

ポテンシャルを有する離散体のマルチスケールモデリング

Multi-scale modeling of discrete systems with potential function

菅家 茂理*, 斉木 功**, 中島 章典***, 寺田賢二郎****, 池田清宏†,
Shigeri KANKE, Isao SAIKI, Akinori NAKAJIMA, Kenjiro TERADA and Kiyohiro IKEDA

*学生員 宇都宮大学大学院 工学研究科 (〒321-8585 宇都宮市陽東 7-1-2)

**正会員 博(工) 宇都宮大学助手 工学部建設学科 (〒321-8585 宇都宮市陽東 7-1-2)

***正会員 工博 宇都宮大学教授 工学部建設学科 (〒321-8585 宇都宮市陽東 7-1-2)

****正会員 Ph.D. 東北大学大学院助教授 工学研究科土木工学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 06)

†正会員 Ph.D. 東北大学大学院教授 工学研究科土木工学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 06)

There exists a variety of phenomenological nonlinear constitutive models such as classical flow theory in plasticity. On the other hand, the recent developments of computer and molecular dynamics enable us to analyze the mechanical behavior by atomic level microstructure and eventually to evaluate macroscale material properties. Thus, we develop multi-scale modeling that characterizes macro-scale nonlinear material properties by microscopic particle system governed by potential function. Further, we examine the relationship between nonlinear material response and pattern formation.

Key Words : multi-scale modeling, particle model, molecular dynamics, bifurcation

1. はじめに

いわゆる固体の力学問題に対する非線形解析手法は、有限要素法を中心に発展を遂げ、広い範囲で実用化されている。とりわけ幾何学的非線形性に起因する座屈などの不安定現象についてはその解析技術は確立されている。しかしながら、問題の性質上、材料非線形に関しては現象学的なアプローチを取らざるを得ないのが現状である。これは、非線形応答を示すメカニズムを実験的に解明することが困難であること、また、解明されたメカニズムを構成関係に反映させる数値解析技術が確立されていないということが主な原因である。

金属塑性に関しては、一般的に転移論¹⁾により説明される。さらには、近年の分子動力学^{2),3)}の発展と、計算機の進歩によって、様々な材料の力学特性、破壊現象などを原子レベルでシミュレーションすることが可能になりつつある。しかしながら、一方で、非線形構造解析においては古典的塑性理論に基づく構成関係が用いられ続けている。塑性論の実用的な意味での有効性については疑問の余地はないが、微視的な変形、破壊メカニズムと巨視的な材料特性を結びつけることは、それ自体の価値に加え、未解明の材料不安定現象や、材料の微視領域に形成されるパターン⁴⁾と力学応答の関連を解明する意味で有意義であると考えられる。

分子動力学に代表される微粒子離散体シミュレーションが構造解析と乖離する主な理由は、スケールの違いであろう。よく言われるように、1 mol すなわち約 6×10^{23} 個の鉄 (Fe) 原子の質量は高々 56g 程度でしかない。

したがって、実際の構造物を原子レベルからモデル化することは事実上不可能である。そこで、本研究では微視構造の変形特性から演繹的に材料物性を導く均質化理論により、構造解析と原子レベルの微視構造の力学応答を結びつけるマルチスケール解析手法の構築を試みる。

数学的均質化理論⁵⁾は、有限要素法をはじめとする計算力学のツールと組み合わせられることにより⁶⁾、複合材料の解析手法として脚光を浴びるようになった。均質化法によれば、微視構造の問題も元の巨視問題と同様境界値問題として扱え、巨視問題と連成して解析することができる。そのため、近年では様々な力学モデルの非線形問題に対する適用が盛んに研究されている。さらに、本研究と同様に巨視構造は連続体であるが、微視構造は異なる力学モデルによりモデル化されるようなマルチスケールモデリングも試みられている。金子ら⁷⁾は、粒状体より構成されるミクロスケール準静的問題を力学的考察により定式化し、巨視問題、微視問題を連成したマルチスケール解析を行った。また、市川らは⁸⁾、微視問題そのものに分子シミュレーションを行ってはいないが、均質化法によるベントナイトの透水挙動解析に分子動力学を用いた。

本論文は、原子レベルの微視構造の変形、分岐挙動と巨視的な材料特性を結びつけるための分子動力学に基づく非線形材料応答のマルチスケール解析法の構築を目的とする。そのために、非凸均質化理論⁹⁾により微視構造に分岐を許容するマルチスケール解析法を定式化し、導出される連続体の微視問題と等価な2体間ポテンシャルを有する粒子系の静的微視問題を設定する。本論文では

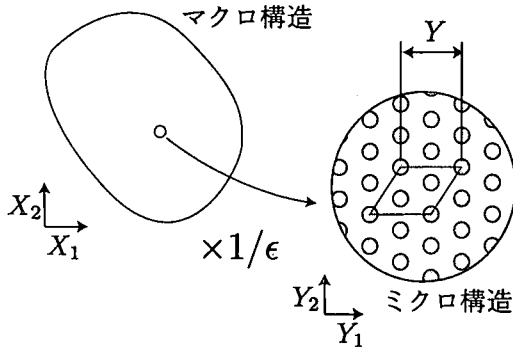


図-1 マルチスケール法の概念図

ミクロ構造の分岐、パターン形成とマクロ的な材料応答の関係を明らかにするという意図から、粒子系に動的ではなく静的問題を設定した。次いで、巨視変形を仮定した粒子系のミクロスケール問題の解析例を示す。

2. 非線形マルチスケール解析

分子動力学で扱われるポテンシャルは、一般的に凸性が保証されない。非凸ポテンシャル問題のための Γ -収束論による均質化法の理論整備は Müller⁹⁾ によりなされ、著者らにより力学問題に適用された。ここでは、まず、著者らの文献¹⁰⁾ で示された Γ -収束論による大変形超弾性体の 2 変数境界値問題の定式化の概要を示す。

2.1 境界値問題の設定

図-1 のように、非常に小さい ϵ によって規定される大きさ ϵY の微小なユニットセルにより、周期的に埋め尽くされた領域 Ω^ϵ を解析対象とする。ここで ϵ に依存する変数には Ω^ϵ のように上付きの ϵ を付すものとする。大変形超弾性体の境界値問題は

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

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

と表される。ここに、 $\mathbf{P}^\epsilon$ は第 1 Piola-Kirchhoff 応力、 ρ は密度、 $\mathbf{b}$ は単位質量当たりの物体力、 $\underline{\mathbf{u}}$ 、 $\underline{\mathbf{t}}$ は与えられる幾何学および力学的境界条件、 $\mathbf{N}$ は初期配置における単位外向き法線ベクトル、 Γ は領域 Ω の境界、 ∇ は下付きの変数による勾配を取る演算子であり、 $\mathbf{X}$ は物質座標を表す。次に、物体を構成する材料としてひずみエネルギー $\mathcal{W}^\epsilon$ を有する超弾性体を仮定したので、構成関係は

$$\mathbf{P}^\epsilon = \frac{\partial \mathcal{W}^\epsilon}{\partial \mathbf{F}^\epsilon} \quad (3)$$

と表される。ここに、 $\mathbf{F}^\epsilon$ は変形勾配テンソルである。

2.2 非凸均質化法による 2 変数境界値問題の定式化

マクロ構造での座標系 $\mathbf{X}$ に対して、ミクロ構造における非均質さを測るためのミクロスケール $\mathbf{Y} = \mathbf{X}/\epsilon$ を

導入する。すると、領域 Ω^ϵ は $\mathbf{X}$ の属する Ω と $\mathbf{Y}$ の属する ϵY の 2 つの空間の直積として $\Omega^\epsilon = \Omega \times \epsilon Y$ と表すことができる。これにより、オーダーの異なる $\mathbf{X}$ と $\mathbf{Y}$ の 2 つの空間測度で変位、応力といった場の変数が表されるため、それぞれのスケールにおける支配方程式が定義される。

前述の境界値問題は、変分原理により汎関数

$$\Pi(\mathbf{v}^\epsilon) := \int_{\Omega^\epsilon} \mathcal{W}(\nabla_X \mathbf{v}^\epsilon) dv + \Pi_{\text{ext}}(\mathbf{v}^\epsilon) \quad (4)$$

の停留問題に変換される。ここに、 $\mathbf{v}$ は任意の変位、 $\Pi_{\text{ext}}(\mathbf{v}^\epsilon)$ は外力ポテンシャルである。Müller による Γ -収束論^{9),11)} によれば、パラメータ ϵ を持つ非凸汎関数 $\Pi(\mathbf{u}^\epsilon)$ は $\epsilon \rightarrow 0$ の極限において

$$\Pi^H(\mathbf{v}) := \int_{\Omega} \mathcal{W}^H(\nabla_X \mathbf{v}) dv \quad (5)$$

に Γ -収束する。ただし $\mathcal{W}^H$ は

$$\mathcal{W}^H(\gamma) := \inf_N \inf_{\mathbf{v}^1} \langle \mathcal{W}(\gamma + \nabla_Y \mathbf{v}^1) \rangle_{NY} \quad (6)$$

により定義される均質化ひずみエネルギーである。ここに、 γ はマクロスケールの変位勾配、 N はある正の整数、 $\mathbf{v}^1$ は NY における周期関数であり、 $\langle \bullet \rangle_{NY}$ は

$$\langle \bullet \rangle_{NY} := \frac{1}{|NY|} \int_{NY} \bullet dY \quad (7)$$

で定義される NY における体積平均を意味する。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。

汎関数 (5) の停留条件より、ミクロ、マクロ、両スケールでの弱形式の釣合式

$$g(\mathbf{P}^0, \boldsymbol{\eta}^1) := \langle \mathbf{P}^0 : \nabla_Y \boldsymbol{\eta}^1 \rangle_{NY} = 0 \quad (8)$$

$$G(\bar{\mathbf{P}}, \boldsymbol{\eta}^0) := \int_{\Omega} \nabla_X \boldsymbol{\eta}^0 : \bar{\mathbf{P}} dv - \int_{\Omega} \rho^H \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\eta}^0 dv - \int_{\Gamma_\sigma} \underline{\mathbf{t}} \cdot \boldsymbol{\eta}^0 ds = 0 \quad (9)$$

を得る¹⁰⁾。ここに、 $\mathbf{u}^0$ 、 $\boldsymbol{\eta}^0$ はマクロスケール変位およびその許容変分、 $\mathbf{u}^1$ 、 $\boldsymbol{\eta}^1$ は NY 周期性を有するミクロスケール変位およびその許容変分である。また、 $\mathbf{P}^0$ は全応力、 $\mathbf{F}^0$ は全変形勾配、 $\bar{\mathbf{P}}$ は平均応力、 ρ^H は平均密度であり、それぞれ

$$\mathbf{P}^0 := \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \mathbf{F}^0} \quad (10)$$

$$\mathbf{F}^0 := \mathbf{1} + \nabla_X \mathbf{u}^0 + \nabla_Y \mathbf{u}^1 \quad (11)$$

$$\bar{\mathbf{P}} := \langle \mathbf{P}^0 \rangle_{NY}, \quad \rho^H := \langle \rho \rangle_{NY} \quad (12)$$

により定義した。また、このとき、代表体積要素内の全変形に起因する実変位 $\mathbf{w}$ は、式 (11) より一様変形に起因する成分と周期成分 $\mathbf{u}^1$ の和として

$$\mathbf{w}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \nabla_X \mathbf{u}^0(\mathbf{X}) \cdot \mathbf{Y} + \mathbf{u}^1(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) \quad (13)$$

により与えられる¹²⁾。

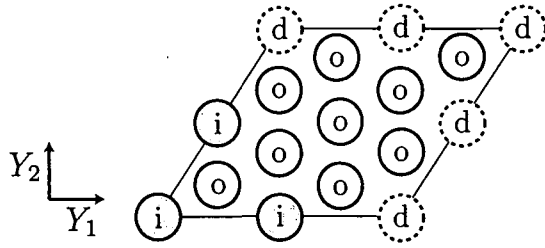


図-2 代表体積要素

3. 粒子系ミクロスケール問題の設定

ミクロスケール問題は、マクロスケール問題を解いて得られるマクロ変形を受けたときのミクロ構造の自己釣合問題であり、マクロ変形という入力情報から代表体積要素の平均応力としてのマクロ応力を出力として与える。すなわち、ミクロスケール問題は、マクロスケール問題に対して陰的構成関係を与える。

本節では、前節で導いた連続体に対するミクロスケール問題に対して、マクロスケール変形-応力関係において等価となるような粒子系の境界値問題を示し、具体的な解析手順を示す。

3.1 実変位表示の粒子系のミクロスケール問題

粒子を剛体と見なせば、ミクロスケール問題に対して剛体の変位場を導入することにより、粒子系のミクロスケール問題を設定できそうである。著者らにより、ミクロスケール変位において仮定する周期性と導入する変位場の整合性に関する問題点が指摘され¹³⁾、この問題は式(13)で定義される実変位に基づく定式化、解析により回避されることが示された¹⁴⁾。そこで、以下、オリジナルの微視問題とミクロ粒子系の微視問題を実変位に基づいて考える。

ミクロスケール境界値問題は、釣合式(8)、マクロスケール変形 $\nabla_X u^0$ および周期ミクロスケール変位 u^1 に対する周期境界条件から構成される。これを実変位で考えれば、全応力の釣合式(8)を周期境界で対応する境界上の点同士に相対変位を与える問題に相当する¹⁴⁾。したがって、オリジナルのミクロ境界値問題と等価なミクロ粒子問題は、境界上の粒子同士にマクロ変形に相当する相対変位を与え通常の粒子系の釣合を解く問題に帰着される。

粒子群から構成されるミクロ構造のポテンシャルを $\mathcal{U}$ とすれば、各粒子に作用する内力 t_i は付録 I より

$$t_i = -\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial w_i} \quad (14)$$

となる。したがって、ミクロスケール粒子群の実変位表示の弱形式釣合式は

$$\sum_{i=1}^n t_i \cdot \delta w_i = \sum_{i=1}^n -\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial w_i} \cdot \delta w_i = 0 \quad (15)$$

となる。ここに n は代表体積要素内の粒子の総数、 w_i は粒子 i の実変位である。ここで、ミクロスケール Y の原点が属する境界上のある粒子の実変位を w_i 、周期境界によりこの粒子に対応する粒子、すなわちこの粒子を Nr_i 並進させた位置の粒子の実変位を w_d とする¹⁾。ただし N は代表体積要素に含まれる単位周期構造の数、 r_i は基本並進ベクトルである。すると、マクロ変形 $\nabla_X u^0$ に起因する両粒子間の相対変位 d は

$$d := w_d - w_i = \{\nabla_X u^0(X)\} \cdot Nr_i \quad (16)$$

により与えられる。

3.2 実変位に基づくミクロスケール問題の解法

以下、非線形ミクロ解析のための繰り返し計算過程における、マクロ変形を増加させた後の最初の線形計算を考える。周期境界を考慮せずにミクロ釣合式(15)を線形化すると

$$\begin{pmatrix} K_{ii} & K_{io} & K_{id} \\ K_{oi} & K_{oo} & K_{od} \\ K_{di} & K_{do} & K_{dd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_i \\ w_o \\ w_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_i \\ 0 \\ t_d \end{pmatrix} \quad (17)$$

となる。ここに、 K は接線剛性行列、 t は本来、無限周期構造体である解析領域から周期境界を有する代表体積要素を切り出すことに対する形式的な内力であり、ここでは未定である。

ここで、 w における u^1 の NY 周期性を表す式(16)を線形化ミクロ釣合式(17)に代入すると

$$\begin{pmatrix} K_a & K_{io} + K_{do} \\ K_{oi} + K_{od} & K_{oo} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_i \\ w_o \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} (K_{id} + K_{dd}) \cdot d \\ K_{od} \cdot d \end{pmatrix} \quad (18)$$

となり、 w について解くことができるようになる。ここに、 $K_a = K_{ii} + K_{id} + K_{di} + K_{dd}$ である。上式により求められた w および式(14)から内力 t が得られる。

本研究で扱っている離散体モデルでは、局所的な応力は定義できない。しかしながら、連続体における平均応力が、例えば平均第1 Piola-Kirchhoff 応力 $\bar{P}$ に対して

$$\begin{aligned} \bar{P} &= \langle P^0 \rangle_{NY} = \left\langle \left\{ \nabla_Y \cdot (P^0 \otimes Y) \right\}^T \right\rangle_{NY} \\ &= \int_{\partial NY} \{ N \cdot (P^0 \otimes Y) \}^T ds \\ &= \int_{\partial NY} Y \otimes t ds \end{aligned} \quad (19)$$

と表されることから、粒子系代表体積要素においても、上式最右辺により表面力 t を用いて平均応力の算定が可能となる。

¹⁾ w などの下付の添字は、図-2に示すように、それぞれ

i: ミクロスケール Y の原点が属する境界上の粒子 (independent)

o: 境界上でない粒子 (ordinary)

d: i を Nr_i だけ並進させた点にある境界上の粒子 (dependent) を意味する。

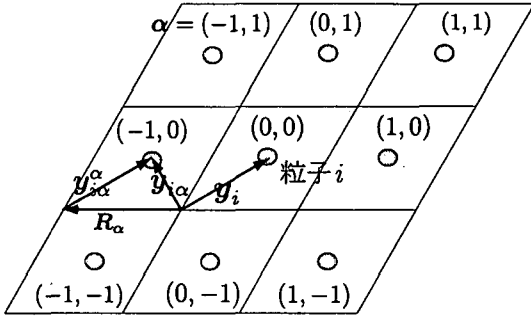


図-3 レプリカセル

3.3 レプリカセル

いわゆる局所理論に基づく連続体の範疇では、まず代表体積要素を決定し、式(15)に周期境界条件(16)を考慮することで問題を解くことができる。しかし本研究で扱っているようなポテンシャルによる非局所的な相互作用を及ぼし合う粒子系においては、代表体積要素内の粒子はその外の粒子からも相互作用を受ける。ただし、分子動力学において用いられる粒子の相互作用を表すポテンシャルは、一般的には粒子間距離の逆数の6乗程度に比例するとされている²⁾ので、代表体積要素に加え、数値解析上無視できる程度の相互作用を及ぼす周辺の範囲までを考慮すればよい。このため、分子動力学では、代表体積要素の周囲にレプリカセルと呼ばれる代表体積要素と形状が同じセルを考える²⁾。レプリカセル内の粒子の実変位は、周期境界条件より対応する(基本並進ベクトルの距離にある)代表体積要素内の粒子の変位と式(16)の関係を有することになる。代表体積要素とレプリカセルの幾何学的な関係を図-3に示す。図中、網掛けの領域が代表体積要素であり、周辺を囲むように配置されている8つの領域がレプリカセルである。

以下、レプリカセルとの相互作用を含む系全体のポテンシャル U を2粒子間のポテンシャル U_{ij} から構築する方法を示す。

図-3のように各レプリカセルに識別子 $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$ を与える。あるレプリカセル α に属する粒子 i の位置ベクトル $y_{i\alpha}$ は、レプリカセル α の原点を基準点とする位置ベクトルを $y_{i\alpha}^\alpha$ とすれば

$$y_{i\alpha} = y_{i\alpha}^\alpha + R_\alpha \quad (20)$$

となる。ここに、位置ベクトル y の下付の i は粒子番号、下付の α はそれが属するレプリカセル、上付きの α は位置ベクトルの基準点がレプリカセル α の基準点にあることを意味する。 α を省略した場合、代表体積要素を意味する。また、 R_α は代表体積要素の基準点からレプリカセル α の基準点へのベクトルであり

$$R_\alpha = \alpha_1 \bar{r}_1 + \alpha_2 \bar{r}_2 \quad (21)$$

で与えられる。ここに、 $\bar{r}_i$ は代表体積要素の基本並進ベクトルであり、単位周期構造の基本並進ベクトル r_i の N 倍である。レプリカセル内の粒子は代表体積要素

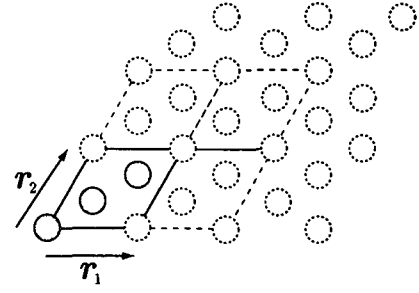


図-4 周期微視構造と単位周期構造

内の粒子と同じ配置なので、すべてのレプリカセル α に対して

$$y_i = y_{i\alpha}^\alpha \quad (22)$$

が成り立ち、式(20)は

$$y_{i\alpha} = y_i + R_\alpha \quad (23)$$

となる。以上から、レプリカセルを考慮した粒子系の全ポテンシャルエネルギー U は、レプリカセルを含めた任意の組み合わせの2粒子間ポテンシャルの総和として

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_i \sum_j U_{ij}(|r_{ij} - R_\alpha|) \quad (24)$$

と表される。ここに、 $U_{ij}(r)$ は2粒子間距離 r をパラメータとする任意の2粒子間ポテンシャルである。また、以下の定義

$$\sum_{\alpha} := \sum_{\alpha_1} \sum_{\alpha_2}, \quad \alpha_1, \alpha_2 = -1, 0, 1 \quad (25)$$

$$r_{ij} := y_j - y_i \quad (26)$$

を用いた。

4. ミクロスケール解析例

前節までに示した、非凸均質化理論に基づく粒子系ミクロ解析の定式化の検証のために、以下に述べる粒子系のミクロ構造に対して仮定したマクロ変形を平均変位勾配 $\{\bar{H}\} = f\{\bar{H}_{11}, \bar{H}_{22}, \bar{H}_{12}, \bar{H}_{21}\}$ として与えることで非線形ミクロ解析のみを独立に行う。ここに、 f は荷重パラメータである。また、以下のすべての解析例において、粒子はすべて等しいものであり、ポテンシャルには代表的な2粒子間ポテンシャルであるLennard-Jonesポテンシャルを用いた。Lennard-Jonesポテンシャルは通常希ガス系原子の固体、液体のみに用いられる。また、2体間ポテンシャルでは立方晶の異方性を表現できないといった制約が知られている。しかしながら、最も基本的な2粒子間ポテンシャルとしてよく知られているので、本論文の以下の解析において採用した。Lennard-Jonesポテンシャルの詳細は付録Iに述べる。

粒子の配置に関しては、分子や結晶の原子配置の対称性の観点から、群論¹⁵⁾により格子の並進対称性を表す並進群、および格子の局所的な対称性を表す点群に基づ

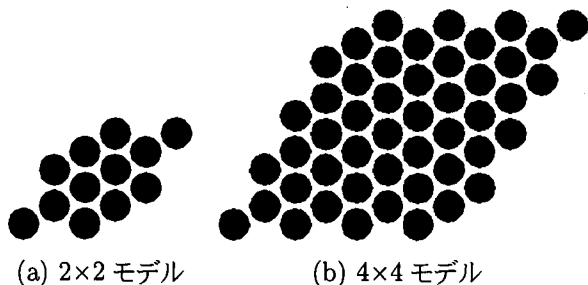


図-5 代表体積要素

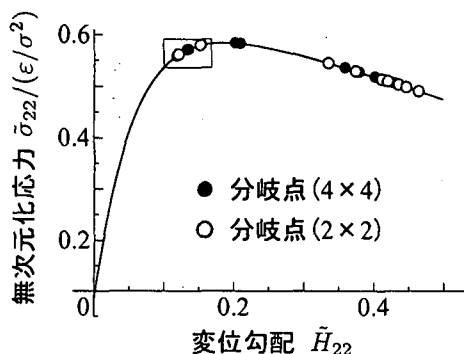


図-6 1軸圧縮における平均応力-ひずみ関係

き分類される¹⁶⁾。ここでは、図-4に示す等方的な2次元格子の代表である正六角形状の格子を用いる。このとき、単位周期構造は図中の実線で示す領域である。前述のように、複数の単位周期構造により代表体積要素を構成する場合、例えば 2×2 個の単位周期構造に対しては、図-4における破線の領域を用いる。初期配置における粒子間距離は、2粒子間に及ぼし合う内力がゼロとなる $r/\sigma = 1.122$ としている。ここに、 σ は粒子の半径である。

平均変位勾配が $\{\bar{H}\} = f\{0, 1, 0, 0\}$ となるような1軸引張りひずみ状態にて解析を行った。代表体積要素は、図-5に示す単位周期構造を 2×2 個、および 4×4 個により構成されるモデルを用いた。以下に示すように、ここで扱う問題においては、基本経路上に多数の多重分岐点が存在する。多重分岐点から発生する分岐経路の追跡に関しては、ブロック対角化¹⁷⁾などの手法が応用できるが、ここでは個々の分岐経路を追跡することはせず、基本経路上の最初数個の分岐点における分岐モードを、前述の2種類の代表体積要素と比較、考察する。

このときの平均応力-変形関係を図-6に示す²⁾。図中、横軸は平均変位勾配成分 $\bar{H}_{22}$ とし、縦軸はポテンシャルパラメータで無次元化した平均Cauchy応力成分 $\bar{\sigma}_{22}$ である。当然のことながら、一樣に変形する基本経路に関しては、代表体積要素に含まれる単位周期構造の数は影響しない。基本経路上の極大点付近に●、○で示す

²⁾ 初期配置は、2粒子間の内力がゼロとなるように設定したが、粒子は周囲の他の粒子とも相互作用を及ぼし合うため、この初期配置における平均応力は厳密にはゼロとはならない。

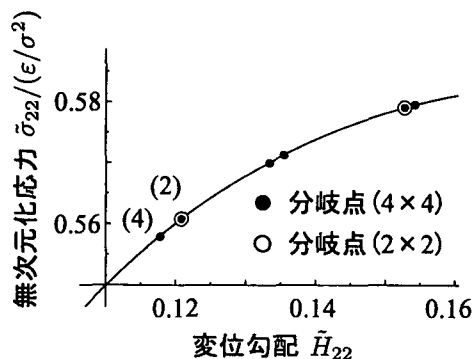


図-7 1軸圧縮における平均応力-ひずみ関係(拡大図)

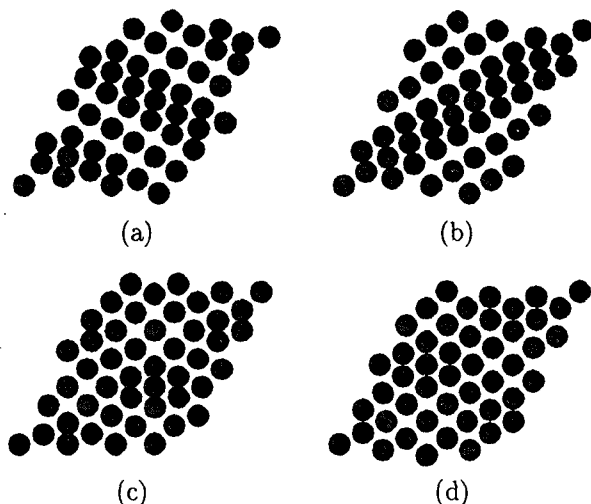


図-8 4x4モデルの第1分岐点での分岐モード

分岐点が多く存在する。●は4x4モデルにおける分岐点、○は2x2モデルにおける分岐点であるが、4x4モデルは2x2モデルの変形モードを含むので、○においては4x4モデルにおいても分岐点が存在する。

図-6に示した長方形領域を図-7に拡大表示した。同図中、分岐点付近の(4)、(2)は分岐点の多重度を表す。4x4モデルの第1分岐点における分岐モードを図-8に示す。(a)、(b)のモードは r_2 方向の位相がずれているが、基本的には鉛直軸に反転したモードであり、共に斜めストライプ状のパターンが見られる。(c)、(d)のモードについても、位相がずれた同じ分岐モードと見なすことができそうである。しかしながら、厳密なモード間の関係については、ブロック対角化などを用いた検討が必要である。

同じ位置に存在する2x2モデルの第1分岐点、4x4モデルの第2分岐点における分岐モードをそれぞれ図-9、および図-10に示す。4x4モデルは2x2モデルの変形を完全に表現できるので、図-10に示す分岐モードは図-9に示す2x2モデルの分岐モードの繰り返し図形になっているはずである。そこで、2x2モデルの分岐モードをさらに2x2倍に繰り返した図形を図-11に示

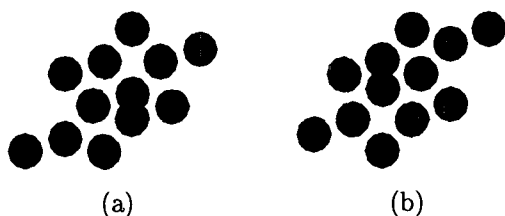


図-9 2×2 モデルの第1分岐点での分岐モード

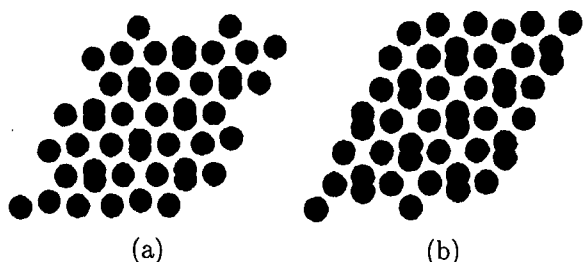


図-10 4×4 モデルの第2分岐点での分岐モード

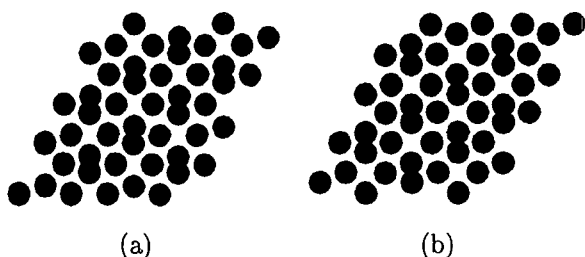


図-11 2×2 モデルの分岐モード (繰り返し図形)

す。厳密なモード間の関係については、更なる検討が必要であることには変わりないが、これらの分岐モードの比較から、(b)については r_2 方向の位相のずれはあるものの、図-10 (a), (b)のモードはそれぞれ図-11 (a), (b)のモードとほぼ一致していることが分かる。

5. おわりに

原子レベルの微視構造の変形、分岐によるパターン形成と巨視的な材料特性を結びつけるための分子動力学に基づく非線形材料応答のマルチスケール解析法の定式化を行った。次いで、巨視変形を仮定した粒子系のミクロスケール問題の解析例から、2種類の代表体積要素における分岐モードについて考察した。今後は、ブロック対角化などの手法を用いて、分岐モードに関するより詳細な検討、あるいは分岐経路の追跡を行い、微視構造の変形と非線形材料応答の関係を考察する。

謝辞：この研究は科学研究費補助金奨励研究(A)(課題番号 12750416 平成 12, 13 年度)の補助を得た。

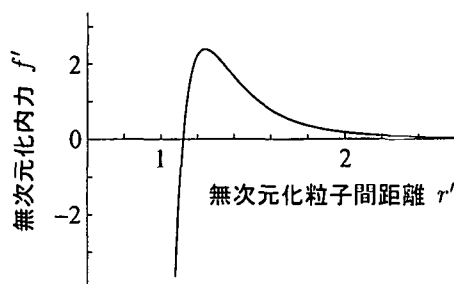


図-12 内力 - 距離関係

付録 I ポテンシャル関数

分子動力学においてシミュレーションを行う際に用途に応じて様々なポテンシャル関数が用いられている。本研究ではもっとも基本的な2体間ポテンシャルの一つである Lennard-Jones ポテンシャル関数

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right\} \quad (I.1)$$

を用いた。ここに、 r_{ij} は2つの粒子間の距離を表し、 ϵ は力、 σ は粒子の半径を表すポテンシャルパラメータである。このポテンシャル関数は、通常、希ガス系原子の固体において用いられる。ここで、粒子 j が粒子 i から受ける内力 f_{ij} は、ポテンシャル関数の勾配として

$$f_{ij}(r_{ij}) = -\frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} \quad (I.2)$$

で表される。ここに、 r_{ij} は式 (26) で定義した粒子 i を基準とした粒子 j の位置ベクトルである。このとき、無次元化距離を $r' := |r_{ij}|/\sigma$ 、無次元化内力を $f' := f_{ij} \cdot r_{ij}/(|r_{ij}|\epsilon/\sigma)$ とした場合の無次元化内力 - 距離関係を図-12に示す。内力における正の値は2粒子間に引力が生じ、負の値は斥力が生じることを意味する。

参考文献

- 1) Hull, D. and Bacon, D.: *Introduction to Dislocations* 3rd edition, Vol.37 of *International Series on Materials Science and Technology*, Pergamon, 1984.
- 2) Haile, J.M.: *Molecular Dynamics Simulation: elementary methods*, John Wiley & Sons, 1997.
- 3) 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.
- 4) 斉木 功, 田中玲子, 池田清宏: 均質な三次元材料におけるパターン形成の分岐メカニズム, 土木学会論文集, No.694/III-57, pp.259-276, 2001.
- 5) Bensoussan, A., Lions, J.L. and Papanicolaou, G.: *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North-Holland Publishing Company, 1978.
- 6) Guedes, J.M. and Kikuchi, N.: Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element meth-

- ods, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, Vol.83, pp.143-198, 1990.
- 7) 金子賢治, 寺田賢二郎, 京谷孝史, 岸野佑次: 非線形均質化理論に基づく粒状体マルチスケール解析法の開発とその応用, 土木学会論文集, No.680/III-55, pp.183-199, 2001.
 - 8) 市川康明, 河村雄行, 中野 政詩, 分子シミュレーション法と均質化法の結合解析 — 高レベル放射性廃棄物の地層処分における緩衝材挙動への適用, 日本原子力学会誌, Vol.42, No.2, pp.88-97, 1999.
 - 9) Müller, S.: Homogenization of nonconvex integral functionals and cellular elastic materials, *Arch. rat. mech. anal.*, 99, pp.189-212, 1987.
 - 10) 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.
 - 11) Allaire, G.: Mathematical approaches and methods, in: Hornung, U. ed., *Homogenization and Porous Media*, Springer, New York, pp.225-250, 1996.
 - 12) Terada, K. and Kikuchi, N.: A class of general algorithm for nonlinear multi-scale analyses for heterogeneous media. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, Vol.190, pp.5427-5464, 2001.
 - 13) 大植 健, 斉木 功, 中島章典, 寺田賢二郎: 骨組要素を用いたセル構造体のマルチスケールモデリング, 応用力学論文集, Vol.3, pp.185-192, 2000.
 - 14) 斉木 功, 大植 健, 寺田賢二郎, 中島章典: 構造要素を用いた微視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, Vol.4, pp.139-146, 2002.
 - 15) 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝: 応用群論 (増補版), 裳華房, 1980.
 - 16) Armstrong, M.A.: *Groups and symmetry*, Springer, New York, 1997.
 - 17) Zloković, G.: *Group Theory and G-vector Spaces in Structural Analysis*, Ellis Horwood, Chichester, 1989.

(2002 年 4 月 19 日 受付)