

(I-14) ポテンシャル関数を用いた離散体のマルチスケールモデリングの試み

宇都宮大学 ○学生員 菅家 茂理 宇都宮大学 正 員 斉木 功
宇都宮大学 正 員 中島 章典 宇都宮大学 学生員 大植 健

1. はじめに

古典的塑性論を含む非線形構成モデルは広く用いられているが、それらはあくまで現象論的にモデル化されたものである。一方、近年の計算機の高速度化と分子動力学の発展により、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。そこで本研究では2体間ポテンシャル関数であるLennard-Jonesポテンシャルを用いて¹⁾、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、さらに非線形応答とパターン形成の問題について考察する。

2. 定式化

(1) マルチスケール法

図-1に示すように構造物は粒子レベルで見ると粒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。このように、単位周期構造(図-2)が周期的に繰り返されて構成される物体において、周期的に繰り返される構造をユニットセルまたはミクロ構造と呼び、これに対し全体構造をマクロ構造と呼ぶ。ここでマクロ構造での座標系を x 、ミクロ構造での座標系を y 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。マルチスケール法では両スケールの境界値問題を同時に扱うことから、全体構造の変形と共に任意の点のミクロ構造の力学応答が観察できる。ここで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 とすると、 $y = x/\epsilon$ となる。マクロスケールの変位を u^0 、ミクロスケールの変位を u^1 とすると全体の構造の変位勾配は

$$\nabla_x u^0 + \nabla_y u^1 \quad (1)$$

となり、これをミクロスケールで積分することによりユニットセルの全変位

$$w(x, y) = \{\nabla_x u^0(x)\} \cdot y + u^1(x, y) \quad (2)$$

が得られる。図-3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で粒子がペアを組むように配置したモデルでは、ペアの粒子の全変位の差は

$$w(x, y + Y_i) - w(x, y) = \{\nabla_x u^0(x)\} \cdot Y_i \quad (3)$$

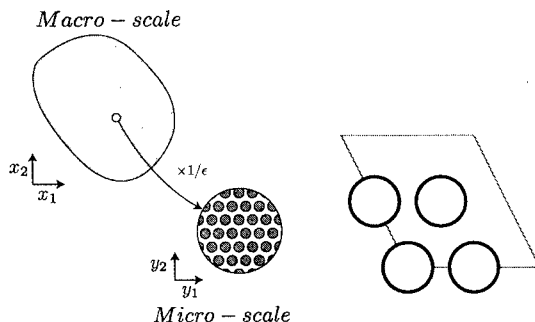


図-1 マルチスケール法概念図

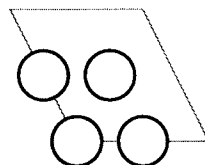


図-2 単位周期構造

となり、これは u^1 に関する Y_i 周期性を表している。ここに Y_i は基本並進ベクトルである。図-3中の粒子の数字はそれぞれ、

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 Y_i だけ並進させた位置に粒子

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(3)から、

$$w_3 = w_1 + \{\nabla_x u^0(x)\} \cdot Y_i \quad (4)$$

とし、これを釣り合い式と連立させ解析を行う²⁾。

(2) 微視問題の設定

連続体の仮説における有限要素法では、まずユニットセルを決定し、式(4)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関数を用いる場合、ユニットセル内の粒子はそのセル外の粒子からも影響を受けるため、ユニットセル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と呼ばれるユニットセルと形状、大きさが同じであり内部の同じ位置に同じ粒子をもつセルを考える。このレプリカセル内の粒子はユニットセル内の粒子が移動すれば、レプリカセル内の対応する粒子も同じ変位を持つと考える²⁾。ここで現実の物体から解析対象とするある大きさの粒子群を取り出し、それをユニットセルとして図-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。ユニットセルの粒子はユニットセル内の粒子の影響だけでなく、レプリカセル内の粒子からも影響を受けるが、遠くに位置する粒子から

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

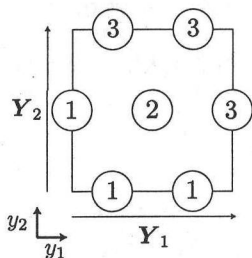


図-3 ユニットセル

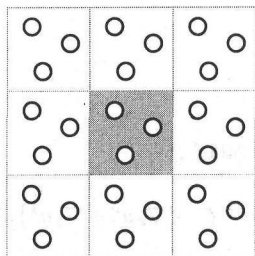


図-4 ユニットセルとレプリカセル

の影響は小さいので、ユニットセルの周り一周分のレプリカセルによる影響を考慮すれば十分である。

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

$$\phi_{ij}(r) = 4A \left\{ \left(\frac{B}{r} \right)^{12} - \left(\frac{B}{r} \right)^6 \right\} \quad (5)$$

を用いる。 ϕ_{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, B はポテンシャルパラメータを示している。

3. 解析例

不安定問題を扱う場合分岐を制限しない複数の単位周期構造を用いなければならないことが知られている³⁾。ここでは解析対象とするユニットセルは図-5のように単位周期構造の3×3倍のセルとした。ある物質点のマクロ構造の変形を $\partial u_2^0 / \partial x_2$ のみ漸増させ他の成分をすべてゼロと仮定しミクロスケール解析を行った。その結果を、マクロひずみとある粒子の変位との関係により、図-6に示す。ここでは図-5で黒塗りした粒子を選び粒子の鉛直方向の変位を初期配置の y 座標で除して無次元化した。図のように直線の基本経路があり矢印の点に分岐点が存在する。括弧内の数字は分岐点の多重度を示している。ここで分岐経路を追跡すると、左側の曲線のような安定経路が存在することがわかった。このとき全

体構造はユニットセルで周期的に埋め尽くされているので、この経路でのユニットセルの変形状と同一ものを4つ配置したものを図-7に示す。

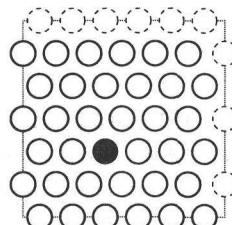


図-5 ユニットセル

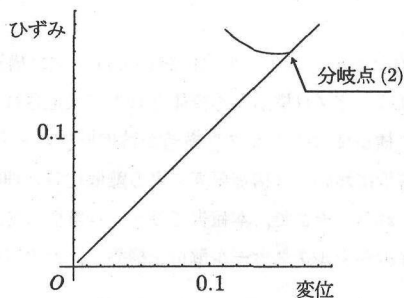


図-6 変位 - ひずみ関係

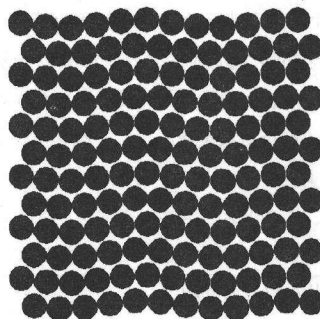


図-7 分岐経路上でのユニットセルの実変形

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
- 2) 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, 計算工学会論文集(掲載予定)
- 3) 斉木 功, 寺田賢二郎, 堀 宗朗, 池田清宏: 巨視的材料不安定性のマルチスケールモデリングにおける微視的構造周期のブロック対角化法による同定, 応用力学論文集, Vol.3, pp.37-45, 2000.