

平成27年度 博士論文

Euler型拡張有限要素法による
粘性-超弾性体の数値解析手法の研究

(Visco-Hyperelastic Solid Analysis Method
using Eulerian eXtended Finite Element Method)

平成27年9月

広島大学大学院工学研究科

輸送・環境システム専攻

構造システム研究室

D113556 西口 浩司

要旨

論文題目 Euler 型拡張有限要素法による粘性-超弾性体の数値解析手法の研究
(Visco-Hyperelastic Solid Analysis Method using Eulerian eXtended Finite Element Method)

氏名 西口 浩司

本研究の目的は、高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料の実用的な数値シミュレーションを可能とすることである。そのために、本研究では以下の2点の問題の解決に取り組む、Euler 型拡張有限要素法による粘性-超弾性体の数値解析手法を提案した。

1. 従来の Lagrange 型有限要素法や Euler 型有限要素法では、高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料の特性である温度依存性と粘性-超弾性の定式化が行われていなかった。
2. 従来の Euler 型有限要素法で複数の固体材料を扱う場合、ひとつの有限要素内に複数の固体材料が存在し得ることから、基礎方程式を空間平均化することで定義域内の速度場を C^0 連続な関数とし、有限要素法による空間離散化を行ってきた。しかし、空間平均化により単一の速度場で複数の固体材料を扱うことになるため、固体と固体の界面が固着して固体界面の滑りなどの不連続性をモデル化できず、実用的な数値シミュレーションの妨げになることがあった。

本研究で得られた結論を以下の4点にまとめる。

1. Simo の粘弾性モデルに対して、代表的な時間-温度換算則である WLF 則を導入し、高分子材料の温度依存性を緩和時間に換算して表現した。この定式化により、高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料の特性である温度依存性を考慮した粘性-超弾性をモデル化できる。物質点を追跡しない記述方法である Euler 表示においては、左 Cauchy-Green 変形テンソルの時間発展式を導入することで、Euler 表示の速度場から固体変形を記述できる。
2. 超弾性を規定するひずみエネルギー関数として、設計実務における活用のし易さ観点から関数形がシンプルで物理的意味が明瞭である山下-川端モデルを基礎として、新たなひずみエネルギー関数を提案した。山下-川端モデルは、線形的な弾性挙動とひずみ硬化挙動を表す項を有している。山下-川端モデルはカーボンブラック補強ゴム解析のために提案されたものであるため、高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料解析の定量性は低い。ひずみ硬化挙動を表す高次項を追加することによって、高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料解析の定量性を向上できる。
3. 固体界面の滑りなどの不連続性をモデル化するため、拡張有限要素法 (X-FEM) により速度場の拡充を行い、3次元 PLIC 法により各有限要素で線形近似した異種材料界面の接触条件を、ペナルティ法で制御する手法を提案した。固体平面上における粘性-超弾性体の自重変形解析により、本研究の提案手法の妥当性を2次元および3次元問題で確認した。
4. B ステージ樹脂やアクリル系粘着剤の大変形解析により、柔らかい高分子材料の設計実務における本研究の提案手法の有効性を示した。具体的には、粘着剤や樹脂の衝撃吸収性能評価のために行われる鋼球衝突試験の数値解析を行うことで、実務的解析における有効性を示した。また、異種材料界面の不連続モデルを用いて、B ステージ樹脂による凹凸面の包埋挙動の解析を行い、B ステージ樹脂の製品設計における有効性を示した。

目次

第 1 章	緒言	1
1.1	背景	1
1.2	固体の大変形問題に関する既往の研究	2
1.3	高分子材料の構成則に関する既往の研究	4
1.4	本研究の目的と位置付け	5
1.5	本研究の概要	6
第 2 章	連続の式と平衡方程式	9
2.1	連続体の運動の記述法	9
2.1.1	Lagrange 表示と Euler 表示	9
2.1.2	物質時間導関数	10
2.2	保存則	11
2.2.1	質量保存の法則	12
2.2.2	運動量保存の法則	13
第 3 章	空間平均化	15
3.1	体積平均値の定義	15
3.2	連続の式の平均化	16
3.3	平衡方程式の平均化	18
3.4	まとめ	23
第 4 章	構成方程式	25
4.1	構成方程式の原理	25
4.2	超弾性体	26
4.3	Euler 表示における固体変形の記述	28
4.4	粘性-超弾性体	28

4.4.1	Simo の粘弾性モデル	28
4.4.2	ひずみエネルギー関数	30
4.4.3	温度依存性の定式化	32
4.5	非圧縮性 Newton 流体	33
第 5 章	時間発展	34
5.1	SMAC 法	34
5.2	時間発展の安定条件	36
第 6 章	空間離散化	38
6.1	平衡方程式	38
6.1.1	仮想仕事の原理	39
6.1.2	有限要素法による空間離散化	40
6.1.3	選択型低減積分	43
6.1.4	陽解法による速度の算出	46
6.1.5	速度の移流	46
6.2	ポアソン方程式	49
6.3	速度修正式	53
6.4	構成方程式	54
6.4.1	固体：左 Cauchy-Green 変形テンソルの離散化	54
6.4.2	流体：ひずみ速度テンソルの離散化	57
第 7 章	界面不連続性のモデル化	59
7.1	不連続性のモデル化手法の概観	59
7.2	拡張有限要素法による速度場の拡充	60
7.3	ペナルティ法による接触条件の制御	62
7.4	表面力ベクトルの空間離散化	63
第 8 章	3次元 PLIC 法による界面捕捉	67
8.1	3次元 PLIC 法の概要	67
8.2	境界面の再構成	68
8.2.1	境界面セルの判定	68

8.2.2	線形近似された境界面の方程式	69
8.2.3	境界面の法線ベクトルの計算	70
8.2.4	距離定数の計算	72
8.2.5	境界面の場合分け	81
8.3	境界面の移流	85
8.3.1	移流方程式の離散化	85
8.3.2	体積フラックスの計算	86
第 9 章	数値解析例	87
9.1	一軸引張試験の 2 次元解析	87
9.1.1	数値解析モデル	87
9.1.2	引張速度を変えた場合の結果	90
9.1.3	粘着剤温度を変えた場合の結果	91
9.1.4	変形形状	92
9.2	鋼球衝突試験の 3 次元解析	95
9.2.1	鋼球衝突試験の概略	95
9.2.2	数値解析モデル	95
9.2.3	数値解析結果	97
9.3	平坦面における固体自重変形の 2 次元解析	99
9.3.1	数値解析モデル	99
9.3.2	数値解析結果	101
9.4	平坦面における固体自重変形の 3 次元解析	107
9.4.1	数値解析モデル	107
9.4.2	数値解析結果	107
9.5	凹凸面の包埋挙動の 2 次元解析	112
9.5.1	数値解析モデル	112
9.5.2	数値解析結果	114
第 10 章	結言	118
付 録 A	3 次元 PLIC 法の界面捕捉精度の検証	121
A.1	2D Zalesak's disk rotation	121

A.2	2D Shearing flow	122
A.3	3D Deformation field	123
A.4	3D Zalesak's sphere rotation	124
A.5	3D Shearing flow	125
A.6	3D Stanford bunny rotation	126
A.7	体積保存性	138
A.8	計算時間	138
A.9	まとめ	144
付録B	VOF 法による界面捕捉	145
B.1	VOF 法	145
B.2	2次精度風上差分法	146
B.2.1	TVD 条件	146
B.2.2	移流方程式の離散化	147
B.2.3	制限関数	147
	謝辞	151
	投稿論文・学会発表一覧	152
	参考文献	154

第1章 緒言

1.1 背景

近年、コンピュータ性能の飛躍的向上と計算力学の進歩によって、様々な力学現象の数値シミュレーションが可能となっており、造船・自動車・航空機・土木・建築など広範な分野において数値シミュレーションは重要な役割を果たしている。数値シミュレーションの産業的役割としてよく言及されるのは、実験代替や試作レスによる開発スピード向上とコスト削減である。実験や試作のコストの大きい自動車や航空機などの分野では、この役割は非常に大きいといえるが、数値シミュレーションの役割はそれだけにどどまらない。数値シミュレーションは、例えば応力分布や速度分布等のように観測困難な物理量や現象の可視化・定量化を可能にし、現象をより深く理解するための手段となる。また、製品購入者に対する製品の機能・品質の訴求手段として、数値シミュレーションが活用される場面も増えている。さらに、数値シミュレーションは現実には存在しない仮想的な物性や構造の評価も可能にするため、実験ベースの研究開発では到達しにくい構造や物性を持った製品の設計を可能にする。

このように広範な産業分野で数値シミュレーションが活用されている一方、高分子ゲル・粘着剤・Bステージ樹脂¹などの高分子材料の設計実務では数値シミュレーションが十分に活用されているとは言い難い。一般に、高分子ゲル・粘着剤・Bステージ樹脂などの高分子材料のヤング率は室温で概ね 10^5 Pa 以下であり、一般の固体材料と比べて極めて柔らかい。そのため、外力が作用すると一般の固体材料と比べて大変形や破断を生じやすく、公称ひずみで 1000% を超える変形を生じ得る。さらに、高分子材料であるゴムと比較した場合、これらの高分子材料は温度依存性と

¹Bステージ樹脂とは硬化反応の中間の段階にある樹脂を差し、柔らかいゲル状態の樹脂である。なお、Aステージ樹脂は硬化反応の開始前の液体状態の樹脂を意味し、Cステージ樹脂は完全に硬化した状態の樹脂を意味する。

粘性-超弾性が強いのが特徴である．以上のような幾何学的非線形性と材料非線形性の強さが，柔らかい高分子材料開発における数値シミュレーションの実施を困難にしてきた理由であると考えられる．しかし，他の産業分野と同様に，柔らかい高分子材料の製品開発においても数値シミュレーションによる設計支援が強く求められている．

1.2 固体の大変形問題に関する既往の研究

まず，固体の大変形や破断を伴う現象に対する数値シミュレーション手法に関する既往の研究について概観する．解析対象とする固体を巨視的に扱う場合，その物体は空間的に微分可能な連続体としてモデル化され，その力学的挙動は連続体力学に基づく偏微分方程式で記述される．固体の巨視的挙動を記述する偏微分方程式の離散化手法としては，Lagrange 型有限要素法が一般に用いられている．有限要素法の歴史を振り返れば，1943年に Courant[1]により発表された，節点三角形要素でねじり問題を解析した研究が有限要素法の数学的理論の端緒とされている．1953年には，Turnerら [2]によって直接剛性法 (Direct stiffness method) が提案され，これが工学分野における有限要素法の最初の研究と言われている．その後，有限要素法は構造力学分野で発展を遂げ，今日では熱流体解析や電磁場解析など幅広い工学分野に適用されるに至っている．その一方で，Lagrange 型有限要素法では解析が困難な問題も存在する．Lagrange 型有限要素法で固体の大変形や破断を取り扱う場合，変形が進むにつれて有限要素が歪むことで数値的健全性が失われ，それ以上の解析が不可能となる．有限要素の歪みによる数値的健全性の喪失を回避する代表的な方法としては，リメッシュを行う方法 [3]，ALE(arbitrary Lagrangian-Eulerian) 型有限要素法 [4][5]，Euler 型有限要素法 [13]，有限要素を用いないメッシュフリー/粒子法 [6]-[12] があげられる．

リメッシュとは有限要素を再生成する方法であり，Lagrange 型有限要素法に基づく商用シミュレーション・コードでは固体形状を領域に分割しメッシュを再生成することによりリメッシュを行う方法が用いられている [3]．ただし，その適用例の殆どは2次元問題であり，3次元の複雑な形状の物体に対してリメッシュを行うことは困難である．また，リメッシュを繰り返すことにより誤差が蓄積され，計算精度が低下する問題も生じる．一方，ALE(arbitrary Lagrangian-Eulerian) 型有限要素法は

リメッシュを動的に行う方法である。ただし、有限要素のトポロジー変化には対応できず、また有限要素は物体の境界形状に適合している必要があるため、上述の柔らかい高分子材料に観られるような非常に大きな変形を取り扱うことができない。

メッシュフリー/粒子法 [6]-[12] は、その名の通り有限要素 (メッシュ) を用いない離散化手法であり、連続体内部に離散的に配置された節点や粒子と呼ばれる評価点によって連続体を離散化し、それらの点を用いて各種の物理量を近似する。メッシュフリー/粒子法では有限要素の歪みによる数値的健全性の喪失をあらかじめ回避することができ、固体の大変形や破断を伴う問題や固体-流体連成問題への適用が試みられている。メッシュフリー/粒子法は、流体解析に関しては実現象を高精度に表現できる手法が確立されつつあるが、固体解析においては数値解の定量性に課題があるなどの理由で、現状では実務的解析を行えるまでには至っていない。

Euler 型有限要素法 [13] は空間固定の有限要素を用いる方法であり、任意の大変形や破断に対応できる手法である。これまでに、Euler 型有限要素法による弾塑性体の大変形解析手法 [13]-[18]、大変形を伴う超弾性体と流体の連成解析手法 [19] などの開発が行われてきた。また、有限要素法とは異なるアプローチとしては、Euler 型有限差分法による固体-流体連成解析手法 [20]-[24] が提案され、血流解析などに適用されている [25]。ただし、有限差分法に基礎を置く手法では、固体界面における力学的境界条件の取り扱いが困難である。そのため、本研究のように柔らかい高分子材料を主な解析対象とする場合は、力学的境界条件を仮想仕事式の導出過程で自然に取り込むことができる有限要素法が適している。従来の Euler 型有限要素法では、VOF (Volume-of-Fluid) 法 [26] などの界面捕捉法を用いて物体境界を陰的に表現してきたため、長時間積分においては物体境界面の数値拡散により界面捕捉の精度が低下してしまう問題があった。そのため急峻な物体形状への適用は難しく、急峻な境界面を持たない単純な形状の問題への適用にとどまっていた。そこで、著者らは 3 次元 PLIC 法 [38][39] により界面捕捉を行う方法を提案している [27][28]。3 次元 PLIC 法により物体境界面を陽に定義することで、物体境界面への境界条件の付与が可能となるとともに、界面捕捉精度が大幅に向上した。ただし、従来の Euler 型有限要素法の問題として、固体と固体の界面における滑りなどの不連続性を取り扱えないことがあげられる。従来の Euler 型有限要素法では、複数の固体材料を扱う場合にひとつの有限要素内に複数の固体材料が存在し得ることから、基礎方程式を空間平均化することで定義域内の速度場を C^0 連続な関数としている。すなわち、空

間平均化により単一の速度場で複数の固体材料を扱うことになるため、固体と固体の界面が固着して固体界面の滑りなどの不連続性をモデル化できない。この問題は、Euler 型有限要素法の実用的問題への適用を阻む要因となる場合がある。

1.3 高分子材料の構成則に関する既往の研究

次に、高分子材料の構成方程式に関する既往の研究について概観する。高分子材料の構成方程式については、タイヤ・伝動ベルト・生体材料など広範な産業分野で使用されているゴム材料を中心として、精力的な研究が行われてきた [29]。高分子材料一般に共通した特性として、前述のように、粘性・超弾性・温度依存性があげられる。粘性とは、より具体的に言えば、その固体の応力ひずみ関係がひずみ速度に影響を受けることを意味する。超弾性とは、連続体力学における概念である。高分子材料は、複雑に入り組んだ長い鎖状の分子構造を持ち、その鎖が伸びることによって数百%から数千%に達する大きなひずみが許容される。化学や材料科学の分野では、この性質はゴム弾性と呼ばれ、金属のように結晶構造からなる物質の結晶弾性と区別される。一方、連続体力学においてはゴム弾性は超弾性としてモデル化でき、超弾性はひずみエネルギー関数によって規定される。

既往の研究では、ゴム材料を中心として様々なひずみエネルギー関数が提案されている。代表的なひずみエネルギー関数としては、neo-Hooke モデル [30]、Mooney-Rivlin モデル [31]、Ogden モデル [32]、Arruda-Boyce モデル [33]、Gent モデル [34] などがあげられる。neo-Hooke モデル [30] は熱力学を基本としたガウス鎖分子理論から提案されたひずみエネルギー関数である。せん断弾性係数からひずみエネルギー関数を同定できるため、最も単純であり基礎的なモデルとして利用される。ただし、ガウス鎖分子理論から導出されているため、伸長比 1.3(公称ひずみ 30%) を超えると実在のゴムの挙動には合わなくなる。Mooney-Rivlin モデル [31] は、現象論的なモデルとして考案されたひずみエネルギー関数である。現象論的モデルとは、neo-Hooke モデルのように分子論的背景があるわけではなく、応力ひずみ曲線を幾何学的に高精度に表現することを主眼に置いているという意味である。Mooney-Rivlin モデルでは、単軸伸長で 400% を超えるひずみ領域での実在のゴムの応力の立ち上がり表現するのは困難である。また、Mooney-Rivlin モデルを基礎として、カーボンブラック等による補強の効果を追加したモデル等も考案されている [61]。Ogden モデルは、

Mooney-Rivlin モデルよりさらに高精度な現象論的モデルである。応力ひずみ曲線を幾何学的に高精度に表現することができるため、ゴム材料の数値シミュレーションで用いられることの多いモデルである。ただし、その材料パラメータの複雑さと物理的意味の不明瞭性は、設計実務においては活用しにくい場面もあると思われる。Arruda-Boyce モデル [33] は、ゴム材料の分子構造に着目して非ガウス鎖分子理論から考案されたひずみエネルギー関数である。8 個の分子鎖が連続体中の立方体を表現する仮説を採用しているため、8 鎖モデルとも呼ばれている。Gent モデル [34] は、Arruda-Boyce モデルと同様に、分子構造に着目して非ガウス鎖分子理論から考案されたひずみエネルギー関数である。Gent モデルは neo-Hooke モデルを拡張したひずみエネルギー関数とみなすことができ、Arruda-Boyce モデルと比べて関数形が単純で材料パラメータが少ない。

以上のように、ゴム材料を中心として様々なひずみエネルギー関数が提案されているが、本研究で対象とする高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料のように公称ひずみで 1000% を超える応力ひずみ関係の記述に適しており、なおかつ設計実務で活用しやすいひずみエネルギー関数は著者の知る限り見当たらない。さらに、既往のひずみエネルギー関数は Lagrange 表示を前提とした定式化となっており、物質点を追跡しない Euler 表示では物質点の位置ベクトルを用いることなく固体変形 (ひずみ) を記述する定式化が必要である。

1.4 本研究の目的と位置付け

以上の背景において、本研究では高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂等の柔らかい高分子材料の実用的な数値シミュレーションを可能にすることを目的とする。その目的を達成するには、以下の問題を解決する必要がある。

1. 従来の Lagrange 型有限要素法や Euler 型有限要素法では、高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料の特性である温度依存性と粘性-超弾性の定式化が行われていない。
2. 従来の Euler 型有限要素法で複数の固体材料を扱う場合、ひとつの有限要素内に複数の固体材料が存在し得ることから、基礎方程式を空間平均化することで定義域内の速度場を C^0 連続な関数とし、有限要素法による空間離散化を行っ

ている．しかし，空間平均化により単一の速度場で複数の固体材料を扱うことになるため，固体と固体の界面が固着して固体界面の滑りなどの不連続性をモデル化できず，実用的な数値シミュレーションの妨げになることがある．

そこで本研究では，上記の問題を解決するために，Euler 型拡張有限要素法による粘性-超弾性体の数値解析手法を提案する．次節で本研究の概要を述べる．

1.5 本研究の概要

第 2 章「連続の式と平衡方程式」では，基礎方程式である連続の式と平衡方程式を示す．高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料は，エラストマーを基礎として作成される高分子化合物であるが，本研究では連続体力学で記述される巨視的な系としてモデル化する．

第 3 章「空間平均化」では，従来の Euler 型有限要素法で複数の材料を扱う場合に用いられてきた基礎方程式の空間平均化を述べる同時に，この定式化では固体と固体の界面における滑り現象などの不連続性を取り扱えないことを説明する．

第 4 章「構成方程式」では，本研究で解析対象とする高分子材料の温度依存性と粘性-超弾性を記述する構成方程式を提案する．非圧縮性の仮定の下で，温度依存性は WLF 則により温度依存性を緩和時間に換算して定式化し，粘性-超弾性は Simo の粘性-超弾性モデルに新たなひずみエネルギー関数を導入することで定式化する．また，物質点を追跡しない記述方法である Euler 表示においては，左 Cauchy-Green 変形テンソルの時間発展式を導入することで Euler 表示の速度場から固体変形を記述できることを示す．

第 5 章「時間発展」では，SMAC 法による基礎方程式の時間発展について説明する．SMAC 法は一般に非圧縮性流体解析で用いられる時間発展法であるが，本研究で用いる基礎方程式は Euler 表示で記述されており，物質の非圧縮性が仮定されていることから SMAC 法を適用することができ，非圧縮条件により決定される圧力を効率的に求めることができる．

第6章「空間離散化」では、基礎方程式の空間離散化について述べる。動的陽解法による有限要素法を基本とし、移流方程式・ポアソン方程式・速度修正式の空間離散化には差分法を適用する。これにより系全体でのマトリクス演算を回避し、計算コストを小さくすると同時に並列化効率の高い手法にする。

第7章「界面不連続性のモデル化」では、固体界面の滑りなどの不連続性をモデル化するため、拡張有限要素法(X-FEM)により速度場の拡充を行い、3次元PLIC法により各有限要素で線形近似した異種材料界面の接触条件をペナルティ法で制御する手法を提案する。この手法により、Euler型解法の枠組みにおいて、異種材料界面の摩擦が無い滑り現象や摩擦がある滑り現象をモデル化できる。この手法は、従来のEuler型有限要素法との定式化を大幅に変更することなく異種材料界面の不連続性をモデル化できる利点がある。また、ペナルティ法により異種材料界面の表面力が規定されるため、ペナルティ係数を変化させるだけで表面力を容易に操作できるという利点もある。

第8章「3次元PLIC法による界面捕捉」では、高精度な界面捕捉法である3次元PLIC法について述べる。PLIC法は、物体界面が存在するメッシュ(有限要素)で界面を線形近似して再構築し、その物体がメッシュ境界を横切る立体の体積を計算することで高精度に移流計算を行う手法である。3次元PLIC法の計算は、(1)界面の法線ベクトルの計算、(2)境界面の再構築、(3)境界面の移流の3つ手順に分けることができる。法線ベクトルの計算では、注目する界面セルの周囲の体積率分布から計算する比較的簡単な方法を用いている。境界面の再構築では、従来のPLIC法で用いられることの多かった反復計算を必要とする計算コストの大きい手法でなく、より高速で高精度な直接計算法を用いている。境界面の移流では、アルゴリズムが簡便になる各座標軸方向の移流を別々に行う方法を用いている。

9章では、種々の数値解析例により、本研究の提案手法の妥当性を検証し、柔らかい高分子材料の設計実務における有効性を示す。9.1節では、アクリル系粘着剤の一軸引張試験の数値解析を行うことで、本研究で提案する温度依存性を考慮した粘性-超弾性体の定式化の妥当性を検証する。9.2節では、粘着剤や樹脂の衝撃吸収性能評価のために行われる鋼球衝突試験の数値解析を行うことで、本研究の提案手法

の実務的解析における有効性を示す。9.3 節では，固体平面上における粘性-超弾性体の自重変形解析を行い，異種材料界面における不連続性のモデル化の妥当性を 2 次元問題で検証する。9.4 節では，異種材料界面における不連続性のモデル化の妥当性を 3 次元問題で検証する。9.5 節では，異種材料界面の不連続モデルを用いて，B ステージ樹脂による凹凸面の包埋挙動の解析を行い，B ステージ樹脂の製品設計における有効性を示す。

第 10 章「結言」では，本研究で得られた知見を総括し，より産業的価値を生むために取り組むべき今後の課題について考察する。

第2章 連続の式と平衡方程式

本章では，はじめに連続体の運動の記述法である Lagrange 表示と Euler 表示について説明する．次いで，基礎方程式である連続の式と平衡方程式について述べる．高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料は，エラストマーに軟化剤，架橋剤，粘着付与剤などを付与して作成される高分子化合物であるが，本研究では連続体力学で記述される巨視的な系としてモデル化を行う．

2.1 連続体の運動の記述法

連続体の運動の記述法には，Lagrange 表示と Euler 表示がある．固体の運動には Lagrange 表示が，流体の運動には Euler 表示が一般に用いられている．以下でこれらの記述法及び物質時間導関数について説明する [46]-[52]．

2.1.1 Lagrange 表示と Euler 表示

Lagrange 表示は，連続体を構成する物質点の運動を追尾しながら，連続体内部に分布する物理量を記述する方法である．Lagrange 表示は物質表示とも呼ばれる．粒子の時間発展を追尾する理論形態を取る Newton 力学と同じように，連続体が物質点という粒子から構成されるという立場に立てば，その記述法の一つに物質点の時間発展を追尾する方法があると考えるのは自然である．ここで，連続体内部に分布する任意の物理量を Ψ を考える．ただし Ψ はスカラー値関数，ベクトル値関数，テンソル値関数のいずれかである．Lagrange 表示では，物理量 Ψ を物質点の初期の位置ベクトル X 及び時刻 t の関数として，次式のように表す．

$$\Psi = \Psi(X, t) \quad (2.1)$$

ここで，物質点の初期の位置ベクトル X を，連続体を構成する各々の物質点を区別するラベルとみなすことができる．つまり X を固定することはある 1 つの物質点に

着目することを意味し， X を変化させることはある物質点から別の物質点に着目点を変えることを意味する．よって， $\Psi(X, t)$ は時刻 t における物質点 X に付随する物理量を表している．

一方，Euler 表示は，連続体内部に分布する物理量を場の量¹として記述する方法である．Euler 表示は空間表示とも呼ばれる．Euler 表示では，物理量 Ψ を 3 次元空間内の位置ベクトル x と時刻 t の関数として，次式のように表す．

$$\Psi = \Psi(x, t) \quad (2.2)$$

すなわち， $\Psi(x, t)$ は時刻 t において 3 次元空間内の位置 x に存在する物理量を表している．時刻 t において位置 x に存在する物質点は，次の時刻 $t + \Delta t$ には別の位置に移動する．よって，同じ位置 x における次の時刻の物理量 $\Psi(x, t + \Delta t)$ は，位置 x に移動してきた別の物質点に付随する物理量の値になる．このように，Euler 表示では物質点の運動を追尾せず，電磁気学のように，連続体内部に分布する物理量を場の量として扱う．

前述したように，流体力学では Euler 表示が一般に用いられる．流体力学では，物質点の初期の位置ベクトル X は未知で，物質点を識別しないことが多い．したがって X を用いる Lagrange 表示は不便であるため，Euler 表示が一般に用いられる．一方，固体力学では Lagrange 表示が一般に用いられる．固体力学では，構成方程式で固体の変形（ひずみ）を評価する際，物質点の初期の位置ベクトル X が必要になる．そのため，固体力学では X を用いる Lagrange 表示により理論を構成することが多い．しかし，本研究では固体も Euler 表示により記述するため，固体の変形の評価に工夫が必要となる．そこで本研究では，4.3 節で詳述するように固体の変形を左 Cauchy-Green 変形テンソルの時間発展式により評価している．

2.1.2 物質時間導関数

連続体力学では，しばしば物理量の時間変化率に着目する．その着目する物理量は連続体を構成する物質点に付随している．したがって，物質点の運動を追尾しながら，物理量の時間変化を評価するのが自然である．このように，物質点に着目し

¹空間の各点に応じて，ある物理量がひとつ決まるとき，この対応を場と呼ぶ [53]．場は物理量のテンソル特性によってスカラー場，ベクトル場，テンソル場に分けられる．

で観察する時間変化率を物質時間導関数といい，この微分演算を D/Dt またはドット ($\dot{}$) で表す．この演算は，対象とする関数について，物質点 X を固定し時間 t で微分することを意味している．すなわち，Lagrange 表示の物理量 $\Psi(X, t)$ の物質時間導関数は次式で定義される．

$$\frac{D\Psi}{Dt} = \left. \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{X}, t) \right|_{\mathbf{X}} \quad (2.3)$$

一方，時刻 t における物質点 X の位置ベクトルを $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t) = (x_1(\mathbf{X}, t), x_2(\mathbf{X}, t), x_3(\mathbf{X}, t))$ とすれば，Euler 表示の物質時間導関数は次式で表せる．

$$\frac{D\Psi}{Dt} = \left. \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}(\mathbf{X}, t), t) \right|_{\mathbf{X}} \quad (2.4)$$

$$= \left. \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}(\mathbf{X}, t), t)}{\partial x_i} \frac{\partial x_i(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} + \left. \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}(\mathbf{X}, t), t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} \quad (2.5)$$

$$= \left. \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}(\mathbf{X}, t), t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} + v_i \left. \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}(\mathbf{X}, t), t)}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{X}} \quad (2.6)$$

ただし，式 (2.5)(2.6) では i について総和規約を適用しており，式 (2.6) の v_i は次式で定義しているように物質点 X の速度ベクトルを表している．

$$v_i = \left. \frac{\partial x_i(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} \quad (2.7)$$

式 (2.6) の右辺第 1 項は空間時間導関数と呼ばれ，3 次元空間に固定されたある点 \mathbf{x} における物理量 Ψ の時間変化率を表す．以上より，物質時間導関数と空間時間導関数について，一般に演算子の関係式

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad (2.8)$$

が成立することがわかる．なお， $\nabla = \partial/\partial x_i$ である．

2.2 保存則

物理学は保存則を基礎として構成されており，連続体力学においても保存則は重要な役割を果たす．連続体力学における保存則には，質量保存の法則，運動量保存の法則，角運動量保存の法則，エネルギー保存の法則がある．本節では，特に固体連成解析において基礎方程式として用いる，物質の不生不滅を表現する質量保存の法則と運動方程式に対応する運動量保存の法則について説明する [46]-[52][53]．

2.2.1 質量保存の法則

物質の質量 m は，質量密度を ρ ，物質の占める領域を v として，

$$m = \int_v \rho dv \quad (2.9)$$

により与えられる．質量保存の法則は，質量 m が時間に依存せず，変形後も一定，すなわち

$$\frac{Dm}{Dt} = 0 \quad (2.10)$$

が成立することを述べている． D/Dt は，物質時間導関数である．変形前の体積を dV ，変形後の体積を dv ，変形勾配テンソルを F とする．このとき，これらの間には，

$$dv = (\det F) dV \quad (2.11)$$

なる関係が成り立つ．ここで， $\det F$ は体積変化率を表し，

$$\det F \equiv J \quad (2.12)$$

とする．式 (2.11)，式 (2.12) より，式 (2.9) は

$$m = \int_v \rho J dV \quad (2.13)$$

と書き換えられる．これを式 (2.10) に代入すると，

$$\int_v \left(\frac{D\rho}{Dt} J + \rho \frac{DJ}{Dt} \right) dV = 0 \quad (2.14)$$

$$\int_v \left(\frac{D\rho}{Dt} J + J \rho \operatorname{tr} \mathbf{L} \right) dV = 0 \quad (2.15)$$

$$\int_v \left(\frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{tr} \mathbf{L} \right) J dV = 0 \quad (2.16)$$

$$\int_v \left(\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} \right) dv = 0 \quad (2.17)$$

となる．ただし， \mathbf{v} は物質点の速度ベクトルを表す．上式は物質の任意の部分についても成り立つことから，

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.18)$$

を得る．式 (2.18) は連続の式と呼ばれる．非圧縮性物質の場合，質量密度 ρ の物質時間導関数は零となることより，連続の式は次式になる．

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.19)$$

2.2.2 運動量保存の法則

物質に作用する力には，物体力 b と表面力 t がある．ただし， b は単位質量当たりの物体力， t は単位面積当たりの表面力とする．運動量保存の法則により，物質全体における物体力と表面力の和と運動量の物質時間導関数は次式のように等値される．

$$\frac{D}{Dt} \left(\int_v \rho \mathbf{v} dv \right) = \int_v \rho b dv + \int_s t ds \quad (2.20)$$

式 (2.20) において， $\int_v \rho \mathbf{v} dv$ は物質全体の運動量の物質時間導関数， $\int_v \rho b dv$ は物質全体における物体力の総和， $\int_s t ds$ は物質全体における表面力の総和を意味している．式 (2.20) は Euler の第 1 運動法則と呼ばれる．ここで，式 (2.20) の左辺は以下のように変形される．

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \left(\int_v \rho \mathbf{v} dv \right) &= \frac{D}{Dt} \left(\int_v \rho \mathbf{v} J dV \right) dV \\ &= \int_v \left(\frac{D\rho}{Dt} \mathbf{v} J + \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} J + \rho \mathbf{v} \frac{DJ}{Dt} \right) \\ &= \int_v \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} J dV + \int_v \left(\frac{D\rho}{Dt} \mathbf{v} J + \rho \mathbf{v} (\nabla \cdot \mathbf{v}) J \right) dV \\ &= \int_v \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} dv + \int_v \left(\frac{D\rho}{Dt} \mathbf{v} + \rho \mathbf{v} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \right) dv \\ &= \int_v \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} dv + \int_v \mathbf{v} \left(\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} \right) dv \\ &= \int_v \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} dv \end{aligned} \quad (2.21)$$

また，式 (2.20) の右辺第二項は以下のように変形される．

$$\begin{aligned} \int_s t ds &= \int_s \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \mathbf{n} ds \\ &= \int_v \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dv \end{aligned} \quad (2.22)$$

ここで， $\boldsymbol{\sigma}$ は Cauchy 応力， \mathbf{n} は任意面 s 上の外向単位法線ベクトルであり，Cauchy の公式と Gauss の発散定理を用いた．Cauchy の公式とは，任意面の表面力（応力ベクトル） t が，任意面の外向単位法線ベクトル \mathbf{n} の Cauchy 応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}$ による線形変換

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \mathbf{n} \quad (2.23)$$

により求められることを述べている．なお，角運動量保存の法則により，

$$\boldsymbol{\sigma}^T = \boldsymbol{\sigma} \quad (2.24)$$

なる関係式が成り立つことが要請される．つまり Cauchy 応力は対称テンソルである．

以上の式 (2.21)(2.22) より，Euler の第 1 運動法則 (2.20) は以下のように書き換えられる．

$$\int_v \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} dv = \int_v (\rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) dv \quad (2.25)$$

$$\int_v \rho \left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt} - \mathbf{b} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) dv = 0 \quad (2.26)$$

上式は物質の任意の部分についても成り立つことから，

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} \quad (2.27)$$

$$\rho \mathbf{a} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} \quad (2.28)$$

を得る．ここで， \mathbf{a} は物質点の加速度ベクトルである．式 (6.1) は，Cauchy の第 1 運動法則または平衡方程式と呼ばれる．

第3章 空間平均化

Euler 型有限要素法で複数の材料を取り扱う場合，ひとつの有限要素内に複数の材料が存在し得る．従来の Euler 型有限要素法では，本章で述べるように，連続の式と平衡方程式を空間的に平均化して統一し，単一の速度場を求めることで複数の材料を解析してきた．ただし，単一の連続的な速度場となるため，固体同士が固着するモデル化となる．固体と固体の界面における滑り現象などの界面の不連続性が生じない場合は，本章で述べる空間的に平均化した方程式を適用することができる．一方，固体と固体の界面における滑り現象などの不連続性を取り扱う場合は，7章で述べる定式化を適用する必要がある．

本章では，固体と固体の界面における滑り現象などの界面の不連続性が生じない場合に適用する空間平均化の定式化について述べる．混相流解析においては平均化方程式が頻繁に用いられている．平均化方程式を用いることによって各相は混合体として取り扱われ，各相の基礎方程式を弁別して解析する必要がなくなるためである．そこで，このような混相流の分野で培われてきた手法を活用し [55]，空間平均化の定式化を行う．

3.1 体積平均値の定義

3次元ユークリッド空間内の検査体積 ($x - \Delta x/2 \leq \bar{x} \leq x + \Delta x/2$, $y - \Delta y/2 \leq \bar{y} \leq y + \Delta y/2$, $z - \Delta z/2 \leq \bar{z} \leq z + \Delta z/2$) における，ある物理量 $\psi(x, y, z)$ の体積平均値を次式のように定義する．ただし， $\psi(x, y, z)$ はスカラー量，ベクトル量，テンソル量のいずれかであるとする．

$$\langle \psi \rangle (x, y, z) = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} \int_{y-\Delta y/2}^{y+\Delta y/2} \int_{z-\Delta z/2}^{z+\Delta z/2} \psi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) d\bar{x} d\bar{y} d\bar{z} \quad (3.1)$$

ここで，検査体積内の物質 i の存在する領域を Ω_i としたとき，

$$I_i(x, y, z) = \begin{cases} 1 & \text{if } (x, y, z) \in \Omega_i \\ 0 & \text{if } (x, y, z) \notin \Omega_i \end{cases} \quad (3.2)$$

なる指示関数を定義する．すなわち，この関数は検査体積内において物質 i が存在する領域では 1，存在しない領域では 0 の値をとる．この指示関数を用いれば，検査体積中の物質 i の体積率は次式になる．

$$\phi_i = \langle I_i \rangle \quad (3.3)$$

さらに，物質 i の存在する領域 Ω_i における $\psi(x, y, z)$ の体積平均値（相体積平均値）を次式のように定義する．

$$\bar{\psi}_i = \frac{\langle I_i \psi \rangle}{\phi_i} \quad (3.4)$$

以上で定義した体積平均値 $\langle \psi \rangle$ ，指示関数 I_i ，体積率 ϕ_i ，相体積平均値 $\bar{\psi}_i$ を用いて，以下で連続の式および平衡方程式の平均化を行う．

3.2 連続の式の平均化

検査体積中に n 個の物質領域が存在するとき， n 個の物質に対する連続の式は，指示関数 (3.2) を用いれば

$$\sum_{i=1}^n I_i \nabla \cdot \mathbf{v}_i = 0 \quad (3.5)$$

と表すことができる．ここで，

$$\nabla \cdot (I_i \mathbf{v}_i) = I_i \nabla \cdot \mathbf{v}_i + \mathbf{v}_i \cdot \nabla I_i \quad (3.6)$$

なる関係が成り立つことにより，式 (3.5) を次式のように変形する．

$$\nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \mathbf{v}_i \right) - \sum_{i=1}^n \mathbf{v}_i \cdot \nabla I_i = 0 \quad (3.7)$$

また，指示関数 I_i の物質時間導関数が零となることから，

$$\frac{DI_i}{Dt} = 0 \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial I_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla I_i = 0 \quad (3.9)$$

なる指示関数 I_i の移流方程式が成り立つ．式 (3.9) より，式 (3.7) は次式のように変形される．

$$\nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \mathbf{v}_i \right) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial I_i}{\partial t} = 0 \quad (3.10)$$

$$\nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \mathbf{v}_i \right) + \frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^n I_i = 0 \quad (3.11)$$

ここで，検査体積中では

$$\sum_{i=1}^n I_i = 1 \quad (3.12)$$

が成り立つことより，式 (3.11) は

$$\nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \mathbf{v}_i \right) = 0 \quad (3.13)$$

となる．式 (3.13) を検査体積において体積平均すれば，

$$\left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \mathbf{v}_i \right) \right\rangle = 0 \quad (3.14)$$

$$\nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \langle I_i \mathbf{v}_i \rangle \right) = 0 \quad (3.15)$$

$$\nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \bar{\mathbf{v}}_i \right) = 0 \quad (3.16)$$

となる．ここで，各物質の速度を体積率で平均した速度について

$$\mathbf{v}_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \bar{\mathbf{v}}_i \quad (3.17)$$

とおけば，

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_{\text{mix}} = 0 \quad (3.18)$$

となり，平均化された連続の式が得られる．

3.3 平衡方程式の平均化

検査体積中に n 個の物質領域が存在するとき， n 個の物質に対する平衡方程式は，指示関数 (3.2) を用いれば

$$\sum_{i=1}^n I_i \rho_i \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \sum_{i=1}^n I_i \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i + \left(\sum_{i=1}^n I_i \rho_i \right) \mathbf{b} \quad (3.19)$$

と表すことができる．平衡方程式 (3.19) を検査体積において平均化すれば，

$$\left\langle \sum_{i=1}^n I_i \rho_i \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^n I_i \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i \right\rangle + \left\langle \left(\sum_{i=1}^n I_i \rho_i \right) \mathbf{b} \right\rangle \quad (3.20)$$

となる．

< 物質時間微分項 >

まず，式 (3.20) の物質時間微分項について考える．物質時間微分項の物質 i についての体積平均値は以下のように表すことができる．

$$\begin{aligned} \left\langle I_i \rho_i \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} \right\rangle &= \left\langle I_i \rho_i \left(\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} + (\mathbf{v}_i \cdot \nabla) \mathbf{v}_i \right) \right\rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \langle I_i \rho_i \mathbf{v}_i \rangle + \nabla \cdot \langle I_i \rho_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i \rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i \bar{\mathbf{v}}_i) + \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \overline{\mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i}) \end{aligned} \quad (3.21)$$

式 (3.21) において，2 次の速度相関項 $\overline{\mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i}$ の代わりに，数値解析上の変数として取り扱う $\bar{\mathbf{v}}_i$ を用いて移流項を表せば，

$$\left\langle I_i \rho_i \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i \bar{\mathbf{v}}_i) + \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \bar{\mathbf{v}}_i \otimes \bar{\mathbf{v}}_i) - \nabla \cdot \phi_i \mathbf{T}_i^{Re} \quad (3.22)$$

となる．ここで， \mathbf{T}_i^{Re} は平均化の際に現れるレイノルズ応力であり，次式で定義している．ただし，このレイノルズ応力は乱流解析で一般的に用いられるものとは異なる．

$$\mathbf{T}_i^{Re} = -\rho_i (\overline{\mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i} - \bar{\mathbf{v}}_i \otimes \bar{\mathbf{v}}_i) \quad (3.23)$$

式 (3.22) より，各物質の物質時間微分項を足し合わせると次式を得る．

$$\left\langle \sum_{i=1}^n I_i \rho_i \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \bar{\mathbf{v}}_i \right) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \bar{\mathbf{v}}_i \otimes \bar{\mathbf{v}}_i \right) - \nabla \cdot \sum_{i=1}^n \phi_i \mathbf{T}_i^{Re} \quad (3.24)$$

ここで,

$$\rho_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \quad (3.25)$$

とおき, ρ_{mix} と \mathbf{v}_{mix} を用いれば, 式 (3.24) は次式のように表せる.

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{i=1}^n I_i \rho_i \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} \right\rangle &= \frac{\partial \rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}} \otimes \mathbf{v}_{\text{mix}}) \\ &\quad - \left[\frac{\partial (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \mathbf{T}_i^{\text{Re}} + \mathbf{T}'^M \right) \right] \end{aligned} \quad (3.26)$$

式 (3.26) において, \mathbf{v}'^M と \mathbf{T}'^M は混合化の際に現れる速度と応力であり, それぞれ以下のように定義している.

$$\mathbf{v}'^M = -\frac{1}{\rho_{\text{mix}}} \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \bar{\mathbf{v}}_i - \rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}} \right) \quad (3.27)$$

$$\mathbf{T}'^M = -\sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \bar{\mathbf{v}}_i \otimes \bar{\mathbf{v}}_i + \rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}} \otimes \mathbf{v}_{\text{mix}} \quad (3.28)$$

ここで, 物質 i の連続の式 $\nabla \cdot \mathbf{v}_i = 0$ が成り立つことにより, I_i の移流方程式 (3.9) を次式のように変形する.

$$\frac{\partial I_i}{\partial t} + \nabla \cdot (I_i \mathbf{v}_i) = 0 \quad (3.29)$$

式 (3.29) の両辺に ρ_i を乗じると

$$\rho_i \frac{\partial I_i}{\partial t} + \rho_i \nabla \cdot (I_i \mathbf{v}_i) = 0 \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial (\rho_i I_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i I_i \mathbf{v}_i) = 0 \quad (3.31)$$

と表せる. ただし, ρ_i は空間的に一様であること, 及び物質 i の非圧縮性を仮定しているため, ρ_i が空間と時間に対して一定であることを用いた. 式 (3.31) を体積平均すれば,

$$\left\langle \frac{\partial (\rho_i I_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i I_i \mathbf{v}_i) \right\rangle = 0 \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial (\rho_i \langle I_i \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \langle I_i \mathbf{v}_i \rangle) = 0 \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial (\rho_i \phi_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \phi_i \bar{\mathbf{v}}_i) = 0 \quad (3.34)$$

となる. 式 (3.34) について $i = 1$ から n までの和をとれば,

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^n (\rho_i \phi_i) + \nabla \cdot \sum_{i=1}^n (\rho_i \phi_i \bar{\mathbf{v}}_i) = 0 \quad (3.35)$$

となる．式 (3.25) で定義した ρ_{mix} , 式 (3.27) で定義した \mathbf{v}'^M を用いれば , 式 (3.35) は以下のように表される .

$$\frac{\partial \rho_{\text{mix}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}}) = \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M) \quad (3.36)$$

式 (3.36) を用いれば , 式 (3.26) は以下のように変形できる .

$$\begin{aligned} & \left\langle \sum_{i=1}^n I_i \rho_i \frac{D \mathbf{v}_i}{Dt} \right\rangle \\ &= \frac{\partial \rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}} \otimes \mathbf{v}_{\text{mix}}) \\ & \quad - \left[\frac{\partial (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \mathbf{T}_i^{\text{Re}} + \mathbf{T}'^M \right) \right] \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial \rho_{\text{mix}}}{\partial t} \mathbf{v}_{\text{mix}} + \rho_{\text{mix}} \frac{\partial \mathbf{v}_{\text{mix}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}}) \mathbf{v}_{\text{mix}} + (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}} \cdot \nabla) \mathbf{v}_{\text{mix}} \\ & \quad - \left[\frac{\partial (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \mathbf{T}_i^{\text{Re}} + \mathbf{T}'^M \right) \right] \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} &= \rho_{\text{mix}} \left(\frac{\partial \mathbf{v}_{\text{mix}}}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{mix}} \cdot \nabla) \mathbf{u}_{\text{mix}} \right) + \mathbf{v}_{\text{mix}} \left(\frac{\partial \rho_{\text{mix}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}_{\text{mix}}) \right) \\ & \quad - \left[\frac{\partial (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \mathbf{T}_i^{\text{Re}} + \mathbf{T}'^M \right) \right] \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} &= \rho_{\text{mix}} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_{\text{mix}}}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{mix}} \cdot \nabla) \mathbf{u}_{\text{mix}} \right) + \mathbf{v}_{\text{mix}} \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M) \\ & \quad - \left[\frac{\partial (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \mathbf{T}_i^{\text{Re}} + \mathbf{T}'^M \right) \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} &= \rho_{\text{mix}} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_{\text{mix}}}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{mix}} \cdot \nabla) \mathbf{u}_{\text{mix}} \right) \\ & \quad - \left[\frac{\partial (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M)}{\partial t} - \mathbf{v}_{\text{mix}} \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \mathbf{T}_i^{\text{Re}} + \mathbf{T}'^M \right) \right] \end{aligned} \quad (3.41)$$

ここで , 式 (3.41) の右辺第二項 (括弧 $[\dots]$ 内) は , 平衡方程式の体積平均操作により現れる項であるため , 数値解析上の空間解像度が高くすればこの項の影響は小さくなると考えられる . また , 式 (3.41) の右辺第二項は数値解析上 , 取り扱いが困難である . これらの理由により , 本研究では次式のように式 (3.41) の右辺第二項が零であると仮定する .

$$\left[\frac{\partial (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M)}{\partial t} - \mathbf{v}_{\text{mix}} \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \mathbf{T}_i^{\text{Re}} + \mathbf{T}'^M \right) \right] = 0 \quad (3.42)$$

この仮定の下では，式 (3.20) の物質時間微分項は，最終的に次式になる．

$$\left\langle \sum_{i=1}^n I_i \rho_i \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} \right\rangle = \rho_{\text{mix}} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_{\text{mix}}}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{mix}} \cdot \nabla) \mathbf{u}_{\text{mix}} \right) \quad (3.43)$$

< 応力項 >

次に，式 (3.20) の応力項について考える．

$$\nabla \cdot (I_i \boldsymbol{\sigma}_i) = I_i \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i + \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \nabla I_i \quad (3.44)$$

なる関係式が成り立つことにより，式 (3.20) の応力項は次式のように表せる．

$$\left\langle \sum_{i=1}^n I_i \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i \right\rangle = \left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \boldsymbol{\sigma}_i \right) - \sum_{i=1}^n \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \nabla I_i \right\rangle \quad (3.45)$$

$$= \left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \boldsymbol{\sigma}_i \right) - \sum_{i=1}^{n-1} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \nabla I_i - \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \nabla I_n \right\rangle \quad (3.46)$$

$$= \left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \boldsymbol{\sigma}_i \right) - \sum_{i=1}^{n-1} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \nabla I_i - \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \nabla \left(1 - \sum_{i=1}^{n-1} I_i \right) \right\rangle \quad (3.47)$$

$$= \left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \boldsymbol{\sigma}_i \right) - \sum_{i=1}^{n-1} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \nabla I_i + \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \nabla \sum_{i=1}^{n-1} I_i \right\rangle \quad (3.48)$$

$$= \left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \boldsymbol{\sigma}_i \right) - \sum_{i=1}^{n-1} (\boldsymbol{\sigma}_i - \boldsymbol{\sigma}_n) \cdot \nabla I_i \right\rangle \quad (3.49)$$

ここで，物質 i ($i = 1, \dots, n-1$) と物質 n の境界面における単位法線ベクトル \mathbf{n}_i は，物質 i の領域外の方を正とした場合，

$$\mathbf{n}_i = -\frac{\nabla I_i}{|\nabla I_i|} \quad (3.50)$$

で与えられることを考慮すれば，式 (3.49) は

$$\left\langle \sum_{i=1}^n I_i \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i \right\rangle = \left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \boldsymbol{\sigma}_i \right) - \sum_{i=1}^{n-1} (\boldsymbol{\sigma}_i - \boldsymbol{\sigma}_n) \cdot \nabla I_i \right\rangle \quad (3.51)$$

$$= \left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \boldsymbol{\sigma}_i \right) + \sum_{i=1}^{n-1} (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{n}_i - \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \mathbf{n}_i) |\nabla I_i| \right\rangle \quad (3.52)$$

となる．ここで，物質 i ($i = 1, \dots, n-1$) の表面力 \mathbf{t}_i ，物質 n の表面力 \mathbf{t}_n は Cauchy の公式により

$$\mathbf{t}_i = \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{n}_i \quad (3.53)$$

$$t_n = \sigma_n \cdot n_i \quad (3.54)$$

と表せることから，式 (3.52) は次式になる．

$$\left\langle \sum_{i=1}^n I_i \nabla \cdot \sigma_i \right\rangle = \left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \sigma_i \right) + \sum_{i=1}^{n-1} (t_i - t_n) |\nabla I_i| \right\rangle \quad (3.55)$$

式 (3.55) において，物質 i ($i = 1, \dots, n-1$) と物質 n が接触している場合，表面力は作用・反作用の法則により平衡しているため，次式が成り立つ．

$$t_i = t_n \quad (3.56)$$

他方，物質 i ($i = 1, \dots, n-1$) と物質 n が接触していない場合は表面力は作用しないため，次式が成り立つ．

$$t_i = t_n = 0 \quad (3.57)$$

したがって，式 (3.55) の右辺第二項は恒等的に零になるため，式 (3.55) は以下のようになる．

$$\left\langle \sum_{i=1}^n I_i \nabla \cdot \sigma_i \right\rangle = \left\langle \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n I_i \sigma_i \right) \right\rangle \quad (3.58)$$

$$= \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \bar{\sigma}_i \right) \quad (3.59)$$

ここで，各物質の応力を体積率で平均した応力について

$$\sigma_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \bar{\sigma}_i \quad (3.60)$$

とおけば，式 (3.20) の応力項は，最終的に次式になる．

$$\left\langle \sum_{i=1}^n I_i \nabla \cdot \sigma_i \right\rangle = \nabla \cdot \sigma_{\text{mix}} \quad (3.61)$$

< 体積力項 >

式 (3.20) の体積力項については，体積力 \mathbf{b} が検査体積内で一様であれば次式になる．

$$\left\langle \left(\sum_{i=1}^n I_i \rho_i \right) \mathbf{b} \right\rangle = \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \right) \mathbf{b} \quad (3.62)$$

$$= \rho_{\text{mix}} \mathbf{b} \quad (3.63)$$

< 平均化された平衡方程式 >

以上の式 (3.43)(3.61)(3.63) より, 検査体積において平均化された平衡方程式 (3.20) は次式になる .

$$\rho_{\text{mix}} \left(\frac{\partial \mathbf{v}_{\text{mix}}}{\partial t} + (\mathbf{v}_{\text{mix}} \cdot \nabla) \mathbf{v}_{\text{mix}} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{mix}} + \rho_{\text{mix}} \mathbf{b} \quad (3.64)$$

3.4 まとめ

以上, 検査体積で平均化された連続の式と平衡方程式の導出を説明した . 最後に, これらの平均化方程式と, 平均化方程式の導出の際に用いた仮定についてまとめる . 検査体積で平均化された連続の式と平衡方程式は次式である .

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_{\text{mix}} = 0 \quad (3.65)$$

$$\rho_{\text{mix}} \left(\frac{\partial \mathbf{v}_{\text{mix}}}{\partial t} + (\mathbf{v}_{\text{mix}} \cdot \nabla) \mathbf{v}_{\text{mix}} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{mix}} + \rho_{\text{mix}} \mathbf{b} \quad (3.66)$$

ここで, \mathbf{v}_{mix} , ρ_{mix} , $\boldsymbol{\sigma}_{\text{mix}}$ はそれぞれ以下のように定義される .

$$\mathbf{v}_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \bar{\mathbf{v}}_i \quad (3.67)$$

$$\rho_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \quad (3.68)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i \quad (3.69)$$

また, 体積平均化された平衡方程式の導出の際には, 次式のように体積平均化により現れる項を零と仮定した .

$$\left[\frac{\partial(\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M)}{\partial t} - \mathbf{v}_{\text{mix}} \nabla \cdot (\rho_{\text{mix}} \mathbf{v}'^M) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \phi_i \mathbf{T}_i^{\text{Re}} + \mathbf{T}'^M \right) \right] = 0 \quad (3.70)$$

なお, 平均化された連続の式は, 特別な仮定をおくことなく導出されている .

以上の平均化方程式を用いることにより, 各物質は混合体として扱われるため, 各物質の連成問題の取り扱いが容易になる . また, 各物質の連続の式と平衡方程式を弁別して解く必要がなくなり, 統一的に解析することが可能になる . ただし, 単一の連続的な速度場となるため, 固体同士が固着するモデル化となる . 固体と固体の

界面における滑り現象などの界面の不連続性が生じない場合は，本章で述べる空間的に平均化した方程式を適用することができる．一方，固体と固体の界面における滑り現象などの不連続性を取り扱う場合は，7章で述べる定式化を適用する必要がある．

第4章 構成方程式

本章では，構成方程式について説明する．本研究では，高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料を解析対象とする．このような物質は大変形下においてもほとんど体積が変化しないため，非圧縮性物質として取り扱われることが多い [56]-[58]．また，高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料は強い粘性-超弾性を示す．そこで本研究では，固体に対して非圧縮性を仮定し，粘性-超弾性体または粘性の無い超弾性体の構成方程式を用いる．また，高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料の解析では，周囲の流体との連成問題の解析が必要な場合もあり得る．そこで，流体に対しては非圧縮性 Newton 流体の構成方程式を用いる．本章では，まず構成方程式が満たすべき原理について説明し，超弾性体の一種である neo-Hooke 体の構成方程式，Simo の粘弾性モデル [60] に基づく粘性-超弾性体の構成方程式，非圧縮性 Newton 流体の構成方程式を説明する [46]-[54] [56]-[58]．

4.1 構成方程式の原理

2章で説明した保存則は，物質の性質に無関係かつ普遍的に成立する法則である．しかし，保存則から導かれる方程式だけでは方程式系は閉じず，連続体の運動を記述することはできない．この自由度がいろいろな物質が存在し得る余地を与える．物質の応力と変形の関係式である構成方程式を導入することで方程式系は閉じられ，連続体の運動が記述される．ただし，構成方程式は現実に存在する物質の数理モデルであるため，構成方程式を任意に与えることはできず，任意性は制限される．そこで Noll は構成方程式が満たすべき条件として次の 3 原理を提案した [59]．これらは経験則に基づいた物理的仮定である．

1. 応力決定の原理

この原理は，物質に生じる応力が未来の運動には依存せず，過去の全ての時間に対する物質全体の運動に依存することを述べている．

2. 局所作用の原理

この原理は，物質点 X の応力の決定において X の近傍の運動だけが関与し， X の近傍の外側の物質の運動は関与しないことを述べている．

3. 物質客観性の原理

この原理は，構成方程式は観測者によらず同一な方程式にならねばならないことを述べている．つまり，この原理は物質に剛体運動（並進移動・回転移動）を与えても物質固有の物理量は普遍であることを意味している．構成方程式が物質客観性の原理に矛盾しないためには，構成方程式の両辺とも客観性のあるテンソルを用いるか，観測不変テンソルを用いる必要がある．

4.2 超弾性体

本研究では粘性の無い固体に対しては，超弾性体の一種である非圧縮性 neo-Hooke 体の構成方程式を用いる．超弾性体とは，次式のように，変形やひずみの成分によって微分されることにより共役な応力成分を生じる弾性ポテンシャル関数 W が存在する物質である．

$$\mathbf{S} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{E}} \quad (4.1)$$

ここで， \mathbf{S} は第 2Piola-Kirchhoff 応力テンソル， \mathbf{E} は Green-Lagrange ひずみテンソルである． \mathbf{S} と \mathbf{E} は双方とも観測不変テンソルで， W は客観性のあるスカラーであることより，超弾性体の構成方程式 (4.1) は観測者によらず同一であり，物質客観性の原理を満たしている．本研究では，右 Cauchy-Green 変形テンソル \mathbf{C} ひいては左 Cauchy-Green 変形テンソル \mathbf{B} を用いて構成方程式 (4.1) の定式化を進めることにする．まず， $\mathbf{E} = (\mathbf{C} - \mathbf{I})/2$ であることより，式 (4.1) を次式のように変形する．

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} \quad (4.2)$$

一般に弾性ポテンシャル関数は，右 Cauchy-Green 変形テンソル \mathbf{C} の主不変量 I_C ， II_C ， III_C の関数として与えられることより，偏微分の連鎖律の公式を用いて，

$$\mathbf{S} = 2 \left(\frac{\partial W}{\partial I_C} \frac{\partial I_C}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial W}{\partial II_C} \frac{\partial II_C}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial W}{\partial III_C} \frac{\partial III_C}{\partial \mathbf{C}} \right) \quad (4.3)$$

と表すことができる． C の主不変量の C に関する偏微分がそれぞれ

$$\frac{\partial I_C}{\partial C} = I \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial II_C}{\partial C} = I_C I - C \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial III_C}{\partial C} = III_C C^{-1} \quad (4.6)$$

となることを用いれば，式 (4.3) は次式になる．

$$S = 2 \left\{ \left(\frac{\partial W}{\partial I_C} + \frac{\partial W}{\partial II_C} I_C \right) I - \frac{\partial W}{\partial II_C} C + \frac{\partial W}{\partial III_C} III_C C^{-1} \right\} \quad (4.7)$$

$\sigma = F \cdot S \cdot F^T / J$ 及び $I_C = I_B$, $II_C = II_B$, $III_C = III_B$ が成り立つことより，式 (4.7) は

$$\sigma = \frac{2}{J} \left\{ \frac{\partial W}{\partial III_B} III_B I + \left(\frac{\partial W}{\partial I_B} + \frac{\partial W}{\partial II_B} I_B \right) B - \frac{\partial W}{\partial II_B} B \cdot B \right\} \quad (4.8)$$

と表せる．式 (4.8) のように，超弾性体の構成方程式は Cauchy 応力 σ と左 Cauchy-Green 変形テンソル B を用いて表せる．以上の定式化は圧縮性超弾性体に対するものであり，非圧縮性が仮定されれば，式 (4.8) は次式のように修正される．すなわち，主不変量のうち $III_B = 1$ となることから，弾性ポテンシャル関数 W は I_B , II_B のみの関数となること，及び $J = 1$ を考慮して次のようになる．

$$\sigma = 2 \left(\frac{\partial W}{\partial I_B} + \frac{\partial W}{\partial II_B} I_B \right) B - 2 \frac{\partial W}{\partial II_B} B \cdot B - p I \quad (4.9)$$

ここで， p は不定圧力であり，応力の体積成分は物質点の運動の履歴からは定めることはできず，非圧縮性条件により決定される．このように，非圧縮性物質では等積変形のみが可能であり，応力決定の原理は制約を受ける．

本研究で取り扱う非圧縮性 neo-Hooke 体は，次式で定義される弾性ポテンシャル関数を持つ物質である．

$$W = c_1 (I_C - 3) \quad (4.10)$$

$$= c_1 (I_B - 3) \quad (4.11)$$

式 (4.11) において， c_1 は実験により定められる定数であり，微小変形時には Hooke 則のせん断弾性係数 G との間に $c_1 = G/2$ なる関係が成り立つ．非圧縮性 neo-Hooke 体の弾性ポテンシャル関数 (4.11) を非圧縮性超弾性体の構成方程式 (4.9) に代入することにより，非圧縮性 neo-Hooke 体の構成方程式は次式になる．

$$\sigma = GB - pI \quad (4.12)$$

4.3 Euler 表示における固体変形の記述

固体力学で一般に用いられる Lagrange 表示では，物質点の初期の位置ベクトル \mathbf{X} を用いて物質の変形を評価する．そのため，変形勾配テンソル \mathbf{F} ひいては左 Cauchy-Green 変形テンソル \mathbf{B} を容易に求めることができる．これに対して，本手法では Euler 表示により固体の変形を記述するため，変形勾配テンソルを直接的に求めることができない．よって，左 Cauchy-Green 変形テンソル \mathbf{B} の評価には工夫が必要となる．

そこで本研究では，次式に示すように左 Cauchy-Green 変形テンソル \mathbf{B} の定義式 $\mathbf{B} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T$ の両辺を物質時間微分することにより得られる時間発展式を導入する．

$$\frac{D\mathbf{B}}{Dt} = \frac{D(\mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T)}{Dt} \quad (4.13)$$

$$= \frac{D\mathbf{F}}{Dt} \cdot \mathbf{F}^T + \mathbf{F} \cdot \frac{D\mathbf{F}^T}{Dt} \quad (4.14)$$

$$= \mathbf{L} \cdot \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T + \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{L}^T \quad (4.15)$$

$$= \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}^T \quad (4.16)$$

ここで， \mathbf{L} は速度勾配テンソルである．さらに式 (4.16) を Euler 表示すれば，次式になる．

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{B} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}^T \quad (4.17)$$

本研究では，式 (4.17) により Euler 表示の左 Cauchy-Green 変形テンソル \mathbf{B} を時間発展させる．

4.4 粘性-超弾性体

4.4.1 Simo の粘弾性モデル

まず，Simo の粘弾性モデル [60] について説明する．Simo の粘弾性モデルは，Fig.4.1 に示す一般化 Maxwell モデルを有限変形理論に拡張したモデルで，スプリングは超弾性体，ダッシュポットは粘性流体を表す．一般化 Maxwell モデルは，ダッシュポットとスプリングを直列させた粘弾性ユニットとスプリングのみの弾性ユニットから構成され， m 個の粘弾性ユニットを並列させた力学モデルである．Simo の粘弾性モデルでは，次式のように Cauchy 応力テンソルを等積変化項と体積変化項に加算分

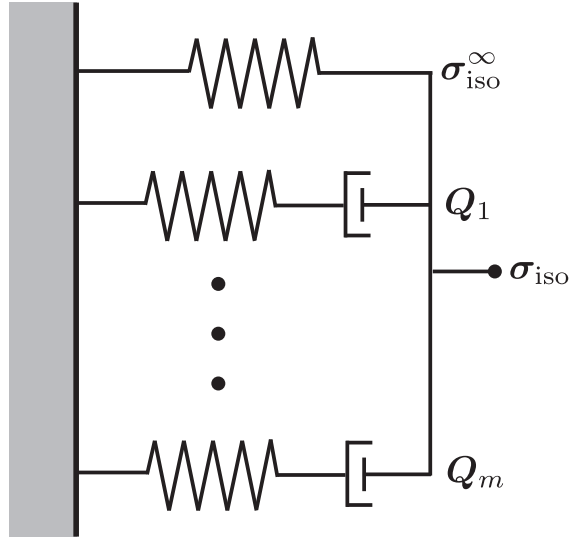


Fig. 4.1: Generalized Maxwell model

解して定式化を行う．

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{vol}} \quad (4.18)$$

ここで，下添え字 iso は等積変化項，下添え字 vol は体積変化項を意味する．体積変化項は非圧縮性条件から決定される圧力 p を用いて次式で表される．

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{vol}} = -p\mathbf{I} \quad (4.19)$$

一方，等積変化項 $\boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}}$ は一般化 Maxwell モデルにより次式のように定式化される．

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}} = \boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}}^\infty + \sum_{\alpha=1}^m \mathbf{Q}_\alpha \quad (4.20)$$

$$\frac{D\mathbf{Q}_\alpha}{Dt} = \frac{D\boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}\alpha}}{Dt} - \frac{\mathbf{Q}_\alpha}{\tau_\alpha} \quad (\alpha = 1, \dots, m) \quad (4.21)$$

ここで， $\boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}}^\infty$ は超弾性ユニットの Cauchy 応力テンソル， \mathbf{Q}_α は α 番目 ($\alpha = 1, \dots, m$) の粘弾性ユニットの Cauchy 応力テンソル， D/Dt は物質時間微分演算子， τ_α は緩和時間である．緩和時間 τ_α は粘着剤の温度によって変化する値であり，本研究では後述する時間-温度換算則により求められる．式 (4.21) を Euler 表示すれば，次式のように表せる．

$$\frac{\partial (\mathbf{Q}_\alpha - \boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}\alpha})}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{Q}_\alpha - \boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}\alpha}) = -\frac{\mathbf{Q}_\alpha}{\tau_\alpha} \quad (4.22)$$

ここで，各粘弾性ユニットにおけるスプリングの Cauchy 応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}\alpha}$ は Holzapfel の定式化 [47] に従い，

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}\alpha} = \beta_\alpha^\infty \boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}}^\infty \quad (4.23)$$

であると仮定する．ここで， $\beta_\alpha^\infty (\alpha = 1, \dots, m)$ は材料試験により定められるパラメータで， $\beta_\alpha^\infty \geq 0$ である．この仮定により，各スプリングの Cauchy 応力テンソルは同一のひずみエネルギー関数から求められる．

4.4.2 ひずみエネルギー関数

式 (4.20)(4.23) においてスプリングの Cauchy 応力テンソル $\sigma_{\text{iso}}^\infty$ は，ひずみエネルギー関数により求められる．これまで数多くのひずみエネルギー関数が提案されてきたが，本研究では実務的解析における活用のし易さの観点から山下-川端モデル [61] に着目する．実務的解析においては，関数形がシンプルで物理的意味が明瞭である方が材料設計に反映し易いからである．山下-川端モデルは，次式で与えられる．

$$\Psi_{\text{iso}}^\infty = c_1(\bar{I}_B - 3) + c_2(\bar{II}_B - 3) + \frac{c_3}{q+1}(\bar{I}_B - 3)^{q+1} \quad (4.24)$$

ここで， $c_1, c_2, c_3, q (> 0)$ は材料試験により定められるパラメータである． \bar{I}_B と \bar{II}_B は左 Cauchy-Green 変形テンソルの低減不変量であり，それぞれ次式で定義される．

$$\bar{I}_B = J^{-2/3} \text{tr} \mathbf{B} \quad (4.25)$$

$$\bar{II}_B = J^{-4/3} \{(\text{tr} \mathbf{B})^2 - \text{tr}(\mathbf{B}^2)\} . \quad (4.26)$$

山下-川端モデルは，カーボンブラック補強ゴム解析のために提案されたモデルである．式 (4.24) の右辺第 1 項と第 2 項は，線形的な弾性挙動を表し，右辺第 3 項はひずみ硬化挙動を表す．ただし，本研究で解析対象とする樹脂や粘着剤などの柔らかい高分子材料の応力ひずみ曲線は，カーボンブラック補強ゴムと比べてひずみ硬化挙動が大きく，非線形性が強い．そこで，本研究では山下-川端モデルに左 Cauchy-Green 変形テンソルの第 2 低減不変量 \bar{II}_B の高次項を付加した次式のひずみエネルギー関数を提案する．

$$\Psi_{\text{iso}}^\infty = c_1(\bar{I}_B - 3) + c_2(\bar{II}_B - 3) + \frac{c_3}{q+1}(\bar{I}_B - 3)^{q+1} + \frac{c_4}{r+1}(\bar{II}_B - 3)^{r+1} \quad (4.27)$$

ここで， $c_4, r (> 0)$ は材料試験により定められるパラメータである．式 (4.27) の右辺第 3 項と第 4 項によって，本研究で解析対象とする柔らかい高分子材料ひずみ硬化挙動のより定量的な再現が可能となる．式 (4.27) の有効性については，9 章の数値解析例において検証する．

次に，低減不変量を用いたひずみエネルギー関数 (4.24)(4.27) から，スプリングの Cauchy 応力テンソル $\sigma_{\text{iso}}^{\infty}$ を導く．スプリングの第 2Piola-Kirchhoff 応力 S_{iso}^{∞} は次式で与えられる．

$$S_{\text{iso}}^{\infty} = 2 \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial C} \quad (4.28)$$

$$S_{\text{iso}}^{\infty} = 2 \left(\frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{I}_C} \frac{\partial \bar{I}_C}{\partial C} + \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_C} \frac{\partial \bar{II}_C}{\partial C} \right) \quad (4.29)$$

ここで， \bar{I}_C と \bar{II}_C は右 Cauchy-Green 変形テンソル C の低減不変量であり，それぞれ次式のような関係にある．

$$\bar{I}_C = \bar{I}_B \quad (4.30)$$

$$\bar{II}_C = \bar{II}_B \quad (4.31)$$

また，低減不変量の C による偏微分は，それぞれ以下のようになる [47]．

$$\frac{\partial \bar{I}_C}{\partial C} = J^{-2/3} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{3} I_C C^{-1} \right) \quad (4.32)$$

$$\frac{\partial \bar{II}_C}{\partial C} = J^{-4/3} \left(I_C \mathbf{I} - \frac{2}{3} II_C C^{-1} - C \right) \quad (4.33)$$

式 (4.32)(4.33) より超弾性構成方程式 (4.29) は以下のように変形される．

$$\begin{aligned} S_{\text{iso}}^{\infty} &= 2J^{-2/3} \left(\frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{I}_C} + \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_C} J^{-2/3} I_C \right) \mathbf{I} \\ &\quad + 2J^{-2/3} \left(\frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_C} J^{-2/3} \right) C \\ &\quad - \frac{2}{3} J^{-2/3} \left(I_C \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{I}_C} + 2II_C \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_C} J^{-2/3} \right) C^{-1} \end{aligned} \quad (4.34)$$

式 (4.34) において固体の変形は右 Cauchy-Green 変形テンソル C で表わされているが，本研究では左 Cauchy-Green 変形テンソル B により固体変形を記述する．そこで，変形勾配テンソル F と第 2Piola-Kirchhoff 応力 S_{iso}^{∞} が

$$\sigma_{\text{iso}}^{\infty} = J^{-1} F \cdot S_{\text{iso}}^{\infty} F^T \quad (4.35)$$

となる関係を用いて，超弾性構成方程式 (4.34) を次式のように書き換える．

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{iso}}^{\infty} &= 2J^{-5/3} \left(\frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{I}_B} + \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_B} J^{-2/3} I_B \right) B \\ &\quad + 2J^{-5/3} \left(\frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_B} J^{-2/3} \right) B \cdot B \end{aligned}$$

$$-\frac{2}{3}J^{-5/3} \left(I_B \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{I}_B} + 2II_B \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_B} J^{-2/3} \right) \mathbf{I} \quad (4.36)$$

超弾性構成方程式 (4.36) は，低減不変量 (4.25)(4.26) および修正左 Cauchy-Green 変形テンソル $\bar{\mathbf{B}}$

$$\bar{\mathbf{B}} = J^{-2/3} \mathbf{B} \quad (4.37)$$

を用いて整理すれば，最終的に次式のように表せる．

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{iso}}^{\infty} = \frac{2}{J} \left\{ \left(\frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{I}_B} + \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_B} \bar{I}_B \right) \bar{\mathbf{B}} + \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_B} \bar{\mathbf{B}} \cdot \bar{\mathbf{B}} - \frac{1}{3} \left(\bar{I}_B \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{I}_B} + 2\bar{II}_B \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}^{\infty}}{\partial \bar{II}_B} \right) \mathbf{I} \right\} \quad (4.38)$$

4.4.3 温度依存性の定式化

本研究で解析対象とする樹脂や粘着剤などの柔らかい高分子材料の粘性-超弾性挙動は，一般に温度依存性が強い．温度依存性を表現するため，本研究では柔らかい高分子材料を熱レオロジー的に単純な物質であると仮定し，時間-温度換算則を用いる．時間-温度換算則は，その物質が熱レオロジー的に単純であるならば，その物質の温度変化は緩和時間の変化に等しいことを述べている [62]．実測温度 θ における緩和時間 τ と基準温度 θ_r における緩和時間 τ' を関係づけるため，温度-時間換算因子 $a(\theta)$ が次式で定義される．

$$\tau = a(\theta)\tau' \quad (4.39)$$

これまでに，温度-時間換算因子について様々な関数形が提案されてきた．高分子材料に対しては，Arrhenius 則 [63] または WLF 則 [64] が頻繁に用いられてきた．解析対象とする樹脂や粘着剤などの柔らかい高分子材料のようなガラス転移温度以上のエラストマーについては， $a(\theta)$ は WLF 則に従うことが知られている．WLF 則は次式で与えられる．

$$\log_{10} a(\theta) = \frac{-d_1(\theta - \theta_r)}{d_2 + \theta - \theta_r} \quad (4.40)$$

ここで， $d_1[-]$ と $d_2[^\circ\text{C}]$ は材料定数である．なお，本研究では粘着剤は変形過程で温度は一定，すなわち自己発熱の影響は無視できると仮定する．

4.5 非圧縮性 Newton 流体

本研究では、水などの液体や音速に比べて流速が小さい気体を取り扱う。よって、流体については非圧縮性 Newton 流体の構成方程式を用いる。Newton 流体とは、せん断応力がせん断変形に比例するという法則にしたがう流体であり、構成方程式は次式で与えられる。

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\boldsymbol{D} + \left\{ -p + \left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \text{tr}\boldsymbol{D} \right\} \boldsymbol{I} \quad (4.41)$$

ここで、 μ は粘性係数、 \boldsymbol{D} は変形速度テンソル、 p は流体の圧力、 κ は体積粘性率である。非圧縮性物質の場合、 $\text{tr}\boldsymbol{D} = 0$ が成り立つことにより、構成方程式は以下のようになる。

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\boldsymbol{D} - p\boldsymbol{I} \quad (4.42)$$

ここで、圧力 p は非圧縮性 neo-Hooke 体と同様に不定であり、6 章で説明するように非圧縮条件により圧力 Poisson 方程式を導入して求める。

第5章 時間発展

本章では，SMAC 法による基礎方程式の時間発展について説明する．SMAC 法 [78] は一般には非圧縮性流体解析に用いられているが，本研究では物質の非圧縮性を仮定した Euler 表示の方程式を用いるために SMAC 法を適用することができる．固体と固体の界面の不連続性が生じない場合は，3 章で述べた各材料の方程式を統一した平均化方程式 (3.65)(3.66) を用いる．一方，固体と固体の界面の不連続性が生じない場合は，7 章で述べるように材料ごとに連続の式と運動方程式を解く．

5.1 SMAC 法

SMAC 法を適用するにあたり，応力項を偏差成分と体積成分に分離した平衡方程式及び体積平均した連続の式を再掲する．

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}' - \nabla p + \rho \mathbf{b} \quad (5.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (5.2)$$

ここで式 (5.1) を時間方向に前進差分近似することにより次式が得られる．

$$\rho \left(\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} + (\mathbf{v}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}^n \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n - \nabla p^{n+1} + \rho \mathbf{b}^n \quad (5.3)$$

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + \Delta t \left\{ \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n - \nabla p^{n+1}) + \mathbf{b}^n - (\mathbf{v}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}^n \right\} \quad (5.4)$$

ここで，圧力については未知であることを考慮して時刻を $n+1$ としている．連続の式 (5.2) については，次式のように時刻 $n+1$ において満足させる．

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \quad (5.5)$$

ここで， $n+1$ 時刻の圧力を，以下のように n 時刻の圧力と圧力修正量に分解して考える．

$$p^{n+1} = p^n + \delta p \quad (5.6)$$

ここで， δp は圧力の時間変化に対応する修正量である．式 (5.6) を用いれば，平衡方程式 (5.4) は以下のように分割することができる．

$$\mathbf{v}^P = \mathbf{v}^n + \Delta t \left\{ \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n - \nabla p^n) + \mathbf{b}^n - \mathbf{v}^n \cdot (\mathbf{v}^n \otimes \nabla) \right\} \quad (5.7)$$

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^P - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \delta p \quad (5.8)$$

ここで， \mathbf{v}^P は中間速度であり， $n+1$ 時刻の速度の予測となっている．式 (5.8) に対して， ∇ を内積すれば次式が得られる．

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{v}^P - \nabla \cdot \left(\frac{\Delta t}{\rho} \nabla \delta p \right) \quad (5.9)$$

式 (5.9) において，連続の式 (5.5) により左辺は零となることから，結果的に以下の圧力修正量に関する Poisson 方程式を得る．

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \delta p \right) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^P \quad (5.10)$$

以下に，SMAC 法による計算の流れをまとめる．以下の手順を時間ステップ毎に計算し，各時刻の速度 \mathbf{v} ，圧力 p ，偏差応力 $\boldsymbol{\sigma}'$ を求めていく．

1. 式 (5.7) より中間速度を計算する．

$$\mathbf{v}^P = \mathbf{v}^n + \Delta t \left\{ \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n - \nabla p^n) + \mathbf{b}^n - (\mathbf{v}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}^n \right\} \quad (5.11)$$

中間速度を算出する際，平衡方程式 (5.11) を以下のように分割し，まず Lagrange 表示の中間速度 \mathbf{v}^* を求めた後，速度を移流させて Euler 表示の中間速度 \mathbf{v}^P を求める．

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{v}^n + \Delta t \left\{ \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n - \nabla p^n) + \mathbf{b}^n \right\} \quad (5.12)$$

$$\mathbf{v}^P = \mathbf{v}^* - \Delta t (\mathbf{v}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}^n \quad (5.13)$$

ここで，式 (5.12) を以下のように表しておく．

$$\rho \frac{\mathbf{v}^* - \mathbf{v}^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n + \rho \mathbf{b}^n \quad (5.14)$$

$$\rho \mathbf{a}_L = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} \quad (5.15)$$

式 (5.15) において， \mathbf{a}_L は Lagrange 表示の中間的な加速度を表している．

2. 式 (5.10) の Poisson 方程式より圧力修正量を計算し，圧力 p^{n+1} を求める．

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \delta p \right) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \boldsymbol{v}^P \quad (5.16)$$

$$p^{n+1} = p^n + \delta p \quad (5.17)$$

3. 式 (5.8) より，求めた圧力修正量 δp を用いて連続の式を満たす $n+1$ 時刻での速度を求める．

$$\boldsymbol{v}^{n+1} = \boldsymbol{v}^P - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \delta p \quad (5.18)$$

4. 構成方程式より，各物質の偏差応力を求め， $\boldsymbol{\sigma}^{m+1}$ を計算する．

$$\boldsymbol{\sigma}^{m+1} = \sum_i^n \phi_i^{n+1} \boldsymbol{\sigma}_i^{m+1} \quad (5.19)$$

5.2 時間発展の安定条件

本手法では，陽解法により基礎方程式の時間発展を計算する．そのため，時間発展の安定条件として CFL 条件を課すことが必要となる [79]．CFL 条件は，ある物理量の伝播距離が時間ステップ Δt 内で要素幅を超えないという条件である．この条件を満たすとき，安定でかつ意味のある解を得ることができる．この CFL 条件を式で表すと以下ようになる．

$$\Delta t < \frac{L_{\min}}{c} \quad (5.20)$$

ここで， L_{\min} は要素幅の最小値であり， c は物理量の伝播速度である．通常，物理量の伝播速度としては以下のように，固体解析は応力波の伝播速度，そして流体解析は流速の最大値を用いる．

$$c = \begin{cases} \sqrt{\frac{E}{\rho_s}} & (\text{for solid}) \\ \boldsymbol{v}_{f,\max} & (\text{for fluid}) \end{cases} \quad (5.21)$$

ここで， E はヤング率である．ただし，neo-Hooke 体の場合はせん断弾性係数 G のみを与えられるため，以下の関係から算出している．

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (5.22)$$

ここで、 ν はポアソン比であるが、本研究では非圧縮性を仮定しているため $\nu = 0.5$ である。

本手法では、複数の固体や流体を統一的に解いており、速度は複数の物質間で共通化されている。したがって、 Δt は以下の式により与えている。

$$\Delta t = C_u \frac{L_{\min}}{\max(c_s, \mathbf{v}_{\max})} \quad (5.23)$$

ここで、 c_s は固体の応力波の伝播速度、 C_u はクーラン数と呼ばれ、 Δt に対して更に余裕を持たせるために用いる。

第6章 空間離散化

本章では，基礎方程式の空間離散化について説明する．空間離散化には，有限要素法と差分法を用いている．平衡方程式の空間離散化には，有限要素法を用いている．有限要素法を用いることにより，力学的境界条件及び幾何学的境界条件を取り扱いやすくなる．移流方程式，ポアソン方程式，速度修正式の離散化には差分法を用いている．

6.1 平衡方程式

本節では，前章で説明した Lagrange 表示の平衡方程式 (5.15) の空間離散化を説明する．3次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^3 内において，ある物質が占める領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ を考える．Fig.6.1 に示すように，領域 Ω の境界 $\Gamma = \partial\Omega$ の一部分 $\Gamma_t \subset \Gamma$ において表面力が与えられているものとする．また，境界の一部 $\Gamma_u \subset \Gamma$ において幾何学的境界条件が課せられているものとする．

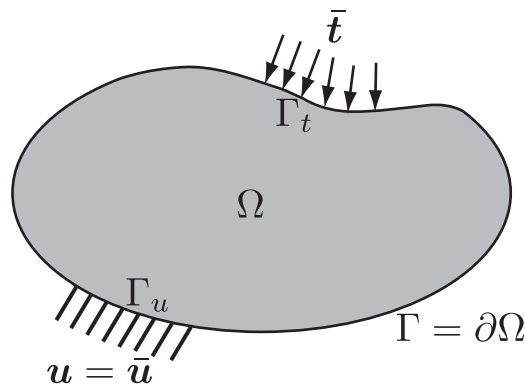


Fig. 6.1: Domain and boundary of material

このとき，Lagrange 表示の平衡方程式，力学的境界条件，幾何学的境界条件はそれぞれ以下のように表される．

$$\rho \mathbf{a}_L = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \bar{\mathbf{b}} \quad (6.1)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{t}} \quad \text{on } \Gamma_t \quad (6.2)$$

$$\boldsymbol{u} = \bar{\boldsymbol{u}} \quad \text{on } \Gamma_u \quad (6.3)$$

ここで、 \boldsymbol{n} は境界上で定義される外向き単位法線ベクトルである。また、 $\bar{\boldsymbol{b}}$ 、 $\bar{\boldsymbol{t}}$ 、 $\bar{\boldsymbol{u}}$ はそれぞれ、既知の情報として与えられる物体力ベクトル、表面力ベクトル、変位拘束ベクトルである。

ただし、領域境界 Γ_t と Γ_u は互いに重なりを持たず、

$$\Gamma_t \cap \Gamma_u = \emptyset \quad \text{かつ} \quad \Gamma = \Gamma_t \cup \Gamma_u \quad (6.4)$$

が成り立つことを仮定する。なお、 \cap は積集合、 \emptyset は空集合、 \cup は和集合を表す数学記号である。

6.1.1 仮想仕事の原理

次に、平衡方程式から仮想仕事式を導く。平衡方程式 (6.1) の両辺に任意の仮想変位 $\delta \boldsymbol{u}$ を内積する。

$$\rho \boldsymbol{a}_L \cdot \delta \boldsymbol{u} = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \delta \boldsymbol{u} + \rho \boldsymbol{b} \cdot \delta \boldsymbol{u} \quad (6.5)$$

ここで、

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{u}) = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \delta \boldsymbol{u} + \boldsymbol{\sigma} : (\delta \boldsymbol{u} \otimes \nabla) \quad (6.6)$$

なる関係が成り立つことを利用すると、式 (6.5) は以下のように変形される。

$$\rho \boldsymbol{a}_L \cdot \delta \boldsymbol{u} = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\sigma} : (\delta \boldsymbol{u} \otimes \nabla) + \rho \boldsymbol{b} \cdot \delta \boldsymbol{u} \quad (6.7)$$

$$\rho \boldsymbol{a}_L \cdot \delta \boldsymbol{u} + \boldsymbol{\sigma} : (\delta \boldsymbol{u} \otimes \nabla) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{u}) + \rho \boldsymbol{b} \cdot \delta \boldsymbol{u} \quad (6.8)$$

上式を領域 Ω で積分する。

$$\int_{\Omega} \rho \boldsymbol{a}_L \cdot \delta \boldsymbol{u} dV + \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : (\delta \boldsymbol{u} \otimes \nabla) dV = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{u}) dV + \int_{\Omega} \rho \boldsymbol{b} \cdot \delta \boldsymbol{u} dV \quad (6.9)$$

ここで、右辺第一項に対して Gauss の発散定理を適用し、力学的境界条件 (6.2) により、

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{u}) dV &= \int_{\Gamma} \boldsymbol{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{u}) dS \\ &= \int_{\Gamma_t} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \delta \boldsymbol{u} dS \end{aligned} \quad (6.10)$$

となる．式 (6.10) を式 (6.9) に代入することにより，以下の式を得る．

$$\int_{\Omega} \rho \mathbf{a}_L \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_v \boldsymbol{\sigma} : (\delta \mathbf{u} \otimes \nabla) dV = \int_{\Gamma_t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_{\Omega} \rho \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} dV \quad (6.11)$$

式 (6.11) は仮想仕事式と呼ばれる．

ここで仮想仕事式の物理的な意味を説明するために，左辺第一項を右辺に移項する．

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : (\delta \mathbf{u} \otimes \nabla) dV = \int_{\Gamma_t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_{\Omega} \rho \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_v \rho \mathbf{a}_L \cdot \delta \mathbf{u} dV \quad (6.12)$$

d'Alembert の原理によれば，物質点の運動による慣性力は外力として物体力に含めることができる．したがって，上式の右辺は外力がなす外部仮想仕事を意味しており，一方，左辺はそれらの外力と平衡している応力場がなす内部仮想仕事を意味していることになる．このように，外力がなす外部仮想仕事と，それら外力と平衡する応力場がなす内部仮想仕事に等しいという命題を仮想仕事の原理という．

6.1.2 有限要素法による空間離散化

仮想仕事式 (6.11) に対して，有限要素法により空間離散化を施す．いま，領域 Ω を N_{el} 個の小領域 Ω_e に分割することを考える．この小領域 Ω_e は有限要素と呼ばれる．このとき，各要素領域 Ω_e は次の関係を満たすものとする．

$$\Omega = \bigcup_{e=1}^{N_{el}} \Omega_e \quad \text{かつ} \quad \Omega_{e_1} \cap \Omega_{e_2} = \emptyset \quad (e_1 \neq e_2) \quad (6.13)$$

式 (6.13) に基づく分割は，領域 Ω を隙間や重なりがなく，要素で埋め尽くされるような分割を意味する．各有限要素領域 Ω_e においても仮想仕事式 (6.12) は成り立つため，仮想仕事式 (6.12) を以下のように表すことができる．

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^{N_{el}} \int_{\Omega_e} \rho \mathbf{a}_L \cdot \delta \mathbf{u} dV_e + \sum_{e=1}^{N_{el}} \int_{\Omega_e} \boldsymbol{\sigma} : (\delta \mathbf{u} \otimes \nabla) dV_e + \\ & = \sum_{e=1}^{N_{el}} \int_{\Gamma_{te}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} dS_e + \sum_{e=1}^{N_{el}} \int_{\Omega_e} \rho \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} dV_e \end{aligned} \quad (6.14)$$

式 (6.14) における加速度 \mathbf{a}_L ，仮想変位 $\delta \mathbf{u}$ をそれぞれ，各要素の節点値 $\hat{\mathbf{a}}_L$ ， $\delta \hat{\mathbf{u}}$ により以下のように近似する．

$$\mathbf{a}_L \simeq N \hat{\mathbf{a}}_L \quad (6.15)$$

$$\delta \mathbf{u} \simeq \mathbf{N} \delta \hat{\mathbf{u}} \quad (6.16)$$

ここで、 \mathbf{N} は重み関数から構成される形状関数マトリクスである。本研究では、有限要素として Fig.6.2 に示す 3次元8節点アイソパラメトリック要素を用いる [79][81]。このとき、節点加速度 $\hat{\mathbf{a}}_L$ 、節点仮想変位 $\delta \hat{\mathbf{u}}$ は以下のように定義される。

$$\hat{\mathbf{a}}_L = \left[a_{x1} \ a_{y1} \ a_{z1} \ a_{x2} \ a_{y2} \ a_{z2} \ \dots \ a_{x8} \ a_{y8} \ a_{z8} \right]^T \quad (6.17)$$

$$\delta \hat{\mathbf{u}} = \left[\delta u_{x1} \ \delta u_{y1} \ \delta u_{z1} \ \delta u_{x2} \ \delta u_{y2} \ \delta u_{z2} \ \dots \ \delta u_{x8} \ \delta u_{y8} \ \delta u_{z8} \right]^T \quad (6.18)$$

また、形状関数マトリクスは \mathbf{N} は以下のように定義される。

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & \dots & N_8 & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & \dots & 0 & N_8 & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & \dots & 0 & 0 & N_8 \end{bmatrix} \quad (6.19)$$

さらに、各節点の重み関数は以下のように定義される。

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)(1-\zeta) \\ N_2 &= \frac{1}{8}(1+\xi)(1-\eta)(1-\zeta) \\ N_3 &= \frac{1}{8}(1+\xi)(1+\eta)(1-\zeta) \\ N_4 &= \frac{1}{8}(1-\xi)(1+\eta)(1-\zeta) \\ N_5 &= \frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)(1+\zeta) \\ N_6 &= \frac{1}{8}(1+\xi)(1-\eta)(1+\zeta) \\ N_7 &= \frac{1}{8}(1+\xi)(1+\eta)(1+\zeta) \\ N_8 &= \frac{1}{8}(1-\xi)(1+\eta)(1+\zeta) \end{aligned} \quad (6.20)$$

式 (6.20) において、 (ξ, η, ζ) は要素ごとに定義された局所座標系であり、要素領域を

$$\left\{ (\xi, \eta, \zeta) \mid -1 \leq \xi \leq 1, \ -1 \leq \eta \leq 1, \ -1 \leq \zeta \leq 1 \right\} \quad (6.21)$$

とする。また、式 (6.17)(6.18) (6.19) (6.20) において、右下添え字の 1~8 は、Fig.6.2 に示すアイソパラメトリック要素の節点番号である。

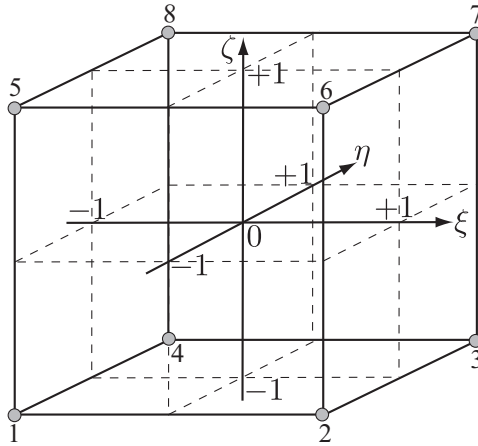


Fig. 6.2: 3D 8-node isoparametric element

次に，各要素領域の和で表された仮想仕事式 (6.14) に，式 (6.15)(6.16) を代入することにより，以下の式を得る．

$$\mathbf{M}\hat{\mathbf{a}}_L + \mathbf{F}_{\text{int}} = \mathbf{F}_{\text{ext}} \quad (6.22)$$

ここで， M は質量マトリクス， F_{int} は内力マトリクス， F_{ext} は外力マトリクスであり，それぞれ以下の式で与えられる．

$$\mathbf{M} = \sum_{e=1}^{N_{\text{el}}} \rho \int_{\Omega_e} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dV_e \quad (6.23)$$

$$\mathbf{F}_{\text{int}} = \sum_{e=1}^{N_{\text{el}}} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_L^T \boldsymbol{\sigma} dV_e \quad (6.24)$$

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = \sum_{e=1}^{N_t} \int_{\Gamma_t} \mathbf{N}^T \mathbf{t} dS_e + \sum_{e=1}^{N_{\text{el}}} \int_{\Omega_e} \rho \mathbf{N}^T \mathbf{b} dV_e \quad (6.25)$$

ここで， N_t は力学的境界条件が課される有限要素の数である．式 (6.25) において，右辺第一項は表面力マトリクスであり，この項によって力学的境界条件が付加される．また，式 (6.24) において B_L は変位-ひずみ変換マトリクスであり，以下のよう

に定義される .

$$\mathbf{B}_L = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial x} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial y} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial z} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial z} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial y} & \frac{\partial N_8}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial z} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \dots & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial z} & \frac{\partial N_8}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (6.26)$$

6.1.3 選択型低減積分

本研究では、非圧縮性の物質を取り扱うため、体積一定の拘束を課していることになる。有限要素解析では、この体積一定の拘束を各要素の積分点ごとに評価するため、変形が本来よりも拘束されて結果が剛となりすぎる体積ロッキング現象が起こることがある。この体積ロッキング現象を避けるために、本手法では選択型低減積分法を用いる。この方法は速度勾配テンソルを偏差成分と体積成分とに分割して、Fig.6.3のように、体積ロッキングに関連している体積成分のみを低減積分し、残りの偏差成分については完全積分を施すというものである。

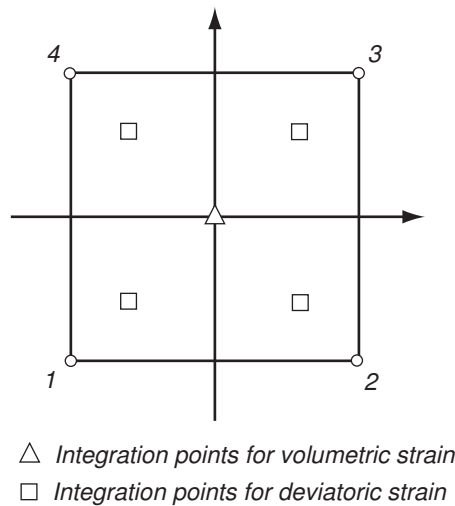


Fig. 6.3: Integration Points

まず，以下のように速度勾配テンソル L を偏差成分 L' と体積成分 L^v に分割する．

$$L = L' + L^v \quad (6.27)$$

ここで，体積成分は以下のものである．

$$L^v = \left(\frac{1}{3} \text{tr} L \right) I \quad (6.28)$$

いま，低減積分において評価した速度勾配テンソルを L^{red} とする．選択型低減積分では，体積成分だけ低減積分を行い，残りの偏差成分は完全積分を行うわけであるから，選択型低減積分における速度勾配テンソル L^{sel} は完全積分における速度勾配テンソルを L^{ful} として以下のように評価できる．

$$L^{sel} = L^{ful} + \left(\frac{1}{3} \text{tr} L^{red} \right) I - \left(\frac{1}{3} \text{tr} L^{ful} \right) I \quad (6.29)$$

上式は体積ひずみに関与する垂直ひずみ成分のみ低減積分を行い，ひずみの偏差成分は完全積分することを意味している．これを離散化した有限要素解析で反映させるためには，以下のように B_L を B_L^{sel} のように修正すればよい．

$$B_L^{sel} = B_L^{ful} + \frac{1}{3} B_{L^v}^{red} - \frac{1}{3} B_{L^v}^{ful} \quad (6.30)$$

ここで，

$$B_{L^v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial z} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial z} & \cdots & \frac{\partial N_8}{\partial x} & \frac{\partial N_8}{\partial y} & \frac{\partial N_8}{\partial z} \\ \frac{\partial N_1}{\partial N_1} & \frac{\partial N_1}{\partial N_1} & \frac{\partial N_1}{\partial N_1} & \frac{\partial N_2}{\partial N_2} & \frac{\partial N_2}{\partial N_2} & \frac{\partial N_2}{\partial N_2} & \cdots & \frac{\partial N_8}{\partial N_8} & \frac{\partial N_8}{\partial N_8} & \frac{\partial N_8}{\partial N_8} \\ \frac{\partial x}{\partial N_1} & \frac{\partial y}{\partial N_1} & \frac{\partial z}{\partial N_1} & \frac{\partial x}{\partial N_2} & \frac{\partial y}{\partial N_2} & \frac{\partial z}{\partial N_2} & \cdots & \frac{\partial x}{\partial N_8} & \frac{\partial y}{\partial N_8} & \frac{\partial z}{\partial N_8} \\ \frac{\partial x}{\partial x} & \frac{\partial y}{\partial y} & \frac{\partial z}{\partial z} & \frac{\partial x}{\partial x} & \frac{\partial y}{\partial y} & \frac{\partial z}{\partial z} & \cdots & \frac{\partial x}{\partial x} & \frac{\partial y}{\partial y} & \frac{\partial z}{\partial z} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.31)$$

である．上式の B_L^{sel} を用いて式 (6.24) の内力マトリクスを求める．

構成方程式で用いる新たなマトリクス B_{NL} についてもここで定義しておく． B_{NL}

を以下のように与える .

$$\mathbf{B}_{NL} = \begin{bmatrix}
 \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial x} & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial N_8}{\partial x} & 0 & 0 \\
 \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial y} & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial N_8}{\partial y} & 0 & 0 \\
 \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial z} & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial N_8}{\partial z} & 0 & 0 \\
 0 & \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial x} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial x} & 0 \\
 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial y} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial y} & 0 \\
 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial z} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial z} & 0 \\
 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial x} \\
 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial y} \\
 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial z} & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial z}
 \end{bmatrix} \quad (6.32)$$

この \mathbf{B}_{NL} についても, \mathbf{B}_L と同じように修正して \mathbf{B}_{NL}^{sel} を算出する . すなわち, \mathbf{B}_{NL}^{sel} を以下のように求める .

$$\mathbf{B}_{NL}^{sel} = \mathbf{B}_{NL}^{ful} + \frac{1}{3}\mathbf{B}_{NLv}^{red} - \frac{1}{3}\mathbf{B}_{NLv}^{ful} \quad (6.33)$$

ここで,

$$\mathbf{B}_{NLv} = \begin{bmatrix}
 \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial z} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial z} & \cdots & \frac{\partial N_8}{\partial x} & \frac{\partial N_8}{\partial y} & \frac{\partial N_8}{\partial z} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial z} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial z} & \cdots & \frac{\partial N_8}{\partial x} & \frac{\partial N_8}{\partial y} & \frac{\partial N_8}{\partial z} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial z} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial z} & \cdots & \frac{\partial N_8}{\partial x} & \frac{\partial N_8}{\partial y} & \frac{\partial N_8}{\partial z}
 \end{bmatrix} \quad (6.34)$$

と与えられる . 以後, ひずみの評価や応力の評価で用いる全ての $\mathbf{B}_L, \mathbf{B}_L$ の代わりに $\mathbf{B}_L^{sel}, \mathbf{B}_{NL}^{sel}$ を用いることで, 計算の整合性を持たす .

6.1.4 陽解法による速度の算出

ここでは，Lagrange 表示の中間速度の算出方法について述べる．離散化された平衡方程式 (6.22) の時間積分に陽解法を用いることにより，Lagrange 表示の速度 v_{mix}^* は次式で計算される．

$$\mathbf{v}_{\text{mix}}^* = \mathbf{v}_{\text{mix}}^n + \Delta t (\overline{\mathbf{M}}^n)^{-1} (\mathbf{F}_{\text{ext}}^n - \mathbf{F}_{\text{int}}^n - \mathbf{F}_p^n) \quad (6.35)$$

ここで，式 (6.23) の代わりに対角化された集中質量マトリクス $\overline{\mathbf{M}}$ を用いることで，連立方程式を解く必要がなくなり，式 (6.35) をスカラー方程式として解くことが可能になる．なお，上添え字 n は現時刻における物理量であることを意味する．

6.1.5 速度の移流

前節で，Lagrange 表示の中間速度を求めた．次に，速度の移流方程式を計算することにより，Euler 表示の中間速度を求める．速度の移流方程式は，2 次精度中心差分法により離散化する．速度の移流方程式は，式 (5.13) で与えられる．

$$\mathbf{v}_{\text{mix}}^P = \mathbf{v}_{\text{mix}}^* - \Delta t (\mathbf{v}_{\text{mix}}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}_{\text{mix}}^n \quad (6.36)$$

これを，成分を用いて以下のように x, y, z の各方向ごとに表しておく．

$$\begin{aligned} u_{\text{mix}}^P &= u_{\text{mix}}^* - \Delta t \left(u_{\text{mix}}^n \frac{\partial u_{\text{mix}}^n}{\partial x} + v_{\text{mix}}^n \frac{\partial u_{\text{mix}}^n}{\partial y} + w_{\text{mix}}^n \frac{\partial u_{\text{mix}}^n}{\partial z} \right) \\ v_{\text{mix}}^P &= v_{\text{mix}}^* - \Delta t \left(u_{\text{mix}}^n \frac{\partial v_{\text{mix}}^n}{\partial x} + v_{\text{mix}}^n \frac{\partial v_{\text{mix}}^n}{\partial y} + w_{\text{mix}}^n \frac{\partial v_{\text{mix}}^n}{\partial z} \right) \\ w_{\text{mix}}^P &= w_{\text{mix}}^* - \Delta t \left(u_{\text{mix}}^n \frac{\partial w_{\text{mix}}^n}{\partial x} + v_{\text{mix}}^n \frac{\partial w_{\text{mix}}^n}{\partial y} + w_{\text{mix}}^n \frac{\partial w_{\text{mix}}^n}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (6.37)$$

ここで， u, v, w は各方向の速度を表す．ここから差分法を用いて離散化する．説明は x 方向の速度 u についてのみ行うが，その他の方向の速度についても同様に離散化している．式 (6.37) の x 方向速度の計算について，後の表記のために，添え字の mix や n は省略して移流項の部分を以下のように書き直す．

$$(\text{Advection Term}) = u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \quad (6.38)$$

本手法では有限要素法がベースとなっているため，速度は Fig.6.4(a) に示すように要素節点で定義されている．しかし通常，差分法ではスタガード格子が用いられ，

2次元で考えた場合は Fig.6.4(b) に示すように，要素辺の中心に速度が定義される（3次元では要素面中心）．なお，図中の下添え字 (i, j) は空間位置を示しており，要素中心と節点で $1/2$ ほどずれている表し方になっている．以下，説明のための図は分かりやすいように2次元で考えることにする．

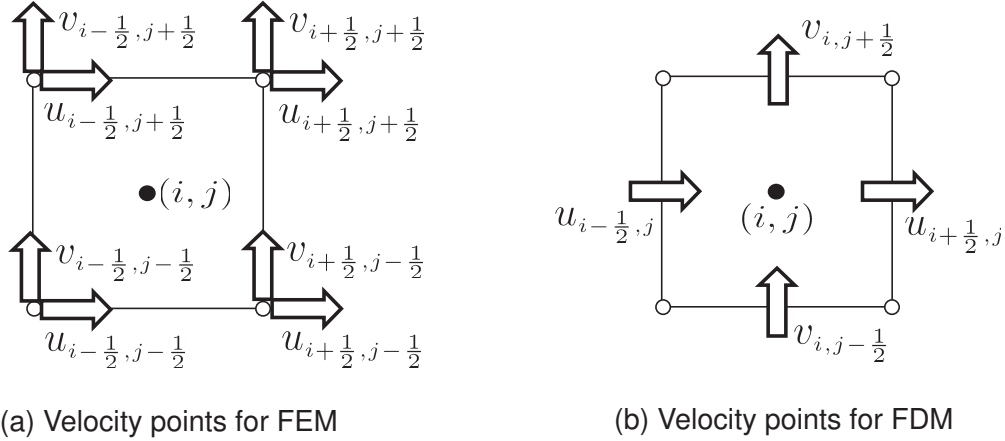


Fig. 6.4: Velocity points for FEM and FDM

有限要素法と有限差分法での速度定義点の相違を補間するために，Fig.6.5 に示すように， x 方向の速度勾配計算する際には，本来の要素と半格子幅ほど y 方向（と z 方向）にずれた仮想的な要素（図中の灰色部分）を考える．これより，従来の差分法による離散化をそのまま適用し，有限要素法で定義された節点の速度を計算することが可能となる．

この仮想的な要素を用いて離散化を行うが，差分形式としては対流型補間法と呼ばれる方法を用いる [82]．この方法は， $(i + 1/2, j + 1/2)$ での x 方向の速度勾配を計算するとき， x 方向に半格子幅だけずれた点 (Fig.6.5 の \triangle) で差分近似してから $u_{i+1/2, j+1/2}$ の点に補間する形になっており，運動量保存に対する誤差が少ないと言われている．この方法を用いると，式 (6.38) の第 1 項は以下のように計算される．

$$u \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}}{2} \frac{u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}}{\Delta x} + \frac{u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + u_{i+\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}}}{2} \frac{u_{i+\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right) \quad (6.39)$$

以上，2次元で x 方向の速度勾配の計算方法について説明したが，3次元問題で y 方向の速度勾配を計算するときは， x, z 方向にそれぞれ半格子幅ずつずれた仮想的な要素を用い， z 方向の場合は x, y 方向にそれぞれ半格子幅ずつずれた仮想的な要素を

用いる．これより，式 (6.38) は $(i + 1/2, j + 1/2, k + 1/2)$ の位置で以下のように差分近似される．

$$\begin{aligned}
 u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = & \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} + u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}{2} \frac{u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right. \\
 & \left. + \frac{u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} + u_{i+\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}{2} \frac{u_{i+\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right) \\
 & + \frac{1}{2} \left(\frac{v_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} + v_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}{2} \frac{u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right. \\
 & \left. + \frac{v_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} + v_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}, k+\frac{1}{2}}}{2} \frac{u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}, k+\frac{1}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right) \\
 & + \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}} + w_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}{2} \frac{u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}}}{\Delta z} \right. \\
 & \left. + \frac{w_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} + w_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{3}{2}}}{2} \frac{u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{3}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}{\Delta z} \right)
 \end{aligned} \tag{6.40}$$

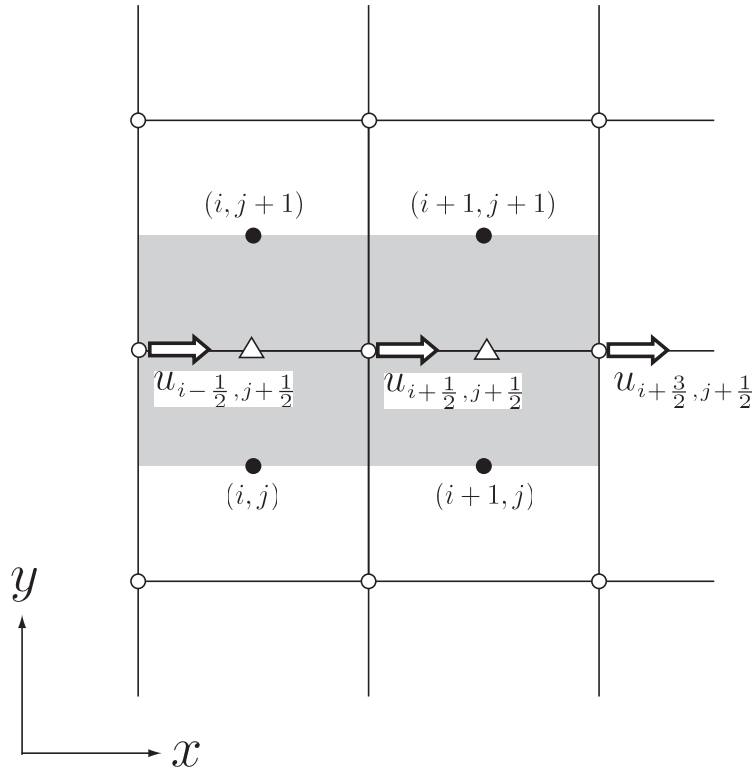


Fig. 6.5: Virtual mesh for velocity calculation (x direction)

式 (6.40) を見れば分かるように，ある節点の速度を更新する際は，その両隣りの節点速度の情報が必要となる．解析領域の端部の節点速度を計算する際は，片方の節

点速度の情報がないため，何らかの形でそれを補う必要がある．本研究では，Fig.6.6に示すように，解析領域外にいわゆるゴーストメッシュを設置し，そこに端部格子と同じ情報を入れて対応している．この考え方はこれ以降説明する差分近似式に対して，基本的に同じである．

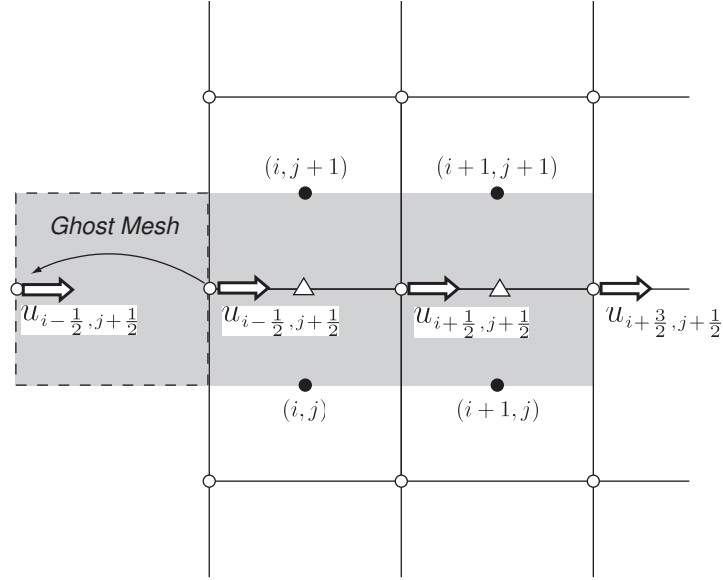


Fig. 6.6: Ghost mesh

以上の離散化操作を x, y, z の各方向の速度に対して行い，節点における Euler 表示の中間速度を計算する．

6.2 ポアソン方程式

ここでは圧力修正量に関する Poisson 方程式の離散化について説明する．離散化には差分法で一般的に利用されるスタガード格子の考え方を適用する．Poisson 方程式は連立一次方程式となるため，解法を選択は計算コストの観点から重要である．本研究ではSOR法 [83][84] を用いて解いている．

Poisson 方程式 (5.10) を再録する．

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho_{\text{mix}}} \nabla \delta p_{\text{mix}} \right) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}_{\text{mix}}^P \quad (6.41)$$

これを，成分を用いて以下のように表しなおす．

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho_{\text{mix}}} \frac{\partial \delta p_{\text{mix}}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho_{\text{mix}}} \frac{\partial \delta p_{\text{mix}}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\rho_{\text{mix}}} \frac{\partial \delta p_{\text{mix}}}{\partial z} \right) \\ = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial u_{\text{mix}}^P}{\partial x} + \frac{\partial v_{\text{mix}}^P}{\partial y} + \frac{\partial w_{\text{mix}}^P}{\partial z} \right) \quad (6.42) \end{aligned}$$

スタガード格子では，2次元で考えた場合，Fig.6.7のように格子の中心に圧力(圧力修正量)，隣りの圧力点との間にはその方向の速度成分が配置される．

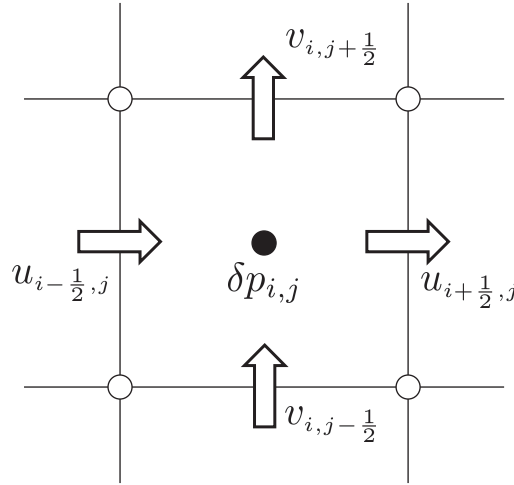


Fig. 6.7: Staggered grid

しかし前節でも述べたとおり，本手法では速度は節点で定義されている．したがって，Fig.6.7の配置に直すために，以下のように節点速度を平均化することで要素面中心の速度に直す(3次元表記)．

$$\bar{v}_{i-\frac{1}{2},j,k} = \frac{1}{4} \left(v_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} + v_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + v_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + v_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} \right) \quad (6.43)$$

$$\bar{v}_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{1}{4} \left(v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} + v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} \right) \quad (6.44)$$

ここでの上付きのバーは平均値であることを表す．この平均操作を用いて，式(6.42)を (i,j,k) の位置で以下のように差分近似する．なお，下添え字の mix は省略する．

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\bar{\rho}_{i+\frac{1}{2},j,k}} \left(\frac{\partial \delta p}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{\bar{\rho}_{i-\frac{1}{2},j,k}} \left(\frac{\partial \delta p}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j,k} \right] \frac{1}{\Delta x} \\ & + \left[\frac{1}{\bar{\rho}_{i,j+\frac{1}{2},k}} \left(\frac{\partial \delta p}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2},k} - \frac{1}{\bar{\rho}_{i,j-\frac{1}{2},k}} \left(\frac{\partial \delta p}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2},k} \right] \frac{1}{\Delta y} \\ & + \left[\frac{1}{\bar{\rho}_{i,j,k+\frac{1}{2}}} \left(\frac{\partial \delta p}{\partial z} \right)_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \frac{1}{\bar{\rho}_{i,j,k-\frac{1}{2}}} \left(\frac{\partial \delta p}{\partial z} \right)_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right] \frac{1}{\Delta z} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\bar{v}_{i+\frac{1}{2},j,k}^P - \bar{v}_{i-\frac{1}{2},j,k}^P}{\Delta x} + \frac{\bar{v}_{i,j+\frac{1}{2},k}^P - \bar{v}_{i,j-\frac{1}{2},k}^P}{\Delta y} + \frac{\bar{w}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^P - \bar{w}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^P}{\Delta z} \right) \quad (6.45)$$

ここで, $\bar{\rho}$ は要素中心面での密度, すなわち速度定義点と同じ位置の密度である. 密度は要素中心で定義されている量なので, $\bar{\rho}$ は以下のように両隣りの要素の平均値で計算される.

$$\bar{\rho}_{i-\frac{1}{2},j,k} = \frac{1}{2} (\rho_{i-1,j,k} + \rho_{i,j,k}) \quad (6.46)$$

$$\bar{\rho}_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{1}{2} (\rho_{i,j,k} + \rho_{i+1,j,k}) \quad (6.47)$$

さらに, 式 (6.45) は以下のように差分近似できる.

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\bar{\rho}_{i+\frac{1}{2},j,k}} \left(\frac{\delta p_{i+1,j,k} - \delta p_{i,j,k}}{\Delta x} \right) - \frac{1}{\bar{\rho}_{i-\frac{1}{2},j,k}} \left(\frac{\delta p_{i,j,k} - \delta p_{i-1,j,k}}{\Delta x} \right) \right] \frac{1}{\Delta x} \\ & + \left[\frac{1}{\bar{\rho}_{i,j+\frac{1}{2},k}} \left(\frac{\delta p_{i,j+1,k} - \delta p_{i,j,k}}{\Delta y} \right) - \frac{1}{\bar{\rho}_{i,j-\frac{1}{2},k}} \left(\frac{\delta p_{i,j,k} - \delta p_{i,j-1,k}}{\Delta y} \right) \right] \frac{1}{\Delta y} \\ & + \left[\frac{1}{\bar{\rho}_{i,j,k+\frac{1}{2}}} \left(\frac{\delta p_{i,j,k+1} - \delta p_{i,j,k}}{\Delta z} \right) - \frac{1}{\bar{\rho}_{i,j,k-\frac{1}{2}}} \left(\frac{\delta p_{i,j,k} - \delta p_{i,j,k-1}}{\Delta z} \right) \right] \frac{1}{\Delta z} \\ & = RHS \quad (6.48) \end{aligned}$$

なお, 式 (6.45) の右辺を RHS と置いている. ここで, 上式に対して反復法を適用する. 上式を $\delta p_{i,j,k}$ について解き, 右辺を前回の反復時のデータから算出するものとする, 以下のように式を変形できる.

$$\begin{aligned} & \left[- \left(\frac{1}{\bar{\rho}_{i+\frac{1}{2},j,k}} + \frac{1}{\bar{\rho}_{i-\frac{1}{2},j,k}} \right) \frac{1}{(\Delta x)^2} \right. \\ & \quad \left. - \left(\frac{1}{\bar{\rho}_{i,j+\frac{1}{2},k}} + \frac{1}{\bar{\rho}_{i,j-\frac{1}{2},k}} \right) \frac{1}{(\Delta y)^2} - \left(\frac{1}{\bar{\rho}_{i,j,k+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{\bar{\rho}_{i,j,k-\frac{1}{2}}} \right) \frac{1}{(\Delta z)^2} \right] \delta p_{i,j,k}^{m+1} \\ & = RHS - \left[\frac{\delta p_{i+1,j,k}^m}{\bar{\rho}_{i+\frac{1}{2},j,k}(\Delta x)^2} + \frac{\delta p_{i-1,j,k}^m}{\bar{\rho}_{i-\frac{1}{2},j,k}(\Delta x)^2} \right. \\ & \quad \left. + \frac{\delta p_{i,j+1,k}^m}{\bar{\rho}_{i,j+\frac{1}{2},k}(\Delta y)^2} + \frac{\delta p_{i,j-1,k}^m}{\bar{\rho}_{i,j-\frac{1}{2},k}(\Delta y)^2} + \frac{\delta p_{i,j,k+1}^m}{\bar{\rho}_{i,j,k+\frac{1}{2}}(\Delta z)^2} + \frac{\delta p_{i,j,k-1}^m}{\bar{\rho}_{i,j,k-\frac{1}{2}}(\Delta z)^2} \right] \quad (6.49) \end{aligned}$$

さらに, 以下のように $\delta p_{i,j,k}^{m+1}$ の係数を $A_{i,j}$ として表しなおす.

$$\begin{aligned} \delta p_{i,j,k}^{m+1} & = \frac{1}{A_{i,j}} RHS - \frac{1}{A_{i,j}} \left[\frac{\delta p_{i+1,j,k}^m}{\bar{\rho}_{i+\frac{1}{2},j,k}(\Delta x)^2} + \frac{\delta p_{i-1,j,k}^m}{\bar{\rho}_{i-\frac{1}{2},j,k}(\Delta x)^2} \right. \\ & \quad \left. + \frac{\delta p_{i,j+1,k}^m}{\bar{\rho}_{i,j+\frac{1}{2},k}(\Delta y)^2} + \frac{\delta p_{i,j-1,k}^m}{\bar{\rho}_{i,j-\frac{1}{2},k}(\Delta y)^2} + \frac{\delta p_{i,j,k+1}^m}{\bar{\rho}_{i,j,k+\frac{1}{2}}(\Delta z)^2} + \frac{\delta p_{i,j,k-1}^m}{\bar{\rho}_{i,j,k-\frac{1}{2}}(\Delta z)^2} \right] \quad (6.50) \end{aligned}$$

ここで、 m は反復回数である．反復法の詳しい説明は省略するが、計算の流れとしては、まず上式において、反復の初期値としてすべてに対して $\delta p_{i,j,k}^0 = 0$ を与える．そして $\delta p_{i,j,k}^m$ を上式に従い $\delta p_{i,j,k}^1, \delta p_{i,j,k}^2, \delta p_{i,j,k}^3, \dots$ と順次変化させていき、誤差の範囲内で $\delta p_{i,j,k}^{m+1} = \delta p_{i,j,k}^m$ になれば（すなわち収束すれば）、それを解とする．非定常問題における反復法の場合、反復の初期値として前の時間ステップの解を用いることが多い．これは、通常圧力は時間ステップごとに少しずつ変化するため、前の解が良い出発点となり収束が速くなると考えられるからである．しかし、本手法では圧力修正量 δp を求めるため、前の時間ステップの解よりも 0 の方が良い出発点であると考えられる．したがって、反復の初期値としては常に 0 と与える．

本研究では、収束を速めるために反復法の中のSOR(Successive Over Relaxation)法 [83][84] を用いる．式 (6.50) は $i = 1, j = 1, k = 1$ から始めて、順に $i, j, k = 2, \dots, n$ とすることにより順次計算することができる．つまり、 $\delta p_{i,j,k}^{m+1}$ を計算する時点で、 $\delta p_{1,1,1}^{m+1}, \dots, \delta p_{i,j,k-1}^{m+1}$ が既知になっているので、それらを計算に用いる．この方法はガウス・ザイデル法と呼ばれているが、SOR 法ではこの時に、いったん式 (6.50) の右辺を計算してそれを $\delta p_{i,j,k}^{m+1}$ の予想値 $\delta \tilde{p}_{i,j,k}$ とし、実際の $\delta p_{i,j,k}^{m+1}$ は $\delta \tilde{p}_{i,j,k}$ と $\delta p_{i,j,k}^m$ の線形結合で決める．したがって、 $\delta p_{i,j,k}^{m+1}$ は以下ようになる．

$$\delta p_{i,j,k}^{m+1} = (1 - \omega)\delta p_{i,j,k}^m + \omega\delta \tilde{p}_{i,j,k} \quad (6.51)$$

ここで、 ω は過緩和係数と呼ばれ $1 < \omega < 2$ の値をとる． ω の最適値は問題にもよるが、Poisson 方程式の場合は概ね 1.5 ~ 1.7 が良いと言われている．なお、本研究では $\omega = 1.6$ としている．

収束判定については変化量 $\|\delta p^{m+1} - \delta p^m\|$ が $\|\delta p^{m+1}\|$ よりも数桁小さくなったら収束したものとみなし、反復を終了させる．つまり、

$$\frac{\|\delta p^{m+1} - \delta p^m\|}{\|\delta p^{m+1}\|} < \varepsilon' \quad (6.52)$$

が収束判定条件となる．ここで、 $\|\cdot\|$ はノルムであり、以下のように計算する．

$$\|\delta p\| = \sqrt{\sum \delta p_{i,j,k}^2} \quad (6.53)$$

また、 ε' は収束判定値であり、目的とする精度に応じて設定する．

以上の方法を用いると、Poisson 方程式を有限要素法のようにマトリクスを作成して解く必要がなくなり、極めて小さなメモリ容量で計算することができる．

6.3 速度修正式

Poisson 方程式を解く事により求めた圧力修正量 δp_{mix} を用いて, Euler 表示の中間速度を修正し, 連続の式を満たす $n+1$ 時刻の速度を計算する. 速度修正式 (5.8) を以下に再録する.

$$\mathbf{v}_{\text{mix}}^{n+1} = \mathbf{v}_{\text{mix}}^P - \frac{\Delta t}{\rho_{\text{mix}}} \nabla \delta p_{\text{mix}} \quad (6.54)$$

これを, 成分を用いて以下のように x, y, z の各方向に分けて表す.

$$\begin{aligned} u_{\text{mix}}^{n+1} &= v_{\text{mix}}^P - \frac{\Delta t}{\rho_{\text{mix}}} \frac{\partial \delta p_{\text{mix}}}{\partial x} \\ v_{\text{mix}}^{n+1} &= v_{\text{mix}}^P - \frac{\Delta t}{\rho_{\text{mix}}} \frac{\partial \delta p_{\text{mix}}}{\partial y} \\ w_{\text{mix}}^{n+1} &= w_{\text{mix}}^P - \frac{\Delta t}{\rho_{\text{mix}}} \frac{\partial \delta p_{\text{mix}}}{\partial z} \end{aligned} \quad (6.55)$$

離散化に際しては, 節点の速度を直接更新する. そのため, 要素中心点で定義されている密度と圧力修正量から, それぞれ必要な点での平均値を求める必要がある. これらの物理量の位置関係を Fig.6.8 に整理する. 灰色の \circ で表した節点 $(i+1/2, j+1/2)$ の速度を修正する場合は, この点の密度 $\bar{\rho}$ と, 灰色の \triangle の点での圧力修正量 $\delta \bar{p}$ が必要になるため, 周りの要素から平均によって求める.

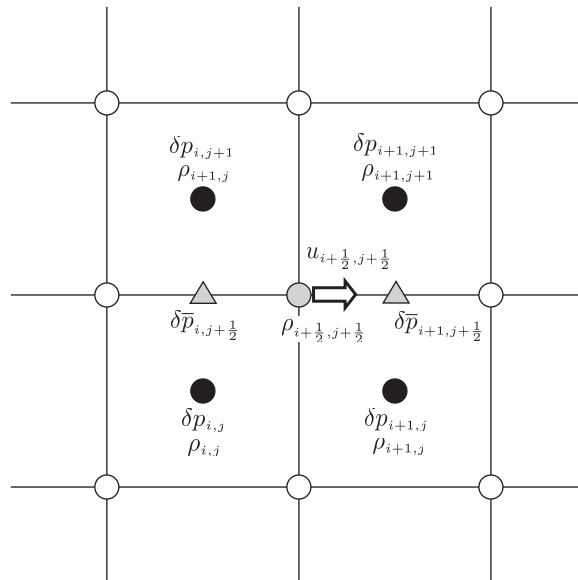


Fig. 6.8: Positions for velocity, pressure, and density

以上の位置関係を考慮して, 式 (6.55) の x 方向に関する速度修正式を $(i+1/2, j+$

$1/2, k + 1/2$) の位置で差分近似すると以下ようになる (下添え字 mix は省略) .

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} = u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^P - \frac{\Delta t}{\bar{\rho}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}} \frac{\delta \bar{p}_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} - \delta \bar{p}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \quad (6.56)$$

このとき , 密度と圧力修正量の平均値は以下のように計算される .

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{8} & (\rho_{i,j,k} + \rho_{i+1,j,k} + \rho_{i+1,j+1,k} + \rho_{i,j+1,k} \\ & + \rho_{i,j,k+1} + \rho_{i+1,j,k+1} + \rho_{i+1,j+1,k+1} + \rho_{i,j+1,k+1}) \end{aligned} \quad (6.57)$$

$$\delta \bar{p}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} (\delta p_{i,j,k} + \delta p_{i,j+1,k} + \delta p_{i,j+1,k+1} + \delta p_{i,j,k+1}) \quad (6.58)$$

以上の離散化操作を y 方向と z 方向の速度に対しても行い , $n + 1$ 時刻での節点速度を求める .

6.4 構成方程式

6.4.1 固体 : 左 Cauchy-Green 変形テンソルの離散化

4 章で説明したように , 本研究では固体を超弾性体または粘性-超弾性体としてモデル化し , 時間発展式 (4.17) を用いて Euler 表示の速度場から左 Cauchy-Green 変形テンソル B を求める .

$$\frac{\partial B}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla B - L \cdot B - B \cdot L^T = 0 \quad (6.59)$$

これを時間差分近似し , 以下のように表す .

$$B^{n+1} = B^n + \Delta t \{ L^{n+1} \cdot B^n + B^n \cdot (L^T)^{n+1} \} - \Delta t \boldsymbol{v}^{n+1} \cdot \nabla B^n \quad (6.60)$$

上式右辺の速度と速度勾配テンソル L の時刻が $n + 1$ になっているが , これは連続の式を満足するように更新された $n + 1$ 時刻の速度を用いて , L と移流項の計算を行うためである . 本研究では , 上式を以下のように 2 段階に分けて計算する .

$$B^* = B^n + \Delta t \{ L^{n+1} \cdot B^n + B^n \cdot (L^T)^{n+1} \} \quad (6.61)$$

$$B^{n+1} = B^* - \Delta t \boldsymbol{v}^{n+1} \cdot \nabla B^n \quad (6.62)$$

ここで，速度勾配テンソル L の計算方法について説明する． L は以下のように成分で表される．

$$\underline{L} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (6.63)$$

これを以下のようにベクトルに変換して表すと，

$$\underline{L} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial y} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad (6.64)$$

となる．ここで，形状関数マトリクス N を用いて，速度 v をその節点値 \hat{v} と以下のように関係付ける．

$$v = N\hat{v} \quad (6.65)$$

このとき節点速度は，

$$\hat{v}^T = (u_1, v_1, w_1, u_2, v_2, w_2, \dots, u_8, v_8, w_8) \quad (6.66)$$

となっている．また，形状関数に関しては有限要素法による離散化の説明で用いたものと同じである．これを式 (6.64) に代入すると，次のようになる．

$$\underline{L} = B_{NL}\hat{v} \quad (6.67)$$

ここで， B_{NL} は式 (6.32) で与えられる．ただし，実際は選択型低減積分を行うため，式 (6.33) で与えられる B_{NL}^{sel} を用いる．式 (6.67) の計算を積分点ごとに繰り返して L を評価し，積分点ごとに式 (6.61) を計算する．計算領域の全要素において以上の計算

を行うが，速度勾配テンソル L は流体領域では固体領域に比べて非常に大きくなる．したがって，この L を用いて計算された左 Cauchy-Green 変形テンソル B も流体領域では非常に大きく計算されてしまう．そうすると，非圧縮条件である $\det B = 1$ が満たされなくなり，計算が発散する．これを防ぐために，本研究では以下のように，判定値 ϕ_{\min} を設定して，固体の体積率 ϕ_s の大きさにより，以下のように B を切り捨てる操作をする．

$$\tilde{B} = \begin{cases} B & (\phi_s > \phi_{\min}) \\ 0 & (\phi_s < \phi_{\min}) \end{cases} \quad (6.68)$$

上式の意味するところは， B は固体の構成方程式にのみ使われる変数なので，この \tilde{B} を用いることで，流体領域では B を計算しないようにするということである．

続いて，左 Cauchy-Green 変形テンソル B の移流方程式(6.69) の移流項の空間離散化について説明する．この移流項は有限差分法により離散化するが，運動方程式の移流項と違い，式 (6.69) には粘性項の代わりになるものが存在しない．したがって，計算の安定化のために 1 次精度の風上化を行い，数値的な粘性を付加する．また，左 Cauchy-Green 変形テンソル B は積分点において定義されているため，それも考慮して差分近似する．

積分点ごとに移流項を評価するため，積分点ごとに Fig.6.9 のような各積分点を中心とする仮想的な要素を考える．なお，図中の B の上添え字 P は積分点の番号を表すことにする．

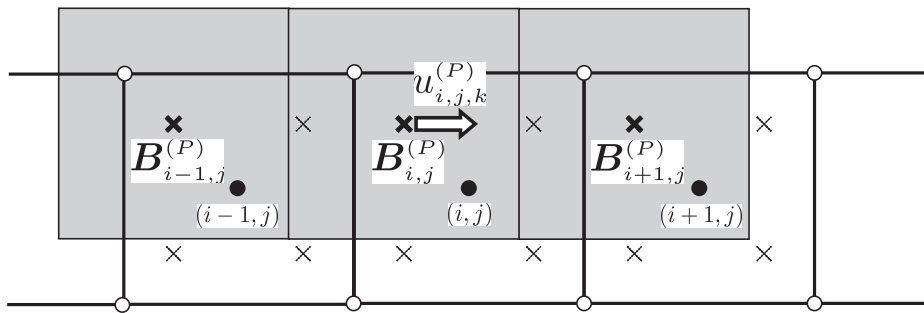


Fig. 6.9: Virtual mesh for advection of B

ここで，式 (6.69) を以下のように書き直しておく．

$$B^{n+1} = B^* - \Delta t \left(u^{n+1} \frac{\partial B^n}{\partial x} + v^{n+1} \frac{\partial B^n}{\partial y} + w^{n+1} \frac{\partial B^n}{\partial z} \right) \quad (6.69)$$

Fig.6.9 の仮想的な要素を用いて，上式の x 方向の勾配に対する要素 (i, j) の積分点 (P) の位置での風上差分は以下のように与えられる（上添え字の時刻は省略）．

$$u \frac{\partial B}{\partial x} = \begin{cases} u_{i,j,k}^{(P)} \frac{B_{i,j,k}^{(P)} - B_{i-1,j,k}^{(P)}}{\Delta x} & (u_{i,j,k}^{(P)} \geq 0) \\ u_{i,j,k}^{(P)} \frac{B_{i+1,j,k}^{(P)} - B_{i,j,k}^{(P)}}{\Delta x} & (u_{i,j,k}^{(P)} < 0) \end{cases} \quad (6.70)$$

y, z 方向に関しても同じように差分近似する．これを積分点ごと ($P = 1 \sim 8$) に繰り返し，各積分点における B の移流項を評価する．なお， $u_{i,j,k}^{(P)}$ は式 (6.65) によって内挿することで求めることができる．

以上の操作により，積分点における左 Cauchy-Green 変形テンソル B を評価し，これにせん断弾性係数 G をかけることで積分点の偏差応力を計算する．

6.4.2 流体：ひずみ速度テンソルの離散化

Newton 流体の偏差成分の構成方程式は式 (4.42) より，以下のように表される．

$$\sigma'_f = 2\mu D \quad (6.71)$$

ここで，ひずみ速度テンソル D は以下のように速度勾配テンソル L から求められる．

$$D = \frac{1}{2}(L + L^T) \quad (6.72)$$

さらに， σ'_f の対称性より 6 行 1 列の行列に書き換えたものを $\underline{\sigma}'_f$ とすると， $\underline{\sigma}'_f$ は以下のように表される．

$$\underline{\sigma}'_f = 2\mu \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial z} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \end{array} \right\} \quad (6.73)$$

$$= \mu \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \left\{ \begin{array}{c} u \\ v \\ w \end{array} \right\}$$

これを，式 (6.65) を用いて離散化すると，以下ようになる．

$$\underline{\sigma}'_f = \mu \mathbf{C} \mathbf{B}_L \hat{\mathbf{v}} \quad (6.74)$$

ここで，式 (6.73) の最右辺の対角マトリクスを \mathbf{C} としている．また， \mathbf{B}_L は式 (6.26) で与えられる．ただし，選択型低減積分をするために，式 (6.30) より得られる \mathbf{B}_L^{sel} を用いる．

式 (6.74) の計算を，各積分点ごとに繰り返すことで積分点における流体の偏差応力を求めることができる．

第7章 界面不連続性のモデル化

本章では，異種材料界面における不連続性のモデル化について述べる．従来の Euler 型有限要素法で複数の材料を扱う場合，連続の式と運動方程式を空間平均化することで定義域内の速度場を C^0 連続な関数としてきた．しかし，その代償として材料界面が固着するモデル化になってしまい，実用的なシミュレーションの実施の妨げになることがあった．

そこで本研究では，X-FEM により速度場の拡充を行い，3次元 PLIC 法で規定した異種材料界面の接触条件をペナルティ法で制御する手法を提案する．この手法により，Euler 型解法の枠組みにおいて，異種材料界面の摩擦が無い滑り現象や摩擦がある滑り現象をモデル化できる．この手法は，従来の Euler 型有限要素法との定式化を大幅に変更することなく異種材料界面の不連続性をモデル化できる利点がある．また，ペナルティ法により異種材料界面の表面力が規定されるため，ペナルティ係数を変化させるだけで表面力を容易に操作できるという利点もある．

7.1 不連続性のモデル化手法の概観

従来の Euler 型有限要素法において，異種材料間の滑りなどの不連続性をモデル化できない原因は，連続の式と平衡方程式の空間平均化である．すなわち，ひとつの有限要素内に異種材料が存在する場合，各材料の物理量を体積率で重み付き平均化する定式化である．ただし，この空間平均化は，有限要素定式化で物理量の C^0 連続性が要請されるという特性から [65]，仮定せざるを得ないというのが実情である．したがって，異種材料間の不連続性をモデル化するには，従来の有限要素法を補間または代替する手法の導入が必要である．

この代表的な手法としては，拡張有限要素法 (X-FEM:eXtended Finite Element Method)[66][67]，HPM(Hybrid Penalty Method)[68]，DDA(Discontinuous Deformation Analysis)[69]，DEM(Discrete Element Method)[70] があげられる．これらの手

法のうち，X-FEM や Hybrid Penalty Method は有限要素メッシュに依存することなく不連続性をモデル化できる利点がある．また，DDA や DEM は固体を離散体として定式化するため，有限要素法とのカップリングは容易ではない．

一方，本研究では，X-FEM により速度場の拡充を行い，3次元PLIC法で規定した異種材料界面の接触条件をペナルティ法で制御する手法を提案する．この手法は，従来の Euler 型有限要素法との定式化を大幅に変更することなく異種材料界面の不連続性をモデル化できる利点がある．また，ペナルティ法により異種材料界面の表面力が規定されるため，ペナルティ係数を変化させるだけで表面力を容易に操作できるという利点もある．次節以降で本手法の詳細を述べる．

7.2 拡張有限要素法による速度場の拡充

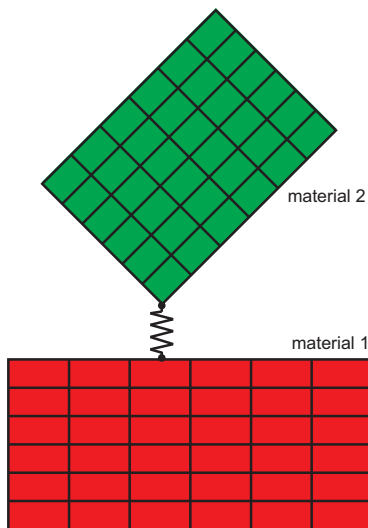


Fig. 7.1: Lagrangian method

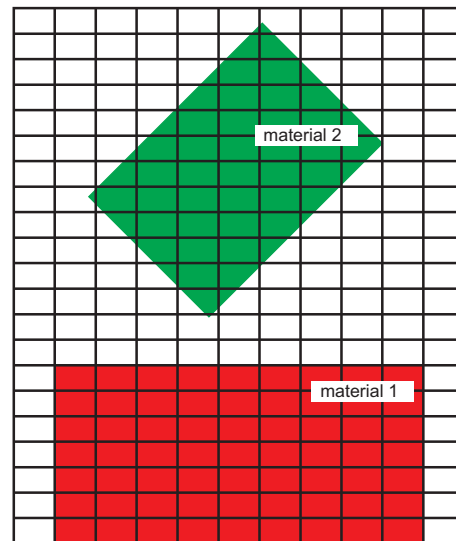


Fig. 7.2: Eulerian method

Lagrange 型有限要素法においてペナルティ法で異種材料界面の接触を取り扱う場合，Fig.7.1のように材料ごとに定義域が設定され，各々の定義域境界をペナルティ・バネで接続する．つまり，有限要素法により空間変数が離散化されるのは，物体ごとに設定された定義域内のみであり，ペナルティ・バネがある領域には有限要素法は適用されない．一方，Euler 型有限要素法においては Fig.7.2のように単一の定義域内で複数の材料が取り扱われる．しかし，有限要素法は C^0 連続の関数の離散化

に適した手法であり，不連続な関数の離散化を取り扱うことができない．したがって，異種材料界面において生じ得る不連続性を再現することができない．そのような背景から，従来の Euler 型有限要素法で複数の材料を扱う場合は，連続の式と運動方程式を空間平均化することで定義域内の速度場を C^0 連続な関数としてきた．しかし，その代償として材料界面が固着するモデル化になってしまい実用的なシミュレーションの実施の妨げになることがあった．

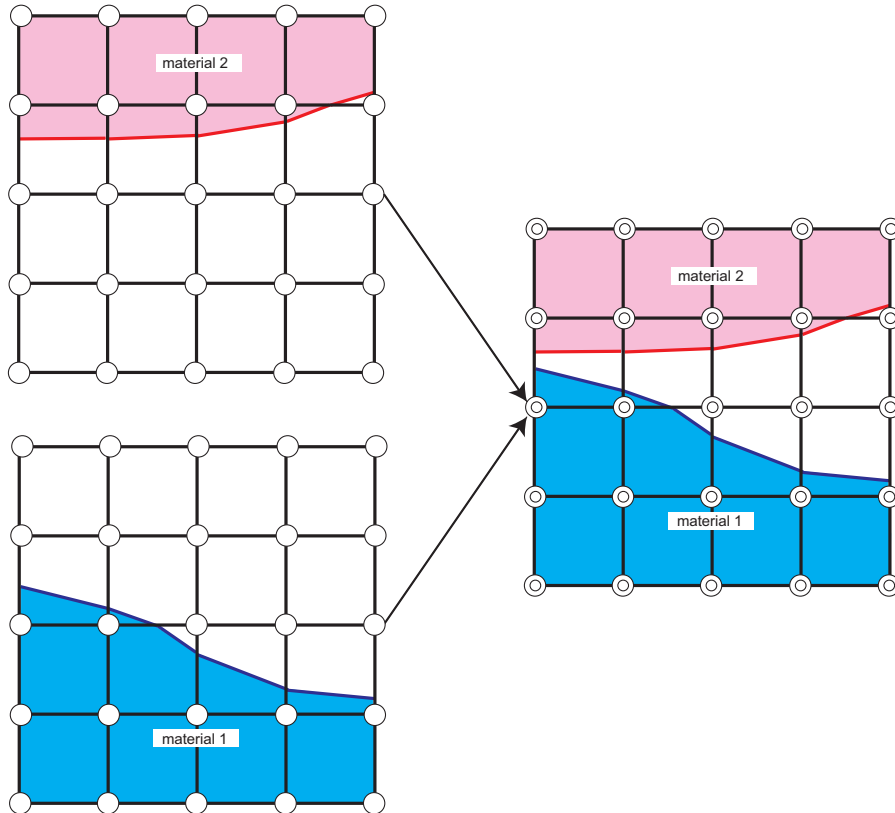


Fig. 7.3: Enrichment of velocity field with X-FEM

そこで本研究では，Vitaliらにより提案された X-FEM を用いて Euler 表示の速度場を拡充する手法 [71]-[74] を導入する．一般的な X-FEM の定式化では，enrichment 関数と呼ばれる解の特徴を表した関数を付加して，PU 条件に基づいて近似を高度化することにより，要素内に変位の不連続性やひずみの不連続性を導入する [66][67]．本研究では，enrichment 関数として Hansbo らが提案した関数 [75] を用いる．この enrichment 関数は，通常の有限要素法における形状関数を材料ごとに適用するものである．すなわち，材料ごとに独立な速度場を定義することで，連続の式と運動方程式を空間平均化を回避する．具体的には，式 (3.65)-式 (3.69) において材料数 $n = 1$

とし，材料ごとに連続の式と平衡方程式を定義する．この手法は，材料ごとに定義された有限要素メッシュを重ね合わせているとみなすこともできる [71]．この概念を示したものが Fig.7.3 であり，白丸は速度の定義点を意味している．ただし，材料ごとに独立な速度場を定義しただけでは，異種材料間で相互作用が起こらず，接触をモデル化できない．そこで，次節で説明するペナルティ法を導入することで異種材料界面の接触を制御する．

なお，X-FEM は，き裂先端における応力特異性を高精度に表現するために，ある関数の自由度をローカルにエンリッチするために Belytschko らにより提案された手法であり，形状関数以外の関数を有限要素近似に用いている [66][67]．一方，Vitali らにより提案された手法は，形状関数以外の関数を有限要素近似に用いておらず，近似領域を材料ごとに定義する目的で X-FEM を導入している点が異なる [71]-[74]．

7.3 ペナルティ法による接触条件の制御

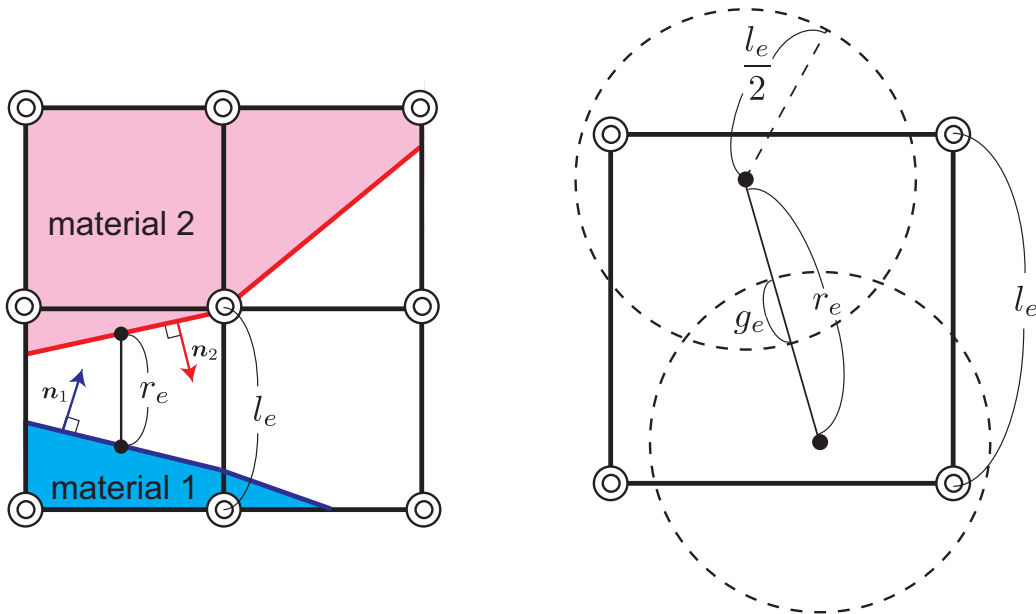


Fig. 7.4: Relative distance for penalty method

X-FEM により速度場を拡充した Euler 型有限要素法の枠組みにおける，ペナルティ法による接触条件の制御方法について述べる．Fig.7.4 のように，ひとつの有限

要素内に2つの材料が存在する場合，相対距離 g_e を次式で定義する．

$$g_e = l_e - r_e \quad \text{for } 0 \leq r_e \leq l_e \quad (7.1)$$

式 (7.1) において， l_e はその有限要素の最大辺長， r_e は PLIC 法で規定された材料1の界面の重心点と材料2の界面の重心点との距離である．相対距離 g_e は，重心点が互いに接近するほどその値が大きくなり，界面の重心点を中心とする半径 $l_e/2$ の円 (3次元では球) と円が重なり合った場合 ($0 \leq r_e \leq l_e$) のみ定義される．式 (7.1) で定義した相対距離 g_e を用いて，ひとつの有限要素の界面における表面力を材料ごとに次式で定義する．

$$\mathbf{t}_{m,e} = - \left(\frac{g_e}{l_e} \right) \mathbf{P} \mathbf{T} \mathbf{n}_{m,e} \quad \text{for } m = 1, 2 \quad (7.2)$$

式 (7.2) において $\mathbf{n}_{m,e}$ は材料 m の有限要素 e における界面の単位法線ベクトルであり3次元 PLIC 法により決定される． \mathbf{T} は単位法線ベクトル $\mathbf{n}_{m,e}$ を界面の局所座標系から全体座標系に変換する行列であり，3次元 PLIC 法で規定された単位法線ベクトルの値から求められる． \mathbf{P} はペナルティ係数行列である．相対距離 g_e を有限要素の最大辺長 l_e で除しているのは，ペナルティ係数の次元をヤング率と同じ次元にすることで，ペナルティ係数のメッシュサイズ依存性を無くすためである [77]．式 (7.2) を成分表示すれば次式になる．

$$\mathbf{t}_{m,e} = - \left(\frac{g_e}{l_e} \right) \begin{Bmatrix} p_n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} n_n \\ n_{t1} \\ n_{t2} \end{Bmatrix} \quad \text{for } m = 1, 2 \quad (7.3)$$

ペナルティ係数行列においては，界面の法線方向成分のみにペナルティ係数を与える．これは異種材料界面の貫通を防ぐことを目的に定式化しているからである．ペナルティ係数 p_n には，解析対象とする固体のヤング率の 10^4 倍以上の値を設定する．

7.4 表面力ベクトルの空間離散化

ペナルティ法により定義した各有限要素の界面における表面力の空間離散化について述べる．空間離散化した平衡方程式における外力マトリクス (6.25) を次式のように表すことにする．

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = \mathbf{F}_t + \mathbf{F}_b \quad (7.4)$$

ここで、 F_t は表面力マトリクス、 F_b は物体力マトリクスであり、それぞれ次式で表す。

$$F_t = \sum_{e=1}^{N_t} \int_{\Gamma_t} N^T t dS_e \quad (7.5)$$

$$t = \bar{t} + t_{m,e} \quad (7.6)$$

$$F_b = \sum_{e=1}^{N_{el}} \int_{\Omega_e} \rho N^T b dV_e \quad (7.7)$$

ここで、 \bar{t} は既知の情報として与える表面力ベクトル、 $t_{m,e}$ は異種材料界面の貫通を防ぐためにペナルティ法で規定する表面力ベクトル (7.3) である。 \bar{t} の接線方向成分に値を与えれば、界面の摩擦力を表現することができる。表面力マトリクス (7.5) について、各有限要素において面積分を行うのは計算コストが大きい。よって本研究では、Fig.7.5 に示すように、要素内における表面力が、PLIC 法により定義される境界面の重心に集中荷重として作用しているものとして取り扱う。重心の算出の際

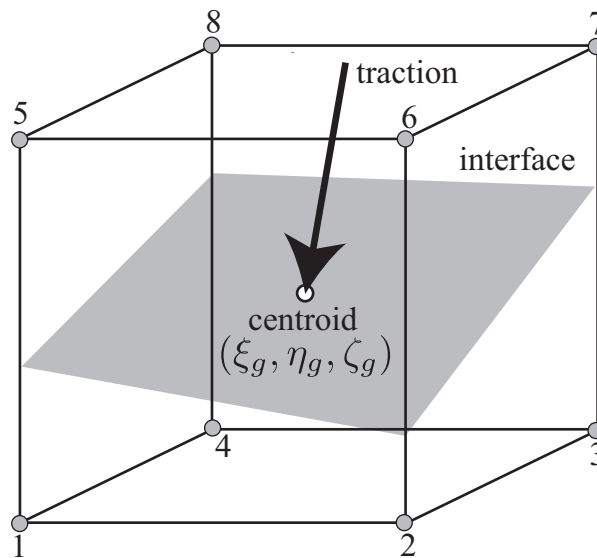


Fig. 7.5: Traction at piecewise linear interface

には、PLIC 法により求められる各要素の境界面の方程式から、要素の各辺と境界面との交点の座標を初めに計算する。次にこの交点を頂点とする多角形の重心を計算することで境界面の重心が決定される。このように表面力を重心に作用する集中荷重として取り扱うことにより、数値積分を行う必要がなくなり、簡便な処理で済

む．この場合，表面力マトリクスは次式で表せる．

$$\mathbf{F}_t = \sum_{e=1}^{N_t} \mathbf{N}^T \mathbf{t} S_e \quad (7.8)$$

式 (7.8) において， S_e は各要素における線形近似された境界面の面積である．式 (7.8) を成分表示すれば，以下のように表せる．

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_t &= \sum_{e=1}^{N_t} \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 \\ 0 & 0 & N_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ N_8 & 0 & 0 \\ 0 & N_8 & 0 \\ 0 & 0 & N_8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_x \\ t_y \\ t_z \end{bmatrix} S_e \\ &= \sum_{e=1}^{N_t} \begin{bmatrix} N_1 t_x \\ N_1 t_y \\ N_1 t_z \\ \vdots \\ N_8 t_x \\ N_8 t_y \\ N_8 t_z \end{bmatrix} S_e \end{aligned} \quad (7.9)$$

式 (7.9) における各節点の重み関数 $N_i (i = 1 \cdots 8)$ は、局所座標系における境界面の重心の座標 (ξ_g, η_g, ζ_g) を代入することにより、次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
 N_1 &= \frac{1}{8}(1 - \xi_g)(1 - \eta_g)(1 - \zeta_g) \\
 N_2 &= \frac{1}{8}(1 + \xi_g)(1 - \eta_g)(1 - \zeta_g) \\
 N_3 &= \frac{1}{8}(1 + \xi_g)(1 + \eta_g)(1 - \zeta_g) \\
 N_4 &= \frac{1}{8}(1 - \xi_g)(1 + \eta_g)(1 - \zeta_g) \\
 N_5 &= \frac{1}{8}(1 - \xi_g)(1 - \eta_g)(1 + \zeta_g) \\
 N_6 &= \frac{1}{8}(1 + \xi_g)(1 - \eta_g)(1 + \zeta_g) \\
 N_7 &= \frac{1}{8}(1 + \xi_g)(1 + \eta_g)(1 + \zeta_g) \\
 N_8 &= \frac{1}{8}(1 - \xi_g)(1 + \eta_g)(1 + \zeta_g)
 \end{aligned} \tag{7.10}$$

第8章 3次元PLIC法による界面捕捉

本章では，3次元PLIC法による界面捕捉について説明する．3次元PLIC法は，(1) 界面の法線ベクトルの計算，(2) 境界面の再構築，(3) 境界面の移流の3つ計算手順に分けることができる．法線ベクトルの計算では，注目する界面セルの周囲の体積率分布から計算する比較的簡単な方法を用いている．境界面の再構築では，従来のPLIC法で用いられることの多かった反復計算を必要とする計算コストの大きい手法でなく，より高速で高精度な直接計算法を用いている．境界面の移流では，アルゴリズムが簡便になる各座標軸方向の移流を別々に行う方法を用いている．

8.1 3次元PLIC法の概要

PLIC法は，各セル内で物質境界面を線形近似してセル境界を横切る立体の体積を計算し，VOF関数を移流することによって，移動境界面を高精度に捕捉する手法である．HirtとNichols[26]により提案されたVOF法(1981)は，移動する物質境界に対する数値解析手法として，これまで幅広く用いられてきた．近年はVOF法に代わって，より少ない格子分割数で高精度な結果が得られるPLIC法の適用が増えつつある．PLIC法は，Youngs[38]による先駆的な2次元PLIC法(1982)に始まり，さらに高精度な2次元PLIC法は1980年代から1990年代にかけて数多く開発されてきた[85][86]．一方，3次元PLIC法は，幾何学的な演算の複雑さから開発・適用事例は多くはなかったが，2000年代に入って，高精度な3次元PLIC法の開発・適用事例が増えている[39]-[45]．

本研究の3次元PLIC法のアルゴリズムは，Youngsが提案した2次元PLIC法(詳細は[87]に詳しい)及びScardovelliとZaleski[88]の提案した計算法に基づいている．PLIC法では，線形近似した物質境界面の方程式を決定するために，平面の法線ベクトルと原点から平面までの距離を求める必要がある．法線ベクトルの計算法には，Chorin[89]，Barth[90]，Swartz[91]などによる方法が挙げられる．本研究では，計算

コストの小さい Youngs の計算法 [87] を採用している．また，原点から平面までの距離は，Kothe ら [85] のように通常は距離に関する 3 次方程式の解を Brent 法 [92] などの反復計算により求める．一方，本研究では Scardovelli と Zaleski [88] が提案した，3 次方程式の解が陽に表された代数式により計算を行うため，反復計算は不要となり計算コストが大幅に軽減される．また，移流項の差分では，アルゴリズムが簡便な direction-split 法を用いている．このように，本研究の 3 次元 PLIC 法のアルゴリズム特徴は，計算コストの少なさと direction-split 法によるアルゴリズムの簡便さにある．

8.2 境界面の再構成

8.2.1 境界面セルの判定

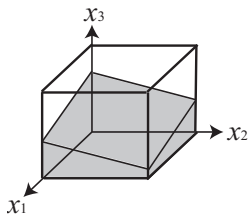


Fig. 8.1: $0 < \phi < 1$

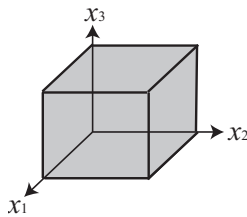


Fig. 8.2: $\phi = 1$

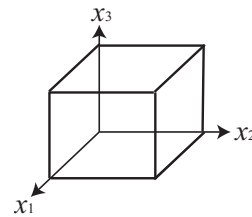


Fig. 8.3: $\phi = 0$

Fig.8.1 のように，物質の境界面が存在するセルを，境界面セルと呼ぶことにする．セルにおける物質の体積率を ϕ としたとき， $0 < \phi < 1$ を満たすセルを境界面セルと判定し，境界面セルのみで境界面を再構成する．実装上は，

$$\varepsilon \leq \phi \leq 1 - \varepsilon \quad (8.1)$$

を満たすセルを境界面セルと判定する． ε には， $\varepsilon = 1.0 \times 10^{-3}$ の値を与えている．

体積率 1 のセル (Fig.8.2) と体積率 0 のセル (Fig.8.3) の場合は，一次風上差分法により体積フラックスの移流計算を行うため，境界面の再構成は不要である．

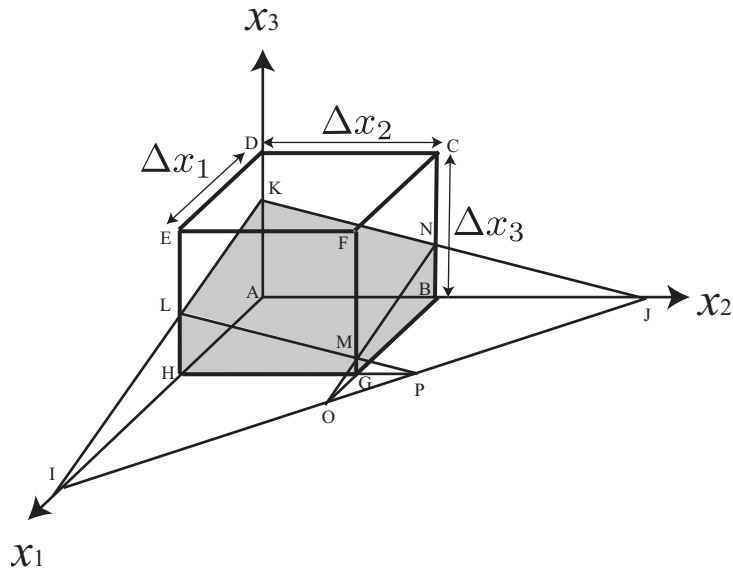


Fig. 8.4: linear interface in each cell

8.2.2 線形近似された境界面の方程式

直交デカルト座標系 (x_1, x_2, x_3) において, Fig.8.4 に示す辺長 Δx_i の直交格子を考える. 線形近似された境界面の法線ベクトルを $n = (n_1, n_2, n_3)$ とすると, 境界面の方程式は

$$n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3 = \alpha \quad (8.2)$$

で与えられる. ここで, α は定数であり, 原点から平面までの距離と関係付けられる¹. 式 (8.2) より, 境界面を再構成するには, 各セルにおいて線形近似された境界面の法線ベクトル n と, 距離定数 α を求める必要があることがわかる.

ここで, 次式のような関数を定義しておく.

$$f(x_1, x_2, x_3) = n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3 - \alpha \quad (8.3)$$

この関数 $f(x_1, x_2, x_3)$ は, 境界面の法線ベクトル方向の領域では $f(x_1, x_2, x_3) > 0$ となり, 一方, 逆向きの領域では $f(x_1, x_2, x_3) < 0$ となる.

¹原点から平面までの距離を d としたとき, 点と平面の距離の公式より, d は次式で与えられる.

$$d = \frac{|\alpha|}{\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}}$$

8.2.3 境界面の法線ベクトルの計算

境界面の法線ベクトル \mathbf{n} は, 外向き方向を正にとった場合, 各セルの体積率 (VOF 関数) ϕ より以下の式で与えられる.

$$\mathbf{n} = -\nabla\phi \quad (8.4)$$

式 (8.4) の体積率勾配の計算法として, 本研究では Youngs の方法 [87] を用いる. 他の計算法として, Chorin[89] (1次精度, 2次元のみ), Barth[90] (1次精度), Swartz[91] (2次精度) によって提案された方法が挙げられる. 一方, Youngs の方法は1次精度で, これらの手法に比べ3倍から5倍ほど低い計算コストで済む手法である [94].

Youngs の方法では, (i, j, k) の位置のセルにおける体積率勾配を以下のように差分近似する.

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_1}\right)_{i,j,k} = \frac{\bar{\phi}_{i+1,j,k} - \bar{\phi}_{i-1,j,k}}{2\Delta x_1} \quad (8.5)$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_2}\right)_{i,j,k} = \frac{\bar{\phi}_{i,j+1,k} - \bar{\phi}_{i,j-1,k}}{2\Delta x_2} \quad (8.6)$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_3}\right)_{i,j,k} = \frac{\bar{\phi}_{i,j,k+1} - \bar{\phi}_{i,j,k-1}}{2\Delta x_3} \quad (8.7)$$

ここで $\bar{\phi}$ は, 次式で定義されるように, セル (i, j, k) に隣接するセルの体積率をパラメータ a, b, c により重みつき平均した体積率である.

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{i+1,j,k} = & [a(\phi_{i+1,j-1,k-1} + \phi_{i+1,j-1,k+1} + \phi_{i+1,j+1,k-1} + \phi_{i+1,j+1,k+1}) \\ & + b(\phi_{i+1,j-1,k} + \phi_{i+1,j+1,k} + \phi_{i+1,j,k-1} + \phi_{i+1,j,k+1}) \\ & + c\phi_{i+1,j,k}] / (4a + 4b + c) \end{aligned} \quad (8.8)$$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{i-1,j,k} = & [a(\phi_{i-1,j-1,k-1} + \phi_{i-1,j-1,k+1} + \phi_{i-1,j+1,k-1} + \phi_{i-1,j+1,k+1}) \\ & + b(\phi_{i-1,j-1,k} + \phi_{i-1,j+1,k} + \phi_{i-1,j,k-1} + \phi_{i-1,j,k+1}) \\ & + c\phi_{i-1,j,k}] / (4a + 4b + c) \end{aligned} \quad (8.9)$$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{i,j+1,k} = & [a(\phi_{i-1,j+1,k-1} + \phi_{i-1,j+1,k+1} + \phi_{i+1,j+1,k-1} + \phi_{i+1,j+1,k+1}) \\ & + b(\phi_{i-1,j+1,k} + \phi_{i+1,j+1,k} + \phi_{i,j+1,k-1} + \phi_{i,j+1,k+1}) \\ & + c\phi_{i,j+1,k}] / (4a + 4b + c) \end{aligned} \quad (8.10)$$

$$\begin{aligned}
\bar{\phi}_{i,j-1,k} &= [a(\phi_{i-1,j-1,k-1} + \phi_{i-1,j-1,k+1} + \phi_{i+1,j-1,k-1} + \phi_{i+1,j-1,k+1}) \\
&\quad + b(\phi_{i-1,j-1,k} + \phi_{i+1,j-1,k} + \phi_{i,j-1,k-1} + \phi_{i,j-1,k+1}) \\
&\quad + c\phi_{i,j-1,k}] / (4a + 4b + c)
\end{aligned} \tag{8.11}$$

$$\begin{aligned}
\bar{\phi}_{i,j,k+1} &= [a(\phi_{i-1,j-1,k+1} + \phi_{i-1,j+1,k+1} + \phi_{i+1,j-1,k+1} + \phi_{i+1,j+1,k+1}) \\
&\quad + b(\phi_{i-1,j,k+1} + \phi_{i+1,j,k+1} + \phi_{i,j-1,k+1} + \phi_{i,j+1,k+1}) \\
&\quad + c\phi_{i,j,k+1}] / (4a + 4b + c)
\end{aligned} \tag{8.12}$$

$$\begin{aligned}
\bar{\phi}_{i,j,k-1} &= [a(\phi_{i-1,j-1,k-1} + \phi_{i-1,j+1,k-1} + \phi_{i+1,j-1,k-1} + \phi_{i+1,j+1,k-1}) \\
&\quad + b(\phi_{i-1,j,k-1} + \phi_{i+1,j,k-1} + \phi_{i,j-1,k-1} + \phi_{i,j+1,k-1}) \\
&\quad + c\phi_{i,j,k-1}] / (4a + 4b + c)
\end{aligned} \tag{8.13}$$

式 (8.8)(8.9)(8.10)(8.11)(8.12)(8.13) からわかるように，Youngs の方法では，セル (i, j, k) の勾配を単なる中央差分法により計算するのではなく，セル (i, j, k) に隣接するセルにステンシルを広く取り，重み付きの平均値で差分近似を行っている．Youngs は，パラメータ a, b, c について次の値を使用している．

$$a = 2, \quad b = 2, \quad c = 4 \tag{8.14}$$

ところで，各パラメータの値が

$$a = 0, \quad b = 0, \quad c = 1 \tag{8.15}$$

の場合は，セル (i, j, k) における体積率勾配は

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right)_{i,j,k} = \frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{2\Delta x_1} \tag{8.16}$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x_2} \right)_{i,j,k} = \frac{\phi_{i,j+1,k} - \phi_{i,j-1,k}}{2\Delta x_2} \tag{8.17}$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x_3} \right)_{i,j,k} = \frac{\phi_{i,j,k+1} - \phi_{i,j,k-1}}{2\Delta x_3} \tag{8.18}$$

となり，中央差分法に一致することがわかる．

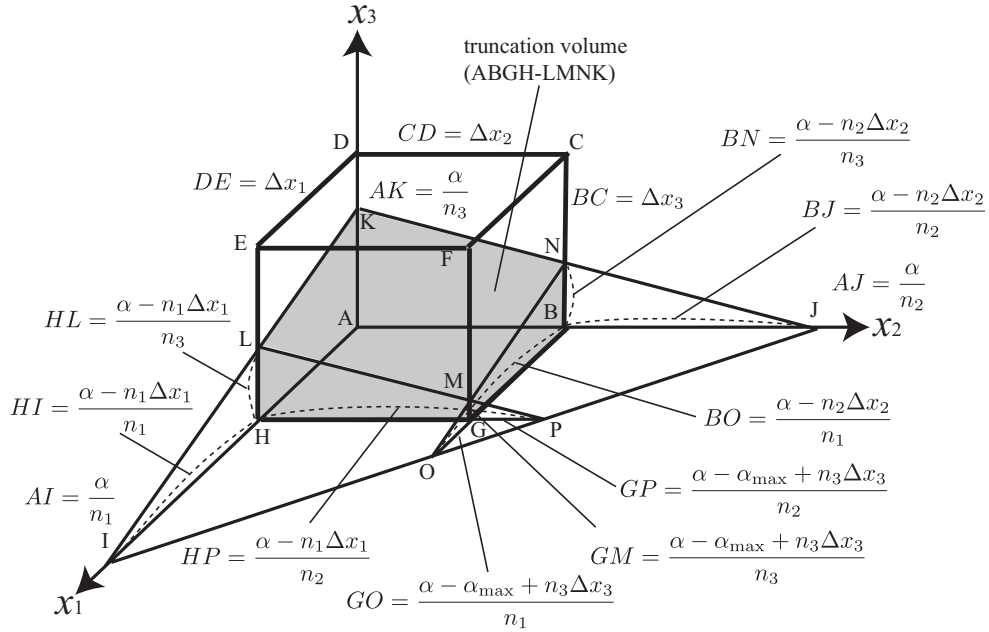


Fig. 8.5: Truncation volume ABGH-LMNK

8.2.4 距離定数の計算

次に、距離定数 α の計算法を説明する。いま、境界面の法線ベクトル n の成分が全て正である場合のみを考える。このとき、Fig.8.5 に示すような辺長 Δx_i の直方体（セル）によって切り取られる立体 (ABGH-LMNK) の体積 V は、以下で与えられる。

$$V = \frac{1}{6n_1n_2n_3} \left[\alpha^3 - \sum_{i=1}^3 F_3(\alpha - n_i\Delta x_i) + \sum_{i=1}^3 F_3(\alpha - \alpha_{\max} + n_i\Delta x_i) \right] \quad (8.19)$$

式 (8.19) において、 α_{\max} と関数 F_n をそれぞれ次式のように定義している。

$$\alpha_{\max} = \sum_{i=1}^3 n_i\Delta x_i \quad (8.20)$$

$$F_n(y) = \begin{cases} y^n & \text{for } y > 0 \\ 0 & \text{for } y \leq 0 \end{cases} \quad (8.21)$$

式 (8.19) の第一項 $\alpha^3/6n_1n_2n_3$ は四面体 $AIIJK$ の体積である。第二項 $\sum_{i=1}^3 F_3(\alpha - n_i\Delta x_i)/6n_1n_2n_3$ は、頂点 I, J, K がセル境界を越えた場合、四面体 $AIIJK$ から取り除かれる四面体の体積である。Fig.8.5 の場合であれば、四面体 $HIPL$, $BOJN$ である。第三項 $\sum_{i=1}^3 F_3(\alpha - \alpha_{\max} + n_i\Delta x_i)/6n_1n_2n_3$ は Fig.8.5 の四面体 $GOPM$ のよ

うに，直線 IJ ， JK ， KI がセル内を通過しない場合に第二項が重複して取り除く四面体の体積である．

ここで，セルの辺長と α_{\max} を正規化した場合を考える．セルの辺長については，

$$\Delta x_i = 1 \quad (8.22)$$

の場合を考える．また， α_{\max} については，平面の方程式 (8.2) の両辺を $\sum_{i=1}^3 n_i$ で割ることにより，

$$\alpha_{\max} = \sum_{i=1}^3 n_i = 1 \quad (8.23)$$

と正規化する．以上の場合，体積 V 及び距離定数 α は以下のような性質を持つ．

- (1) V は距離定数 α の C_1 級関数で，単調に増加する．
- (2) V と α の値の範囲は $[0, 1]$ である．
- (3) V は n_1, n_2, n_3 の順列に対して不変である．
- (4) V と α のグラフ (一例を Fig.8.6 に示す) は，点 $(V, \alpha) = (1/2, 1/2)$ に関して点対称である．

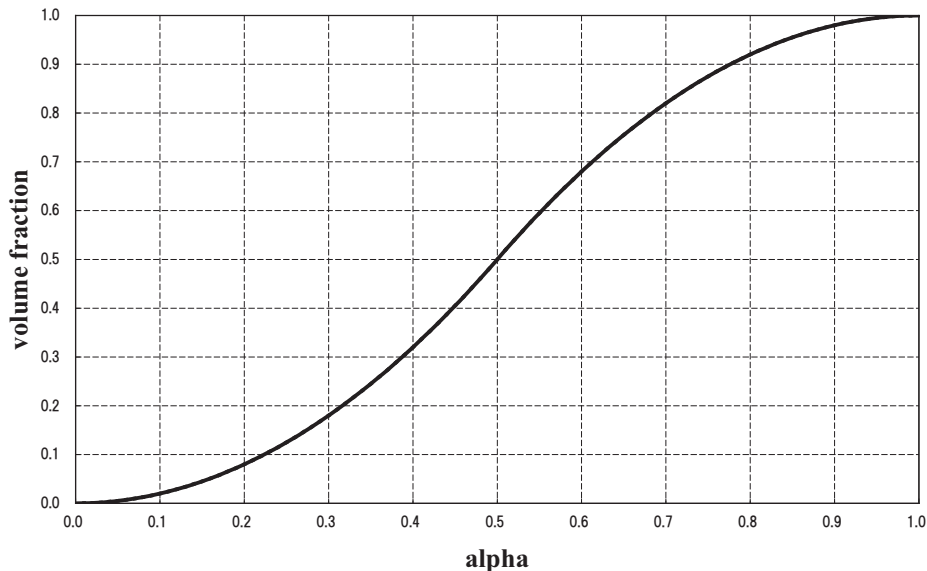


Fig. 8.6: Volume fraction-alpha

性質 (2) より，体積 V と体積率 (VOF 関数) ϕ は一致することがわかる．また，性質 (3) より n_i の順列について以下の場合のみ考えることにする．

$$0 < n_1 \leq n_2 \leq n_3 \quad (8.24)$$

さらに，性質 (4) より， V と α の値の次式の範囲のみを考えればよい．

$$0 \leq V \leq \frac{1}{2} \quad (8.25)$$

$$0 \leq \alpha \leq \frac{1}{2} \quad (8.26)$$

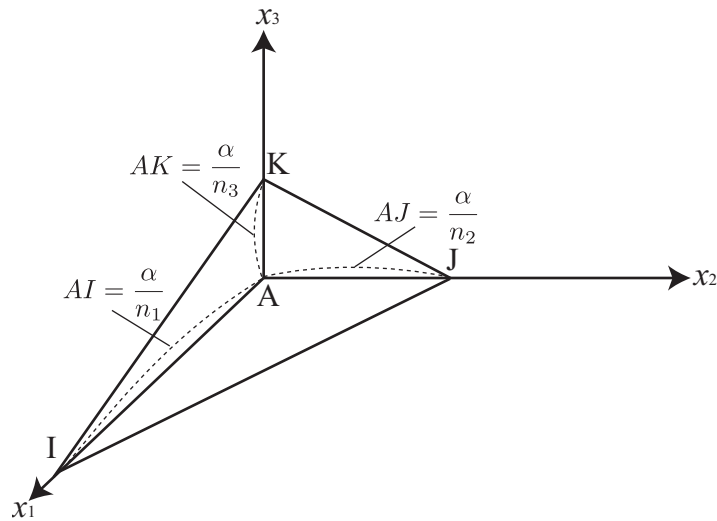


Fig. 8.7: $0 < n_1 \leq n_2 \leq n_3$

ここで，式 (8.22)(8.23) (8.24) が成り立つとき， α を陽な式で表現するために， α の値の範囲により式 (8.19) を場合分けして簡略化する．式 (8.24) が成り立つ場合，四面体 $AIJK$ の各辺長は $AK < AJ < AI$ となることから，四面体 $AIJK$ は Fig.8.7 に示すような立体になる．よって， α の値によって後述するように場合分けすることができる．

(1) $0 \leq \alpha < n_1$

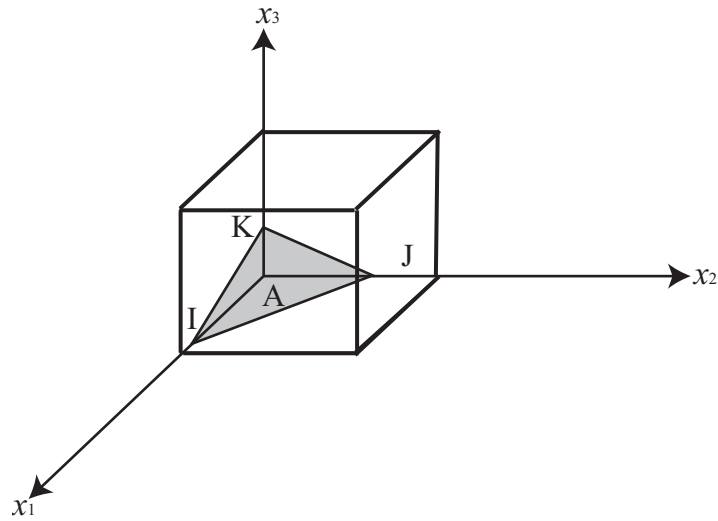


Fig. 8.8: $0 \leq \alpha \leq n_1$

四面体 $AIJK$ が Fig.8.8 のような場合，頂点 I はセル内に位置する．したがって，この場合の α の制約は次式になる．

$$0 \leq \frac{\alpha}{n_1} < 1$$

$$\Leftrightarrow 0 \leq \alpha < n_1 \quad (8.27)$$

式 (8.27) が成り立つ場合，式 (8.19) より体積 V は次式になる．

$$V = \frac{\alpha^3}{6n_1n_2n_3} \quad (8.28)$$

(2) $n_1 \leq \alpha < n_2$

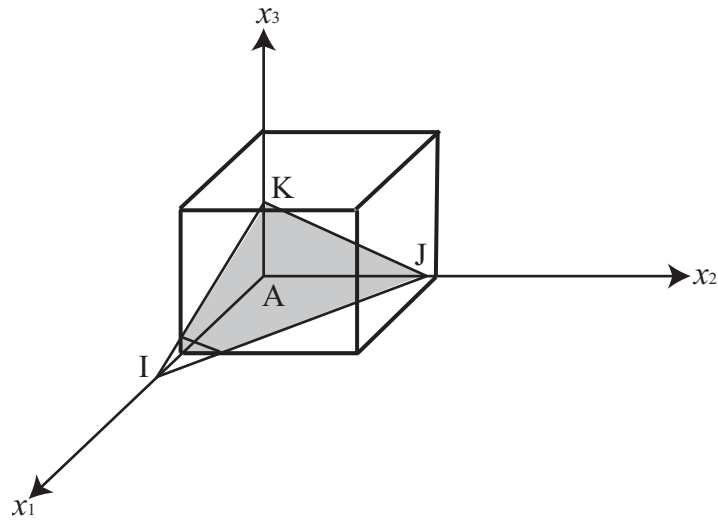


Fig. 8.9: $n_1 \leq \alpha < n_2$

四面体 $AIJK$ が Fig.8.9 のような場合，頂点 I はセル外に位置し，頂点 J, K はセル内に位置する．したがって，この場合の α の制約は次式になる．

$$\begin{cases} 1 \leq \frac{\alpha}{n_1} \\ \frac{\alpha}{n_2} < 1 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow n_1 \leq \alpha < n_2 \tag{8.29}$$

式 (8.29) が成り立つ場合，式 (8.19) より体積 V は次式になる．

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{6n_1n_2n_3} [\alpha^3 - (\alpha - n_1)^3] \\ &= \frac{\alpha(\alpha - n_1)}{2n_2n_3} + \frac{n_1^2}{6n_2n_3} \end{aligned} \tag{8.30}$$

(3) $n_2 \leq \alpha < n$

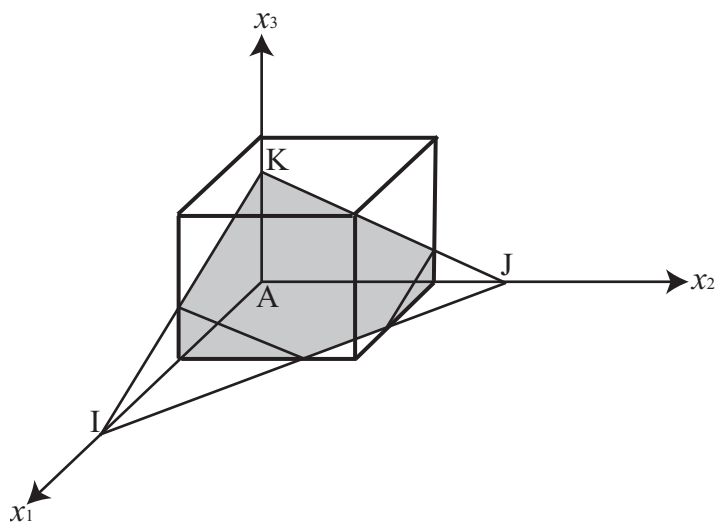


Fig. 8.10: $n_2 \leq \alpha < n$

四面体 $AIJK$ が Fig.8.10 のような場合，頂点 I, J はセル外に，頂点 K はセル内に位置し，直線 IJ はセル内を通過している．したがって，この場合の α の制約は次式になる．

$$\begin{cases} 1 \leq \frac{\alpha}{n_2} \\ \frac{\alpha}{n_3} < 1 \\ n_1 + n_2 - \alpha > 0 \end{cases} \Leftrightarrow n_2 \leq \alpha < n \quad (8.31)$$

ここで n は， $n_1 + n_2$ と n_3 のうち小さい方の値であり，次式により定義する．

$$n_{12} = n_1 + n_2 \quad (8.32)$$

$$n = \min(n_{12}, n_3) \quad (8.33)$$

式 (8.31) が成り立つ場合，式 (8.19) より体積 V は次式になる．

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{6n_1n_2n_3} [\alpha^3 - (\alpha - n_1)^3 - (\alpha - n_2)^3] \\ &= \frac{\alpha^2(3n_{12} - \alpha) + n_1^2(n_1 - 3\alpha) + n_2^2(n_2 - 3\alpha)}{6n_1n_2n_3} \end{aligned} \quad (8.34)$$

(4) $n \leq \alpha \leq 1/2$

$n \leq \alpha \leq 1/2$ の場合は、以下の 2 通りの場合が考えられる。

(4-1) $n_3 \leq \alpha \leq 1/2$

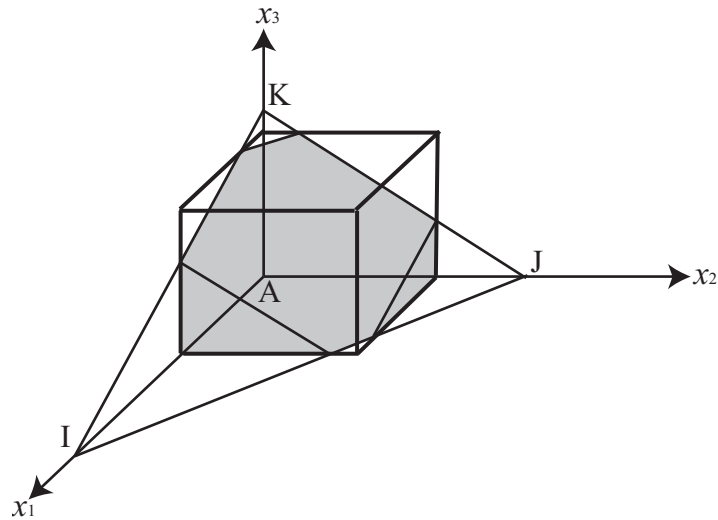


Fig. 8.11: $n_3 \leq \alpha \leq 1/2$

$n_3 \leq \alpha \leq 1/2$ が成り立つ場合、四面体 $AIJK$ は Fig.8.11 のように、頂点 I, J, K はセル外に位置する。また、直線 IJ はセル内を通過する。なぜなら、この場合の α の制約は次式になるためである。

$$\begin{cases} 1 \leq \frac{\alpha}{n_3} \\ n_3 \leq n_1 + n_2 \end{cases} \Leftrightarrow n_3 \leq \alpha \leq \frac{1}{2} \quad (8.35)$$

ここで、 $n_1 + n_2$ の値の範囲について考える。 $n_3 \leq n_1 + n_2$ と $n_1 + n_2 + n_3 = 1$ が成り立つことにより、

$$\begin{aligned} 1 - (n_1 + n_2) &\leq n_1 + n_2 \\ \frac{1}{2} &\leq n_1 + n_2 \end{aligned} \quad (8.36)$$

となる。いま、 $0 \leq \alpha \leq 1/2$ の範囲を考えているため、 $n_1 + n_2 \leq \alpha$ については考えなくてよいことになる。よって、式 (8.35) が成り立つ場合、式 (8.19) より体積 V は

次式になる .

$$\begin{aligned}
 V &= \frac{1}{6n_1n_2n_3} [\alpha^3 - (\alpha - n_1)^3 - (\alpha - n_2)^3 - (\alpha - n_3)^3] \\
 &= \frac{\alpha^2(3 - 2\alpha) + n_1^2(n_1 - 3\alpha) + n_2^2(n_2 - 3\alpha) + n_3^2(n_3 - 3\alpha)}{6n_1n_2n_3}
 \end{aligned}
 \tag{8.37}$$

(4-2) $n_{12} \leq \alpha \leq 1/2$

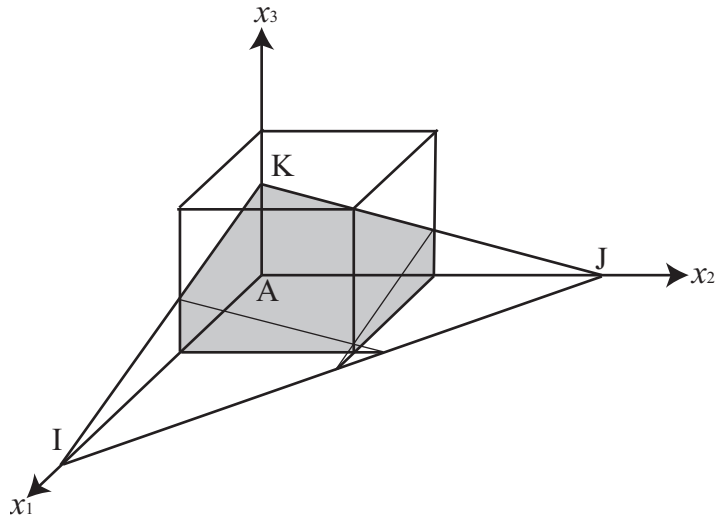


Fig. 8.12: $n_{12} \leq \alpha \leq 1/2$

$n_{12} \leq \alpha \leq 1/2$ が成り立つ場合，四面体 $AIJK$ が Fig.8.12 のように，頂点 I, J はセル外に，頂点 K はセル内に位置する．さらに，直線 IJ はセル外を通過する．なぜなら，この場合の α の制約は次式になるためである．

$$\begin{cases} n_1 + n_2 - \alpha \leq 0 \\ n_1 + n_2 \leq n_3 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow n_{12} \leq \alpha \leq \frac{1}{2}
 \tag{8.38}$$

ここで， n_3 の値の範囲について考える． $n_1 + n_2 \leq n_3$ と $n_1 + n_2 + n_3 = 1$ が成り立つことにより，

$$\begin{aligned}
 1 - n_3 &\leq n_3 \\
 \frac{1}{2} &\leq n_3
 \end{aligned}
 \tag{8.39}$$

となる．いま， $0 \leq \alpha \leq 1/2$ の範囲を考えているため， $n_3 \leq \alpha$ については考えなくてよいことになる．したがって，式 (8.38) が成り立つ場合，式 (8.19) より体積 V は次式になる．

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{6n_1n_2n_3} [\alpha^3 - (\alpha - n_1)^3 - (\alpha - n_2)^3 + (\alpha - n_1 - n_2)^3] \\ &= \frac{2\alpha - n_{12}}{2n_3} \end{aligned} \quad (8.40)$$

以上の体積 V についての場合分け (1), (2), (3), (4) を以下にまとめる．

$$V = \frac{\alpha^3}{6n_1n_2n_3} \quad \text{for } 0 \leq \alpha < n_1 \quad (8.41)$$

$$V = \frac{\alpha(\alpha - n_1)}{2n_2n_3} + \frac{n_1^2}{6n_2n_3} \quad \text{for } n_1 \leq \alpha < n_2 \quad (8.42)$$

$$V = \frac{\alpha^2(3n_{12} - \alpha) + n_1^2(n_1 - 3\alpha) + n_2^2(n_2 - 3\alpha)}{6n_1n_2n_3} \quad \text{for } n_2 \leq \alpha < n \quad (8.43)$$

$$V = \frac{\alpha^2(3 - 2\alpha) + n_1^2(n_1 - 3\alpha) + n_2^2(n_2 - 3\alpha) + n_3^2(n_3 - 3\alpha)}{6n_1n_2n_3} \quad \text{for } n_3 \leq \alpha \leq 1/2 \quad (8.44)$$

$$V = \frac{2\alpha - n_{12}}{2n_3} \quad \text{for } n_{12} \leq \alpha \leq 1/2 \quad (8.45)$$

以上の式 (8.41) ~ (8.45) を変形することより， α は以下のように表せる．ただし， $0 \leq \alpha \leq 1/2$ であることを考慮している．

$$\alpha = \sqrt[3]{6n_1n_2n_3V} \quad \text{for } 0 \leq V < V_1 \quad (8.46)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(n_1 + \sqrt{n_1^2 + 8n_2n_3(V - V_1)} \right) \quad \text{for } V_1 \leq V < V_2 \quad (8.47)$$

$$P(\alpha) = a'_3\alpha^3 + a'_2\alpha^2 + a'_1\alpha + a'_0 = 0 \quad \text{for } V_2 \leq V < V_3 \quad (8.48)$$

$$P(\alpha) = a''_3\alpha^3 + a''_2\alpha^2 + a''_1\alpha + a''_0 = 0 \quad \text{for } V_{31} \leq V \leq 1/2 \quad (8.49)$$

$$\alpha = n_3V + \frac{n_{12}}{2} \quad \text{for } V_{32} \leq V \leq 1/2 \quad (8.50)$$

式 (8.46) ~ (8.50) において， $V_1, V_2, V_{31}, V_{32}, V_3$ を以下のように定義する．

$$V_1 = V|_{\alpha=n_1} = \frac{n_1^2}{\max(6n_2n_3, \varepsilon)} \quad (8.51)$$

$$V_2 = V|_{\alpha=n_2} = V_1 + (n_2 - n_1)/2n_3 \quad (8.52)$$

$$V_{31} = V|_{\alpha=n_3} = [n_3^2(3n_{12} - n_3) + n_1^2(n_1 - 3n_3) + n_2^2(n_2 - 3n_3)] / 6n_1n_2n_3 \quad (8.53)$$

$$V_{32} = V|_{\alpha=n_{12}} = n_{12}/2n_3 \quad (8.54)$$

$$V_3 = V|_{\alpha=n} = \min(V_{31}, V_{32}) \quad (8.55)$$

ここで V_1 は, $n_1 = n_2 = 0$ の場合の零割りを避けるための $n_1^2/6n_2n_3$ の実装上の近似式である. ε には零でない, 十分に小さな値を与える. さらに, α に関する 3 次方程式 (8.48)(8.49) の係数はそれぞれ以下ようになる.

$$a'_3 = -1 \quad (8.56)$$

$$a'_2 = 3n_{12} \quad (8.57)$$

$$a'_1 = -3(n_1^2 + n_2^2) \quad (8.58)$$

$$a'_0 = n_1^3 + n_2^3 - 6n_1n_2n_3V \quad (8.59)$$

$$a''_3 = -2 \quad (8.60)$$

$$a''_2 = 3 \quad (8.61)$$

$$a''_1 = -3(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (8.62)$$

$$a''_0 = n_1^3 + n_2^3 + n_3^3 - 6n_1n_2n_3V \quad (8.63)$$

α に関する 3 次方程式 (8.48)(8.49) には, 3 つの実数解が存在し, 求めるべき解は 2 番目に大きい解になる [88]. この 3 次方程式の方程式の厳密解は, 以下のようにして求められる [95]. まず, $a_3 = 1$ とするために 3 次方程式 (8.48)(8.49) の両辺を a_3 で割り, 新たに p_0, q_0 を以下のように定義する.

$$p_0 = \frac{a_1}{3} - \frac{a_2^2}{9} \quad (8.64)$$

$$q_0 = \frac{a_1a_2 - 3a_0}{6} - \frac{a_2^3}{27} \quad (8.65)$$

さらに, θ を次式で定義する.

$$\theta = \frac{1}{3} \cos^{-1} \left(\frac{q_0}{\sqrt{-p_0^3}} \right) \quad (8.66)$$

以上により, 求めるべき解は次式で与えられる.

$$\alpha = \sqrt{-p_0}(\sqrt{3} \sin \theta - \cos \theta) - \frac{a_2}{3} \quad (8.67)$$

8.2.5 境界面の場合分け

前節では, 境界面の法線ベクトル n の各成分が次式を満たす場合の α の計算法を説明した.

$$0 \leq n_1 \leq n_2 \leq n_3 \quad (8.68)$$

その他の場合は，式 (8.68) の場合に変換して α を求める．まず，Fig.8.13 に示すように， n_i の正負により 8 通りの境界面が考えられる．さらに，Fig.8.14 に示すように， n_i の絶対値の順列で 6 通りの境界面がある．つまり，法線ベクトルの成分の値により，合計 48 通りの境界面が考えられる．

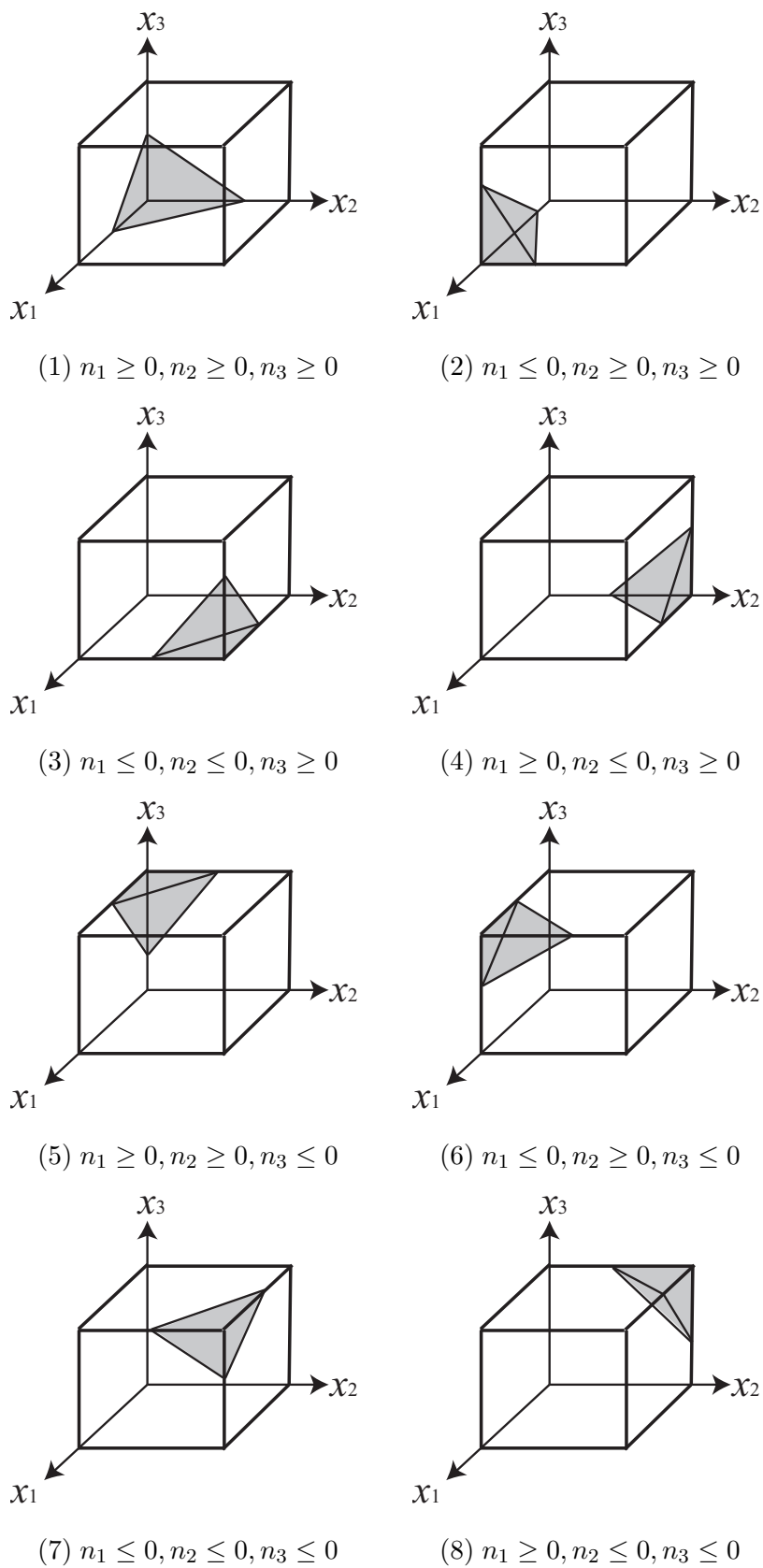


Fig. 8.13: Eight kinds of interfaces

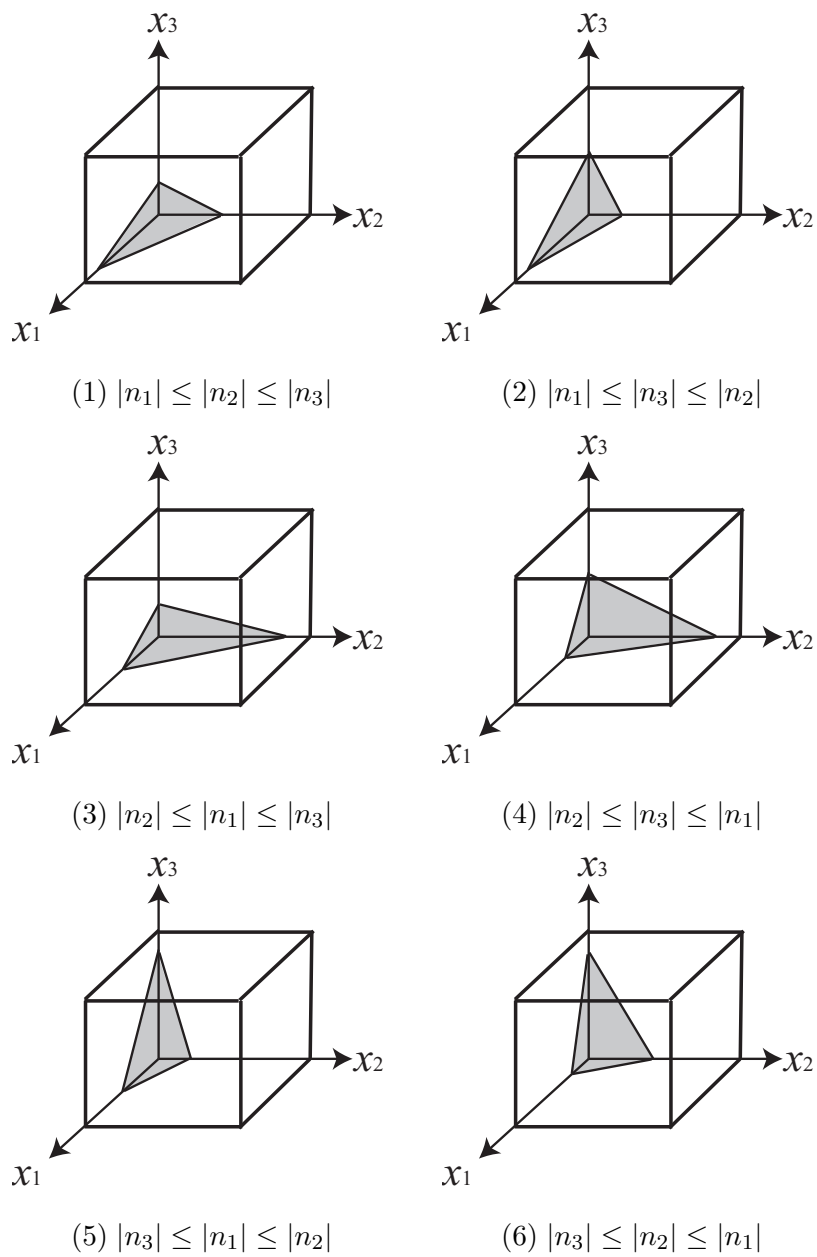


Fig. 8.14: Six kinds of interfaces

8.3 境界面の移流

8.3.1 移流方程式の離散化

前節までで、境界面の再構築について説明した。本節では、再構築した境界面の移流計算の方法について説明する。体積率（VOF 関数） ϕ の移流方程式は、

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \phi = 0 \quad (8.69)$$

で与えられる。連続の式 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ が成り立つことにより、発散型に変形する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \phi) = 0 \quad (8.70)$$

ここで、体積率のフラックス f を

$$\mathbf{f} = \mathbf{v} \phi \quad (8.71)$$

とおくと、移流方程式は

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} + \frac{\partial f_3}{\partial x_3} = 0 \quad (8.72)$$

と表せる。式 (8.72) を時間方向に前進差分近似すると

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t \frac{\partial f_1^n}{\partial x_1} - \Delta t \frac{\partial f_2^n}{\partial x_2} - \Delta t \frac{\partial f_3^n}{\partial x_3} \quad (8.73)$$

となる。さらに空間方向に差分近似することにより、

$$\phi_{i,j}^{n+1} = \phi_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_1} \left(f_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - f_{i-\frac{1}{2},j,k}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x_2} \left(f_{i,j+\frac{1}{2},k}^n - f_{i,j-\frac{1}{2},k}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x_3} \left(f_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - f_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \right) \quad (8.74)$$

となる。さらに、境界面が 1 ステップでセル境界を横切る体積（体積フラックス）を求めて、移流計算を行うために、式 (8.74) を次式のように変形する。

$$\begin{aligned} \phi_{i,j}^{n+1} = \phi_{i,j}^n & - \frac{\Delta V_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - \Delta V_{i-\frac{1}{2},j,k}^n}{V_{i,j,k}} - \frac{\Delta V_{i,j+\frac{1}{2},k}^n - \Delta V_{i,j-\frac{1}{2},k}^n}{V_{i,j,k}} \\ & - \frac{\Delta V_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - \Delta V_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{V_{i,j,k}} \end{aligned} \quad (8.75)$$

式 (8.75) において、 $V_{i,j,k}$ はセルの体積であり、次式で定義される。

$$V_{i,j,k} = \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3 \quad (8.76)$$

また，体積フラックス ΔV はそれぞれ以下のように定義される．

$$\Delta V_{i+\frac{1}{2},j,k}^n = f_{i+\frac{1}{2},j,k}^n \Delta x_2 \Delta x_3 \Delta t \quad (8.77)$$

$$\Delta V_{i-\frac{1}{2},j,k}^n = f_{i-\frac{1}{2},j,k}^n \Delta x_2 \Delta x_3 \Delta t \quad (8.78)$$

$$\Delta V_{i,j+\frac{1}{2},k}^n = f_{i,j+\frac{1}{2},k}^n \Delta x_1 \Delta x_3 \Delta t \quad (8.79)$$

$$\Delta V_{i,j-\frac{1}{2},k}^n = f_{i,j-\frac{1}{2},k}^n \Delta x_1 \Delta x_3 \Delta t \quad (8.80)$$

$$\Delta V_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = f_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta t \quad (8.81)$$

$$\Delta V_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n = f_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta t \quad (8.82)$$

さらに，アルゴリズムの簡便さを考慮して，以下のように式 (8.75) を方向分離して計算する．

$$\phi_{i,j,k}^* = \phi_{i,j,k}^n - \frac{\Delta V_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - \Delta V_{i-\frac{1}{2},j,k}^n}{V_{i,j,k}} \quad (8.83)$$

$$\phi_{i,j,k}^{**} = \phi_{i,j,k}^* - \frac{\Delta V_{i,j+\frac{1}{2},k}^* - \Delta V_{i,j-\frac{1}{2},k}^*}{V_{i,j,k}} \quad (8.84)$$

$$\phi_{i,j,k}^{n+1} = \phi_{i,j,k}^{**} - \frac{\Delta V_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{**} - \Delta V_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{**}}{V_{i,j,k}} \quad (8.85)$$

8.3.2 体積フラックスの計算

はじめに全てのセルにおいて1次風上差分法により体積フラックスを計算する．次に，境界面セルにおいて式 (8.41) ~ (8.45) を利用して体積フラックスを再計算する．その際，セルから流出する方向の体積フラックスの場合のみ，1次風上差分法により計算した体積フラックスを更新する．

第9章 数値解析例

本章では、種々の数値解析例により、本研究の提案手法の妥当性を検証し、柔らかい高分子材料の設計実務における有効性を示す。9.1節では、アクリル系粘着剤の一軸引張試験の数値解析を行うことで、本研究で提案する温度依存性を考慮した粘性-超弾性体の定式化の妥当性を検証する。9.2節では、粘着剤や樹脂の衝撃吸収性能評価のために行われる鋼球衝突試験の数値解析を行うことで、本研究の提案手法の実務的解析における有効性を示す。9.3節では、固体平面上における粘性-超弾性体の自重変形解析を行い、異種材料界面における不連続性のモデル化の妥当性を2次元問題で検証する。9.4節では、異種材料界面における不連続性のモデル化の妥当性を3次元問題で検証する。9.5節では、異種材料界面の不連続モデルを用いて、Bステージ樹脂による凹凸面の包埋挙動の解析を行い、Bステージ樹脂の製品設計における有効性を示す。

9.1 一軸引張試験の2次元解析

9.1.1 数値解析モデル

実験では、アクリル系粘着剤を直径 1.6mm、高さ 30mm の円柱形状に加工したサンプルを作成し、サンプル上部 10mm と下部 10mm をチャックで固定し、サンプル中部 10mm の領域を引っ張った。そこでシミュレーションでは、Fig.9.1 に示すように、粘着剤サンプルを2次元 1/4 モデルでモデル化する。解析領域を x 方向に 66 分割、 y 方向に 600 分割する。境界条件としては、上面以外は slip wall とし、チャックを模擬した物質 (Fig.9.1 の青色の領域) を上面から所定の速度で流出させることで、チャックによる引張を表現する。

粘着剤の粘性-超弾性に関する材料パラメータについては、20°C のアクリル系粘着剤の一軸引張試験 (引張速度 500mm/min, 50mm/min, 5mm/min) により得られた

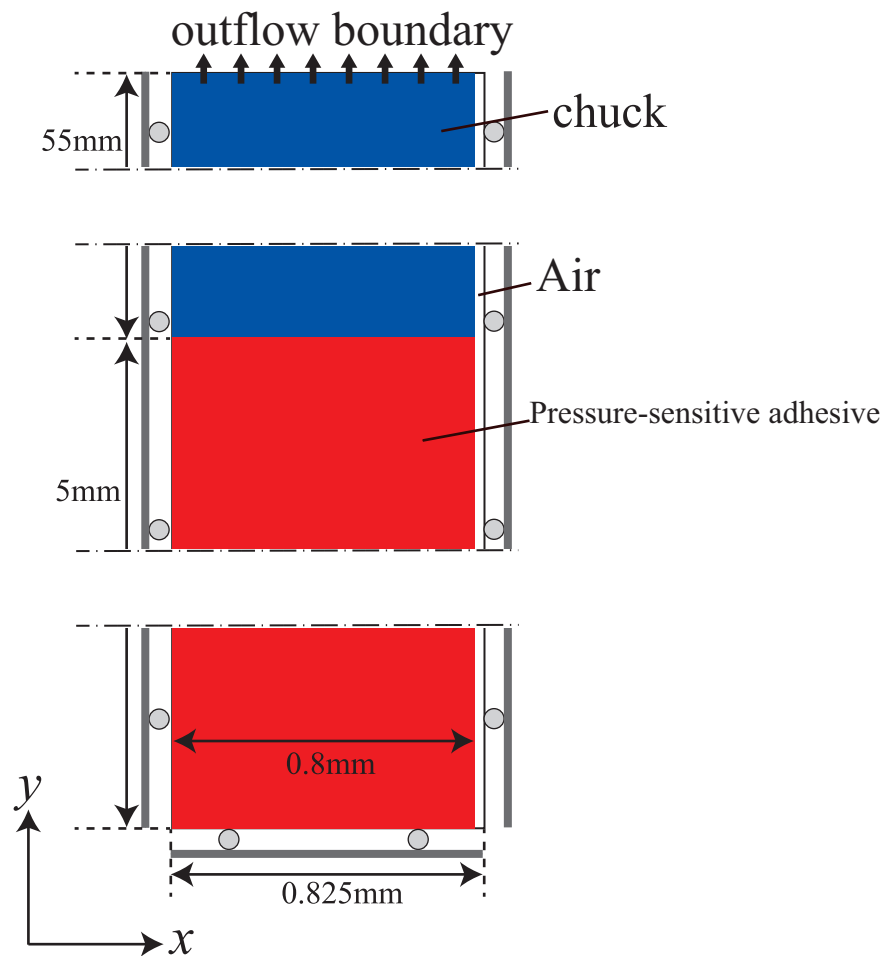


Fig. 9.1: Computational model of uniaxial tension

応力ひずみ曲線から最小二乗法を用いて同定した．山下-川端モデル(4.24)を用いた場合の材料パラメータを Table 9.1 に，本研究で仮定したモデル(4.27)を用いた場合の材料パラメータを Table 9.2 にそれぞれ示す．粘着剤の質量密度は 1000kg/m^3 とする．次に温度依存性のパラメータ $d_1[-]$ と $d_2[^\circ\text{C}]$ の同定について述べる．アクリル系粘着剤の温度を -20°C , 0°C , 20°C , 40°C とした各場合で応力緩和試験を実施し，各温度における温度-時間換算因子の値を求めた．Fig.9.2 に示すようにこの離散値を WLF 則で近似すると， $d_1 = 12.2$, $d_2 = 120^\circ\text{C}$ となる．なお，基準温度 θ_r を 0°C とした．WLF 則が成立する温度範囲は，ガラス転移温度の上約 100°C までとされている [64]．すなわち，解析対象とするアクリル系粘着剤のガラス転移温度が -50°C であることから，WLF 則が成立する温度範囲は，概ね $-50^\circ\text{C} < \theta < 50^\circ\text{C}$ の範囲であるといえる．Fig.9.2 より温度-時間換算因子 $a(\theta)$ は単調に減少していることがわかる．つまり，粘着剤の温度 θ が高くなるほど緩和時間 τ が短くなり，応力緩和が生じ

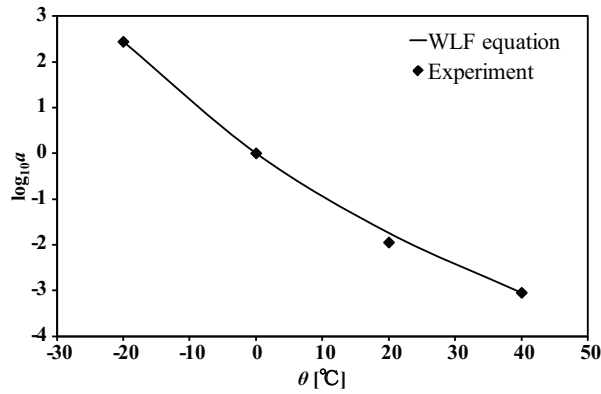


Fig. 9.2: Time-temperature shift factor

Table 9.1: Values of the material constants for Yamashita-Kawabata model

hyperelastic parameters			
c_1 [Pa]		2.32×10^1	
c_2 [Pa]		1.00×10^{-5}	
c_3 [Pa]		6.80×10^{-3}	
q [-]		1.76	
viscous parameters			
β_1^∞ [-]	1.00	τ_1 [s]	1.00
β_2^∞ [-]	5.19×10^2	τ_2 [s]	1.00×10^1
β_3^∞ [-]	1.00	τ_3 [s]	5.00×10^1
β_4^∞ [-]	5.62×10^2	τ_4 [s]	1.00×10^2
β_5^∞ [-]	1.00	τ_5 [s]	1.00×10^3

やすいことがわかる．一方，チャックを模擬した物質については neo-Hooke 体を仮定する．すなわち， c_1 以外の超弾性パラメータを零とし，十分に硬く変形しない物質とするため $c_1 = 10^{10}$ Pa を与え，質量密度を 1000 kg/m^3 とする．固体の周囲の空気はニュートン流体としてモデル化し，質量密度 1.205 kg/m^3 ，粘性係数 $1.82 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ を与える．これらの値は 20 の空気の物性である．

Table 9.2: Values of the material constants for modified Yamashita-Kawabata model

hyperelastic parameters			
c_1 [Pa]	5.00×10^3		
c_2 [Pa]	-2.89×10^1		
c_3 [Pa]	4.88×10^{-1}		
c_4 [Pa]	1.60		
q [-]	4.19×10^{-7}		
r [-]	1.15		
viscous parameters			
β_1^∞ [-]	1.00	τ_1 [s]	1.00×10^{-5}
β_2^∞ [-]	1.00	τ_2 [s]	1.00×10^{-5}
β_3^∞ [-]	1.10	τ_3 [s]	1.00×10^{-5}
β_4^∞ [-]	5.40	τ_4 [s]	4.00×10^{-1}
β_5^∞ [-]	1.70	τ_5 [s]	1.70×10^1
β_6^∞ [-]	2.70	τ_6 [s]	1.00×10^2

9.1.2 引張速度を変えた場合の結果

まず，粘着剤の温度を 20°C に設定し，引張速度を $500\text{mm}/\text{min}$, $50\text{mm}/\text{min}$, $5\text{mm}/\text{min}$ とした場合の応力ひずみ曲線について，数値解析結果と実験結果を Fig.9.3, Fig.9.4 に示す．数値解析結果の公称応力は，解析領域下面の有限要素の Cauchy 応力テンソルの yy 成分値に粘着剤の断面積（2次元では長さ）を乗じて荷重を求め，その荷重を初期断面積で除して算出した．ここで，実験値と数値解の誤差を定量的に議論するために，次式で定義される誤差 ε を導入する．

$$\varepsilon = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \frac{|\sigma_i^{\text{exp.}} - \sigma_i^{\text{comp.}}|}{\sigma_i^{\text{exp.}}} \quad (9.1)$$

式 (9.1) において， N_d は実験値の数， σ は公称応力の引張方向成分 (yy 成分) である．Fig.9.3 はひずみエネルギー関数に山下-川端モデル (4.24) を用いた場合の結果であり，誤差は $\varepsilon = 22.2\%$ となった．一方，Fig.9.4 は本研究で仮定したひずみエネルギー関数 (4.27) を用いた場合の結果であり，誤差は $\varepsilon = 4.76\%$ と減少し，本研究で仮定し

たひずみエネルギー関数 (4.27) の有効性を示すことができた。さらに，Fig.9.4 より，本手法によって粘性によるひずみ速度依存性が精度良く再現されていることが確認できる。

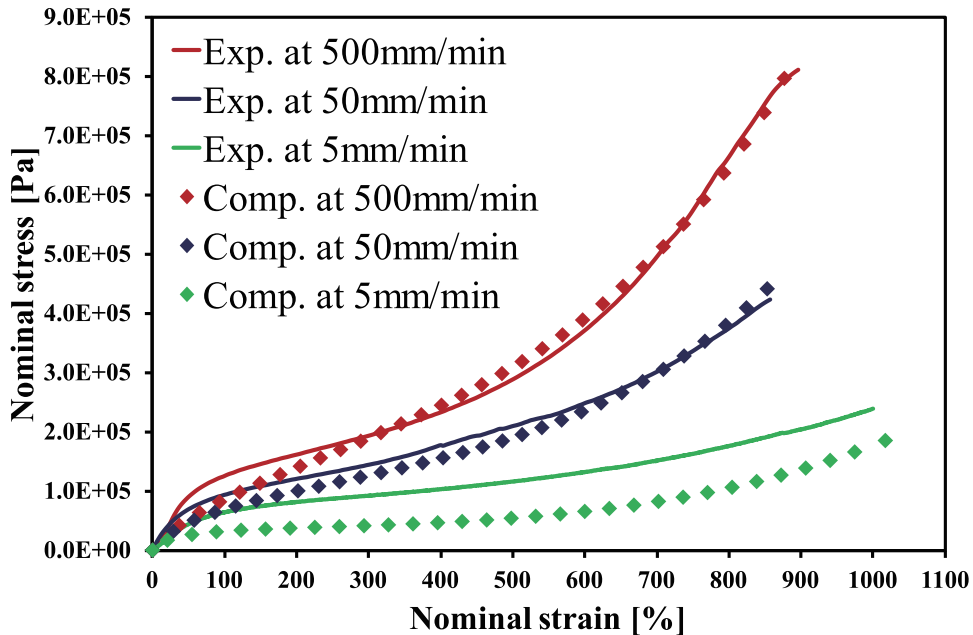


Fig. 9.3: Comparison between the experimental and computational results of uniaxial tension tests at a constant temperature (20°C) with Yamashita-Kawabata model

9.1.3 粘着剤温度を変えた場合の結果

次に，引張速度を 50mm/min に固定し，粘着剤の温度を 0°C, 20°C, 40°C とした場合の応力ひずみ曲線について，数値解析結果と実験結果を Fig.9.5, Fig.9.6 に示す。Fig.9.5 は山下-川端モデル (9.5) を用いた場合の結果であり，誤差は $\varepsilon = 40.1\%$ となった。一方，Fig.9.6 は本研究で仮定したひずみエネルギー関数 (4.27) を用いた場合の結果である。誤差は $\varepsilon = 27.0\%$ と減少し，本研究で仮定したひずみエネルギー関数 (4.27) の有効性を示すことができた。特に，室温以上の温度領域 (20°C, 40°C) では温度依存性を精度良く再現できているといえる。ただし，粘着剤の温度が 0°C の場合の数値解の誤差が大きく，低温領域の解析精度を向上させるのは今後の課題である。

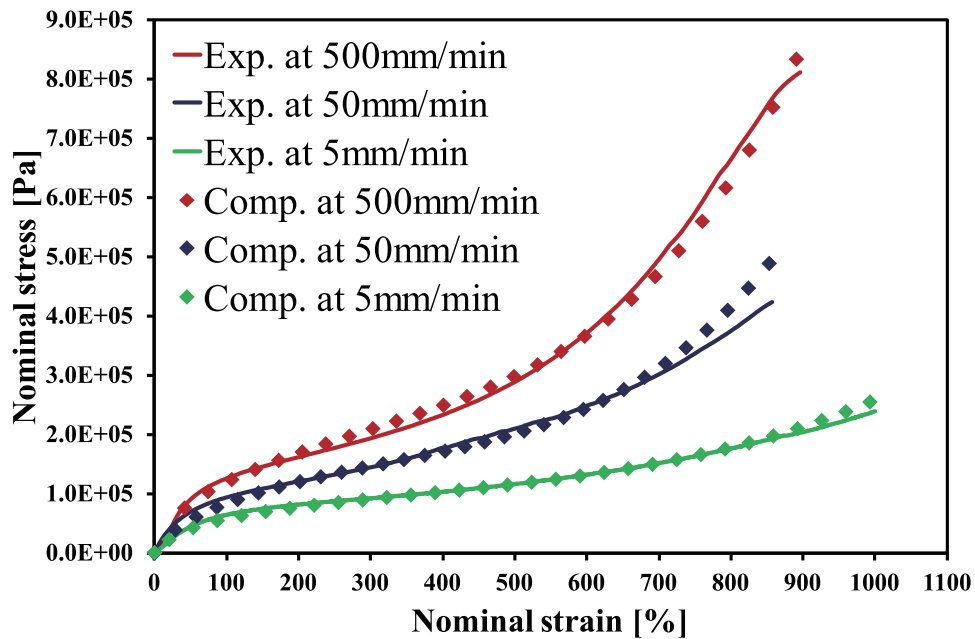


Fig. 9.4: Comparison between the experimental and computational results of uniaxial tension tests at a constant temperature (20°C) with modified Yamashita-Kawabata model

9.1.4 変形形状

最後に、数値解析における物体の変形形状を確認する。Fig.9.7は(a)から(c)に示す公称ひずみにおける物体の変形形状を示したものであり、VOF関数値が0.5の等数値面を物質界面として描いている。青色の領域はチャックを模擬した物体、赤色の領域は粘着剤である。なお、解析対象とする材料が y 方向に非常に長いため、Fig.9.7ではチャックの上部を省略して図示している。Fig.9.7より、チャックで固定された近傍で粘着剤のくびれが再現されており、大変形領域でもメッシュが破綻することなく解析できていることがわかる。

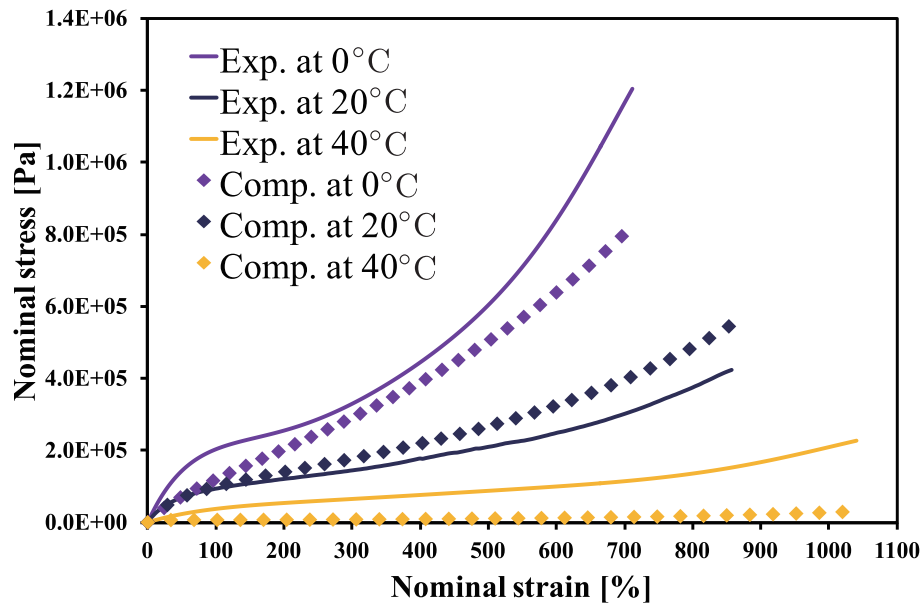


Fig. 9.5: Comparison between the experimental and computational results of uniaxial tension tests at a constant tensile speed (50mm/min) with Yamashita-Kawabata model

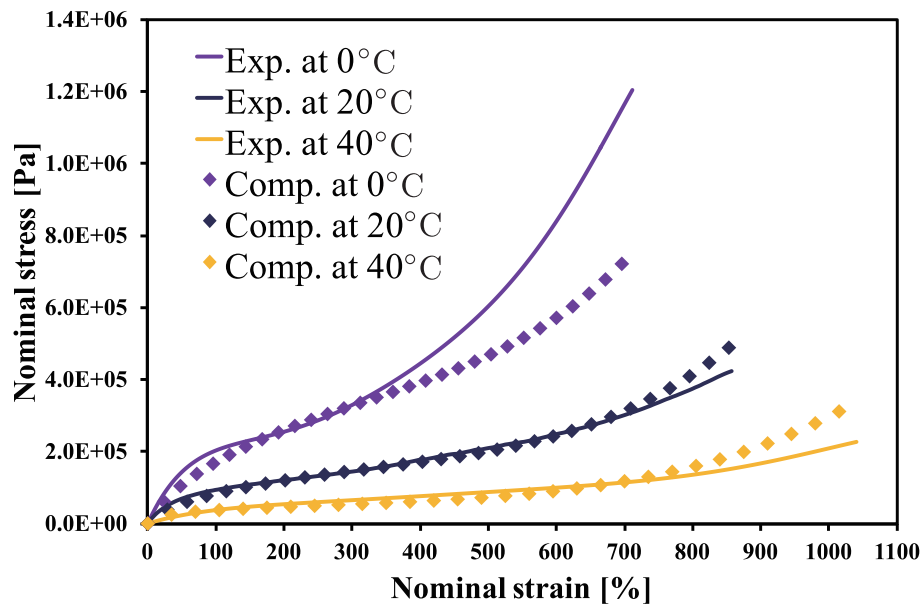


Fig. 9.6: Comparison between the experimental and computational results of uniaxial tension tests at a constant tensile speed (50mm/min) with modified Yamashita-Kawabata model

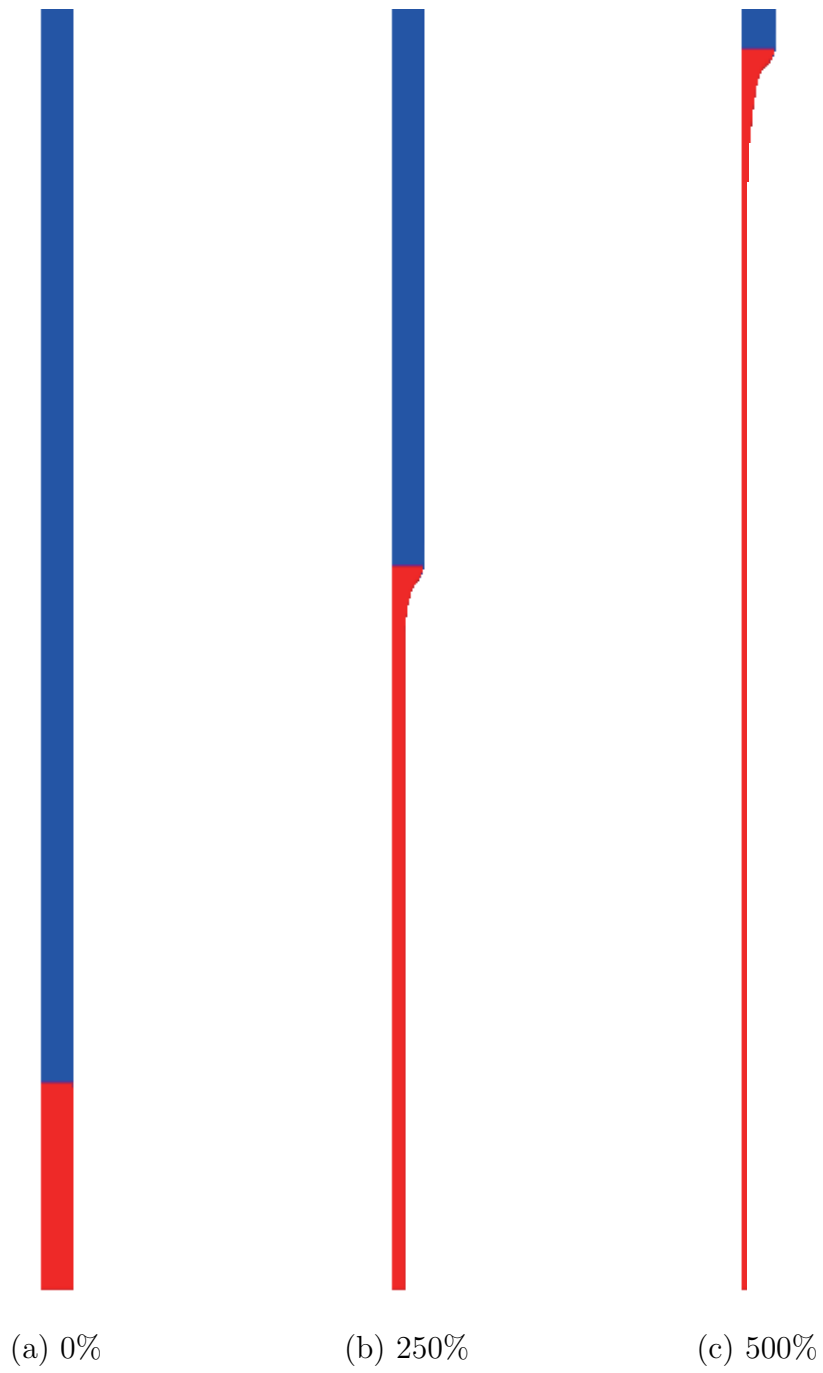


Fig. 9.7: Uniaxial tensile deformation of pressure-sensitive adhesive

9.2 鋼球衝突試験の3次元解析

次の問題は鋼球-粘着剤の衝突試験である。近年は、粘着剤が電子機器の部材の接合に用いられることも多くなっており、衝撃吸収性能評価のためにこのような衝突試験の数値解析は実用上重要である。

9.2.1 鋼球衝突試験の概略

まず実験の概略を説明する。図9.8に示すように、自由落下させた直径20mmのステンレス製の鋼球を、 $5\text{mm} \times 40\text{mm} \times 40\text{mm}$ の直方体形状のアクリル系粘着剤の上部中央点に衝突させた。落下高さは0.5m、1.0m、1.5mの3水準であり、図9.8において粘着剤と底面のアルミ板は接着した状態になっている。そして高速度カメラで撮影した動画を解析することにより、粘着剤の中央点の変位を計測した。

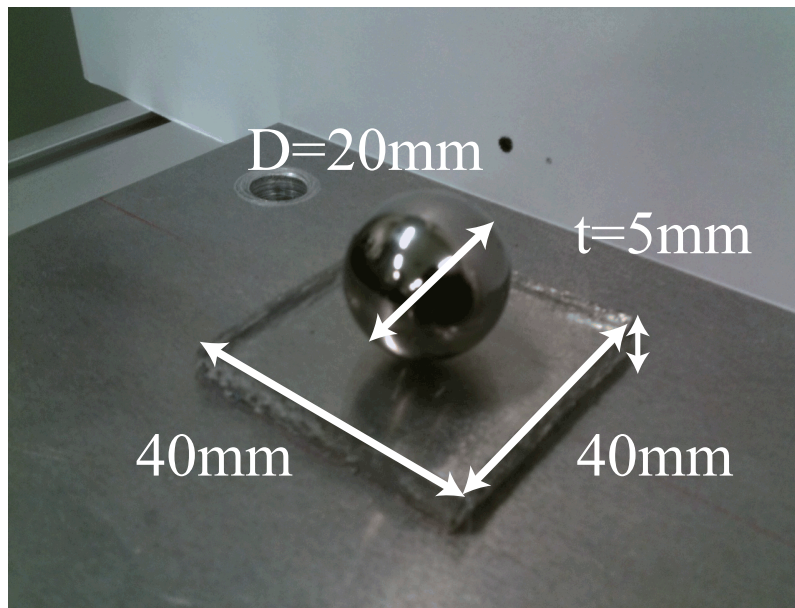


Fig. 9.8: Experimental system of steel ball impact test

9.2.2 数値解析モデル

次に数値解析モデルについて説明する。図9.9にモデルの幾何形状を示す。境界条件については図9.10に示すように、下端面の全方向の速度を固定し、残り端面は面

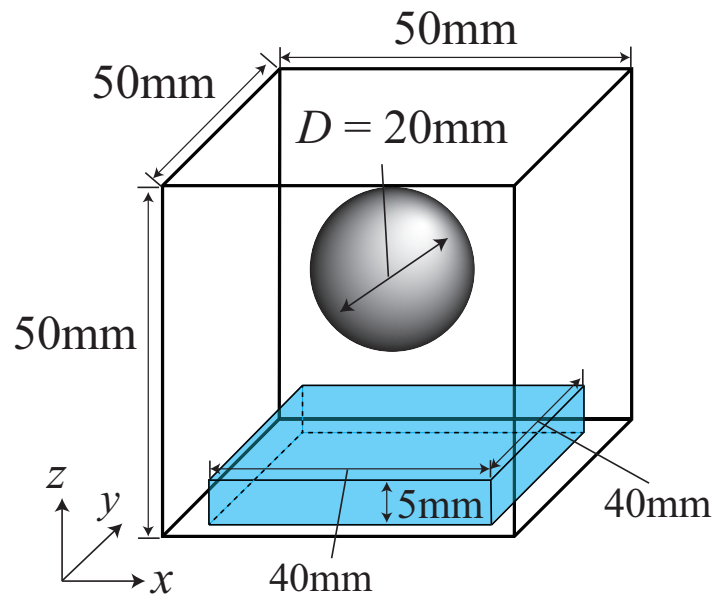


Fig. 9.9: Computational model of steel ball impact test

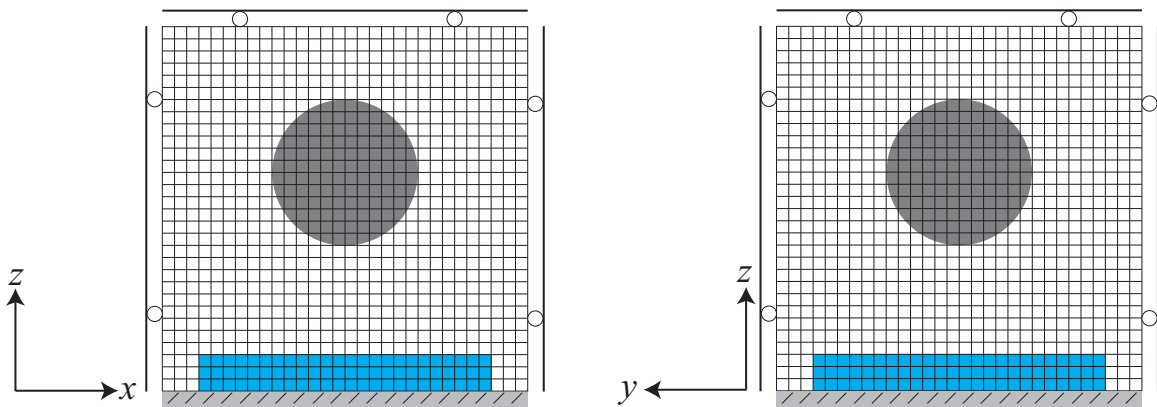


Fig. 9.10: Boundary conditions and mesh geometry of steel ball impact test

に垂直な方向の速度のみ固定する．異種材料界面の滑りや摩擦の影響は無視できるほど小さいと仮定し，この解析においては速度場を材料ごとに分けず単一の速度場として解くこととする．また図 9.10 に示すように解析領域を $30 \times 30 \times 30$ でメッシュ分割する．ステンレス鋼球は弾性体としてモデル化し，質量密度 7786kg/m^3 ，ヤング率 200GPa を与える．固体の周囲の空気はニュートン流体としてモデル化し，質量密度 1.205kg/m^3 ，粘性係数 $1.82 \times 10^{-5}\text{Pa}\cdot\text{s}$ を与える．これらの値は 20 の空気 の物性である．粘着剤の質量密度は 1000kg/m^3 であり，解析領域に作用する重力加速度は 9.81m/s^2 である．高速度カメラで撮影した動画の解析結果によれば，鋼球衝突時の粘着剤中央点の最大速度は 5.43m/s であった．そこで，粘着剤の粘性-超弾性

に関する材料パラメータについては、 20°C のアクリル系粘着剤の一軸引張試験（引張速度 10.0m/s , 5.0m/s , 1.0m/s ）により得られた応力ひずみ曲線から最小二乗法を用いて同定した．その値を表 9.3 に示す．

Table 9.3: Values of the material constants for modified Yamashita-Kawabata model

c_{10} [Pa]	6.00×10^5	β_1^{∞} [-]	1.00	τ_1 [s]	1.00×10^{-8}
c_{01} [Pa]	0.00	β_2^{∞} [-]	1.00	τ_2 [s]	1.00×10^{-7}
c_{20} [Pa]	0.00	β_3^{∞} [-]	1.00	τ_3 [s]	1.00×10^{-6}
q [-]	1.00	β_4^{∞} [-]	1.00	τ_4 [s]	1.00×10^{-5}
r [-]	1.00	β_5^{∞} [-]	1.00	τ_5 [s]	1.00×10^{-4}

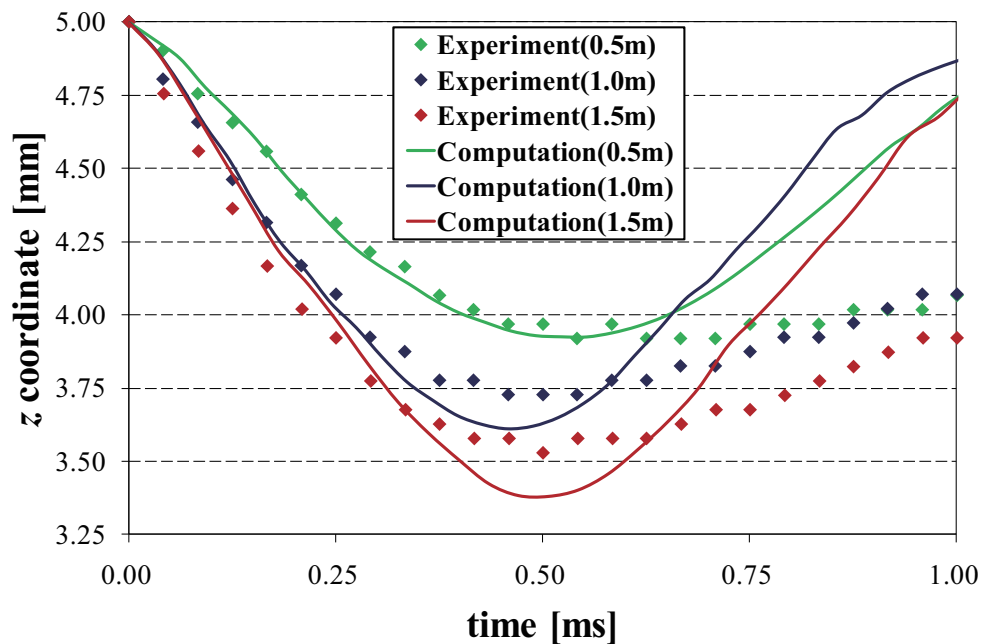


Fig. 9.11: Time history of z position of central point

9.2.3 数値解析結果

以上の数値計算モデルに基づき解析を行った結果を図 9.11-9.13 に示す．図 9.11 は粘着剤の中央点の z 座標の時刻歴について，実験値と数値解を比較したものである．また図 9.12 と図 9.13 は，ステンレス鋼球を 1.5m の高さから自由落下させ，衝

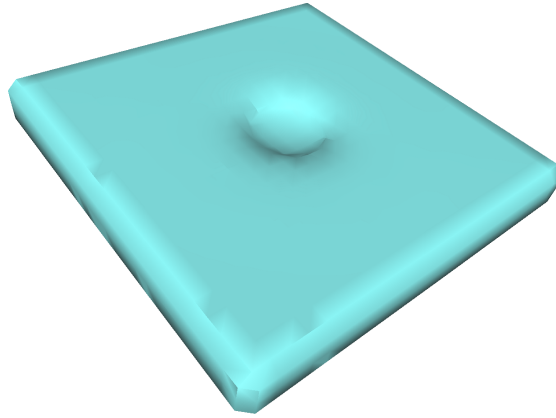


Fig. 9.12: Deformation of acrylic PSA ($t = 0.50\text{ms}$)

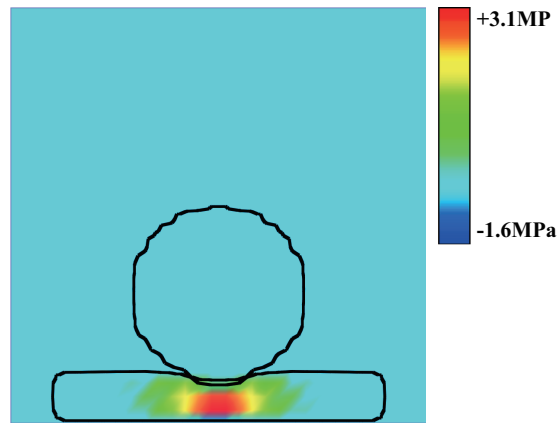


Fig. 9.13: Pressure field in $y = 25\text{mm}$ ($t = 0.50\text{ms}$)

突から 0.50ms 後における粘着剤の変形および圧力場をそれぞれ示したものである。図 9.13 より、粘着剤内部に最大で約 3.1MPa の圧力が生じていることが確認できる。さらに図 9.11 より、衝突による押し込み変形挙動については、実験値と数値解は概ね良い一致を示していることが確認される。一方、跳ね返り変形挙動については、数値解の跳ね返り量が実験値より大きくなっている。この理由は、粘着剤とステンレス鋼球の界面の法線方向に作用する粘着力を数理モデル化していないことであると考えられる。実際の粘着剤の表面は粘着力があるため、その粘着力による仕事がステンレス鋼球の運動エネルギーを散逸させている。この実験に観られるような粘着剤表面の粘着力の数理モデル化は、今後の課題の一つである。しかしながら、押し込み変形量については実験値と数値解が概ね一致していることから、数理モデル化した範囲において本手法の妥当性は確認されたといえる。

9.3 平坦面における固体自重変形の2次元解析

前節までは、空間平均化した単一の基礎方程式を用いた数値解析例を述べた。本節では、固体平面上における粘性-超弾性体の自重変形解析により、異種材料界面における不連続性のモデル化の妥当性を検証する。本節では2次元問題で妥当性を検証し、次節では3次元問題で妥当性を検証する。

9.3.1 数値解析モデル

Fig.9.14 に数値解析モデル形状を示す。境界条件については全面を slip wall とし、解析領域のメッシュ分割数は 40×40 である。重力加速度として z 方向下向きに 9.81m/s^2 を与える。固体1は粘性-超弾性体としてモデル化し、そのパラメータを Table9.4 に示す。固体2は超弾性体の一種である neo-Hooke 体としてモデル化し、 $G = 1.0 \times 10^9$ とする。固体1と固体2の質量密度はいずれも 1000kg/m^3 とする。固体1と固体2の界面の接触を制御する式(7.3)のペナルティ係数として $p_n = 1.0 \times 10^{13}$ を与える。界面の接線方向の表面力は与えず、界面においては摩擦なしの滑り状態をモデル化する。固体の周囲の空気はニュートン流体としてモデル化し、質量密度 1.205kg/m^3 、粘性係数 $1.82 \times 10^{-5}\text{Pa}\cdot\text{s}$ を与える。これらの値は20℃の空気の物性である。

Fig.9.14 の数値解析モデルの解の妥当性を検証するために、Fig.9.15 の数値解析モデルも計算する。境界条件、メッシュ分割数、重力加速度、固体1の材料パラメータは Fig.9.14 の数値解析モデルと同様である。

Table 9.4: Values of the material constants for modified Yamashita-Kawabata model

hyperelastic parameters			
c_1 [Pa]	0.1×10^4		
c_2 [Pa]	0		
c_3 [Pa]	0		
c_4 [Pa]	0		
q [-]	1.0		
r [-]	1.0		
viscous parameters			
β_1^∞ [-]	1.00	τ_1 [s]	0.1

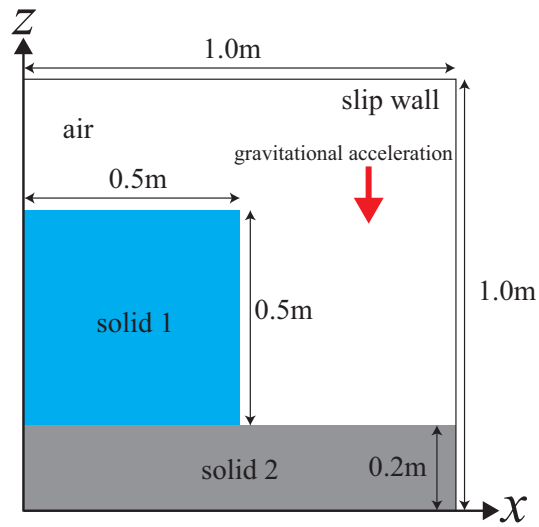


Fig. 9.14: Computational model of gravity-driven deformation (2D, two solids)

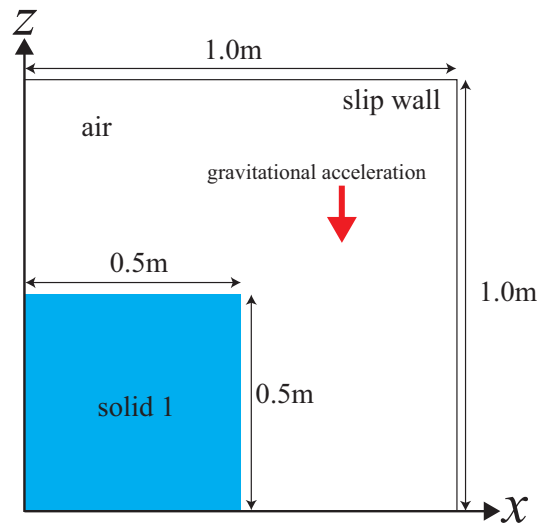


Fig. 9.15: Computational model of gravity-driven deformation (2D, one solid)

9.3.2 数値解析結果

まず，本節の問題を空間平均化した単一の基礎方程式で解いた場合の数値解析結果を Fig.9.16-9.17 に示す．Fig.9.16-9.17 より，固体 1 と固体 2 の界面は空間平均化により固着し，界面の滑りは表現できないことが確認できる．

次に，異種材料界面の不連続モデルを適用した場合の数値解析結果を Fig.9.18-9.19 に示す．Fig.9.18-9.19 より，固体 1 と固体 2 の界面が固着することなく，界面の滑りが表現できていることが確認できる．さらに，解の妥当性を検証するために，固体 1 の変形について Fig.9.15 の数値解と比較した結果，Fig.9.20 に示すように，精度良く一致することが確認された．なお，変形の指標として Lagrange 的に追跡するマーカーを用いた．このマーカーは変形場の可視化のために定義したものであり，基礎方程式の計算には影響を与えない．以上の結果により，本論文で提案する異種材料界面の不連続モデルの妥当性が 2 次元で検証できたといえる．次節では，3 次元における妥当性を検証する．

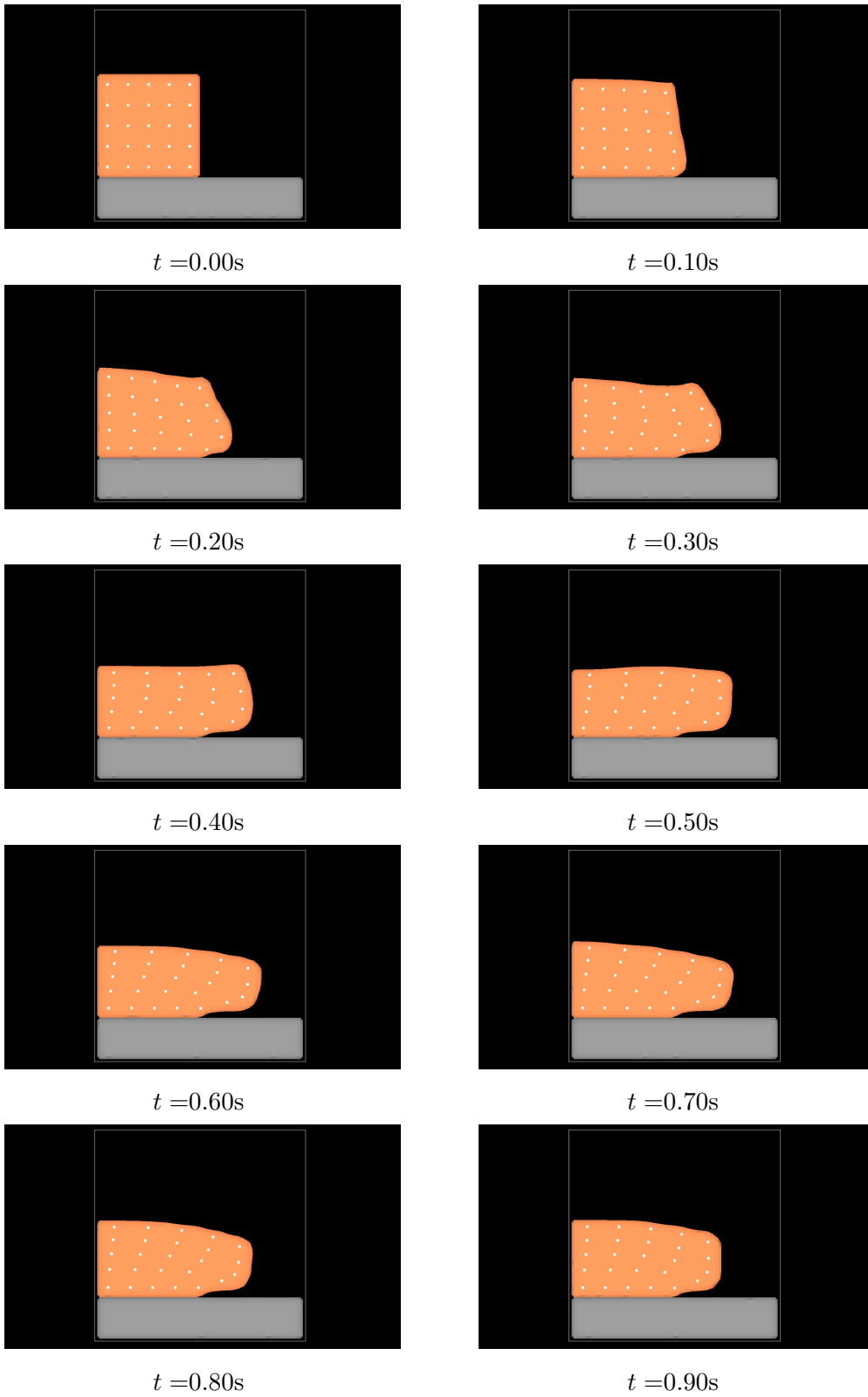


Fig. 9.16: Gravity-driven deformation (continuous condition, 2D)

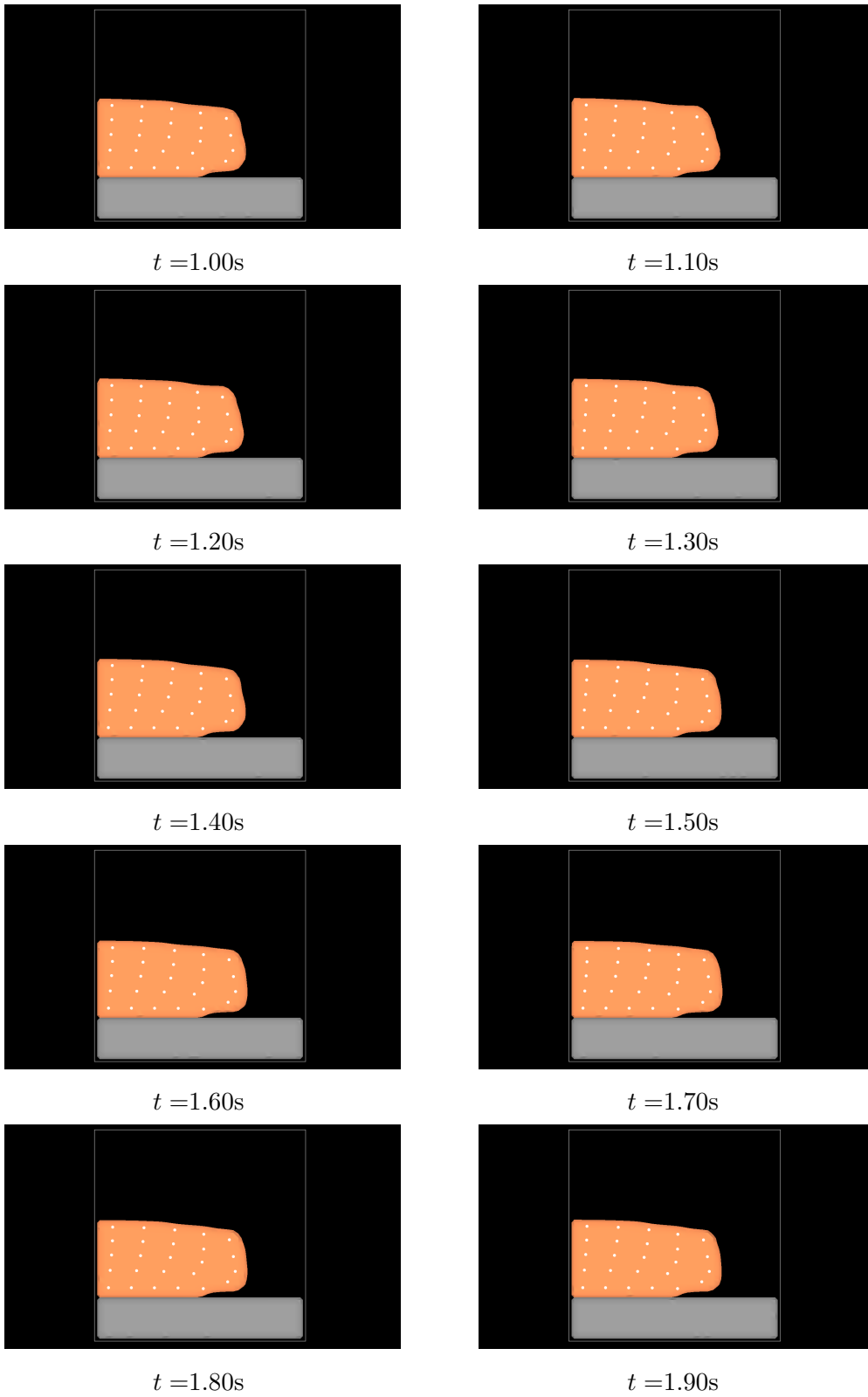


Fig. 9.17: Gravity-driven deformation (continuous condition, 2D)

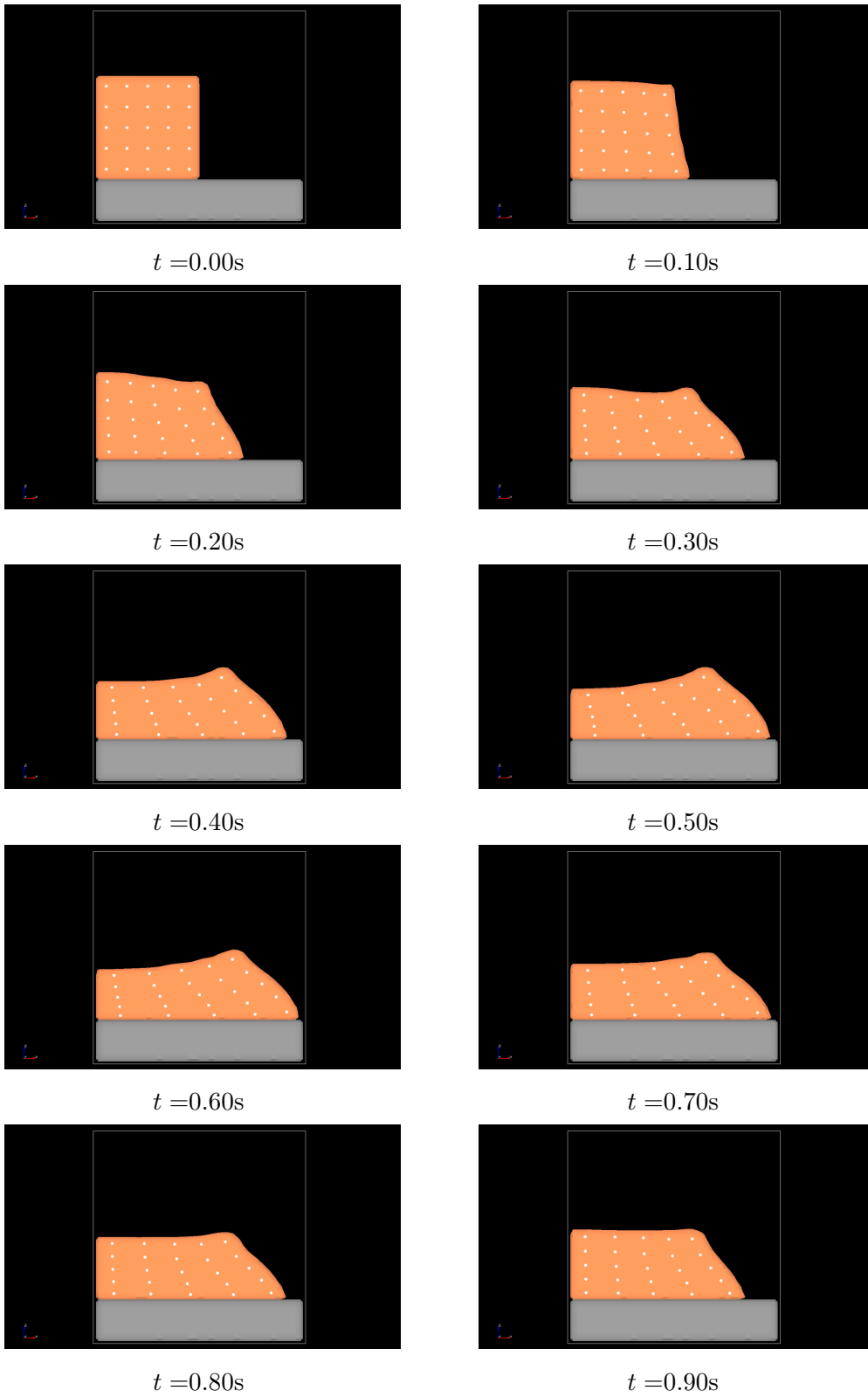


Fig. 9.18: Gravity-driven deformation (discontinuous condition, 2D)

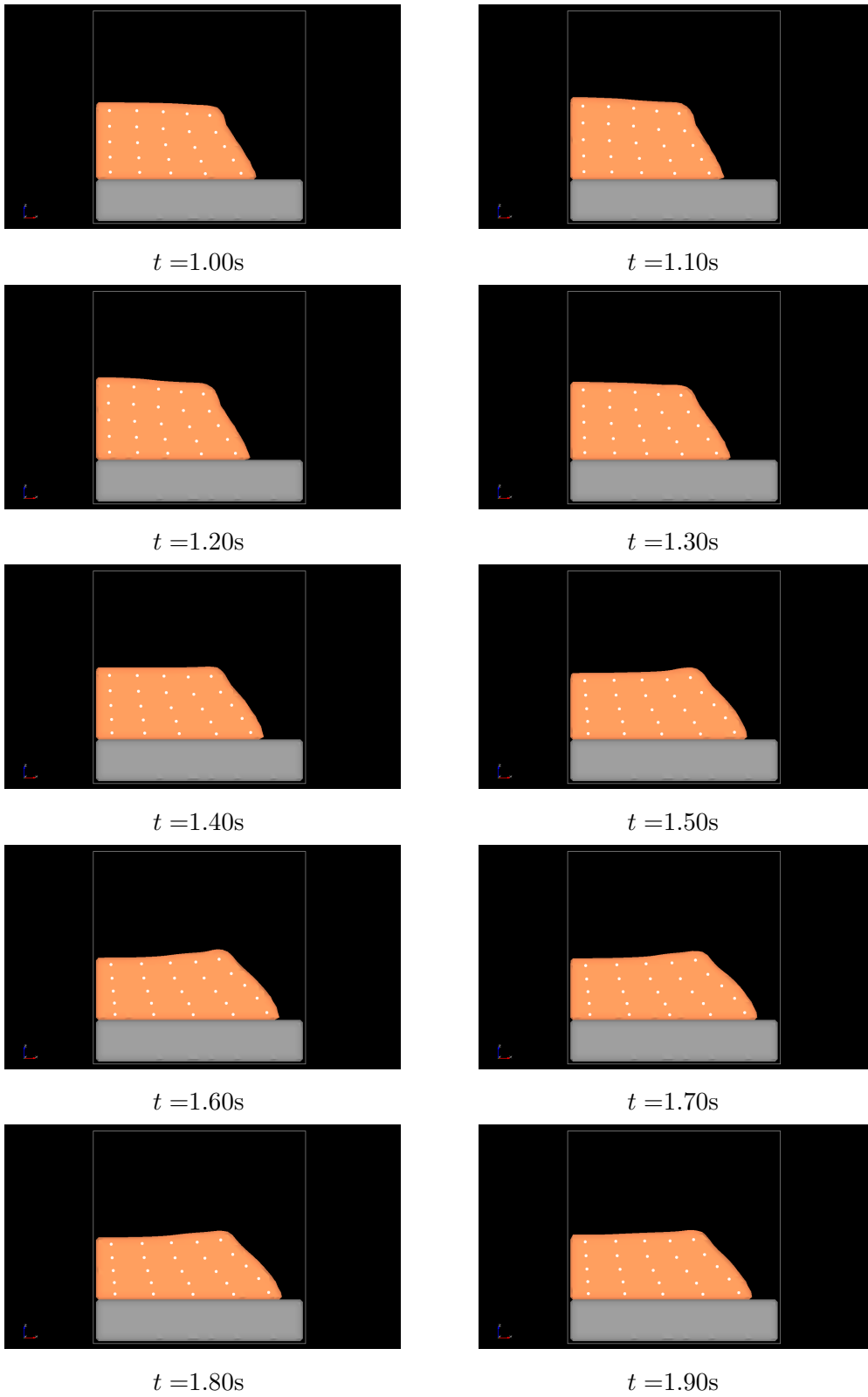


Fig. 9.19: Gravity-driven deformation (discontinuous condition, 2D)

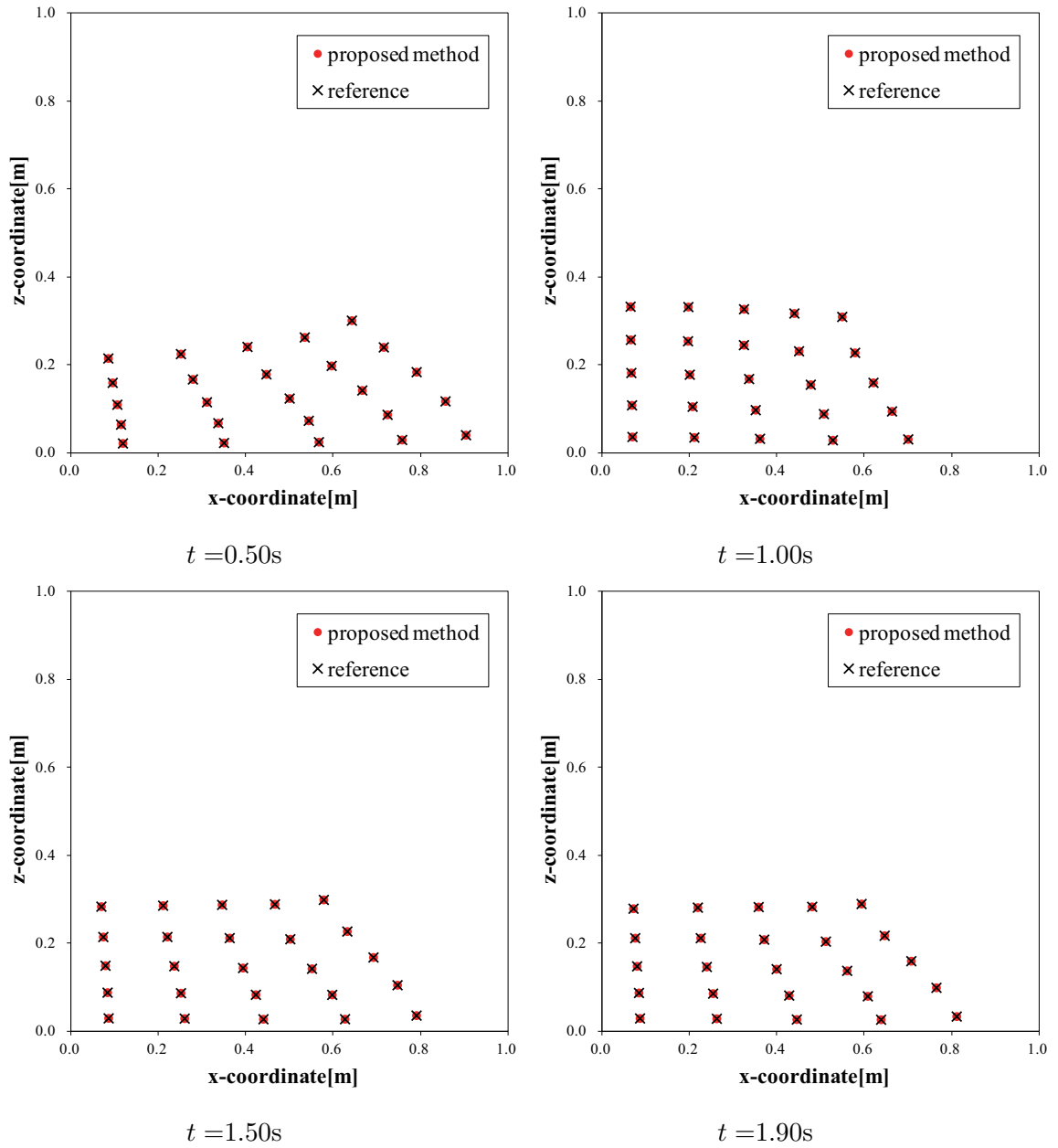


Fig. 9.20: Comparison of deformation (Lagrangian point)

9.4 平坦面における固体自重変形の3次元解析

前節では、2次元問題において界面不連続性のモデル化の妥当性を検証した。本節では前節と同様に、固体平面上における粘性-超弾性体の自重変形解析により、界面不連続性のモデル化の妥当性を3次元問題でも検証する。

9.4.1 数値解析モデル

Fig.9.21 に数値解析モデル形状を示す。境界条件については全面を slip wall とし、解析領域のメッシュ分割数は $40 \times 40 \times 40$ である。重力加速度として z 方向下向きに 9.81m/s^2 を与える。固体1は粘性-超弾性体としてモデル化し、そのパラメータを Table9.4 に示す。固体2は超弾性体の一種である neo-Hooke 体としてモデル化し、 $G = 1.0 \times 10^9$ とする。固体1と固体2の質量密度はいずれも 1000kg/m^3 とする。固体1と固体2の界面の接触を制御する式(7.3)のペナルティ係数として $p_n = 1.0 \times 10^{13}$ を与える。界面の接線方向の表面力は与えず、界面においては摩擦なしの滑り状態をモデル化する。固体の周囲の空気はニュートン流体としてモデル化し、質量密度 1.205kg/m^3 、粘性係数 $1.82 \times 10^{-5}\text{Pa}\cdot\text{s}$ を与える。

Fig.9.21 の数値解析モデルの解の妥当性を検証するために、Fig.9.22 の数値解析モデルも計算する。境界条件、メッシュ分割数、重力加速度、固体1の材料パラメータは Fig.9.21 の数値解析モデルと同様である。

9.4.2 数値解析結果

異種材料界面の不連続モデルを適用した場合の数値解析結果を Fig.9.23-9.24 に示す。Fig.9.23-9.24 より、固体1と固体2の界面が固着することなく、界面の滑りが表現できていることが確認できる。さらに、解の妥当性を検証するために、固体1の変形について Fig.9.22 の数値解と比較した結果、Fig.9.25 に示すように、精度良く一致することが確認された。なお、変形の指標として Lagrange 的に追跡するマーカーを用いた。このマーカーは変形場の可視化のために定義したものであり、基礎方程式の計算には影響を与えない。以上の結果により、本論文で提案する異種材料界面の不連続モデルの妥当性が3次元でも検証できたといえる。

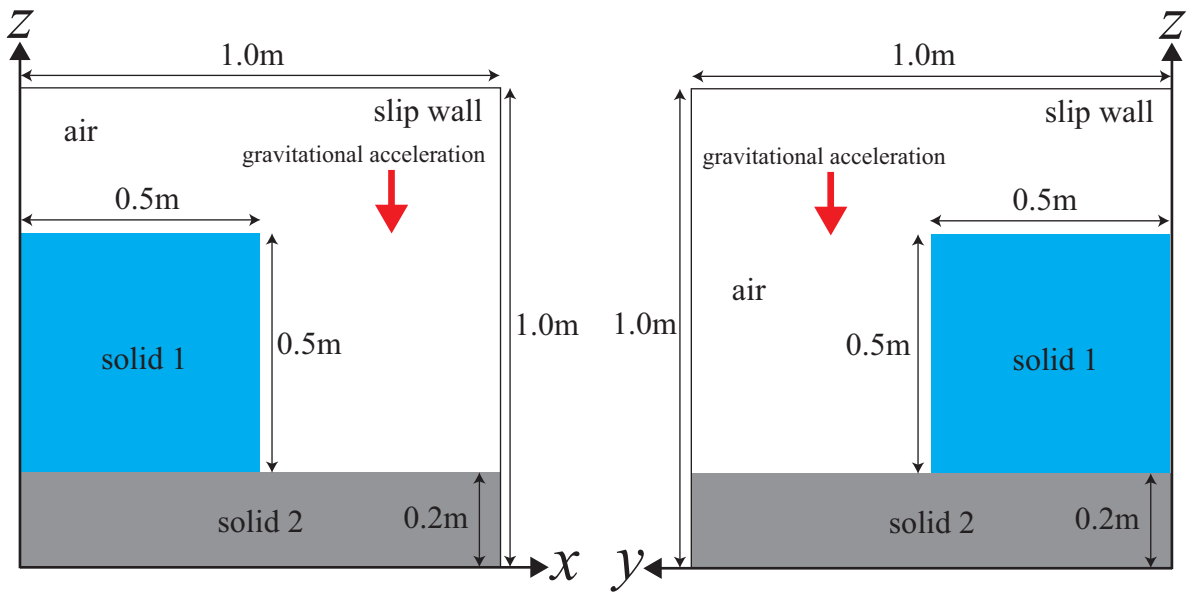


Fig. 9.21: Computational model of gravity-driven deformation (3D, two solids)

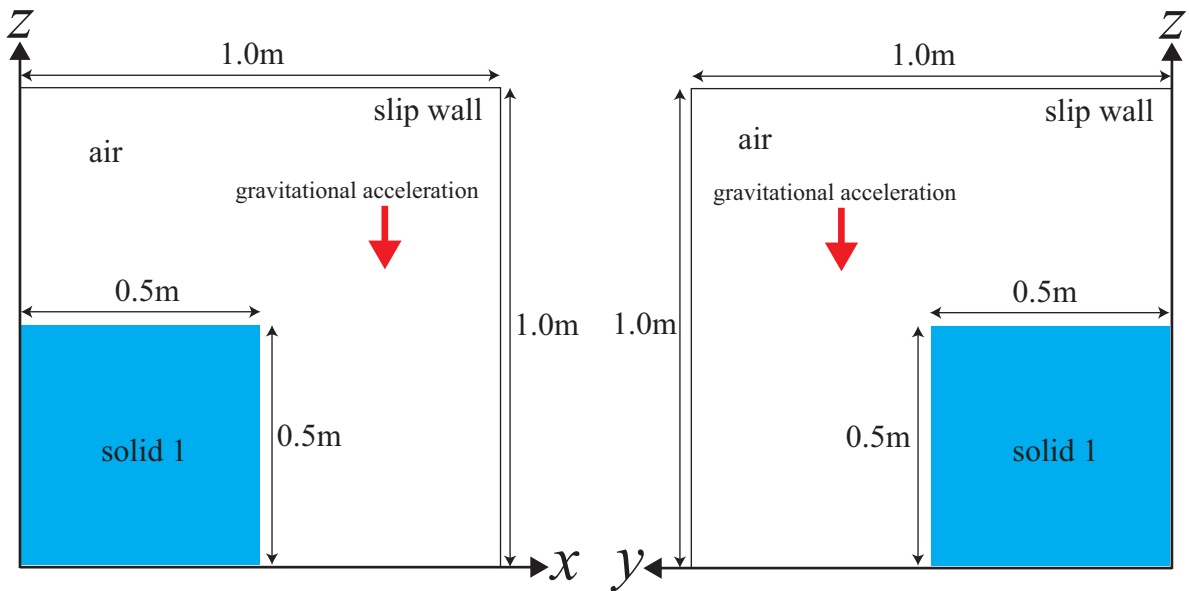


Fig. 9.22: Computational model of gravity-driven deformation (3D, one solid)

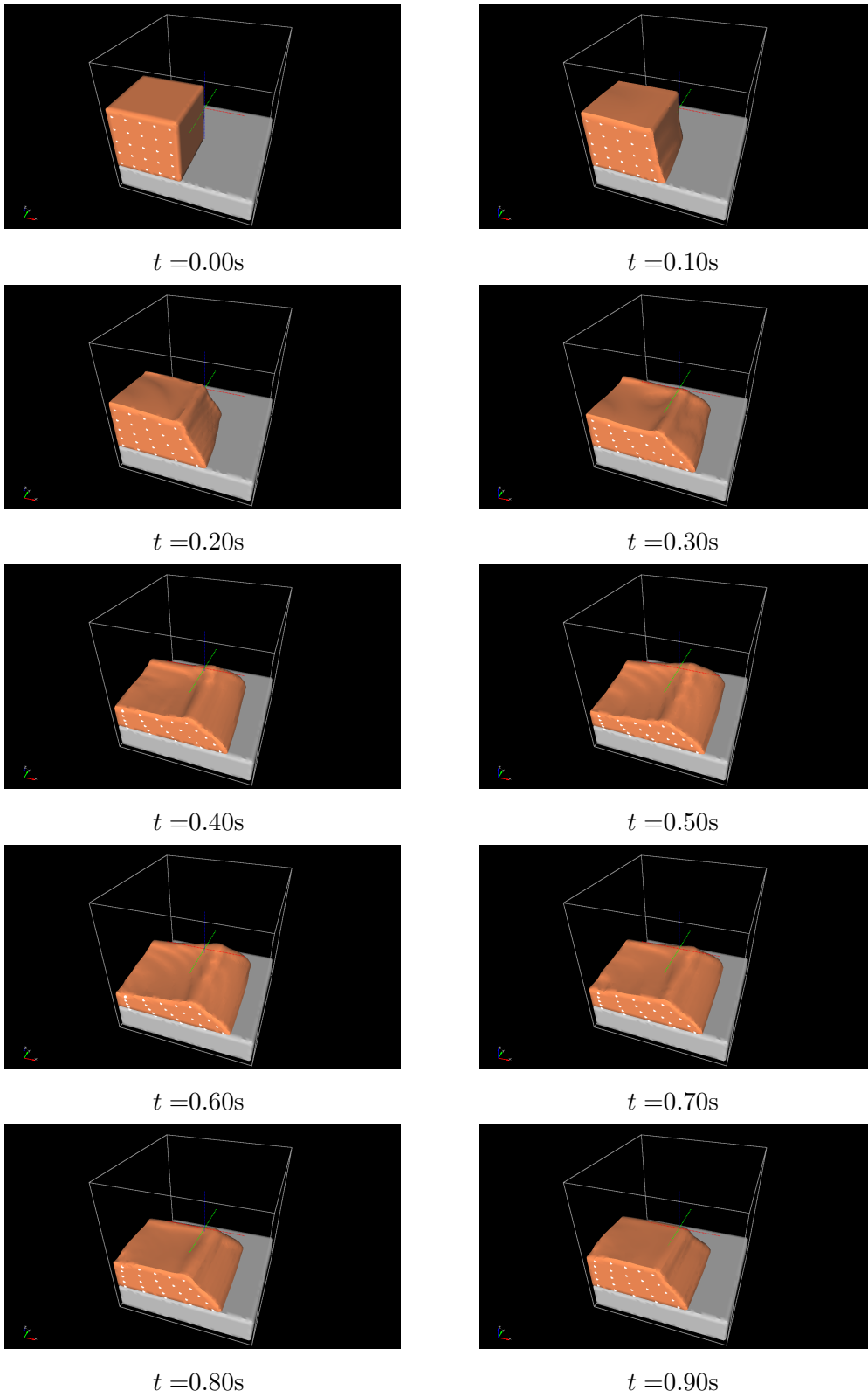


Fig. 9.23: Gravity-driven deformation (discontinuous condition, 3D)

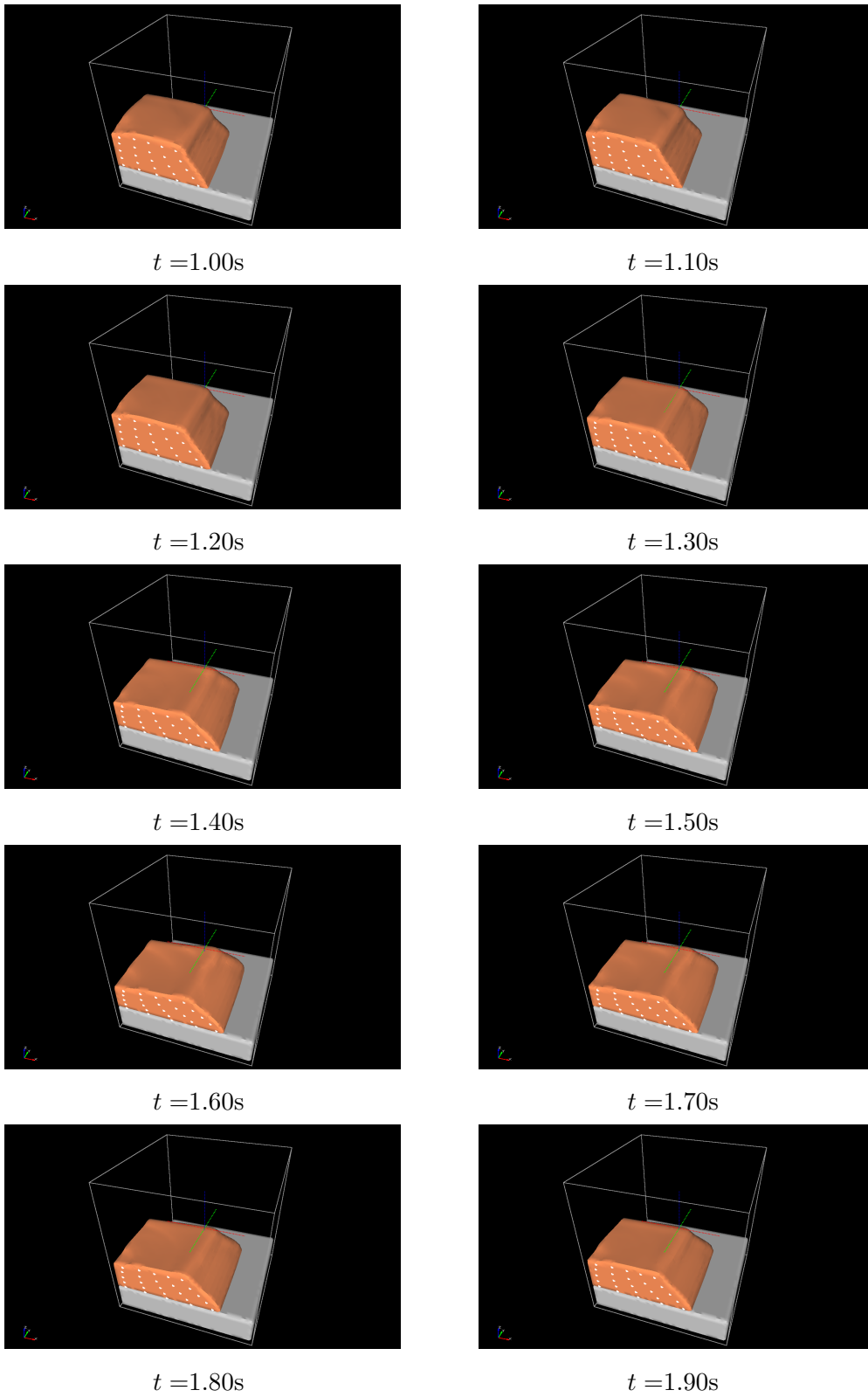


Fig. 9.24: Gravity-driven deformation (discontinuous condition, 3D)

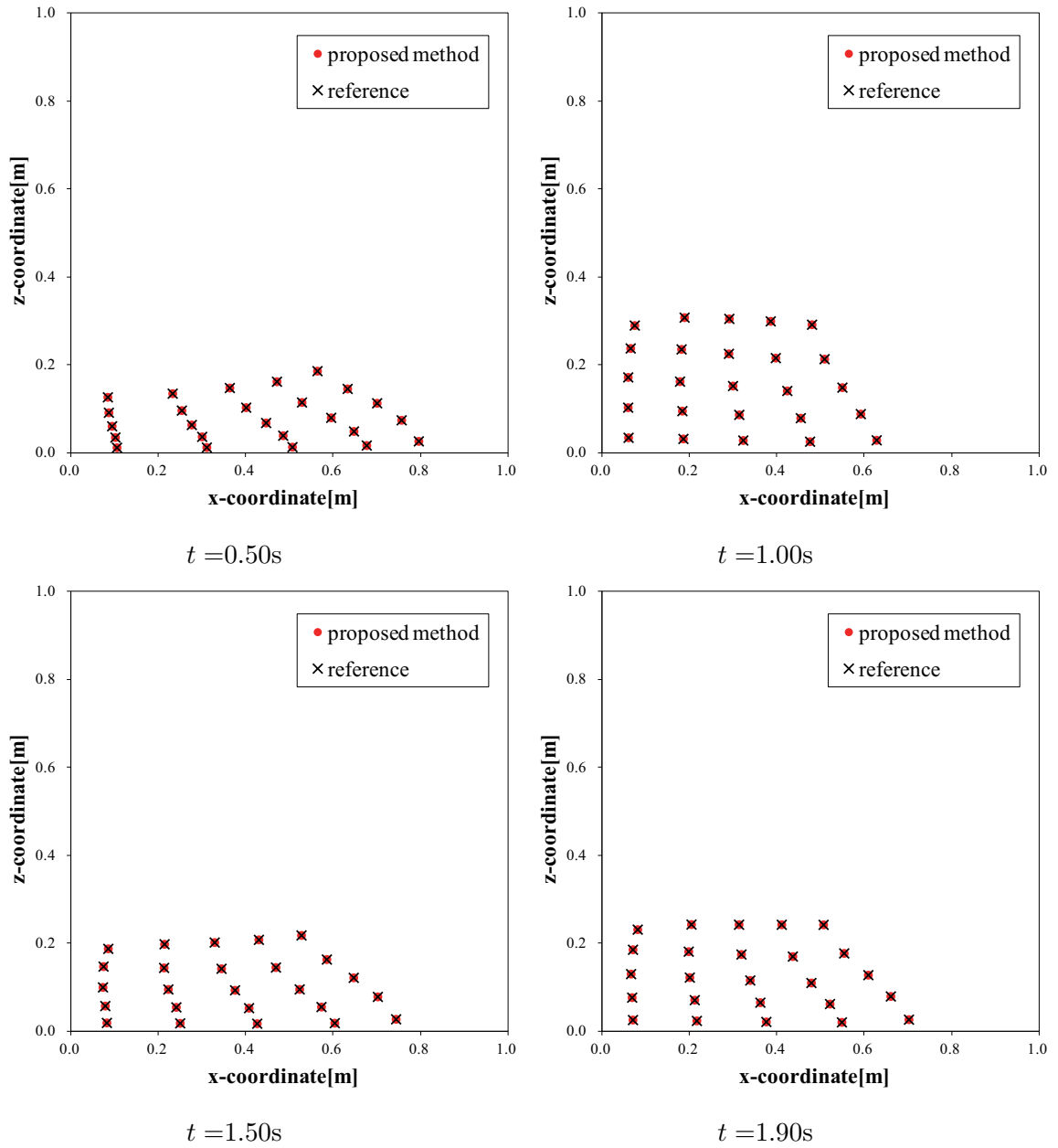


Fig. 9.25: Comparison of deformation (Lagrangian point, x-z plane)

9.5 凹凸面の包埋挙動の2次元解析

最後に、Bステージ樹脂の製品設計における活用例について述べる。粘着剤や樹脂などの固体材料は、電子デバイスなどの構成部材として頻繁に利用されている。特に、デバイス内部の集積回路などの多数の凸部を有する部材 (例えば Fig.9.26 のような部材) を、これらの固体材料で包埋することが多い。しかしながら、従来の有限要素法では大変形によるメッシュ破綻のために、このような凸部の包埋挙動を解析することが困難であった。そこで、本論文で提案する異種材料界面の不連続モデルを用いた、凸部の包埋挙動の解析例を述べる。

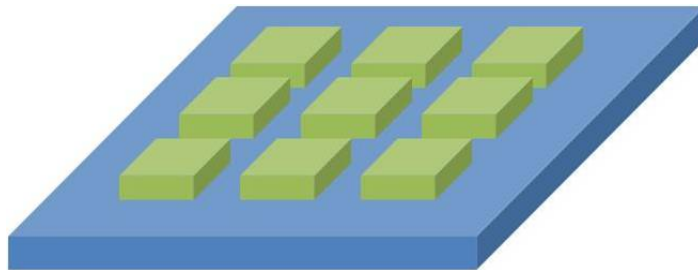


Fig. 9.26: Many bumps on plate

9.5.1 数値解析モデル

粘着剤や樹脂などの固体材料により凸部を包埋する際、凸部には包埋する固体材料から荷重が作用する。凸部が接着剤などで固定されている場合、包埋する固体材料から作用する荷重が一定値を超えれば、凸部が剥離する問題が発生する。一般に、凸部と凸部の距離が小さくなるほど凸部の側面に作用する荷重は大きくなり、凸部が剥離しやすくなる。そのため、凸部と凸部の距離に応じて、凸部の剥離が生じないように、包埋する固体材料の粘性-超弾性物性を設計する必要がある。

本節では、凸部間距離が $300\mu\text{m}$ のモデル (Fig.9.27) と $500\mu\text{m}$ のモデル (Fig.9.28) を仮定し、包埋挙動を解析する。境界条件については、解析領域側面を slip wall とし、解析領域下面を fixed wall とする。解析領域上面から、速度 $10\mu\text{m/s}$ で固体が流入する境界条件とし、圧子による押し込みを表現する。Fig.9.27 のモデルでは、 x 方向に 345 分割、 z 方向に 72 分割する ($\Delta x=10\mu\text{m}$, $\Delta z=10\mu\text{m}$)。Fig.9.28 のモデル

では, x 方向に 375 分割, z 方向に 72 分割する ($\Delta x=10\mu\text{m}$, $\Delta z=10\mu\text{m}$). 重力加速度として z 方向下向きに 9.81m/s^2 を与える. 圧子と凸部は超弾性体の一種である neo-Hooke 体としてモデル化し, $G = 1.0 \times 10^9$ とする. 包埋する固体は, 粘性-超弾性体としてモデル化し, そのパラメータを Table 9.5 に示す. なお, パラメータ c_1 とせん断弾性係数 G の間には, $G = 2c_1$ なる関係が成り立つ. 圧子と粘性-超弾性体の界面は固着しているため, 圧子と粘性-超弾性体に対しては空間平均化した基礎方程式を用いる. 粘性-超弾性体と凸部の界面は摩擦がないと仮定し, 粘性-超弾性体と凸部の界面の接触を制御する式 (7.3) のペナルティ係数として $p_n = 1.0 \times 10^{13}$ を与える. 界面の接線方向の表面力は与えず, 界面においては摩擦なしの滑り状態をモデル化する. 固体の周囲の領域は void とし, 数値計算上の零割を防ぐために空気の質量密度 1.205kg/m^3 を与える.

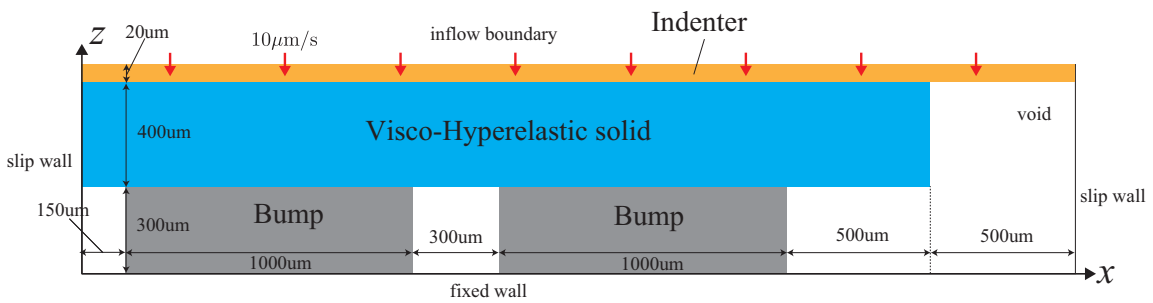


Fig. 9.27: Computational model of embedded bump (gap:300 μm)

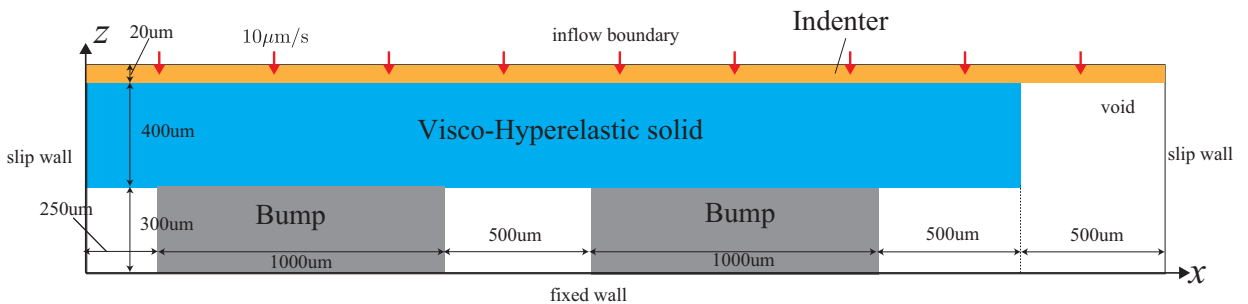


Fig. 9.28: Computational model of embedded bump (gap:500 μm)

Table 9.5: Values of the material constants for modified Yamashita-Kawabata model

hyperelastic parameters	
c_1 [Pa]	1.0×10^4
c_2 [Pa]	0
c_3 [Pa]	0
c_4 [Pa]	0
p [-]	1.0
q [-]	1.0
viscous parameters	
β_1^∞ [-]	1.00
τ_1 [s]	10

9.5.2 数値解析結果

数値解析結果を Fig.9.29-9.31 に示す . Fig.9.29 は , 数値解析モデル (Fig.9.27, Fig.9.28) の右側の凸部に作用する x 軸方向の荷重を算出した結果である . この荷重は , 凸部の左側面に作用する圧力と右側面に作用する圧力の差分に凸部の側面積 ($300\mu\text{m} \times 1000\mu\text{m}$) を乗じて算出した値である . Fig.9.30 と Fig.9.31 は , それぞれの数値解析モデルの変形と Mises 応力分布を示したものである . 凸部間に粘性-超弾性体で完全に充填されるまで計算を行っており , 凸部間距離が $300\mu\text{m}$ のモデルでは圧子の押し込み量が $250\mu\text{m}$ で凸部間が完全に充填され (Fig.9.30) , 凸部間距離が $500\mu\text{m}$ のモデルでは圧子の押し込み量が $200\mu\text{m}$ で凸部間が完全に充填された (Fig.9.31) .

凸部が剥離する荷重は実験的に測定することができ , ここでは凸部の側面に 0.1N を超える荷重が作用すると剥離が生じる場合を想定する . この場合 , 凸部間距離が $500\mu\text{m}$ のモデルでは凸部間の完全充填時でも凸部に作用する x 軸方向の荷重は 0.1N 以下であり , 凸部は剥離しない . 一方 , 凸部間距離が $300\mu\text{m}$ のモデルでは凸部に作用する x 軸方向の荷重は 0.1N を上回り , 凸部の剥離が生じてしまうことがわかる . そこで , 超弾性パラメータ c_1 を変化させることで , 凸部間距離が $300\mu\text{m}$ のモデルで凸部の剥離が生じない物性をシミュレートする . その結果 , 超弾性パラメータ $c_1 = 0.25 \times 10^4\text{Pa}$ とすれば , 凸部間距離が $300\mu\text{m}$ のモデルでも凸部の剥離が生じないことがわかる . 以上のような数値解析を行うことで , 対象とする電子デバイ

ス内部の凹凸部の幾何学的な条件に応じて、凸部の剥離が生じないように包埋する固体材料の粘性-超弾性物性を設計することが可能となる。

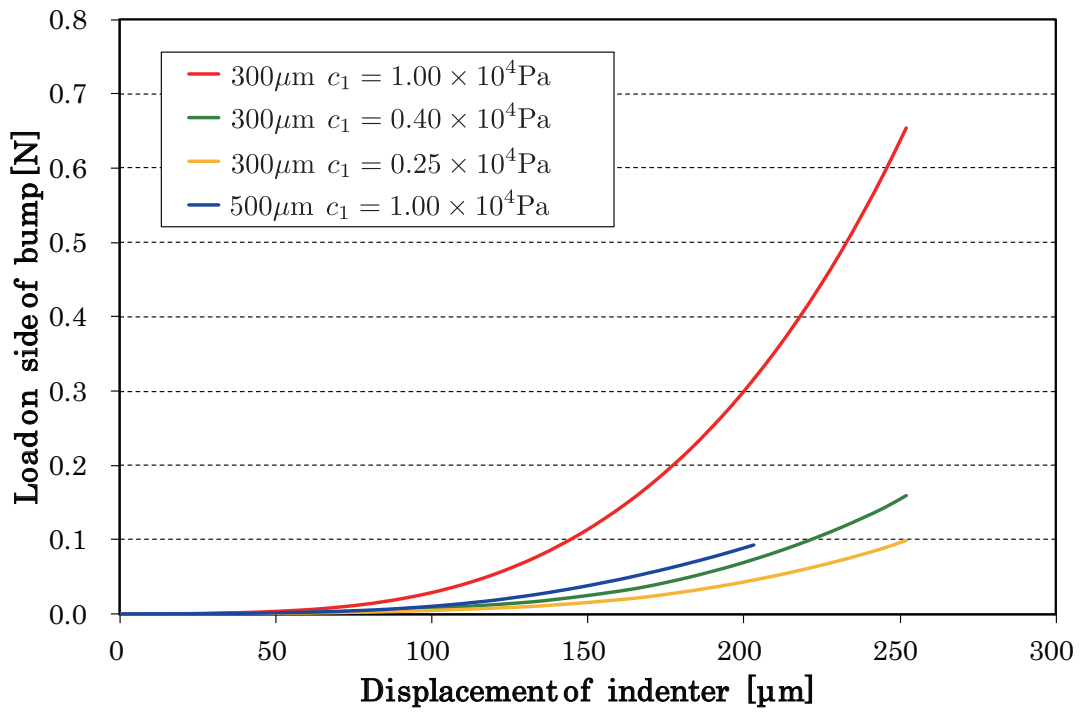


Fig. 9.29: Load on side of bump

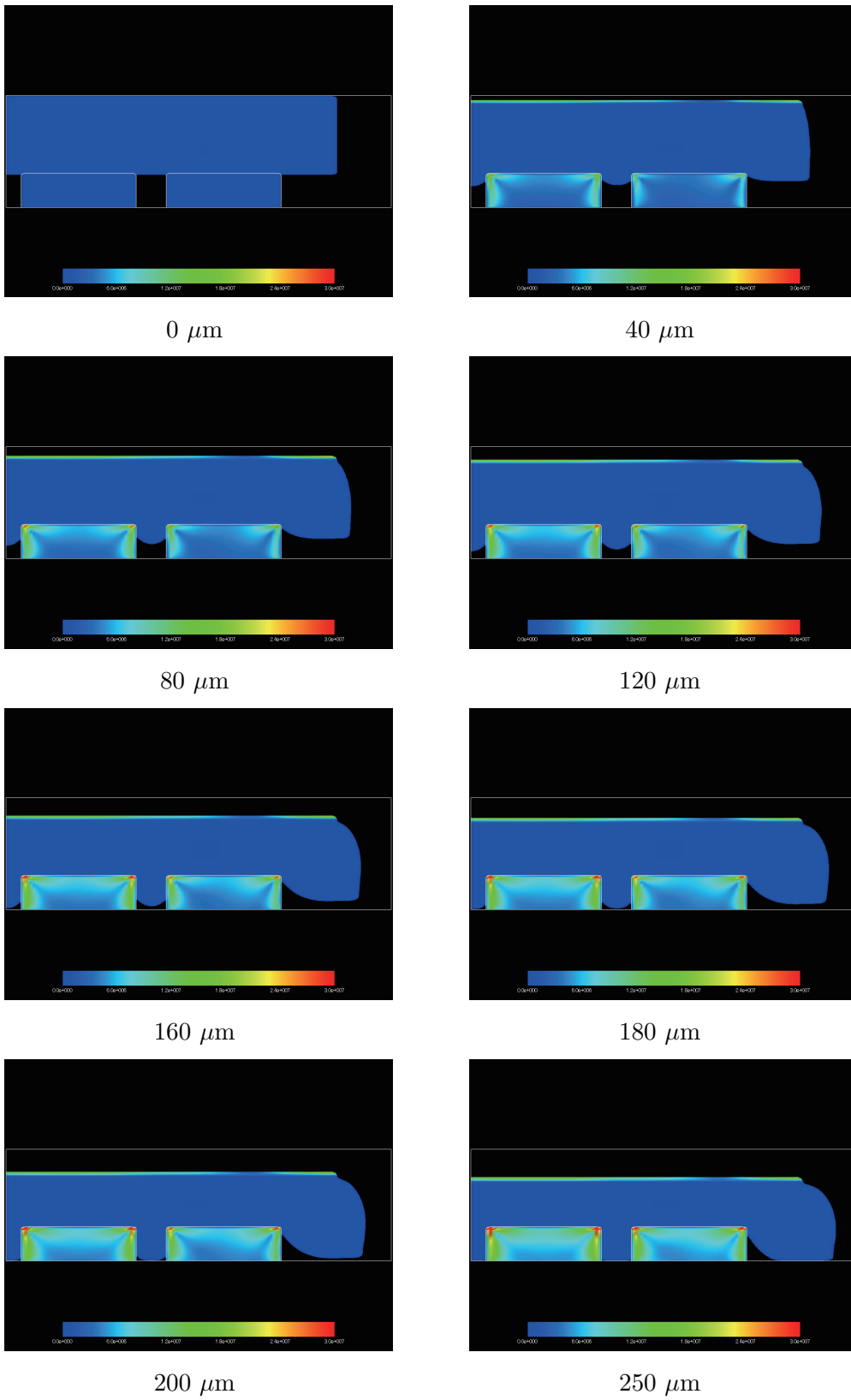


Fig. 9.30: Deformation and Mises stress distribution (gap:300 μm)

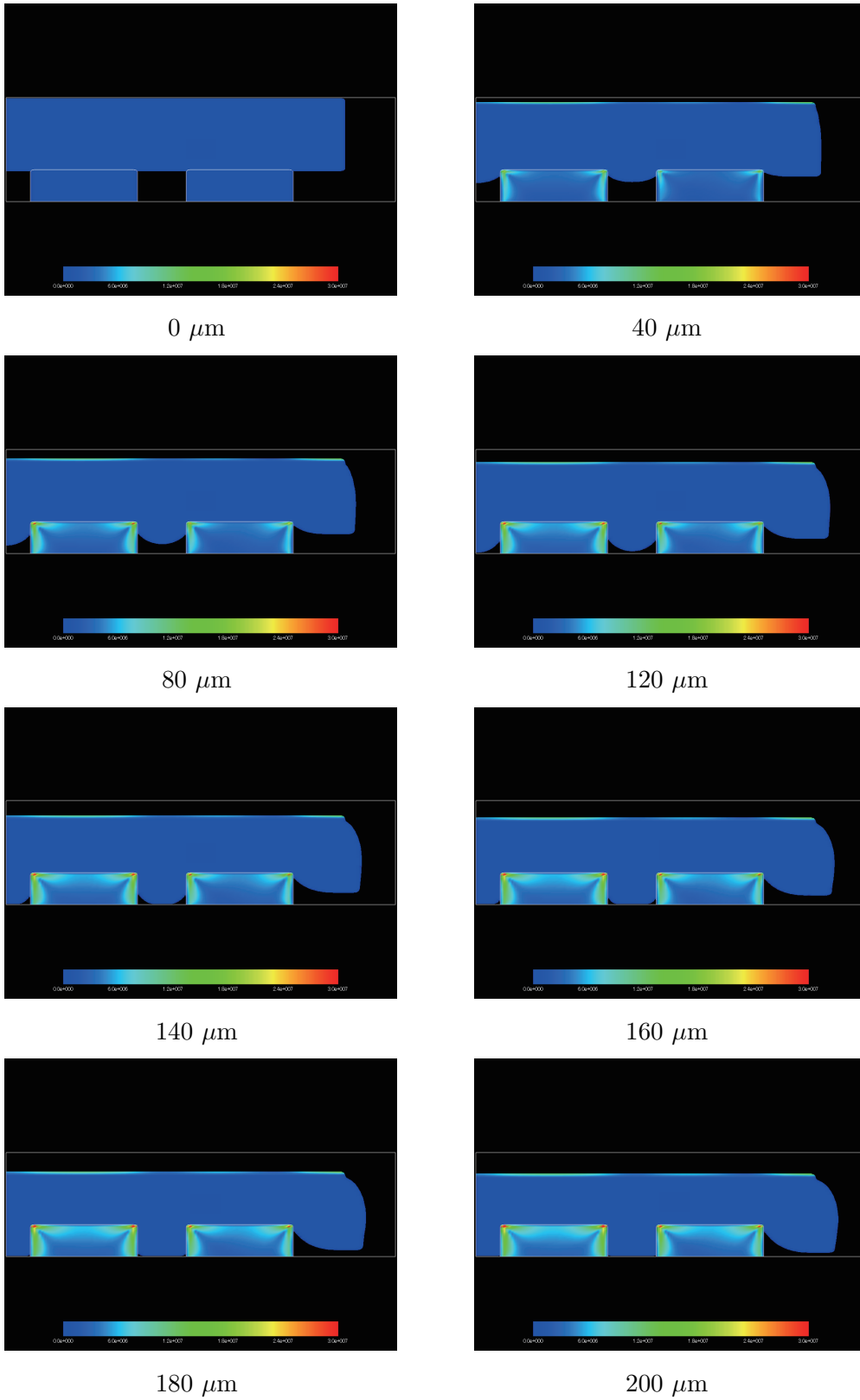


Fig. 9.31: Deformation and Mises stress distribution (gap:500 μm)

第10章 結言

本研究の目的は、以下の2点の課題を解決することにより、従来の Euler 型有限要素法では解析が困難である高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料の実用的な数値シミュレーションを可能とすることであった。

1. 従来の Lagrange/Euler 型有限要素法では、高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料の特性である温度依存性を考慮した粘性-超弾性の定式化が行われていなかった。
2. 従来の Euler 型有限要素法で複数の固体材料を扱う場合、ひとつの有限要素内に複数の固体材料が存在し得ることから、基礎方程式を空間平均化することで定義域内の速度場を C^0 連続な関数とし、有限要素法による空間離散化を行ってきた。しかし、空間平均化により単一の速度場で複数の固体材料を扱うことになるため、固体と固体の界面が固着して固体界面の滑りなどの不連続性をモデル化できず、実用的な数値シミュレーションの妨げになることがあった。

本研究の結論を以下の4点にまとめる。

1. Simo の粘弾性モデルに対して、代表的な時間-温度換算則である WLF 則を導入し、高分子材料の温度依存性を緩和時間に換算して表現した。この定式化により、高分子ゲル・粘着剤・B ステージ樹脂などの柔らかい高分子材料の特性である温度依存性を考慮した粘性-超弾性をモデル化できる。物質点を追跡しない記述方法である Euler 表示においては、左 Cauchy-Green 変形テンソルの時間発展式を導入することで、Euler 表示の速度場から固体変形を記述できる。
2. 超弾性を規定するひずみエネルギー関数として、材料設計における活用のし易さ観点から関数形がシンプルで物理的意味が明瞭である山下-川端モデルを基礎として、新たなひずみエネルギー関数を提案した。山下-川端モデルは、線形的

な弾性挙動とひずみ硬化挙動を表す項を有している。山下-川端モデルはカーボンブラック補強ゴム解析のために提案されたものであるため、高分子ゲル・粘着剤・Bステージ樹脂などの柔らかい高分子材料解析の定量性は低い。ひずみ硬化挙動を表す高次項を追加することによって、高分子ゲル・粘着剤・Bステージ樹脂などの柔らかい高分子材料解析の定量性を向上できる。

3. 固体界面の滑りなどの不連続性をモデル化するため、拡張有限要素法(X-FEM)により速度場の拡充を行い、3次元PLIC法により各有限要素で線形近似した異種材料界面の接触条件を、ペナルティ法で制御する手法を提案した。9.3節および9.4節で、固体平面上における粘性-超弾性体の自重変形解析により、本研究の提案手法の妥当性を2次元および3次元問題で確認した。
4. Bステージ樹脂やアクリル系粘着剤の大変形解析により、柔らかい高分子材料の設計実務における本研究の提案手法の有効性を示した。9.2節では、粘着剤や樹脂の衝撃吸収性能評価のために行われる鋼球衝突試験の数値解析を行うことで、実務的解析における有効性を示した。9.5節では、異種材料界面の不連続モデルを用いて、Bステージ樹脂による凹凸面の包埋挙動の解析を行い、Bステージ樹脂の製品設計における有効性を示した。

以上より、本研究の目的は達成されたと考える。今後、高分子ゲル・粘着剤・Bステージ樹脂などの柔らかい高分子材料の設計実務において、さらなる産業的価値を生むためには、次のような課題に取り組む必要があると考える。

1. 高分子材料の界面における表面力(接着力、摩擦力)の有理的なモデル化手法が必要であると考えられる。高分子材料の界面における表面力は、連続体スケールだけでなく、連続体では近似できない分子スケールの物理に影響を受ける。この界面の表面力は、複数の高分子材料が組み合わされた製品の特性に大きな影響を与える。そのため、高分子材料の界面における表面力の有理的なモデル化手法を開発することは、複数の高分子材料が組み合わされた製品の設計実務において大きな価値があると考えられる。
2. 本研究の提案手法に、トポロジー最適化手法や材料物性最適化手法の導入が有効であると考えられる。工業製品の設計実務では、数値シミュレーションを用いる

ことにより、観測できない物理量や現象を可視化したり、仮想的な条件の検討が一般に行われている。ただし、数値シミュレーションを行ったとしても、製品の設計案を思考するのは設計者である人間であるため、設計案は人間の思考で到達できる範囲にとどまる。しかし、遺伝的アルゴリズムなどを用いた最適化手法と組み合わせることができれば、人間の思考では立案できないような高い性能を持つ設計案を得ることが可能になると考えられる。

付録A 3次元PLIC法の界面捕捉精度の検証

本章では，本研究で用いている界面捕捉法である3次元PLIC法の界面捕捉精度について，2次精度風上差分法を用いたVOF法と比較しながら検証する．まず，2次元移流計算テストの結果を示し，次いで3次元移流計算テストの結果を示す．

A.1 2D Zalesak's disk rotation

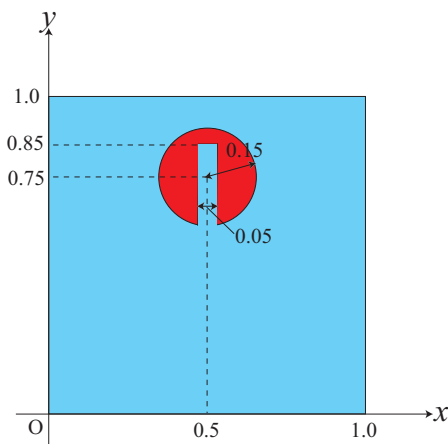


Fig. A.1: Geometry of Zalesak's disk problem

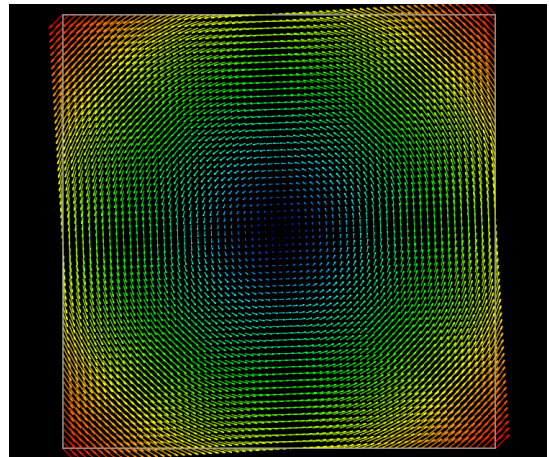


Fig. A.2: Velocity field

ここでは，2D Zalesak's disk rotation 問題 [96] による移流計算テストの結果を示す．解析モデルは Fig.A.3 に示すように，半径 0.15 の円に幅 0.05 の溝がある形状である．速度場は，次式を与える．

$$\begin{aligned} v_x &= -2\pi(y - 0.5) \\ v_y &= +2\pi(x - 0.5) \end{aligned} \tag{A.1}$$

式 (A.1) より 1 秒で図形が 1 回転することがわかる．速度場を図化したものを Fig.A.2 に示す．また，クーラン数は 0.25，格子分割数は 100×100 で計算を行った．

PLIC 法による結果と 2 次精度風上差分法を用いた VOF 法による計算結果を Fig.A.6 に示す．Fig.A.6 より，VOF 法では 1 回転後，境界面の数値拡散により図形の溝の形状を維持できなくなっているのに対して，PLIC 法では急峻な境界面も捕捉できていることがわかる．

さらに，格子分割数 64^2 ， 128^2 ， 256^2 ， 512^2 で計算を行い， L_1 誤差により精度を定量的に比較した．また L_1 誤差の収束性を検討した． L_1 誤差は，次式で定義している．

$$L_1 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N |\phi_n^i - \phi_n^f| \quad (\text{A.2})$$

ここで， N は格子分割数， ϕ^i は初期の VOF 値， ϕ^f は最終的な VOF 値（この問題では $t = 1.00$ における VOF 値）である．Fig.A.12 に計算結果を示す．グラフの横軸は格子幅の対数，縦軸は L_1 誤差の対数である．Fig.A.12 より，VOF 法では 0.75 次精度であるのに対して，PLIC 法では 1.12 次精度で収束していることが確認できる．また，グラフ中の白丸は VOF 法の L_1 誤差の大きさに対する PLIC 法の L_1 誤差の大きさの比である． $N = 64^2$ では 0.13， $N = 128^2$ では 0.07， $N = 256^2$ では 0.07， $N = 512^2$ では 0.16 となっており，PLIC 法では誤差が平均して約 92% 減少している．

A.2 2D Shearing flow

ここでは，2D Shearing flow 問題 [87] による移流計算テストの結果を示す．解析モデルは Fig.A.3 に示すように，半径 $5/\pi$ ，中心座標 $(\pi/2, 0.2 + \pi/5)$ の円である．速度場として，まず次式を与えて円をせん断変形させる．Fig.A.4 は以下の速度場を図化したものである．

$$\begin{aligned} v_x &= + \sin x \cos y \\ v_y &= - \cos x \sin y \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

さらに，1000 ステップ後，式 (A.3) の逆向きの速度場，すなわち

$$\begin{aligned} v_x &= - \sin x \cos y \\ v_y &= + \cos x \sin y \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

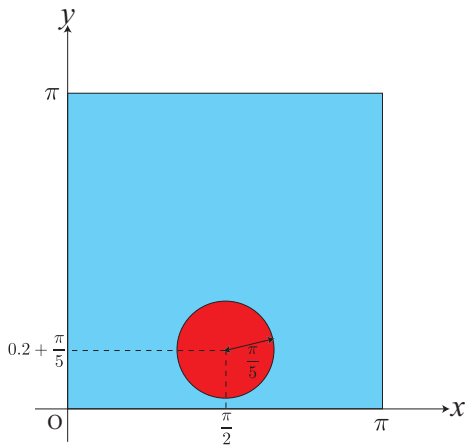


Fig. A.3: Geometry of shearing flow problem

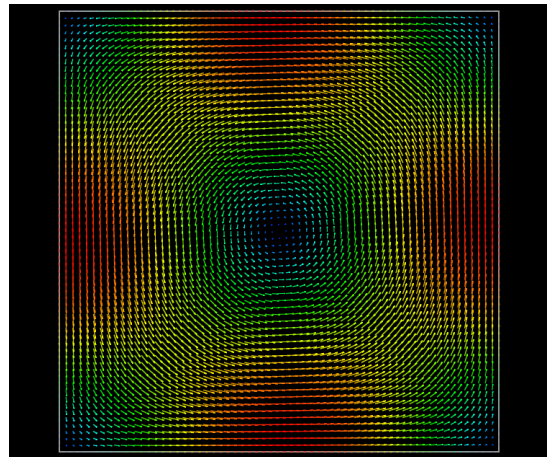


Fig. A.4: Velocity field

を与え，変形した図形を初期形状に戻す．クーラン数は 0.25，格子分割数は 100×100 である．

PLIC法による結果と2次精度風上差分法を用いたVOF法による計算結果を Fig.A.7 に示す．Fig.A.7 より，VOF 法では界面が細くなるにつれて数値拡散が大きくなり，最終形状は初期形状と大きく異なっている．一方，PLIC 法では 1000 ステップ時には界面の分裂が見られるものの，細い界面形状も捕捉されており，最終形状がほぼ円形に回復していることが確認できる．

さらに，格子分割数 64^2 ， 128^2 ， 256^2 ， 512^2 で計算を行い， L_1 誤差により精度を定量的に比較した．また L_1 誤差の収束性を検討した． L_1 誤差は，式 (A.2) で定義している．Fig.A.13 に計算結果を示す．グラフの横軸は格子幅の対数，縦軸は L_1 誤差の対数である．Fig.A.13 より，VOF 法では 0.74 次精度であるのに対して，PLIC 法では 0.95 次精度で収束していることが確認できる．また，グラフ中の白丸は VOF 法の L_1 誤差の大きさに対する PLIC 法の L_1 誤差の大きさの比である． $N = 64^2$ では 0.22， $N = 128^2$ では 0.17， $N = 256^2$ では 0.14， $N = 512^2$ では 0.15 となっており，PLIC 法では誤差が平均して約 83%減少している．

A.3 3D Deformation field

次に，3次元移流計算テストの結果を示す．ここでは，まず 3D Deformation field 問題 [97] による移流計算テストの結果を示す．解析モデル形状は，半径 0.15，中心

座標 (0.35,0.35,0.35) の球であり，解析領域の大きさは $1 \times 1 \times 1$ である．解析領域に対して，次式の世界場を与える．

$$\begin{aligned} v_x &= 2\sin^2(\pi x)\sin(2\pi y)\sin(2\pi z)\cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \\ v_y &= -\sin(2\pi x)\sin^2(\pi y)\sin(2\pi z)\cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \\ v_z &= -\sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\sin^2(\pi z)\cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

式 (A.5) において周期 $T = 3.0$ を与えている．クーラン数は 0.5，格子分割数は 256^3 である．

PLIC法による結果と2次精度風上差分法を用いたVOF法による計算結果を Fig.A.8 に示す．Fig.A.8 は VOF 値 0.5 の等数値面を描いたものである．Fig.A.8 より，VOF 法では $t = 1.50$ で界面が薄くなったとき物体の一部に穴が空き，界面を捕捉できなくなっている．これに対して，PLIC 法では非常に薄くなった界面も捕捉できていることがわかる．

さらに，格子分割数 $32^3, 64^3, 128^3, 256^3$ で計算を行い， L_1 誤差により精度を定量的に比較した．また L_1 誤差の収束性を検討した． L_1 誤差は，式 (A.2) で定義している．Fig.A.14 に計算結果を示す．グラフの横軸は格子幅の対数，縦軸は L_1 誤差の対数である．Fig.A.14 より，VOF 法では 0.43 次精度であるのに対して，PLIC 法では 1.13 次精度で収束していることが確認できる．また，グラフ中の白丸は VOF 法の L_1 誤差の大きさに対する PLIC 法の L_1 誤差の大きさの比である． $N = 32^3$ では 0.43， $N = 64^3$ では 0.27， $N = 128^3$ では 0.16， $N = 256^3$ では 0.14 となっており，PLIC 法では誤差が平均して約 75% 減少している．

また，クーラン数の大きさ，すなわち時間増分の大きさが界面捕捉の精度に与える影響についても検証した．Fig.A.18 に結果を示す．このグラフの横軸はクーラン数，縦軸は L_1 誤差である．Fig.A.18 に示すように，クーラン数を 0.1 から 1.0 まで変化させても安定して計算できることを確認した．また，クーラン数が小さくなるにつれて， L_1 誤差が収束することも確認できる．

A.4 3D Zalesak's sphere rotation

ここでは，3D Zalesak's sphere rotation 問題 [98] による移流計算テストの結果を示す．解析モデル形状は，半径 0.15，中心座標 (0.15, 0.75, 0.5) の球に幅 0.05 深さ 0.125

の溝がある立体である．解析領域の大きさは $1 \times 1 \times 1$ である．解析領域に対して，次式の世界場を与える．

$$\begin{aligned} v_x &= -2\pi(y - 0.5) \\ v_y &= +2\pi(x - 0.5) \\ v_z &= 0 \end{aligned} \tag{A.6}$$

クーラン数は 0.25，格子分割数は 256^3 である．

PLIC法による結果と2次精度風上差分法を用いたVOF法による計算結果を Fig.A.9 に示す．Fig.A.9 は VOF 値 0.5 の等数値面を描いたものである．Fig.A.9 より，1 回転後 VOF 法では溝の角が丸くなっているのに対して，PLIC 法では急峻な界面も捕捉されていることがわかる．

さらに，格子分割数 32^3 ， 64^3 ， 128^3 ， 256^3 で計算を行い， L_1 誤差により精度を定量的に比較した．また L_1 誤差の収束性を検討した． L_1 誤差は，式 (A.2) で定義している．Fig.A.15 に計算結果を示す．グラフの横軸は格子幅の対数，縦軸は L_1 誤差の対数である．Fig.A.15 より，VOF 法では 0.68 次精度であるのに対して，PLIC 法では 1.17 次精度で収束していることが確認できる．また，グラフ中の白丸は VOF 法の L_1 誤差の大きさに対する PLIC 法の L_1 誤差の大きさの比である． $N = 32^3$ では 0.28， $N = 64^3$ では 0.19， $N = 128^3$ では 0.11， $N = 256^3$ では 0.09 となっており，PLIC 法では誤差が平均して約 83% 減少している．

A.5 3D Shearing flow

ここでは，3D Shearing flow 問題 [?] による移流計算テストの結果を示す．解析モデル形状は，半径 0.15，中心座標 $(0.5, 0.75, 0.25)$ の球で，解析領域の大きさは $1 \times 1 \times 1$ である．解析領域に対して，次式の世界場を与える．

$$\begin{aligned} v_x &= \sin(2\pi y) \sin^2(\pi x) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \\ v_y &= -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \\ v_z &= U_{\max} \left(1 - \frac{r}{R}\right)^2 \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \end{aligned} \tag{A.7}$$

式 (A.7) において， $U_{\max} = 1.0$ ， $r = \sqrt{(x_1 - 0.5)^2 + (x_2 - 0.5)^2}$ ， $R = 0.5$ ，周期 $T = 3.0$ である．またクーラン数は 0.5，格子分割数は 256^3 である．

PLIC法による結果と2次精度風上差分法を用いたVOF法による計算結果をFig.A.10に示す。Fig.A.10はVOF値0.5の等数値面を描いたものである。Fig.A.10だけでは界面の捕捉精度の評価は難しいが、Fig.A.16より、 256^3 ではVOF法に対するPLIC法の誤差の比が0.29であることがわかる。

さらに、格子分割数 32^3 、 64^3 、 128^3 、 256^3 で計算を行い、 L_1 誤差により精度を定量的に比較した。また L_1 誤差の収束性を検討した。 L_1 誤差は、式(A.2)で定義している。Fig.A.16に計算結果を示す。グラフの横軸は格子幅の対数、縦軸は L_1 誤差の対数である。Fig.A.16より、VOF法もPLIC法もほぼ1次精度で収束していることが確認できる。また、グラフ中の白丸はVOF法の L_1 誤差の大きさに対するPLIC法の L_1 誤差の大きさの比である。 $N = 32^3$ では0.29、 $N = 64^3$ では0.19、 $N = 128^3$ では0.24、 $N = 256^3$ では0.29となっており、PLIC法では誤差が平均して約75%減少している。

A.6 3D Stanford bunny rotation



Fig. A.5: Stanford bunny

ここでは、3次元複雑形状に対するPLIC法の界面捕捉精度を検討する。3次元複雑形状として、Fig.A.5に示すStanford bunny[99]を取り上げる。初期の物体形状については、PLY形式のデータファイルをV-Xgen[100]を用いてボクセルデータに変換したものを利用している。

解析領域の大きさは $0.5 \times 0.5 \times 0.5$ であり，次式の世界速度場を与える．

$$\begin{aligned}v_x &= -2\pi(y - y_c) \\v_y &= +2\pi(x - x_c) \\v_z &= 0\end{aligned}\tag{A.8}$$

式 (A.8) において， x_c と y_c はそれぞれ解析領域の中心点の x 座標と y 座標で， $x_c = -0.01684$ ， $y_c = -0.05$ である．またクーラン数は 0.25，格子分割数は 256^3 である．

PLIC 法による結果と 2 次精度風上差分法を用いた VOF 法による計算結果を Fig.A.11 に示す．Fig.A.11 は VOF 値 0.5 の等数値面を描いたものである．Fig.A.11 より，1 回転後，VOF 法では Stanford bunny の耳の部分のように長細い界面を捕捉できていない．一方，PLIC 法では初期形状をほぼ保っており，複雑形状に対する捕捉精度の高さを確認できる．

さらに，格子分割数 32^3 ， 64^3 ， 128^3 ， 256^3 で計算を行い， L_1 誤差により精度を定量的に比較した．また L_1 誤差の収束性を検討した． L_1 誤差は，式 (A.2) で定義している．Fig.A.17 に計算結果を示す．グラフの横軸は格子幅の対数，縦軸は L_1 誤差の対数である．Fig.A.17 より，VOF 法では 0.56 次精度で収束しているのに対して，PLIC 法では 0.86 次精度で収束していることがわかる．また，グラフ中の白丸は VOF 法の L_1 誤差の大きさに対する PLIC 法の L_1 誤差の大きさの比である． $N = 32^3$ では 0.41， $N = 64^3$ では 0.33， $N = 128^3$ では 0.26， $N = 256^3$ では 0.22 となっており，PLIC 法では誤差が平均して約 70%減少している．

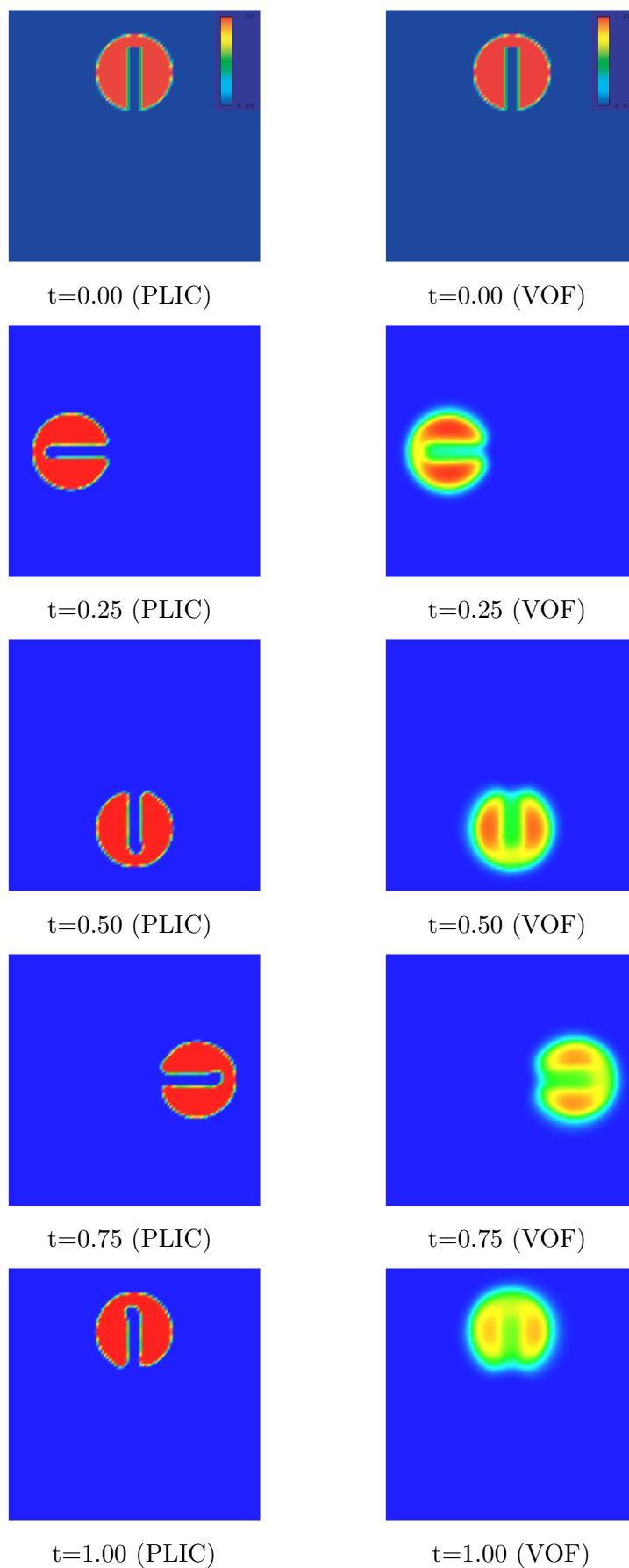


Fig. A.6: Zalesak's disk rotation

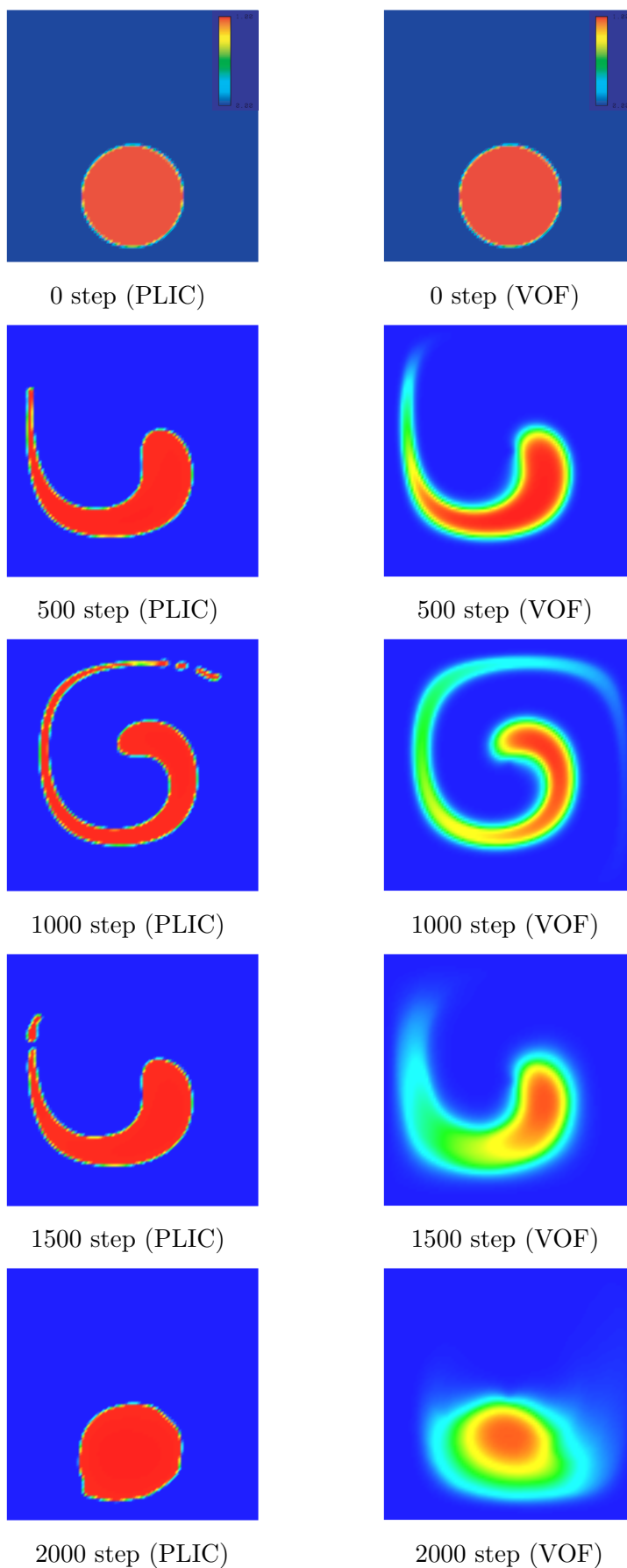


Fig. A.7: 2D shearing flow

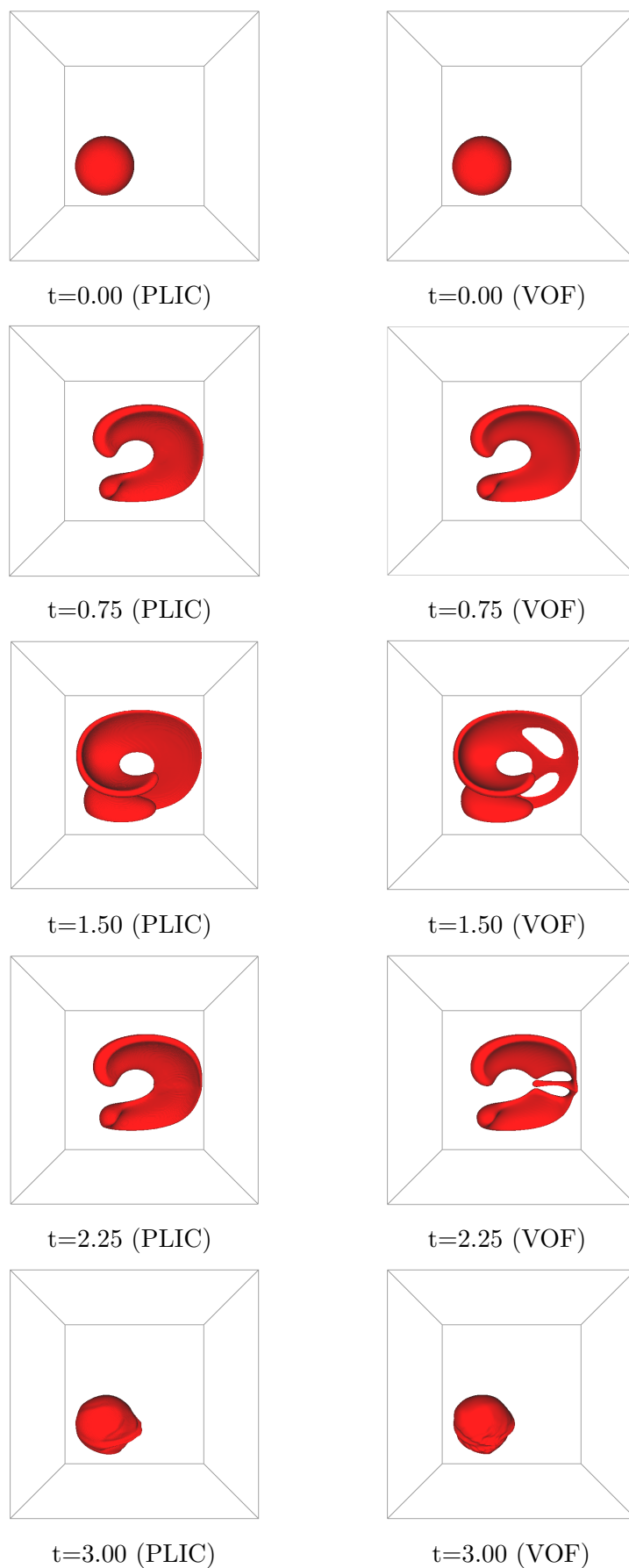


Fig. A.8: 3D deformation field

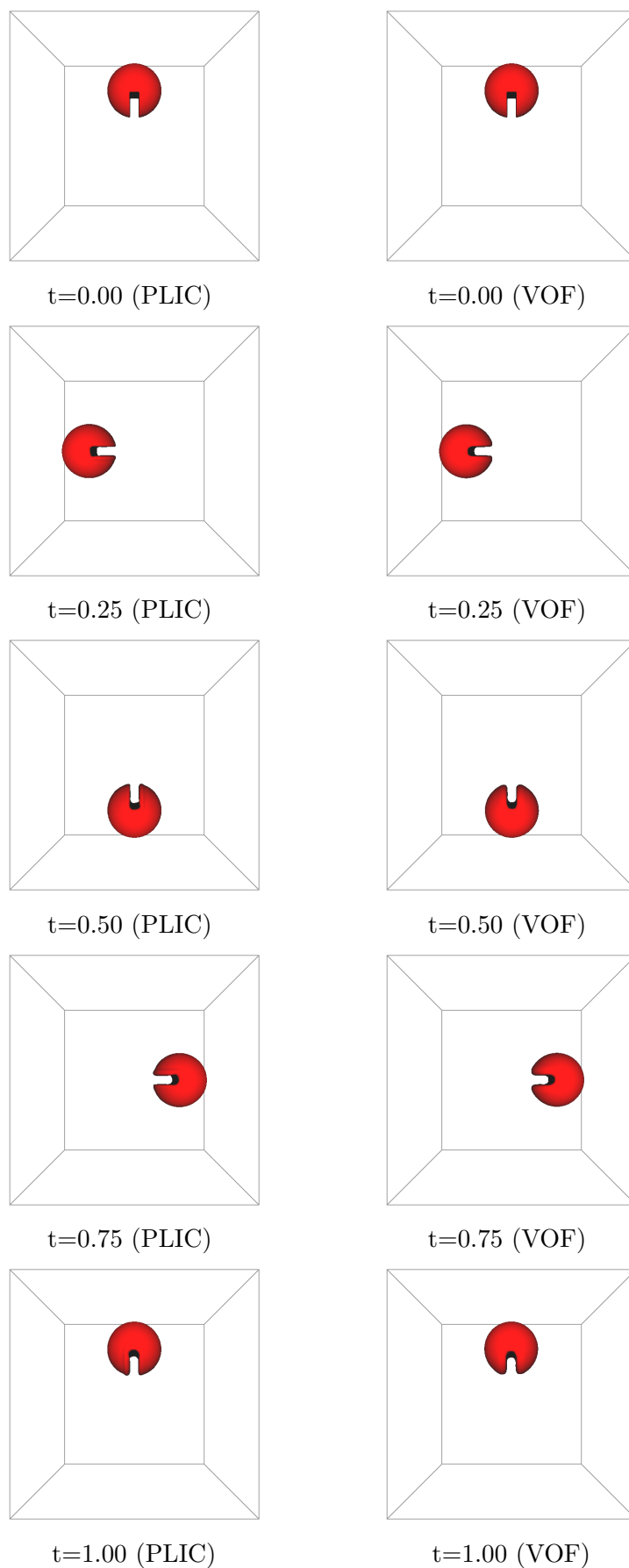


Fig. A.9: 3D Zalesak's sphere rotation

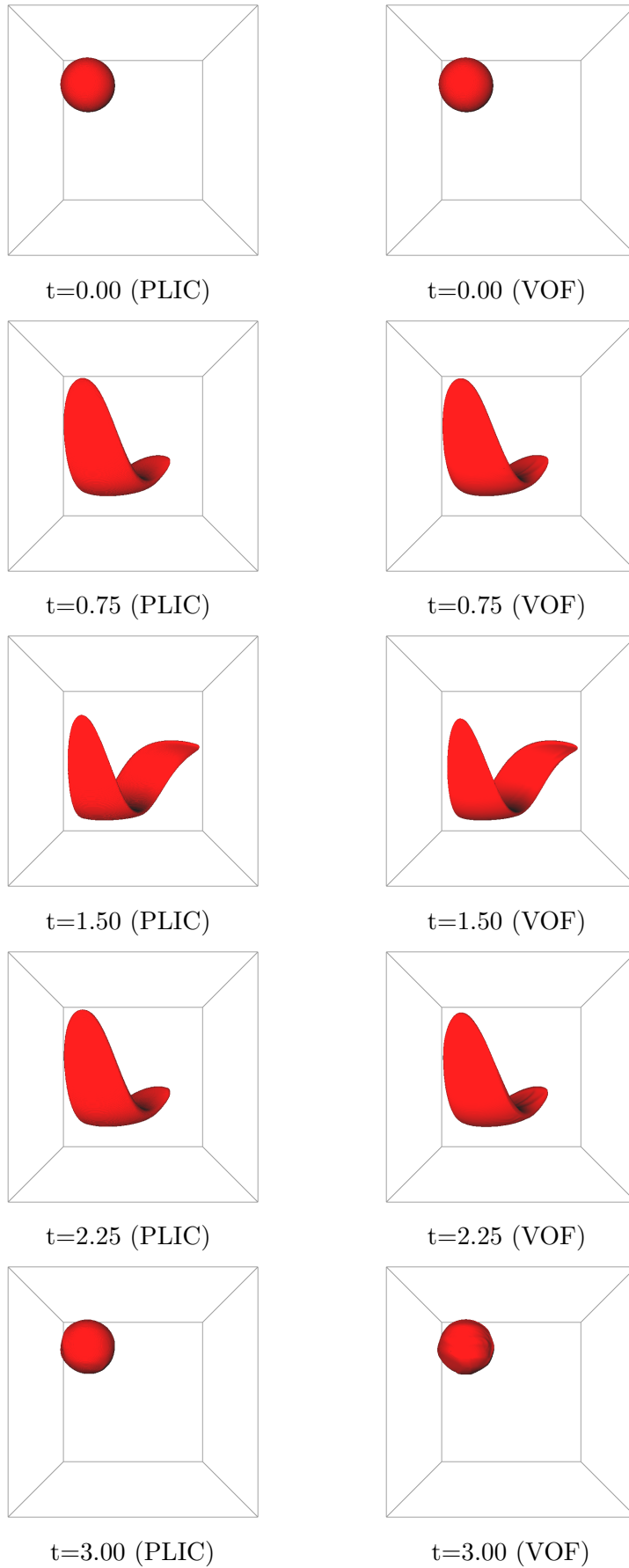
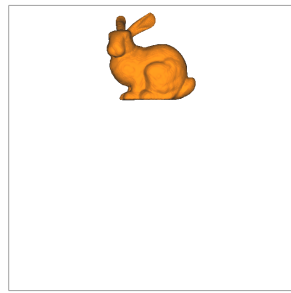
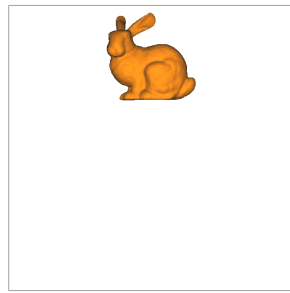


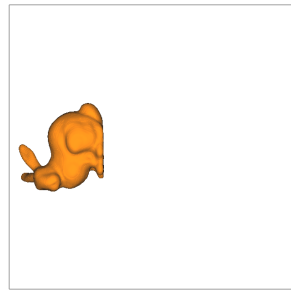
Fig. A.10: 3D shearing flow



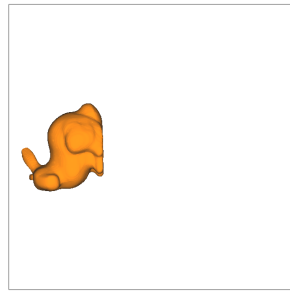
t=0.00 (PLIC)



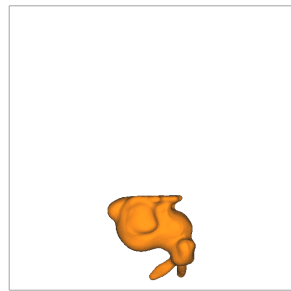
t=0.00 (VOF)



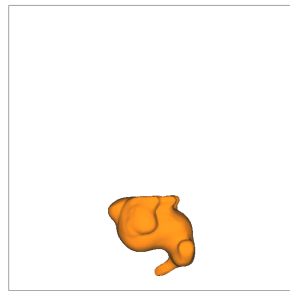
t=0.25 (PLIC)



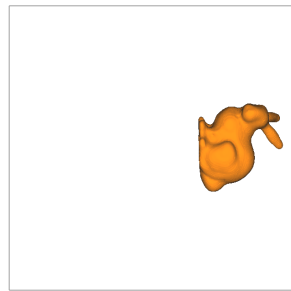
t=0.25 (VOF)



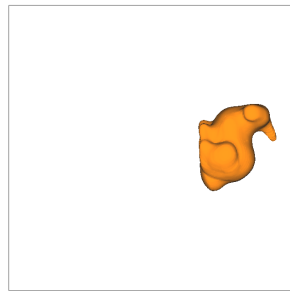
t=0.50 (PLIC)



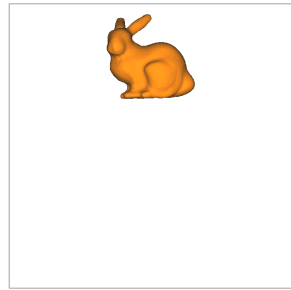
t=0.50 (VOF)



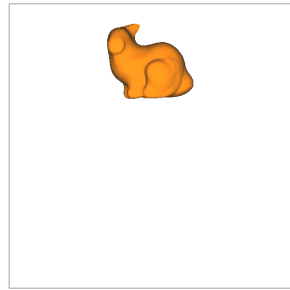
t=0.75 (PLIC)



t=0.75 (VOF)



t=1.00 (PLIC)



t=1.00 (VOF)

Fig. A.11: 3D Stanford bunny rotation

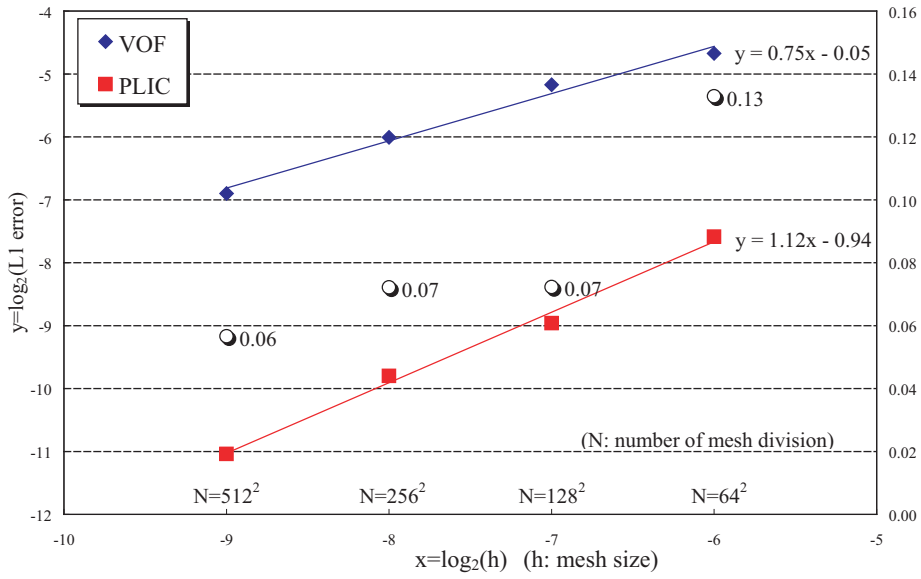


Fig. A.12: L_1 error of Zalesak's disk rotation

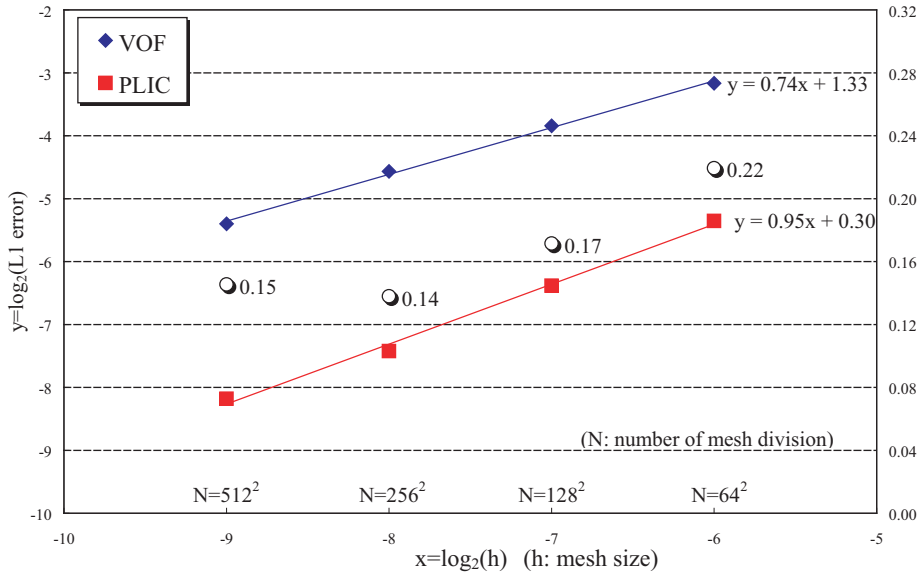


Fig. A.13: L_1 error of 2D shearing flow

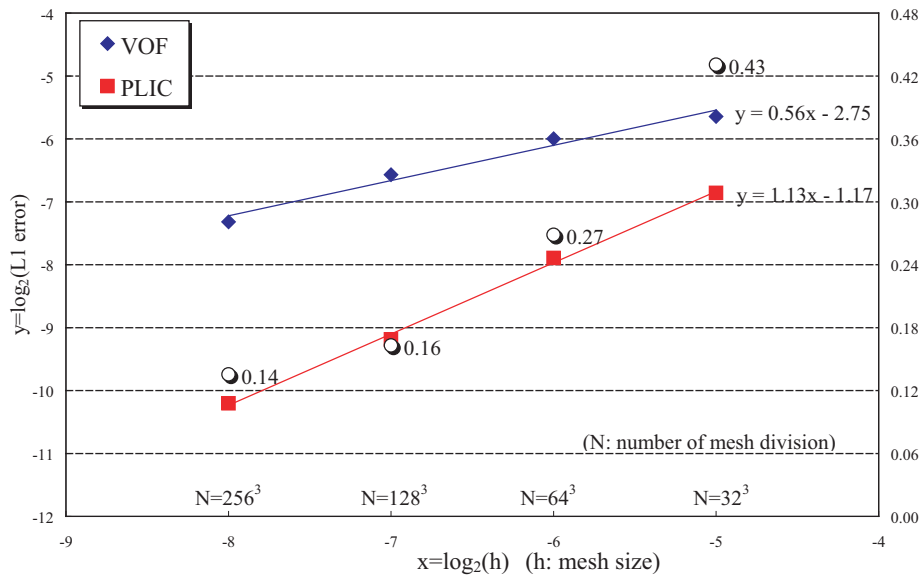


Fig. A.14: L_1 error of 3D deformation field

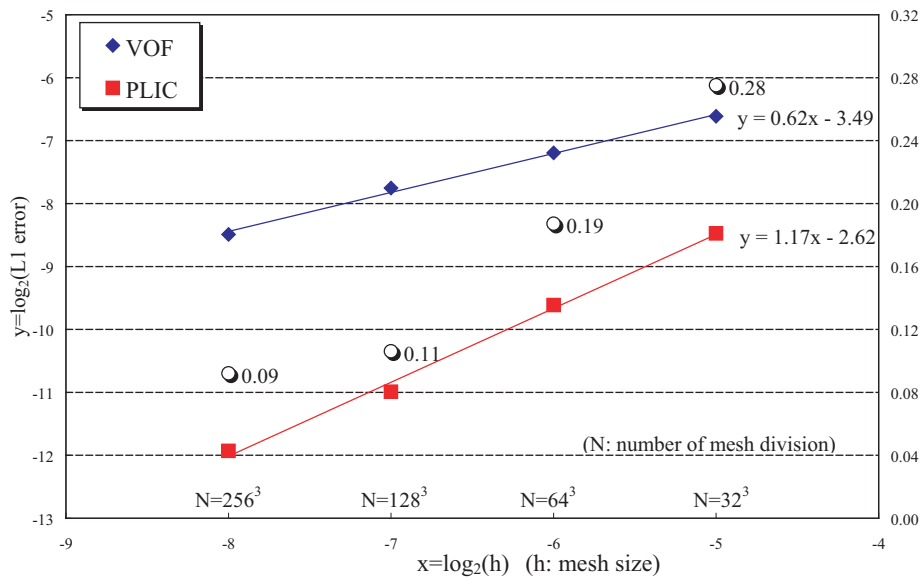


Fig. A.15: L_1 error of 3D Zalesak's sphere rotation

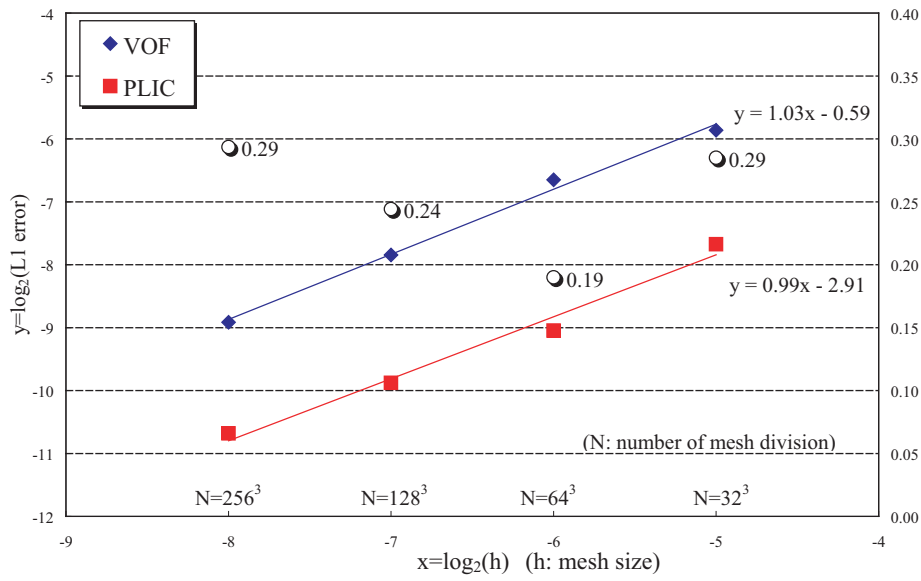


Fig. A.16: L_1 error of 3D shearing flow

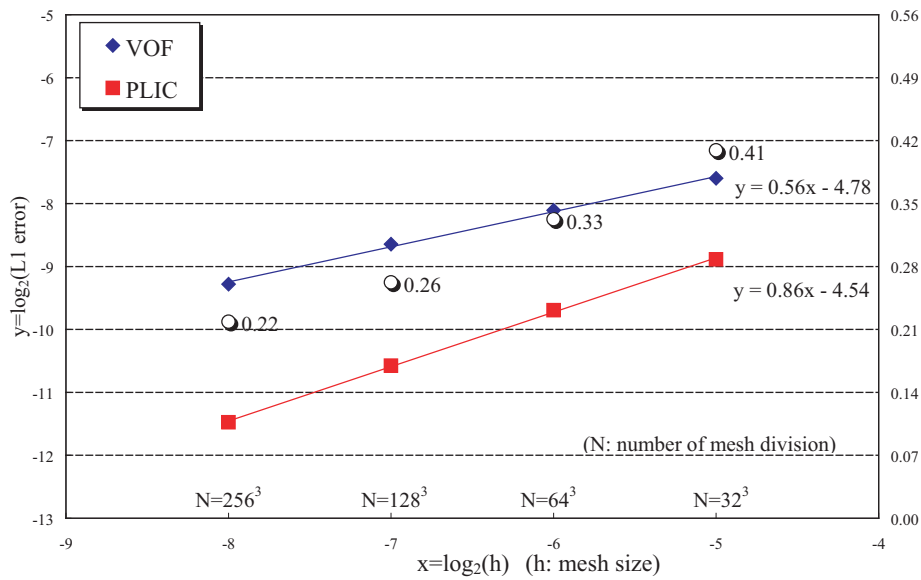


Fig. A.17: L_1 error of 3D stanford bunny rotation

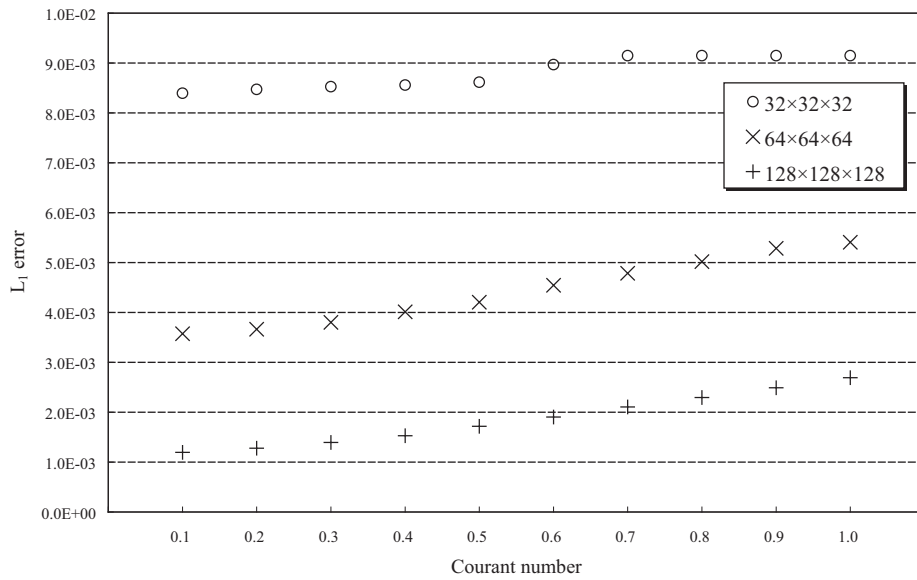


Fig. A.18: L_1 errors of 3D deformation field problem as a function of CFL

A.7 体積保存性

ここでは、以上に示した2次元及び3次元の移流計算テストについて、体積保存性を検討する。Table.A.1～Table.A.6に、それぞれの移流計算テストにおける初期形状に対する最終形状の体積誤差を示す。Table.A.1～Table.A.6に示すように、VOF法の体積誤差は2次元では平均して0.004%、3次元では平均して0.021%である。また、PLIC法の体積誤差は2次元では平均して0.007%、3次元では平均して0.024%である。よって、VOF法もPLIC法のいずれも非常に良い体積保存性が維持されていることがわかる。

A.8 計算時間

次に、PLIC法とVOF法の計算時間を比較する。Fig.A.19～Fig.A.24に、それぞれの移流計算テストに要した計算時間(CPU time)を示す。またFig.A.19～Fig.A.24のグラフにおける白丸は、VOF法の計算時間を1とした場合のPLIC法の計算時間である。Fig.A.19～Fig.A.24より、全ての移流計算テストにおいてPLIC法の計算時間の方が少ないことがわかる。具体的には、VOF法と比べPLIC法の計算時間は、2次元問題では平均して約19%、3次元問題では16%少ない。

3次元PLIC法のアルゴリズムの検討・実装をしていた当初は、計算時間が非常に大きくなることを予想していたが、上述したように実際には計算時間が減少するという結果が得られた。これには次の2つの理由が考えられる。第一に、境界面の法線ベクトルの計算について、6.2.3節で述べたように、アルゴリズムが単純で計算コストの軽いYoungsの方法を用いたことである。移流計算の際、Youngsの方法を用いればステンシルは3格子でよいが、2次精度風上差分法を用いたVOF法では5格子分のステンシルが必要になる。第二に、境界面の位置を決定する際に計算する3次方程式の解法として、反復計算の必要がない方法を用いたことである。この手法では場合分けによって3次方程式の厳密解を直接的に計算するため、処理が非常に単純である。

Table A.1: Volume conservation rate of Zalesak's disk rotation

	PLIC	VOF
64^2	$+3.39 \times 10^{-6}$	$+2.41 \times 10^{-5}$
128^2	-2.16×10^{-5}	-9.79×10^{-6}
256^2	-1.70×10^{-5}	-1.30×10^{-5}
512^2	-1.61×10^{-5}	-1.67×10^{-5}

Table A.2: Volume conservation rate of 2D shearing flow

	PLIC	VOF
64^2	$+6.05 \times 10^{-6}$	-1.90×10^{-6}
128^2	-1.13×10^{-4}	-4.29×10^{-5}
256^2	-1.37×10^{-4}	-1.00×10^{-4}
512^2	-2.49×10^{-4}	-1.34×10^{-4}

Table A.3: Volume conservation rate of 3D deformation field

	PLIC	VOF
32^3	-4.41×10^{-5}	-2.03×10^{-5}
64^3	-3.88×10^{-4}	-1.27×10^{-4}
128^3	-3.79×10^{-4}	-5.64×10^{-4}
256^3	-1.39×10^{-3}	-1.85×10^{-3}

Table A.4: Volume conservation rate of 3D Zalesak's sphere rotation

	PLIC	VOF
32^3	$+8.83 \times 10^{-6}$	$+3.06 \times 10^{-3}$
64^3	-1.17×10^{-4}	-4.16×10^{-5}
128^3	-1.31×10^{-4}	-1.66×10^{-4}
256^3	-4.34×10^{-5}	-3.80×10^{-4}

Table A.5: Volume conservation rate of 3D shearing flow

	PLIC	VOF
32^3	-1.25×10^{-4}	-1.45×10^{-4}
64^3	-2.24×10^{-4}	$+7.45 \times 10^{-4}$
128^3	-1.92×10^{-4}	-2.12×10^{-4}
256^3	-7.12×10^{-4}	-7.11×10^{-4}

Table A.6: Volume conservation rate of 3D stanford bunny rotation

	PLIC	VOF
32^3	$+3.01 \times 10^{-4}$	-2.60×10^{-3}
64^3	-7.13×10^{-5}	$+5.00 \times 10^{-6}$
128^3	-1.90×10^{-4}	$+4.66 \times 10^{-6}$
256^3	-1.69×10^{-4}	-3.03×10^{-4}

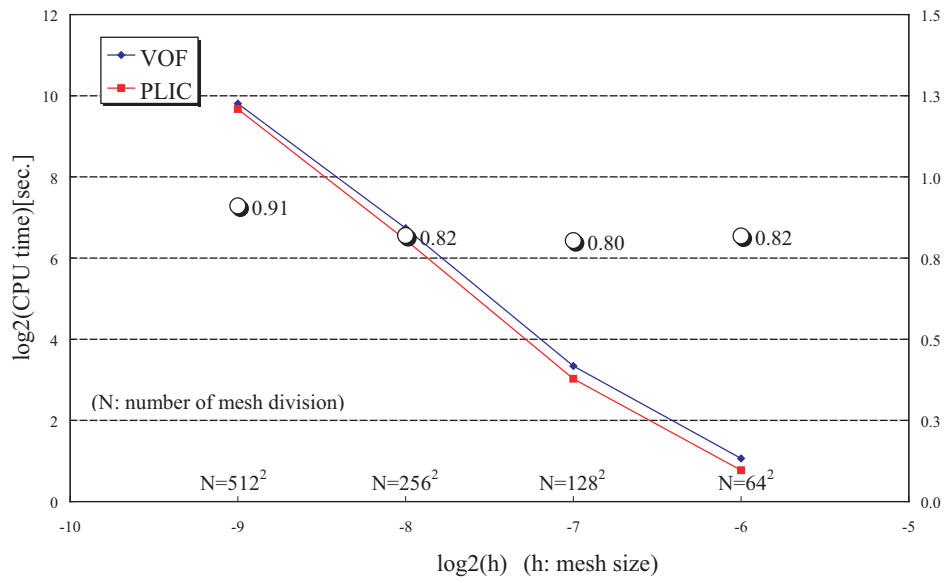


Fig. A.19: CPU time of 2D Zalesak's disk rotation

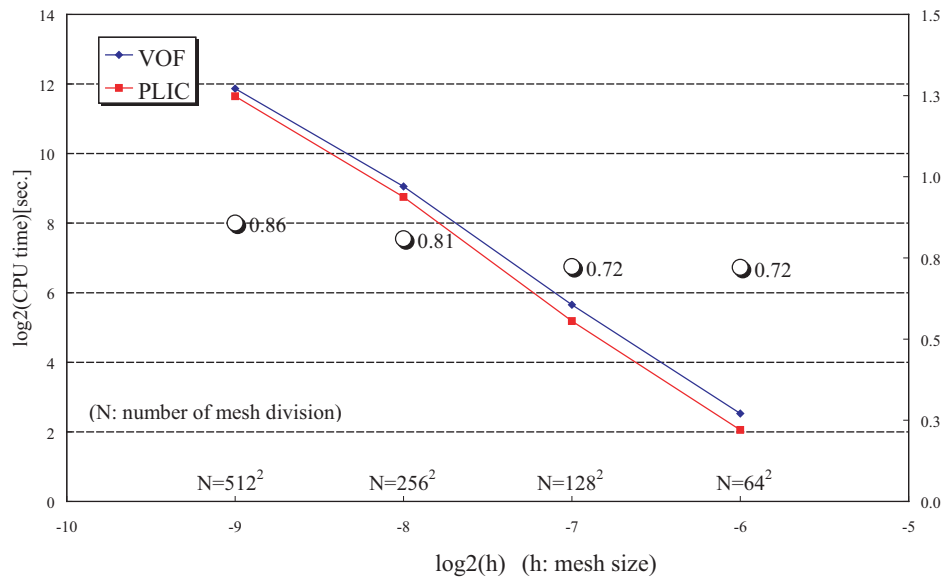


Fig. A.20: CPU time of 2D shearing flow

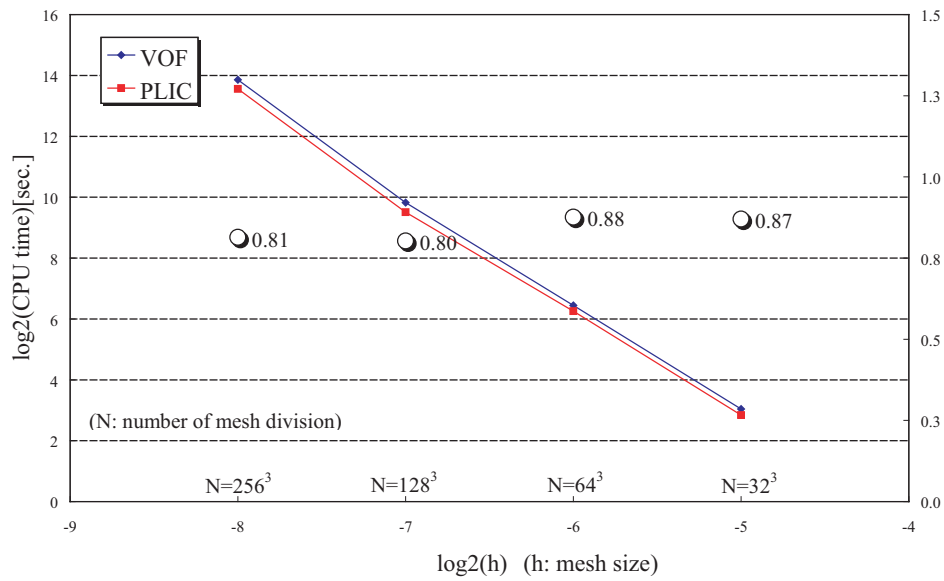


Fig. A.21: CPU time of 3D deformation field

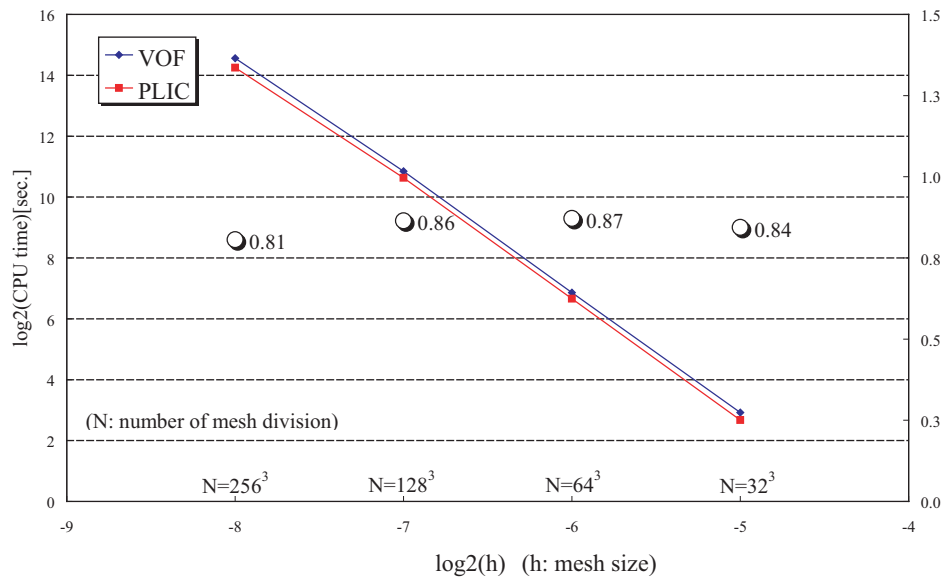


Fig. A.22: CPU time of 3D Zalesak's sphere rotation

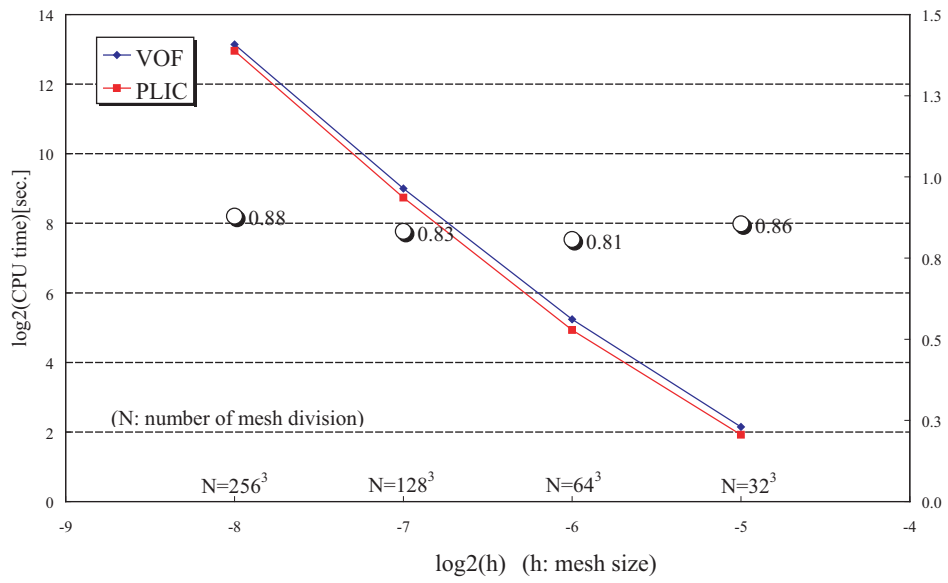


Fig. A.23: CPU time of 3D shearing flow

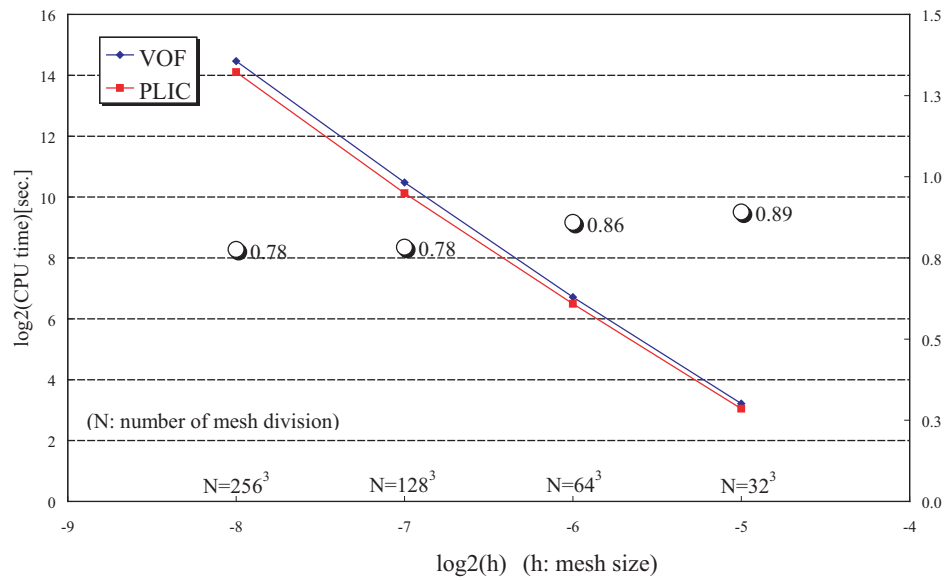


Fig. A.24: CPU time of 3D Stanford bunny rotation

A.9 まとめ

以上、2次元及び3次元の移流計算テストにより PLIC 法の界面の捕捉精度、体積保存性、計算時間について検討した。移流計算テストにより得られた知見を以下にまとめる。

- PLIC 法により、2次精度風上差分法を用いた VOF 法に比べ、界面の捕捉精度が大幅に上昇した。具体的には、 L_1 誤差は2次元問題で平均して約 88%、3次元問題で平均して約 75%減少している。
- 2次精度風上差分法を用いた VOF 法の L_1 誤差は約 0.69 次精度で収束したのに対して、PLIC 法の L_1 誤差は約 1 次精度で収束することを確認した。
- クーラン数を 0.1 から 1.0 まで変化させても安定に計算できることを確認した。またクーラン数に対する L_1 誤差の収束性も確認した。
- PLIC 法と VOF 法について、いずれも非常に良い体積保存性が維持されていることを確認した。
- PLIC 法の計算時間は、2次精度風上差分法を用いた VOF 法の計算時間と比べて、2次元問題では平均して約 19%、3次元問題では平均して約 16%少ない。

付録B VOF法による界面捕捉

本章では、2次精度風上差分法を用いたVOF法による界面捕捉手法について説明する。

B.1 VOF法

VOF (Volume-of-Fluid) 法は、VOF関数 ϕ を要素毎に定義し、その値によってその要素にどの程度の割合で物質が存在しているかを表す方法である。すなわち、 $\phi = 0$ であれば要素内にその物体は存在しない、または他の物体が存在することを意味し、 $\phi = 1$ であれば要素はその物体で満たされていることを示す。また、 $0 < \phi < 1$ であればその要素に境界面が存在することになる。

VOF法では、以下のVOF関数の移流方程式を導入し、これを解くことでVOFを移流させる。

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\phi = 0 \quad (\text{B.1})$$

ここで、

$$\nabla \cdot (\mathbf{v}\phi) = \mathbf{v} \cdot \nabla\phi + \phi\nabla \cdot \mathbf{v} \quad (\text{B.2})$$

の関係を考慮すると、式 (B.1) は以下ようになる。

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\phi) - \phi\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (\text{B.3})$$

本研究では、非圧縮性を仮定しているため、非圧縮性の連続の式が成り立つ。したがって、上式の左辺第3項は0となり、式 (B.1) は以下の式に置き換えることができる。

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\phi) = 0 \quad (\text{B.4})$$

上式の形に変えたのは、次節で説明する発散型スキームのMUSCL法を適用するためである。

B.2 2次精度風上差分法

2次精度風上差分法として、MUSCL法を用いた場合について述べる。VOFのなまりが拡大しすぎると、物体の変形状態を捉えることが困難になる。一般的には式(B.4)を解く際に、精度保持のために1次精度では不十分であり、最低2次精度は必要とされることが考えられている[108]。したがって本研究では、式(B.4)の解法として2次精度のMUSCL(Monotone Upwind Schemes for Conservation Laws)法[110][111]を用いる。MUSCL法では、要素境界における両側の物理量の数値流束を用いてその勾配を評価する。このときに要素両側の物理量として、両境界に接する要素の値をそのまま使うのではなく、さらに隣りの要素での値を用いて定めた、要素内部の物理量の分布関数によって求める。このとき、制限関数を用いることで、後で述べるTVD条件と呼ばれる条件を満たすように調整する。こうすることで数値振動の発生などの不具合を抑え、計算を安定に進めることができる。

B.2.1 TVD条件

2次精度以上の移流方程式の解法を用いる場合、計算が進むにつれてVOFの数値振動が大きくなることがある。この数値振動は物理量の種類によって非現実的な計算結果をもたらす。したがって、この数値振動は数値計算にとって致命的になることが多々あるので、移流方程式の解法には単調性を維持できるスキームが必要となる。単調であるという条件を緩めて、全変動(total variation)が増加しないという概念が提案されている[112]。全変動は次のように定義される。

$$TV(\phi^n) = \sum_i |(\phi_{i+1}^n - \phi_i^n)| \quad (\text{B.5})$$

この全変動とは自由・移動境界面のでこぼこ具合を示したものである。この全変動が増加しないとする条件をTVD(Total Variation Diminishing)条件[112]と言い、以下のように表される。

$$TV(\phi^{n+1}) < TV(\phi^n) \quad (\text{B.6})$$

この条件を満たす解法は単調性を維持できる[110]。MUSCL法では、後で述べる制限関数を導入してTVD条件を満足させている。

B.2.2 移流方程式の離散化

式 (B.4) を時間差分近似し，以下のように表す．

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t \nabla \cdot (\mathbf{v} \phi^n) \quad (\text{B.7})$$

上式を，成分を用いて以下のように表す．

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t \left(\frac{\partial u \phi^n}{\partial x} + \frac{\partial v \phi^n}{\partial y} + \frac{\partial w \phi^n}{\partial z} \right) \quad (\text{B.8})$$

上式を x, y, z の各方向の勾配に分けて，以下のように計算する．

$$\begin{aligned} \phi^* &= \phi^n - \Delta t \left(\frac{\partial u \phi^n}{\partial x} \right) \\ \phi^{**} &= \phi^* - \Delta t \left(\frac{\partial v \phi^*}{\partial y} \right) \\ \phi^{n+1} &= \phi^{**} - \Delta t \left(\frac{\partial w \phi^{**}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

すなわち， x 方向の勾配を計算した ϕ^* を用いて y 方向の勾配を計算して ϕ^{**} を求め，これを z 方向の勾配の計算の際に用いる．

式 (B.8) を要素境界における VOF の数値流束の勾配で差分近似すると，以下のようになる．

$$\begin{aligned} \phi_{i,j,k}^{n+1} &= \phi_{i,j,k}^n - \Delta t \left(\frac{\bar{u}_{i+\frac{1}{2},j,k} \tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \bar{u}_{i-\frac{1}{2},j,k} \tilde{\phi}_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x} \right) \\ &\quad - \Delta t \left(\frac{\bar{v}_{i,j+\frac{1}{2},k} \tilde{\phi}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \bar{v}_{i,j-\frac{1}{2},k} \tilde{\phi}_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y} \right) \\ &\quad - \Delta t \left(\frac{\bar{w}_{i,j,k+\frac{1}{2}} \tilde{\phi}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \bar{w}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \tilde{\phi}_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

ここで， $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ は速度の平均値であり，要素面中心の速度である．また， $\tilde{\phi}$ は要素面中心における VOF 値であり，これは次節で説明するように制限関数を用いて，2 次精度的に内挿される．これらの位置関係を Fig.B.1 に示しておく (2 次元)．

B.2.3 制限関数

本研究では，MUSCL 法における制限関数として Slope Limiter と呼ばれる制限関数を用いる．要素境界の物理量を内挿する際に，2 次精度のスキームでは要素境界

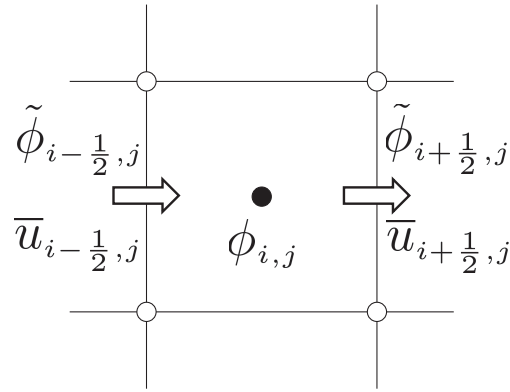


Fig. B.1: Advection of density function

に余計な極大が発生してしまうことがある．Slope Limiter は，この極大の発生を抑えて TVD 条件を満たす働きをする．

要素境界の物理量を内挿するために，Fig.B.2 に示すように，各要素に傾き (Slope) を定義する．なお，MUSCL 法では多次元空間のそれぞれの方向で 1 次元移流計算を行う．したがって，説明は 1 次元で行うことにする．

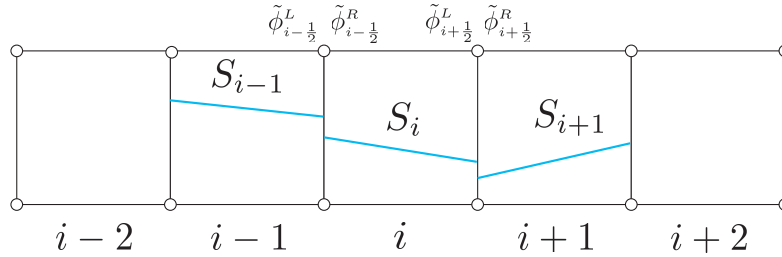


Fig. B.2: Slope Limiter

定義した Slope を用いて，要素境界の物理量が以下のように計算される．

$$\begin{aligned}
 \tilde{\phi}_{i-\frac{1}{2}}^L &= \phi_{i-1} + S_{i-1} \frac{\Delta x}{2} \\
 \tilde{\phi}_{i-\frac{1}{2}}^R &= \phi_i - S_i \frac{\Delta x}{2} \\
 \tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^L &= \phi_i + S_i \frac{\Delta x}{2} \\
 \tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^R &= \phi_{i+1} - S_{i+1} \frac{\Delta x}{2}
 \end{aligned}
 \tag{B.11}$$

ここで，上添え字の R と L は Fig.B.2 で右から内挿した場合と，左から内挿した場合との違いを表しており，その点での速度の向きによって使い分け，風上化を施す．

Slope は以下の式により与えられる .

$$S = \frac{1}{2} \{ \text{sgn}(sl) + \text{sgn}(sr) \} \min(|sl|, |sc|, |sr|) \quad (\text{B.12})$$

ここで , $\text{sgn}(F)$ は F の符号を求める関数である . また , sl, sc, sr は要素 i においては以下のように計算される .

$$\begin{aligned} sl &= \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \\ sc &= \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} \\ sr &= \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

式 (B.12) より得られた S を用いて , 式 (B.11) により要素境界の物理量を求める . 風上化を施すために , 速度が正の場合は左から内挿したものを使い , 負の場合は右から内挿したものを使い , 数値流束 \bar{f} を計算する . このとき , 速度の向きを判別しなくても良いように , 以下のようにまとめる .

$$\bar{f}_{i-\frac{1}{2}} = \frac{\bar{u}_{i-\frac{1}{2}}(\tilde{\phi}_{i-\frac{1}{2}}^L + \tilde{\phi}_{i-\frac{1}{2}}^R) - |\bar{u}_{i-\frac{1}{2}}|(\tilde{\phi}_{i-\frac{1}{2}}^L - \tilde{\phi}_{i-\frac{1}{2}}^R)}{2} \quad (\text{B.14})$$

$$\bar{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\bar{u}_{i+\frac{1}{2}}(\tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^L + \tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^R) - |\bar{u}_{i+\frac{1}{2}}|(\tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^L - \tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^R)}{2} \quad (\text{B.15})$$

この数値流束の勾配を評価することにより , 移流計算を行う . この時 , 解析領域の端部要素の VOF について計算するためにゴーストメッシュを設置している . VOF の移流は 2 次精度で計算するため , Fig.B.3 に示すようにゴーストメッシュは 2 つあり , その両方に端部要素の VOF と同じ値を入れている .

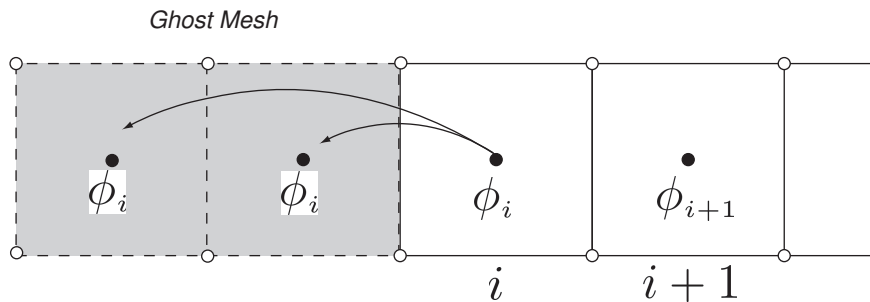


Fig. B.3: Ghost mesh for MUSCL method

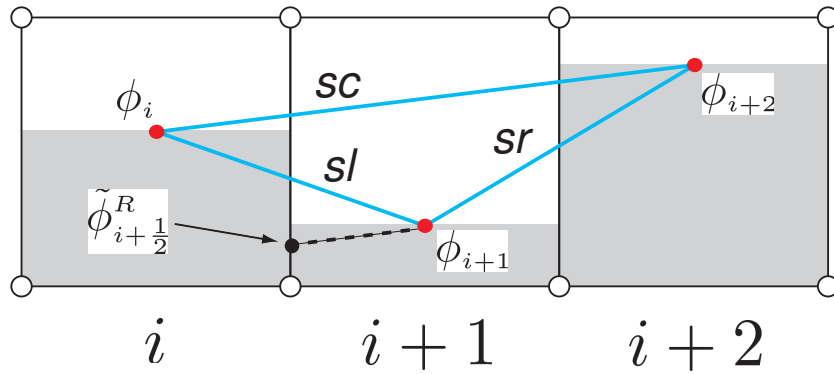


Fig. B.4: Slope limiter

最後に，式 (B.12) の働きについて説明する．VOF の分布が Fig.B.4 のような場合を考える．このような場合，本来は最も小さな傾きである sc を勾配として， $\tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^R$ を計算する．しかし，そうすると $\phi_i > \phi_{i+1} > \tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^R$ となり，要素境界に物理的には不合理な極大ができてしまうことになる．これは TVD 条件に反することであり，数値振動の発生につながる．したがって，これを防ぐために式 (B.12) では，このような状況になった場合は， $S = 0$ となるように計算されるようになっている． $S = 0$ ということは，一次風上差分に落としたということになり， $\tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^R = \phi_{i+1}$ となる．そうすると， $\phi_i > \tilde{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^R \geq \phi_{i+1}$ となり，単調性が維持できる．

謝辞

本論文は，私が日東電工株式会社に在籍しながら広島大学 大学院工学研究科 博士課程後期 輸送・環境システム専攻に進学し，山梨大学 大学院医学工学総合研究部の岡澤重信教授（2015年3月まで広島大学 大学院工学研究院のご所属），広島大学 大学院工学研究院の田中智行助教のご指導の下で行った研究の成果をまとめたものです．本研究を遂行するにあたり，多くの皆様からご指導とご鞭撻を賜りました．ここに深く感謝の意を表します．

岡澤先生には，私が学部生の時から現在に至るまで，指導教員として終始絶え間ないご指導とご鞭撻を賜りました．当時学部生であった私に博士課程への進学を勧めてください，計算力学の研究を志すきっかけを与えて頂いただけでなく，現在に至るまで様々な面で親身にご指導頂きました．田中先生には，日々のゼミを通じて数多くのご助言を頂いただけでなく，研究に行き詰った時にはいつも明るく叱咤激励して頂きました．広島大学 大学院工学研究院の北村充教授，濱田邦裕教授には，本論文を審査して頂く中で，丁寧かつ熱心なご指導を頂きました．

茨城大学 工学部 都市システム工学科の車谷麻緒准教授には，学会発表の場で数多くのご助言を頂いただけでなく，拡張有限要素法とペナルティ法を用いた界面不連続性の定式化について，詳細なご指導を頂きました．米国ローレンス・リバモア国立研究所の Efreem Vitali 博士には，Euler 型有限要素法への拡張有限要素法の導入についてご助言を頂きました．

日東電工株式会社の杉原保則氏，江里口冬樹氏，田中良和氏，前田和久氏には，博士課程後期に進学する機会を与えて頂きました．また，同社の中野真也氏には，粘着剤への鋼球衝突試験実施に際して多大なるご協力を頂きました．

以上の皆様方に，ここに重ねて厚く謝意を表します．最後に，何不自由のない大学生活を送らせてくれた祖父母と両親，あらゆる面で私を献身的に支えてくれた妻の雅子，大学院在学中に生まれ毎日私に元気をくれた息子の佳吾に感謝します．

査読付き学術論文

1. 西口浩司, 岡澤重信, 田中智行: Euler 型有限要素法による粘着剤の粘性-超弾性解析手法, 日本機械学会論文集 A 編, 78, 788, pp.375-389, 2012.
2. 西口浩司, 岡澤重信, 田中智行: Euler 型有限要素法による温度依存性を考慮した粘着剤の粘性-超弾性解析, 日本計算工学会論文集, 2013, pp.20130020, 2013.

国際会議における発表論文

1. K. Nishiguchi, S. Okazawa: FULL EULERIAN FINITE ELEMENT ANALYSIS OF PRESSURE-SENSITIVE ADHESIVES, *Blucher Mechanical Engineering Proceedings* 1.1, 10th World Congress on Computational Mechanics, pp.2497-2511, 2012.

招待講演

1. 西口浩司: オイラー型有限要素法による粘着剤の大変形シミュレーションへのアプローチ, 日本接着学会, アクリルポリマーの設計と粘接着用途への応用セミナー, 2013.

学会発表

1. 西口浩司 *et al.*: PLIC-VOF 法を用いた粘性-超弾性体の大変形解析, 第 60 回理論応用力学講演会, 2011.
2. K. Nishiguchi *et al.*: Flow Dynamic Analysis of Pressure Sensitive Adhesive, 16th International Conference on Finite Elements in Flow Problems, Munich (Germany), 2011.
3. 西口浩司 *et al.*: PLIC-VOF 法を用いた粘着剤の粘性-超弾性解析, 第 16 回計算工学講演会, 2011.
4. K. Nishiguchi *et al.*: Eulerian Visco-Hyperelastic Analysis for Adhesive, 11th U.S. National Congress on Computational Mechanics, Minneapolis (USA), 2011.

5. 西口浩司 *et al.*: 温度依存性を考慮した粘着剤の Euler 型有限要素解析, 第 61 回理論応用力学講演会, 2012.
6. 西口浩司 *et al.*: Euler 型解法による温度依存性を考慮した粘着剤の粘性-超弾性解析, 第 17 回計算工学講演会, 2012.
7. K. Nishiguchi *et al.*: Full Eulerian Finite Element Analysis of Pressure-Sensitive Adhesives, 10th World Congress on Computational Mechanics, São Paulo (Brazil), 2012.
8. 西口浩司 *et al.*: 安定化有限要素法を用いた粘性-超弾性体の大変形解析, 第 62 回理論応用力学講演会, 2013.
9. 西口浩司 *et al.*: 安定化有限要素法を用いた粘性-超弾性解析手法, 第 18 回計算工学講演会, 2013.
10. K. Nishiguchi *et al.*: Full Eulerian Finite Element Formulation using SUPG Method for Large Deformation Analysis of Pressure-Sensitive Adhesive, 12th U.S. National Congress on Computational Mechanics, Raleigh (USA), 2013.

参考文献

- [1] R. Courant: Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations, *Bulletin of the American Mathematical Society*, **49**-1, pp. 1-23, 1943.
- [2] M. J. Turner, R. W. Clough, H. C. Martin, L. J. Topp: Stiffness and deflection analysis of complex structures, *Journal of the Aerospace Sciences*, **23**, pp. 805-823, 1956.
- [3] J. Martin, V. Wihelmy, D. Pinella: Rezoing for ABAQUS using i-deas director/observer, *ABAQUS user's conference proceedings*, pp.545-556, 1992.
- [4] T. Belytschko, J. M. Kennedy, D. F. Schoeberle: Quasi-Eulerian finite element formulation for fluid-structure interaction, *Journal of Pressure Vessel Technology*, **102**-1, pp. 62-69, 1980.
- [5] T. J. Hughes, W. K. Liu, T. K. Zimmermann: Lagrangian-Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **29**-3, pp. 329-349, 1981.
- [6] T. Belytschko, Y. Kronggauz, D. Organ, M. Fleming: Meshless methods: an overview and recent developments, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **139**, pp. 3-47, 1996.
- [7] S. Li, W. K. Liu: Meshfree and particle methods and their applications, *Applied Mechanics Review*, **55**, pp. 1-34, 2002.
- [8] I. Babuska, U. Banerjee, J. E. Osborn: Survey of meshless and generalized finite element methods: a unified approach, *Acta Numerica*, **12**, pp. 1-125, 2003.
- [9] S. Li, W. K. Liu: *Meshfree Particle Methods*, Springer, 2004.

- [10] 越塚誠一: 粒子法, 丸善, 2005.
- [11] 鈴木克幸, 長嶋利夫, 萩原世也: メッシュフリー解析法, 丸善, 2006.
- [12] V. P. Nguyen, T. Rabczuk, S. Bordas, M. Duflet: Meshless methods: a review and computer implementation aspects, *Mathematics and Computers in Simulation*, **79**, pp. 763-813, 2008.
- [13] D. J. Benson: Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **99**, pp.235-394, 1992.
- [14] D. J. Benson: A multi-material Eulerian formulation for the efficient solution of impact and penetration problems, *Computational Mechanics*, **15**, 6, pp.558-571, 1995.
- [15] D. J. Benson: A mixture theory for contact in multi-material Eulerian formulations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **140**, pp.59-86, 1997.
- [16] D. J. Benson: Stable time step estimation for multi-material Eulerian hydrocodes, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **167**, pp.191-205, 1998.
- [17] D. J. Benson and S. Okazawa: Contact in a multi-material Eulerian finite element formulation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**, pp.4277-4298, 2004.
- [18] S. Okazawa, K. Kashiya and Y. Kaneko: Eulerian formulation using stabilized finite element method for large deformation solid dynamics, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **72**, pp.1544-1559, 2007.
- [19] 岡澤重信, 中尾賢司, 西口浩司, 田中智行: 平均化統一解法による Euler 型固体流体連成解析手法, 日本機械学会論文集 A 編, **76**, 772, pp.1533-1540, 2010.
- [20] K. Sugiyama, S. Takeuchi, S. Ii, S. Takagi and Y. Matsumoto: A New Fluid-Structure Coupling Simulation Method on Eulerian Frame using Finite Difference Scheme, RIKEN Workshop, 2008.

- [21] N. Nagano, K. Sugiyama, S. Takeuchi, S. Ii, S. Takagi, Y. Matsumoto: Full-Eulerian finite-difference simulation of fluid flow in hyperelastic wavy channel, *Journal of Fluid Science and Technology*, **5**, 3, pp.475-490, 2010.
- [22] 杉山和靖, 長野直大, 竹内伸太郎, 伊井仁志, 高木周, 松本洋一郎: 固定メッシュ法に基づくネオフック体管内流の流体構造連成シミュレーション, 理論応用力学講演会講演論文集 **59**, pp.188-188 2010.
- [23] K. Sugiyama, S. Ii, S. Takeuchi, S. Takagi, Y. Matsumoto: A full Eulerian finite difference approach for solving fluid-structure coupling problems, *Journal of Computational Physics*, **230**, 3, pp.596-627, 2011.
- [24] S. Ii, X. Gong, K. Sugiyama, J Wu, H. Huang, S. Takagi: A full Eulerian fluid-membrane coupling method with a smoothed volume-of-fluid approach, *Communications in Computational Physics*, **12**, 2, pp.544, 2012.
- [25] 杉山和靖, 伊井仁志, 高木周, 松本洋一郎, 超大規模並列計算に適した流体・構造連成手法の開発と血流シミュレーションへの適用 (「小特集」京による最新計算事例の紹介), 日本流体力学会誌, **32**, 2, pp.139-143, 2013.
- [26] C. W. Hirt and B. D. Nichols: Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, *Journal of Computational Physics*, **39**, pp.205-26, 1981.
- [27] 西口 浩司: PLIC 法を用いた平均化統一解法による固体連成解析手法に関する研究, 広島大学 平成 21 年度 修士論文, 2010.
- [28] 岡澤重信, 西口浩司, 田中智行: 自由移動境界を有するボクセル固体流体連成解析, 日本計算工学会論文集, **2014**, No.20140011, 2014.
- [29] M. C. Boyce, E. M. Arruda: Constitutive models of rubber elasticity: a review, *Rubber chemistry and technology*, **73**-3, pp. 504-523, 2000.
- [30] L.R.G. Treloar: *The Physics of Rubber Elasticity*, Oxford University Press, 1975.
- [31] M. Mooney: A theory of large elastic deformation, *Journal of applied physics*, **11**-9, pp. 582-592, 1940.

- [32] R.W. Ogden: *Elastic deformation of rubber-like solids*, in H.G. Hopkins and M.J. Sewell eds, The Rodney Hill 60th Anniversary Volume, Pergamon Press, pp.499-537, 1981.
- [33] E. M. Arruda, M. C. Boyce: A three-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **41-2**, 389-412, 1993.
- [34] A. N. Gent: A new constitutive relation for rubber, *Rubber chemistry and technology*, **69-1**, pp. 59-61, 1996.
- [35] H. Morita, M. Yamada, T. Yamaguchi, M. Doi: Molecular Dynamics Study of the Adhesion between End-grafted Polymer Films, *Polymer Journal*, **37-10**, pp. 782-788, 2005.
- [36] T. Yamaguchi, M. Doi: Debonding dynamics of pressure-sensitive adhesives: 3D block model, *The European Physical Journal E: Soft Matter and Biological Physics*, **21-4**, 2006, pp. 331-339.
- [37] C. K. C. Wu and M. E. Plesha: Essential boundary condition enforcement in meshless methods: boundary flux collocation method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **53**, pp.499-514, 2002.
- [38] D. L. Youngs: Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion, *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, edited by K. W. Morton and M. J. Baines, Academic Press, pp.273-285, 1982.
- [39] E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli and S. Zaleski: Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in threedimensional Cartesian geometry, *Journal of Computational Physics*, **225**, pp.2301-2319, 2007.
- [40] J. Hernandez, J. Lopez, P. Gomez, C. Zanzi and F. Faura: A new volume of fluid method in three dimensions. Part I: Multidimensional advection method with face-matched flux polyhedra, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **58**, pp.897-921, 2008.

- [41] P. Liovic, M. Rudman, J. L. Liow, D. Lakehal and D. Kothe: A 3D unsplit-advection volume tracking algorithm with planarity-preserving interface reconstruction, *Computers & fluids*, **35**, pp.1011-1032, 2006.
- [42] J. Lopez, C. Zanzi, P. Gomez, F. Faura and J. Hernandez: A new volume of fluid method in three dimensions. Part II: Piecewise-planar interface reconstruction with cubic-Bezier fit, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **58**, pp.923-944, 2008.
- [43] D. Lorstad and L. Fuchs: High-order surface tension VOF-model for 3D bubble flows with high density ratio, *Journal of Computational Physics*, **200**, pp.153-176, 2004.
- [44] G. H. Miller and P. Colella: A conservative three-dimensional Eulerian method for coupled solid-fluid shock capturing, *Journal of Computational Physics*, **183**, pp.26-82, 2002.
- [45] Y. Renardy and M. Renardy: PROST: a parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method, *Journal of Computational Physics*, **183**, pp.400-421, 2002.
- [46] 久田 俊明: 非線形有限要素法のためのテンソル解析の基礎, 丸善, 1992.
- [47] G. A. Holzapfel: Nonlinear solid mechanics / a continuum approach for engineering, John Wiley and Sons, 2000.
- [48] J. Bonet and R. D. Wood: Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis (2nd Edition), Cambridge University Press, 2008.
- [49] A. J. M. Spencer: Continuum mechanics, Dover publications, 1980.
- [50] J. E. Marsden and T. J. R. Hughes: Mathematical foundations of elasticity, Dover publications, 1983.
- [51] 京谷 孝史: よくわかる連続体力学ノート, 森北出版, 2008.
- [52] 棚橋 隆彦: 連続体の力学(1) - 物質の変形と流動 - (第3版), 理工図書, 1995.

- [53] 石原 繁: テンソル - 科学技術のために - (第12版), 裳華房, 2008.
- [54] 徳岡 辰雄: 有理連続体力学の基礎, 共立出版, 1999.
- [55] D. A. Drew and S. L. Passman: Theory of Multicomponent Fluids, Springer, 1999.
- [56] J. C. Simo and T. J. R. Hughes: Computational Inelasticity, Springer, 1998.
- [57] C. W. Macosko: Rheology principles, measurement and applications, Wiley-VCH Publishers, 1994.
- [58] R. W. Ogden: Non-linear elastic deformations, Dover publications, 1984.
- [59] W. Noll: A mathematical theory of the mechanical behavior of continuous media, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **2**, pp.197-226, 1958.
- [60] J. C. Simo: On a fully three dimensional finite strain viscoelastic damage model: formulation and computational aspects, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **60-2**, pp.153-173, 1987.
- [61] 山下義裕, 川端季雄: 補強ゴムのひずみエネルギー密度関数の近似式, 日本ゴム協会誌, **65**, pp. 517-528, 1992.
- [62] John D. Ferry: *Viscoelastic Properties of Polymers*, 3rd edn., John Wiley and Sons, 1980.
- [63] S. Glasstone, J. Laidler, H. Eyring: *The Theory of Rate Processes*, 1st edn., McGraw-Hill Book Company, 1941.
- [64] Malcolm L. Williams, Robert F. Landel, John D. Ferry: The temperature dependence of relaxation mechanisms in amorphous polymers and other glass-forming liquids, *Journal of the American Chemical Society*, **77**, pp.3701-3707, 1955.
- [65] 山田貴博: 高性能有限要素法, 丸善, 2007.

- [66] T. Belytschko, T. Black: Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **45**, pp.602-620, 1999.
- [67] N. Moes, J. Dolbow, T. Belytschko: A finite element method for crack growth without remeshing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **46**, 1, pp.131-150, 1999.
- [68] 竹内 則雄, 草深 守人, 武田 洋, 佐藤 一雄, 川井 忠彦: ペナルティを用いたハイブリッド型モデルによる離散化極限解析, *構造工学論文集*, **46**, pp.261-270, 2000.
- [69] Gen-hua Shi, Richard E. Goodman: Generalization of two-dimensional discontinuous de-formation analysis for forward modeling, *Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **13**, 4, pp.359-380, 1989.
- [70] P.A. Cundall, O.D.L. Strack: A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique*, **29**, pp.47-65, 1979.
- [71] E. Vitali, D.J. Benson: An extended finite element formulation for contact in multi-material arbitrary Lagrangian-Eulerian calculations, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **67**, 10, pp.1420-1444, 2006.
- [72] E. Vitali, D.J. Benson: Contact with friction in multi-material arbitrary Lagrangian-Eulerian formulations using X-FEM, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **76**, 6, pp.893-921, 2008.
- [73] E. Vitali, D.J. Benson: Kinetic friction for multi-material arbitrary Lagrangian Eulerian extended finite element formulations, *Computational Mechanics*, **43**, 6, pp.847-857, 2009.
- [74] E. Vitali: An extended finite element formulation for contact in multi-material arbitrary Lagrangian-Eulerian calculations, Ph.D. Dissertation, University of California, San Diego, 2007.

- [75] A. Hansbo, P. Hansbo: A finite element method for the simulation of strong and weak discontinuities in solid mechanics, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**, pp.3523-3540, 2004.
- [76] 車谷麻緒, 寺田賢二郎, 京谷孝史: X-FEMによる非均質材料の波動伝搬解析に関する基礎的研究, 土木学会論文集 A2 (応用力学), **67**, 1, pp.69-81, 2011.
- [77] E. Vitali, M. Kurumatani, Private communication at 12th US National Congress on Computational Mechanics, 2013.
- [78] A. Amsden and F. Harlow: The SMAC method: a numerical technique for calculating incompressible fluid flows, Technical Report LA-4370, Los Alamos National Laboratory, 1970.
- [79] T. Belytschko, W. K. Liu and B. Moran: Nonlinear finite elements for continua and structures, John Wiley and Sons, 2000.
- [80] 長嶋 利夫, 新山 健二, 石原 嘉一: 構造的なメッシュを用いた応力解析における基本境界条件付与方法の検討, 日本機械学会論文集 (A 編), **70**, pp.354-362, 2004.
- [81] 久田 俊明, 野口 裕久: 非線形有限要素法の基礎と応用, 丸善, 1995.
- [82] 梶島 岳夫: 乱流の数値シミュレーション, 養賢堂, 1999.
- [83] S. P. Frankel: Convergence rates of iterative treatment of partial differential equation, *Mathematical Tables and Other Aids to Computation*, **4**, pp.65-75, 1950.
- [84] D. Young: Iterative methods for solving partial difference equations of elliptic type, *Transactions of the American Mathematical Society*, **76**, pp.92-111, 1954.
- [85] W. J. Rider and D. B. Kothe: Reconstructing volume tracking, *Journal of Computational Physics*, **141**, pp.112-152, 1998.
- [86] R. Scardovelli and S. Zaleski: Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow, *Annual Review of Fluid Mechanics*, **31**, pp.567-603, 1999.

- [87] M. Rudman: Volume tracking methods for interfacial flow calculations, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **24**, pp.671-691, 1997.
- [88] R. Scardovelli and S. Zaleski: Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids, *Journal of Computational Physics*, **164**, pp.228-237, 2000.
- [89] A. J. Chorin: Curvature and solidification, *Journal of Computational Physics*, **58**, pp.472-490,1985.
- [90] T. J. Barth: Aspects of unstructured grids and finite-volume solvers for Euler and navier-stokes equations, VKI/NASA/AGARD Special Course on Unstructured Grid Methods for Advection Dominated Flows AGARD Publication R-787, 1995.
- [91] B. Swartz: The second-order sharpening of blurred smooth borders, *Mathematics of Computation*, **52**, pp.675-714, 1989.
- [92] M. Metcalf, W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery : Numerical recipes in Fortran 90, Cambridge University Press, 1996.
- [93] D. B. Kothe, W. J. Rider, S. J. Mosso, J. S. Brock and J. I. Hochstein: Volume tracking of interfaces having surface tension in two and three dimensions, Technical Report AIAA 96-0859, AIAA, 1996.
- [94] D. J. Benson: Volume of fluid interface reconstruction methods for multi-material problems, *Applied Mechanics Reviews*, **55**, pp.151-165, 2002.
- [95] M. Abramowitz and I. A. Stegun: Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, 1965.
- [96] S. T. Zalesak: Fully Multidimensional Flux-Corrected Transport Algorithms for Fluids, *Journal of Computational Physics*, **31**, pp.335-362, 1979.
- [97] R. Leveque: High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **33**, pp.627-65, 1996.

- [98] D. Enright, R. Fedkiw, J. Ferziger and I. Mitchell: A hybrid particle level set method for improved interface capturing, *Journal of Computational Physics*, **183**, pp.83-116, 2002.
- [99] <http://graphics.stanford.edu/data/3Dscanrep/>
- [100] <http://vcad-hpsv.riken.jp/>
- [101] H. Zhao, J. B. Freund and R. D. Moser: A fixed-mesh method for incompressible flow-structure systems with finite solid deformations, *Journal of Computational Physics*, **227**, pp.3114-3140, 2008.
- [102] 国立天文台編: 理科年表, 2008.
- [103] 日本計算工学会流れの有限要素法研究委員会編: 続・有限要素法による流れのシミュレーション, シュプリンガー・ジャパン, 2008.
- [104] Z. Yu: A DLM/FD method for fluid/flexible-body interactions, *Journal of Computational Physics*, **207**, pp.1-27, 2005.
- [105] H. Wang and T. Belytschko: Fluid-structure interaction by the discontinuous-Galerkin method for large deformations, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **77**, pp.30-49, 2009.
- [106] 岡澤 重信: 弾塑性分岐解析による固体のくびれ・せん断帯挙動に関する研究, 名古屋大学 博士論文, 1999.
- [107] 岡澤 重信, 河口 篤志, 藤久保 昌彦: 各種メッシュ制御における動的陽解法, 応用力学論文集, **6**, pp.151-158, 2003.
- [108] 藤井 幸蔵: 流体力学の数値計算法, 東京大学出版会, 1994.
- [109] M. L. Wilkins and M. W. Guinan: Impact of cylinders on a rigid boundary, *Journal of Applied Physics*, **44**, pp.1200-1206, 1973.
- [110] B. van Leer: Towards the ultimate conservative difference scheme IV: a new approach to numerical convection, *Journal of Computational Physics*, **23**, pp.276-299, 1977.

- [111] B. van Leer: Towards the ultimate conservative difference scheme V:a second-order sequel to godunov's method, *Journal of Computational Physics*, **32**, pp.101-136, 1979.
- [112] A. Harten: On a class high resolution total-variation-stable finite difference schemes, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **29**, pp.329-349, 1981.
- [113] A. J. Chorin: Flame advection and propagation algorithm, *Journal of Computational Physics*, **35**, pp.1-31, 1980.