

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2010-39623

(P2010-39623A)

(43) 公開日 平成22年2月18日(2010.2.18)

(51) Int.Cl.

G06F 19/00 (2006.01)

F I

G06F 19/00 I I O

テーマコード (参考)

審査請求 未請求 請求項の数 6 O L (全 22 頁)

(21) 出願番号 特願2008-199781 (P2008-199781)
(22) 出願日 平成20年8月1日 (2008.8.1)

(71) 出願人 000002107
住友重機械工業株式会社
東京都品川区大崎二丁目1番1号
(74) 代理人 100091340
弁理士 高橋 敬四郎
(74) 代理人 100105887
弁理士 来山 幹雄
(74) 代理人 100141302
弁理士 鶴飼 伸一
(72) 発明者 市嶋 大路
神奈川県横須賀市夏島町19番地 住友重
機械工業株式会社横須賀製造所内
(72) 発明者 大西 良孝
神奈川県横須賀市夏島町19番地 住友重
機械工業株式会社横須賀製造所内
最終頁に続く

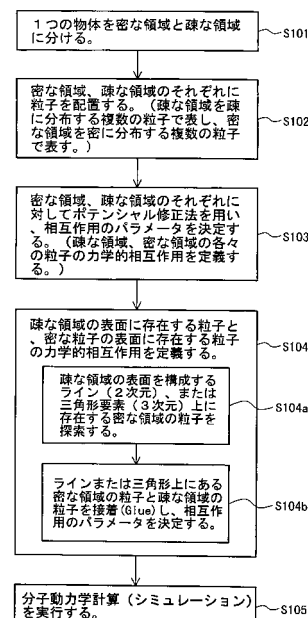
(54) 【発明の名称】 シミュレーション方法及びプログラム

(57) 【要約】

【課題】 高効率でシミュレーションを行う。

【解決手段】 (a) 1つの物体を密な領域と疎な領域とに分ける。(b) 密な領域を、第1の粒子間距離以下の粒子間距離で分布する複数の粒子で表し、疎な領域を、第1の粒子間距離よりも大きい粒子間距離で分布する複数の粒子で表す。(c) 密な領域、疎な領域の各々の中で、粒子の力学的相互作用を定義する。(d) 疎な領域との境界における密な領域の表面に存在する粒子と、密な領域との境界における疎な領域の表面に存在する粒子との間の力学的相互作用を定義する。(e) 工程(c)及び(d)において定義された力学的相互作用に基づいて、密な領域及び疎な領域内の粒子の挙動をシミュレーションする。

【選択図】 図14



【特許請求の範囲】**【請求項 1】**

(a) 1つの物体を密な領域と疎な領域とに分ける工程と、

(b) 前記密な領域を、第1の粒子間距離以下の粒子間距離で分布する複数の粒子で表し、前記疎な領域を、前記第1の粒子間距離よりも大きい粒子間距離で分布する複数の粒子で表す工程と、

(c) 前記密な領域、前記疎な領域の各々の中で、粒子の力学的相互作用を定義する工程と、

(d) 前記疎な領域との境界における前記密な領域の表面に存在する粒子と、前記密な領域との境界における前記疎な領域の表面に存在する粒子との間の力学的相互作用を定義する工程と、

(e) 前記工程(c)及び(d)において定義された力学的相互作用に基づいて、前記密な領域及び前記疎な領域内の粒子の挙動をシミュレーションする工程とを有するシミュレーション方法。

【請求項 2】

前記工程(d)において、前記疎な領域の表面に接触した前記密な領域の粒子と、該粒子が接触した前記疎な領域の表面位置を囲むDe launay三角形分割によって得られた三角形の頂点に位置する、前記疎な領域の表面の3つの粒子との間に、力学的相互作用を定義する請求項1に記載のシミュレーション方法。

【請求項 3】

前記工程(b)において、前記疎な領域との境界における前記密な領域の粒子の位置と、前記密な領域との境界における前記疎な領域の粒子の位置とが一致するように粒子を分布させ、

前記工程(d)において、前記密な領域の粒子と前記疎な領域の粒子の位置が一致しているとき、前記密な領域の粒子を消滅させて、該位置に前記疎な領域の粒子のみを配置する請求項1または2に記載のシミュレーション方法。

【請求項 4】

種々のシミュレーションを行うためにコンピュータを、

1つの物体を密な領域と疎な領域とに分けるための情報を入力する手段、

前記密な領域を、第1の粒子間距離以下の粒子間距離で分布する複数の粒子で表し、前記疎な領域を、前記第1の粒子間距離よりも大きい粒子間距離で分布する複数の粒子で表すための演算を行う手段、

前記密な領域、前記疎な領域の各々の中で、粒子の力学的相互作用を定義する第1の定義手段、

前記疎な領域との境界における前記密な領域の表面に存在する粒子と、前記密な領域との境界における前記疎な領域の表面に存在する粒子との間の力学的相互作用を定義する第2の定義手段、

前記第1及び第2の定義手段で定義された力学的相互作用に基づいて、前記密な領域及び前記疎な領域内の粒子の挙動をシミュレーションする手段

として機能させるためのプログラム。

【請求項 5】

前記第2の定義手段は、前記疎な領域の表面に接触した前記密な領域の粒子と、該粒子が接触した前記疎な領域の表面位置を囲むDe launay三角形分割によって得られた三角形の頂点に位置する、前記疎な領域の表面の3つの粒子との間に、力学的相互作用を定義する請求項4に記載のプログラム。

【請求項 6】

前記第2の定義手段は、前記密な領域の粒子と前記疎な領域の粒子の位置が一致しているとき、前記密な領域の粒子を消滅させて、該位置に前記疎な領域の粒子のみを配置する請求項4または5に記載のプログラム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、シミュレーション方法及びプログラムに関する。

【背景技術】

【0002】

コンピュータを用いて物質科学全般の現象を探索する方法として、分子動力学法に基づく分子シミュレーションが知られている。分子シミュレーションによって、分子のポテンシャルエネルギーや最安定構造等物質の特性を、分子レベルで解明することが可能である。

【0003】

分子動力学法に基づく分子シミュレーションに関して、種々の研究がなされている。たとえば少ない計算量で分子動力学計算を実行するシミュレーション方法の発明が開示されている（たとえば、特許文献1参照）。

10

【0004】

予め設定された複雑な形状の物性値または物理量を求める分子シミュレーションを行う場合、適当に原子を配置したとしても、配置された原子位置に基づいてポテンシャルを修正することにより、原子間相互作用のパラメータを定めることが可能である。

【0005】

しかしながら、原子間距離があまりに異なる領域が存在すると、強度（ヤング率）に異方性が生じてしまう。具体的には、Voronoi解析を行ったときの要素（メッシュ）の面積（2次元の場合）、もしくは体積（3次元の場合）の分散が大きいときに不具合が生じやすい。

20

【0006】

【特許文献1】特開2006-285866号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

本発明の目的は、高効率でシミュレーションを行うシミュレーション方法を提供することである。

【0008】

また、高効率でシミュレーションを行うシミュレーション方法を実行させるプログラムを提供することである。

30

【課題を解決するための手段】

【0009】

本発明の一観点によれば、（a）1つの物体を密な領域と疎な領域とに分ける工程と、（b）前記密な領域を、第1の粒子間距離以下の粒子間距離で分布する複数の粒子で表し、前記疎な領域を、前記第1の粒子間距離よりも大きい粒子間距離で分布する複数の粒子で表す工程と、（c）前記密な領域、前記疎な領域の各々の中で、粒子の力学的相互作用を定義する工程と、（d）前記疎な領域との境界における前記密な領域の表面に存在する粒子と、前記密な領域との境界における前記疎な領域の表面に存在する粒子との間の力学的相互作用を定義する工程と、（e）前記工程（c）及び（d）において定義された力学的相互作用に基づいて、前記密な領域及び前記疎な領域内の粒子の挙動をシミュレーションする工程とを有するシミュレーション方法が提供される。

40

【0010】

また、本発明の他の観点によると、種々のシミュレーションを行うためにコンピュータを、1つの物体を密な領域と疎な領域とに分けるための情報を入力する手段、前記密な領域を、第1の粒子間距離以下の粒子間距離で分布する複数の粒子で表し、前記疎な領域を、前記第1の粒子間距離よりも大きい粒子間距離で分布する複数の粒子で表すための演算を行う手段、前記密な領域、前記疎な領域の各々の中で、粒子の力学的相互作用を定義する第1の定義手段、前記疎な領域との境界における前記密な領域の表面に存在する粒子と、前記密な領域との境界における前記疎な領域の表面に存在する粒子との間の力学的相互

50

作用を定義する第2の定義手段、前記第1及び第2の定義手段で定義された力学的相互作用に基づいて、前記密な領域及び前記疎な領域内の粒子の挙動をシミュレーションする手段として機能させるためのプログラムが提供される。

【発明の効果】

【0011】

本発明によれば、高効率でシミュレーションを行うシミュレーション方法を提供することができる。

【0012】

また、高効率でシミュレーションを行うシミュレーション方法を実行させるプログラムを提供することができる。

10

【発明を実施するための最良の形態】

【0013】

2次元の場合と3次元の場合とに分けて、原子（粒子）が細かく配置された領域と、粗く配置された領域とを、両領域間で物理量が連続的に変化するように接着（Glue）する手法の実施例について説明する。

【0014】

まず、図1～図7を参照し、2次元の場合について、実施例による粗密領域接着手法を説明する。

【0015】

図1（A）に原子が密に配置された2次元領域と、原子が疎に配置された2次元領域を示す。

20

【0016】

図1（B）に示すように、これら2つの領域を接着して、1つの領域を形成する。この際、密な領域の内部と疎な領域の内部は、それぞれポテンシャル修正法で相互作用のパラメータを決定しておく。

【0017】

図2（A）に、密に配置された領域の原子と、疎に配置された領域の原子の接着前の状態を示す。

【0018】

図の上方の原子 $g_0 \sim g_4$ は密に配置された領域に属する原子である。原子 g_0 と g_1 とはバネ定数 k_{01} のバネで結合しているとする。同様に、原子 g_1 と g_2 とはバネ定数 k_{12} のバネで、原子 g_2 と g_3 とはバネ定数 k_{23} のバネで、原子 g_3 と g_4 とはバネ定数 k_{34} のバネで結合していると考える。

30

【0019】

図の下方の原子 i 及び j は疎に配置された領域に属する原子である。原子 i と j とはバネ定数 k_{ij} のバネで結合しているとする。

【0020】

疎な領域の原子 i 、 j 上に、密な領域の原子 $g_0 \sim g_4$ を接着する。原子 $g_0 \sim g_4$ は、疎な領域の表面を構成するライン（原子 i と原子 j とを結ぶ直線）上に存在する。

【0021】

図2（B）を参照する。接着に当たって、原子 g_0 、 g_4 の位置が、それぞれ原子 i 、 j の位置と一致するときには、密な領域の原子 g_0 、 g_4 を消去し、代わりに疎な領域の原子 i 、 j を用いる。原子 g_0 、 g_4 の位置が、それぞれ原子 i 、 j の位置と極めて近い場合も同じく処理する。

40

【0022】

また、密な領域の原子同士を結合していたバネ、及び疎な領域の原子同士を結合していたバネをすべて消去する。代わりに、隣り合う原子同士がすべてバネ定数 k_{ij} のバネで結合すると考える。具体的には、原子 i と原子 g_1 、原子 g_1 と原子 g_2 、原子 g_2 と原子 g_3 、及び原子 g_3 と原子 j とはすべてバネ定数 k_{ij} のバネで結合すると考える。

【0023】

50

図 2 (C) を参照して、接着後、原子 i と原子 j とを結ぶ方向に直交する方向に作用する力について説明する。

【 0 0 2 4 】

原子 i と原子 j とを結ぶ直線から、当該直線と直交する方向に Δr だけ変位している原子には、変位している方向と反対方向に変位 Δr に比例する力が加わると考える。たとえば、図 2 (C) において、原子 i と原子 j とを結ぶ直線と直交する方向に Δr だけ変位している原子 g_1 には、

$$F = -k\Delta r$$

【 0 0 2 5 】

・ ・ (1)

の力が作用するとする。ここで負の符号は力 F の作用する向きが変位 Δr と反対方向であることを示す。力 F は原子 i と原子 j とを結ぶ直線に直交する方向に働く。

【 0 0 2 6 】

また、式 (1) の力 F の反作用として、原子 i に作用する力 F_i 、原子 j に作用する力 F_j をそれぞれ以下の式 (2)、(3) で導入する。

$$F_i = \frac{l_j}{l_i + l_j} F$$

【 0 0 2 7 】

・ ・ (2)

$$F_j = \frac{l_i}{l_i + l_j} F$$

【 0 0 2 8 】

・ ・ (3)

ここで l_i 、 l_j はそれぞれ原子 g_1 の存する点から直線 i j に下ろした垂線の足と、原子 i、原子 j との間の距離を示す。力 F_i 、 F_j の働く向きは、力 F の働く向きと反対方向である。

【 0 0 2 9 】

力 F、 F_i 、 F_j を式 (1) ~ (3) で示すように定めることで、図示の系内で力とトルクのバランスが保たれる。

【 0 0 3 0 】

このようにして、原子が密に配置された 2 次元領域と、疎に配置された 2 次元領域とを接着する。

10

20

30

40

50

【 0 0 3 1 】

本願発明者らは、上述のように原子密度の異なる 2 つの 2 次元領域を接着して、精度確認のためのシミュレーションを行った。

【 0 0 3 2 】

図 3 ~ 図 7 を参照して、シミュレーションについて説明する。

【 0 0 3 3 】

図 3 (A) 及び (B) に、精度確認のための計算系を示す。

【 0 0 3 4 】

図 3 (A) を参照する。半径 6 mm の半円筒と、半径 20 mm の半円筒の円筒面を、お互いの頂点部分が接触するように接触させ、半径 6 mm の半円筒側から接触点に垂直に、500 N / mm の荷重をかけるシミュレーションを行った。

10

【 0 0 3 5 】

シミュレーションに当たっては、2 つの半円筒を形成する材料に SUS を想定し、ヤング率を 208 GPa、密度を 7800 kg / m³、ポアソン比を 0.27 に設定した。

【 0 0 3 6 】

図 3 (B) は、2 つの半円筒の接触部分、及び粗密両領域が接着された部分の拡大写真である。シミュレーションにおいては、2 つの半円筒の接触部分の近傍にのみ、密領域を導入し、2 つの半円筒の接近距離、及び接近距離と理論値との間の誤差を求めた。なお、上記条件で接触された 2 つの円筒が接近する距離の理論値は 16.84 μ m である。

20

【 0 0 3 7 】

図 4 (A) 及び (B) を参照する。まず、比較例として 2 つの半円筒に粗密領域を設けず、メッシュ幅を一樣としてシミュレーションを行った。メッシュ幅は半円筒を構成する原子の原子間距離に相当する。

【 0 0 3 8 】

図 4 (A) を参照して、第 1 の比較例について説明する。第 1 の比較例においては、半径 6 mm の半円筒のメッシュ幅を 0.3 mm とし、半径 20 mm の半円筒のメッシュ幅を 0.5 mm としてシミュレーションを行った。

【 0 0 3 9 】

第 1 の比較例において、2 つの半円筒の接近距離は 17.78 μ m であり、理論値との誤差は、5.58 % であった。

30

【 0 0 4 0 】

図 4 (B) を参照して、第 2 の比較例について説明する。第 2 の比較例においては、半径 6 mm の半円筒のメッシュ幅を 0.08 mm とし、半径 20 mm の半円筒のメッシュ幅を 0.1 mm としてシミュレーションを行った。

【 0 0 4 1 】

第 2 の比較例において、2 つの半円筒の接近距離は 17.20 μ m であり、理論値との誤差は、2.14 % であった。

【 0 0 4 2 】

第 1 の比較例と第 2 の比較例とを比べたとき、メッシュ幅の小さい第 2 の比較例の方が理論値との誤差が小さいことがわかる。

40

【 0 0 4 3 】

図 5 を参照して、基本シミュレーションについて説明する。基本シミュレーションにおいては、疎領域については、第 1 の比較例と等しいメッシュ幅を用い、密領域については、第 2 の比較例と等しいメッシュ幅を用いた。すなわち、半径 6 mm の半円筒については、疎領域のメッシュ幅を 0.3 mm、密領域のメッシュ幅を 0.08 mm とし、半径 20 mm の半円筒については、疎領域のメッシュ幅を 0.5 mm、密領域のメッシュ幅を 0.1 mm として、2 つの半円筒の接近距離を計算した。その結果、2 つの半円筒の接近距離は 17.48 μ m、理論値との誤差は 3.21 % であった。

【 0 0 4 4 】

全体のメッシュ幅を一樣に細かくした第 2 の比較例には及ばないが、メッシュ幅が一樣

50

に粗い第 1 の比較例に比べると、理論値との誤差が小さくなっていることがわかる。

【0045】

次に本願発明者らは、上述の基本シミュレーションよりも、疎領域のメッシュ幅を粗くしてシミュレーションを行った。

【0046】

図 6 (A) を参照する。本図に示す例では、半径 6 mm の半円筒の疎領域のメッシュ幅を 0.6 mm、半径 20 mm の半円筒の疎領域のメッシュ幅を 1.0 mm とした。その結果、2 つの半円筒の接近距離は 17.50 μ m、理論値との誤差は 3.92 % であった。

【0047】

図 6 (B) を参照する。本図に示すのは、図 6 (A) に示す例より更に疎領域のメッシュ幅を粗くした例である。本例においては、半径 6 mm の半円筒の疎領域のメッシュ幅を 1.2 mm、半径 20 mm の半円筒の疎領域のメッシュ幅を 2.0 mm とした。2 つの半円筒の接近距離は 17.33 μ m、理論値との誤差は 2.91 % という結果が得られた。

【0048】

図 6 (A) 及び (B) を参照して説明したシミュレーションと、基本シミュレーションとの比較から、誤差は、疎領域のメッシュ幅の大小にかかわらず、ほぼ等しくなることがわかる。

【0049】

最後に、本願発明者らは、理論値との誤差とアスペクト比との関係について調査した。アスペクト比は、疎領域のメッシュ幅を密領域のメッシュ幅で除したものとして定義される。

【0050】

調査に当たっては、図 3 (A) 及び (B) を参照して説明した計算系において、2 つの半円筒の疎領域のメッシュ幅をともに 0.5 mm に固定し、密領域のメッシュ幅を様々に変化させることでアスペクト比を変化させた。そして変化させたアスペクト比を与えるメッシュ幅ごとに、2 つの半円筒の接近距離、及び接近距離と理論値との間の誤差を求めた。

【0051】

図 7 は、アスペクト比と誤差との関係を示すグラフである。グラフの横軸はアスペクト比を任意単位で表し、縦軸は、誤差を単位「%」で表す。

【0052】

アスペクト比が大きくなるほど誤差は小さくなっている。これはアスペクト比を大きくするために、密領域のメッシュ幅を小さくしたためであると考えられる。

【0053】

グラフから、実施例による接着手法は、アスペクト比を大きくすることによる不都合は生じないものと考えられる。

【0054】

次に、図 8 ~ 図 13 を参照し、3 次元の場合について、実施例による粗密領域接着手法を説明する。

【0055】

図 8 (A) に原子が密に配置された 3 次元領域と、原子が疎に配置された 3 次元領域を示す。

【0056】

図 8 (B) に示すように、これら 2 つの領域を接着して、1 つの領域を形成する。この際、密な領域の内部と疎な領域の内部は、それぞれポテンシャル修正法で相互作用のパラメータを決定しておく。

【0057】

図 9 (A) に、密に配置された領域の原子と、疎に配置された領域の原子の接着前の状態を示す。

【0058】

10

20

30

40

50

図の左側の原子 $g_0 \sim g_5$ は密に配置された領域に属する原子である。原子 g_0 、 g_2 、 g_5 が形成する三角形の原子 g_0 、 g_2 を結ぶ辺の中点に原子 g_1 が配置されている。また、原子 g_2 、 g_5 を結ぶ辺の中点に原子 g_4 が、原子 g_5 、 g_0 を結ぶ辺の中点に原子 g_3 が配置されている。

【0059】

図の右側の原子 i 、 j 、及び k は疎に配置された領域に属する原子である。原子 i 、 j 、 k が形成する三角形は、密領域の原子 g_0 、 g_2 、 g_5 が形成する三角形と合同である。

【0060】

原子 i と j とはバネ定数 k_{ij} のバネで結合しているとする。同様に、原子 j と k とはバネ定数 k_{jk} のバネで、原子 k と i とはバネ定数 k_{ki} のバネで結合しているとする。 10

【0061】

疎な領域の原子 i 、 j 、 k のつくる三角形上またはその内部に、密な領域の原子 $g_0 \sim g_5$ を接着する。

【0062】

図9(B)を参照する。接着に当たって、密な領域の原子位置と疎な領域の原子位置とが一致した場合、密な領域の原子を取り除き、代わりに疎な領域の原子を用いる。

【0063】

図9(B)においては、それぞれ疎な領域の原子 i 、 j 、 k と位置が一致する密な領域の原子 g_0 、 g_2 、 g_5 を取り除き、その位置には原子 i 、 j 、 k を残す。原子 g_0 、 g_2 、 g_5 の位置が、それぞれ原子 i 、 j 、 k の位置と極めて近い場合も同じく処理する。 20

【0064】

図9(C)を参照する。疎な領域の原子同士を結合していたバネをすべて消去し、代わりに、隣り合う原子同士を結ぶバネを想定する。原子 i 、 j を結ぶ辺に平行な方向に隣り合う原子間を結ぶバネのバネ定数はすべて k_{ij} とする。同様に、原子 j 、 k を結ぶ辺に平行な方向に隣り合う原子間を結ぶバネのバネ定数はすべて k_{jk} とし、原子 k 、 i を結ぶ辺に平行な方向に隣り合う原子間を結ぶバネのバネ定数はすべて k_{ki} とする。

【0065】

三次元形状にメッシュを切る場合、図9(A)～(C)に示すように、接着箇所の粗密両領域の原子配置を相似形とすることが望ましい。しかしながら実際には、そうすることは困難であり、全く異なった形状に配置された粗密領域の原子同士を接着する場合が多い。そこでそのような場合には、以下のルールで結合させる。以下のルールを用いることにより、疎密両領域のメッシュを相似にしくなくても接着が可能となる。 30

【0066】

図10を参照する。

【0067】

原子 i 、 j 、 k を疎な領域に属する原子とする。原子 i j 間の距離を r_{ij} 、原子 j k 間の距離を r_{jk} 、原子 k i 間の距離を r_{ki} とする。また、原子 i と j とはバネ定数 k_{ij} のバネで結合しているとする。同様に、原子 j と k とはバネ定数 k_{jk} のバネで、原子 k と i とはバネ定数 k_{ki} のバネで結合しているとする。 40

【0068】

疎な領域の原子 i 、 j 、 k で形成される三角形上またはその内部(三角形要素上)に、密な領域の原子 g を接着する。原子 i 、 j 、 k で形成される三角形は、原子 g を囲む、De launay 三角形分割によって得られた三角形である。

【0069】

なお、De launay 三角形分割とは、隣接する Voronoi 点同士をつないで領域を分割することをいう。Voronoi 点とは、Voronoi 多面体(2次元ならば垂直二等分線、3次元ならば垂直二等分面で囲まれた領域)を構成する点である。

【0070】

このとき原子 g は、原子 i 、 j 、 k とそれぞれ下の式(4)～(6)で表されるバネ定 50

数 k_{gi} 、 k_{gj} 、 k_{gk} のバネで結合されると考える。

$$k_{gi} = \frac{rr}{r_{gi}} kk / N$$

【 0 0 7 1 】
 ・ ・ (4)

10

$$k_{gj} = \frac{rr}{r_{gj}} kk / N$$

【 0 0 7 2 】
 ・ ・ (5)

20

$$k_{gk} = \frac{rr}{r_{gk}} kk / N$$

【 0 0 7 3 】
 ・ ・ (6)

ここで、 r_{gi} 、 r_{gj} 、 r_{gk} はそれぞれ、原子 g と原子 i 、原子 g と原子 j 、原子 g と原子 k 間の距離を表す。また N は、原子 i 、 j 、 k で形成される三角形上またはその内部に存在する密領域の原子（疎領域に接着される原子）の数である。更に、 rr 、 kk はそれぞれ下の式（ 7 ）、（ 8 ）で求められる値である。

30

$$rr = (r_{ij} + r_{jk} + r_{ki}) / 3$$

【 0 0 7 4 】
 ・ ・ (7)

40

$$kk = (k_{ij} + k_{jk} + k_{ki}) / 3$$

【 0 0 7 5 】
 ・ ・ (8)

50

すなわち r は、原子 i 、 j 、 k の原子間距離 r_{ij} 、 r_{jk} 、 r_{ki} の平均値であり、 k は原子 i 、 j 、 k 間を結ぶバネのバネ定数 k_{ij} 、 k_{jk} 、 k_{ki} の平均値である。

【 0 0 7 6 】

次に、図 1 1 を参照して、接着後、原子 i 、 j 、 k で定められる平面に垂直な方向に作用する力について説明する。疎領域原子 i 、 j 、 k で形成される三角形上またはその内部に接着された密領域の原子 g が、原子 i 、 j 、 k で定められる平面から Δr だけ離れた場合、原子 g 、 i 、 j 、 k に働く、平面に垂直な方向の力を、それぞれ F_g 、 F_i 、 F_j 、 F_k とすると、それらはそれぞれ下式 (9) ~ (1 2) で表され则认为る。

10

$$F_g = -K \Delta r$$

【 0 0 7 7 】

・ ・ (9)

$$F_i = \frac{l_1 \cos \theta_1 l_2 \sin \theta_2 + l_1 \sin \theta_1 l_2 \cos \theta_2}{\delta} F_g$$

20

【 0 0 7 8 】

・ ・ (1 0)

$$F_j = \frac{l_2 l_3 \sin \theta_2}{\delta} F_g$$

30

【 0 0 7 9 】

・ ・ (1 1)

$$F_k = \frac{l_1 l_3 \sin \theta_1}{\delta} F_g$$

【 0 0 8 0 】

・ ・ (1 2)

40

ここで、 K は比例定数であり、(9) 式において負符号は変位 Δr の方向とは反対向きに力 F_g が作用することを示す。また、 l_1 、 l_2 、 l_3 はそれぞれ、原子 g から、原子 i 、 j 、 k で定められる平面に下ろした垂線の足 H から、原子 j 、 k 、 i までの距離である。更に、 θ_1 は、原子 i と垂線の足 H を結ぶ直線と、原子 j と垂線の足 H を結ぶ直線とのなす角度であり、 θ_2 は、原子 i と垂線の足 H を結ぶ直線と、原子 k と垂線の足 H を結ぶ直線とのなす角度である。また、 δ は下式 (1 3) で計算される値である。

50

$$\delta = l_1 l_2 \cos \theta_1 \sin \theta_2 + l_1 l_3 \sin \theta_1 + l_1 l_2 \cos \theta_2 \sin \theta_1 + l_2 l_3 \sin \theta_2$$

【 0 0 8 1 】
 ・ ・ (1 3)

力 F_g 、 F_i 、 F_j 、 F_k を式 (9) ~ (1 2) で示すように定めることで、図示の系内で力とトルクのバランスが保たれる。

【 0 0 8 2 】

このようにして、原子が密に配置された 3 次元領域と、疎に配置された 3 次元領域とを接着する。

10

【 0 0 8 3 】

本願発明者らは、2 次元の粗密領域の接着の場合と同様に、原子密度の異なる 2 つの 3 次元領域を接着して、精度確認のためのシミュレーションを行った。

【 0 0 8 4 】

図 1 2 及び図 1 3 を参照して、シミュレーションについて説明する。

【 0 0 8 5 】

図 1 2 (A) 及び (B) に、精度確認のための計算系を示す。

【 0 0 8 6 】

図 1 2 (A) を参照する。直径 3 0 m m の球と直径 1 3 m m の球とを、2 球の中心を結ぶ直線に沿って、相対速度 1 0 0 m / s で衝突させるシミュレーションを行い、2 球の接触時間 τ からヤング率を導出し、設定値との比較を行った。シミュレーションにおいて、ヤング率は 2 0 8 G P a に設定した。なお、接触時間 τ とヤング率 E との関係は、下式 (1 4) ~ (1 6) を用いて表される。

20

$$\tau = 2.94 \left(\frac{\mu^2}{k^2 v} \right)^{1/5}$$

30

【 0 0 8 7 】
 ・ ・ (1 4)

$$k = \frac{4}{5D} \sqrt{\frac{RR'}{R+R'}}$$

40

【 0 0 8 8 】
 ・ ・ (1 5)

$$D = \frac{3}{2} \left(\frac{1 - \sigma^2}{E} \right)$$

【 0 0 8 9 】
 ・ ・ (1 6)

50

式(14)において μ は換算質量、 v は2球の相対速度を示す。また、式(15)において、 R 及び R' は、2球それぞれの半径を示す。更に、式(16)における σ はポアソン比である。

【0090】

シミュレーションに当たっては、2つの球を形成する材料にSUSを想定し、密度を 7800 kg/m^3 、ポアソン比を0.27に設定した。また、先に述べたように、ヤング率を 208 GPa とした。このとき式(14)～(16)を用いて、接触時間 τ の理論値は、約 $21.61\text{ }\mu\text{m}$ と計算される。

【0091】

図12(B)に、2つの球の中心を通る断面を示す。シミュレーションにおいては、2つの球の表面近傍に密領域を導入し、それ以外の球の内部領域(中心部)に疎領域を画定して、上述のルールで接着した。

【0092】

シミュレーションは、疎密両領域のアスペクト比が2、3、4、5、10の各場合について行った。なお、比較例としてアスペクト比1の場合(領域の密度が一樣とされ、疎密領域の接着が行われない場合)のシミュレーションも実施した。

【0093】

図13(A)及び(B)にシミュレーションの結果を示す。図13(A)は、アスペクト比と接触時間 τ との関係を表し、図13(B)は、アスペクト比とヤング率 E との関係を表す。両図ともに、横軸はアスペクト比を任意単位で示す。また、図13(A)における縦軸は、接触時間 τ を単位「 μs 」で示し、図13(B)における縦軸は、ヤング率 E を単位「 GPa 」で示す。

【0094】

アスペクト比が大きくなるにつれ、接触時間 τ は短く(図13(A))、ヤング率 E は大きくなる(図13(B))ことがわかる。しかしアスペクト比が10以下であるならば、たとえばヤング率 E は設定値から5%以内の誤差で求められることが確認される。

【0095】

図14は、実施例によるシミュレーション方法を示すフローチャートである。

【0096】

まず、ステップS101において、1つの物体を密な領域と疎な領域とに分ける。

【0097】

そして、ステップS102において、密な領域、疎な領域のそれぞれに粒子を配置する。すなわち、疎な領域を、疎に分布する複数の粒子で表し、密な領域を、密に分布する複数の粒子で表す。

【0098】

次に、ステップS103において、疎密それぞれの領域に対してポテンシャル修正法を用い、相互作用のパラメータを決定する。すなわち、疎な領域、密な領域の各々の粒子の力学的相互作用を定義する。

【0099】

続いて、ステップS104において、疎な領域の表面に存在する粒子と密な領域の表面に存在する粒子との間の力学的相互作用を定義する。

【0100】

具体的には、ステップS104aにおいて、疎密それぞれの領域が2次元領域である場合、疎な領域の表面を構成するライン上に存在する、密な領域の粒子を探索する。疎密両領域が3次元領域である場合は、疎な領域の表面を構成する三角形要素上に存在する、密な領域の粒子を探索する。

【0101】

そして、ステップS104bにおいて、2次元の場合はライン上、3次元の場合は三角形要素上にある密な領域の粒子と、疎な領域の粒子とを、図1～図13を参照して説明し

10

20

30

40

50

た接着手法を用いて接着 (G l u e) し、相互作用のパラメータを決定する。

【0102】

最後に、ステップ S 1 0 5 において、分子動力学計算 (粒子法によるシミュレーション) を実行する。ステップ S 1 0 3 及び S 1 0 4 において定義された力学的相互作用に基づいて、密な領域及び疎な領域内の粒子の挙動をシミュレーションする。

【0103】

実施例によるシミュレーション方法を用いると、たとえば接触問題を含む分子シミュレーションを行うに当たって、物体同士が接触する箇所には密に粒子を配置し、それ以外の箇所には疎に粒子を配置し、これらを接着 (G l u e) することで、全体の粒子数を少なくし、シミュレーションの効率を高めることができる。

10

【0104】

従来のポテンシャルを修正する手法だけでは、モデルに配置する粒子間距離 (メッシュの大きさ) は、一番小さい領域に律速してしまい、特に 3 次元解析を行う場合、極端に粒子数が多くなってしまっていて、実質的には計算を行うことが不可能であった。しかしながら、実施例によるシミュレーション方法によれば、接着 (G l u e) の考え方をを用いることにより、2 次元解析であれば 1 0 分の 1、3 次元解析であれば 1 0 0 分の 1 程度の粒子数で、接着 (G l u e) をしない場合と同等の結果を得ることが可能である。

【0105】

図 1 4 にフローチャートを示したシミュレーション方法は、プログラムにより、コンピュータで実行することができる。

20

【0106】

図 1 5 は、実施例によるシミュレーション方法を実行するシミュレーション実行装置のシステム構成図である。

【0107】

まず、キーボードなどの入力装置から、シミュレーション対象 (物体) に関する情報、たとえば大きさ、形状、材料などの情報が入力される。そしてそのシミュレーション対象 (物体) を、どのように疎な領域と密な領域に分けるかを決定する情報、たとえば画定される疎密両領域が 2 次元領域か、3 次元領域か、それらの領域の形状や大きさ (範囲)、更に、それぞれの領域における粒子の粒子間距離等の、疎領域及び密領域に関する情報が入力される。

30

【0108】

中央処理装置は、メインメモリ中の制御プログラムの指令を受け、メインメモリに保存されている相互作用パラメータ決定プログラムを実行する。

【0109】

相互作用パラメータ決定プログラムは、入力された情報を基に、前図 S 1 0 1 に示したように、1 つの物体を密な領域と疎な領域とに分ける。そして S 1 0 2 に示したように、密な領域、疎な領域のそれぞれに粒子を配置する位置を決定する。すなわち、疎な領域を、疎に分布する複数の粒子で表し、密な領域を、密に分布する複数の粒子で表すための演算を行う。

【0110】

そして S 1 0 3 に示したように、疎密それぞれの領域に対してポテンシャル修正法を用い、相互作用のパラメータを決定する。すなわち、疎な領域、密な領域の各々の中での粒子の力学的相互作用を定義する。

40

【0111】

更に、ステップ S 1 0 4 に示したように、疎な領域の表面に存在する粒子と密な領域の表面に存在する粒子との間の力学的相互作用を定義する。具体的には、ステップ S 1 0 4 a に示したように、疎密それぞれの領域が 2 次元領域である場合、疎な領域の表面を構成するライン上に存在する、密な領域の粒子を探索する計算を行う。疎密両域が 3 次元領域である場合は、疎な領域の表面を構成する三角形要素上に存在する、密な領域の粒子を探索する計算を行う。そして、S 1 0 4 b に示したように、2 次元の場合はライン上、3 次

50

元の場合は三角形要素上にある密な領域の粒子と、疎な領域の粒子とを、図 1 ~ 図 1 3 を参照して説明した接手法を用いて接着 (G l u e) し、相互作用のパラメータを決定する。

【 0 1 1 2 】

その後、中央処理装置は、メインメモリ中の制御プログラムの指令を受け、メインメモリに保存されているシミュレーション実行プログラムを実行し、S 1 0 5 に示したように、粒子法によるシミュレーションを実行する。

【 0 1 1 3 】

シミュレーションの結果は、ディスプレイやプリンタなどの出力装置を介して表示される。

10

【 0 1 1 4 】

以上実施例に沿って本発明を説明したが、本発明はこれらに制限されるものではない。種々の変更、改良、組み合わせ等が可能なことは当業者に自明であろう。

【産業上の利用可能性】

【 0 1 1 5 】

原理的には、量子的な現象を除くすべての古典現象を解析するシミュレーションに利用することができる。特に、機構、弾性の動解析における摩擦による発熱、破壊の計算に好適に用いることができる。

【図面の簡単な説明】

【 0 1 1 6 】

20

【図 1】(A) 及び (B) は、2 次元疎密領域の接着について示す図である。

【図 2】(A) は、密に配置された領域の原子と、疎に配置された領域の原子の接着前の状態を示し、(B) は、両領域の原子の接着後の状態を示し、(C) は、接着後、原子 i と原子 j とを結ぶ方向に直交する方向に作用する力を示す図である。

【図 3】(A) 及び (B) は、精度確認のための計算系を示す図である。

【図 4】(A) 及び (B) は、それぞれ第 1、第 2 の比較例について説明するための図である。

【図 5】基本シミュレーションについて説明するための図である。

【図 6】(A) 及び (B) は、基本シミュレーションよりも、疎領域のメッシュ幅を粗くして行ったシミュレーションについて説明するための図である。

30

【図 7】アスペクト比と誤差との関係を示すグラフである。

【図 8】(A) 及び (B) は、3 次元疎密領域の接着について示す図である。

【図 9】(A) は、密に配置された領域の原子と、疎に配置された領域の原子の接着前の状態を示し、(B) 及び (C) は、両領域の原子の接着後の状態を示す。

【図 1 0】密に配置された領域の原子と、疎に配置された領域の原子の接着後の状態を示す図である。

【図 1 1】疎密両領域の接着後、疎領域原子 i、j、k で定められる平面に垂直な方向に作用する力について説明するための図である。

【図 1 2】(A) 及び (B) は、精度確認のための計算系を示す図である。

【図 1 3】(A) は、アスペクト比と接触時間 τ との関係を表す図であり、(B) は、アスペクト比とヤング率 E との関係を表す図である。

40

【図 1 4】実施例によるシミュレーション方法を示すフローチャートである。

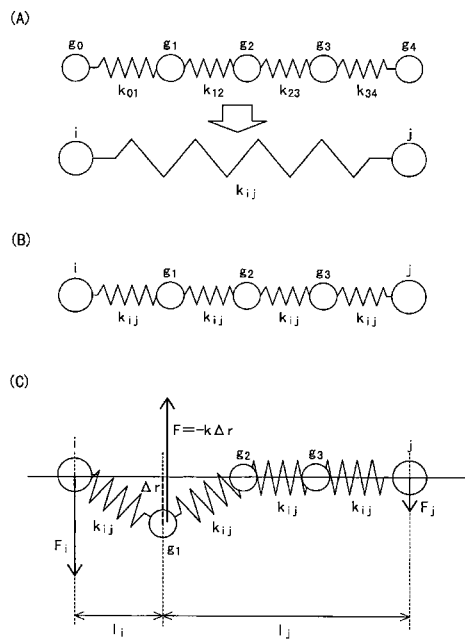
【図 1 5】実施例によるシミュレーション方法を実行するシミュレーション実行装置のシステム構成図である。

【符号の説明】

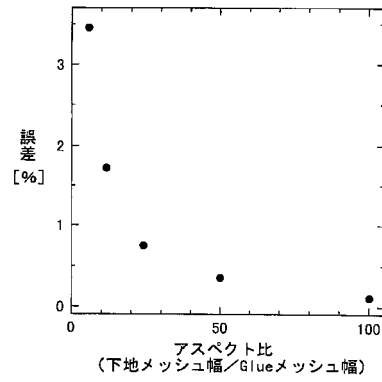
【 0 1 1 7 】

S 1 0 1 ~ S 1 0 5、S 1 0 4 a、S 1 0 4 b ステップ

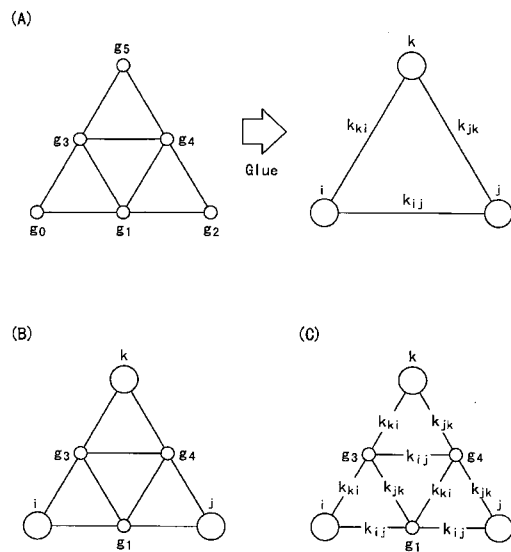
【図 2】



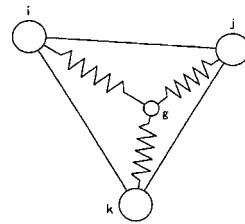
【図 7】



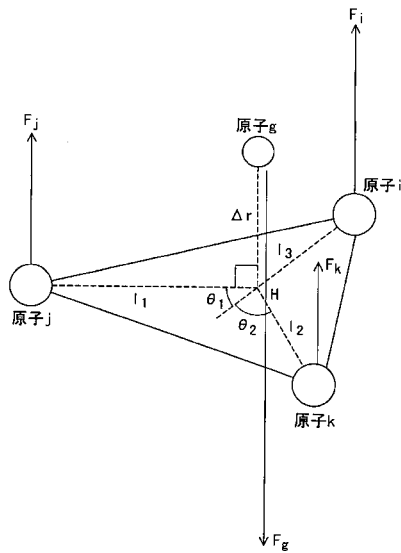
【図 9】



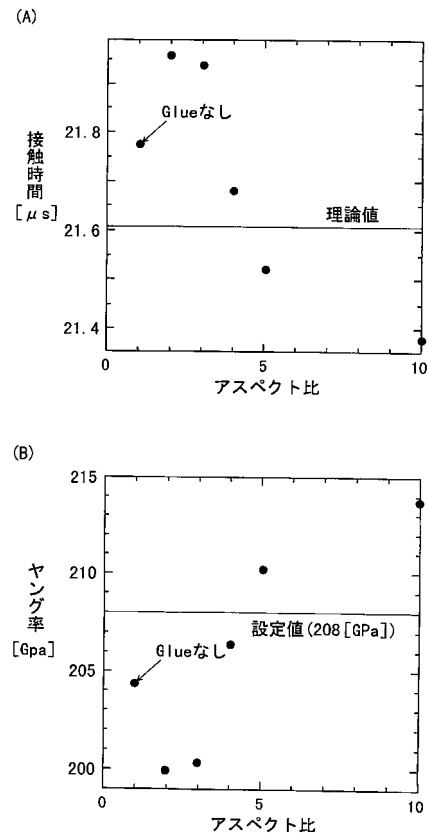
【図 10】



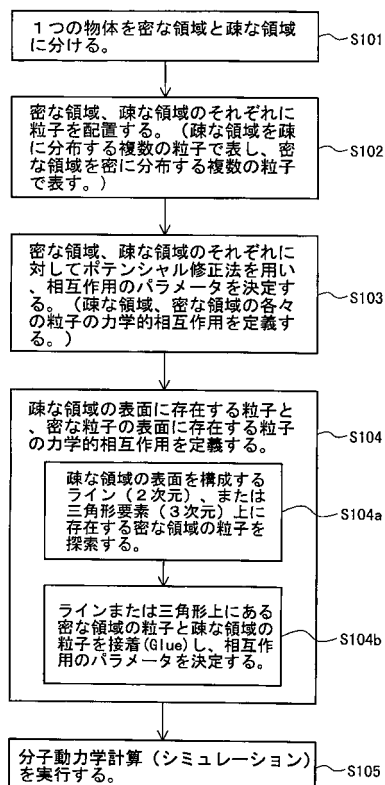
【図 1 1】



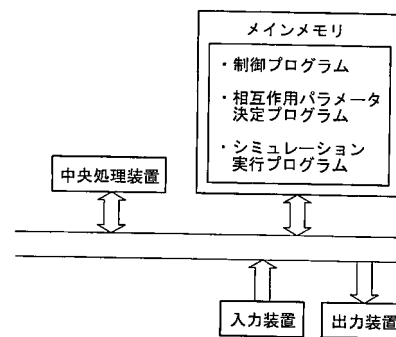
【図 1 3】



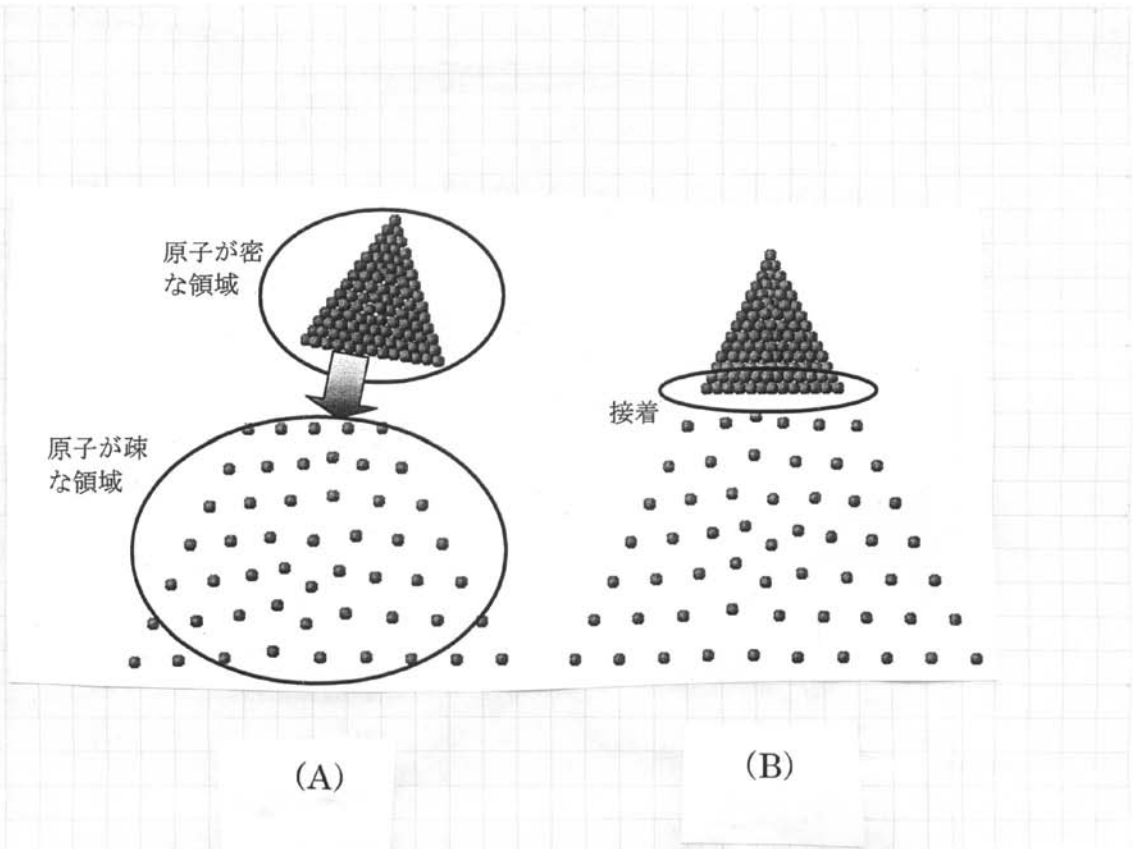
【図 1 4】



【図 1 5】

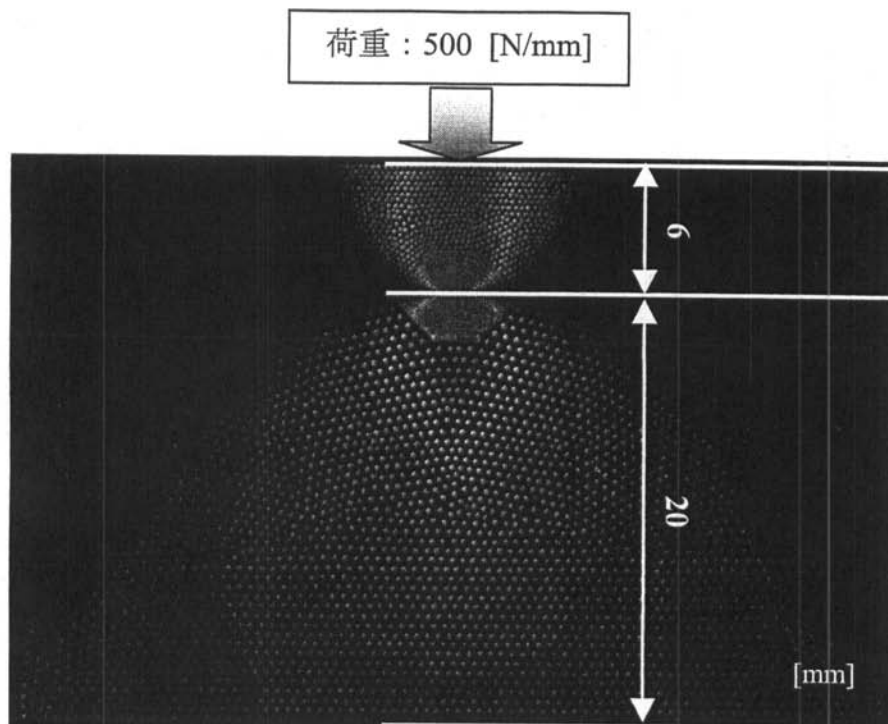


【図 1】

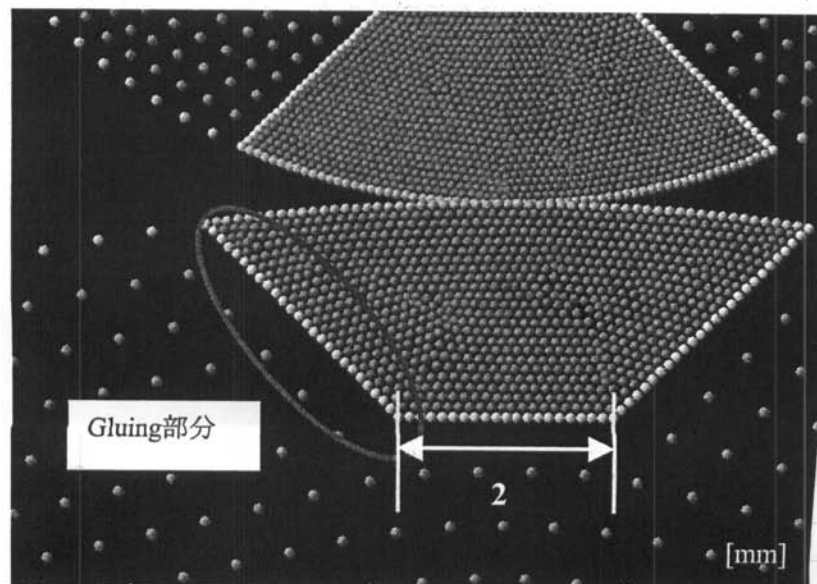


【 図 3 】

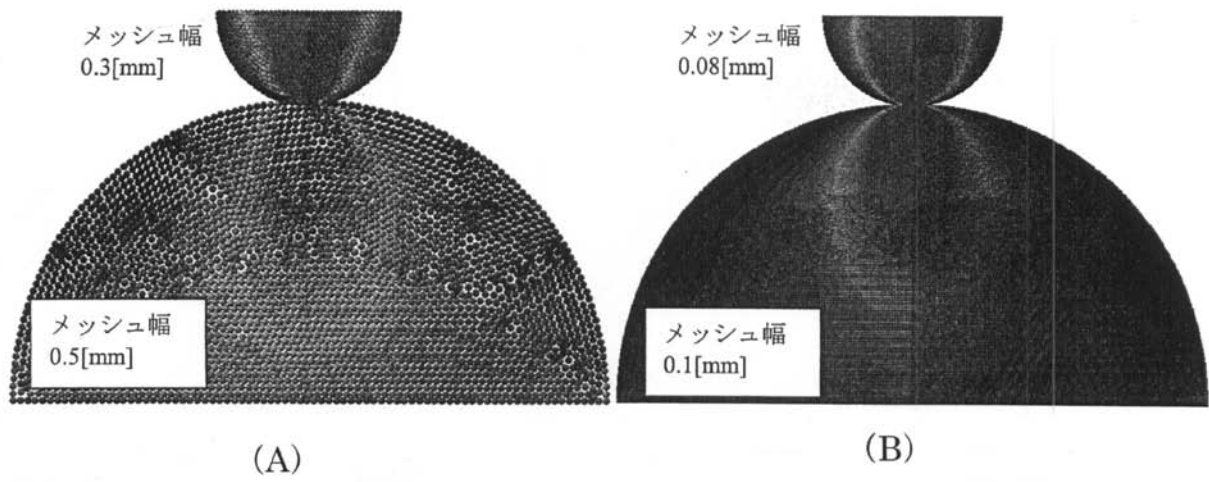
(A)



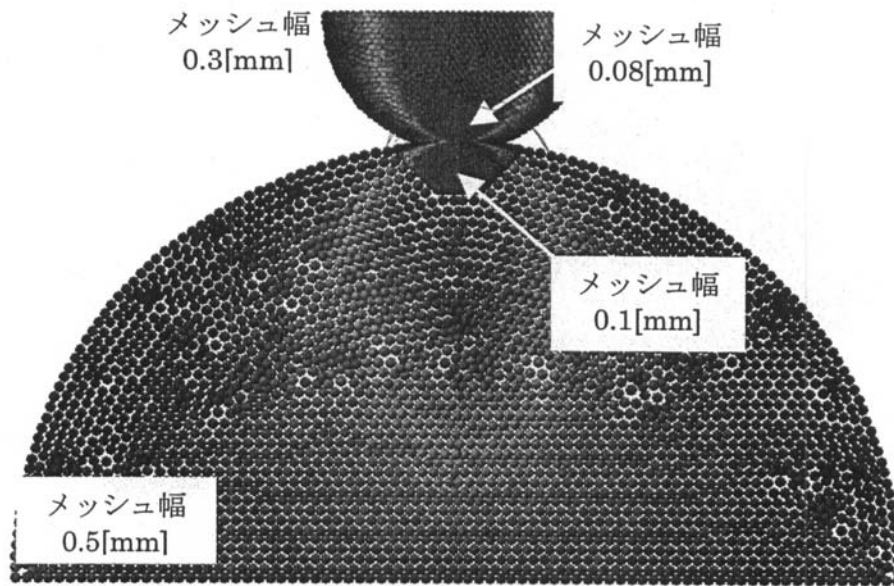
(B)



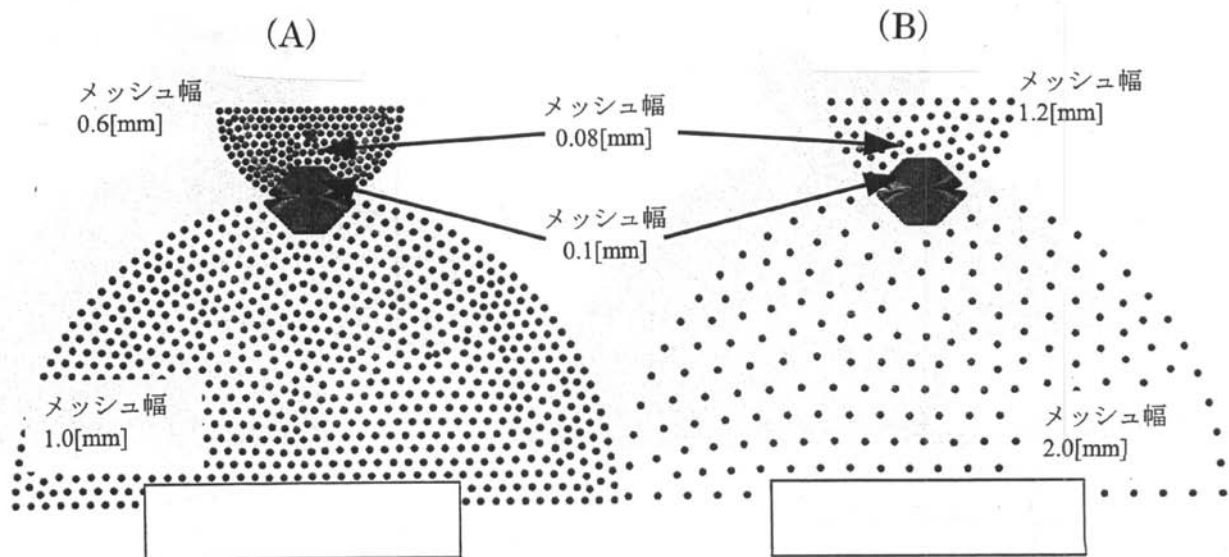
【 図 4 】



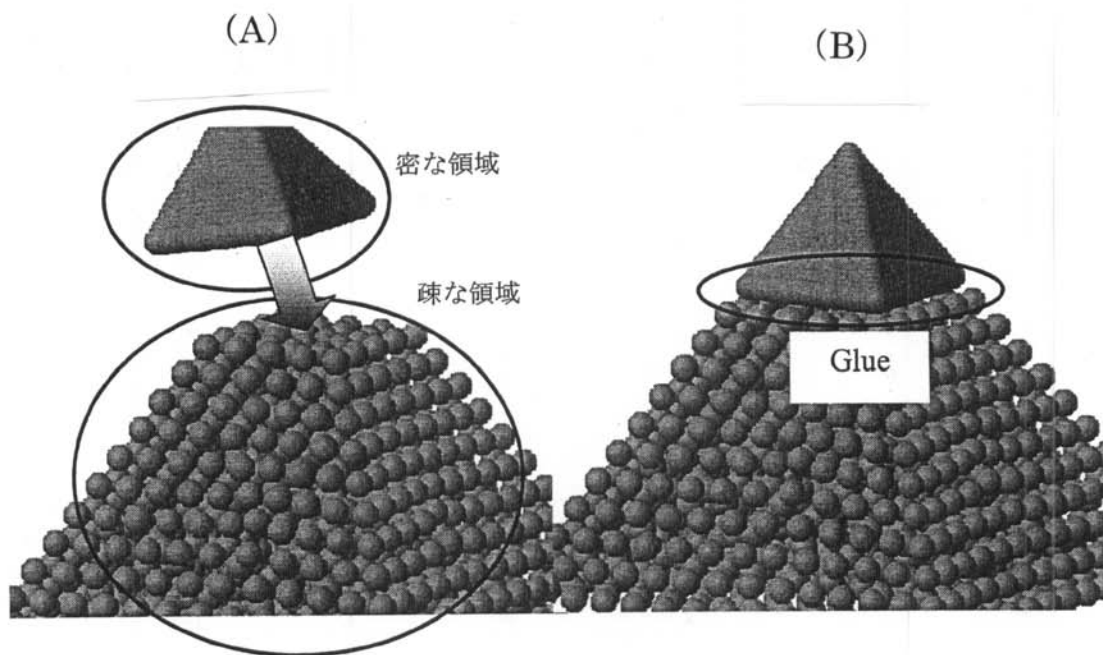
【 図 5 】



【図 6】

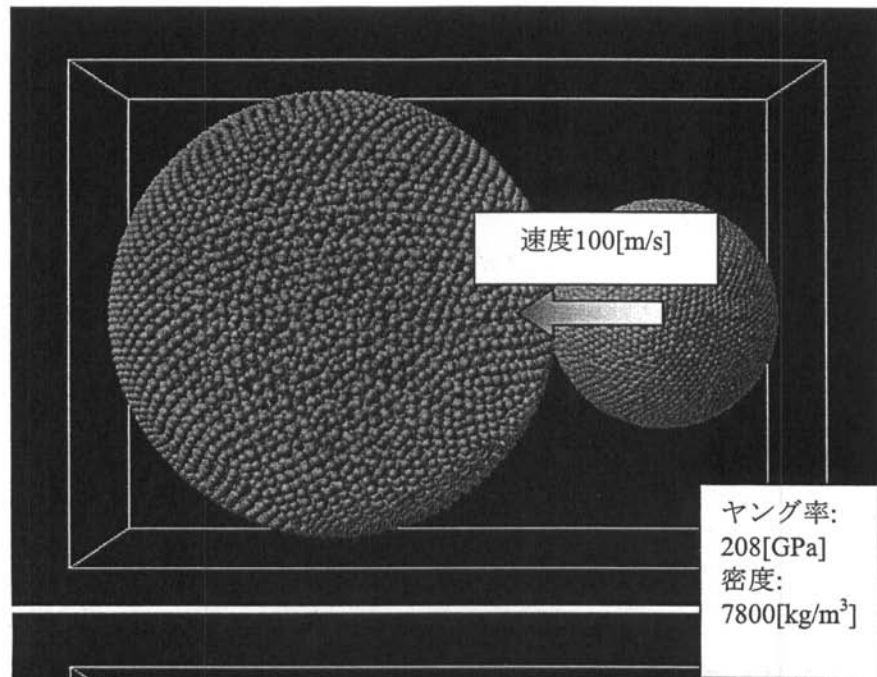


【図 8】

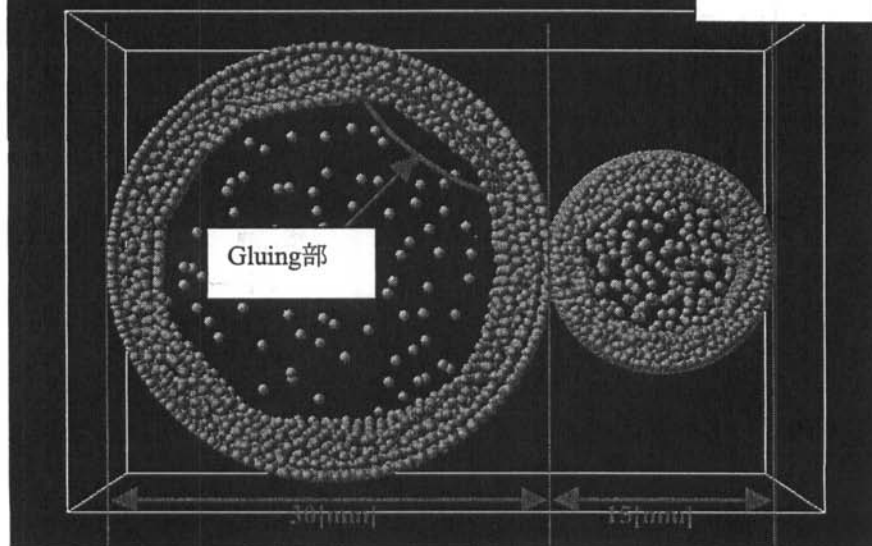


【図 12】

(A)



(B)



フロントページの続き

(72)発明者 広瀬 良太

神奈川県横須賀市夏島町 1 9 番地 住友重機械工業株式会社横須賀製造所内