問題への適用

研究課題名（英文）

Development of universal particle method and its application to solid mechanics problems

研究代表者

齋藤 賢一 (SAITOH KEN-ICHI)

関西大学・システム理工学部・准教授

研究者番号：90294032

研究成果の概要（和文）：微視スケール（分子動力学）と巨視スケール（マクロ粒子法（SPH や PM など））の双方の概念を含む「ユニバーサルな粒子法」を固体力学問題の計算シミュレーション手法として開発・適用する研究・開発を行った。既存の分子動力学法およびマクロ粒子法による固体材料解析を様々に行い、両手法の親和性や適応状況を確認するとともに、それらをハイブリット化もしくは階層的に連結する新手法の提案と構築が行われた。

研究成果の概要（英文）：A novel simulation technology called as “universal particle method” has been developed and been applied to computer simulation of solid mechanics problems. The method includes both micro-scale (molecular dynamics) and macro-scale (macroscopic particle method: SPH, PM) approaches. Both molecular dynamics and macroscopic particle method were applied to lots of problems respectively, to check their availability and limits. At the same time, nice affinity between these two similar but different approaches was recognized. Then, a point of departure for a new simulation methodology has been successfully established based on linking theory including hybrid and hierarchical approach.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	2,200,000	660,000	2,860,000
2010年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	3,800,000	1,140,000	4,940,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学、機械材料・材料力学

キーワード：計算力学、粒子法、固体力学、分子動力学、SPH法、マルチスケール解析、金属物性、ナノクラスター

1. 研究開始当初の背景

機械構造物がより小さくなるに従い、材料要素ではナノ領域の挙動が注目されている。例えば、電子情報機器での微細配線は数十ナノメートルになり、カーボンフラーレン・ナ

ノチューブに代表されるナノサイズ物質が工業製品に使われつつある。実験技術においては原子間力顕微鏡や高解像度電子顕微鏡などで原子レベル観察および力学的試験が実施可能となり、計算力学シミュレーション

による結果の検証や予測の重要性が高まっている。検証するサイズが原子レベルまで小さくなることによって、従来からの設計基準である材料力学や材料強度学の基本学理に加えて、ナノ領域で取得される新知見を組み込んでいくことが今後の設計生産活動に必須となる。そのような微視的な立場から理論的解析を行なうのが、分子動力学法による材料解析である。分子動力学法ではニュートンの力学法則のみを原理とし、考慮する系内の粒子（すなわち原子）の運動軌跡を数値的に得て、系全体の性質を予測することができ、有用である。

一方、巨視的な解析では、有限要素法のような数理解析手法が確立しており、精度も良い。しかし、計算メッシュを用いる方法に限界がある。材料の大変形、物質の分裂、破壊、接触問題に対して、理論的にも技術的にも複雑な対処が必要で、近年ではそれらを自然に取り入れるメッシュレス手法が注目される。平滑化流体力学(SPH)、散逸粒子動力学(DPD)などがある。これらは評価点となる離散点を配置し、基礎式を解く方法であり、各点に粒子を置いて解く印象を与えることから粒子法と呼ばれる。しかし、通常基礎式は連続体力学に基づいており、巨視的な解析の範疇にとどまる。粒子法では有限要素法に遜色の無い精度が得られ、その利点を生かして固体材料の解析への適用が期待される。原子レベルの手法である分子動力学と巨視的な粒子法（以下、単に粒子法と呼ぶ）は計算法として似通った点が多い。仮にこれら二つの手法を含んだユニバーサルな手法を得た場合には、親和性は良好と予想する。以前から、有限要素と分子動力学の結合、連続体理論に基づく分子動力学の拡張（擬連続体や VAC など）が試みられているが、根本的に離散と連続という相反した性質を扱うこれまでの手法では十分な親和性が得られていない。例えば、分子動力学法で相変態を扱うとき、境界条件のわずかな変化が原子レベルの結晶変態をもたらす得る。本研究を進展させることで、巨視レベルと微視レベルが関連する問題を精度良く取り扱うことができると予想される。

2. 研究の目的

本研究では微視的解析のための分子動力学法と巨視的解析のための粒子法を隔たり無く結合させ、「ユニバーサルな粒子法」という解析スケールを問わない計算力学シミュレーションを新しく構築することを目的とする。同時に、従来の分子動力学解析およびマクロ粒子法解析の問題点を改善し、高精度化する試みも行なう。

3. 研究の方法

本研究のアイデアとしては、分子動力学法での運動方程式と境界条件を粒子法の微視バージョンとして定式化し直し、逆に粒子法の原子レベル解析への適用を行い、それらを組み合わせる。本研究で対象とする固体力学現象として、原子レベルの相変態が材料機能や機械的特性の発現に大きく影響しうる問題、例えば、形状記憶合金における相変態、結晶粒界解析、原子クラスター構造・ナノ構造に対する機能・強度への適用がある。本研究によって、それらの各現象の解明がなされ、より高性能な形状記憶材料および超弾性材料の開発指針が得られる。以下の項目について、研究を進める。

- ① マクロ粒子法の微視レベル解析への適用
- ② 粗視化による分子動力学解析のスケールアップ
- ③ 普遍的（ユニバーサルな）手法による新しいアプローチの開拓

4. 研究成果

(1) 粒子法による微視的解析およびマルチスケール解析への発展 [平成21年度-1]

マクロ粒子法である SPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)、DPD(Dissipative Particle Dynamics)とミクロ粒子法である分子動力学(MD)法を用いて、回転による加工物体の解析、生体内ベシクル（小胞体）構造の安定性、金原子のナノクラスター構造の超弾性機能、NiAl合金/NiTi形状記憶合金の相変態および非晶質化などの、固体物質を対象とした様々な解析を行った。その結果、シミュレーション手法による力学的性質の評価および固体物質に内在する各スケールでのメカニズムの発掘が可能であることが示された。

(2) 分子動力学のスケールアップ手法の理論的構築[平成21年度-2]

MD法とSPH法を取り上げ、これらをコンカレントに無理なく結合して解析する手法の構築に着手した。特徴的なサイズスケールに応じて空間的に分割されたサブシステムを、全システムのラグランジアンとして総合し、基礎方程式を導出する方法を検討した。その結果、粒子間力の橋渡しの方法によって、理論的にMD-SPH間のハイブリット解析が可能であることが確認された。応用例として、延性金属材料のナノインデンテーションによる塑性変形進展の問題に適用して検討した。

(3) 粒子法の微視的解析およびマルチスケール解析への適用（開発）[平成22年度-1]

H21年度に引き続き、マクロ粒子法である SPH、DPDとMD法を用いて、回転による加工物体の解析、塑性加工時の応力ひずみ解析、巨大ひずみ加工における結晶粒界の特性評価、

超弾性材料の応力誘起非晶質化などの、解析を行った。その結果、とくにミクロ的手法を用いての原子レベル解析の高精度化の見通しを得るに至った。しかしながら、各解析での限界が垣間見られた。ミクロ的視点とマクロ的視点の双方を兼ね備えるハイブリット手法の開発へすすむべきことが再確認された。

(4) PM法による分子動力学法のスケールアップ手法の理論的構築 [平成22年度-2]

マルチスケールの視点を組み込んだパーティクルモデリング (PM) 法の開発と応用がスタートした。MD法との連結を意識した基礎方程式の定式化と簡単な固体力学問題への適用可能性を確認した。

(5) 本研究のまとめと今後への展開の礎の構築 [平成23年度]

研究期間最終年度である平成23年度は、粒子法のユニバーサル化およびマルチスケール解析への適用について研究した。ミクロ情報に基づいてマクロ粒子法の計算を行うマルチスケールのパーティクルモデリング (PM) 法を構築した。ミクロ情報として、原子間相互作用を表現する原子間ポテンシャルが既にあるので、この原子論的なエネルギーと密度や構造を基にして、実材料のモデリングに要するより大きなマクロ粒子系を設定し、粒子間相互作用等を構築する方法を開発した。その結果、小変形に対応する弾性的挙動については弾性係数の実験値などの実測値と非常に合致する結果を得た。大変形時に発生する塑性変形についても、2粒子間相互作用関数を工夫することで、別に実験で得られた純アルミニウムの実測値の再現を試みた。ただ現状では、経験的なパラメータフィッティングの処理が主体になっている状況である。完全な形で、ミクロ範囲のシミュレーションであるMD法の結果から、塑性変形のための計算パラメータを抽出する工夫が、今後必要である。一方、このPM法の多種多様な負荷状態への応用可能性を見るため、はり構造の曲げ変形に適用することにも成功した。その一方で、MD法における塑性変形の素過程に関する挙動を見る目的で、以下のような原子レベルの材料挙動を深く理解した。巨大ひずみ下の多結晶体の結晶粒界挙動、金属へのナノインプリントによる転写機構、量子ドット構造における原子応力・ひずみ解析、銅合金の原子レベル摺動機構などのテーマを遂行した。以上より、今回開発したPM法と既存手法のSPH法やFEMとの比較などを行う準備が整った。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計10件)

- (1) Takahiro Ejima, Ken-ichi Saitoh, Noboru Shinke, Takuma Masanori, Tomohiro Sato and Yoshimasa Hirai, "Atomic-level analysis of copper sulfide (Cu₂S): Crystalline structure and sliding characteristics", Science and Technology Reports of Kansai University, No.54, (2012), pp.23-33. (査読無)
- (2) 齋藤賢一・壇孟, "ナノ構造シミュレーションにおける原子配置変化を用いる微視的なひずみの解析" 材料, Vol.61, No.2, (2012-2), p.162-168. (査読有)
DOI:dx.doi.org/10.2472/jsms.61.162
- (3) Takeshi Dan and Ken-ichi Saitoh, "Microstructure Evolution in Polycrystalline Metal under Severe Plastic Deformation by Strain-Controlled Molecular Dynamics", Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering (JSMME), Vol.6, No.1, (2012-1), pp.48-60. (査読有)
DOI: dx.doi.org/10.1299/jmmp.6.48
- (4) 松木孝信・齋藤賢一, "ミクロ情報を基礎とする Multi-phase-field 法を用いた Ni-Ti 形状記憶合金の相変態に関する研究", 日本機械学会論文集, A 編, Vol.77, No.780, (2011), pp.1320-1330. (査読有)
DOI:dx.doi.org/10.1299/kikaia.77.1320
- (5) Takanobu Matsuki and Ken-ichi Saitoh, "Phase-Field Simulation of Martensitic Transformation in Ni-Ti Shape Memory Alloys", Science and Technology Reports of Kansai University, No.52, (2010), pp.11-19. (査読無)
- (6) 米川嘉明・齋藤賢一, "金クラスターの変形機構と力学特性に関する分子動力学シミュレーション", 材料, Vol.59, No.8, (2010), pp.624-630. (査読有)
DOI:dx.doi.org/10.2472/jsms.59.624
- (7) Ken-ichi Saitoh and Keisuke Kubota, "Atomistic Simulation on the Relation between Amorphization and Crystalline Transformation in Ni-Ti Alloy", Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol.4, No.7, (2010), pp.1061-1070. (査読有) DOI:dx.doi.org/10.1299/jmmp.4.1061
- (8) Ken-ichi Saitoh, Keisuke Kubota and Tomohiro Sato, "Atomic-level Structural Change in Ni-Ti Alloys under Martensite and Amorphous Transformations", Technische Mechanik, Vol.30, No.1-3, (2010), pp.269-279. (査読有)
http://141.44.1.20/ifme/zeitschrift_tm/2010_Heft1_3/23_Saitoh.pdf
- (9) Ken-ichi Saitoh and Yoshiaki Yonekawa, "Molecular Dynamics Study of Extraordinary Elastic Deformation Found in

Gold Atomic Cluster", Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing, Vol.4, No.1, (2010), pp.405-415. (査読有)

DOI:dx.doi.org/10.1299/jamdsm.4.405

- (10) Ken-ichi Saitoh and Wing Kam Liu, "Molecular dynamics study of surface effect on martensitic cubic-to-tetragonal transformation in Ni-Al alloy", Computational Materials Science, Vol.46, (2009), pp.531-544. (査読有)
DOI:dx.doi.org/10.1016/j.commsci.2009.04.025

[学会発表] (計 31 件)

- (1) 江島貴裕・齋藤賢一・宅間正則・佐藤知広・平井良政 "硫化銅(Cu₂S)の摺動特性に関する分子動力学解析", 日本機械学会講演論文集(関西支部第 87 期定時総会講演会), No.124-1, (2012), pp.(4-)12. (2012/3/16, 関西大学)
- (2) 川瀬達也・齋藤賢一, "分子動力学法によるナノ多結晶ダイヤモンドの粒界構造・強度解析", 日本機械学会講演論文集(関西支部第 87 期定時総会講演会), No.124-1, (2012), pp.(4-)11. (2012/3/16, 関西大学)
- (3) 赤木一太・齋藤賢一・新家昇, "SPH 法による固体材料解析における角運動量保存に関する研究 ~Euler の運動方程式による回転修正~, 日本機械学会講演論文集(関西支部第 87 期定時総会講演会), No.124-1, (2012), pp.(4-)10. (2012/3/16, 関西大学)
- (4) 松尾俊一郎・齋藤賢一・大野治彦, "分子動力学によるセルローズナノファイバー・フィブリルモデルの構築と力学特性の評価", 日本機械学会講演論文集(関西支部第 87 期定時総会講演会), No.124-1, (2012), pp.(4-)9. (2012/3/16, 関西大学)
- (5) 大良修平・齋藤賢一, "ナノ伸線加工の分子動力学法による研究 ~摩擦モデルに関する検討~, 日本機械学会講演論文集(関西支部第 87 期定時総会講演会), No.124-1, (2012), pp.(4-)8. (2012/3/16, 関西大学)
- (6) 山口達也・齋藤賢一・新家昇・淀谷芽実, "分子動力学法による自己組織化量子ドットの構造生成と強度評価に関する研究" 日本機械学会講演論文集(関西支部第 87 期定時総会講演会), No.124-1, (2012), pp.(4-)7. (2012/3/16, 関西大学)
- (7) 壇孟・齋藤賢一, "強ひずみ加工を受ける金属材料の微視組織変化 ~ひずみ制御分子動力学法による解析~, 日本機械学会講演論文集(関西支部第 87 期定時総会講演会), No.124-1, (2012), pp.(4-)6. (2012/3/16, 大阪)
- (8) 花城直也・齋藤賢一・新家昇・小泉照平, "原子間ポテンシャルを基礎とするマクロ粒子モデリングに関する研究 (粒子間ポテンシャル構築と塑性モデルの導入について)", 日本機械学会講演論文集(関西支部第 87 期定時総会講演会), No.124-1, (2012), pp.(4-)5. (2012/3/16, 関西大学)
- (9) 山口達也・齋藤賢一・新家昇, "分子動力学法による自己組織化量子ドットの機械的特性評価 ~ピラミッド型ハットクラスタの応力・ひずみ解析~, 第 16 回関西大学先端科学技術シンポジウム講演集, (2011), pp.60-65. (2012/1/23, 関西大学)
- (10) 齋藤賢一, "分子動力学法 (MD) の基礎と固体力学問題への適用", 第 276 回材料科学談話会(日本金属学会・日本鉄鋼協会九州支部). (2011/11/29, 熊本大学)
- (11) 花城直也・齋藤賢一・新家昇・小泉照平, "原子間ポテンシャルを基礎とするマクロ粒子モデリングに関する研究 (粒子間ポテンシャルの構築と弾性変形の評価)", 日本機械学会講演論文集(第 24 回計算力学講演会), No.11-3, (2011), pp.134-136. (2011/10/9, 岡山大学)
- (12) 齋藤賢一, "原子レベルから見た塑性変形と伸線加工", 日本塑性加工学会 第 60 回伸線技術分科会(特別講演), 講演資料. (2011/6/24, 新日本製鐵本社(東京))
- (13) 齋藤賢一, "伸線加工における材料組織変化のミクロ数値解析---引抜き中の結晶方位と結晶構造の変化---", 平成 23 年度(第 42 回)塑性加工春季講演会 講演論文集, (2011), pp.159-160. (2011/5/29, 早稲田大学)
- (14) 松尾俊一郎・齋藤賢一, "分子動力学によるセルローズナノファイバーの分子構造・運動・機械的特性の評価", 日本材料学会 第 1 会マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム)講演論文集, (2011), P10. (2011/5/23, 大阪大学)
- (15) 花城直也・齋藤賢一・小泉照平・新家昇, "マクロ粒子モデリングによる材料挙動に関する研究 (材料力学モデルと熱伝導モデルの検討)", 日本材料学会 第 1 会マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム)講演論文集, (2011), P23. (2011/5/23, 大阪大学)
- (16) 松尾俊一郎・齋藤賢一, "分子動力学法によるセルローズナノファイバーの分子構造と強度の解析", 日本機械学会講演論文集(関西支部第 86 期定時総会講演会), No.114-1, (2011), pp.(8-)16. (2011/3/20,

- 京都工芸繊維大学)
- (17) 花城直也・齋藤賢一・新家昇・小泉照平, "マクロスケール粒子モデリングによる材料挙動に関する研究 (粒子間ポテンシャルの構築と温度の表現)", 日本機械学会講演論文集(関西支部第 86 期定時総会講演会), No.114-1, (2011), pp.(8-)15. (2011/3/20, 京都工芸繊維大学)
- (18) 壇孟・齋藤賢一, "ひずみ制御分子動力学法による強加工・巨大ひずみを受ける材料の微視組織変化の解析", 日本機械学会講演論文集(関西支部第 86 期定時総会講演会), No.114-1, (2011), pp.(6-)27. (2011/3/20, 京都工芸繊維大学)
- (19) 赤木一太・齋藤賢一・新家昇, "SPH 法による回転物体の数値モデリング---トルクスケーリングを用いる SPH 法の修正---", 日本機械学会講演論文集(関西支部第 86 期定時総会講演会), No.114-1, (2011), pp.(12-)6. (2011/3/19, 京都工芸繊維大学)
- (20) 山口達也・齋藤賢一・新家昇, "分子動力学法による自己組織化量子ドットの構造生成に伴うひずみ緩和に関する研究", 第 15 回関西大学先端科学技術シンポジウム講演集, (2011), pp.193-198. (2011/1/14, 関西大学)
- (21) 齋藤賢一・赤木一太・岡田武史, "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", 第 15 回関西大学先端科学技術シンポジウム講演集, (2011), pp.55-60. (2011/1/13, 関西大学)
- (22) 齋藤賢一・芝田紘和・新家昇, "散逸粒子動力学による生体高分子の構造安定性の解析", 日本機械学会講演論文集(第 23 回計算力学講演会), No.10-2, (2010), pp.572-574. (2010/9/24, 北見工業大学)
- (23) 赤木一太・齋藤賢一・新家昇, "SPH 法における回転運動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), No.10-2, (2010), pp.76-77. (2010/9/23, 北見工業大学)
- (24) 松木孝信・齋藤賢一・高木知弘, "Multi-phase-field 法を用いた Ni-Ti 形状記憶合金とバリエーション間の相互作用の解析", 日本機械学会講演論文集(第 23 回計算力学講演会), No.10-2, (2010), pp.111-112. (2010/9/23, 北見工業大学)
- (25) 齋藤賢一・垣鍔伸幸・新家昇, "分子動力学による伸線加工時の微視組織変化と応力状態の解析", 平成 22 年度(第 41 回)塑性加工春季講演会 講演論文集, (2010), pp.175-176. (2010/5/29, 電気通信大学)
- (26) 赤木一太・齋藤賢一・新家昇, "SPH 法による回転運動を伴う材料挙動のモデリング", 日本材料学会 第 15 回分子動力学シンポジウム講演論文集, (2010), (#P24), pp.76-77. (2010/5/21, 札幌コンベンションセンター)
- (27) 松木孝信・齋藤賢一, "Ni-Ti 形状記憶合金における相変態の Phase-field シミュレーション ---バリエーション形成の解析と可視化---", 日本機械学会講演論文集(関西支部第 85 期定時総会講演会), No.104-1, (2010), pp.(2-)16. (2010/3/17, 神戸大学)
- (28) 米川嘉明・齋藤賢一・山田信太郎・新家昇, "金クラスターの変形機構と力学特性に関する分子動力学シミュレーション", 第 14 回関西大学先端科学技術シンポジウム講演集, (2010), pp.245-250. (2010/1/29, 関西大学)
- (29) 齋藤賢一・米川嘉明・松木孝信, "計算力学シミュレーションによるナノスケール材料特性の予測", 第 14 回関西大学先端科学技術シンポジウム講演集, (2010), pp.35-40. (2010/1/28, 関西大学)
- (30) 齋藤賢一・垣鍔伸幸・矢野聡・中桐明和・新家昇, "ナノ力学による伸線加工時の欠陥挙動と応力状態に関する検討", 日本機械学会講演論文集(第 22 回計算力学講演会), No.09-21, (2009), pp.286-287. (2009/10/10-12, 金沢大学)
- (31) 米川嘉明・齋藤賢一, "分子動力学法による金クラスターの特異な変形機構の解析", 日本機械学会講演論文集(第 22 回計算力学講演会), No.09-21, (2009), pp.282-283. (2009/10/10-12, 金沢大学)
- [図書] (計 2 件)
- (1) 齋藤賢一, "セルロースナノファイバーの分子構造と強度の解析 ---分子動力学法による計算力学解析---", セルロースナノファイバーの樹脂への分散技術と応用事例, (第 4 章 セルロースナノファイバーの構造解析と分散体の評価・解析), (2012), pp.183-193, 技術情報協会.
- (2) Tomohiro Sato, Ken-ichi Saitoh, Keisuke Kubota and Noboru Shinke, "Characteristic Deformation and Structural Changes of Ni-Ti alloys by Molecular Dynamics; Phase Transformation and Amorphization", in "Shape Memory Alloys: Manufacture, Properties and Applications" (editor H.R.Chen), (2010), pp.231-246, Nova Science Publishers.
- [その他]
ホームページ等
<http://www2.memm.mec.kansai-u.ac.jp/saitoh/nano> (研究室のホームページ)
6. 研究組織
(1) 研究代表者
齋藤 賢一 (KEN-ICHI SAITOH)

関西大学・システム理工学部・准教授
研究者番号：90294032

(2) 研究分担者
該当なし