OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	加速分子動力学法の開発と応用-Adaptive Boost法(AB法)
Author(s)	石井, 明男
Citation	アンサンブル. 2017, 19(3), p. 151-157
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/89302
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

[2-2] 加速分子動力学法の開発と応用–Adaptive Boost 法 (AB 法)–

大阪大学　大学院基礎工学研究科
石井明男　ishii@me.es.osaka-u.ac.jp

概要
加速分子動力学法は統計力学的アプローチに基づいて，分子動力学法の時間加速を行う手法の総称である．この記事ではこの手法のうちの一つとして我々のグループにて開発している Adaptive Boost 法 (AB 法) [1] を紹介する．AB 法は今までの加速分子動力学法で提案されてきたアイデアの良いものを採用した，いわばこれまでの手法のいいとこどりをしたような手法であり，現象の時間加速から実際に現象が起きる時間を定量的に評価するに至るまで一連の解析を行うことが可能である．さらに実際に AB 法を用いたいくつかの応用例を紹介し，これからの発展・改良のために加速分子動力学法に存在する問題点についても述べる．

キーワード：加速分子動力学法，マルチスケール解析，自由エネルギー，出現頻度，温度・応力依存性，原子拡散，転位生成

1　緒言

計算機の演算能力の向上により，今や分子動力学法による計算シミュレーションは構造材料の変形，化学反応等の原子レベルのメカニズムを理解するのにはなくてはならない解析手法となっている．特に原子レベルのダイナミクス，定量的な物理量の獲得，エネルギー論に基づいた現象の解析・議論は結晶幾何や近年発達している TEM 観察を用いた実験をもってしても行うことができない分子動力学法の大きな利点である．一方で分子動力学法の弱みとしてよく挙げられるのがその時間・空間スケールにおける制限である．現在の研究室レベルの計算機では，分子動力学法によって解析できる時間スケールはたかだかナノ秒程度であり，空間スケールは大きくて μm 程度である．これは実験結果の時間・空間スケールに比べて極めて小さなスケールであり，分子動力学法の結果と実験結果との定量的比較の難しさが大きな問題となっている．さらに筆者の専門とする材料力学の分野ではスケールのかい離に起因して，分子動力学法で獲得したメカニズムの信憑性が問題視されることがしばしば見受けられる．

分子動力学法の空間スケールに関しては，近年設置が進んでいるスーパーコンピュータによる並列計算を用いれば大きく拡張を見込める．例えば，数年後設置が予定されているスーパーコンピュータ Post-K では 1 億原子およびそれ以上の分子動力学シミュレーションの実現が期待されており，これにより mm 相当の空間スケールの解析が可能である．一方で時間スケールに関しては，並列計算をもってしても拡張は難しく，並列計算効率を高めるコーディングにより，実験結果の時間スケール (秒) と分子動力学法の時間スケール (ナノ秒) 間のかい離を埋めることは困難である．そこでこの時間スケールのかい離を解消する手段として期待されているのが加速分子動力学法である．加速分子動力学法の歴史はアンブレラサンプリング [2] に始まり，マルチカノニカル法 [3]，hyperdynamics [4], メタダイナミクス法等 [5] の手法にいたるまで多くの手法が開発されてきた．これらの手法の共通点は，統計力学に基づいてエネルギー曲面に加工を施すことにより，現象の加速を行うことである．この記事ではこれらの手法のうちの一つとして我々のグループにて開発している Adaptive Boost 法 (AB 法) [1] を紹介する．さらに実際に AB 法を用いたいくつかの応用例を紹介し，加速分子動力学法に存在する問題点とこれからの展望についても述べる．AB 法は今までの加速分子動力学法で提案されてきたアイデアの良いものを採用した，いわばこれまでの手法のいいとこどりをしたような手法であり，現象の時間加速から実際に現象が起きる時間を定量的に評価するに至るまで一連の解析を行うことが可能である．この紹介を通して，加速分子動力学法の基礎概念，およびその問題点について概観いただくことで，加速分子動力学法を使用する際，または改良する際に参考の一助となれば幸いである．

2　Adaptive Boost 法 (AB 法)

2.1　加速分子動力学法の基本概念

分子動力学法において任意の現象が起きる時間は，3N 次元位置ベクトル空間 $\boldsymbol{R}$ において張られる系のポ

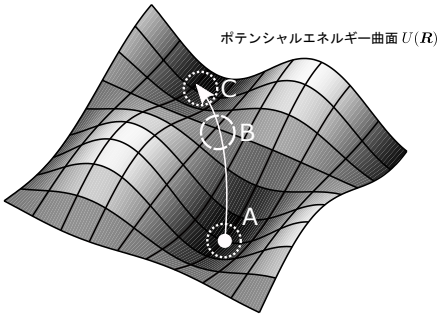


図 1: ポテンシャルエネルギー曲面と状態遷移の概念図．A,C はそれぞれ安定状態であり，B は A-C 遷移過程における鞍点である．

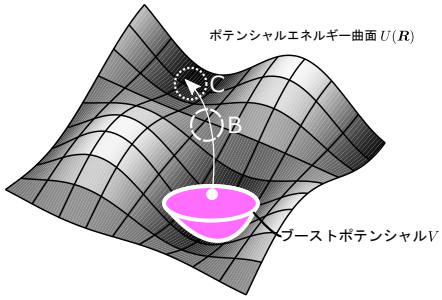


図 2: ポテンシャルエネルギー曲面とブーストポテンシャルの概念図．

テンシャルエネルギー曲面 (図 1) と密接な関係がある．ここで N は系に存在する粒子数の数である．ある現象 (図 1 中の A 点-C 点間の状態遷移に対応) が起きるのに必要な時間はアレニウスの式から，安定状態であるポテンシャルエネルギー曲面の谷底 $\boldsymbol{R_o}$(A 点) と鞍点 $\boldsymbol{R_s}$(B 点) の間のエネルギー差 $\Delta U \equiv U(\boldsymbol{R_s}) - U(\boldsymbol{R_o})$(エネルギー障壁) を用いて以下のように表現される．

$$t = \frac{1}{\nu_0 \exp\left(-\beta \Delta U\right)} \tag{1}$$

ここで ν_0 は試行頻度，β は逆温度である．一般的には現象の時間 t が分子動力学シミュレーションで計算可能な時間スケールより大きければその現象をシミュレーション中に観測することができない．しかしながら，もし任意の関数 $V(\boldsymbol{R})$ をポテンシャルエネルギー曲面に付加し $U' \equiv U + V$ と変化させ，$\Delta U' = \Delta U + \Delta V$ を小さくすることができればその現象を加速させ，シミュレーション中に発現させることが可能となる．これは具体的には図 2 に示すようにポテンシャルエネルギー曲面の谷を埋め，エネルギー曲面を平滑化するような V を選択してやればよい．このような V をブーストポテンシャルと呼ぶ．このように加速分子動力学法ではブーストポテンシャル V をポテンシャルエネルギー曲面 U に付加することで現象を加速させることが基本となる．この時，加速分子動力学法においてのポテンシャルエネルギー曲面はもはやオリジナルのものではなく，加速分子動力学法の時間 t_{acMD} は実時間 t_{real} とは異なっている．一方，遷移状態理論を用いれば，$\Delta U > \Delta V$ かつ $V(\boldsymbol{R}_s) = 0$ の時に限り，t_{acMD} と ΔV から t_{real} を推算することが可能である [6]．

$$t_{\mathrm{real}} = t_{\mathrm{acMD}} \langle \exp\left(\beta \Delta V\right) \rangle \tag{2}$$

ここで鍵括弧はアンサンブル平均を表す．つまり，ΔV の詳細が分かっていれば式 (2) を通じて実時間を獲得することができる．これにより，通常の分子動力学法では解析できないような時間スケールの大きいスローダイナミクスの現象を発現させるだけでなく，その現象に関与した物理量を定量的に評価・比較することが可能となる．

2.2 ブーストポテンシャルの定義

上述のように現象を加速しつつその物理を正確に捉えるためにはブーストポテンシャルの定義は重要であり，加速分子動力学法の各手法の違いは主としてこの部分である．アンブレラサンプリング [2] や hyperdynamics [7] といった多くの加速分子動力学法ではブーストポテンシャルの大きさはパラメータによって与えられている．これはポテンシャルエネルギー曲面の概形がおおよそわかっている場合には有効であるが，未知のポテンシャルエネルギー曲面の解析を行う際には V が $\Delta U > \Delta V$ かつ $V(\boldsymbol{R}_s) = 0$ の条件を満たす保証はなく，式 (2) を使用できるとは限らない．そこで本稿で紹介する AB 法ではブーストポテンシャルを以下のように定義する．

$$V(\boldsymbol{R}) \equiv \frac{1}{\beta} \ln \rho(\boldsymbol{R}) \tag{3}$$

ここで $\rho(\boldsymbol{R})$ は $\boldsymbol{R}$ に関する状態密度である．これは統計力学により，自由エネルギー曲面 $G(\boldsymbol{R})$ が

$$G(\boldsymbol{R}) = -\frac{1}{\beta} \ln \rho(\boldsymbol{R}) \tag{4}$$

と表されることに基づいている．このように定義された V はポテンシャルエネルギー曲面に合うように “adaptive” に変化する (図 3)．もし十分な精度で ρ を求めることができれば，$\Delta U > \Delta V$ かつ $V(\boldsymbol{R}_s) = 0$ の条件が常に満たされ，系の物理を破綻させることなくポテンシャルエネルギー曲面を平滑化することができる．この状態密度 $\rho(\boldsymbol{R})$ による V の定義はマルチカノニカル法 [3] のそれと共通した概念である．また実際の計算においてはのちに述べるように ρ は分子動力学シミュレーションによるサンプリングにより獲得する．

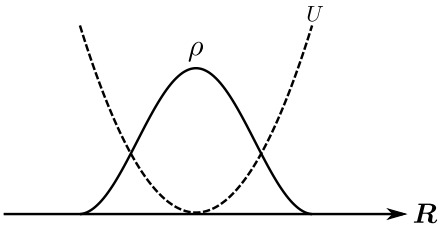


図 3: 状態密度 ρ とポテンシャルエネルギー曲面 U の関係.

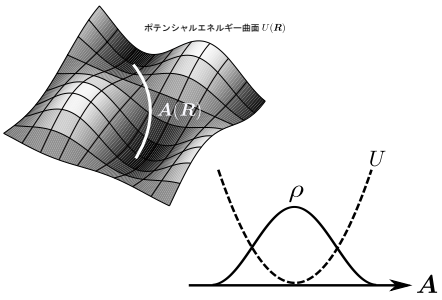


図 4: ポテンシャルエネルギー曲面における集団変数 $\boldsymbol{A}$

2.3 集団変数

AB 法における V や ρ は理論上 3N 次元位置ベクトル $\boldsymbol{R}$ の関数であるが，実際に 3N 次元において V を計算すること, すなわち ρ を分子動力学シミュレーションで十分にサンプリングするのは計算コスト上不可能である．そこで AB 法では 3N 次元より十分に低い次元の，図 4 に示すような集団変数

$$\boldsymbol{A} \equiv \{A_1(\boldsymbol{R}), A_2(\boldsymbol{R}) \dots A_i(\boldsymbol{R}) \dots\} \tag{5}$$

を定義し，$V(\boldsymbol{R}) \approx V(\boldsymbol{A})$; $\rho(\boldsymbol{R}) \approx \rho(\boldsymbol{A})$ と近似する．この集団変数の概念はメタダイナミクス法 [5] にも採用されており，適当な集団変数 $\boldsymbol{A}$ を用いて ρ を分子動力学シミュレーションでサンプリングできる次元まで落とし込むことを狙いとする．$\boldsymbol{A}$ の具体例としては，例えば原子座標，原子結合のボンド長，結合角，原子ひずみ [8]，基本セルの基底ベクトル等が挙げられ，1〜3 次元程度で計算コストが比較的低く解析したい現象に適合したものを選択するとよい．解析したい現象を分子動力学法によりモデル化し，更に適切な集団変数を選択・抽出するためには，解析者はその現象の物理に精通していることが求められる．

2.4 AB 法のコーディング

次に実際の数値計算における AB 法のコーディングについて述べる．理論的には十分長時間の分子動力学

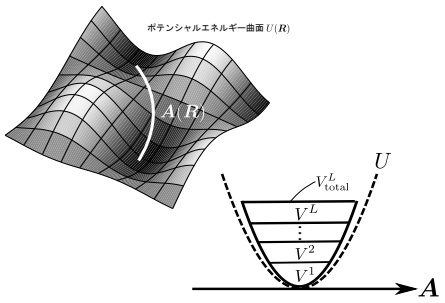


図 5: ポテンシャルエネルギー曲面へのブーストポテンシャル V^l の繰り返し付加

計算を実施し，十分なミクロ状態のサンプリング数があれば，ポテンシャルエネルギー曲面を完全に平坦化することができる．しかしながら，実際には分子動力学計算で得られるサンプリング数は有限であるため，ポテンシャルエネルギーを完全に平坦化する $\rho(\boldsymbol{A})$ を求めることは困難である．そこで，実際の数値計算では，ブーストポテンシャルを複数回に分けて段階的に評価する.(図 5)

計算の流れは以下の通りである．まず，特定のアンサンブルを実現した分子動力学計算を K ステップ行い，集団変数空間の K 個の離散位置データ $\{\hat{\boldsymbol{A}}_k \equiv \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}(k\Delta t))\}$ を得る．ここで Δt は運動方程式の時間積分幅であり，$k = 1, 2 \cdots K$ である．この離散データから参考文献に示す baby-bathwater scheme [9] を用いて，連続的かつなめらかな状態密度関数 $\rho^{(0)}(\boldsymbol{A})$ を得る．もし，この K ステップ間に状態遷移が起きていなければ，状態密度分布と式 (3) を用いて，初期ブーストポテンシャル $V^{(1)}(\boldsymbol{A})$ を得る．次に，求められた $V^{(1)}(\boldsymbol{A})$ をオリジナルのポテンシャル曲面 $V(\boldsymbol{R})$ に加え，新たなポテンシャル曲面を作成する．そして，この新しいポテンシャル曲面を用いて，再び K ステップの分子動力学計算を行う．この計算においても状態遷移がまだなお見られない場合には，この K ステップ間のサンプリングから新たな $\rho^{(1)}(\boldsymbol{A})$ を計算し，$V^{(2)}(\boldsymbol{A})$ を求める．そして，これをさらにポテンシャル曲面に加える．この一連のプロセスを，K ステップ間の分子動力学計算内で状態遷移が起きるまで行う．状態遷移が起きるまでに総計 L 回のブーストポテンシャルの加算が行われたとすると，それまでに加えられたブーストポテンシャルの合計は以下の式で表される．

$$V^L_{\rm total}(\boldsymbol{A}) = \sum_{l=1}^{L} V^l(\boldsymbol{A}) \tag{6}$$

このとき，遷移が起きるまでの実時間は，式 (2) に $V(\boldsymbol{A}) = V^L_{\rm total}(\boldsymbol{A})$ として，ブーストポテンシャルを

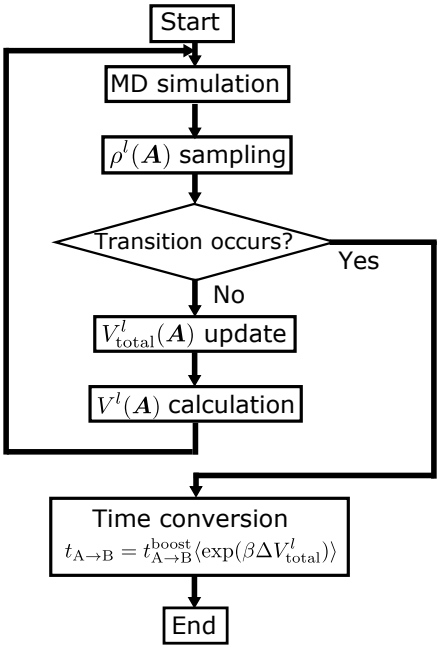


図 6: AB 法のフローチャート．

代入することにより求めることができる．この一連の操作をフローチャートにしたのが図 6 である．また分子動力学計算の際，次式で表されるブーストポテンシャルによって原子 i に作用する力を付加しておく必要がある．

$$\boldsymbol{F}_i^{\rm boost} = -\frac{\partial(V(\boldsymbol{A}))}{\partial \boldsymbol{r}_i} = -\frac{\partial(V(\boldsymbol{A}))}{\partial \boldsymbol{A}}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{r}_i} \qquad (7)$$

ここで $\boldsymbol{r}_i$ は原子 i の位置ベクトルである．前述のように ρ が連続関数となるように定義したのは，この式に現れる V の微分を行うためである．

3 応用例

AB 法を用いた応用例として，これまで当グループにて行われた α 鉄中の炭素拡散の解析 [1,10] および銅粒界部 [11] における転位生成の解析を紹介する．

3.1 α 鉄中の炭素拡散 [1, 10]

炭素原子は，α 鉄体心立方 (BCC) 結晶格子中において，八面体中心の O サイトに主として存在し，結晶格子中の拡散は隣接する O サイト間のジャンプにより起こることが知られている [12] (図 7)．室温における炭素の拡散係数は 10^{-16} [cm^2/s] 程度であり [13]，これは，一回の O サイト間ジャンプに要する平均時間が 10^{-1}[s] であることを意味する．よって高々ナノ秒程度の時間スケールしか扱わない通常の分子動力学法によって当該拡散現象を幅広い温度領域で解析することは難しい．

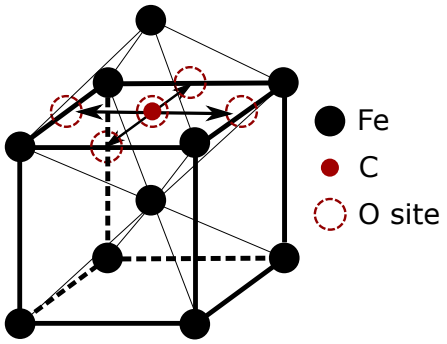


図 7: α 鉄バルク中の炭素拡散．炭素原子は O サイト間を拡散する．

そのため AB 法の性能を試す対象としてふさわしいと言える．

計算モデルには 432 個の鉄原子を含む α 鉄格子 (6×6×6 の BCC 単位格子) に一つの炭素原子を挿入したセルを用いた．また集団変数としてはすべての鉄原子の重心を原点として炭素原子の位置ベクトル $\boldsymbol{r}_{\rm C}$ を定義した場合の，[100] 方向への射影 $r_{\rm C}^{[100]}$ を採用した．これは [100] 方向に沿った炭素原子の隣接 O サイト間の拡散を加速させることを意図している．設定温度によってブーストポテンシャル評価のためのサンプリング数 K を変化させた．具体的には，$K = 10^4 (T$ =500, 600[K]), $K = 10^5$ (T =300, 400[K]), $K = 10^6$ (T =200[K]) とした．300[K] におけるポテンシャル曲面へのブーストポテンシャルの加算状況を図 8 に示す．図 8 からわかるように，この条件では，3 回目のブーストポテンシャル加算後に状態遷移が生じている．

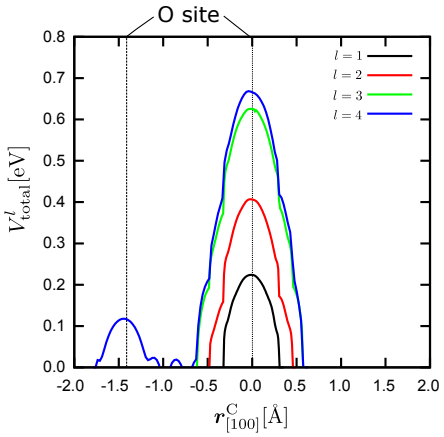


図 8: $V^l (l = 1, 2, 3, 4)$ の繰り返し付加による $V^l_{\rm total}$ の変化．

次に各温度において，同様の解析を初期原子速度を

表 1: 温度ごとの炭素原子の平均ジャンプ時間と AB 法による時間加速率

温度 [K]	平均ジャンプ時間 [ns]	加速率
200	1.48×10^{16}	1.45×10^{17}
300	3.24×10^{8}	5.72×10^{9}
400	7.08×10^{4}	8.78×10^{5}
500	2.48×10^{2}	3.07×10^{4}
600	4.64	9.78×10^{2}

ランダムに変えて 5 回行い，表 1 に示す炭素の平均ジャンプ時間，および時間加速率を計算した．200[K] では，時間加速倍率が 1.45×10^{17} と非常に大きな値となっており，実験でも困難な長時間スケールの拡散の解析が可能となっている．また平均ジャンプ時間を用いて炭素拡散の拡散係数 D_{C} の温度依存性を求めることができる (図 9)．$T = 200$[K] から 600[K] までの比較的低温では AB 法によって得られた平均ジャンプ頻度を用いて，$T = 600$[K] から 800[K] では通常の分子動力学法によって得られたジャンプ頻度を用いて評価した．600[K] では，比較のため，AB 法と通常の分子動力学法の両方を用いて，それぞれ拡散係数を求めているが，良い一致を示している．このことから，AB 法の換算後の時間スケールが妥当であり，AB 法におけるポテンシャル表面の埋め立て，および積算されたブーストポテンシャルに基づく時間換算が正しく働いていることが言える．拡散の活性化エンタルピーは，本グラフの傾きより算出できる．200[K] から 800[K] の間の結果を最小二乗法で直線近似したところ，活性化エンタルピーは 0.90[eV] と求められた．これは実験値 (0.77∼0.90[eV]) や第一原理計算結果 (0.86[eV] [14]) とよい一致を示している．ここでは単純なバルク中の炭素拡散の解析を紹介したが，より複雑な転位芯近傍における炭素拡散の解析も行っており，転位運動と協調した炭素原子の振る舞いが原子レベルで明らかにされている [10]．興味のある方は参考文献 [10] をご覧いただきたい．

3.2 銅粒界部からの転位生成 [11]

次に AB 法を用いた解析として当グループの Du らによって実施された銅中の $\Sigma 9\langle 110\rangle\{221\}$ 粒界からの転位生成の解析を紹介する [11]．図 10 のように $\Sigma 9\langle 110\rangle\{221\}$ 対称傾角粒界 (GB) を中央と上端に含むような解析モデルを構築し，矢印方向に単軸引張り応力を加えた時の粒界からの転位の生成挙動を AB 法を用いて解析した．このケースでは，集団変数は以下

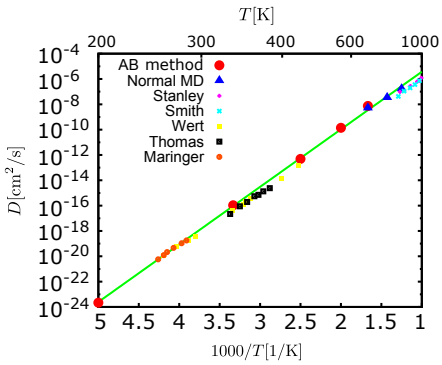


図 9: α 鉄中の炭素の拡散係数の温度依存性. 大きい中実丸は AB 法の結果であり，中実三角は通常の MD 法の結果である．直線はこれらのプロットに対する最小二乗近似である．他の小さなプロットは実験値を表す [13].

のように定義されている．

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{k} \cdot \left(\frac{\sum_i^{N_1} \boldsymbol{r}_i}{N_1} - \frac{\sum_i^{N_2} \boldsymbol{r}_i}{N_2} \right) \tag{8}$$

$\boldsymbol{k}$ は部分転位のバーガースベクトル方向の単位ベクトルであり，$\boldsymbol{r}_i$ は i 番目の銅原子の位置ベクトルである．N_1, N_2 はそれぞれ図 10 中で灰色，黒色に示した原子の数であり，右辺括弧内第一項は図 10 中で灰色に示した原子グループの幾何重心を，第二項は黒色で示した原子グループの幾何重心を表す．このように集団変数を定義することによって灰色，黒色原子グループ間の面にせん断を誘起する方向に現象を加速し，粒界からの転位生成過程が解析できるようになる．

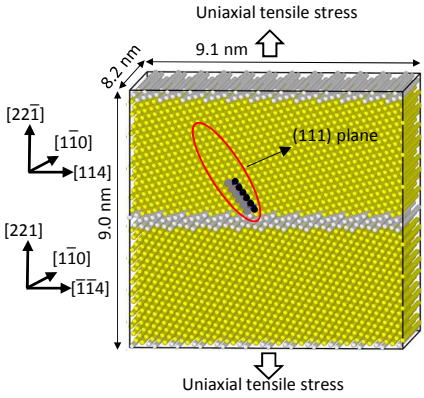


図 10: 銅粒界部からの転位生成の解析モデル

表 2: 温度ごとの平均転位生成時間と AB 法による時間加速率

温度 [K]	平均転位生成時間 [ns]	加速率
250	2.99×10^{20}	6.04×10^{20}
275	5.93×10^{13}	6.05×10^{14}
300	5.78×10^{10}	8.36×10^{11}
325	3.30×10^{6}	1.45×10^{8}
350	2.36×10^{5}	3.88×10^{6}

300[K] におけるポテンシャル曲面へのブーストポテンシャルの加算状況を図 11 に示す．図 11 からわかるように，この条件では，8 回目のブーストポテンシャル加算後に状態遷移が生じている．表 2 に，応力 2.5[GPa] の時の温度ごとの平均転位生成時間，および時間加速率を示す．250[K] では，時間加速倍率が 6.04×10^{20} と非常に大きく，先ほどの炭素拡散のケース以上の加速を実現している．

また図 12 に，応力が (a)2.8[GPa] および (b)2.5[GPa] における粒界からの転位生成の挙動を示す．この AB 法による解析から，応力レベルによって粒界部での転位生成メカニズムは明確に変化することがわかる，すなわち，高い応力では転位は粒界から複数同時に協調的に生成するモードが選択されるが，応力が低くなると転位が一本ずつ生成するモードに遷移していくことがわかった．

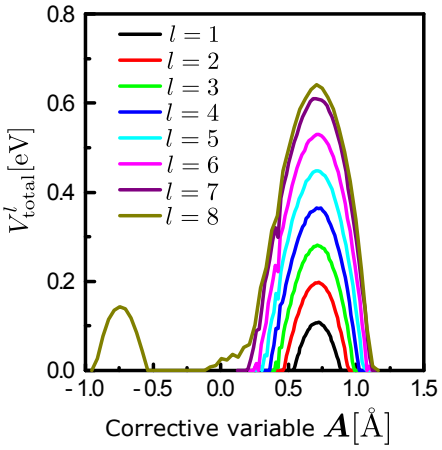


図 11: $V^l(l = 1 - 8)$ の繰り返し付加による $V^l_{\rm total}$ の変化.

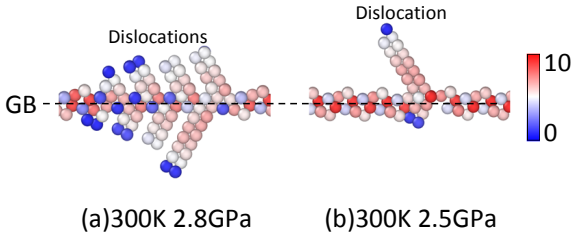


図 12: 粒界からの転位生成の挙動変化．転位を判別するために中心対称パラメータ [15] を用いて原子を色分けしている．なお，転位や粒界等の欠陥部以外の原子は表示していない．

4 AB 法の課題

これからの加速分子動力学法の改良と発展のために AB 法の課題を整理する．AB 法による解析結果の確からしさを決める上で最も重要であり，問題となるのはどのような集団変数を採用するかである．前述のように現象を捉えた正確な解析を行うためにはその現象ごとに適した集団変数が必要となるが，その集団変数の選択は使用者にゆだねられており，効果的な集団変数を選択するためには現象の物理に関する十分な知識が必要となる．これは一般的な分子動力学法よりも高度なモデリングが要求される場合が多く，集団変数の選択もケースバイケースであるため，その汎用性は一般的には低いと考えられる．そして，採用した集団変数によって加速分子動力学法で解析したい現象が正確に捉えられているかどうかを確かめること自体も難しい．また集団変数を定義することは結局は加速したい現象を選択していることに他ならず，その集団変数によって捉えられない現象は一切加速されないことも問題となる．例えば，ある条件下では想定外の現象の方が解析対象とした現象よりも支配的であった場合でも，そのことを認知する手段は AB 法にはない．現状の AB 法で行えることは，温度の効果を考慮できるという大きな利点はあるものの，基本的には初期経路をあらかじめ推定・指定して最小エネルギー経路を探索する Nudged Elastic Band 法 [16] と類似の使い方に限られてくる．これは，限られた時間スケールではあるものの想定外の現象も含めて様々な機構がその発現頻度に応じて自動的に観測される汎用的な分子動力学法とは対照的である．この汎用性についての問題点は実際は AB 法だけのものではなく，集団変数の概念を採用しているメタダイナミクス法や他の加速分子動力学法 [6,17] にも共通するものである．今後いかにこの問題を解決し，その汎用性を高めることができるかが加速分子動力学

法の発展・普及において重要と考える．これは，より汎用的なブーストポテンシャルの定義を見つけることと同義である．

謝辞

この Adaptive-Boost 法を開発する上で多大な尽力を頂いた，大阪大学の尾方成信教授，君塚肇准教授，マサチューセッツ工科大学の Ju Li 教授，また本記事における銅粒界の解析結果の使用を快諾頂いた大阪大学の Junping Du 氏に心よりに感謝の意を示します．Fig.10, 11, and 12 are adapted with permission from Ref. [11]. Copyrighted by the American Physical Society.

参考文献

[1] A. Ishii, S. Ogata, H. Kimizuka, and J. Li. *Phys. Rev. B*, Vol. 85, No. 6, pp. 064303–1–7, 2012.

[2] G.M. Torrie and J.P. Valleau. *J. Comput. Phys.*, Vol. 23, No. 2, pp. 187–199, 1977.

[3] B.A. Berg. *Inter. J. Mod. Phys. C*, Vol. 3, No. 5, pp. 1083–1098, 1992.

[4] A.F. Voter. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 78, No. 20, pp. 3908–3911, 1997.

[5] A. Laio and F.L. Gervasio. *Rep. Prog. Phys.*, Vol. 71, No. 12, pp. 126601–126623, 2008.

[6] R.A. Miron and K.A. Fichthorn. *J. Chem. Phys.*, Vol. 119, No. 12, pp. 6210–6216, 2003.

[7] A.F. Voter. *Phys. Rev. B*, Vol. 57, No. 22, pp. 13985–13988, 1998.

[8] F. Shimizu, S. Ogata, and J. Li. *Mater. Trans.*, Vol. 48, No. 11, pp. 2923–2927, 2007.

[9] J. Li, P.G. Kevrekidis, C.W. Gear, and I.G. Kevrekidis. *SIAM Rev.*, Vol. 49, No. 3, pp. 469–487, 2007.

[10] A. Ishii, J. Li, and S. Ogata. *PloS one*, Vol. 8, No. 4, pp. e60586–1–7, 2013.

[11] J-P. Du, Y-J. Wang, Y-C. Lo, L. Wan, and S. Ogata. *Phys. Rev. B*, Vol. 94, No. 10, pp. 104110–1–8, 2016.

[12] H. Mehrer. *Diffusion in solids: fundamentals, methods, materials, diffusion-controlled processes*. Springer Verlag, 2007.

[13] A.E. Lord Jr and D.N. Beshers. *Acta Metall.*, Vol. 14, No. 12, pp. 1659–1672, 1966.

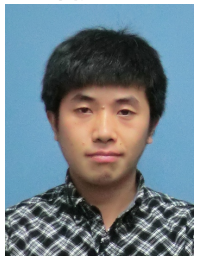
[14] D.E. Jiang and E.A. Carter. *Phys. Rev. B*, Vol. 67, No. 21, pp. 214103–1–10, 2003.

[15] C. Kelchner, S. Plimpton, and J. Hamilton. *Phys. Rev. B*, Vol. 58, No. 17, pp. 11085–11088, 1998.

[16] H. Jonsson, G. Mills, and K. W. Jacobsen. *Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations, B.J. Berne, G. Ciccotti, D.F. Coker (Eds.)*. World Scientific, Singapore, 1998.

[17] S. Hara and J. Li. *Phys. Rev. B*, Vol. 82, No. 18, pp. 184114–1–7, 2010.

著者紹介



石井明男 (博士 (工学))：
〔経歴〕2013 年大阪大学大学院基礎工学研究科博士後期課程修了，日本学術振興会 特別研究員 (PD)，大阪大学大学院基礎工学研究科 特任研究員 (常勤) を経て，2015 年大阪大学大学院基礎工学研究科 助教に就任，現在に至る．
〔専門〕計算材料力学．