OCTA

ソフトマテリアルのための統合化シミュレータ

多相構造シミュレータ

Muffin

version 5.1

ユーザーズマニュアル

- 第5分冊 -

多相線形弾性体シミュレータ

Elastica

OCTA ユーザーズグループ

January 01 2016

執筆者

佐々木誠、山上達也

プログラム開発者

佐々木誠、山上達也

バージョン 5.0 & 5.1

プログラム、マニュアル修正　山上達也 、飯田優羽 、小沢拓

謝辞

本プログラム開発の初版は、経済産業省の出資 · 補助を受け、新エネルギー · 産業技術総合開発機構 (NEDO) が (財) 化学技術戦略推進機構に委託した、大学連携型産業科学技術研究開発プロジェクト「高機能材料設計プラットフォーム」通称「土井プロジェクト (OCTA プロジェクト)」の下で行われたものである。

また、2003 年度からの本プログラム開発の一部は、科学技術振興機構 (JST)・戦略的創造研究推進事業 (CREST) ・バイオレオプロジェクト (2002 年度採択事業) の支援の下で行われたものである。

目 次

図 目 次

第1章　Elasticaの理論背景

多相線形弾性シミュレータ Elastica の持つ機能は

- 応力印可、歪み印可での多相構造を持つ 3 次元線形弾性体の変形の静的解析機能。
- 各成分毎に、等方弾性・非等方弾性 (軸対称異方性) の設定が可能。

多相線形弾性体シミュレータ Elastica の機能は以下の通りである、

- 異なる弾性的性質 (弾性パラメータ) をもつ複数の物質が混合された体系を取り扱うことができる。
- 非等方的な弾性体を扱うことができ、等方弾性と非等方弾性の異なる成分が混合された体系も取り扱うことができる。
- 3 次元および 2 次元の有限要素法による線形弾性体の変形挙動の計算を行う。
- メッシュ形状として任意の四面体を用いることができ、Milk のデローネメッシュ分割で生成した形状のみならず、一般の有限要素法プログラム用のメッシュを取り入れて計算を行うことが可能である。
- 変形の指定方法として体積力、表面応力印可および固定変位境界条件、体積膨張率を用いることができる。
- 計算値として変位ベクトルおよび自由エネルギーの空間分布が得られる。

1.1　計算の原理

線形弾性体の自由エネルギーは変位ベクトル分布 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ の汎関数として以下のように表すことができる。[1]

$$F[\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})] = \int_V d^d x \frac{1}{2} D_{ijkl}(\boldsymbol{x}) e_{ij} e_{kl} - \int_V d^d x \rho(\boldsymbol{x}) g_i u_i(\boldsymbol{x}) - \int_{S_t} d^{d-1} x T_i(\boldsymbol{x}) u_i(\boldsymbol{x}) \tag{1.1}$$

ここで、$d^d x$, $d^{d-1} x$ は各々、体積積分および面積分を表し、また、ベクトル、テンソルの添字の同一なものに関する和をとるという規則を適用する。

e_{ij} は、変位ベクトルから計算される歪みテンソルで微少変形の範囲で以下のように計算される。

$$e_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \tag{1.2}$$

$\rho(\boldsymbol{x})$ は単位体積あたりの質量分布、$\boldsymbol{g}$ は重力加速度、$\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x})$ は物体の表面の単位面積あたりに加わる表面応力 (荷重)、S_t は表面荷重が与えられる表面、d は空間次元数を表す。

弾性率テンソル D_{ijkl} は、歪みテンソルと歪みによる変形エネルギーを結び付ける 4 階のテンソルで、歪みテンソル e_{ij} が i, j に関して対称であることに対応して、添字 (i, j) と (k, l) の組の中および組の入れ替えに対して対称になるように定義される。弾性体の異方性の度合いに応じて D_{ijkl} のうちゼロでない成分の数は変わる。

等方弾性体の場合には D_{ijkl} のうちゼロでないものの数は 2 個となり自由エネルギーの式は以下のようになる。

$$\begin{aligned} F[\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})] &= \int_V d^d x \left\{ G(\boldsymbol{x}) \left(e_{ij} - \frac{1}{d}\delta_{ij} e_{ll} \right)^2 + \frac{K(\boldsymbol{x})}{2}(e_{ll})^2 - K(\boldsymbol{x})\alpha(\boldsymbol{x}) e_{ll} \right\} \\ &\quad - \int_V d^d x \rho(\boldsymbol{x}) g_i u_i(\boldsymbol{x}) - \int_{S_t} d^{d-1} x T_i u_i(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{1.3}$$

ここで、$K(\boldsymbol{x})$ は体積弾性率 (bulk modulus)、$G(\boldsymbol{x})$ はせん断弾性率 (shear modulus)、$\alpha(\boldsymbol{x})$ は体積膨張係数である。

複数の異なる弾性パラメータを持つ物質が混合された体系を取り扱う場合には、D_{ijkl} は物質を構成する成分 α の弾性パラメータ D^{α}_{ijkl}、体積分率場 $\Psi^{\alpha}(\boldsymbol{x})$ から以下のように計算する。

$$D_{ijkl}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\alpha} D^{\alpha}_{ijkl}\Psi^{\alpha}(\boldsymbol{x}) \tag{1.4}$$

弾性体の変形は自由エネルギー F が最小となる変位ベクトル分布として実現される。最小の自由エネルギーは微小な変位ベクトル分布 $\delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ を与えた時の停留点として定義される。

$$\begin{aligned} \delta F[\delta\boldsymbol{u}] &= \int_V d^d x D_{ijkl}(\boldsymbol{x}) e_{kl}\delta e_{ij} - \int_V d^d x \rho(\boldsymbol{x}) g_i \delta u_i - \int_{S_t} d^{d-1} x T_i(\boldsymbol{x})\delta u_i \\ &= \int_V d^d x D_{ijkl}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial u_k}{\partial x_l}\frac{\partial}{\partial x_j}\delta u_i - \int_V d^d x \rho(\boldsymbol{x}) g_i \delta u_i - \int_{S_t} d^{d-1} x T_i(\boldsymbol{x})\delta u_i \\ &= 0 \end{aligned} \tag{1.5}$$

ここで $\delta F[\delta\boldsymbol{u}]$ は、微小な変位ベクトル分布 $\delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ を与えたときと、 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) + \delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ の自由エネルギー差を表す。

等方弾性体の場合には上記の式は、

$$\begin{aligned} \delta F[\delta\boldsymbol{u}] &= \int_V d^d x \left\{ 2G(\boldsymbol{x}) \left(\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{d}\delta_{ij}\frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) + \frac{K(\boldsymbol{x})}{2}\delta_{ij}\frac{\partial u_l}{\partial x_l} - K(\boldsymbol{x})\alpha(\boldsymbol{x}) \right\} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_j} \\ &\quad - \int_V d^d x \rho(\boldsymbol{x}) g_i \delta u_i - \int_{S_t} d^{d-1} x T_i(\boldsymbol{x})\delta u_i \\ &= 0 \end{aligned} \tag{1.6}$$

と表せる。ここで、

$$\left(e_{ij} - \frac{1}{d}\delta_{ij} e_{ll} \right) \delta_{ij} = 0 \tag{1.7}$$

を利用した。これから応力テンソルは以下のように定義できる。

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial F}{\partial e_{ij}} = 2G(\boldsymbol{x})(e_{ij} - \frac{1}{d}\delta_{ij} e_{ll}) + K(\boldsymbol{x})\delta_{ij} e_{ll} - K(\boldsymbol{x})\alpha(\boldsymbol{x})\delta_{ij} \tag{1.8}$$

1.2 有限要素法による離散化

式 (1.5) または式 (1.6) で表される釣り合い条件式に対して変分法による有限要素離散化を行う。1 つの有限要素メッシュ内の変位ベクトル成分を、要素を構成する節点 I で値 1 を持つ線形補完関数 $L_I(\boldsymbol{x})$ の線形結合による試行関数で表す。

$$u_i(\boldsymbol{x}) = \sum_I L_I(\boldsymbol{x}) u_i^I \tag{1.9}$$

この変位ベクトルで表された自由エネルギー式において

$$\frac{\delta F}{\delta u_i^I} = 0 \tag{1.10}$$

とおくことにより u_i^I を未知数とする連立一次方程式を導くことができる。等方弾性体について、その具体的な表現を一つの要素 e について表すと以下のようになる。

$$
\begin{aligned}
&V_e \sum_J \left[\sum_j G_e \left\{ (\nabla_i L_J \cdot \nabla_j L_I) u_j^I + (\nabla_j L_J \cdot \nabla_j L_I) u_j^J \right\} + \left(K_e - \frac{2}{d} G_e \right) \sum_k \left(\nabla_k L_J \cdot \nabla_i L_I \right) u_k^J \right] \\
&= K_e \alpha_e (\nabla_i L_I) + \sum_J \rho_i^J g_i \left[\int_e d^d x L_I L_J \right] + \sum_J T_i^J \left[\int_e d^{d-1} x L_I L_J \right] \qquad (1.11)
\end{aligned}
$$

ここで、V_e は要素の体積、K_e、G_e、α_e はそれぞれ体積弾性率, せん断弾性率, 体積膨張係数の要素平均値で、J は要素を構成する節点のインデックスである。左辺の括弧 [...] 内の変位ベクトル成分の係数から構成されるマトリックスによる連立一次方程式が得られる。

実際の連立方程式はこの式の両辺を節点 I が属する要素すべてについて足し合わせたものとして得られる。得られた連立一次方程式を共役勾配法により解くことで変位ベクトルを評価する。

1.3 非等方弾性体の取り扱い

弾性体の異方性は結晶のタイプに応じて現われ、例えば、以下のようなものがある。

- 軸対称異方性 (axisymmetric) : 特定の空間軸方向に異方性を持ち、それに垂直な方向については等方的。
- 直交異方性 (orthorhombic) : 直交する 3 つの空間軸それぞれに異なる弾性率を持つ。

本シミュレータではこれらの異方性のうち、軸対称異方性弾性体を扱うことが出来る。主軸の方向は任意に与えることができる。

直交異方性またはそれよりも高い対称性を持つ弾性体の弾性定数は一般には以下のように応力テンソル σ_{ij} と歪みテンソル e_{ij} を結び付ける係数行列 C として表現される。ここで、主軸方向を x, y, z 軸にとっている。

$$
\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\
C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\
C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{bmatrix}
\qquad (1.12)
$$

軸対称異方性弾性体の場合以下のように 5 つの独立なパラメータ n, l, k, m および μ を用いて C 行列を表現できる。(x 軸を異方性の主軸とした場合)

$$
\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
n & l & l & 0 & 0 & 0 \\
l & k+m & k-m & 0 & 0 & 0 \\
l & k-m & k+m & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & m & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{bmatrix}
\qquad (1.13)
$$

式 (1.13) は異方性の主軸が座標軸と一致する場合の表現となっているが、一般にシミュレーション時の座標軸が主軸と一致するとは限らず、また異なる軸方向を持つ物質が混合された状態をとりあつかう場合も考えられる。そこで Elastica シミュレータでは異方性の軸が任意の方向をとることができるようにしている。

軸対称異方性をもつ弾性体の主軸方向の単位ベクトルを n_i とするとき、単位体積あたりのひずみのエネルギー f を以下のように表現する。

$$
\begin{aligned}
f &= D_1(e_{ii})^2 + D_2(n_in_je_{ij})^2 + D_3(e_{ll}\cdot n_in_je_{ij}) + D_4n_le_{il}\cdot n_ke_{ik} + D_5e_{ij}e_{ij} \\
&= \frac{1}{2}\left[2D_1\delta_{ij}\delta_{kl} + 2D_2n_in_jn_kn_l + D_3(\delta_{ij}n_kn_l + \delta_{kl}n_in_j) + D_4(\delta_{ik}n_jn_l + \delta_{jl}n_in_k) + D_5(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{jk}\delta_{il})\right] \\
&\quad e_{ij}e_{kl} \\
&\equiv \frac{1}{2}D_{ijkl}e_{ij}e_{kl} \qquad (1.14)
\end{aligned}
$$

ここにあらわれる 5 個の係数 D_1, D_2, D_3, D_4, D_5 は式 (1.13) に現れる 5 つの弾性パラメータと関連づけることができ、これにより任意の異方性軸方向を与えた線形弾性体の変形を計算することができる。関係式 $\sigma_{ij} = \frac{\partial f}{\partial e_{ij}}$ と $n_x = 1, n_y = n_z = 0$ としたときの式 (1.13) の係数の対応により以下の関係が得られる。

$$
\begin{aligned}
D_1 &= (k-m)/2 && (1.15)\\
D_2 &= (n+k-m)/2 - l - \mu && (1.16)\\
D_3 &= l - k + m && (1.17)\\
D_4 &= \mu - m && (1.18)\\
D_5 &= m && (1.19)
\end{aligned}
$$

この自由エネルギー表示を用いた u_i^I に対する有限要素離散化式は式 (1.11) を一般化した以下の形に書ける。この式は等方、軸対称等を限定せずにすべての線形弾性体に適用可能である。

$$
\begin{aligned}
&V_e\sum_J\left[\sum_j\sum_l D_{ijkl}\nabla_jL_I\nabla_lL_J\right]u_k^J \\
&= \sum_J\rho_i^Jg_i\left[\int_e d^dxL_IL_J\right] + \sum_J T_i^J\left[\int_e d^{d-1}xL_IL_J\right] \qquad (1.20)
\end{aligned}
$$

1.4 異なる対称性を持つ成分の混合系の取扱い

Elastica シミュレータは等方的弾性体と異方性を持つ弾性体の混合系を取扱うことができる。弾性率テンソルは式 (1.4) のように各成分の弾性率テンソルを各成分の体積分率によって加重平均したものとして扱っている。この取扱いの範囲では自由エネルギーも以下のように成分 α による和として表すことが出来る。

$$
f = \frac{1}{2}\sum_\alpha\left(D_{ijkl}^\alpha\Psi^\alpha\right)e_{ij}e_{kl} \qquad (1.21)
$$

したがって有限要素マトリックスの生成処理では、各成分毎に弾性率テンソルが $D_{ijkl}^\alpha\Psi^\alpha$ であるような物質に対応するマトリックスを生成して、さらにそれらのマトリックスの和をとることで混合物質に対応するマトリックスを生成することができる。各成分についてはそれらの弾性率テンソルの異方性に応じた処理を行なえばよいので、結果としてどのような異方性をもつ物質の混合物でも対応が可能である。

1.5 異方性軸に空間分布がある場合の取扱い

軸対称異方性をもつ弾性体成分の異方性軸ベクトル $\boldsymbol{n}$ が全空間で同一ではなく、空間分布 $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x})$ を持つ場合を考える。節点 K での異方性軸ベクトル $\boldsymbol{n}^K$ の関数として表された異方性弾性テンソル $D_{ijkl}(\boldsymbol{n}^K)$ と、節点 K での体積分率 Ψ_K から要素内の弾性率テンソルを以下のように内挿する。

$$D_{ijkl}(\boldsymbol{x}) = \sum_K L_K(\boldsymbol{x}) D_{ijkl}(\boldsymbol{n}^K)\Psi_K \tag{1.22}$$

この場合、式 (1.20) の左辺を以下のように書きなおす。

$$\begin{aligned}
&\sum_K \left\{ \sum_J \left[\sum_j \sum_l \left(D_{ijkl}(\boldsymbol{n}^K)\Psi_K \int_e d^d x L_K(\boldsymbol{x}) \right) \nabla_j L_I \nabla_l L_J \right] \right\} u_k^J \\
&= V_e \sum_K \left\{ \sum_J \left[\sum_j \sum_l \left(\frac{1}{p_e} D_{ijkl}(\boldsymbol{n}^K)\Psi_K \right) \nabla_j L_I \nabla_l L_J \right] \right\} u_k^J
\end{aligned} \tag{1.23}$$

ここで p_e は一つの要素を構成する節点の数である。この式は異なる異方性軸をもつこともある各節点 K について $\frac{1}{p_e} D_{ijkl}(\boldsymbol{n}^K)\Psi_K$ を非等方弾性率テンソルとしてマトリックスを作成し、それらを各節点 K について和をとる処理を行なうことを意味する。

1.6 境界条件

Elastica シミュレータで取り扱うことのできる境界条件は、“固定変位境界条件” と” 表面への荷重” の 2 つである。

境界面を $S = S_u + S_t$ とする。ここで；

- 固定変位境界 S_u：

$$u_i = \bar{u}_i \tag{1.24}$$

- 表面荷重が与えられた境界 S_t：

$$\sigma_{ij} n_j = T_i \tag{1.25}$$

自由表面は大きさゼロの表面荷重が与えられた境界と考える。

具体的な境界条件の入力法は、“Elastica リファレンス” の”Elastica の利用可能な部分領域 (境界) 条件の一覧” を参照されたい。

1.7 固定変位境界条件の処理

Elastica シミュレータでは、penalty number を使用する方法 (矢川、吉村 [2]、p.50) により固定境界条件の節点を取り扱っている。

この方法では、まず固定変位境界条件を構成する節点に対しても、一旦はその節点の変位が未知量であるかのように式 (1.11) にしたがって行列の構成処理を行っておく。そののち適当に決めた大きな数値 α を penalty number として固定変位境界条件の変位 u_i^I の行列要素の対角項に α を、右辺ベクトルの成分に $\alpha \bar{u}_i^I$ を加える。

このように処理した一次方程式を解くことで固定境界条件を採り入れることができる。

第2章　Elasticaの応用操作

ここでは多相線形弾性体シミュレータ Elastica の応用例を示す。

2.1　Elastica 応用例概説

Elastica では以下の 11 のサンプルを用意している。これらの応用例に対応する入力 UDF ファイル、出力ファイル等は MUFFIN の配布版のディレクトリ以下に問題別のディレクトリとして納められている。

2.1.1　応用例 01：単純剪断変形

- 3 次元
  1) 孤立した直方体の剪断変形 (非周期)。(EX01/EX01_cube_in.udf)
  Usage：muffin5e_elastica -I EX01_cube_in.udf -O EX01_cube_ou.udf
  2) 単純剪断変形 (周期)。(EX01/EX01_bulk_in.udf)
  Usage：muffin5e_elastica -I EX01_bulk_in.udf -O EX01_bulk_ou.udf
- 2 次元
  1) 孤立した四角形の剪断変形 (非周期)。(EX01/2D/EX01_square2d_in.udf)
  Usage：muffin5e_elastica -I EX01_square2d_in.udf -O EX01_square2d_ou.udf
  2) 単純剪断変形 (周期)。(EX01/2D/EX01_bulk2d_in.udf)
  Usage：muffin5e_elastica -I EX01_bulk2d_in.udf -O EX01_bulk2d_ou.udf

2.1.2　応用例 02：片持ち梁

- 3 次元：片持ち梁。(EX02/EX02_in.udf)
  Usage：muffin5e_elastica -I EX02_in.udf -O EX02_ou.udf
- 2 次元：片持ち梁。(EX02/2D/EX02_2d_in.udf)
  Usage：muffin5e_elastica -I EX02_2d_in.udf -O EX02_2d_ou.udf

2.1.3　応用例 03：PhaseSeparation からの２成分モルフォロジーの入力と剪断変形

PhaseSeparation_FEM の応用例 03（流れ場無し、Flory-Huggins model の 2 成分相分離構造）の相分離構造の剪断変形解析。

1. EX03_in.udf を開き。アクション”import_fields”で PhaseSeparation_FEM の EX03/EX03_ou.udf を読み込み。
2. 計算実行
   Usage：muffin5e_elastica -I EX03_in.udf -O EX03_ou.udf

詳細操作は後述。

2.1.4 応用例 04：SUSHI の１次元２成分ラメラ構造の入力と圧縮変形

SUSHI の 1 次元 2 成分ラメラ構造の計算結果 (blend_uot.udf) を入力し、圧縮変形を行う。

1. EX04_in.udf を開き。アクション”import_fields_1d”で SUSHI の blend_uot.udf を読み込み。
2. 計算実行
   Usage : muffin5e_elastica -I EX04_in.udf -O EX04_ou.udf

2.1.5 応用例 05：SUSHI の３次元シリンダー構造の入力と表面力印加

SUSHI の 3 次元シリンダー構造の計算結果 (susi3_cylinder3D_uot.udf) を入力し、表面力印可で伸張変形を行う。

1. EX05_in.udf を開き。アクション”import_fields”で SUSHI の susi3_cylinder3D_uot.udf を読み込み。
2. 計算実行
   Usage : muffin5e_elastica -I EX05_in.udf -O EX05_ou.udf

詳細操作は後述。

2.1.6 応用例 06：球構造を含む弾性体の剪断変形（モルフォロジーで球を与える）

1 つの球状ゴムを含む弾性体の剪断変形。内部の球構造は体積分率場の初期化コマンド”ONE_SPHERE”により作成。
Usage : muffin5e_elastica -I EX06_in.udf -O EX06_ou.udf

2.1.7 応用例 07：球構造を含む弾性体の剪断変形（メッシュで球を与える）

1 つの球状ゴムを含む弾性体の剪断変形。内部に球構造を含む形状は Milk を用いた非構造格子で表現されており、EX06 と比べて、球表面がシャープな形状になる。球の体積分率は部分領域条件 (region_condition[]) で指定。

1. Milk により形状作成。
   Usage : milk5_3d -I EX07_milk_onesphere_in.udf -O EX07_milk_onesphere_ou.udf
2. EX07_in.udf を開き。アクション”import_mesh”で EX07_milk_onesphere_ou.udf を読み込み。
3. 計算実行
   Usage : muffin5e_elastica -I EX07_in.udf -O EX07_ou.udf

2.1.8 応用例 08：SUSHI の１次元２成分ラメラ構造の膜の膨張と表面凹凸

SUSHI の 1 次元 2 成分ラメラ構造の計算結果 (blend_uot.udf) を入力し、各成分の膨張率を与えて変形を行う。

1. EX08_in.udf を開き。アクション”import_fields_1d”で SUSHI の blend_uot.udf を読み込み。
2. 計算実行
   Usage : muffin5e_elastica -I EX08_in.udf -O EX08_ou.udf

2.1.9 応用例 09：バイメタルの曲げ

膨張率の異なる 2 層膜の曲げを計算する。非構造メッシュは、ここでは (Milk では無く）Elastica のメッシュ生成機能を用いて作成する。(もちろん Milk を用いても良い)

1. メッシュ生成：
   Usage：muffin5e_elastica -I EX09_meshgenerate_in.udf -O EX09_meshgenerate_ou.udf
2. EX09_in.udf を開き。アクション”import_mesh”で EX09_meshgenerate_ou.udf を読み込み。
3. リロードし、Python コマンド ”make_bilayer.py” で 2 層膜構造を作成。
4. 計算実行
   Usage：muffin5e_elastica -I EX09_in.udf -O EX09_ou.udf

2.1.10 応用例 10：ノッチのある硬い基盤上での膜の収縮と応力集中

ノッチのある金属のような硬い基盤 (K=G=1000) 上での膜 (K=G=1) の収縮変形と応力集中の解析を行う。非構造メッシュは、ここでは (Milk では無く）Elastica のメッシュ生成機能を用いて作成する。(もちろん Milk を用いても良い)

1. メッシュ生成：
   Usage：muffin5e_elastica -I EX10_meshgenerate_in.udf -O EX10_meshgenerate_ou.udf
2. EX10_in.udf を開き。アクション”import_mesh”で EX10_meshgenerate_ou.udf を読み込み。
3. リロードし、Python コマンド ”make_bilayer_with_notch.py” でノッチつきの 2 層膜構造を作成。
4. 計算実行
   Usage：muffin5e_elastica -I EX10_in.udf -O EX10_ou.udf
5. Python コマンド ”stress_analysis.py” で指定の線に沿った主応力分布を解析。

2.1.11 応用例 11：負圧下での半球殻（半球膜）の変形

負圧下での半球殻の変形を解析する。球殻形状のメッシュは Milk で作成出来る。(MILK の EX12 参照)

1. メッシュ生成：
   Usage：milk5_3d -I EX11_milk_in.udf -O EX11_milk_ou.udf
2. EX11_in.udf を開き。アクション”import_mesh”で EX11_milk_ou.udf を読み込み。
3. 計算実行
   Usage：muffin5e_elastica -I EX11_in.udf -O EX11_ou.udf

2.2 Elastica 応用操作詳細解説

ここでは、応用例 03 と応用例 05 について、操作の詳細な解説を行う。

2.2.1 応用例 03 : PhaseSeparation からのモルフォロジーの入力と等方弾性解析

[問題設定]

1. PhaseSeparation_FEM シミュレータで計算した 2 成分系 (50:50) の Flory-Huggins 自由エネルギーによる相分離構造 (流れ無し) のモルフォロジー (PhaseSeparation_FEM の応用例 3 の結果) を入力。
2. 両成分とも等方弾性体とする。
3. 第 1 成分 (赤色の成分) のバルク弾性率およびせん断弾性率を 10 に、第 2 成分 (青色の成分) のバルク弾性率およびせん断弾性率を 40 に設定。
4. Y 軸に垂直な上面を X の正方向に、Y 軸に垂直な底面を X の負方向に変位し、せん断変形を与え変形をシミュレーション。
5. 変形の様子と自由エネルギーのカラーコンターを描画。

[サンプル **UDF** ファイル]

PhaseSeparation_FEM の出力 UDF ファイルは
`MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/PhaseSeparation/EX03/EX03_ou.udf` に、
入力 UDF ファイルは `MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX03/EX03_in.udf` に、
出力 UDF ファイルは `MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX03/EX03_ou.udf` にある。

[入力 **UDF** ファイルの作成]

1. Elastica の入力 UDF ファイル `MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX03/EX03_in.udf` を GOURMET で開く。
2. GOURMET の"NEW WINDOW" で、Editor をもう 1 つ立ち上げ、Phaseseparation_FEM シミュレータの応用例 3 の出力 UDF データ `MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/PhaseSeparation/EX03/EX03_ou.udf` を開く。最終レコード (No.5) の体積分率場を描画すると、図 2.1 のような相分離構造が見られる。描画を行なうには GOURMET の左側のウィンドウの "EX03_ou.udf" をマウスの右ボタンでクリックしポップアップメニューから "show_field" を選択する (region を z-sections にする)。

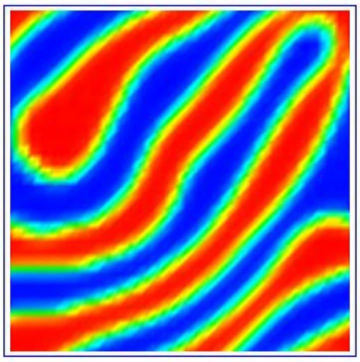

図 2.1: Elastica : 応用例 3. 入力するモルフォロジー (Phaseseparation_FEM:応用例 3 の結果)

3. モルフォロジーのデータを `EX03_in.udf` にコンバートする (サンプルファイルではすでにコンバート済み)。`MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX03/EX03_in.udf` の Editor ウインドウでマウスの右ボタンをクリックしメニューから “import_fields” を選択する。

4. 次にデータ変換のためのパラメータをダイアログ上で入力する。Phaseseparation_FEM の出力 UDF、`MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/PhaseSeparation/EX03/EX03_ou.udf` を “import_udf_filepath” として入力し、“import_record_no” に 5 を入力する。テキストボックス上で右クリックすると、ファイルを選択できる。“save_as” に、例えば `EX03_2_in.udf` と入力する（すでに `EX03_in.udf` を開いているため）。この様子を図 2.2 に示す。

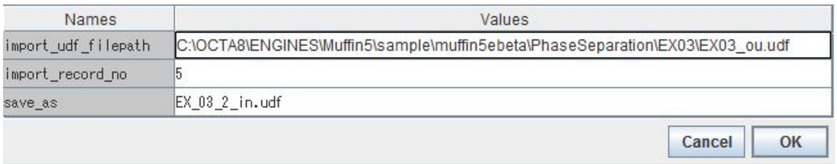

図 2.2: Elastica：応用例 3. パラメータ入力ダイアログ

5. コンバートが完了すれば `EX03_2_in.udf` が作成され、そちらを編集していってもよいが、以下では、引き続き `EX03_in.udf` を用いる。

6. 続いて、パラメータの設定を行う。まず、メッシュのパラメータ (parameter.mesh_parameter) を変更する (図 2.3)。Phaseseparation_FEM のメッシュでは周期境界を設定していたが、Elastica を用いた本計算では周期境界条件を用いないためである。

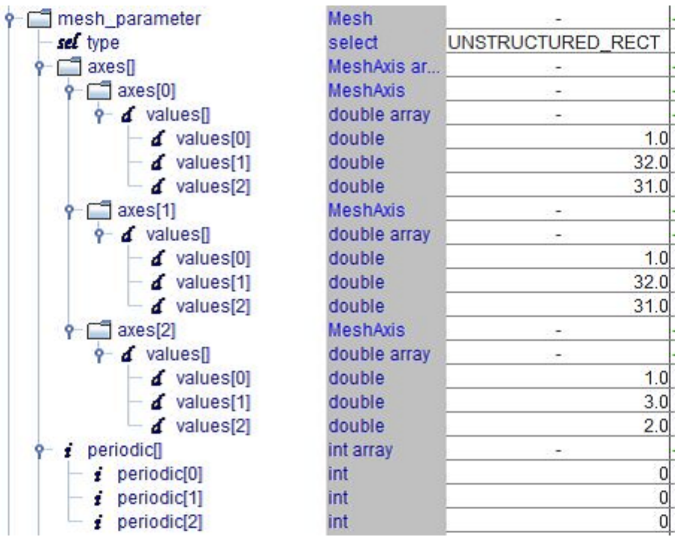

図 2.3: Elastica：応用例 3. メッシュパラメータの変更

7. 次に、物理パラメータ部 (parameter.physical_parameter[]) を設定する。以下の表のように入力する。

名前	値	意味
NUMBER_OF_COMPONENTS	2	2 成分系
MODULUS_ANISOTROPY_0	Isotropic	第 1 成分は等方弾性体
MODULUS_ANISOTROPY_1	Isotropic	第 2 成分は等方弾性体
BULK_MODULUS	[10, 40](配列)	バルク弾性率は第 1 成分は 10、第 2 成分は 40
SHEAR_MODULUS	[10, 40](配列)	せん断弾性率は第 1 成分は 10、第 2 成分は 40

8. 続いて、境界条件設定を行う。部分領域 (境界) 条件部 (region_condition.condition[]) に以下の表のように入力する。境界条件を以下のように部分領域条件として与えている。

名前	部分領域	場	条件名	値
condition1	BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Displacement	D_VEC	$[-5.0, 0.0, 0.0]$
condition2	BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Displacement	D_VEC	$[+5.0, 0.0, 0.0]$

これらの条件は、Y 軸に垂直な上面 (BOUNDARY_VERTEX_YMAX) を X の正方向に +5.0 変位、Y 軸に垂直な底面 (BOUNDARY_VERTEX_YMIN) を X の負方向 −5.0 変位し、せん断変形を与えることを意味している。(D_VEC は変位についてのデリクレ条件の意味)

[シミュレーション実行]

以下のコマンドで Elastica を実行する。
muffin5e_elastica -I EX03_in.udf -O EX03_ou.udf

[結果の描画]

1. 計算結果の出力 UDF ファイルを GOURMET で開き、変形後のレコード (No.1) に移動。

2. 先ずは、変形後の体積分率場のカラーコンターを描画してみよう。GOURMET の左側のウィンドウの “EX03_ou.udf” をマウスの右ボタンでクリックしポップアップメニューから “show_field” を選択する。図 2.4 の左図のようにカラーコンターが描画される。赤色が軟かい第 1 成分、青色が硬い第 2 成分である。レコード No.0 の変形前のモルフォロジーと比べると硬い青色の成分は構造を維持し、軟かい赤色の成分が大きく歪んでいることが分かる。

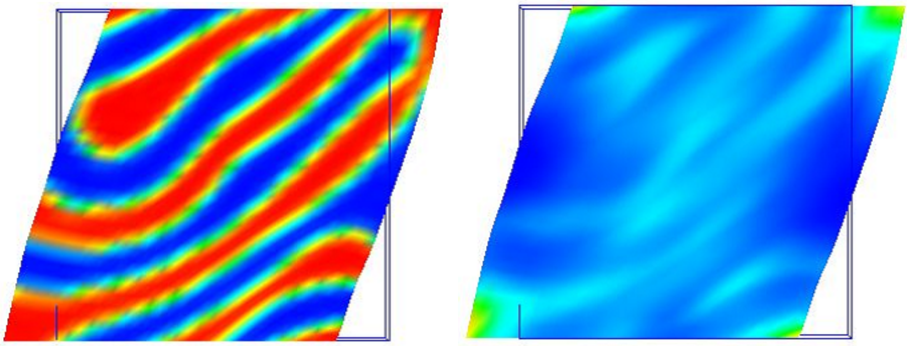

図 2.4: Elastica : 応用例 3. 変形後のモルフォロジーと自由エネルギー (カラーコンター)

3. 続いて、変形後の自由エネルギーのカラーコンターを描画してみよう。GOURMET の左側のウィンドウの “EX03_ou.udf” をマウスの右ボタンでクリックしポップアップメニューから “show_field” を実行し、”FreeEnergy”場を選択。図 2.4 の右図のようにカラーコンターが描画される。モルフォロジー界面に沿って、ひずみが溜っていることが分かる。

2.2.2　応用例 05 : SUSHI からのモルフォロジーの入力と非等方弾性解析

[問題設定]

1. SUSHI シミュレータで計算したダイブロックコポリマー系 (長さの比 5:15) のシリンダー構造のモルフォロジーを入力。シリンダー構造は Z 軸に平行である。

2. 両成分とも軸対称の非等方弾性体とし、異方性の軸を Z 軸 (シリンダーの軸) に平行とする。
3. 第 1 成分 (赤色のシリンダーを構成する成分) は、Z 軸方向に硬く、XY 軸方向には軟かいとする。具体的には、5 つの弾性パラメータ (理論編を参照) を $(n, l, k, m, \mu) = (100, 20, 10, 5, 5)$ とする。一方、第 2 成分 (青色の海成分) は、Z 軸方向に軟かく、XY 軸方向には硬いとする。具体的には、5 つの弾性パラメータを $(n, l, k, m, \mu) = (20, 20, 100, 5, 5)$ とする。
4. Z 軸に垂直な上面を Z の正方向に応力を印可、Z 軸に垂直な底面は固定し、伸長変形を与え変形をシミュレーション。
5. 変形の様子と自由エネルギーのカラーコンターを描画。

[サンプル **UDF** ファイル]

- SUSHI の出力 UDF ファイル: `MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX05/sushi3_cylinder3D_uot.udf`
- 入力 UDF ファイル: `MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX05/EX05_in.udf`
- 出力 UDF ファイル: `MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX05/EX05_ou.udf`

[入力 **UDF** ファイルの作成]

1. Elastica の入力 UDF ファイル `MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX05/EX05_in.udf` を GOURMET で開く。
2. モルフォロジーのデータを `EX05_in.udf` にコンバートする (サンプルファイルではすでにコンバート済み)。`MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX05/EX05_in.udf` を開いた GOURMET の左側のウィンドウの "EX05_in.udf" をマウスの右ボタンでクリックしポップアップメニューから "import_fields" を選択する。
3. ダイアログ上で SUSHI の出力 UDF `MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/Elastica/EX05/susi3_cylinder3D_uot.udf` を "import_udf_filepath" として入力し、"import_record_no" に 1 を入力する（前節参照)。テキストボックス上で右クリックすると、ファイルを選択できる。"save_as" に、例えば `EX05_2_in.udf` と入力する（すでに `EX05_in.udf` を開いているため)。
4. コンバートが完了すれば `EX05_2_in.udf` が作成され、そちらを編集していってもよいが、以下では、引き続き `EX05_in.udf` を用いる。
5. 続いて、パラメータの設定を行う。設定の必要があるのは、物理パラメータ部 (parameter.physical_parameter[]) である。以下の表のように入力する。

名前	値	意味
NUMBER_OF_COMPONENTS	2	2 成分系
MODULUS_ANISOTROPY_0	Axisymmetric	第 1 成分は軸対称弾性体
MODULUS_ANISOTROPY_1	Axisymmetric	第 2 成分は軸対称弾性体
MODULUS_0	[100, 20, 10, 5, 5](配列)	第 1 成分の弾性率
MODULUS_1	[20, 20, 100, 5, 5](配列)	第 2 成分の弾性率
MODULUS_AXIS_0_0	[0.0, 0.0, 1.0](配列)	第 1 成分の異方性軸は Z 軸に平行
MODULUS_AXIS_1_0	[0.0, 0.0, 1.0](配列)	第 2 成分の異方性軸は Z 軸に平行
AXISYMMETRIC_MODULUS _EVALUATION_AXES	[1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0](配列)	X,Y,Z 軸に平行な 3 軸に対して、軸対称異方性の自由エネルギーを評価

6. 続いて、境界条件設定を行う。部分領域 (境界) 条件部 (region_condition.condition[]) に以下の表のように入力する。境界条件を以下のように部分領域条件として与えている。

名前	部分領域	場	条件名	値
condition1	BOUNDARY_VERTEX_ZMIN	Displacement	D_VEC	[0.0, 0.0, 0.0]
condition2	BOUNDARY_FACE_ZMAX	Displacement	N_LOAD	[0.0, 0.0, 10.0]

これらの条件は、Z 軸に垂直な上面 (BOUNDARY_FACE_ZMAX) に Z の正方向に 10.0 の力を印可し、Z 軸に垂直な底面 (BOUNDARY_VERTEX_ZMIN) を固定することを意味している。(N_LOAD は変位についてのノイマン条件の意味)

[シミュレーション実行]

以下のコマンドで Elastica を実行する。
muffin5e_elastica -I EX05_in.udf -O EX05_ou.udf
計算を行うと、エンジン実行の標準出力に

```
============================================================
====== total free energy     : 4956.54
====== strain multiple for K : 82.8955
====== strain multiple for G : 263.137
====== energy term for anisotropic modulus evaluation ===
  == axis ( 1, 0, 0 )
   coeff 0 = 165.791
   coeff 1 = 5.51128
   coeff 2 = -26.5938
   coeff 3 = 0.402436
   coeff 4 = 318.401
  == axis ( 0, 1, 0 )
   coeff 0 = 165.791
   coeff 1 = 5.71867
   coeff 2 = -26.919
   coeff 3 = 0.831829
   coeff 4 = 318.401
  == axis ( 0, 0, 1 )
   coeff 0 = 165.791
```

```
   coeff 1 = 294.217
   coeff 2 = 219.304
   coeff 3 = 28.1567
   coeff 4 = 318.401
====== free energy maximum = 2.96863 at ( 0, 15, 0 )
       displacement ( 1.26046e-13, -1.25515e-13, 3.17924e-13 )
====== free energy minimum = 0.817829 at ( 6, 7, 0 )
       displacement ( 1.17777e-14, 1.76429e-14, 6.33716e-13 )
=============================================================
```

と AXISYMMETRIC_MODULUS_EVALUATION_AXES パラメータで与えた、自由エネルギー評価の異方性軸の各々について、自由エネルギーの係数が出力される。これらの値は出力 UDF ファイルの中にも記載されている。詳細は理論編の式 (1.14) を参照。

[結果の描画]

1. 計算結果の出力 UDF ファイルを GOURMET で開き、変形後のレコード (No.1) に移動。
2. 先ずは、変形後の体積分率場のカラーコンターを描画してみよう。GOURMET の左側のウィンドウの "EX05_ou.udf" をマウスの右ボタンでクリックしポップアップメニューから "show_field" を選択する。図 2.5 の左図のようにカラーコンターが描画される。赤色が第 1 成分、青色が第 2 成分である。レコード No.0 の変形前のモルフォロジーと比べると、引っ張り方向に硬いが垂直方法には軟かい赤色成分のシリンダーが細くなり、引っ張り方向に軟かい青色の成分は赤色成分よりも引っ張り方向に出ていることが分かる。青色成分は引っ張り方向に大きくひずみ側面が凹んでいる。

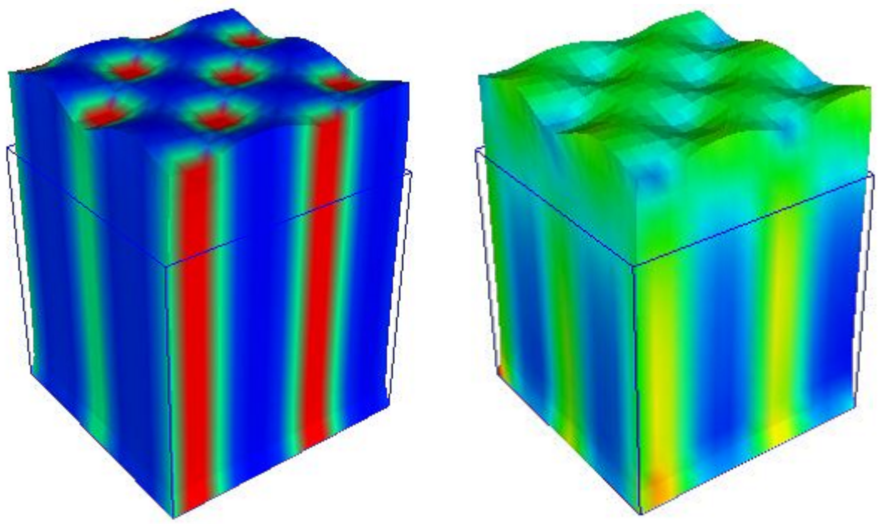

図 2.5: Elastica : 応用例 5. 変形後のモルフォロジーと自由エネルギー (カラーコンター)

3. 続いて、変形後の自由エネルギーのカラーコンターを描画してみよう。GOURMET の左側のウィンドウの "EX02_ou.udf" をマウスの右ボタンでクリックしポップアップメニューから "show_field" を実行し、"FreeEnergy"場を選択する。図 2.5 の右図のようにカラーコンターが描画される。固定面近くで、引っ張りに対して硬い赤色成分に大きなひずみが溜っていることが分かる。

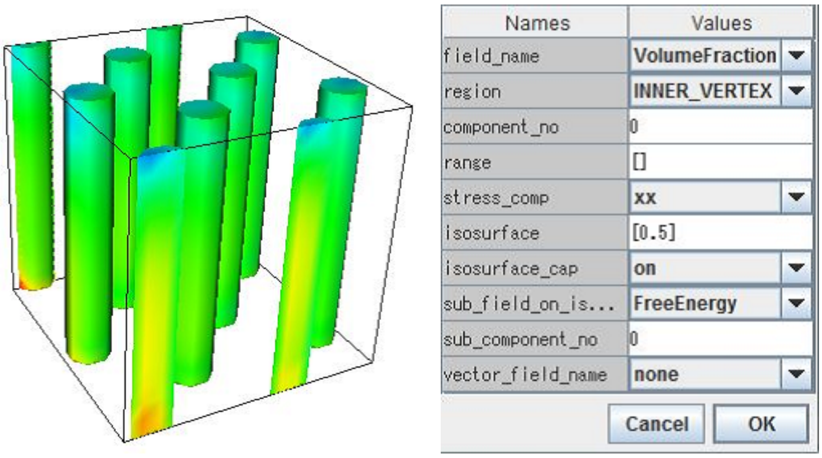

図 2.6: Elastica : 応用例 5. 変形後の界面上の自由エネルギー

4. 変形後の界面上の自由エネルギーのカラーコンターを描画するには 図 2.6 のようにする。isosurface の cap を off にすれば、変形時の界面形状を描画できる。

第3章　Elasticaリファレンス

3.1　Elasticaの利用可能な場の一覧

現在、選択可能な場は以下のものである。

場の名前	場の意味と理論編での記号
Displacement	変位場 $\boldsymbol{u}$
FreeEnergy	自由エネルギー (歪みエネルギー) 場 f
VolumeFraction	体積分率場 ψ_α
Stress	応力テンソル場 σ

3.2　Elasticaの入力パラメーター一覧

ソルバパラメータ

パラメータの名前	パラメータの意味と理論編での記号
CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_1	CG法で一次方程式を解くときの収束判定条件。残差ベクトルのノルムがこの値以下であるとき収束とみなす。デフォルト値は 0.5×10^{-6}。
CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_2	CG法で一次方程式を解くときのもう一つの収束判定条件。デフォルト値は0。ペナルティ法による変位境界条件を適用している場合には0にしておくべきである。
MATRIX_SOLVER	用いる連立一次方程式の行列ソルバを“ICCG”、”CG” より選択。デフォルト値は“ICCG”。
PENALTY_NUMBER_FOR_DIRICHLET_BC	デリクレ条件を満たすために行列ソルバに与えるペナルティー数 (非常に大きい数)。デフォルト値は 10^{13}。
ELEMENTS_PER_MATRIX_MERGE	変位計算のためのマトリックス (剛性マトリックス) の計算をここで指定した要素を単位として行う。デフォルトは5000。この数値を小さくするとマトリックス合成時のメモリを削減できるが、処理時間は大きくなる可能性がある。

物理パラメータ

パラメータの名前	パラメータの意味と理論編での記号
NUMBER_OF_COMPONENTS	成分数
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	複数成分が均一に混合している場合の各成分の体積分率。先頭から成分 0, 成分 1,... と成分数分配列で与える。
GRAVITY_X	X 軸方向の重力加速度
GRAVITY_Y	Y 軸方向の重力加速度
GRAVITY_Z	Z 軸方向の重力加速度
GRAVITY	各座標軸方向の重力加速度を配列で与える。ex.) [X 方向の重力加速度, Y 方向の重力加速度, Z 方向の重力加速度]
MASS_DENSITY	各成分が体積分率 1 で含まれた場合の重量密度。
AXISYMMETRIC_MODULUS _EVALUATION_AXES	任意の数の 3 次元方向軸ベクトル。 系全体をこれらのベクトルを軸とする軸対称非等方弾性体とみなしたときの平均化された非等方弾性パラメータを計算するためのデータが計算される (全歪みエネルギーを計算するときに係数 D_k に掛かる歪みの 2 次形式)。
MODULUS_ANISOTROPY_α	α 番目の成分の弾性率の非等方性を指定する。文字列 ”Isotropic” (等方弾性体) または ”Axisymmetric” (軸対称非等方弾性体) のいずれかを指定する。α 成分に対してこのパラメータが指定されない場合、その成分は等方弾性体と見なされる。
BULK_MODULUS	等方弾性体での各成分のバルク弾性率を、先頭から成分 0, 成分 1,... と成分数分配列で与える。
SHEAR_MODULUS	等方弾性体での各成分のせん断弾性率を、先頭から成分 0, 成分 1,... と成分数分配列で与える。
MODULUS_α	α 番目の成分の弾性率。 等方弾性体成分の場合 2 個の値をバルク弾性率およびせん断弾性率の順序で配列として与える。 軸対称非等方性成分の場合、5 つの弾性率パラメータ (n, l, k, m, μ) を配列で与える。
MODULUS_AXIS_α_i	成分 α が非等方性成分の場合、その非等方性の空間軸ベクトルの X, Y, Z 成分を与える。i はゼロから始まる整数で、軸ベクトルを n 本指定する必要がある場合に $i = 0$ から $i = n - 1$ までのパラメータを指定する。現状では軸対称非等方性成分のみサポートしているので $i = 0$ のみが指定できる。

3.3 Elastica の利用可能な部分領域 (境界) 条件の一覧

部分領域条件名	処理
D_VEC	指定された部分領域の節点変位ベクトルを設定 (固定変位条件)。データは変位ベクトルの X, Y, Z 成分として与える。
D_VX	指定された部分領域の節点変位ベクトル X 成分を設定 (固定変位条件)。
D_VY	指定された部分領域の節点変位ベクトル Y 成分を設定 (固定変位条件)。
D_VZ	指定された部分領域の節点変位ベクトル Z 成分を設定 (固定変位条件)。
N_LOAD	指定された部分領域の節点の荷重ベクトルを設定する (固定荷重条件)。データは荷重ベクトルの X, Y, Z 成分として与える。

3.4 Elastica の場のコマンド一覧

Displacement : 変位場 コマンド一覧

Displacement	名称
初期化	"INITIALIZE:TO_ZERO"
時間発展	"SOLVE:LINEAR_ELASTICITY:ISOTROPIC"
時間発展	"SOLVE:LINEAR_ELASTICITY:ANISOTROPIC"
時間発展	"MOVE:POSITION_OF_VERTEX"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. **Displacement 初期化コマンド 詳細**

名称	**"INITIALIZE:TO_ZERO"**
機能	すべての節点での値を 0 に初期化する

2. **Displacement 時間発展コマンド 詳細**

名称	**"SOLVE:LINEAR_ELASTICITY:ISOTROPIC"**
機能	等方線形弾性体の変位を求解する
依存している場	Displacement
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_1
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_2
依存パラメータ	DIMENSION_OF_SPACE
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER
依存パラメータ	ELEMENTS_PER_MATRIX_MERGE
依存パラメータ	GRAVITY
依存パラメータ	GRAVITY_X
依存パラメータ	GRAVITY_Y
依存パラメータ	GRAVITY_Z
依存パラメータ	MASS_DENSITY
依存パラメータ	PENALTY_NUMBER_FOR_DIRICHLET_BC
依存パラメータ	MODULUS_ANISOTROPY_α
依存パラメータ	BULK_MODULUS
依存パラメータ	SHEAR_MODULUS
依存パラメータ	MODULUS_α
依存パラメータ	MODULUS_AXIS_α_i

名称	**"SOLVE:LINEAR_ELASTICITY:ANISOTROPIC"**
機能	非等方線形弾性体の変位を求解する
依存している場	Displacement
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_1
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_2
依存パラメータ	DIMENSION_OF_SPACE
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER
依存パラメータ	ELEMENTS_PER_MATRIX_MERGE
依存パラメータ	GRAVITY
依存パラメータ	GRAVITY_X
依存パラメータ	GRAVITY_Y
依存パラメータ	GRAVITY_Z
依存パラメータ	MASS_DENSITY
依存パラメータ	PENALTY_NUMBER_FOR_DIRICHLET_BC
依存パラメータ	MODULUS_ANISOTROPY_α
依存パラメータ	BULK_MODULUS
依存パラメータ	SHEAR_MODULUS
依存パラメータ	MODULUS_α
依存パラメータ	MODULUS_AXIS_α_i

名称	**"MOVE:POSITION_OF_VERTEX"**
機能	メッシュの節点座標を変位分移動する

3. **Displacement 解析コマンド 詳細**

名称	**"OUTPUT:AVS"**
機能	AVS 形式で場のデータを出力する
依存している場	Displacement
依存パラメータ	DIMENSION_OF_SPACE

4. **Displacement 評価コマンド 詳細**

名称	**"EVALUATE:TRUE"**
機能	常に真値を返す評価関数

FreeEnergy： 自由エネルギー (歪みエネルギー) 場 コマンド一覧

FreeEnergy	名称
時間発展	"SOLVE:LINEAR_ELASTICITY"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. **FreeEnergy 時間発展コマンド 詳細**

名称	**"SOLVE:LINEAR_ELASTICITY"**
機能	歪みエネルギー場を計算する。
依存している場	Displacement
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	AXISYMMETRIC_MODULUS_EVALUATION_AXES
依存パラメータ	MODULUS_ANISOTROPY_α
依存パラメータ	BULK_MODULUS
依存パラメータ	SHEAR_MODULUS
依存パラメータ	MODULUS_α
依存パラメータ	MODULUS_AXIS_α_i

2. **FreeEnergy 解析コマンド 詳細**

名称	**"OUTPUT:AVS"**
機能	AVS 形式で場のデータを出力する

3. **FreeEnergy 評価コマンド 詳細**

名称	**"EVALUATE:TRUE"**
機能	常に真値を返す評価コマンド

VolumeFraction： 体積分率場 コマンド一覧

VolumeFraction	名称
初期化	”INITIALIZE:ONE_COMPONENT”
初期化	”INITIALIZE:TWO_COMPONENT”
初期化	”INITIALIZE:UNIFORM”
解析	”OUTPUT:AVS”
評価関数	”EVALUATE:TRUE”

1. **VolumeFraction 初期化 詳細**

名称	**”INITIALIZE:ONE_COMPONENT”**
機能	1 成分の体積分率場 ($\psi_0 = 1$) を初期生成する
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	**”INITIALIZE:TWO_COMPONENT”**
機能	2 成分の体積分率場を初期生成する ($\psi_1 = 1 - \psi_0$)
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	**”INITIALIZE:UNIFORM”**
機能	複数成分が均一に混合した体積分率場を初期生成する
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	AVERAGED_VOLUME_FRACTION

2. **VolumeFraction 解析コマンド 詳細**

名称	**”OUTPUT:AVS”**
機能	AVS 形式で場のデータを出力する

3. **VolumeFraction 評価コマンド 詳細**

名称	**”EVALUATE:TRUE”**
機能	常に真値を返す評価コマンド

Stress： 応力テンソル場 コマンド一覧

Stress	名称
時間発展	”SOLVE:STRESS”
評価関数	”EVALUATE:TRUE”

1. **Stress 時間発展コマンド 詳細**

名称	**"SOLVE:STRESS"**
機能	応力テンソル場を計算する。
依存している場	Displacement
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	AXISYMMETRIC_MODULUS_EVALUATION_AXES
依存パラメータ	MODULUS_ANISOTROPY_α
依存パラメータ	BULK_MODULUS
依存パラメータ	SHEAR_MODULUS
依存パラメータ	MODULUS_α
依存パラメータ	MODULUS_AXIS_α_i

2. **Stress 評価コマンド 詳細**

名称	**"EVALUATE:TRUE"**
機能	常に真値を返す評価コマンド

参考文献

1) L.D.Landau, and E.M.Lifshitz, eds.: *Theory of Elasticity - 3rd Edition*, Butterworth-Heinemann (1986).

2) 矢川元基, 吉村忍：有限要素法 (計算力学と CAE シリーズ 1), 培風館 (1991).