

令和 6 年 6 月 19 日現在

機関番号：17201

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03772

研究課題名(和文)連続体と不連続体をつなぐメッシュフリー・分子動力学ハイブリッド解析手法の開発

研究課題名(英文) Development of a meshfree-molecular dynamics hybrid analysis method bridging continuum and non-continuous body

研究代表者

只野 裕一 (Tadano, Yuichi)

佐賀大学・理工学部・教授

研究者番号：00346818

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：原子スケールから連続体スケールの物理現象を統一的に数値解析し、固体材料の変形における連続体から不連続体へ、もしくは不連続体から連続体への遷移のメカニズムを明らかにすることを目的として、原子と連続体をシームレスに取り扱うメッシュフリー・分子動力学ハイブリッド解析手法を新たに提案した。連続体解析手法であるメッシュフリー法において、物質点は連続体を構成する点でありながら離散的な取り扱いが可能であることに注目し、連続体と原子の性質も併せ持つハイブリッド物質点を新たに導入することで、従来手法では表現が困難であった連続体、不連続体の両者と矛盾なく接続可能なハイブリッド解析手法を開発することができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題で提案した解析手法により、従来手法では困難であった連続体、不連続体の両者と矛盾なく接続する数値解析が可能となった。これにより、固体材料の変形における連続体から不連続体へ、もしくは不連続体から連続体への遷移のメカニズムを明らかにするための新たな枠組みを構築できたことが、本研究の学術的意義である。今後、提案手法を種々の材料の変形挙動解析に適用することで、高性能な構造材料創製のためのシミュレーション技術の確立や、種々の塑性加工解析の高精度化へと展開可能な工業的応用の可能性も秘めていることが、本研究の社会的意義である。

研究成果の概要(英文)：To analyze physical phenomena from atomic to continuum scales with a unified numerical scheme and to elucidate the mechanisms of continuum-to-discontinuous body transitions in the deformation of solid materials, a novel meshfree-molecular dynamics hybrid analysis method that bridges atoms and continua behaviors seamlessly. In the meshfree method, which is a continuum analysis method, a material point consists of a continuum body and can be treated as a discrete point. Using this feature of the meshfree method, a concept of hybrid material point, which has both continuum and atom properties, is proposed and a hybrid analysis method that bridges continuum and discontinuous body without any contradiction has been developed.

研究分野：計算固体力学

キーワード：マルチスケール解析 メッシュフリー法 分子動力学法

1. 研究開始当初の背景

固体力学、材料科学の世界で、マルチスケール、マルチフィジクスという語が広く使われるようになって久しい。いずれも魅力的なキーワードであり、実際に理論面と実用面のいずれからも非常に重要なテーマである。しかし視点を変えれば、種々の現象を複数のスケールや物理に分割して捉えざるを得ない、ということでもある。あるスケールの現象を積分しても、一つ上のスケールの現象の解が直ちに得られるわけではない。離散的な点として扱われる原子が多数集合し、巨視的には連続体とみなせる物質を構成するが、現実的な計算機性能では、原子シミュレーションの結果から連続体の挙動を直接予測することは困難である。

金属材料では、mm スケール、 μm スケール、nm スケールと、およそ 10^3 程度のスケール比ごとに異なる構造が見いだされる。そこで現実的な解析手法として、スケールごとに異なる物理モデル、計算モデルを導入し、それらを連成させることでマルチスケール解析を実現することになる。しかし、離散的な原子スケールにおける不連続体挙動が、どのようにして連続体としての振る舞いへ移行するのか、という問いに対する明確な回答は、未だ得られていない。これは、両スケールにおける物理現象を結びつける物理モデルおよび解析手法が、未だ確立できていないことによる。原子スケール、連続体スケールの個々のモデルについては多数の先行研究がなされ多くの知見が得られているが、連続体から不連続体へ、もしくは不連続体から連続体へ現象がいかにして接続、遷移するのか、という疑問には答えられていないのが現状である。

研究代表者はこれまでに、マルチスケール解析に関する複数の研究課題を遂行してきた。特に最近では、幾何学的に必要な転位密度の情報を導入した高次勾配結晶塑性論を用い、サブミクロンスケールの現象である転位の情報を、 μm スケールの材料モデルに反映させることで、多結晶金属における寸法効果や粒界挙動、双晶変形を表現する試みを行っている。このモデル化において、転位はあくまで連続体力学の枠組みの中で密度として導入されており、離散的な原子スケールの挙動としての転位を直接取り込んだ解析はできないという限界が、特に粒界挙動や変形双晶の表現において障壁となってきた。

一方で、連続体解析手法の一種であり、研究代表者が数年前より研究対象としているメッシュフリー法は、離散的な点の情報から連続体を表現する手法であり、有限要素法のような連続領域としての要素は持たない。この点が離散的な解析手法である分子動力学との親和性が高いのではないかと、という可能性に着目し、メッシュフリー法の物質点と分子動力学法の原子という2つの特性を有するハイブリッド物質点を導入するという、本研究の着想に至った。

2. 研究の目的

本研究課題では、連続体スケールの解析手法にメッシュフリー法を、原子スケールの不連続体としての挙動に対する解析手法に分子動力学法をそれぞれ導入し、両者をつなぐ遷移領域の解析手法として、連続体としての物質点と原子の両方の性質を併せ持つハイブリッド物質点の考えを新たに導入したメッシュフリー・分子動力学ハイブリッド解析手法を提案する。これにより、連続体と不連続体(原子)をシームレスに取り扱うことが可能となる。これにより、原子スケールの現象を反映した連続体スケールの材料挙動、および連続体スケールの現象を反映した原子の挙動を解明するための、新たなマルチスケール解析理論が構築することを目的とする。

3. 研究の方法

メッシュフリー法と分子動力学法を連成することで、連続体スケールの材料挙動と原子スケールの不連続体の挙動をシームレスに解析可能な理論を提案すると共に、複数の数値解析例を通じてその有用性と適用可能範囲を詳細に調査した。まず、本研究課題の中核となる、連続体-不連続体間のハイブリッド解析手法の定式化を行った。連続体解析に対する物質点と、分子動力学解析における原子の両方の性質を併せ持つハイブリッド物質点を導入した解析手法を定式化し、連続体解析における支配原理である仮想仕事の原理と整合するよう留意しながら定式化を進め、力学的に矛盾のない体系を構築した。図1に提案手法の概要を示す。本手法の重要な独自性が、連続体と不連続体をシームレスに遷移させるために、遷移領域を設けることである。遷移領域では、物質点は連続体と原子の両方の性質を有するハイブリッド物質点として取り扱う。具体的には、連続体のメッシュフリー解析では通常の節点として振る舞い、分子動力学解析では原子として振る舞うような物質点を導入し、このハイブリッド物質点を介してメッシュフリー解析と分子動力学解析の情報が相互に交換されることになる。

つぎに分子動力学解析手法についての検討を実施した。研究期間前半においては、分子動力学解析は自ら開発したハウスコードを用いて行い、手法の妥当性を検証したが、研究期間後半に汎用分子動力学パッケージである LAMMPS の導入を新たに行った。これにより、LAMMPS が有する多様な機能や原子ポテンシャルを使用することが可能となり、提案手法を汎用性の高い手法へ拡張することができた。

実装した提案手法を用いて、メッシュフリー法における物質点数や分子動力学法の原子数、遷移領域のハイブリッド物質点の数などが、解析結果へ及ぼす影響を定性的および定量的に調査

し、既存の手法に対する優位性を調査した。その後、複数の条件による数値解析を実施し、提案手法の妥当性と適用範囲を調査し、提案手法の汎用性と有用性を確認した。以上により、本研究課題が目指す、メッシュフリー法と分子動力学法を連成することで、連続体スケールの材料挙動と原子スケールの不連続体の挙動をシームレスに解析可能な理論構築を達成することができた。

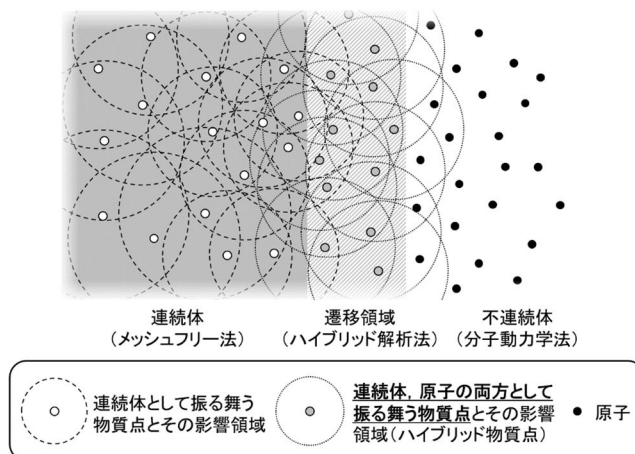


図1 提案手法による連続体-不連続体遷移の概要

4. 研究成果

本研究課題で得られた主な研究成果は、以下の通りである。

(1) 不連続体である原子と連続体をシームレスに取り扱うことを可能とするメッシュフリー・分子動力学ハイブリッド解析手法を新たに提案した。連続体と不連続体をシームレスに遷移させるために、遷移領域を設け、遷移領域では物質点は連続体と原子の両方の性質を有するハイブリッド物質点として取り扱う新たな理論を構築した。連続体のメッシュフリー解析では通常の間点として振る舞い、分子動力学解析では原子として振る舞うような物質点を導入し、このハイブリッド物質点を介してメッシュフリー解析と分子動力学解析の情報を相互に交換させることが可能であることを示した。

(2) 提案理論に基づき、手法の実装を行った。研究代表者がこれまでに開発したメッシュフリー解析プログラムと、新規に実装した分子動力学解析プログラムを連成する解析コードを開発し、いくつかのベンチマーク例題を通じて提案手法の妥当性を確認した。つぎに、汎用分子動力学解析パッケージ LAMMPS による実装を行った。これにより、LAMMPS に実装されている多様な機能や原子ポテンシャルを本理論の枠組みにおいて使用することが可能となり、提案手法をより汎用性、実用性の高いものへと拡張することができた。

(3) 複数の条件における例題解析を通じて、提案手法の妥当性を検証した。一例として、単軸引張解析の結果を示す。図2に解析モデルを、図3に全エネルギーの時刻歴をそれぞれ示す。

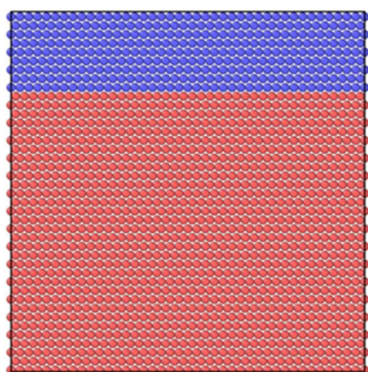


図2 単軸引張解析モデル

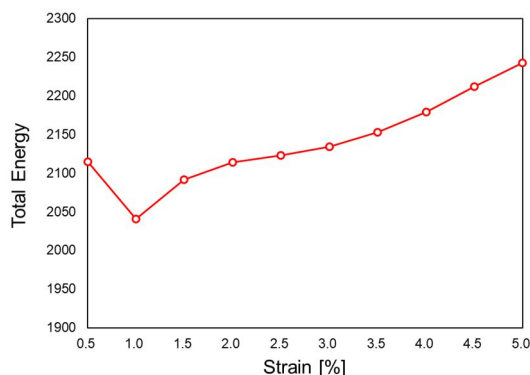


図3 全エネルギー時刻歴

図2において、分子動力学法で取り扱う原子は赤、メッシュフリー法で扱う節点は青の粒子で示されている。また、青で示された粒子の一部はハイブリッド物質点として扱っている。このモデ

ルに対して、図中垂直法方向へ 5% のひずみに相当する強制変位を付与したときの、与えたひずみと全エネルギーの時刻歴が図 3 となる。ひずみの増加とともに全エネルギーは上昇しており、これは与えたひずみエネルギーに対応している。なお、解析の初期ステップにおいて一度エネルギーが減少しているが、これは原子が初期配置から安定な配置へと移行することによるエネルギーの緩和であると考えられる。

以上を通じて、従来手法では表現が困難であった連続体、不連続体の両者と矛盾なく接続可能なハイブリッド解析手法を開発することができた。今後の展望として、現状では連続体のスケールとして μm スケール程度を想定しているが、連続体スケールの解析手法をよりブラッシュアップすることで、巨視的スケール (mm スケール以上) から原子までを一つの数値解析で表現できるよう提案手法を拡張することが挙げられる。これにより、高性能な構造材料創製のためのシミュレーション技術の確立や、種々の塑性加工解析の高精度化などの工業的応用につなげられるよう、引き続き提案手法の改良を継続する予定である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 0件）

| |
|--|
| 1. 発表者名 只野裕一, 大川祐樹, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 高次勾配結晶塑性モデルを用いた大変形解析におけるメッシュフリー法の解析精度 |
| 3. 学会等名 第35回計算力学講演会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 永田紘暉, 只野裕一 |
| 2. 発表標題 メッシュフリー・分子動力学ハイブリッド解析手法構築に向けた基礎検討 |
| 3. 学会等名 日本機械学会九州支部 第76期総会・講演会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎 |
| 2. 発表標題 高次勾配結晶塑性メッシュフリー法によるキンク強化機構解明へのアプローチ |
| 3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演大会（招待講演） |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 大川祐樹, 只野裕一, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 高次勾配結晶塑性解析におけるメッシュフリー法および有限要素法の性能評価 |
| 3. 学会等名 第34回計算力学講演会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 城下颯汰, 只野裕一, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 メッシュフリー法と分子動力学法を融合したマルチスケール連成解析手法開発に向けた基礎検討 |
| 3. 学会等名 第36回計算力学講演会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 只野裕一 |
| 2. 発表標題 メッシュフリー法によるマルチスケール問題へのアプローチ |
| 3. 学会等名 日本機械学会A-TS01-15研究会第3回研究会（招待講演） |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 城下颯汰, 只野裕一, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 メッシュフリー法と分子動力学法を融合したマルチスケール解析手法の開発 |
| 3. 学会等名 第29回計算工学講演会 |
| 4. 発表年 2024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 |
|---------|---------|
|---------|---------|