

```
# 3D Peridynamic simulation with projectile
```

「#」はコメント行「3次元のPeridynamicによる投射体のシミュレーション」

```
units          si
```

単位系の設定、他にも lj, real, metal, cgs, electron などがある

si の場合には、各物理量は下記の単位とする

- mass = kilograms · distance = meters · time = seconds
質量 : kg 距離 : m 時間 : 秒
- energy = Joules · velocity = meters/second · force = Newtons
エネルギー : J 速度 : m/s 力 : N
- torque = Newton-meters · temperature = degrees K · pressure = Pascals
トルク : Nm 温度 : 華氏 ° K 圧力 : P
- dynamic viscosity = Pascal*second · charge = Coulombs (クーロン)
動粘性 : Ps 電荷 : C
- dipole = Coulombs*meters · electric field = volts/meter
双極子強さ : Cm 電界強さ : V/m
- density = kilograms/meter^dim
密度 : kg/m² (2次元) kg/m³ (3次元)

```
dimension      3
```

対象問題の次元 2か3

```
boundary       s s s
```

解析空間の境界条件をXYZ面で設定、p, f, s, mの4つで、組み合わせることもできる

p: 周期的設定

f: 非周期的で、境界面が固定され外に出る粒子は消失する

s: 非周期的で、境界面は空間の次元において粒子を包み込むように全てを保持する

m: 非周期的で、境界面は粒子を保持するが、他で設定された値を保持する最小値とする

```
atom_style     peri
```

解析対象の粒子の種類 Peridynamics の場合は peri

他にも、angle, atomic, bond, charge, dipole, electron, ellipsoid, full, line, meso molecular, peri, sphere, tri, wavepacket などとこれらの組み合わせがある

LIGGGHTS においては、DEM 解析用に granular が追加されている

```
atom_modify    map array
```

解析対象の粒子の管理 キーワードとして、map, first, sort の3つがある

map は粒子の ID を探す方法を定義し、これに対する設定は array, hash がある。

array では全ての粒子に対応する配列を準備する これは普通は最も高速な処理となる

しかしながら膨大な粒子数の場合にはメモリの実装量を超えてしまうことがある

そこで hash を利用すればメモリを節約して処理できるが若干遅くなることもある

```
neighbor 0.0010 bin
```

近接する粒子の相互関係情報の集約方法 影響範囲の距離と形式 bin, nsq, multi を選択する
0.0010 は m 単位なので 1mm のこと bin は近接粒子を集約する方法で普通は最も高速

```
lattice sc 0.0005
```

解析対象の空間の格子を定義する 格子の種類は sc 間隔の距離は 0.0005m
格子種類は、none, sc, bcc, fcc, hcp, diamond, sq, sq2, hex, custom がある
この sc (simple cube) は 3次元空間の標準形式で立方体を単位とする
下部の左隅に核 (基準点) が 1 つある

```
# Create desired target
```

「解析対象の領域の生成」

```
region target cylinder y 0.0 0.0 0.037 -0.0025 0.0 units box
```

解析領域を設定する 空間名称 空間形状 設定数値 追加情報
空間名称は自由に設定し target 空間形状は cylinder で円柱として 6 個の設定数値がある
円柱の軸を y 方向とし軸の位置を x, z (0.0 0.0 : 原点) の 2 つの作業で定める
円柱の半径は 0.037m 円柱の下面は y 軸上 -0.0025m で上面は 0.0 となる
解析領域の形状を定義する単位は box 解析空間の単位で定める
他の空間形状は delete, block, cone, plane, prism, sphere, union, intersect がある

```
# Make 1 atom type
```

「種別番号 1 の粒子を作る」

```
create_box 1 target
```

解析空間 box を作る 粒子種別番号 1 は空間名称 target に存在する

```
# Create the atoms in the simulation region
```

「解析領域における粒子を生成する」

```
create_atoms 1 region target
```

粒子種別番号 1 を空間名称 target 内にのみ生成する
生成の方法は他に single, random がある

```
pair_style peri/pmb
```

生成する粒子の種類を特定する Peridynamics の場合は peri/pmb となる
pmb: Prototype Microelastic Brittle による Peridynamics 粒子を用いる

```
# <type1> <type2> <c> <horizon> <s00> <alpha>
```

「粒子の種類を規定するパラメータ」

```
pair_coeff * * 1.6863e22 0.0015001 0.0005 0.25
```

peri/pmb 粒子間の様々な影響係数を設定する
<type1><type2> は LAMMPS で利用する粒子の種類を特定するがここでは設定しない
<c> は応力場を定義するスカラー関数 f の定数 <horizon> は粒子からの影響範囲境界面の距離
<s00> と <alpha> は限界伸び量 s0 を定義するための材料に依存した値で 0.0005 0.25 とする
※ Peridynamics の理論として PMB-model などの定式化が予備知識として必要

```
# Set mass density
```

「粒子密度 (質量密度) の設定」

```
set group all density 2200
```

粒子に属性などを設定する 対象は group IDは all 属性は density 値は 2200
対象の選択には他に atom, type, mol, regionがある 単位は kg/m³

```
# volume = lattice constant^3
```

「粒子体積（格子間隔距離の3乗）」

```
set group all volume 1.25e-10
```

粒子の属性などを設定する 対象は group IDは all 属性は volume 値は 1.25e-10

```
# Zero out velocities of particles
```

「粒子の速度の初期化」

```
velocity all set 0.0 0.0 0.0 sum no units box
```

粒子の速度を設定する 対象は all 機能は set 速度は vx, vy, vz として 0.0 0.0 0.0
条件設定は sumは速度の指定方法で noなら設定値で定め yes増分値で加える
解析領域の形状を定義する単位は box 解析空間の単位で定める

```
# Use velocity-Verlet time integrator
```

「分子動力学のベレの手法による速度と時間の積分の利用」

```
fix F1 all nve
```

粒子への条件設定 条件名称は F1 設定対象は all 設定条件は nve
分子動力学手法として NVEは粒子数 N 体積 V エネルギー E を一定とする積分

```
# Construct spherical indenter to shatter target
```

「対象を破壊する球形投射体の構成」

```
variable y0 equal 0.00510
```

変数定義 y0は 0.00510（任意定義変数 y0：初期位置）

```
variable vy equal -100
```

変数定義 vyは-100（任意定義変数 vy：衝突速度）

```
variable y equal "v_y0 + step*dt*v_vy"
```

変数定義 yは y0+step*dt*vy y0は初期位置 stepは増分ステップ dtは時間刻み
step*dtは増分時間 任意定義変数を参照するときは v_を変数名の前につける

```
fix F2 all indent 1e17 sphere 0.0000 v_y 0.0000 0.0050 units box
```

粒子への条件設定 条件名称は F2 設定対象は all 設定条件は indent
indentは接触し陥入する 接触面の作用力は 1e17 投射体の形状は sphere 球
投射体の初期位置は x, y, z に対し 0.0, 変数 y, 0.0（y軸上） 球の半径は 0.005
解析領域の形状を定義する単位は box 解析空間の単位で定める

```
# Compute damage for each particle
```

「各粒子に対して損傷を計算する」

```
compute C1 all damage/atom
```

粒子の状態を計算する 条件名称は C1 計算対象は all 計算方式は damage/atom
damage/atomは Peridynamicsによる粒子の破壊条件の計算

```
timestep 1.0e-7
```

計算の時間刻みの設定 1.0e-7

```
thermo 200
```

熱力学的計算での出力間隔の設定 200 ログファイルへの出力の頻度を定める

dump D1 all custom 100 dump.peri id type x y z c_C1

計算結果の出力 出力名称は D1 出力対象は all 出力形式は custom 出力間隔は 100

出力ファイルは dump.peri 出力内容は id, type, x, y, z, c_C1

計算結果は全計算ステップの中で 100 ステップ毎に dump.peri に出力される

出力内容は粒子の ID・種類・位置 X Y Z 座標・損傷状態 C1 の計算結果

粒子の状態を計算する条件 C1 の結果を参照するときは c_ を条件名称の前につける

run 2000

計算の全ステップ数 2000