

4.4.3 機械材料

(1) 現在行われている課題

機械材料分野において、材料機能設計に関する第一義的要件は、機械部品の寿命を保証する長期にわたる強度信頼性の確保である。強度低下の要因については、内在する欠陥の成長による応力場の変化という力学的側面と、使用環境下での劣化という化学反応的側面の両面より評価する必要がある。欠陥成長に関しては、連続体力学を基礎とした応力・ひずみ場の評価が機軸となり、部品レベルの m オーダーから結晶粒界レベルあるいは炭素繊維強化プラスチックの炭素繊維直径レベルの μm オーダーに向けて、トップダウン的アプローチによるシミュレーション手法の開発が進められている。使用環境下での劣化に関しては、量子力学を基礎として原子・分子レベルから結晶粒界レベルに向けてボトムアップ的アプローチによるシミュレーション手法の開発が進められている。

これらの両アプローチを統合することを目指し、メゾ領域の力学モデルにより原子スケールとマクロスケールを接続する試みが、マルチスケールシミュレーションとして行われてきた

(図 4.4.3-1) [1,2]。しかしながら、現時点では原子モデルで扱える対象がたかだか数十～百 nm 以下に限定されているため、実用レベルには至っていない。原子系の計算で得られた力学特性パラメータを上位スケールの力学モデルに入力値として与え、それを更に上位スケールモデルに受け渡していくとの定性的解決策はあったが、実務的手法は未だないといえる。原子シミュレーション単体としても、その材料設計・開発への応用はいまだ限定的であり、現象を理解するための手段にとどまっている。

実務レベルに至らない主因は周期境界条件の呪縛にあり、それを解かない限り、すなわちボトムアップアプローチとトップダウンアプローチがオーバーラップする領域まで、双方のスケールを拡大しない限り、根本的解決は困難である。その領域を数 μm と定めて、根本的解決を目指した研究開発が進められている。以下では、i) ボトムアップアプローチと ii) トップダウンアプローチに分けて、状況と方策を解説する。

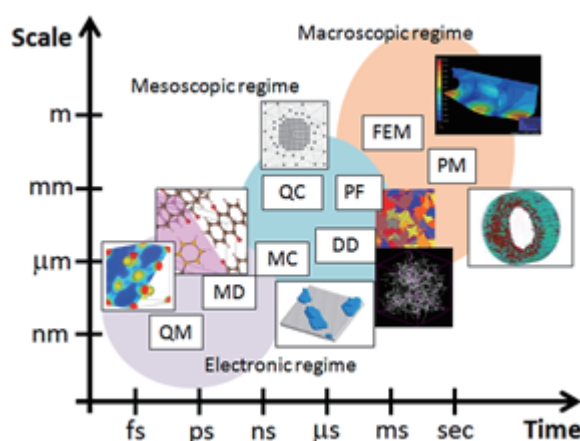


図 4.4.3-1 マルチスケールシミュレーションによる材料強度評価

(i) ボトムアップアプローチ

環境による劣化の一例を挙げると、固体酸化物形燃料電池（SOFC : Solid Oxide Fuel Cell）では高温での運転中にナノ構造が変化する（燃料極の金属原子拡散による三相界面減少、酸化還元反応起因の応力発生による亀裂発生、固体電解質材の相変態など）ことにより性能が著しく劣化されている。その対策のためには原子レベルの構造変化メカニズムを明らかにする必要がある。ひとたびメカニズムが明らかになれば、それを抑制するための適切な対策を検討することが容易になる。例えば、特定の欠陥構造（ボイド、積層欠陥等）や析出物が構造変化の主要因となっていることが明らかになれば、その混入を最小限にするための材料やプロセス選択が必要であることがわかる。適切な材料・構造選択を行う際、このような理論的アプローチに基づいた指針を立てることで、材料の膨大な組み合わせを手当たり次第に試すというような非効率的な手法から脱却し、設計・開発過程を大幅に効率化することが可能となる。これはすなわち、デバイスデザイン技術のスマート化であり、原子モデルに基づくデザイン技術の確立が急務となっている。このような要求に応えるためには、原子に関する運動方程式を数値積分することで原子レベルの変形を時系列で追跡する方法である、分子動力学（MD : Molecular Dynamics）シミュレーション技術の高度化を図り、大規模かつ長時間の原子シミュレーションを実現することが求められる[3,4,5]。

海外では、分子動力学ソフトウェアの組織的な開発が積極的に行われてきており、LAMMPS（Sandia National Laboratories, USA）、IMD（University of Stuttgart, Germany）などはデファクトスタンダードと言われるほど世界的に普及している。また、分子動力学計算では、原子間相互作用を記述するポテンシャル関数の構築と信頼性評価が常に重要な問題である。この問題を解決するため米国で KIM（Knowledgebase of Interatomic Models）という大型プロジェクトが進行しており、ポテンシャル関数データの標準規格づくり、体系的データベース作成、API

（Application Programming Interface）整備の動きがある。マルチスケールシミュレーションについても積極的に取り組まれており、例えばヨーロッパでは国家間アライアンスによるマルチスケールシミュレーション技術発展の取り組みが見られる。

翻ってわが国では、分子動力学計算ソフトウェア開発やポテンシャル関数の整備の重要性が十分に認識されず、個々の研究者が別々に開発を進めてきているのが現状である。大型のプロジェクトの下で組織的かつ効率的に進められてきていないため、さまざまな研究シーズを有しているものの組織的な連携という意味では海外勢力の後塵を拝していると言わざるを得ない。

ここで、原子モデルシミュレーションによって解析可能な空間スケールの現状を整理しておく。微小な時間スケール幅の計算であれば、1 兆原子の分子動力学計算の記録が 1995 年に Stuttgart のグループによりつくられているが、固体中の材料強度あるいは材料力学的に意味ある現象を見るためには十分な時間スケール（MD 計算におけるステップ数）を取らなければならない。材料物性・材料強度学的に意味のある計算としては、10 年前に 100 億原子を超える分子動力学計算が米国 Los Alamos 研究所において行われている。ムーアの法則と、古典分子動力学法がほぼオーダー N （計算時間が原子数 N に比例すること）であるとの仮定に基づく、現在の世界のトップランクに位置するスパコンでは力学的に意味のある計算が行える原子数は 1 兆個に手が届くところまで来ている。これは固体では 1~数ミクロンサイズのモデルについてシミュレーションが可能であることを意味する。

スパコンと普及型 PC の性能差は約 1 万倍で推移していると言われており、ものづくりに供することのできる一般的な計算サーバがその中間に位置するとすれば、現在、100 億原子・数百 nm スケールの対象物について原子シミュレーションが行える状況である。拡散問題など長時間スケールの分子動力学シミュレーションを行う際は、当然ながら空間スケールは小さくなる。

(ii) トップダウンアプローチ

基本となる方法論は連続体力学をベースとする有限要素法の枠組みにある。固体の有限要素シミュレーションは工学的シミュレーション手法を代表するものであり、経験に支えられた豊富な知見の蓄積があり、商用ソフトウェアの主流を支えている。その半面、これまでの資産の多くが黎明期のスーパーコンピュータ上で開発されたものであるため、超並列コンピューティングへの転換に多大な労力を要している。

また材料モデルの観点からは、これまでは鋼を中心とする金属機械材料を評価の対象としており、線形弾性体から弾塑性構成則あるいはクリープ構成則などの非線形挙動評価へと展開してきた。

近年の環境問題に対する意識の高まりから、自動車や航空機などの輸送機器の燃費向上が強く求められ、より軽い素材の活用が試みられている。炭素繊維強化プラスチックは軽量材料の代表格であるが、その材料の非線形挙動の数理モデルについては開発の途上にあり、今後の研究進展に期待が高まっている。

炭素繊維強化プラスチックの最小構成単位は炭素繊維であり、直径 $6\mu\text{m}$ の炭素繊維まで明確にモデル化できることが理想ではあるが、現状では炭素繊維を数万本オーダーで束ねた繊維束の単位でモデル化を行うにとどまっている。そのようなメゾスケールモデルであっても、樹脂の材料特性と強度発現機構を顕在化させることは可能であり、試験片レベルのシミュレーションから材料選定と炭素繊維束のメゾ構造決定に益する知見を得る試みがなされている。

(2) 長期的目標

(i) ボトムアップアプローチ

世界トップのスパコンは 2018 年に並列度 1 億で EFLOPS レベル、15 年後には 10EFLOPS 以上に到達すると予想される。固体すべてを原子として扱うとき、トップランクのスパコンでは数百ミクロンオーダーの直接原子シミュレーションが理論的には可能となることになる。ものづくりに適用可能な計算機レベルで考えると、15 年後に 1 兆原子、すなわち $10\mu\text{m}$ スケールの計算が現実的になると予想される。実際には、直接原子シミュレーション単独ではなく、Quasicontinuum (QC) 法など、弾性変形領域に対して自由度を減らす方法を組み合わせることで空間スケールを増大させ、ミリメートルスケールの対象物の直接計算を目指す流れになると思われる[6,7]。

拡散など時間依存現象のシミュレーションのためには、少なくとも数十ナノ秒～マイクロ秒程度の実時間幅の計算をターゲットとせねばならない。その際には扱えるモデルサイズは 1 桁ほど小さくなる。またクリープなど更に長時間の変形を追跡せねばならない問題の場合には、サブ μm スケールのモデルサイズでも、通常の分子動力学計算では追いつかない。そこで、原

子移動等の“event”に対するエネルギー障壁を人為的に下げてやることで rare event の発生頻度を上げ、こうした長時間依存の現象を解析可能とする Metadynamics や Hyper MD などと呼ばれる加速分子動力学法のアプローチなどを用いて、数桁大きな時間スケールを扱えるようにする必要がある。あるいは、粗視化分子動力学法、転位動力学法、フェーズフィールド法といったマルチスケールシミュレーション技術によって、原子スケールとマクロスケールを接続する必要がある。

(ii) トップダウンアプローチ

結晶粒レベルの欠陥が顕在化する解像度で、実部品全体を有限要素分割することがマイルストーンとなる。すなわち、 $10\mu\text{m}$ の要素サイズで 1m の物体を離散化するため、 $(10^5)^3$ 要素のシミュレーションを現実的な時間内で行うことが要求される。固体の強度解析においては、極端な非線形挙動が発生する領域は限定的であることから、ほぼ線形挙動を呈する大部分の領域とその領域の計算ロードバランスを取れる計算手法が必要である。また局所的な剛性が極端に異なることに起因する基礎方程式の悪状態化に対処可能な、大規模並列ソルバーの開発も必須となる。

以上の研究開発が完成を見た暁には、結晶粒レベルを連結点として、原子レベルからマクロスケールまでを統一的にハンドリングできるシミュレーション技術が確立し、当該分野の長年の課題であった固体材料の変形・破壊現象の物理に基づくシミュレーションが可能となる[8]。

材料強度の問題は有史以来、人類が道具を開発した瞬間から営々と解決の努力を積み重ねてきた問題であるが、数理的方法論による合理性を付与する試みはごく近年になってから進展したものである。これまでの方法論は経験則の蓄積を基礎としているため、新種の材料を実用に応用する際は、膨大な試験が必要となる。航空機への応用で脚光を浴びている炭素繊維強化プラスチックを例にとれば、材料開発から本格的実用まで約半世紀の歳月を費やしたが、現状においても材料強度発現機構について合理的な解明が行われたわけではなく、多くの研究開発課題が残されている。その解決策として期待されているのが、最小構成単位である直径 $6\mu\text{m}$ の炭素繊維まで明確にモデル化できるシミュレーションである。

そのような連続体ベースのミクロスケールシミュレーションにより、樹脂の材料選定と炭素繊維構造決定の最適化問題を構成することが可能となり、これまで試行錯誤に頼らざるを得なかった材料開発の効率化が飛躍的に進展するものと期待される。

破壊のメカニズムは実験的手法のみで明らかにできるものではなく、実験で観察できない部分をシミュレーションが補完することで、合理的な説明が可能となる。原子レベルから部品レベルまでをカバーする合理的な材料強度シミュレーション手法が準備されれば、現象観察の積み重ねであったこれまでの材料強度評価手法の一大転換を促すことになる。

炭素繊維強化プラスチック材料の強度評価においても、炭素繊維と樹脂単体の強度特性と複合材としての強度特性の相関を合理的に評価できるようになる。合理性に裏づけられた強度評価手法により、試行錯誤による部分を排除し、材料開発から実用までのリードタイムを大幅に短縮することができる。このように、シミュレーションの活用による製品開発の加速を通じ、「ものづくり」分野に大きく貢献することができる。

(3) 次世代に解決すべき課題

(i) ボトムアップアプローチ

(ア) 超並列による大規模分子動力学アルゴリズム

超並列による大規模分子動力学アルゴリズムは、シミュレーションセルを領域分割により並列化するというものである。この場合、各セグメントの境界に近い原子の情報を隣り合うセグメントに毎ステップ受け渡す必要があるため、並列化効率が著しく落ちないように配慮したコーディングが重要である。更に、加速分子動力学法を組み込むことが考えられる。例えば HyperMD 法や Metadynamics 法が提案されており、これは結晶格子位置の深いポテンシャルの谷から原子を強制的に追い出すようなバイアスポテンシャルを付加し、他の pKa へのジャンプのようなレアイベントの発生を加速するものである。通常の分子動力学法との違いは基本的にはバイアスポテンシャルの付加部分であるので、超並列分子動力学アルゴリズムにそのまま加速機能を搭載することは難しくない。

(イ) 超並列によるポテンシャルの高効率構築（パラメータフィッティング）技術

中長期的に飛躍的な原子モデルシミュレーションの展開を可能とするため、短期的には原子間ポテンシャル作成技術の向上が求められる。環境非依存性の高いロバストなポテンシャルではパラメータの数が数十以上にも上り、合金や酸化物など多元系では原子種の組み合わせの数だけパラメータが増えるため、広大なパラメータ空間の中で最適値探索を行わねばならない。この最適値探索のために、パラメータ空間を並列プロセッサに分割し、各プロセッサはそれぞれのセグメント内の最適値探索を行う遺伝的アルゴリズムの高度化が求められる。この方法は、パラメータ空間をセグメントに分割するのみであるため、超並列計算機にきわめて適した問題であり、高い並列効率が期待できる。また、パラメータ探索範囲を学習することにより、ポテンシャルの半自動構築を行うアルゴリズムの開発が必要である。これによって、企業の製品開発部門など専門レベルの研究者がいない場合でも、対象とする材料に適応したポテンシャル関数の開発が容易に行えるような環境を整備することができる。更に、電子構造に対する自由度を含めた電荷移動型ポテンシャルや磁性ポテンシャルなどの複雑な関数形にも対応できるアルゴリズムへの改良も必要となる[9]。

(ii) トップダウンアプローチ

シミュレーションの中核を占めるのが、数千万自由度以上の大規模な連立一次方程式を解くソルバーである。大規模並列計算に適した解法として、共役勾配法に代表される繰り返し修正に基づく、いわゆる反復解法が多用されている。この方法の有効性はコモディティの高い PC クラスターレベルまででは実証されているが、数万以上の並列コアが動作する「京」クラス、エクサクラスのシミュレーションにおいても同様にその有効性が保持されるか否かについては未知である。

材料強度評価に関わるシミュレーションでは、局所的に進行する強度の非線形性現象を的確にハンドリングする必要がある。すなわち、分割された領域ごとの非線形度が大きく異なる状態で計算を進行させる必要があり、CPU に対するロードバランス、通信の問題まで考慮した革新的アルゴリズムの開発が必要となる。

また破壊の進行にともない、剛性が著しく低下し、連立方程式の係数がほぼ零となる状態も頻出する。大規模並列解析で発生する誤差に対するロバスト性も要件の一つである。

動的破壊問題の超並列シミュレーションにおいては、これらの問題を解決することが特に重要となり、アルゴリズムの抜本的改良が必要である。

(4) ターゲットとする研究対象

(i) ボトムアップアプローチ

手法開発と工業的要求の双方の観点から、電子部品用の機能性材料に関する強度評価が適切なターゲットである。機能性材料の解析のためには、電気的特性や磁気特性など電子構造が支配する特性と、機械的ひずみや変形の連動作用によるマルチフィジックスが関与する問題に対処する必要がある。これまでこのような問題については第一原理解析や半経験的量子力学シミュレーションが必須であったが、電荷移動や電子スピンを記述することができる原子間ポテンシャルモデル（以下、マルチフィジックスポテンシャル）を用いれば、電子に対するハミルトニアンを解くことなく分子動力学計算を行うことができ、第一原理などと比べ格段に大きなサイズの問題が扱えるようになる。このようなポテンシャルは次々と提案されるようになってきているが、パラメータの数が膨大になるため限定的にしか活用されていない。上記の超並列ポテンシャル作成ソフトの整備によりこの問題は解決できるため、マルチフィジックスポテンシャルの構築ならびに電子特性－変形連動問題に対する大規模分子動力学計算技術の開発も進めるべきである。

(ii) トップダウンアプローチ

「京」を頂点とするハイパフォーマンスコンピューティングの現状を考慮し、またわが国のものづくり分野へ与える影響度も勘案すれば、連続体力学を基礎とする材料強度評価の対象とすべき材料は、炭素繊維強化プラスチックである。炭素繊維束の厚さは $500\mu\text{m}$ 程度であるので、そのレベルまでの解像度で代表寸法 1m の部材をモデル化することが目標となる。

炭素繊維強化プラスチックによる軽量化の恩恵を最も受けるのが、自動車と航空機である。これら輸送機械の軽量化とトレードオフ関係にある安全性確保の観点から、最も過酷な試験は衝突安全性評価である。よって、動的衝撃荷重に対する炭素繊維強化プラスチック材料の破壊シミュレーションを、 $500\mu\text{m}$ の解像度を有するモデルで実施可能とすることが究極の目標である。

短期的目標として、炭素繊維を 1 万本程度束ねた繊維束のレベルでのモデル化による、炭素繊維強化プラスチック製の高圧水素容器の破壊評価の高度化を挙げる。これは、燃料電池自動車の普及を目前に控え、水素供給インフラを支える基盤部品である超高圧水素蓄圧器の開発に必須の事項である。この圧力容器は炭素繊維束をフィラメントワインディングによりライナーと呼ばれる内部容器に巻きつけて成形される（図 4.4.3-2）。強度発現機構を明らかにし、強度を確保したうえで軽量化コンパクト設計を合理的に進めるために、シミュレーションの果たす役割は大きい。

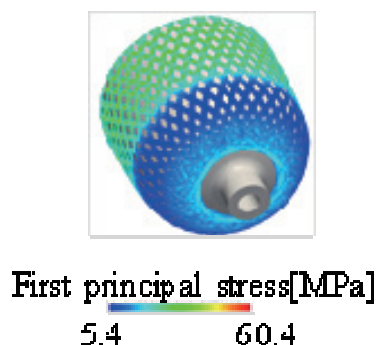


図 4.4.3-2 フィラメントワインディング高圧水素容器の強度評価

(5) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

(i) ボトムアップアプローチ

分子動力学法の並列化には空間ベースの領域分割法が用いられ、その計算量と系の大きさの関係は **weak scaling** となることが期待される。その領域分割においては、サブボリュームの縮小によるデータ量の削減がキャッシュ効率の向上に有効な一方で、原子間力のカットオフ領域以下にサブボリュームを縮小することはノード間通信の増加による並列化効率の悪化を招く。また、ある種の加速分子動力学法では、レプリカを用いたアンサンブル計算によって、いわば「時間軸方向の並列化」が行われる。

後述のロードマップにおいては、これらの並列化手法を想定して計算量の予測を行った。例えば、銅粒界（粒径 50nm）、10 マイクロ秒の加速分子動力学（1000 レプリカ）による引張シミュレーションを考える。ここでは、1 コアのピーク性能が「京」と同等の計算機を想定する。1 コアあたり 6000 原子を割り当て、1 フェムト秒の分子動力学ステップに 12.0×10^8 並列で 0.05 秒を要するとしたとき、この計算を 12 時間で終えるために必要な実効性能は 1000PFLOPS と見積もられる。

(ii) トップダウンアプローチ

非線形有限要素法においても分子動力学法と同様に、空間ベースの領域分割法が有効である。陰解法に基づく非線形有限要素法では、計算時間のほとんどは連立一次方程式の解法である反復解法に費やされる。その領域分割において、サブボリュームの縮小はキャッシュ効率の向上に繋がる一方で、反復解法の収束性悪化による計算量増大を招く。

後述するロードマップにおいては、「京」と同様の性能・特徴を持つ並列計算機上で **weak scaling** を実現すると理想化して計算量の予測を行った。例えば、 $50 \mu\text{m}$ の欠陥を含む代表長さ 20cm の試験片における非線形有限要素シミュレーションを例として考える。非線形ステップ、反復解法ステップを各々 4000 とし、1 コアが担当する要素数を約 3 万とする。このとき、1 反復解法ステップに 3.0×10^8 並列で 12 秒要すると仮定すると、この計算を 12 時間で終えるために必要な実効性能は 200PFLOPS と見積もられる。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモ リバンド 幅 (PB/s)	メモリ量 /ケース (PB)	ストレ ージ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
電子部品用機能性 材料に関する強度評 価	1,000	50	10	500	12	10	430,000	加速分子動力学法	粒径50nm、10マイクロ秒、 レプリカ数1000の銅粒界 引張シミュレーション	レプリカによる加速化率は 1000並列あたり666倍と仮定
炭素繊維強化プラス チック開発	200	50	30	500	12	10	86,000	非線形有限要素法	試験片20cm、欠陥サイズ 50 μ m、4000ステップの 陰解法シミュレーション	反復解法における反復回数 は4000として見積もり

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版（→「1.2. 本文書の構成」）を参照のこと。

(6) 他分野との連携

(i) マルチスケール

すでに述べたようなボトムアップアプローチおよびトップダウンアプローチによって、原子レベルから mm \sim μ m オーダーまでのスケールをカバーするマルチスケールシミュレーション技術やデバイスデザイン技術の構築が期待される。しかしながら、デバイスや微小構造材料が実機の中で使用される状況について信頼性評価などを行うためには、更に上位スケールの力学・強度問題と結びつけることが必要である。サブミクロンスケールのモデリングと有限要素法 (FEM) 等の連続体モデリングのカップリングは、境界領域でひずみや応力を連続的に接続することで実現され、その方法論はほぼ確立しているが、計算コストのほとんどはサブ μ m 領域の計算に費やされ、連続体領域の計算負荷はそれに比較するときわめて小さくなる。すなわちロードバランスが悪くなるという問題があり、これを超並列計算機でどのように効率的に処理していくかが技術的なキーとなる。

(ii) 物性・界面

物性物理・界面工学の分野において、ひずみや変形による物性変化が注目されており、これらの特性をデバイスの機能向上に積極的に利用しようとする試みが進められている。例えば、半導体デバイスの設計においては、ひずみ負荷による電子の有効質量変化をデバイスの機能向上のために利用している[10]。また、グラフェンのような低次元構造体でオングストロームオーダーの波長のコルゲーション（しわ形状）が起こることが観察されており、こうした特異な変形による新奇な特性の発現・応用が期待されている[11]。ひずみや変形による新利物性の発現を利用したナノデバイスの開発は、今後更に注目を集めると予想される。ナノ \sim ミクロンレベルの構造体のひずみ・応力分布や特異な変形特性を容易に予測できるマルチスケール変形シミュレーション技術と、物性物理・界面工学を融合することで、新規ナノデバイス開発の可能性が開けると期待される。

(7) 公的な意見交換とそのサマリー

日本機械学会および日本材料学会内の、機械材料関連の部門および研究分科会における議論や参加メンバーに対するアンケートを通じ、平成 25 年度上期を目標に取りまとめる予定である。

(8) ロードマップ

図 4.4.3-3 に示す計算機性能予測に基づき、ロードマップを作成した。図 4.4.3-4 に示す。原子系の規模は、製品開発に利用可能と考えられる計算機の性能から見積もった。なお、Quasicontinuum 法などのマルチスケール手法の援用が可能な場合は、空間スケールをセル一辺当たり 10 倍程度拡大できる。

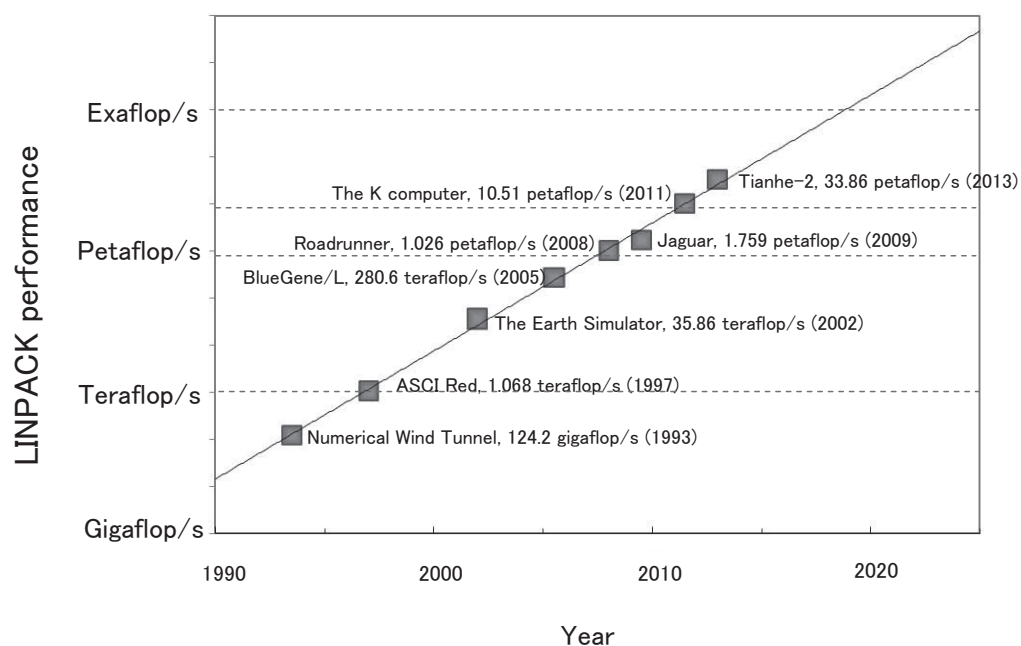


図 4.4.3-3 計算性能向上予測

年代 課題	2012 ～	2014 ～	2016 ～	2018 ～	2020 ～	2022 ～
短時間(数nsec)の分子動力学法・力場の計算	←→ ～200 nm規模の原子系の計算。単結晶内の欠陥間相互作用、少数の結晶粒間の相互作用等			←→ ～2μm規模の原子系の計算。バルクナノメタルの多結晶セルでの粒間相互作用等		
加速化手法による長時間(数μ sec)の分子動力学法	←→ ～20 nm規模の原子系の計算。単結晶内での拡散、転位。現実的なひずみ速度下における単結晶内の欠陥の運動等			←→ 20 ～200 nm 規模の原子系の計算。バルクナノメタル多結晶セルにおける低ひずみ速度での粒界破壊等		
化学反応・分極を考慮した分子動力学法	←→ ～20 nm規模の短時間・長時間シミュレーション			←→ 20 ～200 nm規模の短時間・長時間シミュレーション。亀裂モデルでの腐食割れ等		
連続体力学に基づく強度評価	←→ 1 mmオーダーの解像度で欠陥をモデル化した強度評価			←→ 50μmオーダーの解像度で欠陥をモデル化した強度評価		

図 4.4.3-4 機械材料ロードマップ

参考文献

- [1] S. Yip (ed), Handbook of materials modeling (2005), Springer Dordrecht, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN-10 1-4020-3287-0
- [2] Z.X. Guo (ed), Multiscale materials modelling: Fundamentals and applications (2007), CRC press, ISBN 978-0-8493-9110-1
- [3] D.C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation (1995), Cambridge University Press, ISBN 0-521-59942-3
- [4] J.M. Haile, Molecular dynamics simulation: Elementary methods (1997), Wiley-Interscience, ISBN 0-471-18439-X
- [5] S. Ogata, Y. Umeno and M. Kohyama, “First-principles approaches to intrinsic strength and deformation of materials: perfect crystals, nano-structures, surfaces and interfaces”, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 17 (2009) 013001 (33pp)
- [6] R.E. Miller and E.B. Tadmor, “The quasicontinuum method: Overview, applications and current directions”, J. Computer-Aided Mater. Design 9 (2002) 203-239.
- [7] J. Knap and M. Ortiz, “An analysis of the Quasicontinuum method”, J. Mech. Phys. Sol. 49 (2001) 1899-1923.
- [8] 渋谷陽二, 塑性の物理素過程から理解する塑性力学 (2011), 森北出版, ISBN 978-4-627-66761-7
- [9] M. Griebel, S. Knapek and G. Zumbusch, Numerical simulation in molecular dynamics (2010), Springer, ISBN 978-3-642-08776-9

- [10] 濱川佳弘, 半導体デバイス工学 (2000), オーム社, ISBN 4-274-13223-4
- [11] H. Shima, M. Sato and K. Iiboshi, “Diverse corrugation pattern in radially shrinking carbon nanotubes”, Phys. Rev. B 82 (2010) 085401 (7pp)