

令和 6 年 6 月 26 日現在

機関番号：37112

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2023

課題番号：19K04284

研究課題名（和文）機械システムの振動減衰能の高精度推定が可能な次世代型統合振動シミュレータの構築

研究課題名（英文）Development of next-generation integrated vibration simulator for highly accurate estimation of the vibrational damping capacity of a mechanical system

研究代表者

梶田 顕章（Tomoda, Akinori）

福岡工業大学・工学部・助教

研究者番号：20582414

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：金属材料における双晶や転位などの内部摩擦を再現でき、複雑な機械システムの振動応答を高精度に推定可能な振動解析法を開発することを目的とした。マンガン基制振合金の一種であるM2052合金の結晶構造を分子動力学（MD）法によりモデル化し、深層学習に基づくニューラルネットワーク原子間ポテンシャル（NNP）の構築を試みた。MD法を用いた引張試験シミュレーションの結果、M2052合金の機械的特性を精度良く推定できるNNPの構築が実現可能であることを示した。今後は、双晶を考慮したMDモデルを構築したうえで、縦弾性係数や対数減衰率等の機械的特性の推定を行い、NNPの精度評価および改善を進めていく予定である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、金属材料の内部構造、周囲温度や圧力等の機械システムの運転環境を考慮した統合的振動解析法の開発が可能であることを示した。これは、CAE（Computer Aided Engineering）による複雑な機械システムの設計開発において、振動解析の位置づけを変化させるものであり、あらゆる環境下における機械システムの振動特性を実験せずに高精度に推定できるようになる。本研究で検討を進めている統合的振動解析法は、超小型機械や極限環境下での機械システムの開発等、様々な産業分野での応用が可能であると考えられる。

研究成果の概要（英文）：The purpose of this study is to develop a vibration analysis method that can highly accurately estimate the vibration response of mechanical systems by modeling internal friction mechanisms, such as twinning and dislocations, in metallic materials. The crystal structure of the M2052 alloy, a manganese-based vibration-damping alloy, was modeled using the molecular dynamics (MD) method, and a neural network interatomic potential (NNP) based on deep learning was developed. The results of tensile test simulations using the MD method suggest that it is possible to develop an NNP that can accurately estimate the mechanical properties of the M2052 alloy. In the future, we plan to evaluate and improve the accuracy of the NNP by developing an MD model that takes twinning into account and estimating mechanical properties such as Young's modulus and the logarithmic damping ratio.

研究分野：機械力学・制御

キーワード：機械力学・制御 振動解析 分子動力学法 内部摩擦 マルチスケール解析

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

機械システムの開発・設計では、振動特性の異なる金属材料を用いた部品を多数使用することがあり、振動入力時において系の応答が著しく増大する可能性を有する。このような機械システムにおける振動応答の推定には FEM (有限要素法) が用いられるが、金属材料の内部摩擦に起因する振動減衰能の再現が困難であり、CAE による最適設計の障壁となっている。そこで本研究では、材料内部の転位や双晶といった内部摩擦を高精度にモデリングすることが可能な MD (分子動力学) 法と FEM を組み合わせた統合振動シミュレータの開発に挑む。

2. 研究の目的

本研究の目的は、金属材料における双晶や転位などの内部摩擦を再現でき、複雑な機械システムの振動応答を高精度に推定可能な振動解析法を開発することである。そこで、本研究では、以下の課題を実施する。

(1) 金属材料の結晶構造の構築

双晶型高減衰材料を解析対象として、金属材料の内部摩擦を再現できる MD モデルの構築を行う。また、金属材料の結晶構造および元素分布の同定、材料内部の微細双晶の確認を行う。

(2) 金属材料の振動減衰能の推定

金属材料の内部摩擦による系の振動減衰能への寄与度を求めるため、スーパーコンピュータ (九州大学) による大規模 MD 解析を行う。

(3) 統合振動シミュレータの開発

フルシミュレーションによる機械システムの開発・設計を実現するため、統合振動シミュレータを開発する。先行研究で構築した FEM-MD 連成による大規模振動解析用プログラムに、本研究で作成した内部摩擦を再現するための大規模 MD 解析用プログラムを結合させる。

3. 研究の方法

(1) 金属材料の結晶構造の構築

本研究では、MD による数値解析としてマンガン基制振合金の一種である M2052 合金 (マンガン(Mn):73% ,銅(Cu):20% ,ニッケル(Ni):5% ,鉄(Fe):2%)を解析対象とする。この制振合金は、双晶型の制振機構を有する。M2052 を選定した理由として、双晶型は転位型や強磁性型等の他の制振機構と比較して MD によるモデリングが容易であり少ない要素数で数値解析が可能であること、合金の双晶モデルを用いた MD による数値解析の実績を有すること (鈴木他, *JSME M&M2016*), M2052 合金の振動減衰能の発現機構について複数の報告が存在すること (Yin et al., *Mater Trans*, 2001) が挙げられる。以上の理由により、本研究で構築した結晶構造の MD モデルが適切であるか判断することが可能である。

MD 法による数値解析では、解析対象の金属内に存在する原子に対応した原子間ポテンシャルを予め用意しておく必要がある。本研究では、EAM (Embedded Atom Method) ポテンシャル (Daw, and Baskes, *Phys Rev B*, 1984) の一種である GEAM (Generalized EAM) ポテンシャル (Zhou et al., *Phys Rev B*, 2004) を用いる。GEAM ポテンシャルを用いることにより、単元系の原子間ポテンシャルから多元系合金の原子間ポテンシャルを導出することが可能となるが、M2052 合金の結晶構造を正確に再現できるかは不明である。そこで、本研究では、FE-SEM (電解放出型走査電子顕微鏡, 日本電子社製 JSM-7100F), EDS / EBSD (エネルギー分散型 X 線分析法 / 電子線後方散乱回折法, オックスフォード・インストルメンツ社製 Aztec Energy Advanced X-act / Aztec Integrated HKL Advanced Nordy Nano) を用いて M2052 合金板 (RIX 社製 制振合金 WAVLES1, 厚さ 1mm) の元素分析および結晶構造解析を行い、MD によるモデリングが適切であるか検証する。

(2) 金属材料の振動減衰能の推定

九州大学スーパーコンピュータ (Fujitsu PRIMERGY CX2570 M4, CPU: Intel Xeon Gold 6140 × 2, GPU: NVIDIA Tesla P100 × 4) および名古屋大学スーパーコンピュータ (Fujitsu Server PRIMERGY CX2570 M5, CPU: Intel Xeon Gold 6230 × 2, GPU: NVIDIA V100 × 4) を用いて振動解析を実施し、材料内部の内部摩擦による振動エネルギーの散逸量を定量的に明らかにする。

(3) 統合振動シミュレータの開発

先行研究で構築した FEM-MD 連成による大規模振動解析用プログラムに、本研究で作成した内部摩擦を再現するための MD 解析用プログラムを結合させる。材料内部の内部摩擦による振

動減衰能および摩擦・衝突現象を高精度に再現できる統合振動シミュレータを開発する。

4. 研究成果

M2052 合金は, Mn, Cu, Ni, Fe を含む 4 元系合金であり, 各元素は不規則相を形成しつつ全率固溶している。合金生成後の冷却過程において, 結晶中の Mn 原子の磁気モーメントが熱エネルギーによる揺らぎに打ち勝ち, 磁氣的秩序を帯びて一定の配列をなす。M2052 合金は, この磁気秩序および熱弾性型マルテンサイト変態によって常温域で結晶構造の歪化が発生し, 面心立方格子 (FCC) 構造を取る。本研究では, 原子数 32000 の M2052 合金の MD モデルを作成し, 大規模 MD シミュレータである LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) を用いて系のエネルギーの緩和計算を実施した。

まず, 手順 1 として, 共役勾配法を用いて系の温度 $T = 0\text{K}$ における系全体のエネルギーが最小となる原子位置を探索した。次に, 手順 2 として, 上述の緩和計算で得られた最安定状態の原子配置を用いて, 系の温度が 300K となるよう各原子に初期速度を与え, 系の原子数 N , 体積 V , 温度 T が一定 ($T = 300\text{K}$) となるように制御しながら, MD 解析を実施した。各原子の運動方程式の数値積分については, 速度ベレル法を用いた。

手順 1 で得られた緩和計算後の各原子の位置のスナップショットを図 1 に示す。 $T = 0\text{K}$ における最安定状態の原子配置を求めた結果, 図 1 の左下側に双晶が発生した。さらに, 前章で述べた EDS, EBSD による M2052 合金板の元素分析および結晶構造解析を行った結果, Mn: 70.5%, Cu: 22.3%, Ni: 5.2%, Fe: 2.0% の組成であり, FCC 構造に近い結晶構造をとるものであることが分かった。手順 2 において, $T = 300\text{K}$ での系のポテンシャルエネルギーを取得した。計算開始時においては, ポテンシャルエネルギーの変動が大きい, 時間の経過とともにその変動幅が小さくなり, 系が安定状態になることが確認できた。

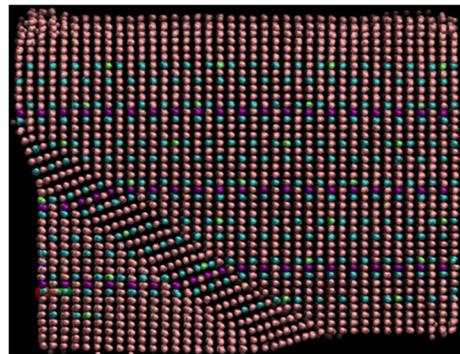


図 1 緩和計算後の原子配置 ($T = 0\text{K}$)

手順 2 で得られた MD モデルを用いて引張試験シミュレーションおよび振動試験シミュレーションを実施した。MD 解析の結果, 本研究で構築した MD モデルの縦弾性係数は 142.7GPa , 対数減衰率は 0.17 であることが分かった。過去の研究における実験値 (縦弾性係数 67.7GPa , 対数減衰率 0.3) と比較すると大きな差異が生じていることから, M2052 合金の GEAM ポテンシャルは実際の材料の機械的特性を精度良く推定することが困難であると考えられる。

そこで本研究では, 深層学習に基づくニューラルネットワーク原子間ポテンシャル (NNP) に注目した。Behler らが提案した High-Dimensional NNP (*Phys Rev Lett*, 2007) は, 多数のニューラルネットワークを基に, 系の原子配置を入力データとして系のポテンシャルエネルギーを出力するものである。本手法は, ニューラルネットワークの入力層に放射対称関数および角度対称関数を導入することで, 古典 MD 法による大規模系の総原子数が教師データを準備する際に用意する第一原理計算のための小規模系の総原子数と異なっている場合でも問題なく適用でき, 汎用性の高い原子間ポテンシャルを構築することが可能とされている。ただし, 上述の対称性関数は, 多くの元素が存在する多元系では計算量が大幅に増大する可能性がある。Zhang らは, 並進, 回転, 置換対称性を維持するような局所座標を導入した上で, 原子間距離の逆数で局所座標を表現するような深層ニューラルネットワークを提案した (*Phys Rev Lett*, 2018)。本手法を用いた NNP 構築用のオープンソースソフトウェアである DeePMD-kit が Zhang らの研究チームにより一般公開されている (*Comput Phys Commun*, 2018)。本研究では, DeePMD-kit を用いて M2052 合金の NNP の構築を試みた。深層学習時の教師データについては第一原理計算により作成した。ここで, 第一原理計算とは, 実験結果を用いずに量子力学の基礎方程式であるシュレーディンガー方程式から系の電子状態を求める計算方法である。本研究では, 密度汎関数法に基づく平面波基底および擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算用プログラムパッケージである Quantum ESPRESSO を用いた。擬ポテンシャルには Ultrasoft 型, 電子の交換相互汎関数には一般化勾配近似 (GGA) の一種である Perdew-Burke-Ernzerhof 交換相互汎関数を用いた。初期の原子配置は, Mn, Cu, Ni, Fe がランダムかつ FCC 構造となるようにするため, MATLAB により原子の初期配置の生成および Quantum ESPRESSO の入力ファイルの出力を同時に行うソースコードを記述した。原子数 108 とし, 計算セル内において Mn: 73%, Cu: 20%, Ni: 5%, Fe: 2% に近い割合となるように各原子を配置した。計算セルの大きさは, $11.1\text{Å} \times 11.1\text{Å} \times 10.8\text{Å}$ を基準とし, 3 辺を $0.700, 0.750, 0.800, 0.850, 0.900, 0.950, 1.00, 1.05, 1.10$ 倍に変化させた計算セル内に Mn, Cu, Ni, Fe 原子を配置した。ここで, M2052 合金は反強磁性を有することから, 本研究では c 軸方向のみスピン分極を考慮した。計算セルの大きさ, 原子の初期配置が異なる結晶構造を 15629 種類用意し, 第一原理計算を実施した。第一原理計算により得られた全解析結果の約 7 割を深層学習の教師データ, 約 1 割を検証用データ, 約 2 割をテスト用データとした。

DeePMD-kit および第一原理計算による解析結果を深層学習の教師データ (10944 個), 検証用データ (1561 個), テスト用データ (3124 個) として利用し, M2052 合金の NNP の構築を試み

た．カットオフ距離を 8.0 \AA ，深層ニューラルネットワークの隠れ層を 3 層，深層学習の訓練ステップ数を 1000000 として NNP の構築を行った．1000000 ステップ経過後の 1 原子あたりのエネルギーの二乗平均平方根誤差 (RMSE) は $3.45 \times 10^{-3} \text{ eV}$ ，力の RMSE は $3.51 \times 10^{-2} \text{ eV/\AA}$ であった．ここで，DeePMD-kit による NNP のエネルギーおよび力の RMSE の目標値は，それぞれ $1.00 \times 10^{-2} \text{ eV}$ 以下および $1.00 \times 10^{-1} \text{ eV/\AA}$ 以下である．本研究で構築した M2052 合金の NNP は，いずれも目標値を満たしていることがわかった．

上述の M2052 合金の NNP ポテンシャルを用いて，原子数 32000 の MD モデルを構築した．系の原子数 N ，圧力 P ，温度 T が一定となるように制御しながら 100000 ステップの緩和計算を実施し，系のポテンシャルエネルギーが平衡状態に達していることを確認した．さらに，計算セルの x 軸方向に一定のひずみ速度を与え，計算セルを変形させる．解析結果より応力 - ひずみ線図を作成し，弾性域で最小二乗法による直線近似を行うことで，縦弾性係数の推定を試みた．系の温度 T は $173 \sim 373 \text{ K}$ とした．図 2 は $T = 300 \text{ K}$ における応力 - ひずみ線図であり，このグラフから推定した縦弾性係数は 82.0 GPa であった． $173 \sim 373 \text{ K}$ の各温度域で応力 - ひずみ線図を作成し，縦弾性係数を推定した．系の温度 T と縦弾性係数の関係を図 3 に示す．

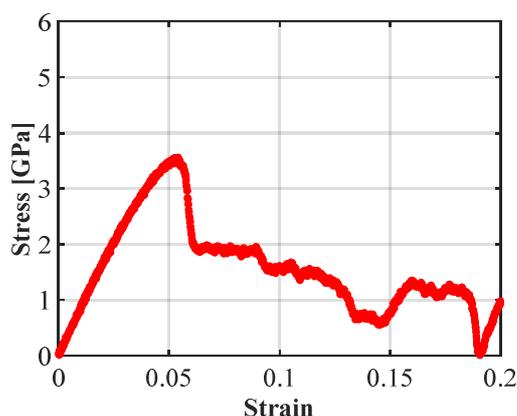


図 2 $T = 300 \text{ K}$ における応力 - ひずみ線

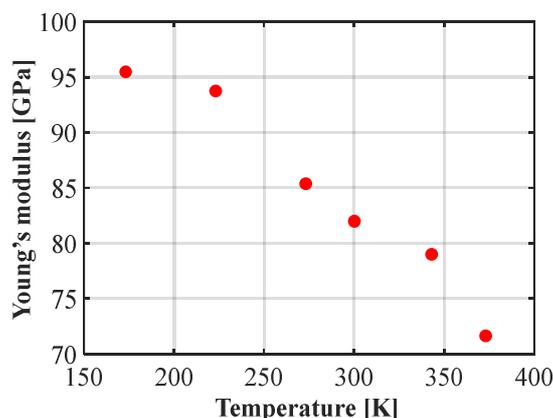


図 3 M2052 合金の縦弾性係数の温度依存性

$T = 300 \text{ K}$ における縦弾性係数の推定値と実験値 (67.7 GPa) を比較すると，20%程度の差異が生じている．構築した MD モデルは単結晶かつ不純物や初期欠陥が含まれていないものであるのに対して，実際の M2052 合金の試験片は多結晶体であることから，上記の差異が生じているものと考えられる．また，MD モデルにおける縦弾性係数の温度依存性については，実験と同様の傾向を示すことが分かった．

以上より，エネルギーおよび力の誤差が小さく，M2052 合金の縦弾性係数を精度良く推定できる NNP の構築が実現可能であることを示した．今後は，多結晶や双晶を考慮した MD モデルの構築を行ったうえで，縦弾性係数や対数減衰率等の機械的特性の推定を行い，上記の NNP の精度評価および改善を進めていきたいと考えている．また，M2052 合金向けの NNP を用いて，原子数 1000 万～1 億程度の大規模 MD 解析および統合振動シミュレータの開発を継続して実施する．

<引用文献>

鈴木俊也，宮澤直己，袴田昌高，馬淵守，千野靖正，“Mg の二重双晶に及ぼす Y 偏析の影響の原子シミュレーション”，日本機械学会 M&M2016 材料力学カンファレンス講演論文集，pp.46-49 (2016)．

F. Yin, Y. Ohsawa, A. Sato and K. Kawahara, “Characterization of the Strain-amplitude and Frequency Dependent Damping Capacity in the M2052 Alloy”, *Materials Transactions*, Vol.42, No.3, pp.385-388 (2001)．

M.S. Daw and M.I. Baskes, “Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals”, *Physical Review B*, Vol.29, No.12, pp.6443-6453 (1984)．

X.W. Zhou, R.A. Johnson and H.N.G. Wadley, “Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers”, *Physical Review B*, Vol.69, pp.144113 (2004)．

J. Behler and M. Parrinello, “Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces”, *Physical Review Letters*, Vol.98, 146401 (2007)．

L. Zhang and J. Han, “Deep Potential Molecular Dynamics: A Scalable Model with the Accuracy of Quantum Mechanics”, *Physical Review Letters*, Vol.120, 143001 (2018)．

H. Wang, L. Zhang, J. Han, W. E, “DeePMD-kit: A deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics”, *Computer Physics Communications*, Vol.228, pp.178-184 (2018)．

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Akinori Tomoda, Masahiro Yamanaka, Taiyo Takashima	4. 巻 -
2. 論文標題 Vibration Analysis of a Beam with Both Ends Fixed using Molecular Dynamics Method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Vibration Engineering for a Sustainable Future (Proceedings of the Asia-Pacific Vibration Conference 2019)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 山口順也, 鞆田顕章, 朱世杰
2. 発表標題 分子動力学法を用いた銅単結晶の機械的特性の推定
3. 学会等名 日本機械学会九州支部第77期総会・講演会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 山口順也, 鞆田顕章, 藤壺航輔, 山内菜奈
2. 発表標題 Mn基制振合金の機械的特性の推定のためのニューラルネットワーク原子間ポテンシャルの構築
3. 学会等名 日本機械学会九州支部第77期総会・講演会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 朱世杰, 中村雄飛, 鞆田顕章
2. 発表標題 Zr-Ni-Al金属ガラスの疲労せん断帯厚化の支配要因および形成条件
3. 学会等名 日本材料学会 第35回疲労シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中村雄飛, 鞆田顕章, 朱世杰
2. 発表標題 Zr-Ni-Al金属ガラスの疲労挙動の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会 2021年度 年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中直道, 鞆田顕章, 岩下雄輝, 菊池雅翔
2. 発表標題 Mn基合金の振動減衰機構表現のための原子間ポテンシャルの検討
3. 学会等名 日本機械学会 九州支部 九州学生会第52回学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中村雄飛, 鞆田顕章, 朱世杰
2. 発表標題 分子動力学法を用いたZr-Ni-Al金属ガラスの圧縮試験シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会 九州支部 第74期総会・講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Akinori Tomoda, Masahiro Yamanaka, Taiyo Takashima
2. 発表標題 Vibration Analysis of a Beam with Both Ends Fixed using Molecular Dynamics Method
3. 学会等名 The 18th Asia-Pacific Vibration Conference (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高島 太陽, 鞆田 顕章
2. 発表標題 機械システムの振動減衰能の高精度推定に向けた分子動力学モデルの構築 (-Mn結晶の分子動力学モデル)
3. 学会等名 日本機械学会九州支部第73期総会・講演会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関