計算工学講演会論文集　Vol.28 (2023年5月)　　　　計算工学会

均質化法における接触を伴う周期境界条件のモデル化

Modeling of Periodic Boundary Condition with Contact over the Boundaries on Homogenization Method

木口 裕希1)，瀧澤 英男2)

Yuki Kiguchi and Hideo Takizawa

1) 日本工業大学 大学院 工学研究科（〒345-5801埼玉県南埼玉郡宮代町学園台4-1, E-mail: 2237011@stu.nit.ac.jp)

2) 博(工)　日本工業大学 基幹工学部 教授（〒345-5801埼玉県南埼玉郡宮代町学園台4-1, E-mail: htaki@nit.ac.jp）

This study proposes a homogenization analysis model that includes a closing gap. In this method, the flexible membrane elements are placed in the gap, and periodic boundary conditions are applied to these membrane elements. This method can be easily applied to general-purpose codes. To verify the fundamental functions of the proposed model, compaction analyses of spherical particles arranged in 2 types of cubic lattice are carried out. The results of the analyses using conventional symmetry conditions are used as reference solutions. The analysis results using the unit cell modeled by the proposed method are compared with the reference solutions. The results of the proposed model agree with reference solutions.

Key Words: *Homogenization, Contact, Membrane, Periodic boundary condition, Particle compaction*

1.　緒　言

連続体力学における構成則は，力学的性質を特徴づける材料の微視的構造に従い，それぞれ異なる関数で定義される．例えば，金属結晶であれば，光学顕微鏡レベルで観察可能な結晶粒の向きや大きさと，その下部構造である原子レベルの転位の力学によって支配される．このような，原子レベルの力学現象を記述するためには，連続体力学とは異なる力学体系を導入する必要がある．一方，繊維強化複合材料のように，単一材料での材料特性が，何らかの構成式で適切に記述できるのであれば，これらの複合としてのマクロ特性は，二つ以上の材料の幾何学的な複合形態（モルフォロジー）によって決定される．材料間の接合界面で強い拘束（変位の連続性）が仮定できる場合は，純粋に力学的な問題として，均質化法によりマクロ特性を導出することができる．

均質化法[1]は，微視的な不均質構造をもつ固体のマクロ特性を導出する解析方法であり，複合材料を中心として広く産業上の応用が進んでいる．均質化法解析では，ユニットセルに対して適切な周期境界条件を設定することで，任意の変形状態または応力状態を付与できる．このため，物理的な制約を受ける現実の材料試験よりも，はるかに広範な試験条件の設定が可能である．

繊維強化樹脂のように，下部構造において内部がいずれかの固体材料で満たされており，間隙がない場合，周期境界条件は容易に設定できる．あるいは，間隙があっても，間隙が閉空間になっている場合，周期境界と間隙が重複しないようにユニットセルを定義できれば問題は生じない．しかし，周期境界と間隙が重複し，かつ，周期境界を跨いで接触が生じる場合は，ユニットセル解析において，かなり複雑な例外処理が必要となる[2].

このような微視的構造の間隙において周期境界と接触条件が重複するような問題は，繊維の織物や編物の変形，低密度多孔質体の大変形問題，粒子の流動・圧密問題などで生じる．本研究では，このような問題に対する均質化法解析の汎用化・簡略化を目的として，金属粉末粒子の圧密挙動の解析を例に，膜要素による周期境界条件のモデル化を提案する．

2.　問題の所在

(1)　個別要素法とのすみわけ

粉末のような小さな離散粒子の集合体を解析する場合，個別要素法（DEM: Discrete Element Method）が用いられる[3, 4]．個別要素法は，個々の粒子の相対的位置の大きな変化を主な解析対象としている．従って，個々の粒子の変形は考慮されず，粒子は基本的に剛体として扱われる．このため，粒子間の相互作用については，接触時は粒子間のわずかな貫通を許容し，接触面における法線方向と接線方向の特性を粘弾性モデルや非線形バネでモデル化する．つまり，粒子間の相互作用を，粒子の材料特性と表面特性が混在した，解析上の現象論的パラメータとしてモデル化する．これにより，非常に効率的に多数の粒子の流動現象を解析することが可能となる．

以上のように，個別要素法では粒子の相互作用のモデルおよびパラメータを現実との合わせ込みにより決定する作業が必要であり，また，粒子そのもの材料特性の影響を陽な形で導入することができない．これに対して，本研究では，有限要素法を用いて，材料構成則が定義された粒子そのものの変形を解析することを目的とする．

(2)　周期境界条件と接触条件の重複

固体の均質化法解析では，ユニットセルの固体部分を有限要素に離散化し，ユニットセルの外周の節点に周期境界条件を設定する．よって，ユニットセルの外周に間隙を含む場合，節点の存在しない間隙空間には周期境界条件を設定することができない．この間隙は，圧密のような変形の進行によって固体間の接触が生じると，閉塞する．しかし，間隙には周期境界条件が設定されていないため，接触による荷重あるいは拘束を対応する周期境界へ伝達することができず，適切な解析とならない．

この問題を解消するためには，周期境界を跨いで生じる固体同士の接触を，一般的な接触とは別に例外として処理する必要がある．煩雑ではあるがロジックは明確な処理なので，in-houseコードであれば，このような周期境界を跨ぐ接触条件を記述することは不可能ではない．しかし，一般の汎用コードにこの処理を組込むことは，かなり煩雑である．

本研究では，一般の汎用コードにおいて，ユニットセルの外周の間隙に，接触条件と両立できる周期境界条件の設定方法を提案する．

3.　膜要素による接触条件の伝達

(1)　提案モデルの基本概念

図-1に本研究で提案する膜要素による接触条件の伝達モデルを二次元の模式図で示す．簡単のため，図-1(a)に示すように同一形状の粒子が初期状態では二次元で格子状に整列していると仮定する．整列している粒子構造にマクロな体積収縮とゆがみ変形を加えると，それぞれの粒子は，隣接する粒子同士の相互接触により圧縮とせん断が同時に作用して変形が進行する．ここで，整列している粒子から，図-1(b)のようにひとつの粒子をユニットセルとしてモデル化する．この粒子は圧密により，間隙を介して上下左右に配置されている「自身と等価な粒子」に接触して変形する．こうした接触を伝達するために，提案モデルでは，この間隙に膜要素（接触膜もしくは周期境界膜）を配置する．この膜要素には粒子との接触条件を定義すると同時に，周期境界条件を設定する．こうすることで，間隙を介した粒子同士の接触を疑似的に表現する．このとき，膜要素の剛性を解析対象の粒子に比べて十分小さく設定することで，膜要素を力学的に透明な状態とする．

このモデルにより，以下のような挙動を解析することができる．図-1(b)に示すように粒子の右上の節点Aが，膜要素aに接触すると，膜要素aは周期境界条件によって，等価な変形挙動が規定される膜要素a'に変位を伝達する．伝達した変位により，膜要素a'と粒子の右下の節点Bが接触する．このとき，粒子表面の節点Aと節点Bは直接接触していないが，周期境界条件が設定された二つの膜要素aおよびa'が仲介することで接触条件を伝達する．つまり，何もない間隙に力学的に透明な膜要素を配置することで，

$$\text{Node A} \xleftrightarrow{\text{Contact}} \text{Mem. a} \xleftrightarrow{\text{Periodic B.C.}} \text{Mem. a}' \xleftrightarrow{\text{Contact}} \text{Node B}$$

のような周期境界条件を跨いだ接触条件の伝達をモデル化する．

(2)　周期境界条件の設定方法

本研究では，非線形有限要素解析コードMarcを用いる．以下に，Marcにおける周期境界条件の組み込み方法を記載する．なお，これと同等の機能は，ほぼすべての汎用コードで利用可能である．

周期境界上の膜要素の節点変位$\{u\}$は以下の式で表される．

$$\{u\} = [S_\varepsilon]\{\varepsilon\} + [S_\gamma]\{\gamma\} + [\mathrm{I}]\{u^*\}$$

ここで

$$[S_\varepsilon] = \begin{bmatrix} X_1 & 0 & 0 \\ 0 & X_2 & 0 \\ 0 & 0 & X_3 \end{bmatrix}, \{\varepsilon\} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \end{Bmatrix}$$

$$[S_\gamma] = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} X_2 & 0 & X_3 \\ X_1 & X_3 & 0 \\ 0 & X_2 & X_1 \end{bmatrix}, \{\gamma\} = \begin{Bmatrix} \gamma_{12} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{31} \end{Bmatrix}$$

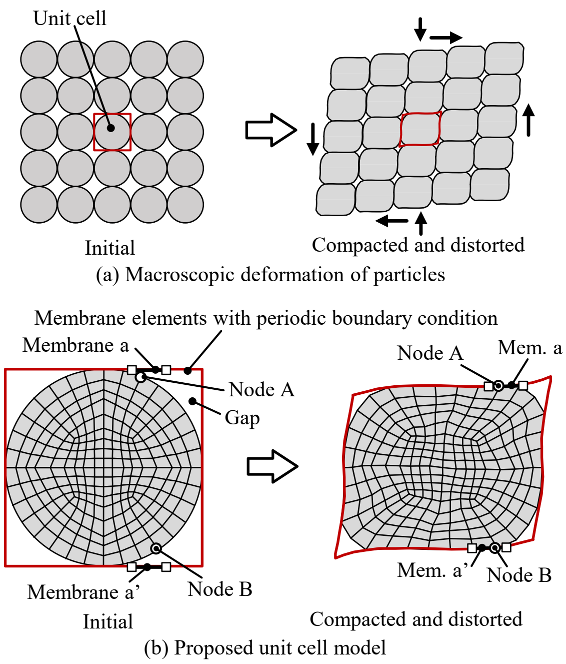
$$[\mathrm{I}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \{u^*\} = \begin{Bmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ u_3^* \end{Bmatrix}$$

である．$\{\varepsilon\}$および$\{\gamma\}$は，ユニットセル全体に与える垂直ひずみおよびせん断ひずみ（いずれも公称ひずみの定義）を，X_iは周期境界膜上の節点の初期座標をそれぞれ示す．また，$\{u^*\}$は周期境界膜上の対応する等価な節点で共通の擾乱変位を示す．

周期境界条件の定義には，Marcのユーザサブルーチンuformsnを用いる．Tyingを用いて，従属自由度として周期境界膜上の節点を，独立自由度として$\{\varepsilon\}$，$\{\gamma\}$および$\{u^*\}$を指定し，ユーザサブルーチンで各Tyingに対して，以下の行列$[S]$

$$[S] = \left[[S_\varepsilon], [S_\gamma], [\mathrm{I}]\right]$$

を設定する．



(a) Macroscopic deformation of particles
(b) Proposed unit cell model

図-1　周期境界膜モデルの二次元模式図

なお，周期境界膜に設定する要素には，解析では，膜要素ではなくシェル要素を用いる．シェル要素の曲げ剛性は今回の解析の意図からすれば不要だが，シェル要素は膜要素に比べて解析機能が充実しており，使用実績も多く，信頼性が高い．このため，十分に薄い厚さを設定した薄肉シェル要素を，膜要素の代替として利用する．このシェル要素は弾性体として定義する．また，圧密の進行とともに接触膜に座屈（しわ）が生じないように，シェル要素には十分大きな初期張力を付与する．なお，実際に使っている要素はシェル要素だが，本文では，機能的な意味で膜要素と呼称する．

4. 接触膜法の数値解析的検証

(1) 検証方法

本章では，提案した接触膜法の基礎的な妥当性を，信頼できる参照解との比較により検証する．接触膜法の基本動作の検証として，立方格子状に配置した球状粒子に対して，垂直ひずみのみによる圧密解析を行う．このような単純な圧密条件であれば，変形は鏡面対称となるため，汎用コードの標準機能である対称境界条件で同様の解析が可能である[5]．この対称境界条件による解析を信頼できる参照解として，提案モデルを検証する．ここでの検証は，V&Vの枠組みでは提案手法のCode to Code Verificationを意味する．

(2) 解析条件

表-1に粒子の材料モデルを示す．粒子は球体としてモデル化し，材料モデルはMisesの降伏条件に従う線形硬化弾塑性体とした．検証のための単純問題として，初期の粒子配置を，面心立方格子（FCC）および体心立方格子（BCC）とする．

接触解析手法については，対称境界条件（対称面）を使った対称モデルではSegment to Segmentモデルを，提案手法を使った接触膜法モデルでは膜要素をマスター面としたNode to Segmentモデルをそれぞれ適用した．

膜要素を力学的に透明な膜とするためには，膜要素は可能な限り薄い厚さと低いヤング率を持つことが望ましい．ここでは，解析の安定性も考慮して，膜の厚さは球状粒子の半径の1/10000，ヤング率は粒子のヤング率の3/4とした．また，接触膜には750MPaの面内等二軸応力を初期張力として付与している．摩擦係数はCoulomb摩擦でμ=0.25とした．

接触膜法モデル（提案モデル）および対称モデル（参照解）の初期形状を図-2に示す．接触膜法モデルにおいて，球状粒子を覆う接触膜の形状は，FCC配置では菱形十二面体，BCC配置では切頂八面体になる．また，対称モデルでは格子の1/8領域を解析対象とする．

各モデルに対する圧密条件を図-3に示す．図のように，立方格子の垂直方向から一軸圧縮，等二軸圧縮および等三軸圧縮の公称ひずみを与える．

表-1 粒子の材料モデル

Young's modulus E/MPa	1000
Poisson's ratio ν	0.3
Flow curve Y/MPa	$1+0.5\bar{\varepsilon}^{p}$
Coefficient of friction μ	0.25

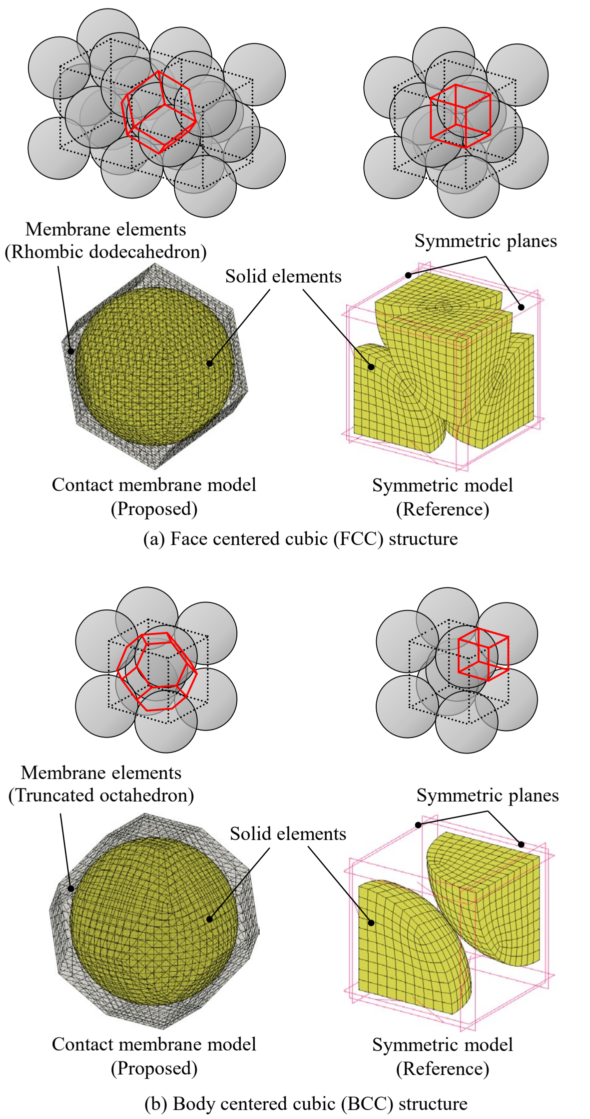


図-2 接触膜法モデルと対称モデル

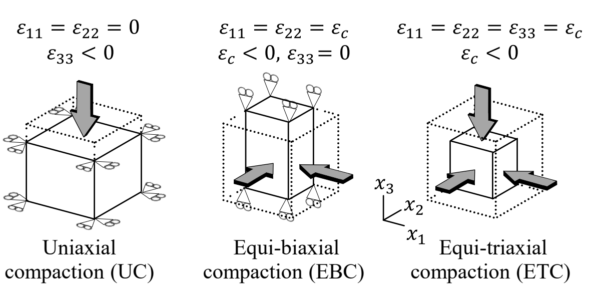


図-3 圧密解析のマクロひずみ条件

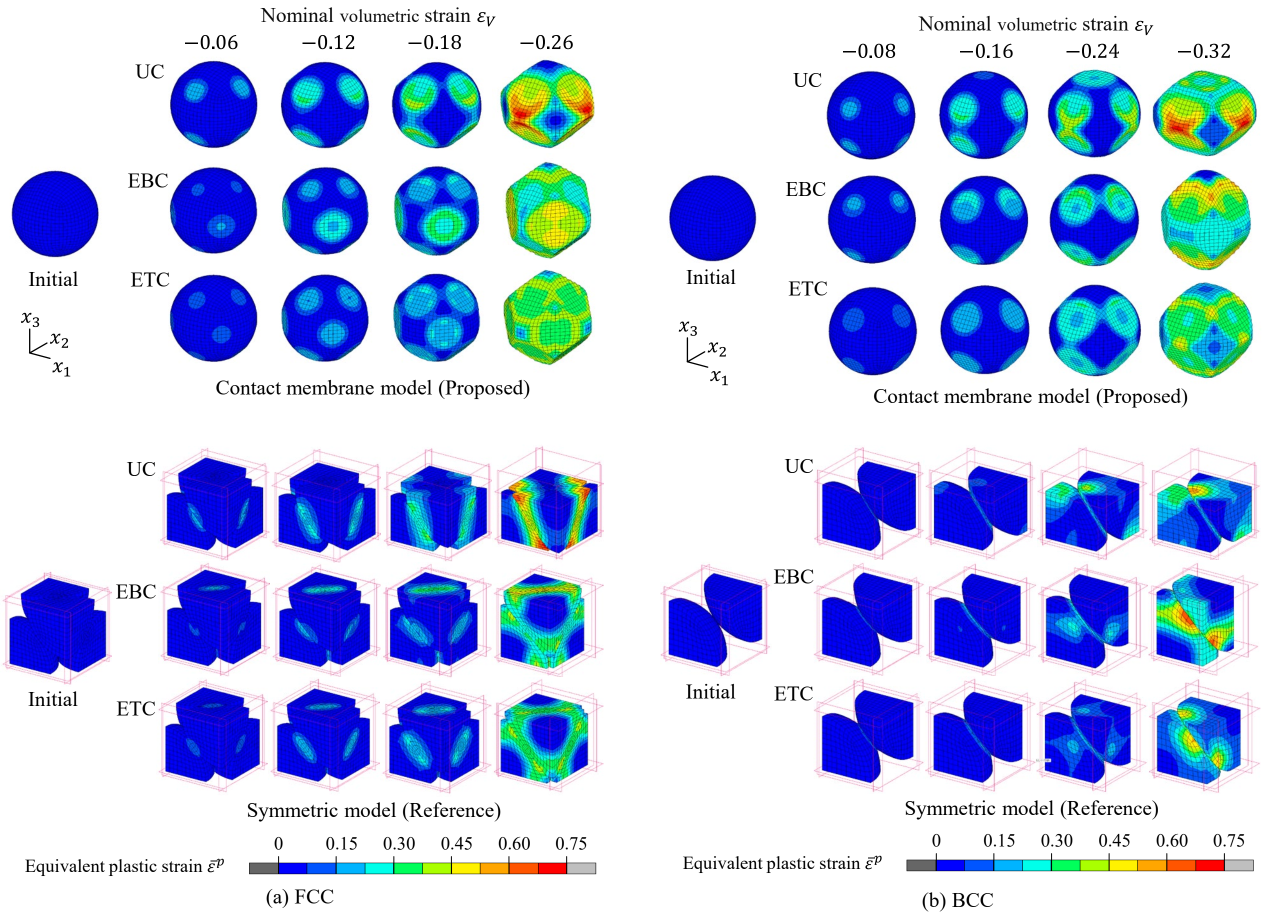


図-4　圧密解析における変形形状および相当塑性ひずみ分布の参照解との比較

（3）　検証結果

図-4に，各圧密条件における，接触膜法モデルおよび対称モデルの変形の様子を示す．図では接触膜を非表示にし，変形体には相当塑性ひずみ$\bar{\varepsilon}^p$の分布を示す．

提案した接触膜法モデルでは，球状粒子は周期境界膜との接触により押し潰され，疑似的な粒子間（周期境界膜を介して対応する粒子の反対側の面）の接触により圧密が進行している．この変形の様子は，参照解である対称モデルの変形の様子と対応している．相当塑性ひずみの値については，完全な一致にはならないが，分布状態はよく対応している．また，図中では省略しているが，接触膜法モデルの周期境界膜は，座屈が生じることなく，圧密と共に収縮している．

図-5に各圧密条件における公称圧密応力σと公称体積ひずみε_Vの関係を示す．ここで，接触膜法モデルについては，接触膜に付与している初期張力の影響を取り除いた値を示している．

いずれの粒子配置および負荷条件においても，接触膜法モデルと対称モデルの公称圧密応力はよく一致している．また，初期状態での粒子の空間充填率は，FCC配置で74%，BCC配置で68%であるため，これに対応する体積圧縮率（FCCで$\varepsilon_V = -0.26$，BCCで$\varepsilon_V = -0.32$）で真密度に達する．これ以降も圧縮を加えると，粒子そのものの体積

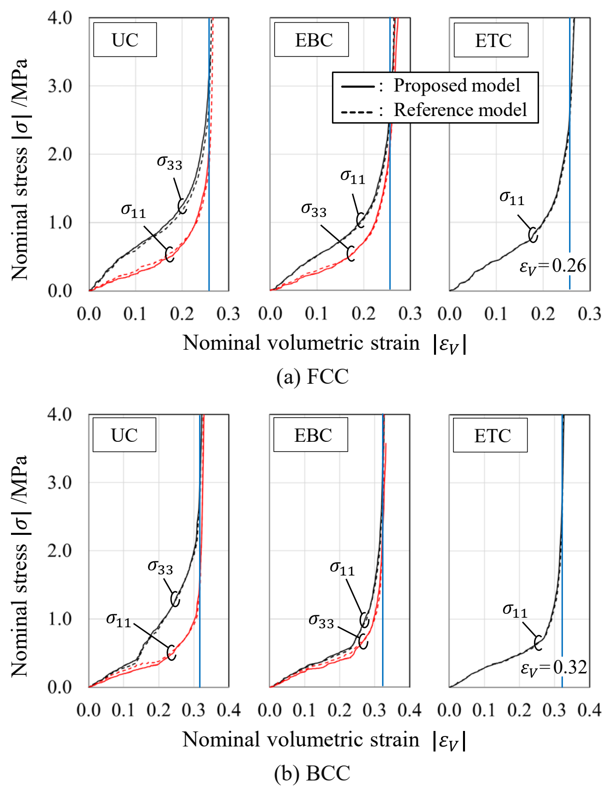


図-5　圧密圧力・公称体積ひずみ関係における比較

変化が生じるため公称圧密応力が垂直に立ち上がる．しかし，いずれのグラフにおいても，この変化は，対応する公称体積ひずみよりも，やや大きな値で生じている．これは，離散化および接触による誤差が原因である．この誤差は，接触膜法モデルと対称モデルのいずれの結果においても確認できるため，本検証では問題ないと判断する．

ここでは，垂直ひずみに限定した条件での解析を示した．限定条件下ではあるものの，本研究で提案した接触膜法モデルによる粒子圧密解析の結果は，汎用コードの標準機能で解析した対称モデルの解析結果とほぼ一致した．以上より，接触膜法モデルの基礎的な妥当性が検証できた．

5.　せん断変形を含む圧密解析（参考解析）

前章までの解析例では，鏡面対称条件しか設定できない参照解に条件を合わせるために，接触膜法モデルに対しても垂直圧縮ひずみのみを与えた．本研究で提案した接触膜法では，通常の均質化法と同様に，せん断ひずみを含む任意のひずみ履歴をモデルに負荷することができる．

図-6に，FCCおよびBCC配置の球状粒子に対して，接触膜法を用いて，圧密変形とせん断変形を同時に与えた場合の解析結果を示す．与えたひずみの比は，

$$\varepsilon_{11}:\varepsilon_{22}:\varepsilon_{33}:\gamma_{12}:\gamma_{23}:\gamma_{31} = -2:-2:-2:-1:-1:0$$

である．図より，粒子が圧密されながらせん断変形する解析が可能であることがわかる．

冒頭に述べたように粉末粒子そのものの変形が十分に小さく，粒子同士の相対位置関係が大きく変化するような場合は，個別要素法による解析が適切である．一方，圧密過程の後半では，粒子同士の相対位置変化が小さく，粒子同士の中心間距離が近接する．このような場合は，今回提案した手法により，材料特性や摩擦条件を陽に定義した解析が有効である．

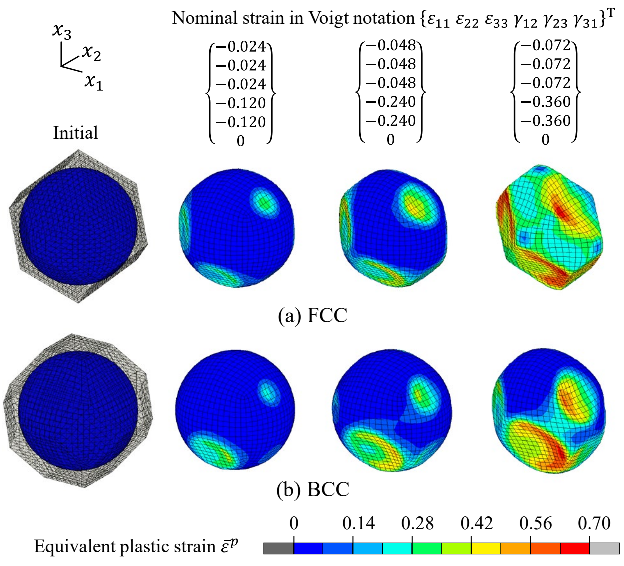


図-6　接触膜法によるせん断変形を含む圧密解析例

今後，今回の提案モデルを拡張し，粉末圧密構成式の精緻化や織物繊維基材の変形解析に取り組む．

6.　結　言

(1) 均質化法解析において物体のない間隙に周期境界条件を設定する方法として，間隙に力学的に透明な膜要素を配し，この膜要素に周期境界条件を設定する手法を提案した．

(2) 提案手法の具体例として，面心立方格子および体心立方格子に配置した球状粒子の圧密問題を取り上げ，対称境界条件で解析可能な負荷条件で参照解と比較した．この結果，ほぼ同一の結果が得られることを示した．

(3) 提案した接触膜法では，圧密と共にせん断変形が生じる場合も解析が可能であり，この手法であれば粒子の材料特性や形状を直接考慮した圧密解析が可能である．

謝辞: 本解析の実施にあたり，Hexagon MI Japanの穴山明寛氏に有益な助言を頂いた．謝意を表する．

参考文献

[1] 寺田賢二郎，他: 数値材料試験，丸善出版, 2021.

[2] 西紳之介，他: 繊維束の接触・摩擦を考慮したドライファブリックのアイソジオメトリック均質化解析，日本機械学会論文集，Vol.84, DOI: 10.1299/transjsme.17-00554, 2018.

[3] 金子賢治，他: 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.

[4] 酒井幹夫，他: 粉体の数値シミュレーション，丸善出版, 2012.

[5] Harthong, B. et al.: Modeling of high-density compaction of granular materials by the discrete element method, Int. J. of Solids Struct. Vol.46, pp.3357–3364, 2009.