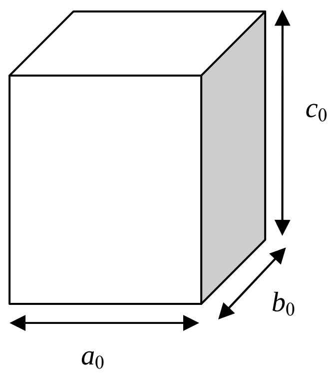
周期境界条件の有限要素法（分子動力学と同じ系の計算）

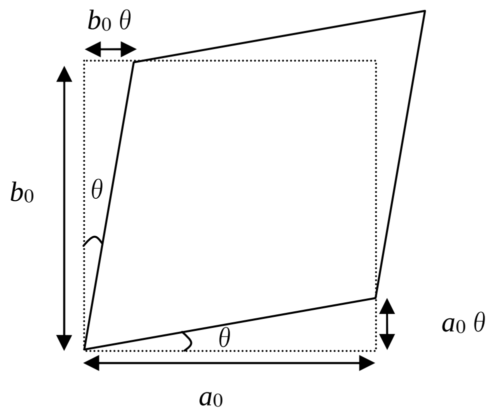
分子動力学のひずみ負荷の計算では、最初の無ひずみのＭＤセルの形状を三種類のエッジのベクトルを使って、以下のような形状マトリックスを設定する



$$h_0 = \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 \\ 0 & b_0 & 0 \\ 0 & 0 & c_0 \end{pmatrix} \quad \cdots\cdots\cdots(1)$$

この形状マトリックスを変えることによって、MD では系の変形が行われる。ただし、形状マトリックスは 9 成分、変形は 6 成分なので、変形の際には工夫が必要になる。

ここで、例えば、各辺のベクトルを xy 面内で θ 、xz 面で ϕ 、yz 面内で ϕ だけ対称に傾け、各辺の長さを δa, δb, δc だけ長くしたとすると、



変形状態の形状マトリックスは

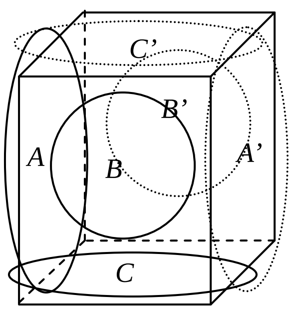
$$h=\begin{pmatrix} a_0+\delta a & b_0\theta & c_0\varphi \\ a_0\theta & b_0+\delta b & c_0\phi \\ a_0\varphi & b_0\phi & c_0+\delta c \end{pmatrix} \quad \cdots\cdots\cdots(2)$$

変形勾配テンソルと、ひずみテンソルは

$$F=hh_0^{-1}=\begin{pmatrix} \dfrac{a_0+\delta a}{a_0} & \theta & \varphi \\ \theta & \dfrac{b_0+\delta b}{b_0} & \phi \\ \varphi & \phi & \dfrac{c_0+\delta c}{c_0} \end{pmatrix} \quad \cdots\cdots\cdots(3)$$

$$\eta=\begin{pmatrix} \dfrac{\delta a}{a_0} & \theta & \varphi \\ & \dfrac{\delta b}{b_0} & \phi \\ sym. & & \dfrac{\delta c}{c_0} \end{pmatrix} \quad \cdots\cdots\cdots(4)$$

この周期境界条件を有する系の変形を FEM で解くためには、変形前の形状マトリックスのセル形状のメッシュを用意する。ここで、*A-A’, B-B’, C-C’*などの相対する面の節点の位置は、周期境界条件の設定により、平行移動したものになってなければならない。



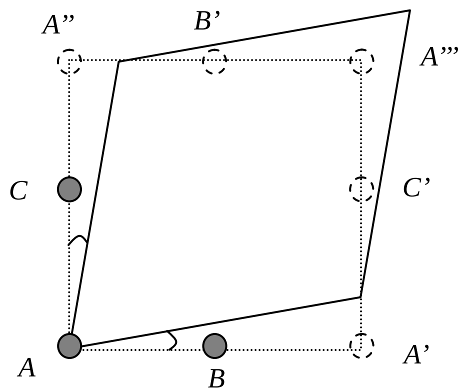
その上で、例えば面 A と A’上の対応する節点の x, y, z 方向の変位を以下の拘束方程式により拘束する。

$$x_A+\delta a=x_{A'}$$
$$y_A+a_0\theta=y_{A'} \quad \cdots\cdots\cdots(5)$$
$$z_A+a_0\varphi=z_{A'}$$

面 B-B’, C-C’も同様となる。

$x_B + b_0\theta = x_{B'}$
$y_B + \delta b = y_{B'}$ ………(6)
$z_B + b_0\phi = z_{B'}$
$x_C + c_0\varphi = x_{C'}$
$y_C + c_0\phi = y_C$ ………(7)
$z_C + \delta c = z_{C'}$

ただし、x,y,z の三方向に周期境界条件を与えているため、同じ節点が複数コピーされているため、辺上の節点の取り扱いには注意が必要になる。



例えば、上の図のような二次元 8 節点のモデルの場合は、独立した節点は A, B, C の 3 つのみであり、他の節点は A, B, C のいずれかと関連付けられる。
具体的に書くと、
A-A’間には
$x_A = x_{A'}$
$y_A + a_0\theta = y_{A'}$
A-A”間には
$x_A + b_0\theta = x_{A''}$
$y_A = y_{A''}$
A-A”’間には
$x_A + b_0\theta = x_{A'''}$
$y_A + a_0\theta = y_{A'''}$
の関係がそれぞれ成り立つ。

二次元の場合は、頂点の節点は等価な節点を 4 個（3 個はコピー）持ち、辺上の節点は 2 個（1 個はコピー）持つ。よって、頂点の節点の拘束方程式のみに注意を払えば良い。三次

元では、頂点の節点は等価な節点を 8 個（7 個はコピー）持ち、辺上の節点は 4 個（3 個はコピー）、面内の節点は 2 個（1 個はコピー）持つ。

（例題）

任意の直方体のセルに、任意の変形（引張・せん断）を与えてみて、式(4)の均一なひずみになるかどうか、それに対応する応力になるかどうかを確かめる。

Ex1)

$$h_0 = \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 & 0 \\ 0 & 0 & a_0 \end{pmatrix}, \quad h = \begin{pmatrix} a_0 + \delta a & 0 & 0 \\ 0 & a_0 & 0 \\ 0 & 0 & a_0 \end{pmatrix}$$

a_0=100, δa=1, E=1, ν =0.3

$$\eta = \begin{pmatrix} 0.01 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 \\ sym. & & 0 \end{pmatrix}$$

Ex2)

$$h_0 = \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 & 0 \\ 0 & 0 & a_0 \end{pmatrix}, \quad h = \begin{pmatrix} a_0 & a_0\theta & 0 \\ a_0\theta & a_0 & 0 \\ 0 & 0 & a_0 \end{pmatrix}$$

a_0=100, θ =0.01

$$\eta = \begin{pmatrix} 0 & 0.01 & 0 \\ & 0 & 0 \\ sym. & & 0 \end{pmatrix}$$

Ex3)

$$h_0 = \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 \\ 0 & 2a_0 & 0 \\ 0 & 0 & a_0 \end{pmatrix}, \quad h = \begin{pmatrix} a_0 & 2a_0\theta & 0 \\ a_0\theta & 2a_0 & 0 \\ 0 & 0 & a_0 \end{pmatrix}$$

$$\eta = \begin{pmatrix} 0 & 0.01 & 0 \\ & 0 & 0 \\ sym. & & 0 \end{pmatrix}$$

解答）

解析条件

100mm×100mm×100mm の立方体（1,2）

100mm×200mm×100mm の六面体（3）

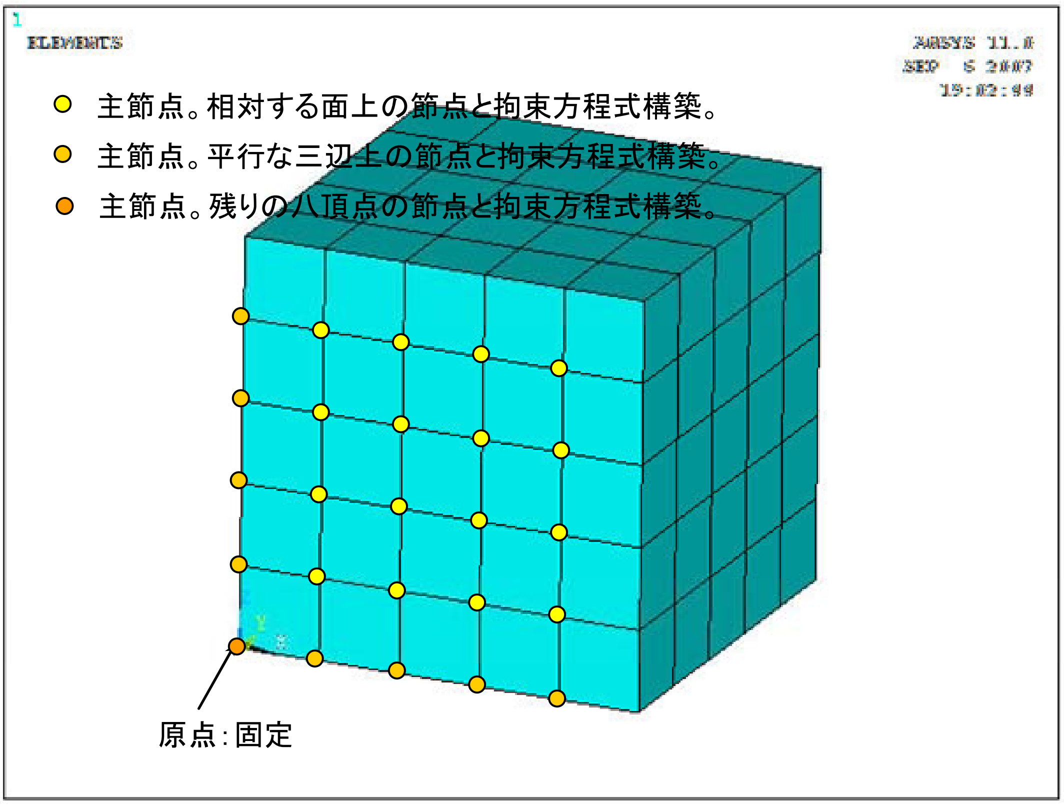
E=1MPa、 ν =0.3

Solid45（三次元ソリッド一次要素）

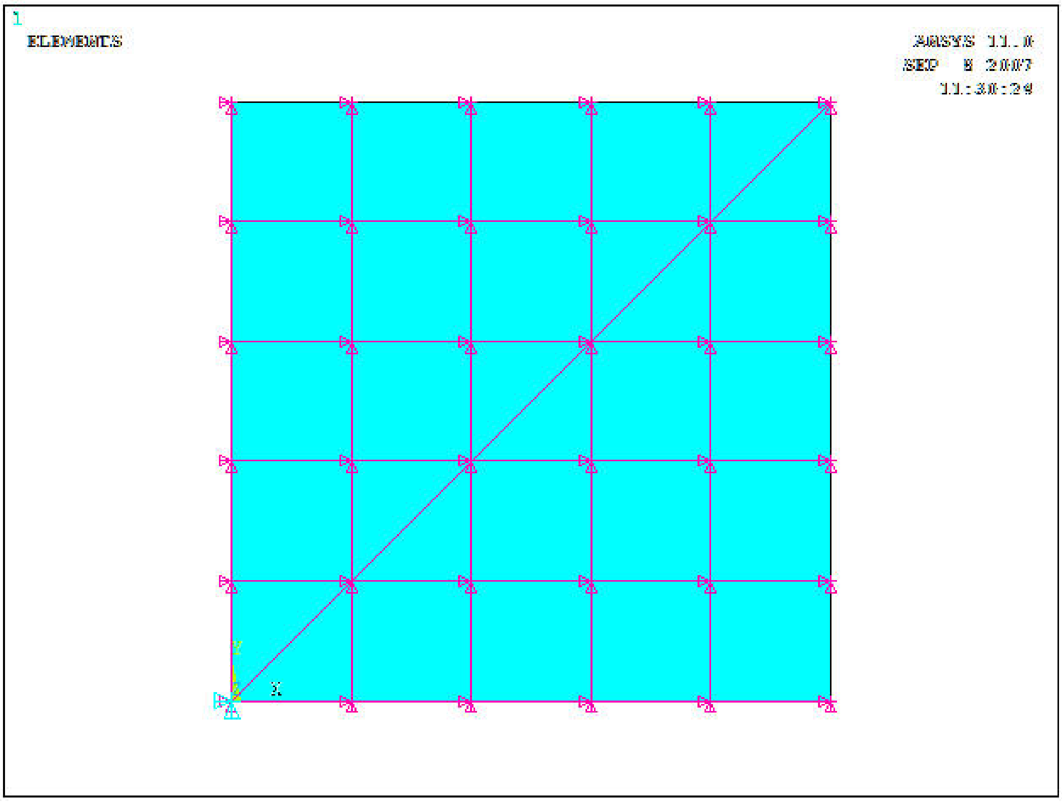
拘束方程式

原点を含む面上の下図の節点を主節点として

拘束方程式を構築。

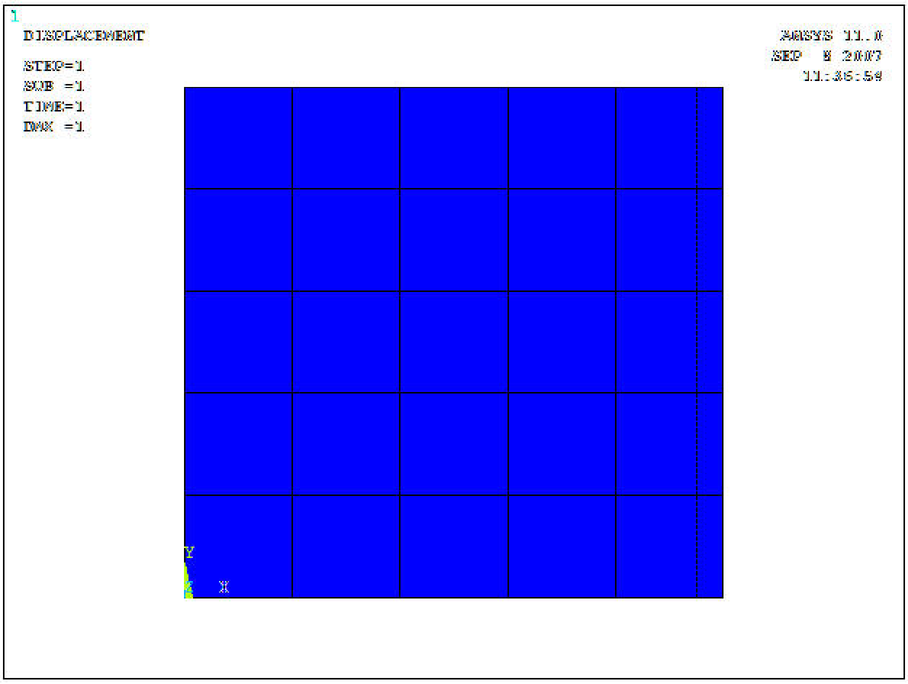


xy 平面から見た境界条件（ピンク色の線：拘束方程式）

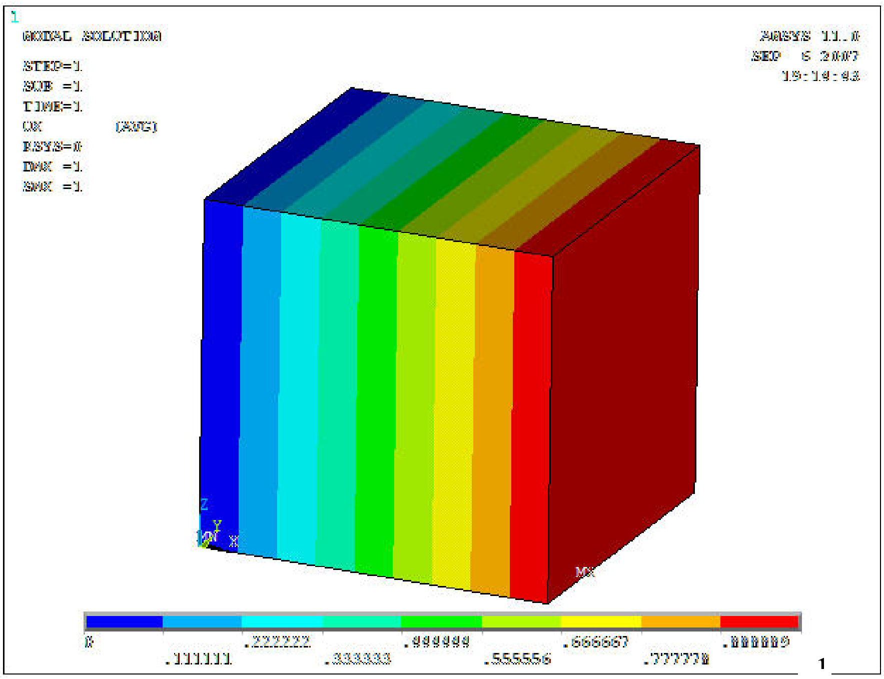


Ex1)　δa=1（単純引張り）→ εx のみ 0.01 で後はゼロになる

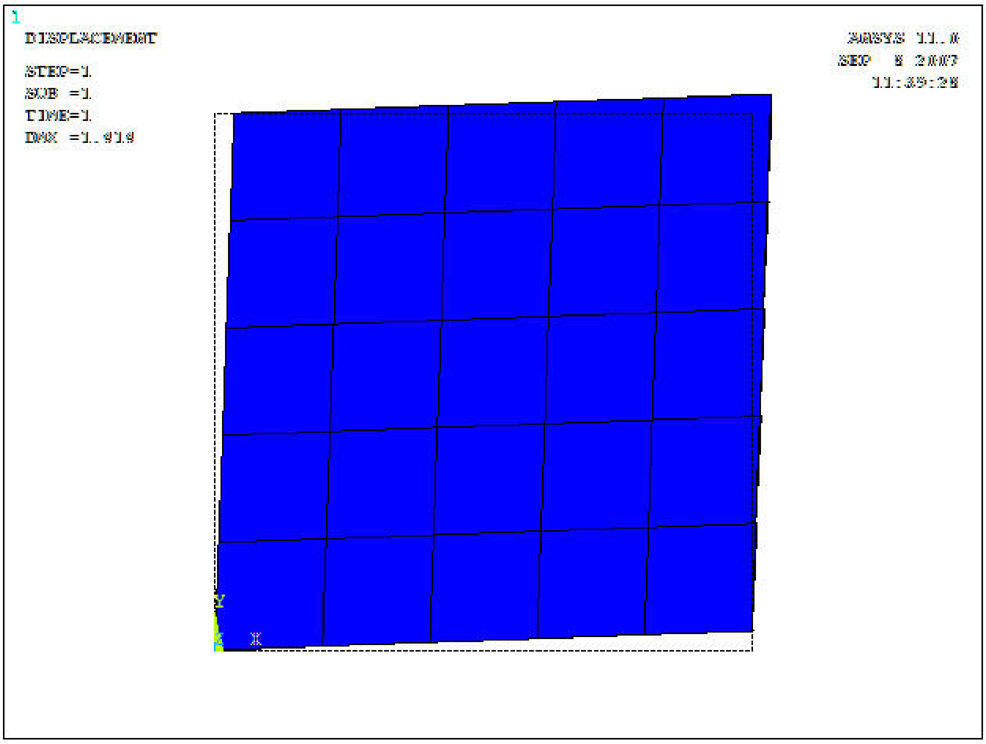
変形図



x 方向変位



Ex2)　 $\delta\ \theta$ =0.01（純せん断）→ ε_{xy} のみ 0.02 で後はゼロになる



Ex3) b0=200mm,　$\delta\ \theta$ =0.01（純せん断）→ ε_{xy} のみ 0.02 で後はゼロになる

（その他の例）

真ん中に穴が開いている場合

周期的な Mises 相当応力場が実現されている。