

ポテンシャル関数を用いた離散体のミクロスケール解析とその分岐解析

宇都宮大学 ○ 学生員 菅家 茂理 宇都宮大学 正 員 齊木 功
宇都宮大学 正 員 中島 章典 東北大学 正 員 寺田 賢二郎

1. はじめに

古典的塑性論を含む現象学的非線形構成モデルは広く用いられている．一方，近年の計算機の高速度化と分子動力学¹⁾の発展により，材料物性を原子レベルから評価することが可能になりつつある．しかし，実構造を原子からモデリングすることは不可能であるため，マクロ構造とミクロ構造の関連性を評価することができない．そこで本研究ではもっとも単純な2体間ポテンシャル関数である Lennard-Jones ポテンシャル¹⁾を用いて，微視的な粒子の挙動から巨視的な非線形材料応答をモデル化するマルチスケールモデリングを試み，ミクロスケール解析から非線形応答とパターン形成について考察する．

2. 離散体のマルチスケール解析

図-1 に示すように，構造物は原子レベルで見ると原子または分子によって周期的に埋め尽くされていると考えることができる．粒子によって構成される微視的な構造をミクロ構造とする．これに対し全体構造をマクロ構造と呼ぶ．図-1 のミクロ構造において，周期的に繰り返される最小の構造をユニットセルと呼ぶ．ここでマクロ構造での座標系を X ，ユニットセルの代表的な大きさをあらわすパラメータを ϵ とし，ミクロ構造での座標系を $Y = X/\epsilon$ とする2つの異なる座標系を導入し，ミクロとマクロの支配方程式を求めるのがマルチスケール法である．ここでマクロ，ミクロの両スケールに依存する変数には上付の ϵ を付すものとする，大変形超弾性体の釣合式は

$$\nabla_X \cdot P^\epsilon + \rho^\epsilon b = 0 \quad (1)$$

$$u^\epsilon = \underline{u} \quad \text{on } \Gamma_u, \quad P^{\epsilon T} \cdot N = \underline{t} \quad \text{on } \Gamma_\sigma \quad (2)$$

と表される．ここに， P^ϵ は第一 Piola-Kirchhoff 応力， ρ は密度， b は単位質量当たりの物体力， N は初期配置における単位外向き法線ベクトルである．

変分原理と適切な収束論により，境界値問題からミクロ，マクロ，両スケールでの弱形式の釣合式

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial w_i} \cdot \delta w_i = 0 \quad (3)$$

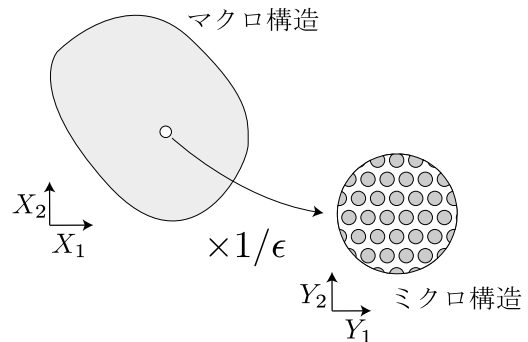


図-1 マルチスケール法概念図

$$\int_{\Omega} \nabla_X \delta u^0 : \tilde{P} dv - \int_{\Omega} \rho^H b \cdot \delta u^0 dv - \int_{\Gamma_\sigma} \underline{t} \cdot \delta u^0 ds = 0 \quad (4)$$

を得る²⁾．ここに， n は代表体積要素内の粒子の総数， $\mathcal{U}$ は粒子系のポテンシャル， w_i は粒子 i の実変位， k はある正の整数である．ユニットセル内の実変形に起因する実変位 w は，一様変形に起因する成分と周期成分 u^1 の和として

$$w(X, Y) = \{ \nabla_X u^0(X) \} \cdot Y + u^1(X, Y) \quad (5)$$

と表される．ここで， u^1 はミクロスケールの変位であり， kY における周期関数である． $\tilde{P}$ は平均第一 Piola-Kirchhoff 応力， ρ^H は平均密度であり，それぞれ

$$\tilde{P} := \int_{\partial kY} Y \otimes t ds, \quad \rho^H := \frac{nm}{kY} \quad (6)$$

により定義した³⁾．ここに， t は境界での表面力， m は粒子の質量である．ここで注目すべきことは，ミクロ問題の対象となる代表体積要素として複数の単位周期構造を考えなくてはならないことである．

図-2 のように上辺と下辺の2つの粒子や，左辺と右辺の粒子のようにセルの境界どうして粒子がペアを組むように配置したモデルでは， u^1 に関する kY 周期性によりペアの粒子の実変位の差は，

$$w(X, Y + r_i) - w(X, Y) = \{ \nabla_X u^0(X) \} \cdot k r_i \quad (7)$$

となる．ここに r_i は基本並進ベクトルである．図-2 における粒子の数字はそれぞれ，

Key Words: ポテンシャル関数，分子動力学，マルチスケールモデリング，分岐

〒 321-8585 宇都宮市陽東 7-1-2 宇都宮大学工学部建設学科 Tel.028-689-6208 Fax.028-689-6230

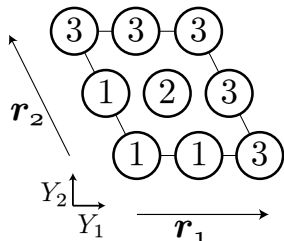


図-2 代表体積要素

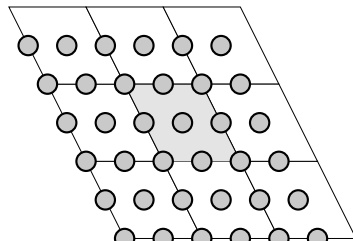


図-3 レプリカセル

1. ミクロスケール Y の原点が属する境界上にある粒子
2. 境界上にない粒子
3. 1. の粒子を r_i だけ並進させた粒子

を意味している．実際の計算では3の粒子の変位 w_3 を式(7)から，

$$w_3 = w_1 + \{ \nabla_x u^0(x) \} \cdot k r_i \quad (8)$$

とし，これを釣り合い式と連立させ解析を行う．連続体仮説に基づく有限要素法では，まず代表体積要素を決定し，式(8)により周期境界条件を考慮することで問題を解くことができる．しかし本研究のようにポテンシャルを有する離散体においては，代表体積要素内の粒子はそのセル外の粒子からも影響を受けるため，代表体積要素内の相互作用とその周囲にある粒子との関連も考慮しなければならない．そこで分子動力学では，ユニットセルの周囲にレプリカセル¹⁾と呼ばれる代表体積要素と形状が同じセルを考える．ここでマクロ構造から解析対象となる代表体積要素を取り出し，図-3の網がかかっているところへ配置し，その周りにレプリカセルを配置する．

分子動力学では目的により様々なポテンシャルが用いられるが，本研究ではもっとも基本的な2体間ポテンシャルである．Lennard-Jones ポテンシャル関数

$$U_{ij}(r) = 4A \left\{ \left(\frac{B}{r} \right)^{12} - \left(\frac{B}{r} \right)^6 \right\} \quad (9)$$

を用いる． U_{ij} は2つの粒子 i, j 間のポテンシャル， r は2つの粒子間の距離を表し， A は力， B は粒子の半径を表すポテンシャルパラメータである．

3. 解析例

単位周期構造は図-2の3の粒子を除いた4つの粒子とし，代表体積要素は単位周期構造を 3×3 倍したものとする．代表体積要素の粒子の初期配置は， $r/B = 1$ の間隔で粒子を配置している．マクロ構造のある物質点の変形を $\partial u_2^0 / \partial X_2$ のみ漸増させ他の成分をすべてゼロとしミクロスケール解析を行った．このときの応力 - ひずみ関係を図-4に示す．横軸は $\partial u_2^0 / \partial Y_2$ ，縦軸は平均 Cauchy 応力成分 $\bar{\sigma}_{22}$ をポテンシャルパラメータで無次元化した．図-4の実線のような基本経

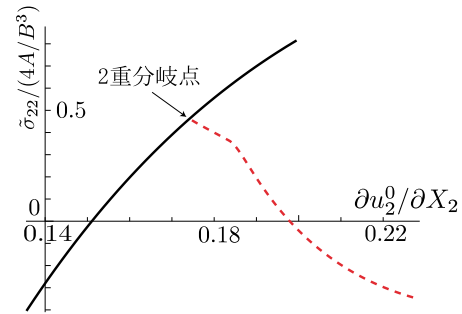


図-4 平均応力 - ひずみ関係

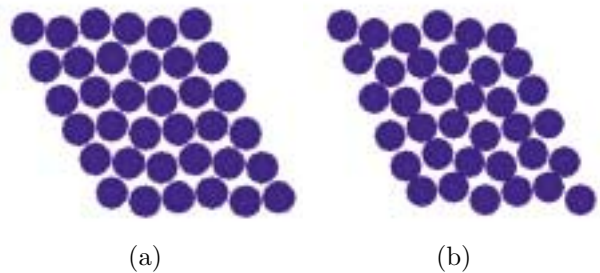


図-5 分岐モード

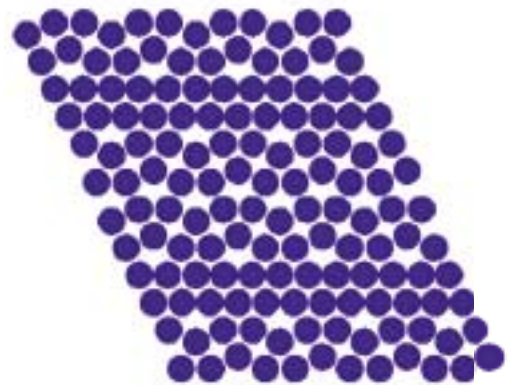


図-6 分岐経路上でのユニットセルの実変形

路が存在し，この経路上に矢印で示した箇所に2重分岐点が存在する．この点から図-4の破線で示す安定な分岐経路が存在する．この分岐点での分岐モードを図-5に示す．応力 - ひずみ関係から分岐経路上では軟化し，図-6のような実変形を示す．分岐パターンとしてはくさび状に粒子が離れるパターンと粒子が直線に並ぶパターンが形成されている．

参考文献

- 1) 川添良幸，三上益弘，大野かおる：コンピュータ・シミュレーションによる物質科学—分子動力学とモンテカルロ法，共立出版，1996.
- 2) Saiki, I., Terada, K., Ikeda, K. and Hori, M.: Appropriate number of unit cells in a representative volume element for microstructural bifurcation encountered in a multi-scale modeling, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, Vol.191, pp.2561-2585, 2002.
- 3) 斉木 功，大植 健，中島章典，寺田賢二郎，構造要素を用いたミクロモデルによるマルチスケールモデリングとそのセル構造体への適用，日本計算工学会論文集，Paper No.20020004, 2002.