

審査の結果の要旨

氏名 早川 頌

現代社会には様々な巨大構造物が存在するが、それらの安全性・効率性は社会の持続可能性に直結するため、構造物の躯体とも言える構造材料の健全性を担保することは必須である。また、現代社会においては人工物を取り巻く環境が劇的に変化し得ることを考慮した場合、設計当初の考えや従来の保全学に基づく手法ではもはや構造材料の健全性を十分に担保することは難しい。よって、計算科学に基づいたシミュレーションによる材料挙動の評価・予測が必要であり、その技術のさらなる発展が望まれる。さらに、我々が直面する材料劣化現象は多くの場合マクロスケールの現象である一方で、その引き金となる現象はミクロスケールの現象であることを考慮すると、材料劣化現象のシミュレーションを行う上ではマルチスケールモデリング技術が不可欠となる。微細組織挙動を定量化する上で分子動力学法が従来広く用いられてきた。しかし分子動力学法は原子振動を取り扱う都合上時間刻み幅を 10^{-15} s オーダーに設定する必要があるため、到達できる時間スケールに制限が存在する。時間スケールの壁を克服する手段として、Kinetic Monte Carlo 法のような State-to-State ダイナミクス概念に基づくアプローチは極めて有用であるが、一方で原子スケールの精度と上記概念を両立するための技術はこれまで十分に注目されて来なかった。すなわち、現在のマルチスケールモデリング技術体系において、時間スケールに関する部分が未発達であると言え、その開発と発展が強く望まれる。以上を踏まえ本論文では、原子スケールの精度とメゾ時間スケール性を両立した計算手法の開発・高度化をそれぞれ行い、構造材料健全性担保のための計算科学技術の発展に資することを目的としている。

第 1 章では、構造材料の健全性担保におけるマルチスケールモデリングの必要性と、従来開発・使用されてきた各計算手法に関して詳細にまとめてあり、さらにその中から現在の課題としてマルチ時間スケール技術の弱さに焦点を当て、本論文の位置付けを明示している。

第 2 章では、原子炉構造材料中において観察される照射誘起欠陥形成過程の分子動力学シミュレーションを行っている。特にポアソンひずみ印加下での欠

陥形成過程に対して積層欠陥エネルギーが与える影響について詳細に論じており、原子レベルの挙動を考慮することにより従来の弾性論に基づいた場合と異なる考察が得られている。なお本章における結果は第 3, 4 章において扱われるメゾ時間スケール計算手法に対して重要なインプットパラメータとなる。

第 3 章では、原子スケールの精度とメゾ時間スケール性を併せ持つ手法として将来有望である **Self-Evolving Atomistic Kinetic Monte Carlo (SEAKMC)** 法の高度化を行っている。特に各ステップで行われる発生現象候補の探索に要する計算コストを大幅に削減する高速化スキームが提案されており、ベンチマーク計算の結果最大で約 100 倍の高速化が達成されている。さらに開発した手法を原子炉構造材料中に形成した照射誘起結晶欠陥集合体に適用し、分子動力学スケールの約 100 倍の時間で発生する、集合体の安定形態への変換過程を原子スケールの精度を保持したまま再現することに成功している。

第 4 章では、系のダイナミクスをポテンシャルエネルギー曲面上でのエネルギー最小化問題と捉えることにより、最適化手法を適用した微細組織安定状態再現手法 (**Energy Minimization with Basins-Constructed Space, EM/BCS**) を開発している。開発手法を原子炉構造材料中に形成した照射誘起結晶欠陥集合体に適用した結果、最適化手法の適用により適切に系の安定状態が探索されていることが示されており、さらに **SEAKMC** 法適用時には **Flicker events** の影響により安定形態への変換が見られなかった集合体形状パターンにおいても安定形態への変換プロセスを再現することに成功している。これはすなわち、**EM/BCS** 法が **SEAKMC** 法適用時に問題となっていた **Flicker events** の影響を軽減し得る特徴を有することを意味する。

第 5 章では、本論文で得られた成果を総括し、第 3, 4 章で高度化・開発した手法における課題と今後の展望が整理されている。

材料中微細組織挙動のモデル化を行う上で時間のマルチスケール化は従来十分に検討されてこなかった。本論文はそのような現状を打破するものであると言え、本論文で高度化・開発した手法は、原子レベルの精度、マルチ時間スケール性、計算コストの低さを併せ持つ極めて画期的・独創的な手法である。さらにこれら手法は第二相の形成、成長、粗大化の過程等、他のメゾ時間スケール現象への応用も十分期待でき、従来シミュレーション手法が抱えていたマルチ時間スケール技術部分の弱さを大幅に強化するものである。従って本論文で得られた成果は、構造材料健全性担保のための計算科学技術の発展に大きく資するものであると言える。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。