

Thu. Jun 1, 2023

Room E

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-06] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓
(1)

座長:鳥生 大祐(京都大学)

9:00 AM - 10:15 AM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-06-01] (キーノート講演)領域分割型並列化の統一的ライ
ブラリ開発と多手法への展開*森田 直樹¹、集路 幸正¹、田中 克治¹、柴沼 一樹²、三目
直登¹ (1. 筑波大学、2. 東京大学)

9:00 AM - 9:30 AM

[E-06-02] 界面捕捉法に基づく並列データ駆動型マルチス
ケール解析システム*今口 稜介¹、細川 恭太¹、森田 直樹¹、三目 直登¹ (1.
筑波大学)

9:30 AM - 9:45 AM

[E-06-03] 二相流計算における修正 Allen-Cahn方程式の混合
法定式化*澤田 有弘¹、松本 純一¹ (1. 産業技術総合研究所)

9:45 AM - 10:00 AM

[E-06-04] 繊維配列のランダム性を考慮した CFRP の ツース
ケール損傷進展解析*志村 行宣¹、明司 和真¹、松田 哲也¹ (1. 筑波大学)

10:00 AM - 10:15 AM

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-07] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓
(2)

座長:金子 栄樹(東京大学)

10:30 AM - 11:45 AM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-07-01] (キーノート講演)マーカー粒子とオイラー型有限
体積法を用いた圧縮性構造解析スキームの提案*嶋田 宗将¹、西口 浩司²、岡澤 重信³、坪倉 誠^{4,1} (1.
理化学研究所、2. 名古屋大学、3. 山梨大学、4. 神戸大
学)

10:30 AM - 11:00 AM

[E-07-02] 複数材料分布情報を連続化・低次元化したデータ
駆動型マルチスケール解析*三目 直登¹、細川 恭太¹、森田 直樹¹ (1. 筑波大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[E-07-03] B-spline関数を導入した重合メッシュ法の開発と
検証*馬込 望¹、森田 直樹¹、三目 直登¹ (1. 筑波大学)

11:15 AM - 11:30 AM

[E-07-04] 3スケール均質化法を用いた織物複合材料の樹脂
浸透解析 (ネスティングの影響)*新井 滉平¹、松田 哲也¹、澤田 有弘²、松本 純一² (1.
筑波大学、2. 産業技術総合研究所)

11:30 AM - 11:45 AM

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-08] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓
(3)

座長:西口 浩司(名古屋大学)

1:15 PM - 2:15 PM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-08-01] 非物理現象へ拡張した物理モデリングにおける
データ同化ライブラリ構築手法の提案*市村 純一^{1,2}、中谷 多哉子¹ (1. 放送大学、2. ニュート
ンワークス株式会社)

1:15 PM - 1:30 PM

[E-08-02] 音速抑制法と Fractional Step 法による熱対流の
数値計算*鳥生 大祐¹ (1. 京都大学)

1:30 PM - 1:45 PM

[E-08-03] 並列有限要素解析における大域的固有モードを利用
した Deflated CG 法の性能評価*村井 拓海¹、三目 直登¹、森田 直樹¹ (1. 筑波大学)

1:45 PM - 2:00 PM

[E-08-04] 拡張型有限要素法を援用した重合メッシュ解析の
並列計算と負荷分散*伊藤 博哉¹、三目 直登¹、柴沼 一樹²、森田 直樹¹ (1.
筑波大学、2. 東京大学)

2:00 PM - 2:15 PM

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-09] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓
(4)

座長:三目 直登(筑波大学)

2:30 PM - 3:30 PM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-09-01] SPH法に基づく微分演算を内包した深層学習によ
る粒子法代替モデルの説明性向上*的野 玄¹、才田 大聖¹、西尾 真由子¹ (1. 筑波大学)

2:30 PM - 2:45 PM

[E-09-02] PINN構造振動解析の ARによるリアルタイム可視
化*奥田 東子¹、西尾 真由子¹、才田 大聖¹、的野 玄¹ (1.
筑波大学)

2:45 PM - 3:00 PM

[E-09-03] 離散液滴モデルとアンサンブルカルマンフィルタ
による噴霧断面計測の拡張*三坂 孝志¹、高橋 俊²、奈良 祥太郎²、杉山 直輝²、野原

徹雄²、蔵本 結樹²、川本 裕樹²、小原 昭²、長田 莉菜²、菊池 飛鳥²、落合 成行²、大角 和生³、石川 直也³
 (1. 産業技術総合研究所、2. 東海大学、3. 株式会社いすゞ中央研究所)

3:00 PM - 3:15 PM

[E-09-04] 遷移行列有限要素法・離散 Helmholtz分解によるマルチボディダイナミクス数値計算法のコンセプト

*今村 純也¹ (1. imi計算工学研究室)

3:15 PM - 3:30 PM

Fri. Jun 2, 2023

Room E

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-10] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓
 (5)

座長:森田 直樹(筑波大学)

9:00 AM - 10:15 AM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-10-01] Flow-driven piezoelectric energy harvesterの解析

*金子 栄樹¹、吉村 忍¹ (1. 東京大学)

9:00 AM - 9:15 AM

[E-10-02] Numerical Simulation of the Interactions between an Off-road Pneumatic Tire and Gravel Terrain Using a Multi-sphere DE-FE Method

*Guo Xiaobing¹、Zheng Zumei²、Mitsume Naoto¹、Zhang Mengyan³、Chen Shunhua⁴ (1. University of Tsukuba、2. Qilu University of Technology、3. South China University of Technology、4. Sun Yat-sen University)

9:15 AM - 9:30 AM

[E-10-03] 高次有限要素を用いた Helmholtz 方程式の大規模並列解析

*塚本 顕成¹、馬込 望¹、三目 直登¹ (1. 筑波大学)

9:30 AM - 9:45 AM

[E-10-04] Improved Ghost Cell Boundary モデルを用いた ISPH 法による流体剛体連成解析

*常見 隆幸¹、大村 浩之¹、三目 直登¹ (1. 筑波大学)

9:45 AM - 10:00 AM

[E-10-05] セラミックス材料に対するマイクロカンチレバー試験の数値シミュレーション

*犬塚 康介¹、村本 真悠子¹、松井 和己¹、山田 貴博¹、多々見 純一¹ (1. 横浜国立大学)

10:00 AM - 10:15 AM

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-06] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓 (1)

座長:鳥生 大祐(京都大学)

Thu. Jun 1, 2023 9:00 AM - 10:15 AM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-06-01] (キーノート講演)領域分割型並列化の統一的ライブラリ開発と多手法への展開

*森田 直樹¹、集路 幸正¹、田中 克治¹、柴沼 一樹²、三目 直登¹ (1. 筑波大学、2. 東京大学)

9:00 AM - 9:30 AM

[E-06-02] 界面捕捉法に基づく並列データ駆動型マルチスケール解析システム

*今口 稜介¹、細川 恭太¹、森田 直樹¹、三目 直登¹ (1. 筑波大学)

9:30 AM - 9:45 AM

[E-06-03] 二相流計算における修正 Allen-Cahn方程式の混合法定式化

*澤田 有弘¹、松本 純一¹ (1. 産業技術総合研究所)

9:45 AM - 10:00 AM

[E-06-04] 繊維配列のランダム性を考慮した CFRP の ツースケール損傷進展解析

*志村 行宣¹、明司 和真¹、松田 哲也¹ (1. 筑波大学)

10:00 AM - 10:15 AM

領域分割型並列化の統一的ライブラリ開発と 多手法への展開

Development of Unified Library for Domain Decomposition Parallelization and its Application to Various Methods

森田 直樹¹⁾ 集路 幸正²⁾ 田中 克治³⁾ 柴沼 一樹⁴⁾ 三日 直登⁵⁾
Naoki Morita, Kosei Shuji, Katsuji Tanka, Kazuki Shibanuma, and Naoto Mitsume

¹⁾博 (環境) 筑波大学システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: nmorita@kz.tsukuba.ac.jp)

²⁾筑波大学システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

³⁾筑波大学システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

⁴⁾博 (工) 東京大学大学院工学系研究科 准教授 (〒 113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1)

⁵⁾博 (工) 筑波大学システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

The objective of this study is to propose and develop a unified library for domain decomposition-based parallel simulation that is independent of specific numerical methods. The proposed library comprises a graph manipulation component that handles data transformation and partitioning of graph structures and a parallel linear solver library built on these graph structures. We concentrate on the graph structure representing the interactions between computational points in numerical simulations, with the goal of eliminating reliance on multiple numerical methods by utilizing this graph structure. The library is implemented for the standard finite element method, s-version finite element method, and particle method, and its effectiveness is evaluated through the these parallel computing performance.

Key Words : Parallel computation, Domain decomposition, Graph structure, Linear solver

1. 緒言

(1) 並列シミュレーションと領域分割法

偏微分方程式を支配方程式とした工学分野の数値シミュレーションでは、解析対象をメッシュや計算点で精緻に解像したとき、計算規模が大きくなり、計算時間やメモリ使用量の増大を招く。共有メモリ型の単一計算機を利用した逐次計算を想定した場合、実用的でない計算時間を要したり、メモリ容量の上限に達し計算が不可能となる状況が生じる。本研究では、計算規模の大きな数値シミュレーションを大規模問題と呼ぶ。この他、非定常の非線形解析など、対象の非線形現象や時間発展を扱う数値シミュレーションでは、非線形解法や時間ステップ方向のシミュレーションにおいて反復処理が必要となり、こちらも実用的でない計算時間を要する場合がある。本研究では、多くの反復処理が必要な数値シミュレーションを長継続問題と呼ぶ。

この問題を解決、実用性を向上する方法として、数値シミュレーションの並列計算の利用が挙げられる。この手法は、スーパーコンピュータ・コンピュータクラスタなどの分散メモリ型並列計算機での利用を前提とすれば、複数の計算コアを利用した計算時間の短縮による実用性の向上に加え、メモリ容量の制約が緩和できることが利点である。また分散メモリ型並列計算機における並列計算では、計算時間やデータ通信の効率性の観点から事前のデータ分割が必要であり、加えて分割データごとの計算量の均一化、およびデータが分割されたことで生じる隣接領域間へのデータアクセス

の最小化が重要な課題となる。技術的な側面では、主に MPI (message passing interface) が利用され、ソフトウェアの開発がなされる。

数値シミュレーションの並列計算手法のひとつとして、解析対象のメッシュや計算点を空間的にデータ分割する、領域分割法に基づく手法が挙げられる。特に偏微分方程式を支配方程式とした工学分野の主要な数値シミュレーションは、近傍の計算点の間で相互作用(情報のやり取り)が生じると考えられ、データ分割において空間的なまとまりを考慮することは妥当であると考察される。近傍の計算点の間で相互作用は、支配方程式が離散化され行列の形式が得られたとき、解くべき係数行列の非零構造に対応する。

(2) 並列シミュレーションのためのソフトウェア

数値シミュレーションにおける並列計算のニーズを受け、並列計算機能を有する様々なソフトウェアやライブラリが開発されている。ソフトウェアにおけるライブラリとは、再利用可能なコードの集合であり、他のソフトウェアやプログラムで使用するために提供されるもので、プログラマ自身で作成する必要があった処理を、特定の関数の呼び出しなどで簡便に実行可能とするものである。

はじめに、数値計算手法に特化したソフトウェアでは、有限要素法の並列計算ライブラリとして Permmanらによって開発された MOOSE [1] や Alnasらによって開発された FEniCS [2] などが挙げられる。つぎに、並

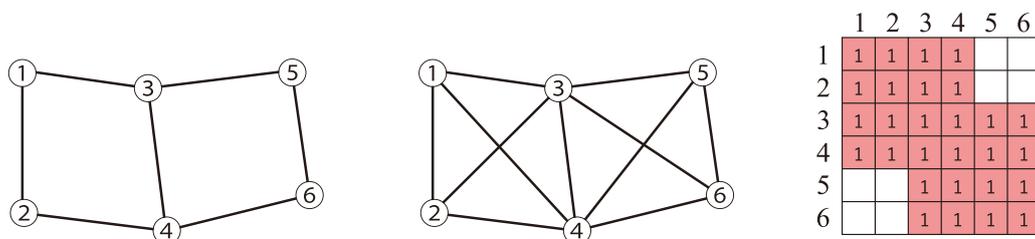


図-1 グラフ構造に基づいた計算点の相互作用関係の模式図（左：四角形要素からなるメッシュ、中：計算点の相互作用を表したグラフ構造、右：四角形要素の有限要素法から得られる行列の非零構造を示した隣接行列）。提案手法では、行列の非零構造を示した隣接行列（右）と等価なグラフ構造（中）を作成し、並列計算を進める。

列線形ソルバライブラリでは、Falgout らによって開発された hypre [3] や、Anzt らにより開発された Ginkgo [4] が挙げられる。Balay らにより開発された PETSc [5] は、並列計算機能を含む多数の計算機能を提供する数値シミュレーションのためのライブラリ（ツールキット）として知られている。

ここで研究開発で利用されるソフトウェアの並列計算のニーズを考えると、ソフトウェアの初期開発段階から並列計算技術の適用を前提とした開発がされているものは多くない。そこで様々な数値計算手法に関する並列計算に対応していない既存ソフトウェアの並列化を実施するという観点から、既存のソフトウェアを考察する。はじめに、有限要素法などの特定の数値計算手法に特化した並列計算ライブラリは、単一のライブラリでは様々な数値計算手法に適用できないため、汎用性が乏しい。つぎに、並列線形ソルバライブラリおよび PETSc は、調査の範囲内では、並列計算のための事前のデータ分割機能を提供しておらず、開発者が何らかのデータ分割機能を開発する必要があり、当該ライブラリの導入障壁は比較的高い。

グラフ構造については詳細を後述するが、グラフ分割ライブラリ Metis [6]、Scotch [7] も同様に、グラフ構造の分割は実行するものの、ファイル入出力やグラフに付随するラベル・データの分割機能を有しておらず、並列シミュレータに利用するには、こちらも開発者が何らかのデータ分割機能を開発する必要がある。

(3) 本研究の目的

本研究では、数値計算手法に依存しない領域分割型並列シミュレーションのための統一的ライブラリの提案およびその開発を目的とする。提案するライブラリは、グラフ構造のデータ変換・データ分割を行うグラフ操作ライブラリと、グラフ構造に基づく並列線形ソルバライブラリからなり、既存のシミュレータのデータ分割部分および線形ソルバ・データ通信を伴う代数演算部分を担う。ここで、統一的なライブラリとしての利用を可能とするため、数値シミュレーションにおける計算点の相互作用を表現するグラフ構造に注目し、グラフ構造を基盤とすることで、数値計算手法の依存性から脱却を目指す。既存シミュレータの開発者は、基本的に、計算データのグラフ構造への変換および分割データの入出力、解くべき係数行列の作成、連立一次方程式の求解に関する部分を提案するライブラリに置

き換えればよく、基礎シミュレータの並列化を簡便に実現できる可能性を有している。

開発成果は、標準的な有限要素法、有限要素法の枠組みで複数のメッシュを重合させた解析を可能とする重合メッシュ法、メッシュフリー法のひとつである粒子法など様々な数値計算手法への適用例を示し、並列計算性能の測定などを通して、その有効性を評価する。

2. グラフ構造に基づく領域分割

数値計算手法に依存しない領域分割型並列シミュレーションの開発を目的として、グラフ構造に基づく領域分割について述べる。グラフは、ノード集合 $V = \{1, 2, \dots, n\}$ とノードの接続関係を表すエッジ集合 $E = \{e_{i,j} \mid i, j \in V\}$ を用いて、グラフ $G = (V, E)$ によって表現される。ここで、 n はノード数、ノード i とノード j からなるグラフのエッジを $e_{i,j}$ で表現する。

はじめに、計算対象の相互作用の情報をグラフ構造として表現する一例を示す。例えば、有限要素法であれば、ある要素を構成する節点 i と節点 j は相互作用をもつ、つまり離散化して解くべき連立一次方程式の係数行列を得る場合に (i, j) 番目の行列要素が非零となるため、この関係をグラフのエッジ $e_{i,j}$ として表現する。同様に、粒子法であれば、ある注目粒子 i とその粒子の影響半径内に位置する粒子 j は相互作用をもつため、この関係をグラフのエッジ $e_{i,j}$ として表現する。

この情報の変換は、離散化された解析対象の計算点の相互作用関係、すなわち解くべき連立一次方程式の係数行列の非零構造から得た隣接行列に対し、自身との相互作用を加味した隣接行列と等価なグラフ構造を取得することと説明できる。そこで隣接行列と等価なグラフ構造が得られたあとは、このグラフ構造に対して領域分割を行う。

並列計算を前提とした領域分割では、分割データごとの計算量の均一化およびデータが分割されたことで生じる隣接領域間へのデータアクセスの最小化は、並列計算性能に直結する重要な指標となる。分割データの計算量の均一化および隣接領域間へのデータアクセスの最小化は、グラフ構造においては、制約付き最小カット問題として知られている。

グラフの最小カット問題は、グラフ $G = (V, E)$ に対し、ノード集合 V を k 個の部分集合に分割することで与えられる。このとき、各部分集合 V_i ($i = 1, \dots, k$) のノード数は均一、かつ異なる部分集合に跨るエッジ数を最小

にする。ここで $V_i \cap V_j = \emptyset (i \neq j), \cup V_i = V (i = 1, \dots, k)$ とする。

さて、ノード集合は他の領域と重複なく分けられているが、グラフ分割がなされる前の単一グラフ構造と比較すると、エッジカットが生じた影響で、エッジ情報が欠けているノードが存在する。エッジはある計算点同士の相互作用を表現すると理解できるので、相互作用の関係が欠けた状態、つまり数値シミュレーションに必要な情報が不完全な状態でデータ分割がなされている。

そこで各ノードに注目したとき、グラフ分割がなされる前の単一グラフ構造と同等の情報（同等の相互作用関係の情報）を有するよう、不足したグラフ情報を補うオーバーラッピング領域を定める。オーバーラッピング領域を加味したノードの部分集合 $W_i (i = 1, \dots, k)$ は、式 (1) のように与えられる。

$$W_i = \text{adj}(V_i) + V_i \quad (1)$$

ここで、 $\text{adj}(i) = \{j | e_{i,j} \in E\}$ は部分集合 V_i に含まれるノードのいずれかに隣接するノードの集合で、オーバーラッピング領域に属するノードの集合は $W_i^\Gamma = W_i \setminus V_i$ 、オーバーラッピング領域以外の部分を内部領域と呼び、内部領域に属するノードの集合は $W_i^I = V_i \cap W_i^\Gamma$ で得られる。さらに、 E のうちノード集合 W_i で構成されるエッジ集合を F_i として、本研究で開発する統一的ライブラリで用いる分割グラフは $G_i = (W_i, F_i)$ で与えられる。本研究で開発するグラフ操作ライブラリは、ここに述べた手順に基づくグラフ構造のデータ分割機能を有する。また、このようなグラフ分割は、特に有限要素法を対象とした領域分割法において、オーバーラッピング層を 1 要素としたオーバーラッピング型領域分割で得られる分割データと等価なグラフ分割となる。

分割グラフが得られた後は、それぞれの分割グラフに紐づくように、計算点の座標や物性値などをデータ分割し、分割データを利用した数値シミュレーションの計算を進めることで、分割領域ごとに解くべき係数行列・連立一次方程式を構築する。

3. グラフ構造に基づく線形ソルバ

数値計算手法に依存しない領域分割型並列シミュレーションの開発を目的として、グラフ構造に基づく線形ソルバについて述べる。

はじめに、連立一次方程式の解法は、直接法と反復法に大別される。直接法はガウスの消去法に代表される、逐次的な計算に基づく手法であり、一定の演算回数で解を得ることが特徴である。反復法はある解の候補を反復的に修正することで漸近的に解を得る手法であり、基本的な代数演算で構成されているため、並列計算に適していることが特徴である。本研究では、並列計算の利用を前提とする観点から、並列計算効率の高い反復法を利用する。

反復法の並列計算は、そのアルゴリズムから、行列ベクトル積、ベクトル内積、ベクトル和、前処理の並列計算を実現すればよい。ここでは、行列ベクトル積、ベクトル内積、ベクトル和の代数演算に注目し、2章で

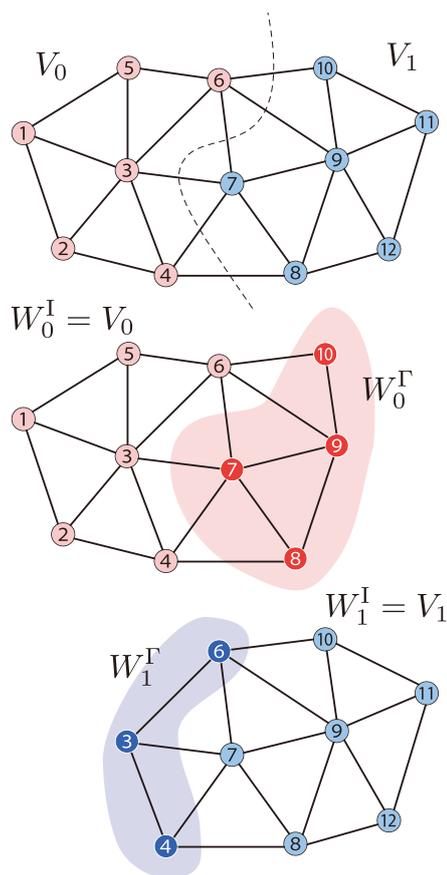


図-2 グラフ構造に基づいた領域分割の例（上：単一グラフ、中：領域 0 の分割グラフ、下：領域 1 の分割グラフ）。

述べた分割グラフから、その並列計算手順について述べる。

はじめに、ある分割領域 (i) におけるベクトル $x^{(i)}$ について、分割グラフの節点番号 j と対応するベクトル要素を $x_j^{(i)}$ と定義する。このとき、ベクトル和 $z^{(i)} = x^{(i)} + y^{(i)}$ はグラフのノード上に定義された値の和演算に対応する。ベクトル要素のうち、内部領域に属するノード集合 W_i^I に対応する値と、オーバーラッピング領域に属するノード集合 W_i^Γ に対応する値が整合していれば、ベクトル和は MPI 通信なく並列計算可能である。

次に、ベクトル内積 $\alpha^{(i)} = x^{(i)} y^{(i)}$ は、分割領域 (i) ごとに局所的な内積演算を計算し、その後 MPI のグローバル通信関数 (allreduce 関数) を用いて分割領域ごとの計算結果の和を計算することで得られる。このとき、分割領域ごとの内積計算で、オーバーラッピング領域のノードに対応するベクトル要素を局所的な内積演算に加味すると、隣接領域で定義された分割グラフの内部領域に属するベクトル要素と計算の重複が生じるので、逐次計算の結果と差異が生じる。そこで分割グラフの内部領域に属するベクトル要素のみを対象として局所的な内積演算を計算し、グローバル通信関数を用いて最終的な計算結果を得る。

最後に、行列ベクトル積 $y^{(i)} = A^{(i)} x^{(i)}$ については、 i 番目のベクトル要素と j 番目のベクトル要素に対応する (i, j) 番目の行列要素を定義する。この対応関係から、

分割領域で計算される係数行列 $A^{(i)}$ は、式 (2) のように表さえる。

$$A^{(i)} = \begin{bmatrix} A_{\Pi}^{(i)} & A_{\Gamma}^{(i)} \\ A_{\Gamma}^{(i)} & A_{\Gamma}^{(i)} \end{bmatrix} \quad (2)$$

ここで、 $A_{\Pi}^{(i)}$ は分割領域の内部領域に属するノードに対応する行列、 $A_{\Gamma}^{(i)}$ は分割領域の内部領域に属するノードとオーバーラップ領域に属するノードに対応する行列、 $A_{\Gamma}^{(i)}$ は分割領域のオーバーラップ領域に属するノードに対応する行列である。

オーバーラップ領域に属するノードは分割領域の境界に位置するため、グラフ分割前の単一グラフと比較すると、エッジの情報が一部欠けている。このノード情報を元に分割領域で得られる行列 $A_{\Gamma}^{(i)}$ は、欠けたエッジの情報に関する行列成分の足し込みが行われないため、逐次計算で得られる行列成分と異なる値をもつ。そのため、行列ベクトル積で得られた解ベクトル $y^{(i)}$ のうち、オーバーラップ領域に対応するベクトル成分は、逐次計算の結果と整合しない値となる。そこで、オーバーラップ領域に対応するベクトル成分は、エッジ情報を完全に有する、自身の分割グラフと隣接した分割グラフの内部領域に対応するベクトル成分を MPI 関数で取得することで整合した計算結果を得る。

このように、分割グラフの情報から適切にデータ通信することで、代数演算の並列計算が達成される。

4. 数値例

数値例として、標準的な有限要素法、有限要素法の枠組みで複数のメッシュを重合させた解析を可能とする重合メッシュ法、メッシュフリー法のひとつである粒子法を対象に、開発ライブラリの適用例を示す。東京大学情報基盤センター Oakbridge-CX スーパーコンピュータを利用した分散メモリ型並列環境において、数値シミュレータの加速率など並列計算性能を測定し、その有効性を評価する。

5. 結言

本研究では、数値計算手法に依存しない領域分割型並列シミュレーションのための統一的ライブラリを提案した。提案したライブラリは、グラフ構造のデータ変換・データ分割を行うグラフ操作ライブラリと、グラフ構造に基づく並列線形ソルバライブラリからなり、既存のシミュレータのデータ分割部分および線形ソルバ・データ通信を伴う代数演算部分を担う。開発成果は、標準的な有限要素法、有限要素法の枠組みで複数のメッシュを重合させた解析を可能とする重合メッシュ法、メッシュフリー法のひとつである粒子法など様々な数値計算手法への適用例を示し、並列計算性能の測定などを通して、その有効性を評価した。詳細な内容については、口頭発表で紹介する。

謝辞: 本研究は、JSPS 科研費 22H00242、JSPS 科研費 22H03601 の助成および学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (課題番号:jh220047) の支援を受けたものである。ここに謝意を表す。

参考文献

- [1] Permann, C. J., Gaston, D. R., Andrs, D., Carlsen, R. W., Kong, F., Lindsay, A. D., Martineau, R. C., et al.: MOOSE: Enabling massively parallel multiphysics simulation, *SoftwareX*, No.11, Vol.100430 (2020).
- [2] Alnas, M., Blechta, J., Hake, J., Johansson, A., Kehlet, B., Logg, A., Wells, G. N.: et al.: The FEniCS project version 1.5, *Archive of Numerical Software*, No.3(100), (2015).
- [3] Falgout, R. D., Jones, J. E., and Yang, U. M.: The design and implementation of hypre, a library of parallel high performance preconditioners, *Numerical solution of partial differential equations on parallel computers*, Springer, pp. 267-294, (2006).
- [4] Anzt, H., Cojean, T., Flegar, G., Gobel, F., Grutzmacher, T., Nayak, P., Quintana-Orti, E. S., et al.: Ginkgo: A modern linear operator algebra framework for high performance computing, *ACM Transactions on Mathematical Software*, No.48(1), pp.1-33 (2022).
- [5] Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M., Brown, J., Brune, P., Buschelman, K., Zhang, H., et al.: PETSc users manual, <https://petsc.org/>, (2019). 2023/4/87 inspected.
- [6] Karypis, G., and Kumar, V.: A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs. *SIAM Journal on scientific Computing*, No.20(1), pp.359-392 (1998).
- [7] Pellegrini, F.: Scotch and PT-scotch graph partitioning software: an overview. *Combinatorial Scientific Computing*, pp. 373-406 (2012).

界面捕捉法に基づく 並列データ駆動型マルチスケール解析システム

Parallel Data-Driven Multiscale Analysis System
based on Interface-Capturing Technique

今口稜介¹⁾ 細川恭太¹⁾ 森田直樹²⁾ 三目直登²⁾
Ryosuke Imaguchi, Kyota Hosokawa, Naoki Morita, Naoto Mitsume

¹⁾筑波大学大学院システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

²⁾筑波大学システム情報系 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

This study develops large-scale parallel structural analysis system to create a surrogate model faster in the data-driven approach of FE²-type multiscale analysis, which is a typical numerical analysis method for composite materials. In the data-driven approach of FE²-type multiscale analysis, the computation cost for multiscale analysis is reduced by replacing micro scale analysis with surrogate models. However, the computation cost for creating surrogate models is high, and composite materials with different microstructures difficult to be treat. The proposed method creates surrogate models that can be used for microstructures with various material configurations by introducing the level set method and capturing the material boundary surface as a spatial distribution. The proposed method implements a parallel analysis framework for the distributed-memory parallel environment, and the parallelization efficiency of the system was quantitatively measured. The results confirmed that the proposed system reduce the computation cost for creating surrogate models.

Key Words : *Surrogate modelling, Level set function, distributed memory parallel computing, Material arrangement, interface capturing*

1. 序論

炭素繊維強化プラスチック (CFRP: carbon fiber reinforced plastics) は巨視的 (マクロ) にみれば周期的な微視的 (ミクロ) 構造を有しており、微視的 (ミクロ) にみれば非均質性が顕著な材料である。このような材料の定量的な強度評価を行う代表的な手法として、一体型マルチスケール解析手法 (FE²)[1][2] が知られている。

この手法は、均質化法を用いることで、炭素繊維の詳細構造が解像されるミクロスケールの現象を、部材全体の構造を表すマクロスケールへと平均化し計算する。一方、マクロ構造モデルが有する全計算点分のミクロ構造解析を実施しなければならないため、計算コストが非常に高く実用的でない。

先行研究 [3] では、データ駆動型関数モデルによりミクロ構造解析のプロセスを代替する手法 (DDFE²: data-driven FE²) が提案され、マルチスケール解析の計算時間を大幅に削減した。一方で、この手法では特定の材料分布を持つマイクロモデルの解析結果に基づいて関数モデルを構築するため、繊維の配向や含有率など内部構造の異なる材料を解析する場合には関数モデルの再構築が必要である。

我々の研究チームでは、level set 法を用いた境界面捕捉型有限要素法に基づいて CFRP ミクロ構造の解析を行い、ミクロ構造の物質配置情報をパラメータの 1 つとする関数モデルを作成することにより、任意の内部構造を持つ部材も自動的に解析可能なデータ駆動型マルチスケール解析手法 (ICDDFE²: interface-capturing

data-driven FE²)[6] を開発した。既存研究 [6] では、一方強化 CFRP 断面を対象とし、2 次元線形弾性体とみなして解析しており、実問題への適用に向けては 3 次元への展開が必要である。

本研究では、3 次元への展開に向けた検討として、2 物質からなる 3 次元線形弾性体を対象に、境界面捕捉型有限要素法に基づいた構造解析手法の開発を行う。

また、関数モデル作成の計算コスト削減のため、領域分割法によりメッシュを分割した上で、分散メモリ型並列環境で効率的に動作する解析システムを開発する。

2. 境界面捕捉型有限要素法

本手法では、物質境界面を捉える界面捕捉法のうち、level set 法を採用した。本章では、level set 法を用いた境界面捕捉型有限要素法の構造解析への適用について述べる。

(1) Level set 法

Level set 法は界面捕捉法の 1 つであり、level set 関数と呼ばれる界面からの距離の関数を用いて境界面の位置を定義する。したがって、level set 関数 ϕ は物体の任意の位置における座標 x を変数にもつ。Level set 関数 $\phi(x)$ は、図-1 に示すように、境界面上で 0、境界面から物質 A の方向に対して正、物質 B の方向に対して負の値で定義される。

Level set 法では、図-2 のように、level set 関数 $\phi(x)$ から次式に示す近似 Heaviside 関数 $H_D(\phi)$ を用いて界面

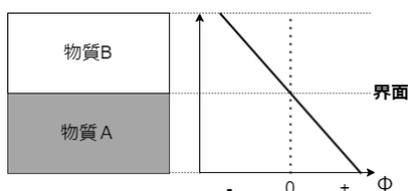


図-1 Level set 関数

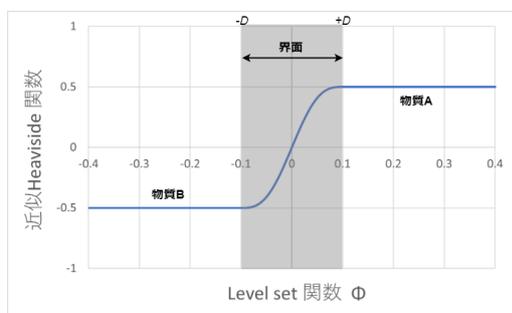


図-2 近似 Heaviside 関数

付近の平滑化を行う。式中、 D は平滑化を行う界面の幅であり、本手法では格子幅の 1 倍の値を用いた。

$$H_D(\phi) = 0.5 \max\{-1.0, \min[1.0, \frac{\phi}{D} + \frac{1}{\pi} \sin(\frac{\pi\phi}{D})]\} \quad (1)$$

なお、level set 関数 ϕ は、領域内の任意の位置における値であるため、最終的に近似 Heaviside 関数 H_D も領域内の任意の位置における値として計算される。

この近似 Heaviside 関数の値 H_D より、物体の任意の位置における物性値 $P(x)$ は次式で計算される。

$$P(x) = 0.5(P_A + P_B) + H_D(P_A - P_B) \quad (2)$$

ここで、 P_A を物質 A の物性値、 P_B を物質 B の物性値とした。

(2) 構造解析への適用

以下では、level set 法を構造解析へ適用する方法について述べる。ここでは簡単のため、対象は 3 次元線形弾性体とし、定常な問題を扱う。

CFRP の周期的なマイクロ構造として、図-3 のような各辺の長さが 1 である立方体の樹脂領域の中に、底面の半径が a である円柱状の炭素繊維が介在しているモデルを考える。以降は、この半径のことを炭素繊維の半径、円柱底面の中心を結んだ線を円柱の軸と呼ぶ。

有限要素法は領域を有限個の要素に分割して数値解析を行う手法であり、各計算点における物理量を用いて計算を行う。図-3 のような複数の物質からなる物体を対象とする場合、物性値の分布は一様ではないため、level set 法を用いて連続かつ非一様な分布として計算を行う。

このモデル内の任意の位置 x における level set 関数の値 $\phi(x)$ は次式で計算される。

$$\phi(x) = (|x - x_c| - a) \cdot (-1) \quad (3)$$

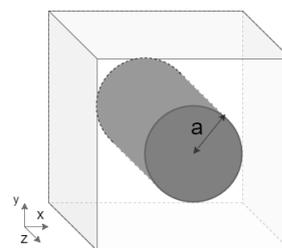


図-3 解析モデル

上式中、 x_c を位置 x に最も近い円柱軸上の点の座標、 a を炭素繊維の半径とした。また、境界内部 (繊維領域) を正とするため、 -1 を乗じている。ここで、炭素繊維の半径 a を設計変数とすることで、炭素繊維の含有率が任意であるモデリングを可能にする。

式 (3) で計算される level set 関数場 $\phi(x)$ から、式 (1) により近似 Heaviside 関数場に変換し、式 (2) で物性値場を計算することで、要素内のヤング率 E とポアソン比 ν の分布を計算する。

以上の操作の流れとモデリング結果を図-4 に示す。図-4 では、例としてヤング率の分布の可視化結果を示しており、炭素繊維のヤング率を 20.6 [GPa]、樹脂のヤング率を 3.43 [GPa] とした。

この物性値をもとに、以降は通常の構造解析と同様の流れで解析を行う。

3. 提案手法の検証

本研究で開発した境界面捕捉型有限要素法に基づいた境界面捕捉型 3 次元構造解析ソルバーの検証のため、円形介在物を持つモデルの無限遠等方引張荷重による変位場の理論解 [10] と数値解を比較する。

本章で行った解析は、すべて対角スケーリングを使って CG 法により線形方程式の解を求めた。

a) 解析条件

本検証では、解析モデルとして図-3 のようなモデルを考えた。炭素繊維と樹脂の材料定数は表-1 の通りである。また、炭素繊維の半径 $a = 0.3$ とした。

表-1 解析モデルの材料定数

炭素繊維	ヤング率 E_f =	20.6	[GPa]
	ポアソン比 ν_f =	0.33	
樹脂	ヤング率 E_r =	3.43	[GPa]
	ポアソン比 ν_r =	0.38	

理論解 [10] は、次式で表される。

$$u_r(r) = \begin{cases} [(1 - \frac{b^2}{a^2})\alpha + \frac{b^2}{a^2}]r, & 0 < r < a \\ (r - \frac{b^2}{r})\alpha + \frac{b^2}{r}, & a < r < b \end{cases} \quad (4)$$

$$\alpha = \frac{(\lambda_1 + \mu_1 + \mu_2)b^2}{(\lambda_2 + \mu_2)a^2 + (\lambda_1 + \mu_1)(b^2 - a^2) + \mu_2b^2} \quad (5)$$

ここで、 r は領域内任意の位置における中心からの距

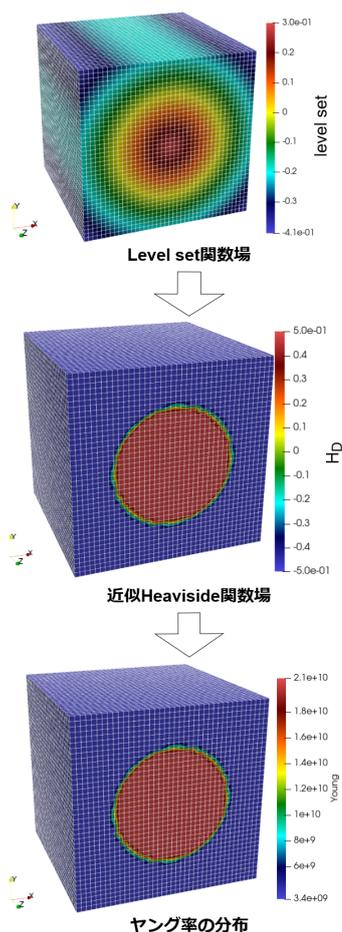


図-4 レベルセット法によるモデリング結果

離、 b は樹脂領域の半径、 λ_1, μ_1 は炭素繊維のラメ定数、 λ_2, μ_2 は樹脂のラメ定数である。

以上の理論解は、2次元の円形介在物を持つモデルを対象としており、本検証では z 方向の変位を 0 とすることで、3次元問題に適用した。したがって、数値解は図-3 のようなモデルのすべての面に z 方向の変位を 0 とする Dirichlet 条件を与え、繊維と平行な四面に式 (4) で計算される x, y 方向の変位を Dirichlet 条件として付与して計算した。

b) 解析結果

図-5,6 に式 (4) で計算される変位の理論解を可視化した結果と、解析で得られた変位の分布を示す。ここで、図-6 は、六面体 1 次要素を用いて各軸方向 40 分割し、総節点数 68921 個 ($N = 68921$) で行った結果である。

図-5 と図-6 を比較すると、数値解は理論解と定性的によく一致している。

また、定量的な評価のため、理論解と数値解の相対誤差を用いて検証を行った。相対誤差は次のように定義する。

$$\text{error} = \frac{\sqrt{\int_{\Omega} |u^{\text{theo}} - u^{\text{numerical}}|^2 d\Omega}}{\sqrt{\int_{\Omega} |u^{\text{theo}}|^2 d\Omega}} \quad (6)$$

ここで、 $u^{\text{numerical}}$ は解析によって得られた変位場である。

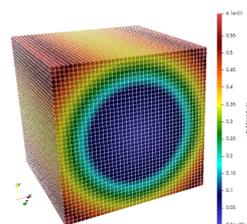


図-5 変位の理論解

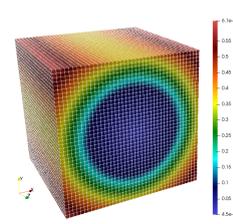
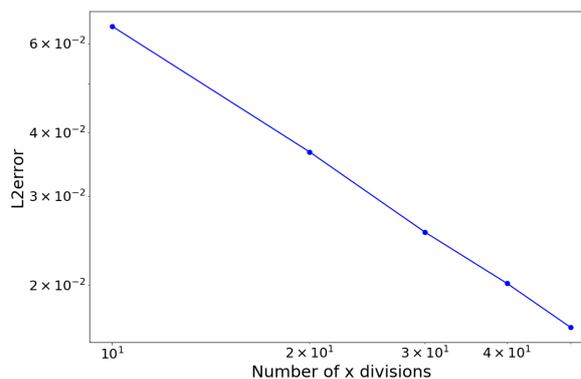


図-6 変位の数値解

図-7 無限遠等方引張問題における x 方向分割数と変位場の相対誤差の関係

以下図-7 に x 方向の分割数と式 (6) で計算される相対誤差の大きさの関係を示す。検証では、一方向あたりの分割数が 10, 20, 30, 40, 50 の 5 パターンで解析を行った。図-7 より、分割を細かくすることで 0.8 の傾きで理論解に収束する様子が確認できた。本検証で最大の分割数である 50 分割 (125000 要素) では誤差が約 1.7% であり、良好な精度であるといえる。

4. 並列化

(1) 並列化とは

並列化とは、計算機において特定の処理をいくつかの独立した処理に分割し、複数のプロセッサで同時に処理を行うことで、処理速度の高速化を図ることである。

並列化は、処理の仕方によって、capability computing と capacity computing の 2 つに大別される。capability computing は、逐次処理では非現実的な計算時間を要する大規模な単一問題を、並列化によって処理することをいい、capacity computing は、逐次処理可能な問題を大量のケースで行う場合に、ケースごとに分割して並列処理することをいう。

また、並列計算機はメモリ構成により、共有メモリ型と分散メモリ型に分類される。共有メモリ型の並列計算機は、図-8 に示すような複数のプロセッサが一つのメモリを共有するシステムであり、各プロセッサ間のデータ交換は、それぞれが共有メモリ上のデータにアクセスすることで行われる。分散メモリ型の並列計算機は、図-9 に示すような各プロセッサが独自のメモリをもつシステムであり、各プロセッサ間のデータ交換は、ネットワークを通じて行われる。共有メモリ型

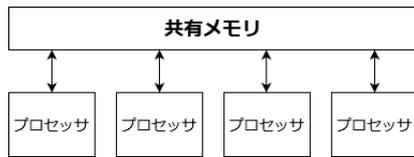


図-8 共有メモリ型

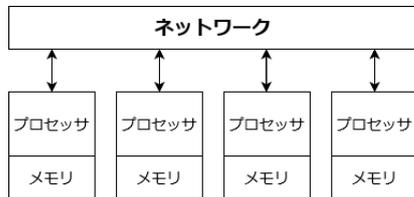


図-9 分散メモリ型

では、扱うデータ量に応じた容量の共有メモリが必要であるため、大規模並列計算には向かない。したがって、本研究では大規模並列計算のために、分散メモリ型並列環境で動作するシステムを開発した。

本論文で行った検証では、使用可能な並列計算環境が共有メモリ型のみであったため、共有メモリ型並列計算環境で capability computing を行った。

(2) 並列性能評価指標

並列化では、逐次計算時間が T であるプログラムを p 並列して、計算時間を T/p にするのが理想的である。しかしながら、実際には分散メモリ型並列計算環境におけるデータ通信時間や並列化が不可能な部分の存在により、上記のような高速化は難しい。

並列処理の性能がどれだけ理想に近いかを評価する指標の1つに、台数効果がある。 p 台のプロセッサを用いた並列処理の時間を T_p 、逐次計算時間を T_1 とすると、台数効果 S_p は次式で定義される。

$$S_p = \frac{T_1}{T_p} \quad (7)$$

式(7)で、 p 並列で $S_p = p$ のとき T_1/p が成り立ち、理想的な速度向上と呼ぶ。

並列性能を評価するその他の指標として、次式で定義される並列化効率がある。

$$E_p = \frac{S_p}{p} \times 100 \quad (8)$$

本論文では、以上の台数効果 S_p と並列化効率 E_p を用いて並列化性能を評価する。

(3) 並列化結果

a) 並列計算環境

並列計算は表-2 に示す環境で行った。

また、以下の検証で用いた各パラメータは、以下表-3 の通りである。

CPU	Intel Core i7-11700 @ 2.50GHz
Memory	32 GB

パラメータ	設定値
炭素繊維ヤング率	20.6[GPa]
炭素繊維ポアソン比	0.33
樹脂ヤング率	3.43[GPa]
樹脂ポアソン比	0.38
使用した要素	六面体 1 次要素
並列数	1,2,4,6,8
収束閾値	1.0×10^{-8}
総自由度	84600,198400,385000

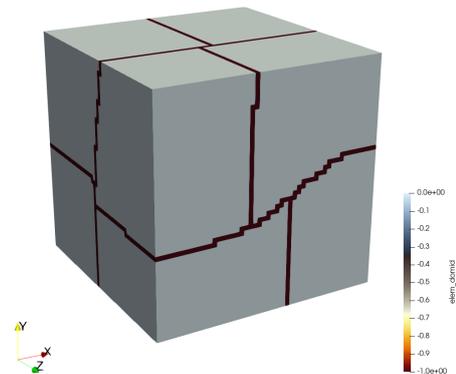


図-10 解析領域を 8 領域に領域分割した例

b) 解の不変性の検証

3章と同様の解析モデル及び理論解、境界条件設定で並列計算を行い、並列化による解への影響を確認する。

並列計算を行う際には、領域分割法によって解析領域を複数の小領域に分割を行う。図-10に、各辺の長さが1である立方体領域を領域分割法によって8領域に分割した様子を示す。図-10における黒い領域は overlapping 領域と呼ばれ、隣り合う領域の情報を含む。したがって、プロセッサ間での通信で得た情報をもとに領域の情報が完成される。

並列数を変化させたときの式(6)で計算される相対誤差の大きさの変動は、以下図-11の通りである。図-11より、並列数を変化させたとき、各自由度数における相対誤差の値は変化していないことが確認できる。したがって、並列化による誤差は生じていないといえる。

c) 並列性能評価

図-12, 13に、3パターンの自由度における、並列数と台数効果 S_p 、並列化効率 E_p の関係を示す。並列計算

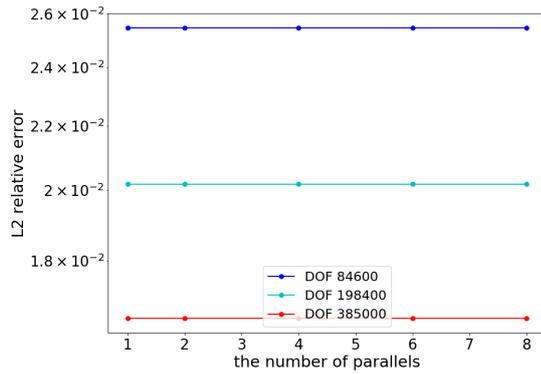
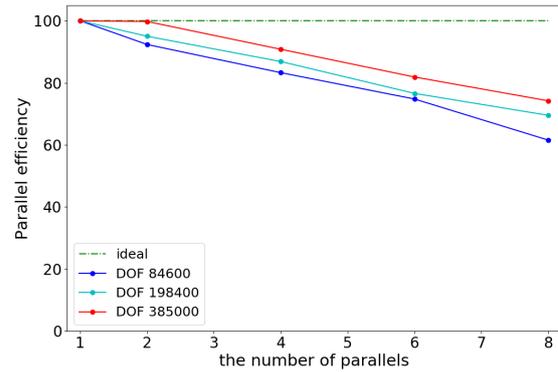
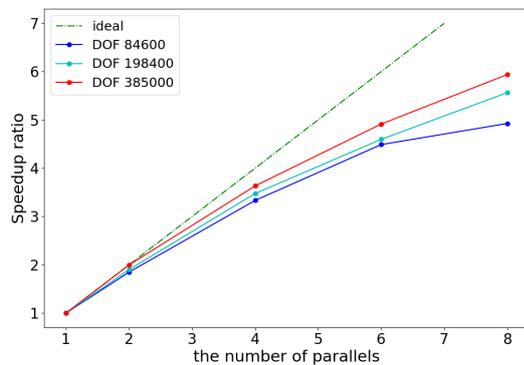


図-11 並列数と相対誤差の関係

図-13 並列数と並列化効率 E_p の関係図-12 並列数と台数効果 S_p の関係

は、3章と同様の解析モデル及び理論解、境界条件設定で行い、各パラメータは表-3 に示す値を用いた。

図-12 より、どのケースでも並列化により計算が高速化していることが確認できる。自由度 385000 の場合を並列数 8 で解析した場合は、逐次計算の約 5 倍の計算速度で解析できている。一方で、図-12, 13 より、自由度が小さく、並列数が大きくなるほど台数効果と並列化効率が低下していることが確認できる。これは、共有メモリ型並列環境で計算を行っているため、並列数の増加に伴って増えるデータの通信量に対して共有メモリの通信速度が追い付いていないことが原因だと考えられる。

5. 結論

本研究では、境界面捕捉型有限要素法に基づき、CFRP ミクロ構造のような 2 物資からなる 3 次元線形弾性体の自動的な解析を可能にする、並列構造解析プログラムの開発及び検証を行った。

まず、level set 法を用いた界面捕捉型 3 次元構造解析ソルバーを開発した。提案手法の妥当性検証のため、無限遠等方引張問題を解き、理論解との相対誤差の比較を行った。その結果、およそ 0.8 の傾きで理論解に収束していることが確認でき、提案手法の妥当性が検証さ

れた。

次に、分散メモリ型並列環境で動作可能なシステムを開発し、並列数による解の不変性を確認した。本論文では、分散メモリ型並列環境が使用できなかったため、共有メモリ型並列計算環境で解析を実行した。さらに、台数効果と並列化効率により並列計算の効果を測定し、本検証において最大の並列数 8 の場合で、総自由度 38500 のとき並列化効率は約 75%、台数効果は約 5 倍であり、計算の高速化が確認された。

謝辞: 本研究は、JST 創発的研究支援事業 JPMJFR215S および JSPS 科研費 22H03601 の支援を受けたものである。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- [1] F. Feyel. Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. Computational Materials Science. Vol. 16, No. 1-4, pp. 344-354, 1999
- [2] F. Feyel, J. L. Chaboche. FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Vol. 183, No. 3-4, pp. 309-330, 2000
- [3] 波多野僚, 松原成志朗, 森口周二, 寺田賢二郎. 超弾性複合材料に対するデータ駆動型ミクロ・マクロ連成マルチスケール解析. 日本計算工学会論文集, No. 20190015, 2019
- [4] C.W Hirt, B.D Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. Journal of Computational physics. Vol. 39(1), pp. 201-225, 1981
- [5] M. Sussman, P. Smereka, S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. Journal of Computational physics. Vol. 114(1), pp. 146-159, 1994
- [6] 細川恭太, 森田直樹, 三目直登. Level set 法を用いたデータ駆動型マルチスケール解析. 日本機械学会第 35 回計算力学講演会, 鹿児島・オンライン, 2022 年 11 月.
- [7] 邵長城. 基本からわかる有限要素法. 森北, 2008

- [8] 寺田賢二郎, 平山紀夫, 山本晃司. 数値材料試験 有限要素法によるマルチスケール解析. 丸善, 2020
- [9] 日本計算工学会. 第3版 有限要素法による流れのシミュレーション. 丸善, 2017
- [10] N. Sukumar, D. L. Chopp, N. Moës, and T. Belytschko. Modeling holes and inclusions by levelsets in the extended finite-element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190(46-47), pp. 6183-6200, 2001
- [11] 片桐孝洋. スパコンプログラミング入門 並列処理とMPIの学習. 東京大学出版会, 2013

二相流計算における修正Allen-Cahn方程式の混合法定式化

A variational mixed formulation of conservative Allen-Cahn equation
for two-phase incompressible flows

澤田 有弘¹⁾, 松本 純一²⁾

Tomohiro Sawada and Junichi Matsumoto

- 1) 博(科) 産業技術総合研究所 (〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 中央第2, E-mail: tomohiro-sawada@aist.go.jp)
2) 博(工) 産業技術総合研究所 (〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 中央第2, E-mail: matsumoto-junichi@aist.go.jp)

This paper presents a variational mixed formulation of the conservative Allen-Cahn equation for stable and accurate computation of two-phase incompressible viscous flows. We split the Allen-Cahn equation into the convection and the diffusion-reaction, namely mobility equation by introducing a scalar Lagrange-multiplier having diffusional dimension. Practical computational results will be shown on the day of the conference.

Key Words : Two-phase incompressible flow, Conservative Allen-Cahn equation, Mixed formulation, Finite element method

1. 緒言

連続体力学に基づく二相流計算においては界面の取り扱いの異なりによって、VOF法、Levelset法、Phase-fields法などの手法がある。このうちPhase-field法による解法は、二相流の界面を保存形のCahn-Hilliard方程式を解くことで追跡する方法、保存形もしくは非保存形のAllen-Cahn方程式を解くことで追跡する手法がある。最近では保存形のAllen-Cahn方程式が用いられることが多くなっている。修正Allen-Cahn方程式とも呼ばれる。Phase-field法による二相流計算では、質量保存則から導出される界面の対流方程式に、界面幅を一定に保つ効果をもたらす、人工的な拡散・相分離項が追加される。このとき、界面を保つ効果の強さを表す係数としてMobilityと呼ばれる係数も導入される。またどのようにCahn-Hilliard方程式やAllen-Cahn方程式を数値的に解くかも研究されている[1], [2]。

本研究では、文献[1], [2]などを先行研究に、保存形のAllen-Cahn方程式をペナルティ法や未定乗数法の見地から再考察し、未定乗数法に基づく混合法定式化、更にペナルティ法と未定乗数法を同時に適用するAugmented Lagrange未定乗数法及びPerturbed Lagrange未定乗数法に相当する定式化を示す。空間離散化手法としては有限要素法を適用することを前提とする。性能などの比較、検証結果や更なる改良型の定式化に関する検討は講演時に示すものとする。

2. 保存型のAllen-Cahn方程式

時刻 t における界面関数を ϕ 、Navier-Stokes方程式から与えられる流速を \mathbf{v} 、Phase-field法におけるMobility (拡散係数)を M 、相当界面幅を w 、相分離力を $M\mathbf{f}$ とすると、保存形のAllen-Cahn方程式は次の式で与えられる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi - M \nabla \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) = 0 \quad (1)$$

$$\mathbf{f} = \frac{1}{w} \phi(1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (2)$$

ここで式(1)左辺第3項が界面幅を一定に保つ効果をもたらす拡散・相分離項となる。

有限要素法での離散化のため、計算領域を Ω 、その境界を Γ として式(1)の弱形式をとると次の式を得る。ここで、 δ は変分演算子、 \mathbf{n} は Γ に対する外向きの法線ベクトルである。また、本稿では M は定数として積分の外に出した。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \right) d\Omega + M \int_{\Omega} \nabla \delta \phi \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) d\Omega \\ = M \int_{\Gamma} \delta \phi \mathbf{n} \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) d\Gamma \end{aligned} \quad (3)$$

3. 保存型のAllen-Cahn方程式の混合法定式化

式(1)と式(2)の連立方程式の解法としては、式(2)を式(1)に代入して直接的に解く方法や、式(2)の \mathbf{f} を一種の媒介変数として連立する方法などがある。文献[2]などではこの媒介変数に基づく方法も混合法の一種と位置付けている。

一方で式(1)において、拡散・相分離項 (Mobilityに関する項) が界面幅を一定に保つことのみを目的とした完全に人工的な項とみなせる場合には、拡散・相分離項は慣性項に対するPenalty項、 M はPenalty係数と解釈することも可能である。それゆえ、 M が過大であると安定な解を得ることが難しくなる傾向をもたらす。

この種の課題に対し古くから存在しているのがLagrange未定乗数法に基づく混合法定式化である。式(1)

を次のように二つの式に分離して考えると、Lagrange未定乗数法に基づく混合法定式化の起点となる式となる。Penalty法の見地からは、 M が無大のときの式となる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (4)$$

$$\tilde{M} \nabla \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) = 0 \quad (5)$$

この形式を採用する場合、式(5)から分かるように M は無用となるが、式(1)との対応関係を明瞭にするため \tilde{M} として残した。本研究ではこの連立方程式に対し、Navier-Stokes方程式と非圧縮性拘束条件式の連立解法(圧力を未定乗数とした混合法定式化)と同様に、新たな未定乗数 λ を導入して弱定式化する。すると以下の式を得る。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \right) d\Omega + \tilde{M} \int_{\Omega} (\nabla \delta \phi - \delta \mathbf{f}) \cdot \nabla \lambda d\Omega \\ = \tilde{M} \int_{\Gamma} (\nabla \delta \phi - \delta \mathbf{f}) \mathbf{n} \cdot \lambda d\Gamma \end{aligned} \quad (6)$$

$$\tilde{M} \int_{\Omega} \nabla \delta \lambda \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) d\Omega = \tilde{M} \int_{\Gamma} \delta \lambda \mathbf{n} \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) d\Gamma \quad (7)$$

この式が、本研究における修正Allen-Cahn方程式の混合法定式化となる。次元解析により、未定乗数 λ はMobility(拡散係数)の次元を有する未知数であることが分かる。

更に、Penalty法と未定乗数法を同時に適用することで安定化を図る手法がAugmented Lagrange未定乗数法として知られている。式(7)の対角項に小さな摂動項を付与することで局所的な不定値性を取り除く手法がPerturbed Lagrange未定乗数法として知られている。このAugmented Lagrange未定乗数法及びPerturbed Lagrange未定乗数法に対応する定式化は、式(3)のPenalty項と式(6)、(7)の未定乗数項を同時に導入し、更に式(7)にPerturbation項も付与した以下の式で与えられる。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \right) d\Omega + \tilde{M} \int_{\Omega} (\nabla \delta \phi - \delta \mathbf{f}) \cdot \nabla \lambda d\Omega \\ + M \int_{\Omega} \nabla \delta \phi \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) d\Omega \\ = \tilde{M} \int_{\Gamma} (\nabla \delta \phi - \delta \mathbf{f}) \mathbf{n} \cdot \lambda d\Gamma \\ + M \int_{\Gamma} \delta \phi \mathbf{n} \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) d\Gamma \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \tilde{M} \int_{\Omega} \nabla \delta \lambda \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) d\Omega - \tilde{M} \frac{\tau}{w^2} \int_{\Omega} \delta \lambda \lambda d\Omega \\ = \tilde{M} \int_{\Gamma} \delta \lambda \mathbf{n} \cdot (\nabla \phi - \mathbf{f}) d\Gamma \end{aligned} \quad (9)$$

ここで \tilde{M} は形式的に残した係数であることから、 $\tilde{M} = 1$ とすることが基本となるが、 $\tilde{M} = \|\mathbf{v}\|w$ 、ここで $\|\mathbf{v}\|$ は代表流速等のノルムとすることで、 λ をMobility(拡散係数)の次元で無次元化する係数として用いることもできる。式(9)の τ は、次元解析によりMobilityの逆数の次元を有するPerturbation係数となる。

4. 結言

本研究では、保存形のAllen-Cahn方程式をペナルティ法や未定乗数法の見地から再考察し、未定乗数法に基づく混合法定式化、更にペナルティ法と未定乗数法を同時に適用するAugmented Lagrange未定乗数法及びPerturbed Lagrange未定乗数法に相当する定式化を示した。

このような定式化に基づく解法が実際にどのような性能、傾向、特性を示すかに関しては学術的に興味深いものと考えられる。そのため、実際の性能に関する比較・検証計算や、安定性の更なる向上のための定式化などを講演時に紹介する。

参考文献

- [1] H. Gomez and T.J.R. Hughes, Provably unconditionally stable, second-order time-accurate, mixed variational methods for phase-field models, Journal of Computational Physics, 230 (2011) 5310-5327.
- [2] W. Ma and Y. Shen, A mixed formulation of proper generalized decomposition for solving the Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations, Finite Elements in Analysis and Design, 194 (2021) 103560.

10:00 AM - 10:15 AM (Thu. Jun 1, 2023 9:00 AM - 10:15 AM Room E)

[E-06-04] 繊維配列のランダム性を考慮した CFRP の ツースケール損傷進展 解析

*志村 行宣¹、明司 和真¹、松田 哲也¹ (1. 筑波大学)

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-07] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓 (2)

座長:金子 栄樹(東京大学)

Thu. Jun 1, 2023 10:30 AM - 11:45 AM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-07-01] (キーノート講演)マーカー粒子とオイラー型有限体積法を用いた圧縮性構造解析スキームの提案

*嶋田 宗将¹、西口 浩司²、岡澤 重信³、坪倉 誠^{4,1} (1. 理化学研究所、2. 名古屋大学、3. 山梨大学、4. 神戸大学)

10:30 AM - 11:00 AM

[E-07-02] 複数材料分布情報を連続化・低次元化したデータ駆動型マルチスケール解析

*三目 直登¹、細川 恭太¹、森田 直樹¹ (1. 筑波大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[E-07-03] B-spline関数を導入した重合メッシュ法の開発と検証

*馬込 望¹、森田 直樹¹、三目 直登¹ (1. 筑波大学)

11:15 AM - 11:30 AM

[E-07-04] 3スケール均質化法を用いた織物複合材料の樹脂浸透解析 (ネスティングの影響)

*新井 滉平¹、松田 哲也¹、澤田 有弘²、松本 純一² (1. 筑波大学、2. 産業技術総合研究所)

11:30 AM - 11:45 AM

マーカー粒子とオイラー型有限体積法を用いた 圧縮性構造解析スキームの提案

Proposal of Compressible Structure Analysis Scheme Based on An Eulerian Finite Volume Method with Marker Particles

嶋田 宗将¹⁾ 西口 浩司²⁾ 岡澤 重信³⁾ 坪倉 誠⁴⁾

Tokimasa Shimada, Koji Nishiguchi, Shigenobu Okazawa and Makoto Tsubokura

¹⁾博 (工) 理化学研究所 計算科学研究センター 特別研究員

(〒 650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26, E-mail : tokimasa.shimada@riken.jp)

²⁾博 (工) 名古屋大学大学院 工学研究科 准教授

(〒 464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町, E-mail : kojinishiguchi@civil.nagoya-u.ac.jp)

³⁾博 (工) 山梨大学 大学院総合研究部 教授

(〒 400-8511 山梨県甲府市武田 4-3-11, E-mail : sokazawa@yamanashi.ac.jp)

⁴⁾博 (工) 神戸大学大学院 システム情報学研究科 教授/理化学研究所 計算科学研究センター チームリーダー

(〒 657-8501 兵庫県神戸市灘区六甲台町 1-1, E-mail : tsubo@tiger.kobe-u.ac.jp)

An Eulerian structure analysis method is suitable for computing large deformation problems and performing large-scale simulations. In this research, a compressible structure analysis method based on an Eulerian finite volume method with marker particles is proposed. In the proposed method, the governing equations of motion are computed with an Eulerian mesh and internal variables of solid are computed with marker particles.

Key Words : Eulerian Formulation, Compressible Structure Analysis, Finite Volume Method, Particle Method

1. 緒言

流体-構造連成問題を含む構造変形の数値解析においてメッシュを用いる手法の一種として、オイラー型解法 [1,2,3] が存在する。オイラー型解法とは、空間固定の変形しないオイラーメッシュを解析に利用する手法である。オイラー型解法については次に述べる 3 つの利点が挙げられる。まず、計算メッシュが解析の際に変形しないため、メッシュ再生成が不要であると同時にメッシュ破綻が根本的に生じず、大変形や破断を伴う解析に適している。そして、計算メッシュが物体境界と一致する必要がないため、メッシュ生成が高速かつ容易である。最後に、空間に固定され変形しないメッシュを用いるため、超並列計算環境で高い並列化効率を得やすい。そのため、スーパーコンピュータを利用した大規模構造解析や、様々な形状の構造物に対する多ケース解析への応用が期待されている。

しかし、従来のオイラー型解法においては、固体形状を表現するカラー関数や、変形勾配テンソルなどの固体内部変数の移流方程式を解くため、数値拡散が避けられないという課題を抱えていた。そこで、著者らはこれらの数値拡散を回避するための手法として、固体領域にマーカー粒子を配置したオイラー型解析手法を提案し、その有効性を確認した [4]。

しかし、圧縮性を考慮した構造物を対象とした著者らの既往論文 [5] においては、構造の微小変形を扱っているため、計算ステップ内の密度の時間変化が小さい

ことを仮定し、密度の時間変化を影響を無視した離散化を行っている。つまり、計算ステップ内における密度の時間変化を考慮した離散化を行えていないという根本的な課題を有する。そこで、本論文においては、圧縮性を考慮した構造物に対する、既往論文における離散化の際の仮定を利用しない、保存型による運動方程式を用いた有限体積法に基づく離散化手法とマーカー粒子を用いた数値解析スキームを提案する。

2. 基礎方程式

本研究では、圧縮性を考慮した固体を解析対象とし、その運動の支配方程式として以下に示す質量保存式、運動方程式を用いる [6]。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} \quad (2)$$

ここで、 ρ は現時刻における質量密度、 \mathbf{v} は速度ベクトル、 $\boldsymbol{\sigma}$ はコーシー応力テンソル、 \mathbf{b} は体積力ベクトルをそれぞれ意味する。なお、 ρ については次の式によっても求めることができる。

$$\rho J = \rho_0 \quad (3)$$

この式において、 J は体積変化率、 ρ_0 は初期時刻における質量密度を意味する。

3. 数値解析手法

本研究で提案する手法は、著者らの既往論文 [5] と同様に、オイラーメッシュ上において固体運動の支配方程式を解き、固体領域を表現するマーカー粒子を用いて固体変形量や構成則の計算を行う。以降において、本研究で提案する手法の説明を行う。

(1) オイラーメッシュ上における計算

本手法においては空間離散化にコロケート変数配置による有限体積法を用いた上で、空間固定のオイラーメッシュ上で質量保存式 (1) と運動方程式 (2) を計算する。その際、質量保存式 (1) と運動方程式 (2) について、次のように表記する。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{F}_z}{\partial z} = \frac{\partial \mathbf{D}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{D}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{D}_z}{\partial z} + \mathbf{S} \quad (4)$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ \rho v_y \\ \rho v_z \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\mathbf{F}_i = \begin{pmatrix} \rho v_i \\ \rho v_i v_x \\ \rho v_i v_y \\ \rho v_i v_z \end{pmatrix}, \quad (i = x, y, z) \quad (6)$$

$$\mathbf{D}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \sigma_{ix} \\ \sigma_{iy} \\ \sigma_{iz} \end{pmatrix}, \quad (i = x, y, z) \quad (7)$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho b_x \\ \rho b_y \\ \rho b_z \end{pmatrix} \quad (8)$$

本手法における式 (4) の空間離散化スキームとして、移流項に対しては Rusanov スキーム [7] と piecewise constant 補間 [8] を用い、右辺第 1,2,3 項には 2 次精度の中心差分を用いる。また、式 (4) の時間積分スキームとして、移流項と右辺第 1,2,3 項に対して 2 次精度のアダムス・バッシュフォース法を用い、右辺第 4 項には 1 次精度のオイラー陽解法を用いる。以上の離散化手法に基づいて式 (4) を解くことで、次ステップの密度と速度が得られる。しかし、式 (4) の 1 行目の式、つまり、質量保存式をオイラーメッシュ上で解いた場合、密度の数値拡散が発生する。そのため、次ステップの密度については、後述する手法によって求め、ここでは、次ステップの速度を求めるためのみ密度の移流方程式を計算する。

(2) マーカー粒子上における計算

マーカー粒子においては、著者らの既往手法と同様に、ラグランジュマーカー粒子の移動、固体変形量、固体構成則に基づく応力、式 (3) による固体質量密度の計算を行う。そして、マーカー粒子上で求めた固体構成則に基づく応力、固体質量密度については、逆距離加

重法 (Inverse distance weighted method) による重みづけ関数 [9] を用いた補間を行うことでオイラーメッシュ上での値を付与する。

4. 結論

本研究においては、圧縮性を考慮した固体に対する、保存型による運動方程式を用いた有限体積法に基づく離散化手法とマーカー粒子を用いた数値解析スキームを提案した。なお、数値解析例や詳細な定式化の説明については講演会当日に紹介する。

参考文献

- [1] Sugiyama, K., Ii, S., Takeuchi, S., Takagi, S. and Matsumoto, Y., "A full Eulerian finite difference approach for solving fluid-structure coupling problems," *Journal of Computational Physics*, Vol. 230, No. 3, pp. 596-627, 2011.
- [2] Kamrin, K., Rycroft, C. H. and Nave, J.-C., "Reference map technique for finite-strain elasticity and fluid-solid interaction," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 60, No. 11, pp. 1952-1969, 2012.
- [3] Nishiguchi, K., Bale, R., Okazawa, S. and Tsubokura, M., "Full Eulerian deformable solid-fluid interaction scheme based on building-cube method for large-scale parallel computing," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 117, No. 2, pp. 221-248, 2019.
- [4] Shimada, T., Nishiguchi, K., Bale, R., Okazawa, S. and Tsubokura, M., "Eulerian finite volume formulation using Lagrangian marker particles for incompressible fluid-structure interaction problems," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 123, No. 5, pp. 1294-1328, 2022.
- [5] 西口浩司, 嶋田宗将, 大高雅史, 岡澤重信, 坪倉誠, "ラグランジュマーカー粒子を用いたオイラー型有限体積法による圧縮性固体解析," 土木学会論文集 A2 (応用力学), Vol. 75, No. 2, pp. I.237-I.248, 2019.
- [6] Holzapfel, G. A., "Nonlinear Solid Mechanics A continuum Approach for Engineering," John Wiley and Sons 2000.
- [7] Rusanov, V. V., "Calculation of interaction of non-steady shock waves with obstacles," *J. Comput. Math. Phys. USSR*, Vol. 1, pp. 267-279, 1961.
- [8] Van Leer, B., "Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection," *Journal of computational physics*, Vol. 23, No. 3, pp. 276-299, 1977.
- [9] Lundquist, K. A., Chow, F. K. and Lundquist, J. K., "An immersed boundary method enabling large-eddy simulations of flow over complex terrain in the WRF model," *Monthly Weather Review*, Vol. 140, No. 12, pp. 3936-3955, 2012.

複数材料分布情報を連続化・低次元化したデータ駆動型 マルチスケール解析

Data-Driven Multiscale Analysis Based on Order Reduced Distribution of Multiple Materials

三目直登¹⁾ 細川恭太²⁾ 森田直樹³⁾

Naoto Mitsume, Kyota Hosokawa, and Naoki Morita

¹⁾博(工) 筑波大学 システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: mitsume@kz.tsukuba.ac.jp)

²⁾筑波大学大学院 システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

³⁾博(環境) 筑波大学 システム情報系 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

This study presents a data-driven approach for FE2-type micro-macro coupled multiscale analysis, a typical numerical analysis method for non-homogeneous materials. The proposed method is a faster version of direct FE2, whose microscopic simulator is replaced by a surrogate model. In the offline process of this method, a level set function represents the arrangement of two materials in a unit cell as a spatial distribution, and a functional model is created that includes the arrangement information.

Key Words : Data-driven multiscale method, Finite element method, Level set method

1. 序論

炭素繊維強化プラスチック (carbon fiber reinforced plastic: CFRP) を含む非均質材料の定量評価手法としては、有限要素法に対し均質化法 [1] を用いたマルチスケール解が代表的である。均質化法では、マクロ有限要素モデルの計算点における物理量を、その点に対応づけられた非均質なマイクロ構造 (ユニットセル) の平均化した物理量より計算する。

材料非線形性を考慮したマルチスケール解析手法としては、連成型マルチスケール解法、または FE² と呼ばれる手法 [2] が広く知られている。この手法はマクロモデルの全積分点にそれぞれ対応したマイクロモデルについて、非線形解法の各ステップでマイクロ解析を行い、マイクロ応力の体積平均として定められるマクロ応力を用いてマクロ解析を行う。連成型解法は非線形なマクロ材料構成則を陽に定義することなく非線形解析を行うことができるという利点がある。一方、マクロ計算点数の多さに比例する形でマイクロ解析の計算コストが増加することから、計算コスト面において課題である。

これに対し近年では、実用的な非線形マルチスケール解法として、事前に用意したユニットセルの解析結果データを参照することで非線形構成則に相当する多次元関数モデルを作成し、計算量を削減するデータ駆動型手法 [3,4,5] の開発が盛んであり、データ駆動型 FE² (data-driven FE²: DDFE²) の研究 [5] もなされている。しかしながら、既存研究の多くは、単一のマイクロ構造に対して、それに対応する関数モデルを生成するものであり、多様なマイクロ構造を一つの関数モデルに導入する確立された方法論は未だない。

そこで本研究では、多様なマイクロ構造を一つの関数モデルに導入する方法論を提案する。まず、主に二層流れ解析等において、境界面の連続な表現方法として

用いられる界面捕捉法に着目し、その代表的な方法である level set 法 [6] を用いた非均質材料のマイクロ解析手法を開発する。その上で、連続な分布量として表現された物質配置の情報に対し、任意の低次元のモードに変換することで配置の代表量を計算し、それらの代表量を関数モデルに導入することで、配置の情報を導入する。

2. 境界捕捉型 DDFE²

本研究にて提案する境界捕捉型 DDFE² では、マイクロ応力場の関数モデル作成を、(1) level set 法を導入した構造解析によるマイクロ応力場のサンプリング (2) データ空間の構築 (3) データ空間の連続関数への拡張、の順に行う。全体の流れは発表者らの過去研究 [7] を参照されたい。

本報では、level set 法によって図 1 のように表現された物質配置の情報を低次元化する方法について、次節で詳述する。

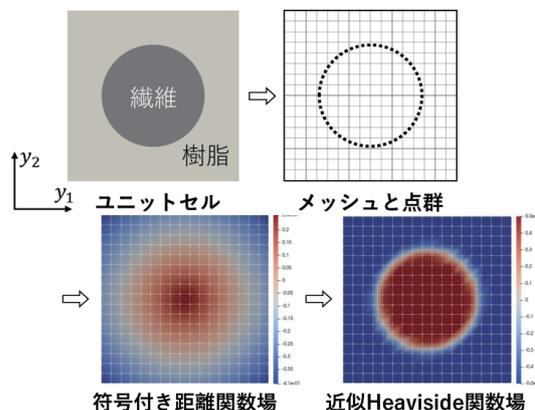


図-1 Level set 法による物質配置の連続表現

3. L2 プロジェクションによる配置情報の低次元化

(1) 任意数のモードに対する方法

図1にて、物質配置を表現する近似 Heaviside 関数を ϕ とする。これをここでは界面関数と呼称すると、この界面関数は有限要素法で一般に用いられる形状関数(ここでは節点 i に対応する大域的な形状関数を N_i と記述する)を用いて以下のように有限要素近似される。

$$\phi(\mathbf{x}) \approx \phi^{\text{FE}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n^{\text{FE}}} \phi_i N_i(\mathbf{x}) \quad (1)$$

なお、 ϕ^{FE} は有限要素近似された界面関数、 ϕ_i は節点 i における ϕ の値、 n^{FE} はマイクロ解析における節点数である。

これを、 n^{MD} 次元の所与のモードを用いて表現された低次元の空間に写像する。 i 番目のモードを M_j とし、その係数を α_i とすると、モードの重ね合わせによって物理量分布 ϕ^{MD} は以下のように表現される。

$$\phi^{\text{MD}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n^{\text{MD}}} \alpha_i M_i(\mathbf{x}) \quad (2)$$

上記の二通りの表現をもとに α_i ($i = 1, \dots, n^{\text{MD}}$) を求める。写像前後の分布に対する等式 $\phi^{\text{MD}}(\mathbf{x}) = \phi^{\text{FE}}(\mathbf{x})$ に対し、式(2)と同様に定義された試行関数を用いて、解析領域 Ω を対象とした重み付き残差法を適用する。結果として、以下の n^{MD} 本の方程式が得られる。

$$\int_{\Omega} M_i(\mathbf{x}) \phi^{\text{MD}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} M_i(\mathbf{x}) \phi^{\text{FE}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3)$$

上式に対し、式(1)および式(2)を代入すると、最終的に、以下のような連立一次方程式が得られる。

$$\mathbf{A}^{\text{FE}} \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{A}^{\text{FEMD}} \boldsymbol{\phi} \quad (4)$$

ただし、 \mathbf{A}^{MD} は $n^{\text{MD}} \times n^{\text{MD}}$ 、 \mathbf{A}^{MDFE} は $n^{\text{MD}} \times n^{\text{FE}}$ の行列であり、各行列要素は以下のように定義される。

$$A_{ij}^{\text{MD}} = \int_{\Omega} M_i(\mathbf{x}) M_j(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (5)$$

$$A_{ik}^{\text{MDFE}} = \int_{\Omega} M_i(\mathbf{x}) N_k(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (6)$$

また、 $\boldsymbol{\alpha}$ と $\boldsymbol{\phi}$ は以下のように定義されるベクトルである。

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{Bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{n^{\text{MD}}} \end{Bmatrix}, \quad \boldsymbol{\phi} = \begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_{n^{\text{FE}}} \end{Bmatrix}$$

ここで得られた各モードの係数 $\alpha_1, \dots, \alpha_{n^{\text{MD}}}$ を、多次元関数モデルの軸として設定し、多数のマイクロ解析によって構成則に相当する超曲面の構築を行うことで、関数モデルに形状に対する汎用性を付与する。

(2) 平均値に対応する方法

式(2)で表されるモードに基づく表現に対し、 $n^{\text{MD}} = 1$ かつ $M_1 = 1$ の最もシンプルなケースにおける α_1 は、界面関数の算術平均に相当する。CFRP で考えると、こ

れは繊維含有率に対応する。この条件を式(3)に代入し整理すると、 α_1 は以下のように表される。

$$\alpha_1 = \frac{\int_{\Omega} \phi^{\text{FE}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} d\mathbf{x}} \quad (7)$$

複合材料の剛性を表すモデルとして、Halpin-Tsai 式など、繊維含有率を基にしたモデルが知られている。その視点から見ると、本報の3(1)項で紹介した方法は、より詳細な分布に関する情報をモードの係数という形で縮約する方法論と解釈できる。

4. 妥当性検証および数値計算例

提案手法を用いた各種計算例は、口頭発表にて紹介する。

5. 結論

本研究では、多様なマイクロ構造を一つの関数モデルに導入するために、level set 法による非均質材料のマイクロ解析手法を開発した。その上で、物質配置を表現する界面関数に対し、任意の低次元のモードに変換することで配置の代表量を計算し、それらの代表量を関数モデルに導入する方法論を示した。

謝辞: 本研究は、JST 創発的研究支援事業 JPMJFR215S および JSPS 科研費 22H03601 の支援を受けたものである。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- [1] E. S. Palencia: Non-homogeneous media and vibration theory. Springer-Verlag, Vol. 127, 1980.
- [2] F. Feyel: Multiscale FE² elastoviscoplastic analysis of composite structures. Computational Materials Science, Vol. 16, No. 1-4, pp. 344–354, 1999.
- [3] K. Terada, J. Kato, N. Hirayama, T. Inugai, K. Yamamoto: A method of two-scale analysis with micro-macro decoupling scheme: application to hyperelastic composite materials. Computational Mechanics, Vol. 52, pp. 1199–1219, 2013.
- [4] 波多野僚, 松原成志朗, 森口周二, 寺田賢二郎: 超弾性複合材料に対するデータ駆動型マイクロ・マクロ連成マルチスケール解析. 日本計算工学会論文集, No. 20190015, 2019.
- [5] R. Xu, J. Yang, W. Yan, Q. Huang, G. Giunta, S. Belouettar, H. Zahrouni, T. B. Zineb, H. Hu. Data-driven multiscale finite element method: From concurrence to separation. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 363, 2020.
- [6] M. Sussman, P. Smereka, S. Osher: A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. Journal of Computational Physics, Vol. 114, No. 1, pp. 146–159, 1994.
- [7] 細川恭太, 森田直樹, 三目直登: Level set 法を用いたデータ駆動型マルチスケール解析. 日本機械学会第35回計算力学講演, 2022.

B-spline 関数を導入した重合メッシュ法の開発と検証

Development and Verification of B-spline Based S-Version of Finite Element Method

馬込望¹⁾ 森田直樹²⁾ 三目直登³⁾

Nozomi Magome, Naoki Morita and Naoto Mitsume

¹⁾筑波大学 システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail:

magome.nozomi.sw@alumni.tsukuba.ac.jp)

²⁾博 (環境) 筑波大学 システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: nmorita@kz.tsukuba.ac.jp)

³⁾博 (工) 筑波大学 システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: mitsume@kz.tsukuba.ac.jp)

s-version of finite element method (SFEM) has intrinsic strengths in local high accuracy with low computational costs and simplicity in the meshing procedure. It, however, has challenges in the accuracy of numerical integration and matrix singularity. In this paper, we summarize these problems and present strategies for solving them. As a concrete solution, we propose B-spline based SFEM, in which cubic B-spline basis functions are applied to the global basis functions, and Lagrange basis functions are applied to the local basis functions. The numerical results show that B-spline based SFEM can be computed with sufficient accuracy using the standard Gaussian quadrature, and the proposed method is superior to the conventional method in terms of convergence of an iterative method.

Key Words : s-version of finite element method, mesh superposition method, B-spline basis functions

1. 序論

Fish[1] が提案した重合メッシュ法 (s-version of finite element method: SFEM) は、解析領域全体を粗く離散化するグローバルメッシュと、任意局所領域を精緻に離散化するローカルメッシュを重ね合わせて解析を行う手法である。重ね合わせるメッシュはそれぞれ独立に定義可能であり、局所的な特徴はローカルメッシュによってのみモデル化される。ゆえに重合メッシュ法はメッシュ生成コストが低く、かつ柔軟にメッシュ細分化可能であり、計算コストを抑えつつ局所領域を高精度に計算可能であるという利点を持つ。重合メッシュ法はこれまで積層複合材料の応力解析 [2] や繊維強化複合材料のマルチスケール解析 [3]、動的亀裂伝播解析 [4,5] 等様々な問題に適用され成功を収めている手法と言える。

一方で、重合メッシュ法には2つの問題がある。1つは重合メッシュ法特有の部分係数行列の数値積分精度である。これは、従来の重合メッシュ法の基底関数として一般的に使用される Lagrange 基底関数が要素境界で C^0 連続性しか持たないことに起因しており、メッシュの重なり方によっては被積分関数が不連続となるため、通常のガウス求積法では十分な精度で数値積分を行うことができなくなる。積分精度を上げるために、積分領域の細分化手法や通常より高次のガウス求積法が適用されてきた [6,7] が、それらの手法はいずれも計算コストが高く、重合メッシュ法の利点を損なうものである。もう1つの問題は、各メッシュの基底関数の線形独立性が保証されていないことである。このため構築するメッシュ次第で解くべき連立一次方程式の係数行列が特異となり、行列計算において反復解法を用いた場合に解が収束しないか、収束が非常に遅くなるのが指摘されている [8]。

本研究では、基底関数に要素境界での連続性の高い B-spline 基底関数を適用しつつ、両メッシュに異なる基底関数を適用することで、これらの課題の抜本的な解決を図る。提案手法と従来手法を3次元 Poisson 方程式に適用して、精度と行列計算の反復回数の点から検証を行う。なお本研究は、構造格子を用いた界面捕捉型の流体解析や連成解析に対し、局所的な高精度化を実現するための基礎的検討の位置付けである。そのため、グローバルメッシュは構造格子であることを前提とし、手法の定式化と検証を実施する。

2. 重合メッシュ法の概要

重合メッシュ法による解析では、図1のように粗さの異なるメッシュを重ねて対象を離散化する。全体領域 Ω^G を粗く離散化するメッシュをグローバルメッシュ、局所領域 Ω^L を精緻に離散化するメッシュをローカルメッシュと呼ぶ。 Ω^G の境界 Γ は Dirichlet 境界条件が課される境界 Γ_1 と Neumann 境界条件が課される境界 Γ_2 に分けられる。重合メッシュ法において、物理空間上の関数解 $u(\mathbf{x})$ は式 (1) で表される。

$$u(\mathbf{x}) = \begin{cases} u^G(\mathbf{x}) & \text{in } \Omega^G \setminus \Omega^L \\ u^G(\mathbf{x}) + u^L(\mathbf{x}) & \text{in } \Omega^L \end{cases} \quad (1)$$

$$u^G(\mathbf{x}) \simeq \sum_{i=1}^{n_{gn}} N_i^G(\mathbf{x}) u_i^G, \quad u^L(\mathbf{x}) \simeq \sum_{j=1}^{n_{ln}} N_j^L(\mathbf{x}) u_j^L$$

$u^G(\mathbf{x})$ および $u^L(\mathbf{x})$ はそれぞれグローバルメッシュ、ローカルメッシュで独立に定義される関数解であり、その基底関数 $N^G(\mathbf{x})$, $N^L(\mathbf{x})$ には異なる関数を適用することが可能である。すなわち、2つのメッシュは独立かつ任意に生成でき、メッシュの整合性を気にせず任意の空

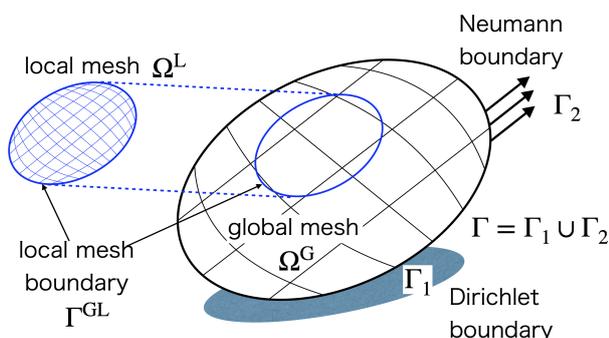


図-1 Global and local meshes defined in SFEM.

間解像度を設定できるため、メッシュ生成が簡便である。 n_{gn}, n_{ln} は基底関数 $N^G(x), N^L(x)$ の数であり、 u_i^G, u_j^L は基底関数 $N_i^G(x), N_j^L(x)$ に対応する係数である。境界 Γ^{GL} 上での関数解 $u(x)$ の連続性を保証するため、式 (2) で表される Dirichlet 境界条件を課す。

$$u^L(x) = 0 \quad \text{on } \Gamma^{GL} \quad (2)$$

対象とする支配方程式が線形である場合、上式を、支配方程式の重み付き残差方程式に代入することで、解くべき連立一次方程式 (3) が導出される。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}^{GG} & \mathbf{K}^{GL} \\ \mathbf{K}^{LG} & \mathbf{K}^{LL} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^G \\ \mathbf{u}^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}^G \\ \mathbf{f}^L \end{bmatrix} \quad (3)$$

式 (3) において、上付き文字 G, L はそれぞれグローバルメッシュ、ローカルメッシュに関連することを示す。行列 $\mathbf{K}^{GG}, \mathbf{K}^{LL}$ はそれぞれグローバルメッシュおよびローカルメッシュで定義される従来の有限要素法の係数行列と同一である。一方、行列 $\mathbf{K}^{GL}, \mathbf{K}^{LG}$ は2つのメッシュの相互作用を表し、被積分関数には $N^G(x)$ と $N^L(x)$ の両方が含まれる。

3. B-spline 重合メッシュ法

(1) Lagrange 基底関数を用いた従来型重合メッシュ法

従来型重合メッシュ法においては、全てのメッシュに対して Lagrange 基底関数を用いられてきた。本章では、Lagrange 基底関数の特徴と、従来型重合メッシュ法の問題点を述べる。

正規要素座標を $\hat{\xi}$ とすると、1次元の正規要素 $\tilde{\Omega}^e$ における Lagrange 補間関数は式 (4) で与えられる。

$$l_i^p(\hat{\xi}) = \prod_{j=1, j \neq i}^{p+1} \frac{\hat{\xi} - \hat{\xi}_j}{\hat{\xi}_i - \hat{\xi}_j} \quad (4)$$

ここで、 $i = 1, 2, \dots, p+1$ は要素内基底番号、 p は関数の次数、 $\hat{\xi}_i$ は節点 i の正規要素座標である。また、要素内の節点数は $n = p+1$ で表され、正規要素 $\tilde{\Omega}^e$ の区間が $[-1, 1]$ で定義されることから $\hat{\xi}_1 = -1, \hat{\xi}_{p+1} = 1$ となる。 p 次の Lagrange 基底関数は、 p 次の Lagrange 補間関数 l_i^p から構成される。

図 2 に 1 次、2 次、3 次の Lagrange 基底関数の一例を示す。図に示すように、Lagrange 基底関数は、要素内

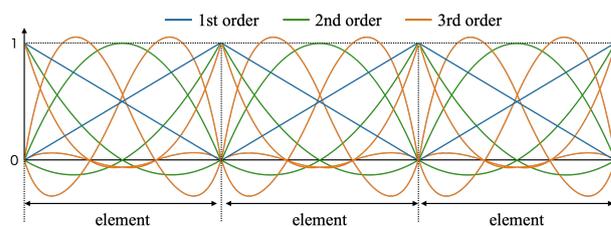


図-2 Linear, quadratic and cubic Lagrange basis functions.

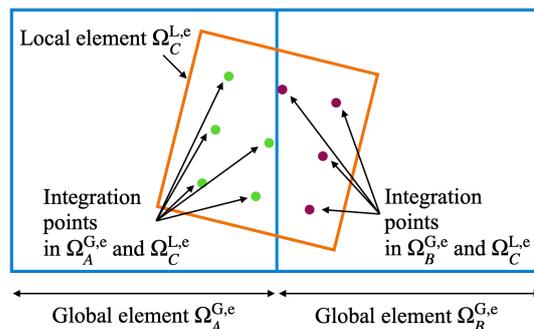


図-3 An example of mesh superimposition that causes the inaccurate quadrature.

部では関数次数に応じて高い連続性を持つが、要素境界では常に C^0 連続であり、基底関数の一階微分値は要素境界で不連続となる。この特徴ゆえに、従来型重合メッシュ法においては、行列 $\mathbf{K}^{GL}, \mathbf{K}^{LG}$ の数値積分の精度が悪化する。

従来型重合メッシュ法には2つの課題が存在する。1つは、行列 $\mathbf{K}^{GL}, \mathbf{K}^{LG}$ の数値積分精度である。この問題は、図3のように、グローバルメッシュとローカルメッシュが部分的に重なるときに生じる。図3では、ローカルメッシュ上の要素 $\Omega_C^{L,e}$ を積分領域としており、被積分関数には、要素 $\Omega_C^{L,e}$ 内の基底関数およびその微分値に加え、グローバルメッシュ上の要素 $\Omega_A^{G,e}$ に重なっている領域では要素 $\Omega_A^{G,e}$ 内の基底関数およびその微分値が、グローバルメッシュ上の要素 $\Omega_B^{G,e}$ に重なっている領域では要素 $\Omega_B^{G,e}$ 内の基底関数およびその微分値がそれぞれ含まれる。前述のとおり Lagrange 基底関数は要素境界をまたいで C^0 連続であり、一階微分値は不連続である。すなわち被積分関数が積分領域内で不連続となる。数値積分で一般的に使用されるガウス求積法はそのような不連続関数を正確に計算することができないため、積分精度が悪化する。

この問題に対して、数値積分の高精度化のために様々な手法が提案されてきた。Fish et al. [6,9] は厳密な積分のために、不連続面に沿ってグローバルメッシュ上の要素を分割し、細分化された各領域に対しガウス求積法を適用した (図4(a))。この手法は正確な数値積分を達成する一方で、非常に複雑な幾何学的処理と多大な計算コストを要したため、積分領域を一様 [10] もしくは再帰的 [11] に分割することで、不連続関数による精度悪化の影響を低減する手法も提案されている (図4(b), (c))。また、メッシュの細分化は行わず、通常よ

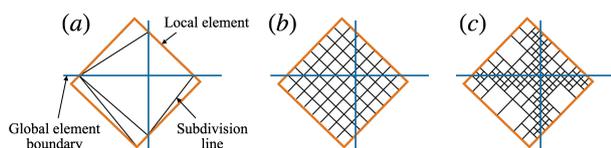


図4 Examples of existing mesh-subdivision approaches for discontinuous integrands.

りも高次のガウス求積法を適用した例もある [1,7]. しかしながら、いずれの手法も通常のガウス求積法を適用した場合より非常に大きな計算コストを必要としており、このような特別な工夫なしに通常のガウス求積法を適用可能な重合メッシュ法が求められている。

従来型重合メッシュ法のもう一つの課題は、各メッシュの基底関数の線形独立性が保証されていないことである。重合メッシュ法における解は式 (1) によって定義されるが、片方のメッシュの基底関数が他のメッシュの基底関数の線形和で表現される場合、式 (1) の分割が一意でなくなり、解の一意性が失われる。すなわち係数行列が特異行列もしくはそれに近い状態となり、反復法において解が収束しなかったり、収束性が悪化することが指摘されている [8]. 特に解が収束しない状況は、グローバルメッシュの要素境界とローカルメッシュの要素境界が一致するようにメッシュが重なっている場合に多く生じており、特異行列を回避するために、グローバルメッシュの要素境界上にあるローカルメッシュ節点の自由度を削除する手法が採用されてきた [12,13]. しかしそれらはモデルを少し修正するのみの暫定的な処理に留まっている。

(2) B-spline 重合メッシュ法による課題の解決

本研究では、前章で指摘した従来型重合メッシュ法の問題点を根本的に解決可能な、B-spline 重合メッシュ法を提案する。本章では、B-spline 基底関数の特徴および具体的な課題解決方法としての B-spline 重合メッシュ法について述べる。

B-spline 基底関数はノットベクトルによって定義される。ノットベクトル Ξ は式 (5) で表されるように、パラメータ空間における座標の非減少な集合である。

$$\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n_k}\}^T \quad (5)$$

このとき、 $\xi_i \in \mathbb{R}$ は i 番目のノット、 n_k はノットベクトル中のノットの数であり $n_k = n_c + p + 1$ と表される。また、 p は B-spline 基底関数の次数、 n_c は幾何形状である B-spline 曲線を構築するのに使われる B-spline 基底関数の数である。与えられたノットベクトルに対して、B-spline 基底関数は 0 次の区分定数で始まる漸化式として定義される。区分定数の関数の定義を式 (6) に示す。

$$N_{i,0}(\xi) = \begin{cases} 1 & (\xi_i \leq \xi < \xi_{i+1}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (6)$$

式 (6) より、0 次の B-spline 基底関数は、パラメトリック区間 $[\xi_i, \xi_{i+1}]$ で定義される要素において 1 をとり、そ

れ以外の区間においては値を持たないことがわかる。次数 $p = 1, 2, 3, \dots$ において、パラメータ区間 $[\xi_i, \xi_{i+p+1}]$ で定義される p 次 B-spline 基底関数 $N_{i,p}(\xi)$ は、Cox-de Boor の漸化式 (7) で表される。

$$N_{i,p}(\xi) = \frac{\xi - \xi_i}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}(\xi) + \frac{\xi_{i+p+1} - \xi}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}(\xi) \quad (7)$$

B-spline 基底関数の一階微分値は式 (8) で与えられる。

$$\frac{d}{d\xi} N_{i,p}(\xi) = \frac{p}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}(\xi) - \frac{p}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}(\xi) \quad (8)$$

\mathbb{R}^d 空間の幾何形状である B-spline 曲線は、従来 FEM と同様に B-spline 基底関数の線形結合で構築される。また、多次元パラメトリック基底関数への拡張は、1 次元パラメータ空間における B-spline 関数のテンソル積として定義できる。ベクトル値係数であるコントロールメッシュ $B_{i,j,k} \in \mathbb{R}^d$ ($i = 1, 2, \dots, n_c$; $j = 1, 2, \dots, m_c$; $k = 1, 2, \dots, l_c$)、多項式次数 p, q, r 、ノットベクトル $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n_k}\}^T$ 、 $\mathcal{H} = \{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_{m_k}\}^T$ および $\mathcal{Z} = \{\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_{l_k}\}^T$ が与えられたとき、 \mathbb{R}^d 空間の B-spline ソリッド $S(\xi, \eta, \zeta)$ は式 (9) で定義される。

$$S(\xi, \eta, \zeta) = \sum_{i=1}^{n_c} \sum_{j=1}^{m_c} \sum_{k=1}^{l_c} N_{i,p}(\xi) M_{j,q}(\eta) L_{k,r}(\zeta) B_{i,j,k} \quad (9)$$

ここで、 $N_{i,p}(\xi)$ はノットベクトル Ξ で定義される p 次 B-spline 関数、 $M_{j,q}(\eta)$ はノットベクトル \mathcal{H} で定義される q 次 B-spline 関数、 $L_{k,r}(\zeta)$ はノットベクトル \mathcal{Z} で定義される r 次 B-spline 関数であり、 i, j, k はそれぞれ ξ, η, ζ 方向に対応する成分インデックスである。なお、コントロールメッシュは解析対象の幾何的形狀と一致しないため、従来の Lagrange メッシュの生成方法は適用できない。本研究では、Otoguro et al. [14] のメッシュ生成手法を採用している。また、本研究ではオープンノットベクトルのみを採用し、B-spline 基底関数が定義される区間の両端で補間特性を満たすとした。一方で、B-スプラインの基底関数は、内部のノットでは補間特性を満たさない。よって、本研究では Dirichlet 境界に属するコントロールポイント値を定数として、Dirichlet 境界条件を課す。加えて、B-spline 基底関数に基づく解析手法も、Lagrange 基底関数に基づく通常の有限要素法と同様にアイソパラメトリック構造が適用可能であり、数値積分には一般的なガウス求積法を用いることができる。

提案手法において最も重要な B-spline 基底関数の特徴は、内部要素境界における関数の連続性である。0 次および 1 次の B-spline 基底関数は、それぞれ区分的定数関数および 1 次 Lagrange 基底関数と同じであるが、2 次以上の B-spline 基底関数は同次の Lagrange 基底関数と異なっている。図 5 に、一様なノットベクトルで

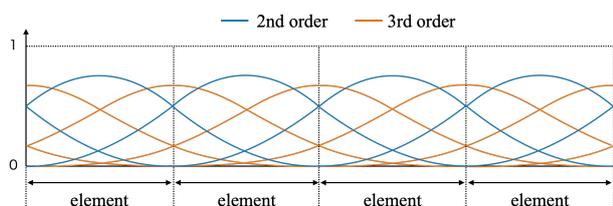


図-5 Quadratic and cubic B-spline basis functions for uniform knot vectors.

定義される2次および3次のB-spline基底関数を示す。図に示すように、B-spline基底関数はLagrange基底関数に比べ、要素境界を越えて高い連続性を持つ。一般に、 p 次B-spline基底関数は、内部ノット ξ_i で定義される要素境界で $p - m_i$ 次の連続性を持つ。 m_i はノット ξ_i におけるノットの多重度である。本研究では、全ての内部ノットにおいて多重度を1とする。すなわち、すべての内部要素境界において、B-spline基底関数は $p - 1$ 次の連続性を持つ。前章で述べたように、従来型重合メッシュ法の数値積分における課題は、グローバル基底関数の要素境界における連続性の低さが原因であった。したがって、3次以上のB-spline基底関数をグローバル基底関数に適用することで、基底関数とその一階微分値が要素境界で連続かつ滑らかとなり、十分な精度で通常のガウス求積法が適用可能になると考えられる。

また、従来型重合メッシュ法のもう一つの課題であった、各メッシュの基底関数の線形独立性の喪失は、グローバルメッシュとローカルメッシュの両方にLagrange基底関数を適用したために生じる問題である。そこで本研究では、各メッシュに異なる基底関数を適用することを提案する。これにより、どのようなメッシュの重なり方であっても、片方のメッシュの基底関数を他のメッシュの基底関数の線形和で表現することは不可能となると思われる。本研究では具体的な事例として、グローバル基底関数にB-spline基底関数を、ローカル基底関数にLagrange基底関数を適用する。

なお、本研究は、構造格子を用いた界面捕捉型の手法において局所高精度化を実現するための基礎的検討の位置づけであり、グローバルメッシュは構造格子であることを前提とする。これにより、B-spline基底関数を適用する上で、解分布および幾何メッシュが存在する物理空間、基底関数が定義されるパラメータ空間の間の写像は恒等写像となる。また、重合メッシュ法では、ローカルメッシュ上の要素に対応する正規要素で定義した求積点上で積分を評価する場合、グローバルメッシュ上の要素に対応する正規要素におけるこれらの点の座標を特定する必要がある。この座標値は明示的に与えられていないため、メッシュが非構造格子である場合は計算コストの高い繰り返し計算が必要となる。しかし、グローバルメッシュを構造格子とすることで、低コストかつ簡単に座標値を求めることができる。

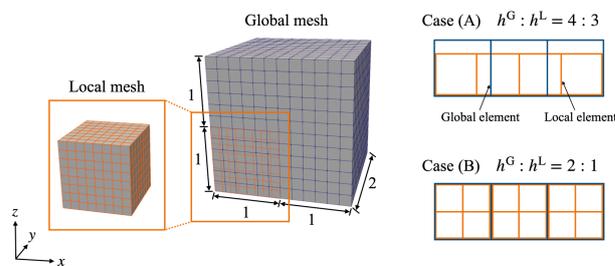


図-6 An example of mesh model for SFEM.

4. 検証

(1) 解析条件

提案手法および従来手法について、相対 L^2 誤差ノルム、係数行列の正定値性、反復法を用いた行列計算における反復回数の点から検証を行った。提案手法では、グローバル基底関数として2,3次のB-spline基底関数を、ローカル基底関数として1,2,3次のLagrange基底関数を用い、計6ケースを検証した。従来手法は、グローバル、ローカル基底関数ともに1,2,3次のLagrange基底関数を用い、計9ケースを検証した。支配方程式はPoisson方程式、解析領域は $[0, 2]^3$ 、局所領域は $[0, 1]^3$ とし、解析領域の全面にDirichlet境界条件を課した。解析モデルの一例を図6に示す。両メッシュにおいて要素は全て立方体とした。定量的な比較のため、すべての検証において、提案手法と従来手法に同じメッシュを適用した。

グローバルメッシュとローカルメッシュの要素幅 h^G および h^L をパラメータとし、図6に示すように、case (A) $h^G : h^L = 4 : 3$ 、case (B) $h^G : h^L = 2 : 1$ の2通りのメッシュにおいて検証を実施した。Case (A)では、ローカルメッシュ上の要素がグローバルメッシュの要素境界を含んでいるため、従来手法では不連続関数の積分が生じる。この解決のために本研究では高次のガウス求積法を採用し、提案手法、従来手法ともに、通常の積分点数よりも7点多い積分点数を用いた。提案手法にも適用しているのは、公平な比較のためである。追加積分点数が7点の場合、積分点数の変化による相対 L^2 誤差ノルムの変化は、全体の誤差の10%以下であった。つまり、この積分点数で積分計算が十分に正確であると考えられる。Case (B)では、ローカルメッシュ上の要素がグローバルメッシュの要素境界を含まず、不連続関数の積分は発生しない。したがって、case (B)では標準的なガウス求積法を採用する。

精度検証には創成解を用い、厳密解との相対 L^2 誤差ノルムを求める。創成解は、1. 予め厳密解を与え、2. 方程式を成立させるために必要な項を解から計算し、3. 検証用の方程式を構成し、4. 構成した方程式に基づき誤差評価を行う手法である。本研究では、厳密解を式(10)で定義し、結果として式(11)で表される検証用のPoisson方程式を得る。

$$u = \sin 2\pi x \sin 2\pi y \sin 2\pi z + 10 \quad \text{in } \Omega \quad (10)$$

$$\Delta u + 12\pi^2 \sin 2\pi x \sin 2\pi y \sin 2\pi z = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (11)$$

相対 L^2 誤差ノルムは式 (12) で定義される.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{L^2} &= \frac{\sqrt{\int_{\Omega^G} |\bar{u}(x) - u(x)|^2 d\Omega}}{\sqrt{\int_{\Omega^G} |u(x)|^2 d\Omega}} \\ &= \frac{\sqrt{\varepsilon_G + \varepsilon_L}}{\sqrt{\varepsilon_A}} \quad (12) \\ \varepsilon_G &= \int_{\Omega^G \setminus \Omega^L} |\bar{u}^G(x) - u(x)|^2 d\Omega \\ \varepsilon_L &= \int_{\Omega^L} |\bar{u}^G(x) + \bar{u}^L(x) - u(x)|^2 d\Omega \\ \varepsilon_A &= \int_{\Omega^G} |u(x)|^2 d\Omega \end{aligned}$$

ここで, Ω^G は解析領域全体, Ω^L は局所領域を示し, $u(x)$ は理論解, $\bar{u}^G(x)$ および $\bar{u}^L(x)$ はそれぞれグローバルメッシュおよびローカルメッシュにおける計算解である. なお, 本研究では積分計算の単純化のため, 局所領域の外側境界とグローバルメッシュの要素境界が重なるように両メッシュを配置している.

本解析ソルバーの行列計算には汎用的並列線形ソルバーライブラリ Monolithic non-overlapping / overlapping DDM based linear equation solver (monolis)[15] を使用している. 線形ソルバーの解法には共役勾配法を用い, その収束判定値は 1.0×10^{-10} とした. 共役勾配法は, 丸め誤差の影響が無視できる場合, 高々自由度回数反復すれば終了する [16]. したがって, 最大反復回数は自由度回数とし, 自由度回数反復しても収束しない場合は, 係数行列が特異となっていると考える. 丸め誤差の影響を少なくするため, 前処理として対角スケールリング法を適用した.

共役勾配法は行列計算の解法として一般的に使用される手法であり, 正定値対称行列にのみ適用できる. 既存研究では重畳メッシュ法における係数行列は正定値行列であると考えられてきた [11] が, 係数行列の正定値性についての厳密な検証や詳細な議論はこれまで実施されていない. そこで本研究では Cholesky 分解の成否に基づき, 係数行列の正定値性を検証する. Cholesky 分解の成否に基づく検証では, Cholesky 分解アルゴリズムを実行し, 負またはゼロのピボットに遭遇せずにアルゴリズムが完了した場合, その行列を正定値とし, それ以外は正定値ではないとする [17].

(2) 結果と考察

不連続関数の積分による誤差を定性的に観測するために, グローバル基底関数の連続性が異なる 3 ケース (グローバル基底関数が 2, 3 次 B-spline 基底関数および 1 次 Lagrange 基底関数) において, グローバル要素とローカル要素の比が極端な $h_G : h_L = 40 : 3$ のケースの, 局所領域における相対 L^2 誤差分布を計測した. いずれのケースでもローカル基底関数は 1 次 Lagrange 基底関数とし, 通常のガウス求積法を適用した. 結果を図 7 に示す. 相対 L^2 誤差分布をカラーコンターで示し, グローバルメッシュを黒線で表している. この結果より, グローバル基底関数の連続性が低いケースほど, グローバル要素境界が内部に存在するローカル要

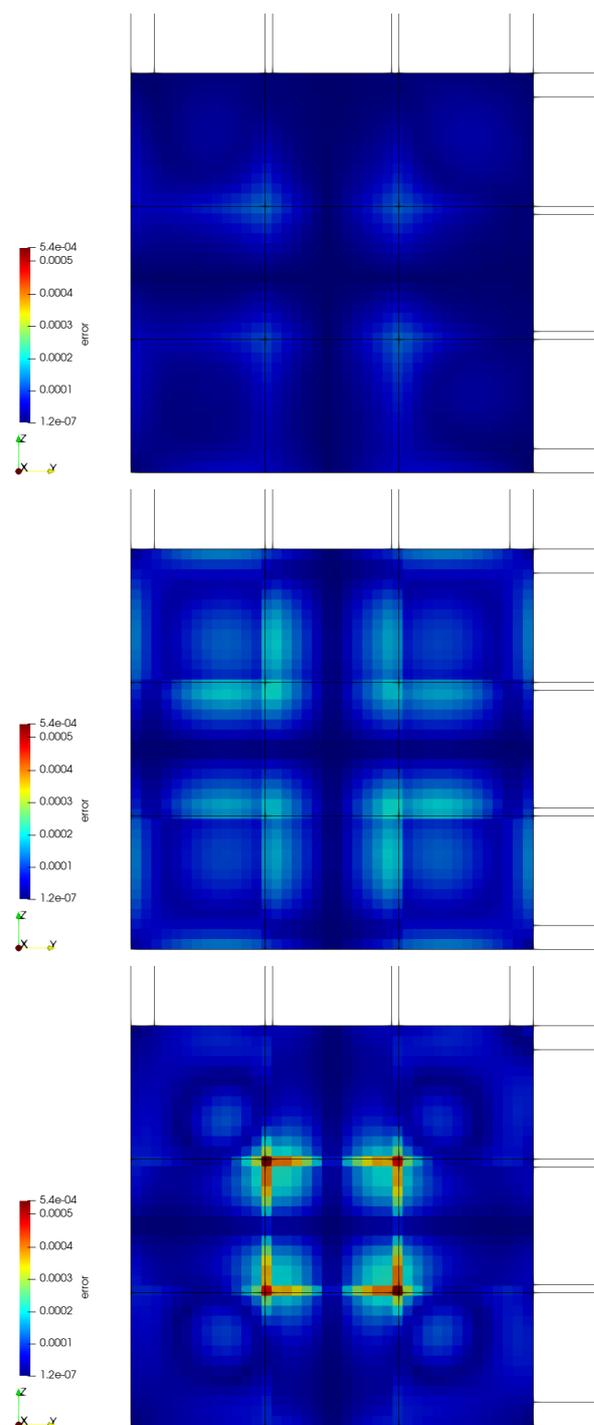


図-7 Relative L^2 error distribution in the local domain in the case of $h_G : h_L = 40 : 3$. Global basis functions are (upper) cubic B-spline basis functions, (middle) quadratic B-spline basis functions, and (lower) linear Lagrange basis functions. The contours of the error are shown by color (min: 1.2×10^{-7} , max: 5.4×10^{-4}).

素において顕著に大きい誤差が生じ, グローバル要素境界を境に誤差分布が不連続になっていることがわかる. また, グローバル基底関数が 3 次 B-spline 基底関数の場合には通常のガウス求積法でも十分な精度で計算可能であると言える.

加えて、提案手法と従来手法において、相対 L^2 誤差ノルムの収束や、係数行列の正定値性、行列計算における反復回数の検討をした。その詳細は口頭発表にて紹介する。

5. 結論

本研究では、従来の重合メッシュ法の問題点である数値積分と行列の特異性を根本的に解決する B-spline 重合メッシュ法を提案した。

まず、従来の重合メッシュ法の問題点を示し、高精度かつ低コストな数値積分の達成のためにグローバル基底関数に要素境界で高い連続性を持つ基底関数を適用すること、行列の特異性回避のために各メッシュにおける基底関数に異なる種類の基底関数を適用することが有効であることを示した。具体的な解決策として、本論文では、要素境界で C^2 連続性を持つ 3 次 B-spline 基底関数をグローバル基底関数とし、Lagrange 基底関数をローカル基底関数とする手法を提案した。提案手法と従来手法を 3 次元 Poisson 方程式に適用して、精度と行列計算の反復回数の点から検証を行った。検証結果から、提案手法は、従来手法よりも誤差の収束性に優れており、また通常のガウス求積法を用いて十分な精度で計算できることが示された。また、提案手法は、行列計算の収束性の点でも従来手法より優れていることが示された。すなわち、提案手法は精度を維持したまま計算コストを削減できる可能性を持つ。

謝辞: 本研究は、JST 創発的研究支援事業 JPMJFR215S および JSPS 科研費 22H03601 の支援を受けたものである。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- [1] J. Fish, The s-version of the finite element method, *Comput. Struct.* 43 (3) (1992) 539–547.
- [2] Y. Jiao, J. Fish, On the equivalence between the s-method, the XFEM and the ply-by-ply discretization for delamination analyses of laminated composites, *International Journal of Fracture* 191 (1) (2015) 107–129.
- [3] O. Vorobiov, S. A. Tabatabaei, S. V. Lomov, Mesh superposition applied to meso-FE modelling of fibre-reinforced composites: Cross-comparison of implementations, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 111 (11) (2017) 1003–1024.
- [4] T. He, N. Mitsume, F. Yasui, N. Morita, T. Fukui, K. Shibamura, Strategy for accurately and efficiently modelling an internal traction-free boundary based on the s-version finite element method: Problem clarification and solutions verification, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 404 (2023) 115843.
- [5] P. Cheng, X. Zhuang, H. Zhu, J. Fish, Application of s-version finite element method to phase field modeling for localized fractures, *Comput. Geotech.* 156 (2023) 105204.
- [6] J. Fish, S. Markolefas, Adaptive s-method for linear elastostatics, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* (1993).
- [7] S.-H. Lee, J.-H. Song, Y.-C. Yoon, G. Zi, T. Belytschko, Combined extended and superimposed finite element method for cracks, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 59 (8) (2004) 1119–1136.
- [8] T. Ooya, S. Tanaka, H. Okada, On the linear dependencies of interpolation functions in s-version finite element method, *J. Comput. Sci. Technol.* 3 (1) (2009) 124–135.
- [9] J. Fish, S. Markolefas, R. Guttal, On adaptive multi-level superposition of finite element meshes for linear elastostatics, *Appl. Numer. Math.* (1994).
- [10] H. Okada, S. Endoh, M. Kikuchi, On fracture analysis using an element overlay technique, *Eng. Fract. Mech.* 72 (5) (2005) 773–789.
- [11] H. Okada, C. T. Liu, T. Ninomiya, Y. Fukui, N. Kumazawa, Applications of element overlay technique to the problems of particulate composite materials (2004).
- [12] R. Fan, The rs - method for material failure simulations, *International journal for numerical methods in* (2008).
- [13] S. L. Angioni, A. Visroli, M. Meo, Combining XFEM and a multilevel mesh superposition method for the analysis of thick composite structures, *Composites Part B* 43 (2) (2012) 559–568.
- [14] Y. Ootoguro, K. Takizawa, T. E. Tezduyar, Space-time VMS computational flow analysis with isogeometric discretization and a general-purpose NURBS mesh generation method, *Comput. Fluids* 158 (2017) 189–200.
- [15] N. Morita, Monolithic non-overlapping/overlapping DDM based linear equation solver, <https://www.kz.tsukuba.ac.jp/%7enmorita/monolis.html>, [accessed 20 March 2023] (2022).
- [16] M. R. Hestenes, E. Stiefel, Others, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Natl. Bur. Stand.* 49 (6) (1952) 409–436.
- [17] N. J. Higham, Cholesky factorization, *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Stat.* 1 (2) (2009) 251–254.

11:30 AM - 11:45 AM (Thu. Jun 1, 2023 10:30 AM - 11:45 AM Room E)

[E-07-04] 3スケール均質化法を用いた織物複合材料の樹脂浸透解析（ネスティングの影響）

*新井 滉平¹、松田 哲也¹、澤田 有弘²、松本 純一²（1. 筑波大学、2. 産業技術総合研究所）

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-08] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓 (3)

座長:西口 浩司(名古屋大学)

Thu. Jun 1, 2023 1:15 PM - 2:15 PM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-08-01] 非物理現象へ拡張した物理モデリングにおけるデータ同化ライブラリ構築手法の提案

*市村 純^{1,2}、中谷 多哉子¹ (1. 放送大学、2. ニュートンワークス株式会社)

1:15 PM - 1:30 PM

[E-08-02] 音速抑制法と Fractional Step 法による熱対流の数値計算

*鳥生 大祐¹ (1. 京都大学)

1:30 PM - 1:45 PM

[E-08-03] 並列有限要素解析における大域的固有モードを利用した Deflated CG 法の性能評価

*村井 拓海¹、三目 直登¹、森田 直樹¹ (1. 筑波大学)

1:45 PM - 2:00 PM

[E-08-04] 拡張型有限要素法を援用した重合メッシュ解析の並列計算と負荷分散

*伊藤 博哉¹、三目 直登¹、柴沼 一樹²、森田 直樹¹ (1. 筑波大学、2. 東京大学)

2:00 PM - 2:15 PM

1:15 PM - 1:30 PM (Thu. Jun 1, 2023 1:15 PM - 2:15 PM Room E)

[E-08-01] 非物理現象へ拡張した物理モデリングにおけるデータ同化ライブ
ラリ構築手法の提案

*市村 純^{1,2}、中谷 多哉子¹ (1. 放送大学、2. ニュートンワークス株式会社)

1:30 PM - 1:45 PM (Thu. Jun 1, 2023 1:15 PM - 2:15 PM Room E)

[E-08-02] 音速抑制法と Fractional Step 法による熱対流の数値計算

*鳥生 大祐¹ (1. 京都大学)

並列有限要素解析における大域的固有モードを利用した Deflated CG 法の性能評価

Performance Evaluation of the Deflated CG Method using Global Eigen-mode
in Parallel Finit Element Method

村井拓海¹⁾ 三目直登²⁾ 森田直樹³⁾

Takumi Murai, Naoto Mitsume and Naoki Morita

¹⁾筑波大学 システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: murai.takumi.tm@alumni.tsukuba.ac.jp)

²⁾博 (工) 筑波大学 システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: mitsume@kz.tsukuba.ac.jp)

³⁾博 (環境) 筑波大学 システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: nmorita@kz.tsukuba.ac.jp)

The deflated conjugate gradient (CG) method is one of the linear solvers for numerical simulations, which can improve the convergence of the approximate solution since the condition number can be reduced by inputting a known independent basis of the solution space. In this study, the global eigen-mode deflation type deflated CG method, we analyzed problems with different number of conditions using structural analysis as an example and measured the number of iterations and computation time. As the results, by examining the breakdown of computation time in terms of the speed-up factor, it became clear that this method exhibits high parallel computation performance around an appropriate number of contractions.

Key Words : Deflated CG method, preconditioning, Finite Element Method, eigen-mode deflation, parallelization

1. 序論

有限要素法の並列計算手法のひとつとして、領域分割法がある。この方法では解析モデルを複数の領域 (sub-domain) に分割し、それぞれの領域について並列計算を行うことができる。またあらかじめ計算データを分割することから、分散メモリ型並列計算機での並列計算に適しており、大規模問題の数値シミュレーションを行う上で大きな課題となる計算時間の削減に有効な手法である。

有限要素法に基づいたシミュレーションは、支配方程式の弱形式化及び離散化を経て最終的に疎な係数行列を持つ連立一次方程式の求解に帰着する。コンピュータ上の数値シミュレーションにおいて、連立一次方程式の求解を行う線形ソルバが解析に要する計算時間の大半を占める。

線形ソルバは直接法と反復法に大別されるが、並列計算を行う場合は並列計算効率の観点から多くの場合反復法が採用される。反復法はある手順に沿って解ベクトルを反復的に更新し、真の解へ漸近させる手法である。この手法は代数的に解を求める直接法と比較すると計算時間の短縮の観点で有利だが、数値誤差の影響を受けやすく、実用にあたっては安定した動作のために問題に適切な処理を施してから求解を行う必要がある。この処理に相当するアルゴリズムを計算する動作を前処理 (preconditioning) と呼称する。効率的な並列計算を実現するためには、反復法前処理についても並列計算に適したアルゴリズムの利用が重要となる。

並列計算における前処理は、局所的前処理と大域的前処理の2種類に大別される。局所的前処理とは、分割

領域内部の情報のみ前処理を施す方法であり、分割領域間の相互作用を無視することに相当する。局所的前処理では、前処理に相当するアルゴリズムにおいて他領域との通信が発生しないため、前処理による通信コストの増加が抑えられるという利点がある反面、自領域内の情報のみを用いて前処理を行うため、一般的にその効果は限定的である。一方、大域的前処理とは分割領域内部の情報だけでなく分割領域同士の相互作用を考慮した前処理である。領域間の相互作用の情報を前処理に利用するため、局所前処理に比べ高い前処理性能を有すると予想されるが、他領域とのデータ通信が必須となるため、このコスト増加を検討に含める必要がある。大域的前処理と局所的前処理は上述のように異なる特性を持ち、適用する前処理の種類や問題によって適切な方法を選択することが必要になる。

本研究では、精緻なシミュレーションから生じる大規模問題を対象に、係数行列の固有ベクトルをもとに前処理を施す eigen-mode deflation (固有モード縮約) に注目し、その有効性を評価する。Eigen-mode deflation では、既知の固有ベクトルの情報をもとに縮約モデル (reduced order model) を作成し、解の収束性向上を図る。過去に行った検討 [1] において、逐次環境での構造解析における eigen-mode deflation が悪条件問題に対して効果的に機能することを確認した。そこで、検討範囲を逐次計算から分散メモリ型並列計算機を用いた並列計算に拡張し、その並列計算性能を評価する。本論文の範囲では、基礎的検討として大域的前処理を対象とし、計算速度、加速率などの観点から計算性能を比較する。

2. 線形ソルバと前処理

(1) 線形ソルバの概要

連立一次方程式の解を数値計算によって求める線形ソルバは、標準的な有限要素法であれば数値シミュレーションの計算プロセスの多くを占める部分である。今日までに直接法と反復法に大別される様々な手法が提案されており、対象とする問題に適した線形ソルバを選択することが重要である。

直接法は、有限回の計算で代数的に解を求める手法である。動作は極めて安定しており計算結果の精度が高い反面、メモリ消費量や計算時間が膨大となる大規模問題には適さない。

対して反復法は、ある規則に従って数値解を反復更新し正しい解へと漸近させる手法であり、解を適切に更新することで、代数的処理と比較して少ない計算量で解を求めることができる。反復法は、成分のほとんどが0である疎行列に対して特に効果を発揮する。0でない要素のみを格納するデータ構造を用いることでメモリが削減でき、さらに0である成分とのベクトル積の計算を省略する実装により大幅に計算量を節約することができる。また反復法はそのアルゴリズムの多くがベクトル演算で構成されるため、MPI (Message Passing Interface) [2] を使用した並列計算と相性がよく、実行時の計算効率が優れる手法である。このような特性から、適切に利用することで直接法と比較して計算時間を大きく短縮できる点で有利であるが、丸め誤差や桁落ちなどの数値誤差に弱く、正しい解が求まらない現象が起こる可能性があるため、安定した運用には後述する反復法前処理を適切に施すことが重要である。

(2) 反復法前処理

反復法前処理とは、反復法が正常に収束するように入力する問題に予め式変形を施すことに相当するアルゴリズムのことである。反復法の収束性は前処理の有無によって大きく左右される。係数行列の最大固有値と最小固有値の比は条件数 (condition number) と呼ばれ、条件数が大きい問題では反復法の収束性が悪化する傾向があるため、前処理により条件数を削減し収束性を向上させることが重要である。前処理のアルゴリズムは、式(1)に示すように、対象とする連立一次方程式 $Ax = b$ の両辺に前処理行列 P の逆行列を左からかける操作に相当する。ここで A は正定値対称行列 (Symmetric Positive Definite: SPD)、 x は解ベクトル、 b は右辺ベクトルである。

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ P^{-1}Ax &= P^{-1}b \end{aligned} \quad (1)$$

このとき、 P は $P^{-1}A$ の条件数が A と比べて小さくなるように選定する。前処理行列 P の生成時間よりも多くの時間を前処理の効果で短縮することができれば、その前処理は効果的に動作しているといえる。

(3) 大域的・局所的前処理

領域分割法により並列計算を行う場合、各分割領域は全体剛性行列を分割したブロック行列で表現するこ

Algorithm 1 Deflated CG method

```

1: function CALC_DEFLATED_CG(A, b, Z)
2:    $\bar{r}^{(0)} \leftarrow b$ 
3:    $g \leftarrow (Z^T AZ)^{-1} Z^T \bar{r}^{(0)}$ 
4:    $r^{(0)} \leftarrow \bar{r}^{(0)} - AZg$ 
5:   if ( $\|r^{(0)}\|/\|\bar{r}^{(0)}\| < \varepsilon$ ) then
6:     skip main loop
7:   end if
8:   for ( $i = 0, k++$ ) do
9:     if ( $i = 0$ ) then
10:       $p^{(0)} \leftarrow r^{(0)}$ 
11:     else
12:       $\beta^{(i)} \leftarrow \frac{(r^{(i)})^T r^{(i)}}{(r^{(i-1)})^T r^{(i-1)}}$ 
13:       $p^{(i)} \leftarrow r^{(i)} + \beta^{(i)} p^{(i-1)}$ 
14:     end if
15:      $v^{(i)} \leftarrow Ap^{(i)}$ 
16:      $v^{(i)} \leftarrow v^{(i)} - AZ(Z^T AZ)^{-1} Z^T v^{(i)}$ 
17:      $\alpha^{(i)} \leftarrow \frac{(r^{(i)})^T r^{(i)}}{(p^{(i)})^T v^{(i)}}$ 
18:      $x^{(i+1)} \leftarrow x^{(i)} + \alpha^{(i)} p^{(i)}$ 
19:      $r^{(i+1)} \leftarrow r^{(i)} - \alpha^{(i)} v^{(i)}$ 
20:     if ( $\|r^{(i+1)}\|/\|\bar{r}^{(0)}\| < \varepsilon$ ) then
21:       exit
22:     end if
23:   end for
24:    $h \leftarrow (Z^T AZ)^{-1} Z^T A(x^{(i+1)} - x^{(0)})$ 
25:    $x^{(i+1)} \leftarrow x^{(i+1)} + Z(g - h)$ 
26:   return  $x^{(i+1)}$ 
27: end function

```

とができ、これらを分散メモリ型並列計算機の計算プロセスに割り振って代数演算の並列処理を行う。このとき反復法前処理は、前処理を施す際に使用する情報によって大域的前処理と局所的前処理に大別される。

大域的前処理とは分割領域内部の情報だけでなく分割領域同士の相互作用を考慮した前処理である。領域間の相互作用の情報を前処理に利用するため、自領域以外の情報を用いて前処理を行うことが可能であることから比較的高い前処理性能を有すると予想される。ただし、この操作には他領域とのデータ通信による情報の更新が必須となるため、このコスト増加を検討に含める必要がある。

対して局所的前処理とは、分割領域内部の情報のみ前処理を施す方法であり、分割領域間の相互作用を無視することに相当する前処理である。局所的前処理では、前処理に相当するアルゴリズムにおいて他領域との通信が発生しないため、前処理による通信コストの増加が抑えられるという利点があるが、自領域内の情報のみを用いて前処理を行うため、一般的にその効果は限定的である。

構造解析の場面では、解析する問題によってモデル形状や前処理に使用する情報が異なるため、大域的前処理と局所的前処理の性能を十分に調査し、適した手法を選択することが非常に重要となる。

表-1 model 1 における並列数及び縮約回数と反復回数の関係

		Number of MPI process									CV
		1	2	4	8	16	32	64	128	256	
Number of deflation mode	0	27,561	27,502	27,745	27,862	27,846	27,813	27,561	27,552	27,488	0.0053
	1	25,042	25,235	25,117	26,399	26,148	26,504	25,213	27,494	25,264	0.0312
	10	8,021	7,998	7,953	8,010	7,933	7,940	7,858	7,946	7,947	0.0058
	25	4,363	4,345	4,348	4,341	4,343	4,341	4,344	4,352	4,361	0.0018
	50	2,628	2,620	2,622	2,621	2,616	2,616	2,622	2,625	2,625	0.0015
	100	663	661	662	662	662	662	662	661	661	0.0009

表-2 model 2 における並列数及び縮約回数と反復回数の関係

		Number of MPI process									CV
		1	2	4	8	16	32	64	128	256	
Number of deflation mode	0	92,280	92,770	95,492	94,762	91,952	93,393	91,461	95,593	94,790	0.0160
	1	79,920	79,558	80,497	85,238	78,867	80,845	79,855	80,083	92,494	0.0502
	10	25,130	25,069	24,537	24,707	24,973	24,560	24,781	25,108	24,795	0.0087
	25	13,691	13,688	13,594	13,639	13,589	13,653	13,561	13,621	13,650	0.0031
	50	5,436	5,411	5,455	5,410	5,401	5,467	5,448	5,467	5,457	0.0045
	100	1,941	1,935	1,938	1,934	1,936	1,938	1,938	1,941	1,927	0.0020

表-3 model 3 における並列数及び縮約回数と反復回数の関係

		Number of MPI process									CV
		1	2	4	8	16	32	64	128	256	
Number of deflation mode	0	212,517	211,891	214,344	212,706	210,294	210,661	213,628	211,977	213,054	0.0058
	1	220,450	217,602	212,344	216,851	217,211	217,765	200,223	203,345	206,320	0.0326
	10	51,631	50,615	50,333	50,792	50,303	49,298	51,114	51,470	50,426	0.0131
	25	26,820	26,488	26,678	26,783	26,424	26,861	26,453	26,361	26,824	0.0071
	50	12,486	12,425	12,521	12,500	12,511	12,455	12,529	12,418	12,443	0.0032
	100	3,664	3,641	3,747	3,738	3,759	3,768	4,982	3,768	4,781	0.1216

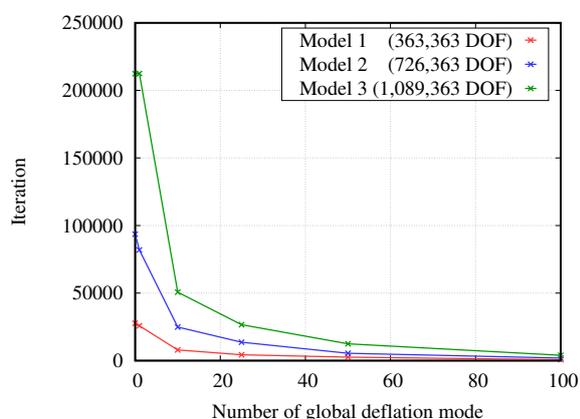


図-1 モデル別の反復回数と縮約基底本数の関係

3. Eigen-mode deflation

(1) 共役勾配法

共役勾配法 (CG 法、Conjugate Gradient method) は、正定値対称行列を対象とした非定常反復法である [3]。

反復法の最も基本的な手法である最急降下法は目的関数の最小勾配方向への探索を繰り返す手法であるが、既に探索した方向を再度探索してしまう可能性があり、解析対象によっては無駄な反復が発生し計算時間が増加してしまう。この問題を係数行列の情報を用いて対策しているのが本手法である。反復解、残差、探索方向の3本のベクトルを更新しながら反復計算を行い、理論上最大 n 回 (n は係数行列の階数) で収束することが知られているが、前処理なしでは数値誤差に弱く収束が不安定になる場合もある。

(2) Deflated 共役勾配法

Deflated 共役勾配法 (deflated CG 法、deflated Conjugate Gradient method) とは、係数行列に縮約 (deflation) を施した共役勾配法である [4]。解空間の基底で構成された任意の本数の線形独立なベクトルを入力することでその情報をもとに縮約モデルを作成し、計算を行う。

表-4 縮約次数毎の deflated CG 法における計算時間の割合

Number of deflation mode	0	1	10	25	50	100
SpMV	82.91 %	71.01 %	56.48 %	41.26 %	30.98 %	14.43 %
Inner product	10.94 %	6.98 %	6.01 %	5.35 %	4.76 %	2.76 %
DeMV	0.00 %	9.55 %	11.66 %	14.30 %	16.32 %	19.62 %
DeMV (without comm)	0.00 %	2.72 %	10.51 %	17.51 %	18.83 %	23.21 %
Precond	3.44 %	2.91 %	2.37 %	1.73 %	1.28 %	0.54 %

Deflated 共役勾配法のアルゴリズムを Algorithm 1 に示す。反復アルゴリズム中における CG 法との差分は係数行列から既知の基底情報を縮約する 17 行目のみであり、既知の基底として 0 ベクトルを入力すると CG 法と等価となる。

ここで、入力する既知の線形独立なベクトルとして低次の固有ベクトル Z を使用する eigen-mode deflation (固有モード縮約) と呼ばれる手法に着目する。大規模自由度問題を扱う場合、問題の条件数は大きくなる傾向があり、反復法の収束性低下が問題となる。Deflated 共役勾配法では、低次固有値 λ_1 から λ_k ($\lambda_1 < \lambda_k < \lambda_n$) に対応する k 本 ($k < n$) の固有ベクトルが他の固有値解法などによって得られ既知である場合、これらの情報を縮約処理によって反復から省略することができる。この操作により解くべき問題の条件数を $\frac{\lambda_n}{\lambda_1}$ から $\frac{\lambda_n}{\lambda_k}$ に削減することができるため、反復法の収束性の向上が期待される。

本研究では解析領域全体の大域的な固有モードを既知の入力基底として利用し、全解析領域、すなわち全体剛性行列に対して縮約処理を施す global eigen-mode deflation の悪条件問題に対する並列計算性能の評価を行う。解析する問題の条件数、入力基底数及び並列数を変化させ、分散メモリ型並列計算機における計算性能を議論する。

並列計算性能の評価には台数効果の指標である加速率 S_p (speed-up factor) を利用する [2]。加速率 S_p は逐次での実行時間 T_s 、並列数 P での実行時間 T_p を用いて式 (2) のように表す。

$$S_p = T_s/T_p \quad (2)$$

4. 構造解析による数値例

(1) 解析条件

構造解析の有限要素法シミュレーションにおいて、既知の基底として解析モデル全体の global な固有モードを利用し、全体剛性行列に対して縮約を行う global eigen-mode deflation の MPI 並列計算環境での性能評価を行うことを目的とする。

構造解析の事象は片持ち梁の曲げ問題を対象とし、縮約数及び並列数を変化させ分散メモリ型並列計算機での計算性能を測定する。片持ち梁モデルは、問題の条件数と線形ソルバの収束性の関係を検討するため、長さの異なる 3 種類の解析モデル model 1 ~ model 3 を使用する。ここで各モデルの寸法諸元は model 1 : (1.0 × 0.01 × 0.01 m、363,363 自由度)、model 2 : (2.0 × 0.01 × 0.01 m、726,363 自由度)、model 3 : (3.0 × 0.01 × 0.01 m、

1,089,363 自由度) である。物性値はヤング率 E : 206,000 N/mm²、ポアソン比 ν : 0.3 の鋼材とした。

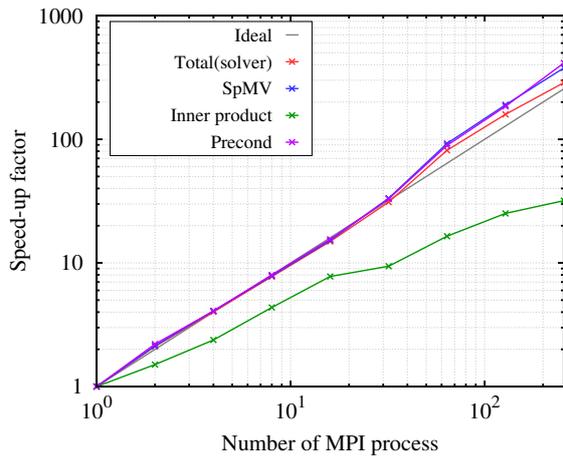
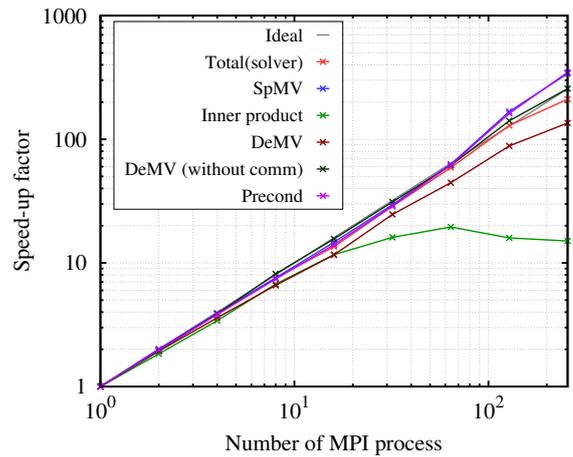
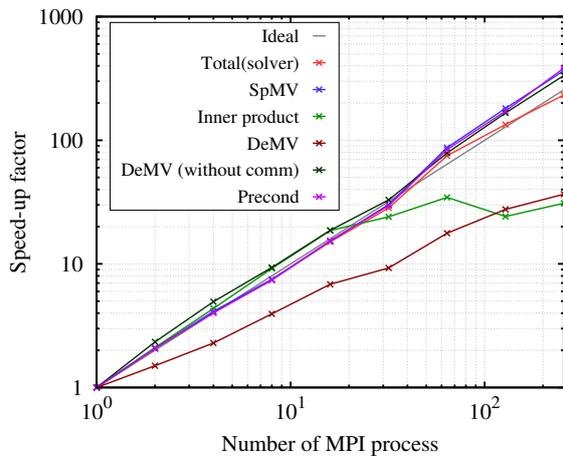
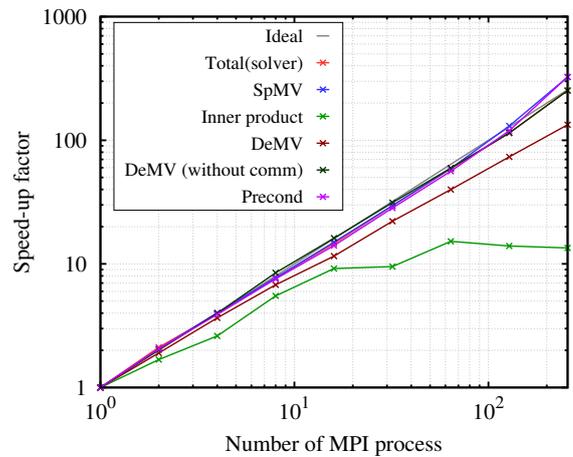
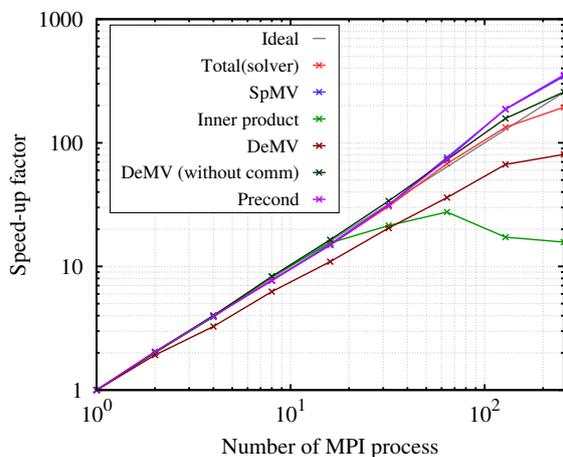
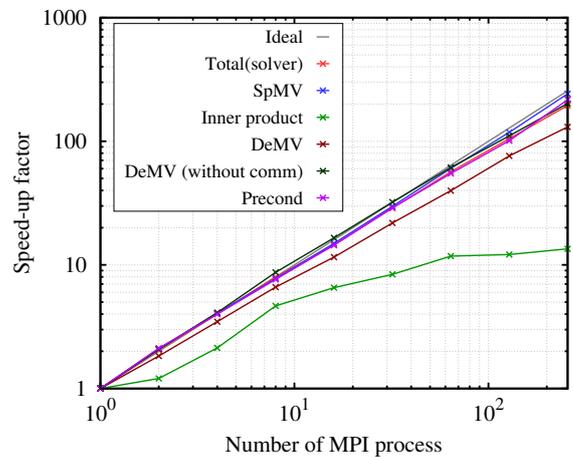
今回は大域的な前処理である global eigen-mode deflation の並列計算性能を評価するため、既知の固有モードの次数を 0、1、10、25、50、100 に設定した。並列数は 1、2、4、8、16、32、64、128、256 とし、各モデル毎に測定を行う。線形ソルバでは上記の縮約前処理に加えて対角スケール前処理を使用し、固有モードの取得には Lanczos 逆べき乗法を用いた。全てのデータは 3 回分測定を行い、検討にはその平均値を使用する。分散メモリ型並列計算機は東京大学の Oakbridge-CX を利用した。

(2) 計算結果と考察

a) 解析モデルの条件数と反復回数

まず model 1 ~ model 3 の基底本数と並列数に対応する反復数を、同一基底本数における標準偏差を平均値で除し無次元化した変動係数 CV と共に表 1 ~ 表 3 に示す。この結果より、同じ縮約次数であれば、多くの場合反復数は並列数が変化してもほぼ一致するが、変動係数 CV に注目すると縮約数が 1 の場合や model 3 における縮約数 100 の場合など、特定の条件においては並列数による反復回数の測定結果に差が生じる場合があることがわかる。今回の検討において使用した global eigen-mode deflation では、解くべき問題を並列化した場合でも、縮約に用いる固有モードは共通であるため数値的な変化はない。よって反復数が並列数によって変化する原因は計算手順の変更による数値誤差の変化に起因するものだと考えられる。この反復数にばらつきが出た事象の原因として、領域分割の過程において、特定の条件でオーダーの差が大きな値同士の和などが発生し、丸め誤差等が発生していると考えられる。

次に model 1 ~ model 3 の反復回数と縮約基底本数の関係を図 1 に示す。この結果より全ての問題において縮約次数の増加に伴って反復回数が単調減少しており、条件数の大きな問題のほうが同一基底数でも反復回数の減少度合いが大きく、悪条件問題で特に eigen-mode deflation が効果的に機能することが確かめられた。これは過去に逐次環境で測定した際の傾向と一致する [1]。またすべてのモデルにおいて今回測定した最大の縮約数 100 で反復回数が縮約なしの場合と比較して 2% 程度まで減少しており、グラフの概形でもこの付近ではほぼ反復数の変化は横這いとなっていることから今回の検討に使用した縮約数のデータセットが妥当なものであることが確かめられた。

図-2 加速率 S_p (Number of global deflation mode = 0)図-5 加速率 S_p (Number of global deflation mode = 25)図-3 加速率 S_p (Number of global deflation mode = 1)図-6 加速率 S_p (Number of global deflation mode = 50)図-4 加速率 S_p (Number of global deflation mode = 10)図-7 加速率 S_p (Number of global deflation mode = 100)

b) 並列計算性能

プログラムの実行にあたり、線形ソルバである deflated CG 法の計算時間をその成分毎に測定した。総計算時間 (Total) の内訳は、分割領域間での通信を要する疎行列ベクトル積 (SpMV)、ベクトル内積 (Inner product)、密行列ベクトル積 (DeMV) と分割領域間での通信を要さない密行列ベクトル積 (DeMV (without comm))、対角スケーリング前処理 (Precond) である。これらの計算時間内訳の割合と縮約次数の関係を表 4 に示す。ま

た model 1 についての測定結果を加速率として図 2 ~ 図 7 に示す。

表 4 より、疎行列ベクトル積 (SpMV) とベクトル内積 (Inner product) の計算時間割合は縮約次数の増加に伴って減少し、逆に密行列ベクトル積 (DeMV) と分割領域間での通信を要さない密行列ベクトル積 (DeMV (without comm)) の割合は増加することがわかる。これは縮約次数 M が大きくなると固有モード Z のサイズが $N \times M$ 増加し、algorithm1 中 17 行目の縮約処理に要する密行列ベクトル積の演算量が $O(M^2)$ のオーダーで増加し、

これに含まれる密行列ベクトル演算の計算割合が徐々に卓越するためである。

続いて図2～図7より、いずれの基底本数の場合でも、総計算時間はおよそ理想的な加速率を示すことがわかる。しかし、ベクトル内積 (Inner product) に注目すると、並列数が増加するにつれ加速率の増加が緩やかになり、一定の値に漸近する。これはベクトル内積の速度向上の限界 (saturation) が起きていることを表す。表4に示す通り、本手法と検討範囲においてベクトル内積が全体の計算時間に占める割合は大きくないため、この現象が全体の並列計算性能に与える影響は限定的である。また密行列ベクトル積 (DeMV) に注目すると、縮約数が比較的小さい図3や図4の場合では加速率が比較的好いことがわかる。これは上述の通り縮約数 M によって deflated CG 法のアルゴリズム上で計算する密行列ベクトル積の計算オーダーが決定されることによるものであり、縮約数が小さい場合領域内での計算量が小さく、通信時間の割合が卓越すると考えられ、これは得られた測定結果の傾向と一致する。

また並列プロセス数が大きな領域では加速率が理想値のラインを超えており、スーパーリニア・スピードアップが起きていることがわかる。これは並列化により分割領域のデータ量が小さくなることでCPUのキャッシュ・ヒット率が増加し、計算が高速化したためだと考えられる。

これらの結果から global eigen-mode deflation は、検討したモデルに対して実用で想定される反復数となる縮約次数においても良好な並列計算性能を示すことが確認された。

5. 結論

本論文では、並列有限要素法に基づいた数値シミュレーションの計算速度向上のために、計算量の大きな割合を占める線形ソルバに着目し、低次の固有モードを利用して deflated 共役勾配法の性能向上を図る大域的前処理である global eigen-mode deflation を deflated 共役勾配法に適用し、性能評価を行った。

まず条件数の異なる複数の解析モデルを用いた検証によって、逐次環境と同様に MPI 並列環境でも条件数の大きな問題であるほど eigen-mode deflation が反復法の収束性の向上に大きく寄与することが確認できた。

次に線形ソルバ deflated CG 法の計算時間の内訳を総計算時間に対する割合とそれぞれの加速率を用いてそ

の性能を評価した。この検討により、縮約前処理のために必要となる密行列ベクトル積の並列性能評価を行い、これが想定される縮約数の範囲で理想的な性能を発揮することを確認した。

ただし、解析する問題によって収束性が向上する特性は大きく異なることが予想され、並列計算性能が大きく低下する領域での計算が必要となる可能性は現段階では否定できない。また本論文の検討では固有モードの取得のため直接法のアルゴリズムを含む lanczos 逆べき乗法を使用したため、並列計算においてはこの部分の計算コストが大きくなるため、固有対を反復計算で取得することができる LOBPCG 法 [5] などのより優れた固有値解法に関して調査し、適した手法を選択する必要がある。これらを考慮して実用に向けた総合的な評価を行うことに加え、分割領域の集合単位で局所的な縮約処理を行う subdomain eigen-mode deflation の性能評価を今後の課題とする。

6. 謝辞

本研究は JSPS 科研費 20K19813 の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] 村井拓海, 三目直登, 森田直樹: 有限要素解析における縮約モデルを用いた反復法前処理, 日本計算工学会第27回計算工学講演会, 2022.
- [2] 片桐孝洋: 「スパコンプログラミング入門 並列処理と MPI の学習」, 東京大学出版会, 2013.
- [3] Magnus, R. H., & Eduard, S.: Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, Journal of Research of the National Bureau of Standards, 49(6), 409-436, 1952.
- [4] Yousef, S., Yeung, M., Jocelyne, E., & Frédéric, G.: A Deflated Version of the Conjugate Gradient Algorithm, SIAM Journal on Scientific Computing, Society for Industrial and Applied Mathematics, 21(5), 1909-1926, 2000.
- [5] Andrew, V. K.: Toward the Optimal Preconditioned Eigensolver: Locally Optimal Block Preconditioned Conjugate Gradient Method, SIAM J. Sci. Comput., 23(2), 517-541, 2006.

拡張型有限要素法を援用した重合メッシュ解析の 並列計算と負荷分散

Parallel Computation and Load Balancing of S-method Finite Element Analysis with Extended Finite Element Method

伊藤博哉¹⁾ 三目直登²⁾ 柴沼一樹³⁾ 森田直樹⁴⁾
Ito Hiroya, Naoto Mitsume, Kazuki Shibamura and Naoki Morita

¹⁾筑波大学 システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: s2220827@s.tsukuba.ac.jp)

²⁾博 (工) 筑波大学システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1 E-mail: mitsume@kz.tsukuba.ac.jp)

³⁾博 (工) 東京大学大学院工学系研究科 准教授 (〒 113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1, E-mail: shibanuma@struct.t.u-tokyo.ac.jp)

⁴⁾博 (環境) 筑波大学システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: nmorita@kz.tsukuba.ac.jp)

The S-version Finite Element Method (S-version FEM) is capable of overlaying multiple different meshes, which is expected to reduce computational and mesh generation costs compared to conventional FEM. However, S-version FEM suffers from decreased accuracy due to its inability to represent discontinuous physical quantities such as the boundary of a circular hole. To address this issue, the eXtended Finite Element Method (XFEM) is applied by assigning enrichment functions to specific nodes, allowing for representation of discontinuous physical quantities within elements and improving accuracy. On the other hand, parallelization is important from a practical viewpoint when calculating complex phenomena. In the case of parallelizing by domain decomposition method, load balancing considering additional computational costs related to coupling terms between global and local meshes and enrichment functions is important. In this study, we propose a load balancing method for parallel computation of S-version FEM analysis with XFEM and evaluate its parallel performance.

Key Words : S-version Finite Element Method, eXtended Finite Element Method, Parallel Computation, Domain Decomposition, Load Balancing

1. 序論

現在、輸送コスト低減に向けた船体の大型化により、構造部材に亀裂が発生する可能性が増大するという問題が存在する。船体構造部材に発生する亀裂現象では、外部から作用する荷重や発生する応力、溶接条件や部材の形状など現象に影響を与える因子が多く存在し、実験によるそれらの詳細なモデル化は難しい。よって、発生する亀裂の進展挙動をシミュレーションによって再現し、評価を行うことが求められている。従来の有限要素法 (Finite Element Method: FEM) において、そのような詳細な強度評価を行うためには、亀裂近傍におけるメッシュの細分化や進展に伴うメッシュの再生成 (リメッシュ) を行う必要性、亀裂により発生する不連続面のモデル化が難しいという課題が存在する。

そのような亀裂進展解析に関して、近年重合メッシュ法 (S-version Finite Element Method: SFEM)[1][2] を利用することが検討されている。重合メッシュ法は、解析対象の全体領域を荒く表現するグローバルメッシュと関心領域を詳細に表現するローカルメッシュを重ね合わせて解析を行う手法である。ローカルメッシュを用いた局所的な詳細化により、従来の有限要素法に比べメッシュ生成コストや計算コストが削減でき、かつ精度の面でも優れるという特徴がある。しかし、重合メッシュ法による亀裂進展解析を三次元に拡張する際、湾曲した亀裂前縁形状の詳細な表現の必要性からメッシュ数

が増大する。このような問題は大規模問題となり、重合メッシュ法を用いてもなお解析に時間を要する。また大規模問題では計算時間やメモリ容量の制約から1台の計算機での処理が困難なため、実用的な観点から計算の並列化が重要となる。

一方で、ローカルメッシュと重なったグローバル領域の境界で、不連続な物理量分布が精度良く表現できない問題が知られている。この問題を解消する手法として、柴沼らは拡張型有限要素法 (eXtended Finite Element Method: XFEM) を援用した重合メッシュ法 [3] を提案した。拡張型有限要素法とはエンリッチ関数を特定の節点に付与して局所的に高精度化する手法である。

また、本研究では有限要素法の並列計算に、解析領域全体を複数の部分領域に分割する領域分割法を用いる。計算の並列化においては、各並列計算機に割り当てる分割領域の計算コストを均一にし負荷を分散することで計算効率が高まる。従来の領域分割法では、要素ごとの計算量を均一と仮定し、各分割領域における節点数が均等になるよう領域分割する。しかし、重合メッシュ法ではグローバルメッシュとローカルメッシュの連成項においてその被積分関数が不連続であり、数値積分を高精度で行う必要があるため要素ごとの計算量が均一とならない。また、拡張型有限要素法は節点あたりの自由度が異なるため、要素ごとの計算量および節点あたりの計算量が均一にならない。そのため、従

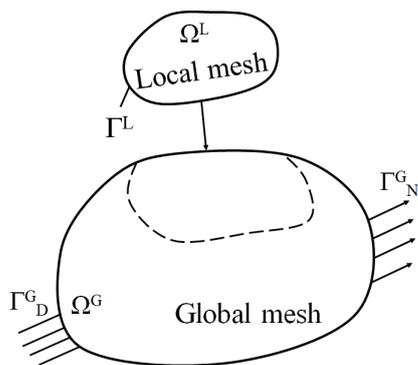


図-1 重合メッシュ法の模式図

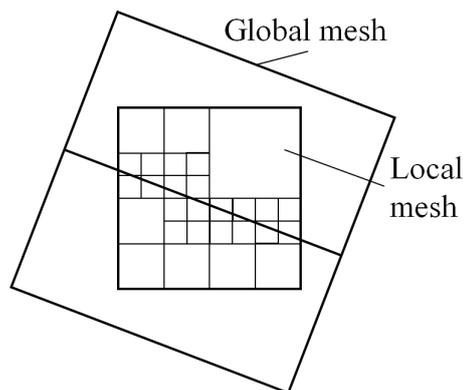


図-2 ローカルメッシュにおける積分領域細分化の例

来の領域分割法における仮定が当てはまらない。よって各分割領域における計算コストが変化し、計算性能が著しく低下することが問題である。

そこで本研究では、各要素に要する計算時間から領域分割時の節点重みを決定し、XFEMを援用した並列重合メッシュ解析において、適切な負荷分散を実現する領域分割手法を提案する。提案手法は、三次元切り欠き材料の引張問題を用いて性能評価を行う。

2. 重合メッシュ法

本研究では、重合メッシュ法による構造解析を対象とする。図-1に、重合メッシュ法の模式図を示す。解析領域は、解析対象の全体領域 Ω^G を粗く解像するグローバルメッシュと、関心領域 Ω^L を詳細に解像するローカルメッシュの重ね合わせで定義される。ここで、境界 Γ_D^G は全体領域のうちDirichlet境界条件が定義される境界、境界 Γ_N^G は全体領域のうちNeumann境界条件が定義される境界、境界 Γ^L は関心領域の境界である。

領域 Ω^L では、式(1)のように、変位 \mathbf{u} をグローバルメッシュにおける変位 \mathbf{u}^G とローカルメッシュにおける変位 \mathbf{u}^L の和で表す。

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^G + \mathbf{u}^L \quad (1)$$

ただし、この条件のみでは \mathbf{u} を表す \mathbf{u}^G と \mathbf{u}^L の一意性がないため、境界 Γ^L において式(2)の条件を付与する。

$$\mathbf{u}^L = \mathbf{0} \text{ on } \Gamma^L \quad (2)$$

この条件のもと、通常の有限要素法と同様に離散化すると、構造解析において解くべき連立一次方程式(3)が得られる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}^G & \mathbf{K}^{GL} \\ \mathbf{K}^{LG} & \mathbf{K}^L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}^G \\ \mathbf{u}^L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}^G \\ \mathbf{f}^L \end{Bmatrix} \quad (3)$$

ここで、 \mathbf{K} は剛性マトリックス、 \mathbf{u} は変位ベクトル、 \mathbf{f} は外力ベクトルであり、上付き添え字Gはグローバルメッシュに関する変数、上付き添え字Lはローカルメッシュに関する変数、上付き添え字GL, LGはグローバルメッシュとローカルメッシュの連成項に関する変数であることを示す。

また、式(3)における \mathbf{K}^{GL} は式(4)のように表される。

$$\mathbf{K}^{GL} = \int_{\Omega^L} \mathbf{B}^{GT} \mathbf{D} \mathbf{B}^L d\Omega^L \quad (4)$$

ここで、 \mathbf{D} は応力-ひずみ関係行列、 \mathbf{B} はひずみ-変位関係行列、 Ω は解析領域である。また、上付き添え字Tは行列の転置を示す。式(4)の被積分関数のうち、 \mathbf{B}^L は領域 Ω^L 中で連続であるが、 \mathbf{B}^G は領域 Ω^L 中のグローバルメッシュにおける要素境界で不連続となる。このような関数を数値積分する場合、被積分関数の不連続性を精度良く取り扱う必要がある。本研究では、グローバルメッシュに跨るローカルメッシュの積分領域を再帰的に細分化して数値積分を行う[4]。ここで、要素の再帰的細分化回数を制御するパラメータを n_{rec} とおいた。あるローカルメッシュについて、グローバルメッシュの境界が存在する場合、 n_{rec} で定めた回数まで繰り返し細分化を行う。図-2では $n_{rec} = 3$ となる。

3. 拡張型有限要素法

重合メッシュ法を用いて図-3(a)のような円孔問題(Ω_{in} が円孔部、 Ω が物体部)を解析する場合、図-3(b)のように解析領域全体をグローバルメッシュ(Ω^G)、円孔をローカルメッシュ(Ω^L)で表現することで、メッシュ生成コストを削減することができる。しかし、物体部と円孔部との境界(Γ_{in})にあるグローバルメッシュの要素内で、物理量が不連続となり、精度が低下してしまう課題がある。これは通常の有限要素法が要素内で物理量が連続であることを前提としているためである。この課題解決のため、本研究では重合メッシュ法の離散化に加え、拡張型有限要素法による高精度化を狙う。拡張型有限要素法は、エンリッチ関数を節点に付与して局所的に高精度化する手法である。エンリッチ関数を付与した節点とそれ以外の節点では、自由度が異なることが特徴としてあげられる。本研究では、エンリッチ関数として、式(5)のようなヘヴィサイド関数を使用し、境界 Γ_{in} があるグローバル要素に属する節点に付与する。図-3(b)の円孔問題であれば、物体部の節点である赤は $H(\mathbf{x}) = 1$ 、円孔部の節点である黒は $H(\mathbf{x}) = -1$ のように値を変化させ、不連続性を表現する。

式(6)に拡張型有限要素法を適用したグローバルメッ

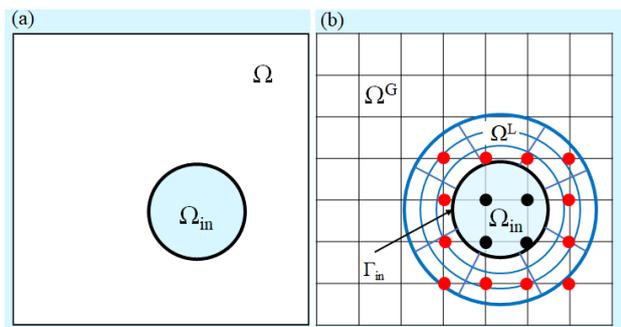


図-3 XFEMを援用した重合メッシュ法を用いた円孔平板解析

シュの要素変位 (\mathbf{u}^G) を示す. m は要素を構成する節点数, $N_i^G(\mathbf{x})$ は形状関数である. また, d_i^G, d_i^{GX} はそれぞれの節点に割り付けられる節点自由度である.

$$H(\mathbf{x}) = \begin{cases} -1 & \text{in } \Omega_{in} \\ 1 & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (5)$$

$$\mathbf{u}^G = \sum_{i=1}^m N_i^G(\mathbf{x}) d_i^G + \sum_{i=1}^m H(\mathbf{x}) N_i^G(\mathbf{x}) d_i^{GX} \quad (6)$$

4. 領域分割法

有限要素法及び重合メッシュ法を並列計算する場合, 並列計算機の主流である分散メモリ型並列計算機に合わせた並列計算の枠組みを構築する必要がある. 分散メモリ型並列計算機は共有メモリを持たず, また計算機1ノード当たりのメモリ容量の制約があるため, 大規模なデータはあらかじめデータ分割を行う必要がある. データ分割の手法として本研究では, 有限要素メッシュの内包関係から全体剛性マトリックスの非ゼロ構造に相当するグラフデータを作成し, そのグラフに基づき領域分割を行う手法を使用する. そのグラフデータには重みを付与することができ, 分割領域ごとの重みの総和が均一になるような領域分割ができる. また, 並列計算にあたり, 各並列計算機に割り当てる領域分割を行うための並列データ分割ライブラリとして, METIS [5] を用いる.

5. 提案手法: XFEMを援用した重合メッシュ法の静的負荷分散

並列計算のための領域分割は一般に, 各分割領域に属する節点数が等しくなる制約条件を付与して分割する. この分割により各分割領域における計算量が均一になりロードバランスを保つことで並列計算効率が高まる. 一方でXFEMを援用した重合メッシュ法に対し, 要素ごとの計算量を均一と仮定している従来の領域分割法を用いると, グローバル・ローカルメッシュの連成項における高い計算量の影響や, 節点ごとに自由度が異なることにより各分割領域での計算コストが均一にならず, 高い並列計算性能が発揮できない. そこで, あらかじめ計算量を予測し, 領域分割時に重みとして取得することで, 各領域の計算負荷が均一になることを目指す.

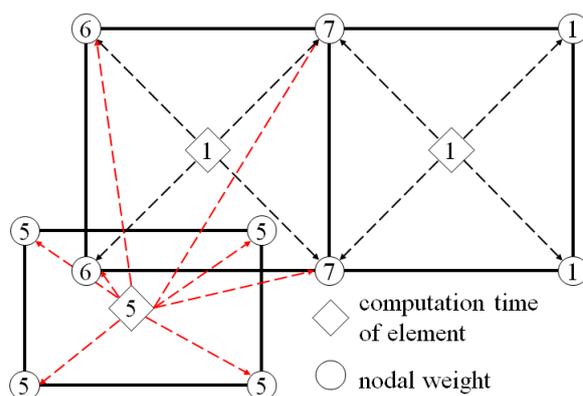


図-4 計算時間を利用した節点重みの付与の例

本研究では領域分割時の重みの決定方法として, 実際にかかる計算時間を利用する手法を提案する. 具体的には, 要素剛性行列の計算に要した時間を要素を構成する全節点に節点重みとして付与することとした (図-4). このようにして設定された重みの合計が各分割領域で均一となるように領域分割を行うことにより, XFEMを援用した重合メッシュ法の負荷分散を図る. 本研究は将来的に動的な亀裂進展解析への適用を計画しているが, その基礎的検討として静的負荷分散を対象とし, 重みの取得は逐次計算による計算結果から行った.

別の重みのつけ方の1つとして, メッシュの幾何情報を用いる方法がある. しかし, 亀裂進展などの実用面を考えると対象となるのは弾塑性問題であり, 解析において応力が決まって初めて次のステップの材料定数が決まる. そのため, 今回は動的負荷分散でも応用可能である計算時間の利用を選択する. またこれは, 将来的な動的負荷分散での利用を考えた際, 1ステップ前の計算時間で解析対象のステップの予測計算時間を近似できると考えられるためである.

6. 数値例: 切り欠き材料の引張問題による検討

図-5に示す三次元切り欠き材料の1/4モデルを対象とした弾性解析を対象として, 並列計算性能評価を行う. ここでは, 節点数42453, 要素数36556のモデルを用いる. 赤四角で囲われた部分がローカルメッシュであり, その外周部分の節点にヘヴィサイド関数を付与している. 材料定数はヤング率 $E=3.2\text{GPa}$, ポアソン比 $\nu=0.35$ とした. 境界条件として, 対称面の法線方向変位を固定し, 図-5の橙四角部の物体の特定の節点に実験より得た変位を付与する. 解析では線形ソルバとして, 対角スケーリング前処理を施した共役勾配 (Conjugate Gradient:CG) 法を用いる. 最大反復回数は10000回, 収束判定閾値を 1.0×10^{-8} とする. また, 並列計算性能評価指標として加速率 (Speed-up factor) を使用する. 加速率は, MPIプロセス数を n , その場合に要した時間を T_n とすると, 式(7)で表されるもので, 並列化により逐次実行 (T_1) に対して何倍に高速化したのかを表す指標である. 本研究では, 加速率の計算に用いる計算時間 T_n は, 領域分割数 $\cdot n_{rec}$ の値について同一の条件の

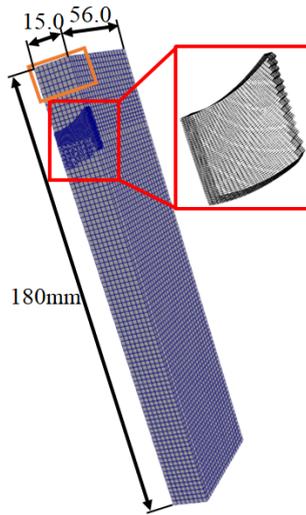


図-5 解析モデル

もと3回ずつ測定を行い、各計算時間の平均を使用する。また、並列計算機として東京大学のOakbridge-CXを利用する。

$$S_n = \frac{T_1}{T_n} \quad (7)$$

7. 結論

本研究では、各要素における剛性行列生成時間を領域分割時の節点重みとして付与し、適切な負荷分散を実現する領域分割手法を提案した。提案手法により静的に負荷分散をしたXFEMを援用した重合メッシュ法の性能評価を行い、従来の領域分割法を用いたXFEMを援用した重合メッシュ法との比較を行う。なお、本稿では手法の説明のみとし、数値解析例については口頭

発表にて報告する。

謝辞: 本研究は、JSPS 科研費 22H00242 の助成および学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(課題番号:jh220047)の支援を受けたものである。ここに謝意を表す。

参考文献

- [1] Fish, J: The s-version of the finite element method, Computers and Structures, Vol. 43, Issue 3, pp.539-547, 1992.
- [2] Fish, J. and Markolefas, S.: Adaptive s-method for linear elastostatics, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 104, Issue 3, pp. 363-396, 1993.
- [3] He T., Mitsume N., Yasui F., Morita N., Fukui T., Shibamura K.: Strategy for accurately and efficiently modelling an internal traction-free boundary based on the s-version finite element method: Problem clarification and solutions verification, Computer methods in applied mechanics and engineering, Vol.404, No.115843, 2023.
- [4] Okada, H, Liu, CT, Ninomiya, T, Fukui, Kumazawa, N: Analysis of particulate composite materials using an element overlay technique, Computer Modeling in Engineering and Sciences, vol. 6, no. 4, pp. 333-347, 2004.
- [5] Karypis G., Kumar V. A.: fast and high quality multi-level scheme for partitioning irregular graphs, SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 20, No. 1, pp.359-392, 1999.

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-09] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓 (4)

座長:三目 直登(筑波大学)

Thu. Jun 1, 2023 2:30 PM - 3:30 PM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-09-01] SPH法に基づく微分演算を内包した深層学習による粒子法代替モデルの説明性向上

*的野 玄¹、才田 大聖¹、西尾 真由子¹ (1. 筑波大学)

2:30 PM - 2:45 PM

[E-09-02] PINN構造振動解析のARによるリアルタイム可視化

*奥田 東子¹、西尾 真由子¹、才田 大聖¹、的野 玄¹ (1. 筑波大学)

2:45 PM - 3:00 PM

[E-09-03] 離散液滴モデルとアンサンブルカルマンフィルタによる噴霧断面計測の拡張

*三坂 孝志¹、高橋 俊²、奈良 祥太郎²、杉山 直輝²、野原 徹雄²、蔵本 結樹²、川本 裕樹²、小原 昭²、長田 莉菜²、菊池 飛鳥²、落合 成行²、大角 和生³、石川 直也³ (1. 産業技術総合研究所、2. 東海大学、3. 株式会社いすゞ中央研究所)

3:00 PM - 3:15 PM

[E-09-04] 遷移行列有限要素法・離散 Helmholtz分解によるマルチボディダイナミクス数値計算法のコンセプト

*今村 純也¹ (1. imi計算工学研究室)

3:15 PM - 3:30 PM

2:30 PM - 2:45 PM (Thu. Jun 1, 2023 2:30 PM - 3:30 PM Room E)

[E-09-01] SPH法に基づく微分演算を内包した深層学習による粒子法代替モデルの説明性向上

*的野 玄¹、才田 大聖¹、西尾 真由子¹ (1. 筑波大学)

2:45 PM - 3:00 PM (Thu. Jun 1, 2023 2:30 PM - 3:30 PM Room E)

[E-09-02] PINN構造振動解析のARによるリアルタイム可視化

*奥田 東子¹、西尾 真由子¹、才田 大聖¹、的野 玄¹ (1. 筑波大学)

離散液滴モデルとアンサンブルカルマンフィルタによる 噴霧断面計測の拡張

Augmentation of Cross-Sectional Spray Measurements by
Discrete Droplet Model and Ensemble Kalman Filter

三坂孝志¹⁾, 高橋俊²⁾, 奈良祥太郎²⁾, 杉山直輝²⁾, 野原徹雄²⁾, 蔵本結樹²⁾, 川本裕樹²⁾,
小原昭²⁾, 長田莉菜²⁾, 菊池飛鳥²⁾, 落合成行²⁾, 大角和生³⁾, 石川直也³⁾

Takashi Misaka, Shun Takahashi, Shotaro Nara, Naoki Sugiyama, Tetsuo Nohara, Yuiki Kuramoto, Yuki Kawamoto,
Akira Obara, Rina Osada, Asuka Kikuchi, Masayuki Ochiai, Kazuo Osumi and Naoya Ishikawa

1) 産業技術総合研究所 (〒135-0064 東京都江東区青海2-3-26)

2) 東海大学 (〒259-1292 神奈川県平塚市北金目4-1-1)

3) いすゞ中央研究所 (〒252-0881 神奈川県藤沢市土棚8番地)

Spray flows, which contain droplets and particles, play a crucial role in various industrial fields. This study aims to investigate an efficient and reliable approach for predicting droplet spray flow by combining the discrete droplet model (DDM) with ensemble data assimilation. Our objective is to enhance cross-sectional measurements such as particle image velocimetry (PIV) by incorporating fast DDM simulations of droplets. Specifically, we focus on conducting numerical experiments of data assimilation (also known as twin experiments) and discuss how the ensemble Kalman filter integrates cross-sectional measurements and DDM. The results showed that the droplet's position, velocity, and the spray nozzle's state are estimated by assimilating the time-averaged velocity measurements on the cross-section using a carefully prepared ensemble of droplets. Furthermore, the droplet size distribution is estimated through DDM.

Key Words : Spray Flow, Discrete Droplet Model, Ensemble Kalman Filter

1. はじめに

液滴や粒子を含む噴霧流は内燃機関をはじめとする様々な産業分野で利用されている。噴霧流において重要な特性として噴霧の広がりや噴霧中の液滴径分布があり、これらは気流との混合や燃焼反応に影響する。

噴霧流は液膜や液滴が相互に作用しながら気流中に分散する多相流であり、その複雑さから多くの研究が行われている。噴霧流の特性評価には粒子画像流速計(PIV)、レーザードップラー流速計(LDA)、平面レーザ誘起蛍光などの様々な計測技術が活用されている。数値流体力学(CFD)としては、気相と液相にそれぞれ非圧縮ナビエ・ストークス方程式と離散液滴モデル(DDM)を適用し、噴霧現象を正確に再現するために、二次微粒化、壁面相互作用が導入されている。近年、これらのモデルは商用ソフトウェアに実装され、CFD-DDM連成解析による尿素選択触媒還元(SCR)システム[1]やスワールインジェクタ[2]の研究なども行われている。

これら計測・数値計算ツールの成熟を受けて、それらを連携した噴霧流へのアプローチが期待される。ここでは、データ同化の枠組みで利用されるベイズの定理に基づく計測と数値シミュレーションの統合に着目する[3]。データ同化により不確かなモデルパラメータを実測データで推定したり、疎な実測データを数値モデルの予測で外挿したりするような実験と数値シミュレーションの補完関

係強化が期待される。データ同化に関する研究事例としては、風洞計測と数値シミュレーションを統合したハイブリッド風洞[4]、ライダー計測を同化した後方乱気流の予測[5]、粒子追跡速度計測法(PTV)と直接数値シミュレーションの融合[6]などが挙げられる。

本稿では高速で信頼性の高い噴霧流予測を実現するために、DDM解析とアンサンブルカルマンフィルタ(EnKF)によるDDM-EnKFデータ同化を検討する。これにより、液滴の高速DDM解析を用いた断面計測の拡張を目指す。特にPIVのような断面計測とDDM解析をアンサンブルベースのデータ同化手法によってどのように統合できるかを、DDM解析から得られる疑似的な計測値を用いたデータ同化の数値実験(双子実験)によって議論する。

2. DDM-EnKFデータ同化手法

本研究ではPIVのような断面計測とDDMの粒子シミュレーションを融合するようなデータ同化を検討するために、事前に特定の条件のDDM解析によって準備された疑似的な時間平均PIV計測を利用したデータ同化の数値実験(双子実験)を行う。双子実験では観測ノイズの分散やアンサンブルメンバーの数などのデータ同化パラメータが同化結果に与える影響を評価することができる。

データ同化の手順は以下ようになる。DDM解析結果と計測結果を比較するために、DDM解析内でPIV計測プロセスを単純化して模擬する。すなわち、PIVの想定計測

断面内の液滴を抽出し、断面上の液滴速度を平均化して擬似的な時間平均PIVを得る。この処理はデータ同化における観測モデル h_t に相当する。これにより擬似的な時間平均PIV計測を $h_t(\mathbf{x}_t)$ のようにDDM解析の変数 \mathbf{x}_t から求め、実測時間平均PIV計測 \mathbf{y}_t との差に基づき、EnKFによってDDM解析の不確かなパラメータを推定する。ここで変数 \mathbf{x}_t および \mathbf{y}_t はそれぞれ状態および観測ベクトルである。双子実験で使用する計測値は、図-1の右に示すように参照用DDM解析から生成されたものである。この参照ケースに対しては、インジェクタ諸元として噴霧量およびSauter平均径（SMD）をそれぞれ $Q_{inj} = 0.22$ [g/s]、 $d_{32} = 63.5$ [μm]を設定した。本研究では、噴霧ノズルに関するパラメータである噴霧速度や噴霧角に加えて、液滴の粒径分布を推定する。DDM解析およびEnKFの詳細については文献[7,8]を参照されたい。

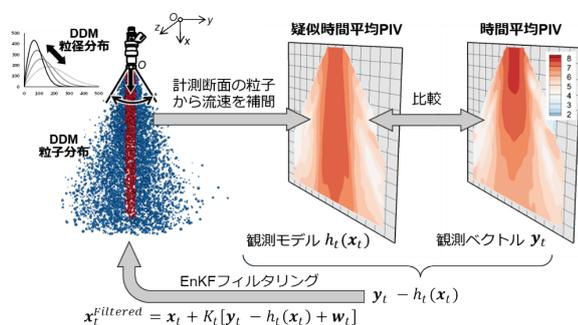


図-1 DDM-EnKFデータ同化の模式図

EnKFでは限られた数のアンサンブルメンバーによって予測状態のガウス分布を規定する平均と分散を近似的に計算する。各アンサンブルメンバーはある条件のDDM解析の1ケースに対応する。EnKFが扱う状態ベクトル \mathbf{x}_t^m は以下のように定義される。まず、各液滴は位置、速度、粒径の情報を持つ。 N_p はDDM解析1ケースで考慮される粒子数である。一方、各DDM解析は直交格子 ($i_{max} \times j_{max} \times k_{max}$) で保持される背景気体速度およびノズル条件（噴霧速度と噴霧角パラメータ）の情報を持つ。これらの情報がアンサンブルメンバー数 M だけ必要になる。以上より、状態ベクトルの定義は図-2のようになる。状態ベクトル \mathbf{x}_t^m は標準的なEnKFアルゴリズムによって計測値に基づき更新される[7]。

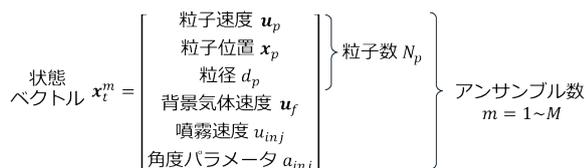


図-2 粒子データ同化のための状態ベクトルの定義

3. データ同化の準備

EnKFによる状態ベクトルの修正方向はアンサンブルの摂動によって決まるため、推定したい量に対して適切

なアンサンブルを生成する必要がある。本事例では、噴霧速度と噴霧角が不確かであると想定して主要な推定パラメータとし、噴射速度と噴霧角パラメータに関して摂動を与える。ノズルにおける噴霧条件はその後の液滴の飛行を支配するため、アンサンブルにおける噴射条件の摂動は、飛行する液滴の位置や速度の摂動にもつながる。本DDM解析では仮想的な空間内に一定数の液滴を準備し、ノズル条件に従って噴霧する。仮想空間内の飛行前液滴が一定数以下に減ったときに、飛行中液滴の古いものからその仮想空間へと再循環させている。そのため、ノズルから噴霧する前の仮想空間内の液滴に関して、位置・速度に関するアンサンブル摂動は考慮しない。図-3は、噴射速度、噴霧角パラメータ、液滴径分布が異なるアンサンブルのメンバーを模式的に示している。ここで液滴の色はその速度を示している。

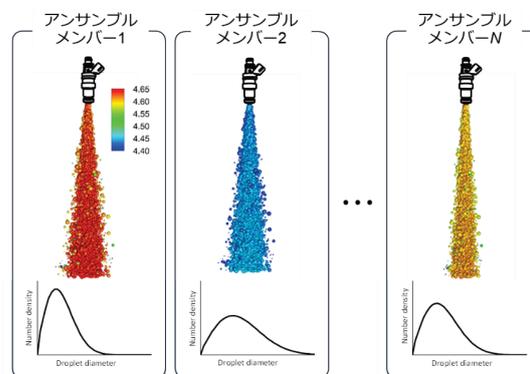


図-3 DDM解析のアンサンブルの例

噴射速度や噴霧の広がりなどの噴霧特性は、断面PIV測定によって部分的に観測される。そのため、断面PIV測定をDDM解析に同化することで、それらを推定することが期待される。一方、液滴の粒径分布はPIV速度分布にも影響を与えると考えられるが、その関係をPIV計測から直接得ることは困難である。しかし、噴射速度と液滴径の関係を何かしらの液滴径分布で関連づけることで、液滴径分布のアンサンブルを考慮し、PIV測定から液滴径分布を推定することが可能となる。具体的には、各アンサンブルメンバーの噴射速度を用いて、Rosin-Rammler分布に基づき液滴径分布を設定する。そして、噴射速度の摂動によって液滴径分布に誘起される摂動を利用して、PIV計測に基づく液滴径分布の推定を行う[7]。

後述の図-5に示すように、液滴のアンサンブルメンバーは基準となるケースを中心に生成される。基準ケースの初期液滴の位置はRosin-Rammler分布に基づいてランダムに生成するgことができるが、各液滴のアンサンブルは基準ケースの液滴を中心に生成されており、アンサンブルメンバーの生成はランダムでない。このように、液滴径分布とPIV断面速度がDDM解析を通して関係づけられたアンサンブルメンバーを用意することで、DDMによる液滴径分布の間接推定を実現することができる。

4. 推定の様子

図-4に推定中の液滴の分布を示す. 図-4(a)は擬似PIV計測を生成した参照ケース, 図-4(b)および(c)はデータ同化を行った場合 (DAあり) と行わなかった場合 (DAなし) の予測である. 色で示した液滴径は, データ同化後, 噴射速度が遅く粒径が大きな液滴が, 噴射速度が速く直径が小さなものに修正されていることを示す. また, データ同化によって液滴の広がりも修正されている. 液滴は上述のとおり一定時間の飛行後に循環させているため, 射出速度が速いほど流れ方向の液滴の分布が長くなっている. EnKFによるフィルタリングを最初に行った際には, すでに飛行している液滴もアンサンブル攪乱の方向に修正されている. このような推定の挙動は, 前節で説明したアンサンブルの定義によって実現されている. すなわち, 各液滴の位置や速度は個別に修正することはできないが, アンサンブルメンバーが規定する空間内において液滴分布を修正することができる.

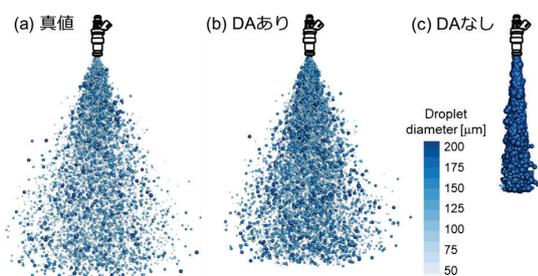


図-4 データ同化前後の液滴分布

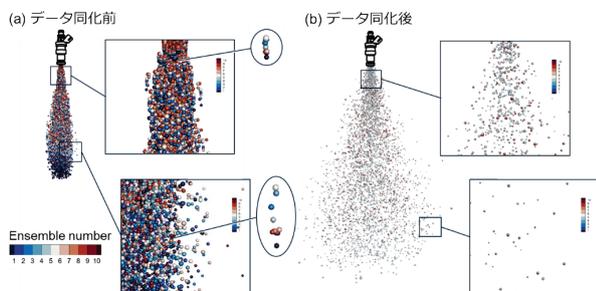


図-5 データ同化前後のアンサンブルの様子

各液滴のアンサンブルメンバーは, 噴霧前に互いに近接して初期配置されるので, 特定の液滴に関するアンサンブルはまとまって飛行する. 図-5はアンサンブル数 $M = 10$ の場合に, アンサンブル番号で色分けした液滴の様子を示す. 最初のフィルタリング前は液滴のアンサンブルが飛行方向に広がり, 図-5(a)に示すように下流に行くほど広がりが大きくなっていることがわかる. 最初のフィルタリングを行った後は図-5(b)のように飛行中の液滴を含めてアンサンブルの広がりが収束する (赤や青の液滴が一つに重なりほぼ白色の液滴になっている). これにより, EnKFによって噴霧ノズルの条件に加えて, 飛行中液滴の速度や位置が修正されていることが確かめられる.

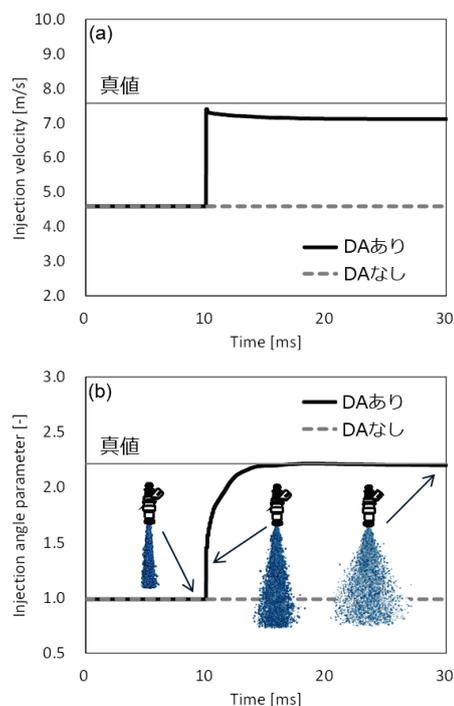


図-6 噴霧速度および噴霧角パラメータの履歴

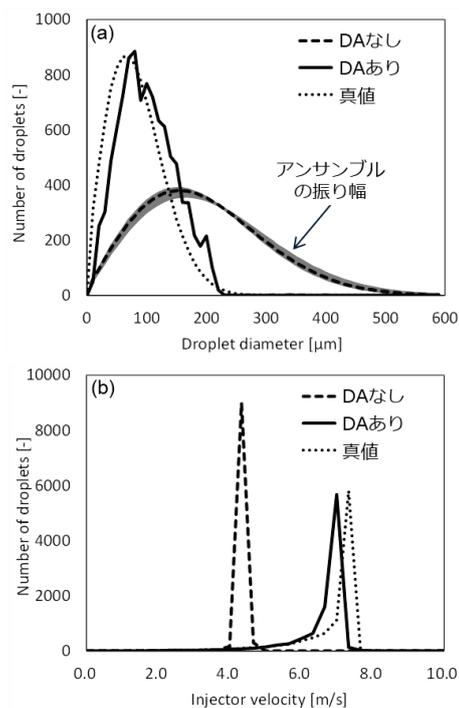


図-7 データ同化前後の液滴径分布および液滴速度分布

図-6は, 噴射速度と噴射角パラメータの時刻履歴であり, いくつかの時間における液滴分布も示している. ここで真値とは参照ケースの結果を得るために使用した値である. 最初のフィルタリングの後, 噴射速度はすぐに真値近くに補正される. 噴射角パラメータも同様であり, また, データ同化によりすでに飛行している液滴も修正されることがわかる. これは先に説明したように, 噴射速度・噴霧角パラメータだけでなく, 飛行中の液滴の位置もアンサンブル摂動により修正されていることを示す. 図-7は飛

行中の液滴から評価した液滴径と液滴速度の分布である。液滴径は単一のパラメータではなく、前述したようにアンサンブルとして修正される。図-7(a)では、初期アンサンブルにおける液滴径分布の振動も灰色の線で示している。これらのアンサンブルで定義された振動によって真値に近い液滴径分布が推定できている。推定された液滴径分布の振動は、DDM解析とRosin-Rammler分布による推定の非線形性に起因していると考えられる。

5. 推定結果の解釈

EnKFによって液滴径分布の間接的な推定が可能となることに関して、EnKFの推定方式に基づき考察する。まず、状態ベクトルのアンサンブルがどのように更新されるかを確認する。フィルタリング後のアンサンブルは、図-8に示すようにフィルタリング前のアンサンブルに行列 X_5 を掛けたもの、すなわち $A_t' = A_t X_5$ であることが知られている[9]。行列 A_t は状態ベクトルのアンサンブル $A_t = [x_t^1 \dots x_t^M]$ からなる。一方、 X_5 はアンサンブルメンバー数 M の大きさの正方行列であり、優対角で各列の要素の和が1であるため、EnKFの更新は各アンサンブルメンバー自身を中心とした非対角成分による加重平均になっている。つまり、EnKFの推定値もアンサンブルメンバーの加重平均とみなすことができる。これにより、液滴径とPIV断面速度の関係が何かしらのモデルによって適切に関係づけられていれば、PIV断面速度の測定値から液滴径分布を推定することが可能となる。

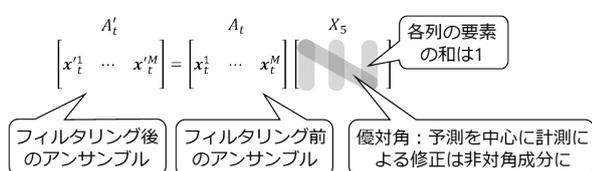


図-8 EnKFによるアンサンブル更新の模式図

図-9に液滴径分布とPIV断面速度の関係を模式的に示す。 X_5 行列において、断面速度 u_{PIV} との比較から断面速度 u_{PIV} に近いアンサンブルメンバー u_2 を優先した結果、 u_2 に対応する液滴径分布 $f(d_2)$ が優先されるように推定が行われる。

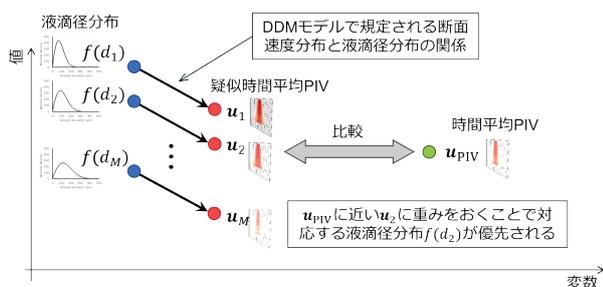


図-9 断面速度計測による液滴径分布推定の模式図

6. おわりに

本稿では高速で信頼性の高い噴霧流予測を目的として、DDM解析におけるアンサンブルデータ同化を検討した。ここでは双子実験を考え、PIV断面計測のような2次元断面計測がDDM解析とEnKFによってどのように拡張されるかを議論した。その結果、適切に準備した液滴のアンサンブルを用いて断面の時間平均速度計測値を同化することにより、液滴の位置や速度、噴霧ノズルの状態を推定できることを示した。さらに、データ同化におけるモデルベースのアプローチを活かし、DDM解析を通した液滴径分布の間接的な推定の可能性を示した。本稿では双子実験の結果について述べたが、実PIV計測値を用いたデータ同化も行っており、詳細は文献[8]を参照頂きたい。

参考文献

- [1] Habchi, C. et al.: Numerical study of deposits formation in SCR systems using urea-water solution injection, *J. of Materials Science and Nanotechnology*, Vol. 6, p. 201, 2018.
- [2] Chen, C. et al.: Investigation of the spray formation and breakup process in an open-end swirl injector, *Science Progress*, Vol. 103, p. 0036850420946168, 2020.
- [3] 大林茂, 三坂孝志, 加藤博司, 菊地亮太: データ同化流体科学 —流動現象のデジタルツイン—, 共立出版, 2021.
- [4] Nisugi, K. et al.: Fundamental study of hybrid wind tunnel integrating numerical simulation and experiment in analysis of flow field, *JSME Int. J. Series B Fluids and Thermal Engineering*, Vol. 47, pp. 593–604, 2004.
- [5] Misaka, T. et al.: Assimilation experiment of lidar measurements for wake turbulence, *J. of Fluid Science and Technology*, Vol. 3, pp. 512–518, 2008.
- [6] Suzuki, T.: Reduced-order Kalman-filtered hybrid simulation combining particle tracking velocimetry and direct numerical simulation, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 709, pp. 249–288, 2012.
- [7] Takahashi, S. et al.: Augmentation of cross-sectional spray measurements with discrete droplet model using ensemble Kalman filter, *Int. J. of Computational Fluid Dynamics*, Vol. 36, pp. 125–137, 2021.
- [8] Takahashi, S. et al.: Estimation of spray flow characteristics using ensemble Kalman filter, *Flow Measurement and Instrumentation*, Vol. 88, p. 102247, 2021.
- [9] Evensen, G.: The ensemble Kalman filter: theoretical formulation and practical implementation, *Ocean Dynamics*, Vol. 53, pp. 343–367, 2003.

遷移行列有限要素法・離散Helmholtz分解による マルチボディダイナミクス数値計算法のコンセプト

Concept of numerical scheme for multibody dynamics by the transfer matrix finite element method and discrete Helmholtz decomposition

今村純也¹⁾

Junya Imamura

1) 博(工) *imi*計算工学研究室 (〒351-0114 埼玉県和光市本町31-9-803, E-mail: jimamura@ra2.so-net.ne.jp)

In a previous paper, I have proposed a generalized force method (GFM), in which the simultaneous equation is constructed novel reduction method for the treatment of the continua. This report is part of research regarding Helmholtz theorem, to apply the Helmholtz decomposition ($H-d$) to the finite element method. $H-d$ is, however, in a certain coordinate expression. I proposed an improved $H-d$ expression called dHd . The dHd includes $H-d$ and other coordinate expressions. That is a multidirectional FEM concept. The objective of this report is to propose a concept of the numerical scheme for the multi body dynamics by transfer matrix method and above dHd . Depends on your habit, because I fell the cylindrical or polar coordinate system which is used in general for MBD calculation. The transfer matrix calculation uses Cartesian coordinate, and dHd uses Lagrangian coordinate which is called also natural coordinate, but potentials in dHd are represented in current coordinate.

Key Words: Transfer matrix method, Helmholtz decomposition, Discrete Helmholtz decomposition, Multibody dynamics, Multibody system.

1. 目的と背景・概要

(1) 目的

自然座標系表示のマルチボディダイナミクス(MBD)の計算には、通常、円筒座標系・極座標系の計算が入る。慣れにもよるが、煩瑣に感じる。

そこで冒険的であるが、デカルト座標系のみでシンプルに表せる、遷移行列有限要素法・離散Helmholtz分解による数値計算法のコンセプトを提示する。

計算安定化のために“共役変数”を、離散Helmholtz分解に基づき組込む。

遷移行列法・遷移行列有限要素法も、Helmholtz分解法・離散Helmholtz分解法も、数値計算法として、未だ一般に定着しているわけではない。

そこで特徴・特長の共通認識のため、多少長くなるが着目点を、なるべく平易に述べて置く。

(2) 離散Helmholtz分解法

本稿は“Helmholtz分解[1]に基づく連続体理論の、有限要素法への適用に関する研究”の一環である。

Helmholtz分解($H-d$)の表示法を修正し、離散Helmholtz分解(dHd)表示法を提示している。(付録1参照。)

修正のポイントは、 $H-d$ 表示のLateral(縦)成分 $\nabla\varphi$ を非圧縮と圧縮の2成分に分け、 $\nabla\varphi$ の非圧縮成分でもCoulombゲージ($\text{div}\psi = 0$)を表す、とする点に在る。

つまり、 $\nabla\psi$ の対角項(： $\nabla_{diag}\psi$ と定義)と $\nabla\varphi$ は等しい、とするものである。(i.e. ; $\nabla\varphi = \nabla_{diag}\psi$)

したがって圧縮成分(： $\nabla\varphi^c$ で表す)の計算に先立って

は、非圧縮材料・圧縮材料の如何に拘わらず、非圧縮計算は必須である。

圧縮成分計算は、変位を $\nabla(\varphi^c + \varphi)$ で表し、 $\nabla\varphi^c$ を連立方程式の未知数として解いて行く、こととなる。(特解には一般解を加えて表す。)

(3) 共役変数

$H-d$ 修正のいま一つは、Cauchy-Riemann (C.-R.)の関係式を3Dにも組み込めるよう、回転形の $curlu$ と対の形で、せん断形をベクトル演算子： $shru$ で表し、C.-R.の横成分3D式を： $\langle shru = 0 \rangle$ としたことである。

すなわち横成分 $curlu$ の計算には($shru = 0$)を、制約条件とする。(その逆も同様。)

同様に、C.-R.の縦成分式も3D化し、2Dの関係式： $\langle \partial u/\partial x - \partial v/\partial y = 0 \rangle$ を、(y-z)2D、(z-x)2Dでも同様に表して、3D演算子 $\langle naiu = 0 \rangle$ でベクトル表示する。

対応して、2Dの $divu$ も同様に、3平面(鏡面)で表して、ベクトル演算子： $imiu$ で表す。

つまり、 ∇u の対角項を $\nabla_{diag}u$ として、和分解形で $\langle 2\nabla_{diag}u = imiu + naiu \rangle$ を表す、と定義した。

$\nabla\psi$ も演算子で、和分解表示して行く。

それら、それぞれ対の変数を互いに“共役変数”と呼ぶものであり、計算安定化(数値 Locking の排除)のために活用する。

要するに、 ∇u は9成分の自由度を有するので、安定計算には9条件式以上必要、とするものである。

また、MBDの3D計算は複雑になるので、3つの鏡面像で2D計算して行くよう、分解表示するものである。

(4) 遷移行列有限要素法

遷移行列法[2][3]は還元法[4]とも呼ばれ、伝達マトリックス法[5]とも邦訳されている。

既報では、遷移行列法は u_i の“有限Taylor級数表示式の1次項以上には剛性 G を乗じて $\nabla F_i (= G\nabla u_i)$ で表す”と説明して来た。

近時、剛性が異なる要素間の勾配の連続性は、 F_i の勾配(応力成分)を連続させるべき境界面と、 u_i の勾配(ひずみ成分)を連続させるべき境界面の、2種類あることに気付いた。(同じ剛性では関係ない特性。)[6]

したがって状態量：{変位、応力}の遷移行列と、 u_i のTaylor級数表示のままの：{変位、ひずみ}の遷移行列を用意し、選択的に適用することとなる。それを“混合変分法”と呼ぶ。

剛性が異なるケースで、一方が $G = \infty$ では、混合変分法でなければ、数値Lockingとして顕れる。

気・液界面では、法線応力により気体粒子は、はじけ飛んでしまう、と表現される現象である。[7]

(5) 遷移行列と離散Helmholtz分解による自然座標系計算法

まず、遷移行列法の特徴は $G = \infty$ の部材・有限要素が組み込めることである。それにより変位・応力のカップリング行列[†]が容易に組み込める。

前述のように、通常、有限Taylor級数で変位の要素関数を表すのに対し、遷移行列有限要素法では、勾配項以上は $\{\nabla F_i, \nabla \nabla F_i, \dots\}_0$ で表す。

したがって変位の、Taylor級数勾配項の、当該係数ベクトル成分は $\{\nabla F_i\}_0/G$ で表す。それにより変位のカップリングが可能となる。

dHd の特徴は、粒子の軌跡(流線)の座標を、 Φ の流通座標で表す点である。(付録2参照のこと。)

したがって、遷移行列法・離散Helmholtz分解法で弾性体・剛体のマルチボディダイナミクスを計算して行ける。

(6) 遷移行列法の変位法への適用

遷移行列法のいまひとつの特性は、アーチなど曲線桁が容易に組み込める点である。ツリー状の系(開いた系: offene Tragwerke [2])を容易に組み込める特性である。

ネット状の系(閉じた系: geschlossene Tragwerke [3])は変位法の特性を活用して組立てる。

変位法でアーチを組み込んだ連立方程式係数行列は、当該部分はバンドマトリックスとなる。

[†] 2点間の $\{w, \theta\}$ および $\{M, Q\}$ のカップリング行列はいずれも $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ 。棒の $\{u\}$ および $\{N\}$ は、いずれも $[1]$ 。

バンド状の部分のみsweep out法で掃き出して前進計算しておけば、残る後退計算用の小行列で、閉じた系でも解いて行ける。

sweep outに代わり、遷移行列を使えば、その小行列をエレガントに計算可能であり、閉じた系にも部分的に活用できる。

(7) 弾性バネで支持される桁・床の遷移行列法計算

単なるピン支持点の連続桁計算は、遷移行列法の最も得意とする問題である。

弾性バネで支持される桁・床の数値計算は、大変困難とされていた。

既報[8]でそれを克服する技法を確立した。

桁の結合点で、同時にバネ支持の機構(枝状結合)とすれば、MBD問題の機構を表している。

したがってこの技法が、本稿コンセプトを提示する切っ掛けともなっている。

2. 基本的技法

(1) 状態ベクトル

状態ベクトルは $\{u, \nabla F\}$ と $\{u, \nabla u\}$ を用意する、とした。

一般の力学書では、いきなり τ_{ij} 、或いは σ_{ij} で法線応力とせん断応力を、並列に説明する。

dHd の観点では、先ず法線応力を説明し、法線応力の横変化分がせん断応力として作用する、と説明できる。

三次元(3D)の六面体で説明すれば(四面体でも同じ)、要素間境界面法線方向は状態ベクトル $\{u, \nabla F\}$ を使って{変位、法線応力}を連続させ、接平面方向は状態ベクトル $\{u, \nabla u\}$ を使って{変位、ひずみ}を計算する。

後者の法線応力は接平面に平行であり、同じ要素内で連続するので、その横変化分がせん断力として、要素間に作用する。

したがって、異種材料の要素間せん断応力は容易に計算可能で、不連続ひずみもそれぞれの要素で容易に計算できる。

同一材料間では従来どおり、 $\{u, \nabla u\}$ を使って計算し、応力はひずみに剛性を乗じて表せる。(上述の方法で計算しても、同じ結果を得る。逆は不可。)

(2) 3Dの2D,1Dへのモデル化とLocking-free法

3D変位ベクトル $\{u, v, w\}$ の(x-y)2Dへのモデル化は、z方向には周期境界の剛体 $\partial w^{\#}/\partial z = 0$ として、 $\{u, v, w^{\#}\}$ で表す。(x-y)平面内内では $\nabla w^{\#} \neq 0$ であり、H-dでは $\nabla w^{\#} \equiv \nabla \Psi_3 \equiv \nabla \Psi$ で表す。($w^{\#} = \text{curl} \psi$ で表し、 ψ を流れ関数と呼ぶ。)

更に、2Dの1Dへのモデル化は、y方向周期境界の剛体 $\partial v^{\#}/\partial y = 0$ として、 $\{u, v^{\#}, w^{\#}\}$ または $\{u, v^{\#}\}$ で表す。

せん断変形 $\langle \partial u/\partial y + \partial v^{\#}/\partial x = 0 + \partial v^{\#}/\partial x = \theta \rangle$ で表すのがTimoshenkoはりモデルであるが、平面保持仮定(Bernoulli-Navierの仮定)による傾角 $\theta = \partial(y\theta)/\partial y$ とは

異なるので、Timoshenkoよりは $\langle \partial v^{\#} / \partial x \equiv \partial \Psi / \partial x \rangle$ で表して、2自由度数 (θ, Ψ) で計算して行く。[9]

上述は2Dの、Mindlin-Reißner板曲げモデルにも適用できる。

MBD計算でも、自由度を確保するLocking-free法として不可欠である。

(3) スカラーポテンシャル Φ による自然座標系表示

自然座標系は、流線(粒子の流れ線)上の粒子(スカラーの質点)を Φ で表し、その移動(変位)を、一般には(MBDでは)空間固定点からの観測値で表す円筒・極座標系を用いる。

dHd ではスカラーポテンシャル Φ を流通座標で表し、変位は流通座標増分で表す。(i.e.; $\mathbf{u} = \Delta \mathbf{X}$.)

シミュレーション初期(静止時)の粒子座標値 \mathbf{X}_p は、当該粒子のデカルト座標値(局所原点 \mathbf{X}_0 からの距離)。

圧縮・非圧縮に拘わらず非圧縮計算は不可欠なので、以下は非圧縮で示す。

1の粒子の変位 \mathbf{u} は $= \Delta \Phi \nabla \Phi$ ($\nabla^2 \Phi = 0$) で表す。($\Delta \Phi$ は増分。)

有限要素内は複数の粒子で表す。それらを有限要素関数で補間して、連続体表示する。

かつ有限要素手法で、頂点ノード k のパラメータ $\{\Phi\}_k$ で表し、要素間連続条件を満たして行く。

ただ、変位 u_i は、要素間界面に並行方向は適合するが、法線方向は非適合となる。

そこで、法線方向は F ($\equiv G\Phi$) (要素)を用いて、 $\{F\}_k$ で(応力の不連続残差を)変分して行く。(混合変分法)

(4) スカラーポテンシャル Φ の運動方程式と離散化 外力荷重下の Φ の運動方程式は式(1)で表される。

$$\frac{D\Phi}{Dt} - G\nabla^2\Phi = 0 \quad (1)$$

時間ステップを $n = 0, 1, 2, \dots$ とし、時間ピッチを Δt とし、先ず n 断面の変位分布をgivenとし、 $(n+0)$ で速度項を、 Φ^{n+1} を未知数として、式(2)で計算する。

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} + (\Phi \nabla \Phi)^n - G(\nabla^2 \Phi)^n = 0 \quad (2)$$

初期値は静止状態とし $(n+0) = (0+0)$ での計算結果は、 $\Phi^{n+1} = 0$ 分布となる。

次いで時間ステップを進めて $n=n+1$ で更新し、 $(n-0)$ で、速度分布をgivenとし、応力項で n 断面の変位分布を、式(3)で計算する。

$$\frac{\Phi^n - \Phi^{n-1}}{\Delta t} + (\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial y})^{n-1} - G(\nabla^2 \Phi)^{(n-0)} = 0 \quad (3)$$

上述2ステップを、望みの状態になるまで反復計算して

行く。(なお、増分: $\Delta \Phi = \Phi^{n+1} - \Phi^n$.)

ただし、式(2)で計算した予測子 Φ^{n+1} は、Coulombゲージ $\langle \nabla^2 \Phi^{n+1} = 0 \rangle$ を満たしてはならない。

それを $\langle \text{imi } \Phi^{n+1} = 0 \rangle$ で表して、鏡面像で計算して行く。

計算法は、式(1)の制約式(最小2乗)として同時に解く陰的解法と、事後に満たす陽的解法とあるが、前者の方を勧める。

計算法は φ 要素を介する方法(MAC法も同じ)による。

(5) 共役変数の概念

Helmholtz分解はCoulombゲージ($\text{div} \psi = 0$)を制約条件とする。変位ベクトル場では体積保存式である。

2Dでは変位増分の和: $(\Delta u + \Delta v = 0)$ を要求するが、それぞれに、桁落ち $|e|$ を含んだ $(\Delta u + e) + (\Delta v - e) = 0$ であっても、2DのCoulombゲージを満たす解である。

$|e|$ を排除するため $(\Delta u + e) - (\Delta v - e) \Rightarrow 0$ を同時に制約条件として、 $(2e \Rightarrow 0)$ とする。

それを共役変数の概念で一般化し、 $(A+B)$ の演算には $(A-B)$ を最小化すべし、とし、 $(A+B)$ と $(A-B)$ を共役変数と呼んでいる。

(6) 横成分に関する計算法について

上述までは、主として縦成分の計算法である。粒子自体は更に自転し、かつせん断変形 $\Phi^{(11)}$ 分小さな公転をする。

それら横成分に関しては、MBD適用の適当な(特別な)具体例で示す必要があり、本稿では省略する。

3. 数値計算例

(1) 計算例1:

“マルチボディシステム“でネット検索の結果、図1の解析例(計算結果は動画)があり、初心者への理論も丁寧、かつ平易に解説されている。

計算例の数式も示されているので、好例として本稿モデルでの再現方法を示す。

本モデルでの数式を示すもので、直接の突き合わせはできないが、スキームのシンプルさを示す目的で示す、ものです。

(2) 有限要素

(変位・ひずみ)要素 と (変位・応力)要素を用意する。

質点を重心に置き $\{\Phi\}_0$ とする。頂点ノードパラメータを $\{\Phi\}_k$ で表す。

双2次要素とし、辺方向を s とし、 $\{\partial^2 \Phi / \partial s^2\}_m$ を中間ノードのパラメータとする。

重心ノードのパラメータは、一般に用いる $\{\Phi\}_0$ ではなく、 $\{\partial^2 \Phi / \partial x \partial y\}_0$ とする。($\{\Phi\}_0$ は従属的に計算する。)

かつ、剛体: $\langle \{\partial^2 \Phi / \partial s^2\}_m = 0, \{\partial^2 \Phi / \partial x \partial y\}_0 = 0 \rangle$ とする。

したがって、頂点ノードの自由度で計算して行く。(双1次要素の自由度数に同じ。)

要は、双2次に対応する状態ベクトルを得るためである。

で計算できる。(ノード番号を $k=0, 1, 2$ で順に表す。)

(3) 境界条件

ピン支持点: $(\{\Phi\}_k = 0)$, バネ支持点: $(K\{\Delta\Phi\}_k \Phi^{(01)})$ のバネ反力, が働く, ただし, 減衰力: $C/\Delta t \{\Delta\Phi\}_k \Phi^{(01)}$ が同時に働く, とする。

要素間のピン結合点では $(\{\Phi\}_k)$ を共有する。

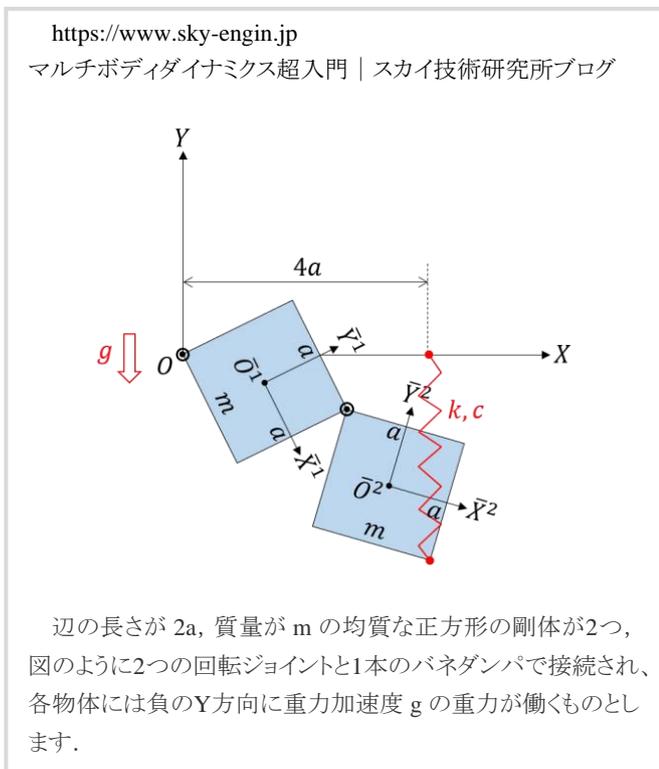


図1 数値計算例

(4) 有限要素法で連立方程式解法

Φ は速度要素とし, 変位は Δt を乗じて計算する。(バネ反力: $\Delta t K\{\Delta\Phi\}_k \Phi^{(01)}$, 減衰: $C\{\Delta\Phi\}_k \Phi^{(01)}$)

連立方程式を組んで解く方法では, 先ず式(4)で, 加速度項分子の $\Delta\Phi$ を計算する。($\rho = 1$ で基準化表示。)

$$\int_{\Omega} [\delta\Phi \cdot (\frac{\Delta\Phi}{\Delta t} - g + (\Phi\nabla\Phi)^n - \nabla^2 F^n) + \delta\nabla\Phi \cdot \nabla F^n] d\Omega = 0 \quad (4)$$

式(4)による予測子はCoulombゲージ $\langle \nabla^1 \Phi^{n+1} = 0 \rangle$ を満たしている必要がある。

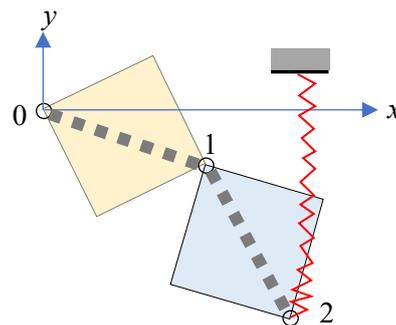
そこで, 陽解法では, 予測子 Φ^{n+1} を式(5)で反復修正する。(m は反復回数: $m=0, 1, 2, \dots$)

$$\int_{\Omega} [\delta\nabla\Phi \cdot (\nabla\Delta\Phi^{n+1} + \frac{1}{2}(\nabla^1\Phi^{n+1})^{m-1})] d\Omega = 0 \quad (5)$$

反復計算し, 収束すれば時間ステップを進める。

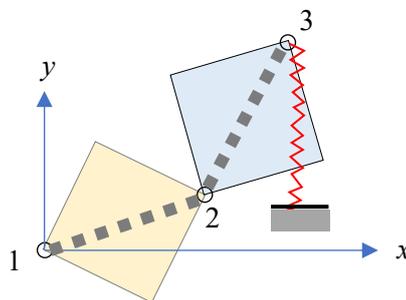
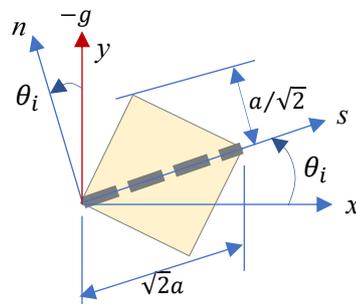
(5) 遷移行列法による解法

本モデルは開いた系(連続桁)なので, 遷移行列法のみ



剛体連続桁の遷移行列モデル

θ_i が正の姿勢の記号を次に示す。(例ではこの $+\theta_i$ の状態は生じない。)



剛体連続桁の遷移行列モデル

たわみ方向を z 軸, たわみを w とし, 材軸方向を x, u で表す。

重力 ρg は桁に, 三角形分布で掛かるので, 5次関数の要素が必要である。

開いた系へ $\{u, v, w\}$ で表す遷移行列法は, 3次元曲線桁(インターチェンジの高速道路桁など)などへの適用でも完成している。

ここではそれを Φ 要素で表す方法に翻訳するものである。(ただ

近時, MBDへの $\{u, v, w\}$ で表す遷移行列法の移転は, 殆どなされていないことを知った。)

連続桁計算ではたわみ w を変数にするが, dHd では Φ を流通座標表示するので, $w = \Delta\Phi\Phi^{(01)}$ で表す。

[付録 2] 流線上移動粒子の流通座標表示と回転

Φ は流通座標で表し、モデル粒子の Φ は、流れ場では流線上に在る。(定義では、質量粒子の軌跡が流線.)

Φ は流線の長さであり、流通座標値の変化は $\Delta \mathbf{X} = \mathbf{u}$ である。

ここでは固体のベクトル場も表す意味を込め、かつ離散表示する意味も込めて、流線を“粒線”とも呼ぶ、とする。

つまり、1 粒子の Φ の Lagrange 座標を流通座標で表す。或いは 1 粒線を流通座標で表す。

粒子-メッシュ法では、粒線群を流通座標表示し、粒線群を、有限要素関数で補間して連続表示する。

粒線の接線方向、および主法線・陪法線方向を軸として表した座標を、粒線座標 (Lagrange 座標) とすれば、横成分は主法線・陪法線方向のひずみ・応力としても表れる。

ただ、粒子の自転は接線軸周りのみではなく、他の軸周りもある。そこで $\text{curl} \Psi$ も流通座標で表す。

1 粒子の流通座標を \mathbf{X}_p で表し、初期 (静止時) 座標を \mathbf{X}_0 で表すとする。

$\nabla \Phi$ も流線座標で表した勾配となる。

dHd では $\nabla \Phi = \nabla_{diag} \Psi$ で表すとした。 Φ のデカルト座標上の増分である。つまりは方向余弦であり、 Φ は非圧縮を表すとしているので、 $\nabla^2 \Phi = 0$ である。

$\nabla \Phi$ は法線ひずみ (のデカルト座標表示) であり、相対量である。

静止時からの Φ の、方向別増分は $\Phi \nabla \Phi$ である。

時間ピッチ Δt 間の増分を $\Delta \Phi$ とすれば、 Δt 間の流通座標の増分: $= \mathbf{u}$ (非圧縮変位) であり、 $\mathbf{u} = \Delta \Phi \nabla \Phi$ である。

体積変化の増分は $\Delta \Phi^c \nabla^2 (\Phi + \Delta \Phi^c)$ とし、一般解 $\nabla^2 \Phi = 0$ を加えて表す。

$\Delta \Phi \nabla \Phi$ は座標回転して $= \mathbf{u}(s, n, \zeta)$ (:非圧縮, Lagrange 座標. s が接線方向.) でも表す。

dHd では $\nabla_{diag} \Psi = \nabla \Phi$ と定義したので $\Delta \Phi \nabla_{diag} \Psi = \mathbf{u}$ であり、 Ψ の Taylor 展開 1 次の項 $\langle \Delta \mathbf{X}_p \cdot \nabla \Psi \rangle$ を速度表示 $\langle = \Delta t \Psi \cdot \nabla \Psi \rangle$ して、縦成分 $\langle = \Delta t \Psi_i \nabla_{diag} \Psi \rangle$ に着目すれば、 $\langle \Delta t^2 \Phi^2 = \Delta t^2 (\Psi_1^2 + \Psi_2^2 + \Psi_3^2) \rangle$ であり、 Φ は接線方向速度である。

(速度 Φ の) $\Delta t \Phi \nabla \Phi$ が $\Delta \mathbf{X}_p / \Delta t = \mathbf{u}_p / \Delta t$ である。

デカルト (Eulerian) 座標型では $\langle U_i = \Psi_j \nabla \Psi_i \rangle$ であり、非定常では加速度項を加えて物質微分表示する。

流線 (Lagrangian) 座標型でも、流通座標表示では、同様である。

粒子自身は $\text{curl} \Psi$ 分自転する。正確には $\text{shr} \Psi$ 分小さく公転しながら自転する。

$\Delta \Phi \nabla \Phi = \mathbf{u}$ は流通座標で表示するとしたが、変位に追従して表す座標 (粒線座標) であり、固体では有限変形理論の変位に追従して表す“有限変位座標”とも呼べよう。

有限変位座標表示の有限変位ベクトル $\Delta \Phi \nabla \Phi$ は、非線形であることに留意する。

準静的载荷の仮想時間 Δt 後には、時間ステップを $n = 0, 1, 2, \dots$ として、 $\mathbf{u}^{n+1} = (1 + \Delta t) (\Delta \Phi \nabla \Phi)^n = (\Delta \Phi \nabla \Phi)^{n+1}$ であり、離散計算では仮想時間 Δt は小さいほど、当然乍ら、粒線を精度高く表せる。

任意のベクトル場を表すとする dHd では、 $\mathbf{u} = \nabla^2 \psi$ である。(ただし, in case ($\text{div} \psi = 0$).)

渦度の表示に関しては次の通りである。

上述で、回転 $\text{curl} \Psi$ もデカルト座標で表すとした。

$\text{curl} \Psi_3$ が x - y 鏡面上の、流れ関数表示の渦度である。

ただし、 Ψ_3 は本来 3D 表示であり、2D では z 軸方向は剛体 ($\partial \Psi_3 / \partial z = \partial w^{\#} / \partial z = 0$) であるが、スライスした x - y 鏡面上の像は z 軸方向に、パラパラ漫画の如く変動する。それを、小さく公転しながら自転する、と表現した。

3D の $\partial \Psi_3 / \partial z \neq 0$ 分が公転で、 $\langle \partial \Psi_3 / \partial y - \partial \Psi_3 / \partial x \rangle$ 分が自転 (渦度・剛体回転) である。

地球の公転が粒線とすれば、月は地球の周りを小さく公転しながら、自転する、と考える。

小さな公転を $\text{shr} \Psi$ で表し、自転を $\text{curl} \Psi$ で表示するものである。(月の裏側は、地球からは見えない。)

かつ、 Ψ_3 の z 軸周り x - y 鏡面像のみではなく、 Ψ_1, Ψ_2 の小さな公転・自転も在り、複雑に回転する。

参考文献

- [1] 例えば、数学ハンドブック p.p.258, 丸善, 1960.
- [2] Falk, S.: Die Berechnung offener Rahmentragwerke nach dem Reduktionsverfahren, Ingenieur-Archiv 26 (1958), S.61-80.
- [3] Falk, S.: Die Berechnung geschlossener Rahmentragwerke nach dem Reduktionsverfahren, Ingenieur-Archiv 26 (1958), S.96-109.
- [4] R. Kersten 著, 伊藤学訳: 構造力学における還元法, 技法堂, (1968).
- [5] 成岡, 遠田: 伝達マトリックス法, コンピュータによる構造工学講座 I-2-B, 培風館, (1970).
- [6] 今村: 有限要素混合変分法: 准 C^1 連続な有限要素法, 計算工学講演会論文集, Vol.27, 2023.
- [7] 越塚誠一: 数値流体力学, p.p.185, 培風館, 1997.
- [8] 今村: 海上交通評価のための人口航跡作成法の一案, 日本航海学会論文集, vol.76, p.p.1-10, 1993-3
- [9] 今村: 離散 Helmholtz 分解 (dHd) 表示に基づく Mindlin 板理論・ティモシェンコはり理論の考察と精解モデルの提案, 理論応用力学論文集, 2022.

OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓

[E-10] OS15 マルチメソッド・新数値解析手法開拓 (5)

座長:森田 直樹(筑波大学)

Fri. Jun 2, 2023 9:00 AM - 10:15 AM Room E (2F Conference Room 202A)

[E-10-01] Flow-driven piezoelectric energy harvesterの解析

*金子 栄樹¹、吉村 忍¹ (1. 東京大学)

9:00 AM - 9:15 AM

[E-10-02] Numerical Simulation of the Interactions between an Off-road Pneumatic Tire and Gravel Terrain Using a Multi-sphere DE-FE Method

*Guo Xiaobing¹、Zheng Zumei²、Mitsume Naoto¹、Zang Mengyan³、Chen Shunhua⁴ (1. University of Tsukuba、2. Qilu University of Technology、3. South China University of Technology、4. Sun Yat-sen University)

9:15 AM - 9:30 AM

[E-10-03] 高次有限要素を用いた Helmholtz 方程式の大規模並列解析

*塚本 顕成¹、馬込 望¹、三目 直登¹ (1. 筑波大学)

9:30 AM - 9:45 AM

[E-10-04] Improved Ghost Cell Boundary モデルを用いた ISPH 法による流体剛体連成解析

*常見 隆幸¹、大村 浩之¹、三目 直登¹ (1. 筑波大学)

9:45 AM - 10:00 AM

[E-10-05] セラミックス材料に対するマイクロカンチレバー試験の数値シミュレーション

*犬塚 康介¹、村本 真悠子¹、松井 和己¹、山田 貴博¹、多々見 純一¹ (1. 横浜国立大学)

10:00 AM - 10:15 AM

Flow-driven piezoelectric energy harvesterの解析

Numerical Analysis of Flow-Driven Piezoelectric Energy Harvester

金子栄樹¹⁾, 吉村忍²⁾

Shigeki Kaneko and Shinobu Yoshimura

- 1) 博(工) 東京大学工学系研究科 助教 (〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1, E-mail: s_kaneko@save.sys.t.u-tokyo.ac.jp)
2) 工博 東京大学工学系研究科 教授 (〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1, E-mail: yoshi@sys.t.u-tokyo.ac.jp)

Recently, an aircraft using highly flexible, light weight, and high-aspect ratio wings has been investigated. Since such wings often undergo large deformation, they easily exhibit a post flutter phenomenon. Although destructive vibration should be suppressed, some researchers have been working on energy harvesting from the flow-induced vibration while a certain magnitude of vibration is allowed. We have been tackling this problem by numerical approaches. In the previous study, we proposed a coupled analysis system for flow-driven piezoelectric energy harvesting. In this study, we show two numerical simulations to verify the analyses of piezoelectric energy harvesting and flow-driven piezoelectric energy harvesting.

Key Words : Coupled analysis, Partitioned iterative approach, Fluid-structure interaction, Piezoelectric energy harvesting

1. 緒言

近年、環境モニタリングのためにHigh-altitude and long-endurance (HALE) 飛行を行う無人航空機の開発がすすめられている[1]. この航空機の実現のために柔軟、軽量そして高アスペクト比の翼の使用が検討されているが、このような翼は大変形を生じやすく、結果としてフラッタ現象を発現することがしばしばある。破壊的な振動は制振されるべきだが、ある程度の振動を許容し、圧電素子を用いてエネルギーハーベストを行い、センサなどの低電力デバイスの電力供給源とすることが検討されている[2].

人工物の設計のためには数値解析が便利であり、圧電素子による機械振動からのエネルギーハーベストに関する数値研究例は多く報告されている[3, 4, 5]. しかし、流体励起振動からのハーベストを対象とした数値研究例はまだ数が少ない。フラッタ現象を精緻にとらえるには、流体や構造由来の非線形性を正しく評価する必要がある。そのため空力解析で一般的なポテンシャル流れベースの方法では不十分であり、詳細な流体構造連成 (Fluid-structure interaction: FSI) 解析が有用であると考えられる。

著者らはこれまでに圧電素子モデルを含む有限要素法ベースのFSI解析システムを開発してきた[6]. そして、その解析システムに回路解析を導入することで、流体駆動の圧電エネルギーハーベスタの解析システムを構築した[7]. 本研究では、そのシステムの妥当性検証に取り組んだ。まず、周囲流体を無視したピュアな圧電エネルギーハーベスタの解析を行う。既存の実験の結果と比較をすることで妥当性検証を行った。次に流体駆動の圧電エネルギーハーベスタの解析を行った。Turekらの有名なベンチマーク問

題[8]を参考に問題を設計した。構造物の固有振動数と渦放出周波数が近いほど振動が増大しエネルギーの回収率が大きくなる、ということが予想され、それが再現できるか確認を行った。

2. 基礎方程式

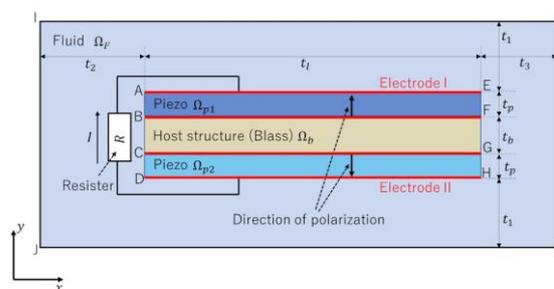


図-1 流体駆動の圧電エネルギーハーベスタの模式図

図1に流体駆動の圧電エネルギーハーベスタの模式図を示す。簡単のためにホストストラクチャの上下に圧電素子が貼り付けられた形状を扱う。圧電素子は電極によって挟まれている。電極I(AE)と電極2(DH)は抵抗を有する回路によって繋がられている。エネルギーハーベスタによって回収されるエネルギーは抵抗によって消費されるエネルギーでモデル化される。これは一般的なエネルギーハーベスタのモデリング方法である。なお電極や回路の形状は無視できるものとし構造物としてのモデリングは行わない。この章では解くべき支配方程式を説明する。

流体はArbitrary Lagrange Eulerian記述された以下のNavier-Stokes方程式によって支配される。

$$\rho^F \left(\frac{\partial \mathbf{v}^F}{\partial t} + (\mathbf{v}^F - \hat{\mathbf{v}}^F) \cdot \nabla \mathbf{v}^F \right) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^F = \rho^F \mathbf{b}^F \quad (1)$$

ここで \mathbf{v}^F は流速, $\hat{\mathbf{v}}^F$ はメッシュ速度, ρ^F は流体密度, $\boldsymbol{\sigma}^F$ は流体の応力テンソル, \mathbf{b}^F は物体力を表す. 本研究では応力テンソルは次のように定義される.

$$\boldsymbol{\sigma}^F = -p^F \boldsymbol{\delta} + \mu (\nabla \mathbf{v}^F + \nabla \mathbf{v}^{F^T}) \quad (2)$$

ここで p^F は圧力, $\boldsymbol{\delta}$ は Kronecker のデルタ, μ は粘度を表す. さらに流れの非圧縮性を仮定し,

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^F = 0 \quad (3)$$

の連続の式が成立する.

圧電素子の挙動は機械と電気の連成現象であり, 機械的な運動は以下のCauchyの第一運動法則により支配される.

$$\rho^S \frac{D^2 \mathbf{u}^S}{Dt^2} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^S = \rho^S \mathbf{b}^S \quad (4)$$

ここで \mathbf{u}^S は構造変位, ρ^S は構造密度, $\boldsymbol{\sigma}^S$ は構造の応力テンソル, \mathbf{b}^S は物体力を表す. また電氣的な平衡状態は即時満たされるものとし準静的過程を仮定しており, 静電場の支配方程式は以下の Gauss の法則である.

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = q \quad (5)$$

ここで \mathbf{D} は電束密度, q は表面電荷を表す. 機械的および電氣的現象は以下の構成則により結合される.

$$\mathbf{S} = \mathbb{D} \mathbf{e}$$

$$\mathbf{e} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon} \\ \mathbf{E} \end{bmatrix}, \mathbf{S} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma}^S \\ -\mathbf{D} \end{bmatrix}, \mathbb{D} = \begin{bmatrix} \mathbb{C} & -\mathbf{e} \\ -\mathbf{e}^T & -\boldsymbol{\epsilon} \end{bmatrix} \quad (6)$$

ここで $\boldsymbol{\varepsilon}$ はひずみ, \mathbf{E} は電場, \mathbb{C} は弾性係数, \mathbf{e} は圧電係数, $\boldsymbol{\epsilon}$ は誘電率を表す. このとき圧電係数をすべて0とすると機械と電気の相互作用は無くなり一般的な弾性体をモデリングすることになる.

ホストストラクチャは導電体であり, また接地されていると考え0Vの等電位条件を有する.

$$\phi = 0 \quad \text{in } \Omega_b \quad (7)$$

同様に電極上でも以下のような等電位条件が成立する.

$$\begin{aligned} \phi &= \bar{\phi}^1 & \text{on AE} \\ \phi &= \bar{\phi}^2 & \text{on BF} \\ \phi &= 0 & \text{on CG and DH} \end{aligned} \quad (8)$$

回路に関する支配方程式として次の Ohm の法則が成立する.

$$I = \frac{(\bar{\phi}^2 - \bar{\phi}^1)}{R} \quad \text{in } \Omega_b \quad (9)$$

ここで I は電流, R は抵抗を表す. また次の電荷保存則が成立する.

$$I = \frac{dQ^1}{dt} = -\frac{dQ^2}{dt} \quad (10)$$

ここで Q^1 と Q^2 は電極1と2に蓄えられた電荷を表す.

実現象とは関係ないが ALE 法を用いているため流体メッシュの更新のための式も解く必要がある. 本研究では擬似弾性体スミージング[9]を用いている. これまでに述

べた式は分離型反復解法によって解かれる.

3. 解析システム

(1) 圧電エネルギーハーベスタの解析システム

まず周囲流体を考慮しない, ピュアな圧電エネルギーハーベスタの解析システムを図2に示す. 電極1と2の電位を未知変数とし非線形ソルバを実行する. システムは2つのサブシステムを有しており, 一つは圧電-構造の一体型解析, そして二つは回路解析である. 前者では電極1と2の電位が電氣的な基本境界条件として課される. 解析後, 電極上の電荷が計算される. 後者ではまず式(9)が解かれ電流が計算される. その後, 式(10)により電極上の電荷が計算される. 電極上の電荷をもとに残差 \mathbf{r}^Q は定義される.

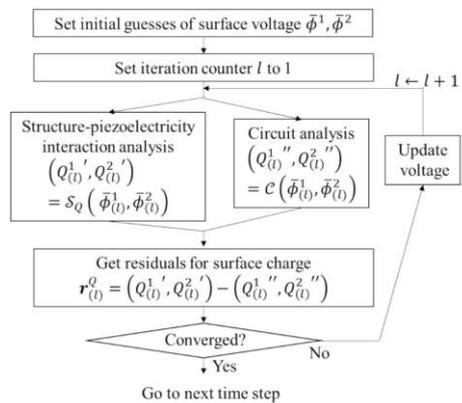


図-2 圧電エネルギーハーベスタの解析システム

(2) 流体駆動の圧電エネルギーハーベスタの解析システム

FSI解析の一般的な解法の1つとしてDirichlet-Neumann型の分離型反復解法[10]があげられる. この解法では構造変形を未知変数として非線形ソルバが実行される. 三つのサブシステムを有し流体メッシュ更新, 流体解析および構造解析が反復的に行われる. この解法を拡張し流体駆動の圧電エネルギーハーベスタの解析システムを構築する. 具体的には構造解析を前節で示した圧電エネルギーハーベスタの解析に置換する. 図-3に解析システムのフローチャートを示す. 結果としてFSIのための非線形ソルバのループの中に圧電エネルギーハーベスタのための非線形ソルバのループが入ることになる. ただし構造モデルの自由度数は流体モデルのそれに比べ, かなり小さい場合が多く, 圧電エネルギーハーベスタの解析の計算負荷は大きくないと考えられる. 本研究では言及しないが非線形ソルバのループが1つで済むような定式化も可能である. しかしコードの可読性を優先し図-3のようなシステムを設計した.

4. 数値解析例

(1) 圧電エネルギーハーベスタの解析

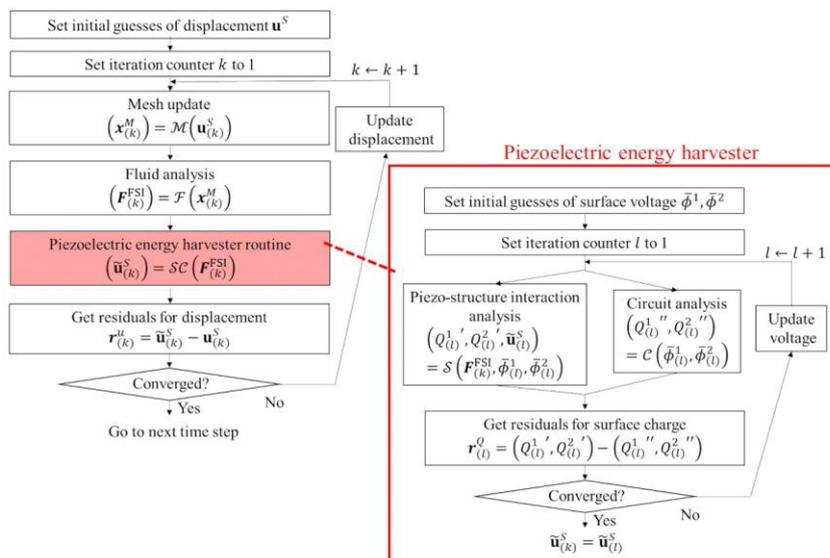


図-3 流体駆動の圧電エネルギーハーベスタの解析システム

duToitらの行った実験[11]を再現し、彼らの実験結果と比較を行った。 $t_l = 55$, $t_p = 0.27$, $t_h = 0.14$ である。ただし単位はmmである。圧電素子はPZT-5Aを、ホストストラクチャにはBlassを用いている。根元(図-1のAD)を共振周波数で加振し抵抗値を2000 Ω としたときのハーベスタの起電力の時刻歴応答を図-4に示す。なお既存研究との比較の結果は口頭発表時に詳細に説明する。

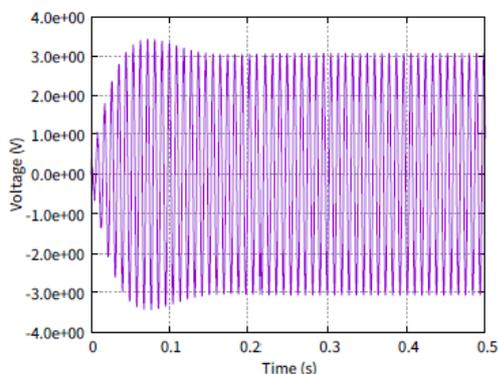


図-4 ハーベスタの電位の時刻歴応答

を行った。

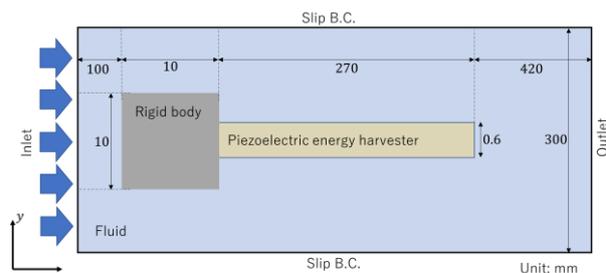


図-5 解析対象のジオメトリ

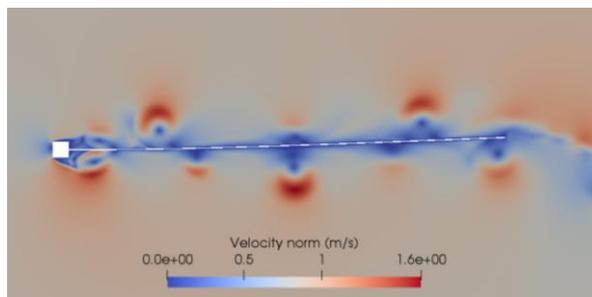


図-6 20秒後における構造物周辺の流速分布

(2) 流体駆動の圧電エネルギーハーベスタの解析

図-5に解析の対象を示す。一様流れ内に柔軟プレート付きの剛体の角柱シリンダーを配置する。柔軟プレートは後流によって励振される。柔軟プレートは前節と同様の構造である。ただし形状は異なり $t_l = 270$, $t_p = 0.2$, $t_h = 0.2$ である。周囲流体は空気である。図-6に流入速度が0.85 m/sのときの20秒後のスナップショットを示す。このような流体励起振動からどのようなエネルギーを回収できるかについては口頭発表時に詳しく説明する。

5. 結言

本研究では流体駆動の圧電エネルギーハーベスタに関する連成解析を行った。2種類の解析を行い妥当性の検証

参考文献

- [1] Partil, M. et al., "Nonlinear Aeroelasticity and Flight Dynamics of High-Altitude Long-Endurance Aircraft", *J. Aircr.*, Vol. 38, (2001), pp. 88-94.
- [2] Tsushima, N., and Su, W., "Modeling of Highly Flexible Multifunctional Wings for Energy Harvesting", *J. Aircr.*, Vol. 53, (2016), pp. 1033-1044
- [3] Sodano, H. et al., "Estimation of Electric Charge Output for Piezoelectric Energy Harvesting", *Strain*, Vol. 40, (2004), pp. 49-58.
- [4] Elvin, N., and Elvin, A., "A Coupled Finite Element-Circuit Simulation Model for Analyzing Piezoelectric

- Energy Generators”, *J. Intell. Mater. Syst. Struct.*, Vol. 20, (2009), pp. 587-595.
- [5] Ravi, S., and Zilian, A., “Monolithic Modeling and Finite Element Analysis of Piezoelectric Energy Harvesters”, *Acta Mech.*, Vol. 228, (2017), pp. 2251-2267.
- [6] Kaneko, S. et al., “Numerical Study on Active Control by Piezoelectric Materials for Fluid–Structure Interaction Problems”, *J. Sound Vib.*, Vol. 435, (2018), pp. 23-35.
- [7] Kaneko, S. et al., “Circuit-integrated fluid-structure-piezoelectricity interaction analysis for flow-driven energy harvesters”, WCCM, No. 15, Yokohama, Japan (Online), August, 2022.
- [8] Turek, S., and Hron, J., “Proposal for Numerical Benchmarking of Fluid–Structure Interaction Between an Elastic Object and Laminar Incompressible Flow”, In: *Fluid-Structure Interaction*, Springer, Berlin, (2006) 371-385.
- [9] Tezduyar, T.E. et al., “Computational of unsteady incompressible flows with the stabilized finite element methods: space-time formulations, iterative strategies and massively parallel implementations”, *New Methods in Transient Analysis*, Vol.246, (1992), pp.7-24.
- [10] Minami, S., and Yoshimura, S., “Performance Evaluation of Nonlinear Algorithms with Line-search for Partitioned Coupling Techniques for Fluid–Structure Interactions”, *Int. J. Numer. Methods in Fluids*, Vol. 64 (2010), pp. 1129-1149.
- [11] duToit, N., and Wardle, B., “Experimental verification of models for microfabricated piezoelectric vibration energy harvesters”, *AIAA J.*, Vol. 45 (2007), pp. 1126-1137.

Numerical Simulation of the Interactions between an Off-road Pneumatic Tire and Gravel Terrain Using a Multi-sphere DE-FE Method

Xiaobing Guo¹⁾, Zumei Zheng²⁾, Naoto Mitsume³⁾, Mengyan Zang⁴⁾ and Shunhua Chen⁵⁾

1) Ph.D (Institute of Systems and Information Engineering, University of Tsukuba 1-1-1, Tennodai, Tsukuba, Ibaraki, 305-8573, Japan, E-mail: guo.xiaobing.gn@u.tsukuba.ac.jp)

2) Ph.D (School of Mechanical Engineering, Qilu University of Technology, Jinan, 250353, China, E-mail: zhengzumei10@qlu.edu.cn)

3) Assistant Professor (Institute of Systems and Information Engineering, University of Tsukuba 1-1-1, Tennodai, Tsukuba, Ibaraki, 305-8573, Japan, E-mail: mitsume@kz.tsukuba.ac.jp)

4) Professor (School of Mechanical & Automotive Engineering, South China University of Technology, Guangzhou, 510641, China, E-mail: myzang@scut.edu.cn)

5) Associate Professor (School of Marine Engineering and Technology, Sun Yat-sen University, Zhuhai, 519082, China, E-mail: chenshunhuascut@gmail.com)

In this work, a combined multi-sphere discrete element and finite element (DE-FE) method is developed to simulate the interactions between an off-road pneumatic tire and gravel terrain in a natural way. Firstly, several kinds of multi-sphere gravel particle models (GPMs) are established, and the multi-sphere DE-FE model is constructed on the basis of the soil-bin experiment. Then the tractive performance of an off-road pneumatic tire on gravel terrain is simulated. The results show that the simulation results obtained by the multi-sphere DE-FE method are consistent with the experimental data, and our developed method can reproduce the tractive behavior of off-road tires on gravel terrain well.

Key Words : *Multi-sphere DE-FE method, Tractive performance, Soil-bin experiment*

1. INTRODUCTION

The interactions between off-road tire and granular terrain have a great influence on the tractive performance of tire, and are attracting more and more attention from scholars in vehicle engineering. In recent years, many numerical techniques have proposed to investigate the tire-terrain interactions, such as discrete element method (DEM) [1], finite element method (FEM) [2] and combined discrete element-finite element (DE-FE) method [3–5]. In the combined DE-FE method, the FEM was used to describe the large deformation of the off-road tire, while the DEM was employed to capture the discontinuous characteristics of granular terrain.

Even though the combined DE-FE method can basically simulate the traveling behaviors of a tire on granular terrain, the granular particles were usually described by using circular DEs (in the two-dimension simulation) or spherical DEs (in three-dimensions), which may affect the computational accuracy of simulation results. In view of this, some researchers proposed two main approaches to model

non-spherical granular particles: one is to add an artificial rolling resistance moment or a shape parameter in spherical DEs to deal with the interlocking mechanism between irregular granular particles; The other one is to establish a more accurate particle model, such as ellipsoid model, polyhedron model and multi-sphere model. In this work, a multi-sphere DE-FE method is developed to handle the interactions between an off-road tire with smooth tread and gravel terrain by using multi-sphere model.

2. MODELING OF GRAVEL PARTICLES

The multi-sphere model, proposed by Favier et al. [6], is an approximation method to simulate the non-spherical shapes of real granular particles, where one multi-sphere particle can be constructed using a set of elemental spheres. In our soil-bin experiment, all gravel particles are filtered by the sieving test to keep the particle sizes within a specified range, i.e., the radii of gravel particles are distributed from 5 to 7 mm randomly, as illustrated in Fig. 1. Herein, three simple kinds of multi-sphere

gravel particle models (GPMs) are established, i.e., cylindrical GPM, conical GPM and cubical GPM, as shown in Fig. 2.



Fig. 1 Gravel particles

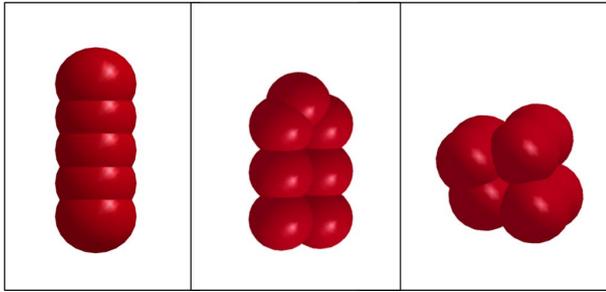


Fig. 2 Modeling diagram of multi-sphere GPMs

3. COMBINED METHOD OF MULTI-SPHERES AND FES

For the contact calculations of multi-sphere DEs and FEs, the inside-outside algorithm [7] is carried out to determine the contact types and the Hertz-Mindlin contact Model [8] is carried out applied in the calculations of contact forces.

(1) Contact types

Fig. 3 shows three potential contact regions between an elemental sphere and a FE segment, i.e., point-to-facet (PTF), point-to-edge (PTE) and point-to-node (PTN).

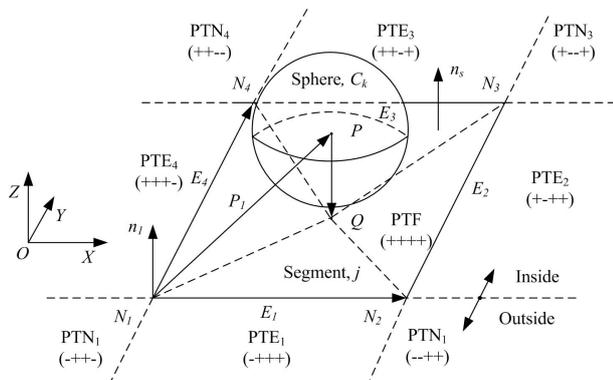


Fig. 3 Three potential contact regions: PTF, PTE and PTN

Firstly, the normal vector of FE segment at each node can be defined by the cross product of two connective edge vectors:

$$\mathbf{n}_i = \mathbf{E}_i \times (-\mathbf{E}_i) \quad (i = 1, 2, 3, 4) \quad (1)$$

where \mathbf{E}_i is the edge vector, and \mathbf{E}_0 is equivalent to \mathbf{E}_4 .

Hence, the normal vector of FE segment is determined as:

$$\mathbf{n}_s = \frac{\sum_{i=1}^4 \mathbf{n}_i}{\left| \sum_{i=1}^4 \mathbf{n}_i \right|} \quad (2)$$

Secondly, the judgement value can be calculated by:

$$\varphi_i = (\mathbf{E}_i \times \mathbf{P}_i) \cdot \mathbf{n}_s \quad (i = 1, 2, 3, 4) \quad (3)$$

where \mathbf{P}_i is the direction vector from point N_i to point P .

Finally, the contact types can be determined by the judgement values:

a) PTF contact type: When $\varphi_i > 0$ ($i = 1, 2, 3, 4$), the elemental sphere may be in contact with the facet of FE segment, and the coordinate of projection point Q can be calculated by the following formula:

$$\mathbf{X}_Q = \sum_{i=1}^4 \phi_i \mathbf{X}_{N_i} \quad (i = 1, 2, 3, 4) \quad (4)$$

where \mathbf{X}_{N_i} is node coordinates; ϕ_i is the shape functions, and $\phi_1 = \varphi_2 \varphi_3 / \varphi$, $\phi_2 = \varphi_3 \varphi_4 / \varphi$, $\phi_3 = \varphi_4 \varphi_1 / \varphi$, $\phi_4 = \varphi_1 \varphi_2 / \varphi$, $\varphi = (\varphi_1 + \varphi_3) / (\varphi_2 + \varphi_4)$.

In this case, the penetration between elemental sphere and FE segment is defined by:

$$h_{es} = (\mathbf{X}_P - \mathbf{X}_Q) \cdot \mathbf{n}_s - r \quad (5)$$

where \mathbf{X}_P is the center coordinate of elemental sphere, and r is the radius. If $h_{es} < 0$, the elemental sphere contacts the facet of FE segment. If $h_{es} \geq 0$, the contact is not occur.

b) PTE contact type: When $\varphi_1 < 0$ and $\varphi_i < 0$ ($i = 2, 3, 4$), the elemental sphere may contact edge E_1 (so do as other edges). The unit vector \mathbf{e}_{E_1} of the edge is given by:

$$\mathbf{e}_{E_1} = (\mathbf{X}_{N_2} - \mathbf{X}_{N_1}) / |\mathbf{X}_{N_2} - \mathbf{X}_{N_1}| \quad (6)$$

The projection point on edge is defined by:

$$\mathbf{X}_Q = \mathbf{X}_{N_1} + (\mathbf{X}_{N_2} - \mathbf{X}_{N_1}) \cdot t_{N_1} \quad (7)$$

In which,

$$t_{N_1} = \left((\mathbf{X}_P - \mathbf{X}_{N_1}) \cdot \mathbf{e}_{E_1} \right) / |\mathbf{X}_P - \mathbf{X}_{N_1}| \quad (8)$$

The penetration can be calculated by:

$$h_{es} = |\mathbf{X}_P - \mathbf{X}_Q| - r \quad (9)$$

If $h_{es} < 0$, the contact between elemental sphere and the edge of FE segment is occur. If $h_{es} \geq 0$, no contact.

c) PTN contact type: When $\varphi_1 < 0$, $\varphi_2 > 0$, $\varphi_3 > 0$ and $\varphi_4 < 0$, the elemental sphere contacts point N_1 (so do as other nodes) and the penetration is:

$$h_{es} = |\mathbf{X}_P - \mathbf{X}_{N_1}| - r \quad (10)$$

If $h_{es} < 0$, the elemental sphere and the FE segment will be in contact. Otherwise, the contact does not occur.

(2) Contact forces

As depicted in Fig. 4, the contact forces between an elemental sphere in multi-sphere particle i and a FE segment j can be calculated by:

$$\mathbf{F}_{n,iCkj}^c = \mathbf{F}_{n,iCkj} + \mathbf{F}_{t,iCkj} \quad (11)$$

where $\mathbf{F}_{n,iCkj}$ and $\mathbf{F}_{t,iCkj}$ are, respectively, the normal and tangential contact forces, and can be obtained by:

$$\mathbf{F}_{n,iCkj} = k_{n,iCkj} \mathbf{h}_{iCk} + \gamma_{n,iCkj} \mathbf{v}_{n,iCkj} \quad (12)$$

When $|\mathbf{F}_{t,iCkj}| < \mu |\mathbf{F}_{n,iCkj}|$, the tangential contact forces are:

$$\mathbf{F}_{t,iCkj} = k_{t,iCkj} \boldsymbol{\sigma}_{iCkj} + \gamma_{t,iCkj} \mathbf{v}_{t,iCkj} \quad (13)$$

Otherwise, the tangential contact forces are given by:

$$\mathbf{F}_{t,iCkj} = \mu \mathbf{F}_{n,iCkj} \quad (14)$$

where \mathbf{h}_{iCk} represents the penetration calculated by the above section. $\mathbf{v}_{n,iCkj}$ and $\mathbf{v}_{t,iCkj}$ are the normal and tangential relative velocities on the contact point, respectively; $\boldsymbol{\sigma}_{iCkj}$ is the tangential relative displacement; $k_{n,iCkj}$ and $k_{t,iCkj}$ mean the normal and tangential stiffness, respectively, which can be defined as:

$$k_{n,iCkj} = \frac{4}{3} \left(E_{iCk} E_j \left(E_{iCk} (1 - \nu_j^2) + E_j (1 - \nu_{iCk}^2) \right) \right) R_{iCk}^{1/2} h_{es}^{1/2} \quad (15)$$

$$k_{t,iCkj} = \frac{16}{3} \left(G_{iCk} G_j \left(G_{iCk} (1 - \nu_j) + G_j (1 - \nu_{iCk}) \right) \right) R_{iCk}^{1/2} h_{es}^{1/2}$$

where E_{iCk} and E_j denote the Young's moduli of the multi-sphere particle and the finite element, respectively; ν_{iCk} and ν_j are the Poisson's ratios, respectively; G_{iCk} and G_j are the equivalent elastic shear moduli, that is:

$$G_{iCk} = E_{iCk} / (2(1 + \nu_{iCk})) \quad (16)$$

$$G_j = E_j / (2(1 + \nu_j))$$

$\gamma_{n,iCkj}$ and $\gamma_{t,iCkj}$ denote the normal and tangential damping coefficients, and they can be calculated as:

$$\gamma_{n,iCkj} = -\zeta_{n,iCkj} m_{iCk} m_j / (m_{iCk} + m_j) \quad (17)$$

$$\gamma_{t,iCkj} = -\zeta_{t,iCkj} m_{iCk} m_j / (m_{iCk} + m_j)$$

where m_{iCk} , m_j , $\zeta_{n,iCkj}$ and $\zeta_{t,iCkj}$ are the mass and the damping factors in the normal and tangential directions, respectively.

Additionally, R_{iCkj} is the equivalent radius of elemental sphere and FE, $R_{iCkj} = R_{iCk} R_j / (R_{iCk} + R_j)$, which is equal to

the radius of element sphere here.

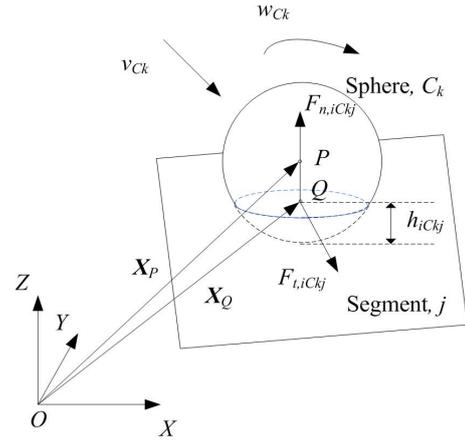


Fig. 4 Contact forces between elemental sphere and FE segment

4. EXPERIMENT AND SIMULATION MODEL

In order to analyze the tractive performance of an off-road tire on gravel terrain, an indoor soil-bin experiment device was developed in this section, which includes (1) single wheel test device, (2) soil mixing and compacting device and (3) soil-bin and control system, as depicted in Fig. 5. Among them, the nominal size of off-road tire is $37 \times 12.5R16.5AR117$ with a radius of 445 mm and a width of 310 mm.

To correspond with the soil-bin experiment, a combined multi-sphere DE-FE model is established, as shown in Fig. 6, where the gravel terrain is constructed by using multi-sphere GPMs, and the FE method is used to model the off-road tire. In the FE tire modeling, the rubber parts of the tire, including tread, sidewall, belt and carcass rubber, are modeled using the Mooney-Rivlin constitutive model, whereas the carcass and belt reinforcements of tire are described by the orthotropic elastic model. Besides, the rim is set to be rigid.

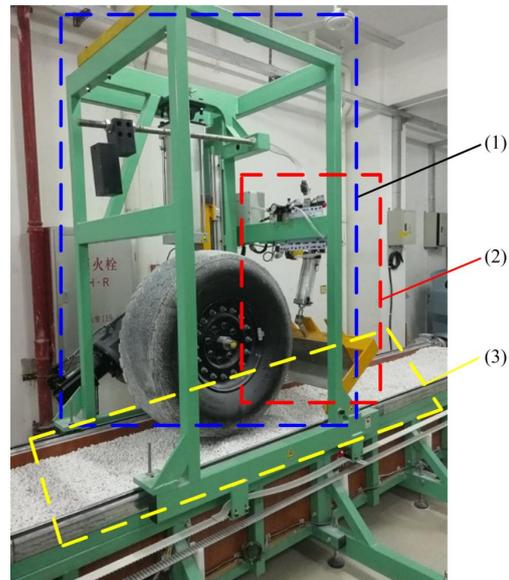


Fig. 5 Indoor soil-bin experiment device

Furthermore, many scholars mostly calibrate the contact and model parameters using the triaxial compression test or biaxial compression test. In this work, an indoor triaxial test is also performed to calibrate the simulation parameters of the multi-sphere DE-FE model, and it can be found in Ref. [9].

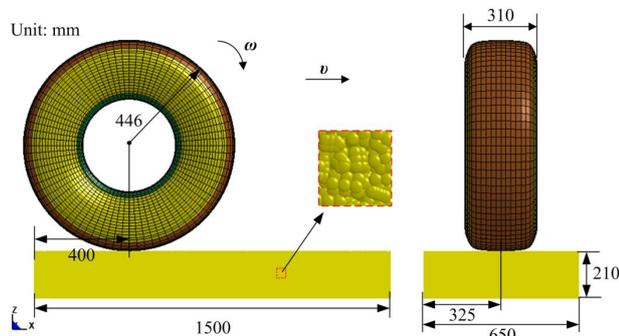


Fig. 6 Combined multi-sphere DE-FE model

The simulation process of an off-road tire on gravel terrain is composed of the following steps:

- Inflation: The pressure of tire is increased gradually from 0 to 0.35 MPa within 10 ms, and then is kept to be constant.
- Force loading: The vertical load acting on the rim is 10,163 N within 10-12 ms, and remains stable after 12 ms.
- Velocity loading: the velocities will be loaded on the rim of tire directly from 0 to the prescribed value (12 to 15 ms).
- Data analysis: the evaluation indexes of the tractive performances, including vertical reaction force, tractive force and rim sinkage, will be collected and analyzed.

5. RESULTS AND DISCUSSIONS

Fig. 7 depicts the simulation and experimental results of the traveling tracks of an off-road tire with smooth tread on multi-sphere gravel terrain under the slip rate of 20%, and the displacements of gravel particles in the Z-direction under different moments. It can be observed that the displacements of gravel particles are positive on both side berms of the tire tracks due to the extrusion of tire, whereas the displacements are negative under the off-road tire owing to the tire vertical force. As can be seen from the figure, the simulation results are in agreement with the soil-bin experimental phenomenon.

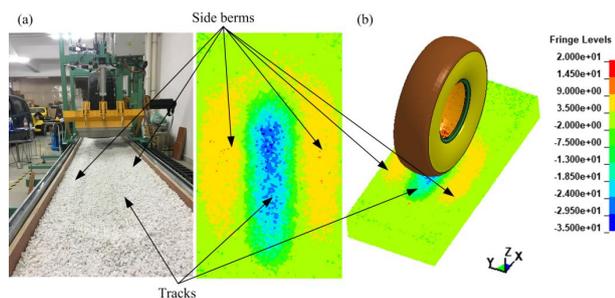


Fig. 7 Traveling tracks: (a) experiment; (b) simulation

To analyze the tractive performance of off-road tire, the vertical reaction forces of the tire on gravel terrain are illustrated in Fig. 8. In the inflation stage (i.e., 0-10 ms), the vertical reaction forces are 0 N, because the tire is not contacts with gravel terrain. With the force loading, the forces will increase rapidly within a short time. Finally, they will be gradually stabilize after a period of fluctuation because of the balance of the forces in the vertical direction.

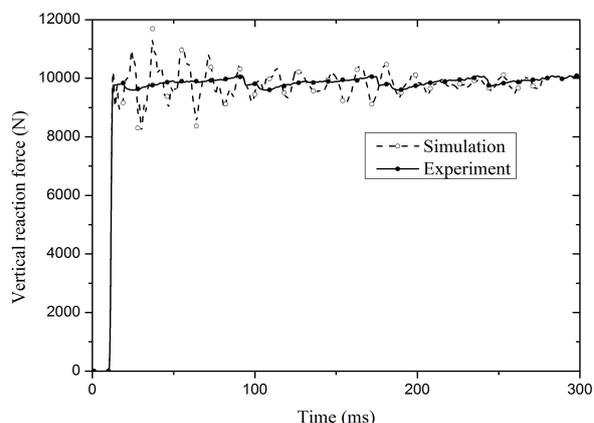


Fig. 8 Simulation and experimental results in terms of vertical reaction force history

Fig. 9 shows the simulation and experimental results of the tractive force histories. It can be found that the tractive forces dramatically increase at first to overcome the running resistance, after that the forces decrease. Finally, the tractive forces will tends to be stable, and the simulation value of the tractive force is close to that of the soil-bin experiment.

Moreover, the simulation and experimental results of the rim sinkages are shown in Fig. 10. During the force loading, the rim sinkages of off-road tire increase rapidly with the rise of the vertical forces. Since the gravel terrain is compacted by the off-road tire, the rim sinkages will gradually converge, and the simulation value is about 53.6 mm in the stable stage.

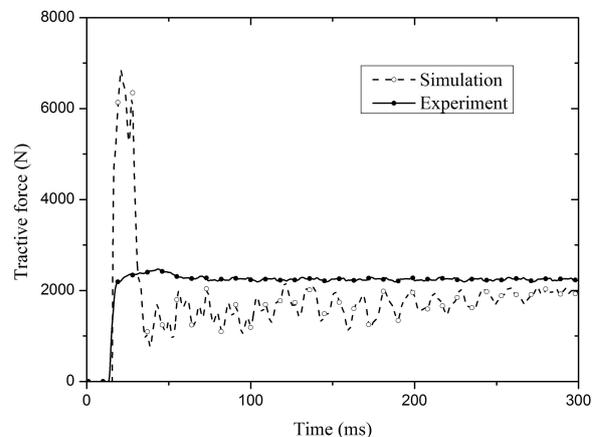


Fig. 9 Simulation and experimental results in terms of the tractive force history

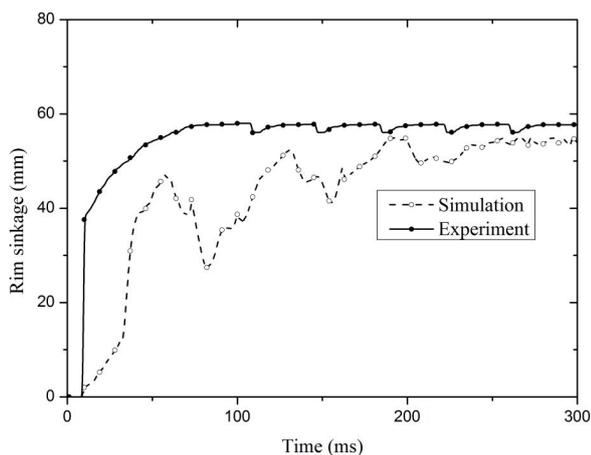


Fig. 10 Simulation and experimental results in terms of the rim sinkage history

6. CONCLUSIONS

In this work, a multi-sphere DE-FE method is developed to investigate the interactions between an off-road tire with smooth tread and gravel terrain. The conclusions are summarized as follows: a) Several kinds of multi-sphere gravel particle models and the combined multi-sphere DE-FE model are established according to the conditions of an indoor soil-bin experiment; b) The developed method is used to analyze the tractive performance of an off-road tire under the slip rate of 20%. The results show that the simulation result of the traveling track of an off-road tire on gravel terrain is consistent with that of experimental result, and the evaluation indexes of the tractive performances obtained by the numerical simulation, including vertical reaction force, tractive force and rim sinkage, are also in agreement with the experimental data. Therefore, our developed method can well predict the traveling behaviors of a tire on granular terrain.

ACKNOWLEDGMENT

This work was supported by a JSPS Grant-in-Aid for Scientific Research (B) (GrantNumber22H03601) and JST FOREST Program (Grant Number JPMJFR215S).

REFERENCES

- [1] Nakashima H, Fujii H, Oida A, et al. Discrete element method analysis of single wheel performance for a small lunar rover on sloped terrain. *Journal of Terramechanics* 2010, 47(5): 307–321.
- [2] Nankali N, Namjoo M, Maleki MR. Stress analysis of tractor tire interacting with soil using 2D finite element method. *International Journal of Advanced Design and Manufacturing Technology* 2012, 5(3): 107–111.
- [3] Yang P, Zang M, Zeng H. DEM-FEM simulation of tire-sand interaction based on improved contact model. *Computational Particle Mechanics* 2020, 7: 629–643.
- [4] Nishiyama K, Nakashima H, Yoshida T, et al. FE-DEM with interchangeable modeling for off-road tire traction analysis. *Journal of Terramechanics* 2018, 78: 15–25.
- [5] Zeng H, Xu W, Zang M, et al. Calibration and validation of DEM-FEM model parameters using upscaled particles based on physical experiments and simulations. *Advanced Powder Technology* 2020, 31: 3947–3959.
- [6] Favier JF, Abbaspour-Fard MH, Kremmer M, et al. Shape representation of axisymmetrical, non-spherical particles in discrete element simulation using multi-element model particles, *Engineering Computations* 1999, 16(4): 467–480.
- [7] Wang SP, Nakamachi E. The inside-outside contact search algorithm for finite element analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 1997, 40(19): 3665–3685.
- [8] Balevičius R., Džiugys A, Kačianauska R.. Discrete element method and its application to the analysis of penetration into granular media, *Journal of Civil Engineering and Management* 2004, 10(1): 3–14.
- [9] Guo X, Zheng Z, Zang M, et al. A multi-sphere DE-FE method for traveling analysis of an off-road pneumatic tire on irregular gravel terrain. *Engineering Analysis with Boundary Elements* 2022, 139: 293–312.

高次有限要素を用いた Helmholtz 方程式の大規模並列解析

Large-Scale Parallel Solution of Helmholtz Equation
by High-Order Finite Element Method

塚本顕成¹⁾ 馬込望²⁾ 三目直登³⁾

Akinari Tsukamoto, Nozomi Magome, and Naoto Mitsume

¹⁾筑波大学 システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1,

E-mail:tsukamoto.akinari.qw@alumni.tsukuba.ac.jp)

²⁾筑波大学 システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1,

E-mail:magome.nozomi.sw@alumni.tsukuba.ac.jp)

³⁾博 (工) 筑波大学 システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail:mitsume@kz.tsukuba.ac.jp)

The purpose of this study is to develop and verify a fast simulation framework for the Helmholtz equation for frequency-domain acoustic analysis of sound fields using the finite element method. In this study, a framework for solving the 3-D Helmholtz equation was developed and parallel computation using the domain decomposition method was implemented for it. It reads a mesh in which the domain is partitioned into first-order hexahedral elements or higher-order elements. Results obtained by it was compared with theoretical solutions including sound wave propagation problems in pipes to verify the accuracy of our proposed framework. Numerical results show good agreement and appropriate convergence with the theoretical ones. In addition, the parallelization was confirmed to have moderate parallel performance.

Key Words : Helmholtz equation, finite element method, parallel computation, domain decomposition method

1. 序論

近年、コンサートホールや音楽スタジオ、講堂などの音響設計には、計算機を用いた音場の数値解析技術が用いられている [1][2]。従来、音響設計の実設計前に行われていた模型や試作品などの実物を用いた試験の繰り返しには、多くの時間・費用が必要であった。数値解析を用いることで、実物を用いた試験を行わなくとも設計品質を高めることができ、実際に製造するまでの時間・費用を削減することが可能である。

また、近年のメタバースの流行により、VR 技術や AR 技術などを活用したさまざまな仮想空間や拡張現実でのサービスが開発されており、実際に仮想空間内での共同製品開発やリアルタイムシミュレーションなどが可能なプラットフォーム [3] の開発が行われている。また、現実世界に存在する生産設備などを仮想空間で表現する技術であるデジタルツインを利用した製品設計・開発も注目されている。

このような背景から、音響解析も仮想空間への適用が求められて行くと考えられ、解析へのリアルタイム性及び、現実に近い体験のための精度が求められる。リアルタイムでの音響解析となると計算コストが課題となり、特に高周波数帯の解析時は出現する最短の波長に合わせて要素分割をするためにメッシュを細かく切る必要があり、その分計算コストが増大する問題がある。

既存の音響解析の研究において、時間領域差分法 (finite-difference time-domain: FDTD) 法 [4] や有限要素法 (finite element method: FEM)[5][6] を用いた解析手法

や、幾何音響論に基づく音線法や鏡像法といった手法 [7] が提案されている。

時間領域差分法は構造格子を利用するため、領域の境界付近での精度を得るには非常に細かい格子を用いて領域全体を分割する必要がある。幾何音響理論に基づいた音場解析手法は、音の波動性を考慮せず音の伝搬を幾何学的に扱うものであり、計算時間の点で有利である特徴があるが、波動現象を考慮しないことで誤差が生じる問題がある。

一方、有限要素法は偏微分方程式を弱形式化した上で、解析対象の領域全体を多数の単純な形状をした要素に分割し近似解を求める手法であり、メッシュを利用することから複雑な形状や境界の表現に有利である。そのため、複雑形状や境界付近での高い計算精度が期待できる。

本研究では、有限要素法による音場の周波数領域音響解析のための、Helmholtz 方程式ソルバの開発とその妥当性の検証を目的とする。

また、分散メモリ型並列計算機に適した並列化手法として知られる領域分割法を適用し、計算の高速化の達成も目的とする。領域分割法は対象領域を幾何学的に分割して解析する手法であり、各分割領域における計算量を均一にし、並列効率を悪化させる領域間の通信量を最小化することにより計算の高速化を目指す。

2. 定式化

(1) Helmholtz 方程式の有限要素法による定式化

有限要素法による音場の数値解析では、支配方程式である Helmholtz 方程式に重み付き残差法を適用し、離散化することによって得られた連立一次方程式を解くことによって近似解を得る。本節では Helmholtz 方程式の有限要素法による定式化について述べる。

境界 Γ で囲われた三次元空間の音場 Ω を考える。音速を c とすると、音場を支配する方程式は速度ポテンシャル ϕ の波動方程式で

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \quad \text{in } \Omega \quad (1)$$

のように表現される。角周波数 ω とし、速度ポテンシャル ϕ を未知の関数 $\Phi(x)$ を用いて

$$\phi = \Phi \exp(-j\omega t) \quad (2)$$

と置き変数分離する。ここで j は虚数単位である。式 (2) を速度ポテンシャル ϕ の波動方程式 (1) に代入すると、

$$(\nabla^2 + k^2)\Phi = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (3)$$

となり、定常状態における音場の支配方程式である Helmholtz 方程式が導出された。ここで k は波数であり、 $k = \omega/c$ である。このとき音圧 p は、空気密度 ρ として

$$p = j\omega\rho\Phi \quad (4)$$

である。

境界 Γ に関して、吸音境界 Γ_a 、振動境界 Γ_v が与えられているとする。音場の数値解析では境界での吸音特性を、境界での音圧と、境界に垂直な粒子速度の比である音響インピーダンスで表される。吸音境界 Γ_a での吸音特性は、次式の音響インピーダンスによって表す。

$$Z_n = \frac{p}{v_n} \quad (5)$$

Z_n は音響インピーダンス、 v_n は法線方向粒子速度である。速度ポテンシャルの定義より法線方向粒子速度 v_n は

$$v_n = \frac{\partial \phi}{\partial n} \quad (6)$$

である。式 (5) に式 (6) と式 (4) を代入すると、吸音境界 Γ_a の境界条件は

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n} = -j\omega\rho \frac{1}{Z_n} \Phi \quad \text{on } \Gamma_a \quad (7)$$

で表される。境界面が剛境界 (完全反射面) のとき、表面インピーダンスは無窮大であり、この条件は、剛境界での粒子速度をゼロとすることで境界面を表現することが可能である。振動境界 Γ_v で境界が粒子速度 v で振動するとするとき境界条件は

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n} = -v \quad \text{on } \Gamma_v \quad (8)$$

と表される。

Helmholtz 方程式に重み関数 W を乗じて音場全体を積分すると

$$\int_{\Omega} W (\nabla^2 + k^2) \Phi d\Omega = 0 \quad (9)$$

となる。Green の公式を使い式を整理すると

$$\int_{\Omega} [-\nabla W \cdot \nabla \Phi + k^2 W \Phi] d\Omega + \int_{\Gamma} W \frac{\partial \Phi}{\partial n} d\Gamma = 0 \quad (10)$$

となり、弱形式が導かれた。式 (10) に境界条件である式 (7) と式 (8) を代入すると

$$\int_{\Omega} [\nabla W \cdot \nabla \Phi - k^2 W \Phi] d\Omega + j\omega\rho \frac{1}{Z_n} \int_{\Gamma_a} W \Phi d\Gamma = -v \int_{\Gamma_v} W d\Gamma \quad (11)$$

となる。

音場 Ω を、 n_e 個の境界 Γ_e で囲われた有限要素 Ω_e に分割すると、弱形式は要素ごとの積分の和となる。 Φ を内挿関数 N を使って、 $\Phi = N \cdot \Phi$ とする。分割された要素内の節点数を k とすると、 Φ は、

$$\Phi = (\Phi_1 \quad \dots \quad \Phi_k) \quad (12)$$

と表される。 Φ の添字は要素内の節点番号を示している。また、 N および ∇N は

$$N = (N_1 \quad \dots \quad N_k) \quad (13)$$

$$\nabla N = (\nabla N_1 \quad \dots \quad \nabla N_k) \quad (14)$$

である。 N の添字は要素内の節点番号を示している。また、重み関数 W は Galarkin 法を適用し、内挿関数 N を使って $W = N \cdot w$ とする。ここで、 w は重み関数の節点値である。式 (11) を離散化すると

$$\sum_{e=1}^{n_e} \left[\int_{\Omega_e} \nabla N^T \nabla N d\Omega - k^2 \int_{\Omega_e} N^T N d\Omega + j\omega\rho \frac{1}{Z_n} \int_{\Gamma_e} N^T N d\Gamma \right] \Phi = \sum_{e=1}^{n_e} -v \int_{\Gamma_e} N^T d\Gamma \quad (15)$$

となる。行列式で表現すると

$$A\Phi - k^2 M\Phi + j\omega\rho C\Phi = q \quad (16)$$

である。全体行列をそれぞれの要素ごとに分けた要素行列 A_e 、 M_e 、 C_e とおく。このとき要素剛性行列 A_e 、 M_e はそれぞれ

$$A_e = \int_{\Omega_e} \nabla N^T \nabla N d\Omega \quad (17)$$

$$M_e = \int_{\Omega_e} N^T N d\Omega \quad (18)$$

となる。また要素減衰行列 C_e は

$$C_e = \frac{1}{Z_n} \int_{\Gamma_e} N^T N d\Gamma \quad (19)$$

で与えられる。右辺ベクトル q は音源分布を表しており

$$q = \sum_{e=1}^{n_e} v \int_{\Gamma_e} N^T d\Gamma \quad (20)$$

と表現される。音場の周波数領域解析では式 (16) の連立一次方程式を解くことで領域内の速度ポテンシャルを計算する。

(2) 複素対称連立一次方程式の反復解法

式 (16) を見ると減衰行列項が虚部を持つため、全体行列は複素対称行列となっている。そこで本研究では式 (16) を、エルミート行列ではない線形方程式に対して有効である COCG 法 (conjugate orthogonal conjugate gradient method)[8] によって解く。

3. 三次元 Helmholtz 方程式ソルバ

(1) 三次元有限要素法における六面体一次要素

本研究で開発した三次元 Helmholtz 方程式ソルバでは領域を六面体一次要素で分割されたメッシュを使用する。領域中の六面体一次要素の局所節点 1、2、3、4、5、6、7、8 の座標と物理量をそれぞれ、 (x_1, y_1, z_1, u_1) 、 (x_2, y_2, z_2, u_2) 、 (x_3, y_3, z_3, u_3) 、 (x_4, y_4, z_4, u_4) 、 (x_5, y_5, z_5, u_5) 、 (x_6, y_6, z_6, u_6) 、 (x_7, y_7, z_7, u_7) 、 (x_8, y_8, z_8, u_8) とする。六面体一次要素では、 (x, y, z) 座標系の要素を座標変換により (ξ, η, ζ) における辺長 2 の立方体基準要素に変形してから計算を行う。基準要素の (ξ, η, ζ) 座標は各節点でそれぞれ、1(-1,-1,-1)、2(1,-1,-1)、3(1,1,-1)、4(-1,1,-1)、5(-1,-1,1)、6(1,-1,1)、7(1,1,1)、8(-1,1,1) となっている。このときの座標変換式は、

$$\begin{aligned} x &= \sum_{i=1}^8 N_i x_i \\ y &= \sum_{i=1}^8 N_i y_i \\ z &= \sum_{i=1}^8 N_i z_i \end{aligned} \quad (21)$$

である。各形状関数は、

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{(1-\xi)(1-\eta)(1-\zeta)}{8} \\ N_2 &= \frac{(1+\xi)(1-\eta)(1-\zeta)}{8} \\ N_3 &= \frac{(1+\xi)(1+\eta)(1-\zeta)}{8} \\ N_4 &= \frac{(1-\xi)(1+\eta)(1-\zeta)}{8} \\ N_5 &= \frac{(1-\xi)(1-\eta)(1+\zeta)}{8} \\ N_6 &= \frac{(1+\xi)(1-\eta)(1+\zeta)}{8} \\ N_7 &= \frac{(1+\xi)(1+\eta)(1+\zeta)}{8} \\ N_8 &= \frac{(1-\xi)(1+\eta)(1+\zeta)}{8} \end{aligned} \quad (22)$$

である。形状関数と各節点での物理量をつかって六面体要素の物理量 u を表すと、

$$u = N_1 u_1 + N_2 u_2 + N_3 u_3 + N_4 u_4 + N_5 u_5 + N_6 u_6 + N_7 u_7 + N_8 u_8 \quad (23)$$

となる。六面体一次要素の場合、式 (16) で表した行列式の要素行列 A_e 、 M_e 、 C_e はそれぞれ、

$$A_e = \int_{\Omega_e} \begin{pmatrix} \nabla N_1 \\ \vdots \\ \nabla N_8 \end{pmatrix} (\nabla N_1 \quad \dots \quad \nabla N_8) d\Omega \quad (24)$$

$$M_e = \int_{\Omega_e} \begin{pmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_8 \end{pmatrix} (N_1 \quad \dots \quad N_8) d\Omega \quad (25)$$

$$C_e = \int_{\Gamma_e} \begin{pmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_8 \end{pmatrix} (N_1 \quad \dots \quad N_8) d\Gamma \quad (26)$$

と表される。三次元 Helmholtz 方程式ソルバでは、本項で述べた形状関数を使い連立一次方程式を構築する。

開発ソルバの精度検証は Helmholtz 方程式の代数的な理論解を用いた検証と、管路内の音波伝搬モデルによる検証を行った。

(2) 三次元 Helmholtz 方程式ソルバの理論解での精度検証

三次元 Helmholtz 方程式の代数的な理論解として式 (27) を用いる。

$$\Phi = \cos kx + \cos ky + \cos kz \quad (27)$$

境界に式 (27) で表される理論解の値を Dirichlet 境界条件として全境界に課し、計算し得られた解と理論解を比較することによって精度検証を行う。

誤差評価は式 (28) に示される L^2 ノルムによる誤差評価式によって行う。

$$\epsilon = \frac{\sqrt{\int_{\Omega} |\Phi_{\text{calc}} - \Phi|^2 d\Omega}}{\sqrt{\int_{\Omega} |\Phi|^2 d\Omega}} \quad (28)$$

ここで Φ は理論解であり、 Φ_{calc} は計算解である。有限要素法の場合、場が連続であるため誤差は厳密には積分型になる。式 (28) の積分は 3 次のガウス求積により求めた。

解析領域は図 1 で示すような六面体一次要素で分割された各辺長さ 1 の立方体とする。

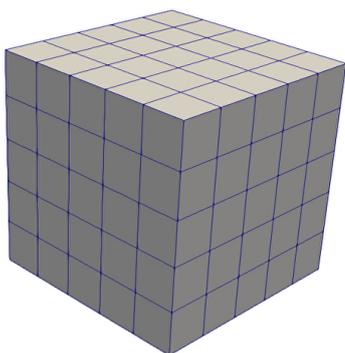


図-1 三次元 Helmholtz 方程式ソルバの理論解検証解析領域

解析条件は表 1 に示す。

音速	343[m/s]
解析周波数	500[Hz]
空気密度	1.3[kg/m ³]
線形ソルバー	COCG 法
収束判定値	1.0 × 10 ⁻¹⁰
最大反復数	10000

要素幅に対する L^2 誤差ノルムを図 2 に示す。縦軸が L^2 誤差ノルム、縦軸が要素幅である。要素幅の減少に

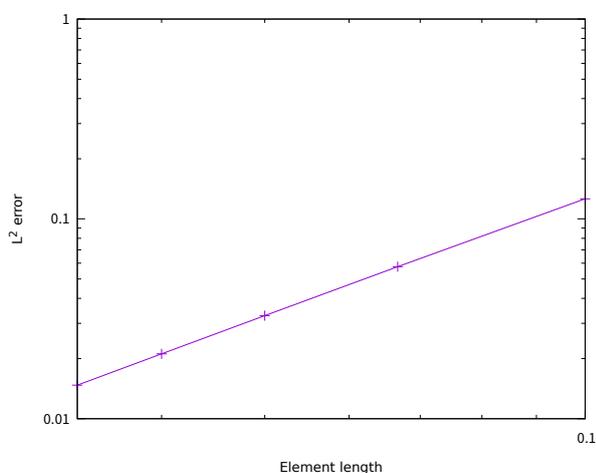


図-2 三次元理論解検証 L^2 誤差ノルム

対して、誤差が 2 次で収束した。

(3) 三次元 Helmholtz 方程式ソルバの管路内音波伝搬モデルでの精度検証

管路内音波伝搬モデルでの精度検証として図 3 に示すような問題を考える。解析領域は長さ 1m、幅 0.2m、

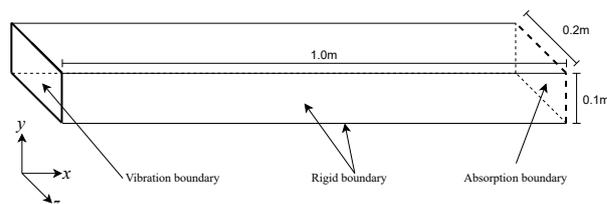


図-3 三次元管内音波伝搬モデル問題

高さ 0.1m の長方体であり、左端に振動境界、右端に吸音インピーダンスが与えられている。振動境界と吸音境界をのぞく境界はすべて剛境界 (全反射) とした。この問題の理論解は

$$p(x) = \rho c \frac{Z_n \cos k(l-x) + j\rho c \sin k(l-x)}{\rho c \cos kl + jZ_n \sin kl} v_0 \quad (29)$$

である。解析領域は図 4 に示すような六面体一次要素で分割した。また、表 2 に解析条件を示す。

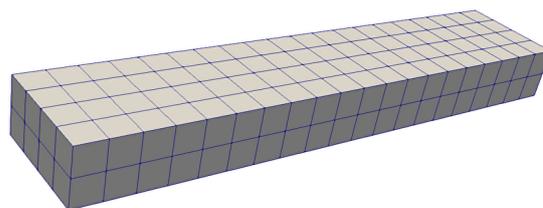


図-4 三次元管内音波伝搬モデル問題使用メッシュ

表-2 三次元管内音波伝搬モデル解検証解析条件

音速	343[m/s]
解析周波数	500[Hz]
空気密度	1.3[kg/m ³]
振動境界速度	0.014[m/s]
吸音境界音響インピーダンス	445.9[kg/(m ² s)]
線形ソルバー	COCG 法
収束判定値	1.0 × 10 ⁻¹⁰
最大反復数	10000

図 5 は 960 要素 315 節点での解析結果の音圧分布の可視化結果であり、図 6 は理論解の音圧分布可視化結果である。

図 5 の解析結果と図 6 の理論解を比較すると、両者は良好な一致を見せており、妥当な計算結果を得られていることがわかる。

図 7 は管路内音波伝搬モデルでの、要素幅に対する誤差ノルムである。縦軸が L^2 誤差ノルム、縦軸が要素幅である。要素幅の減少に対して、2 次で誤差が収束している。

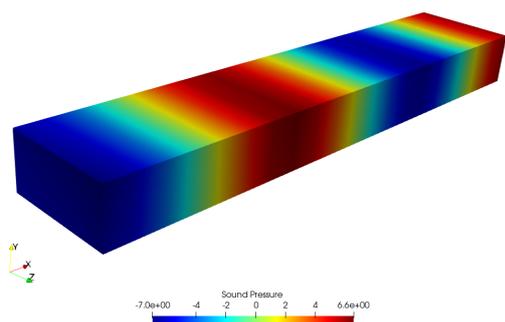


図-5 三次元管内音波伝搬モデル問題解析結果

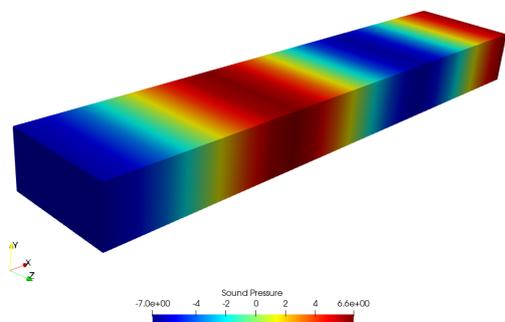
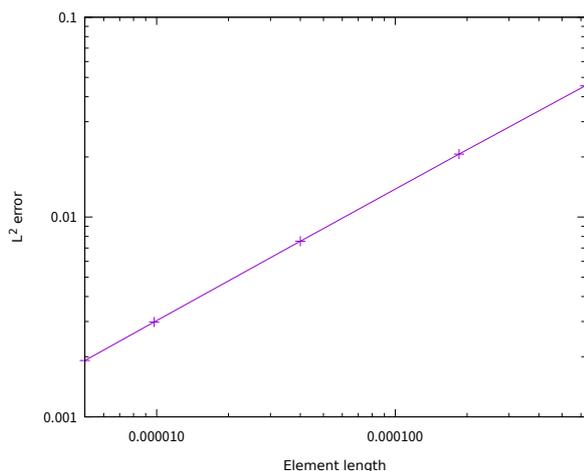


図-6 三次元管内音波伝搬モデル問題理論解

図-7 三次元管内音波伝搬モデル問題 L^2 誤差ノルム

音圧分布計算結果と要素数に対する誤差の収束はどちらも良好であり、正常に問題を解くことができていると考えられる。

表-3 三次元 Helmholtz 方程式ソルバ並列化性能検証条件

誤差評価式	$\epsilon = \frac{\sqrt{\int_{\Omega} \Phi_{\text{calc}} - \Phi ^2 d\Omega}}{\sqrt{\int_{\Omega} \Phi ^2 d\Omega}}$
総節点数	1331,4096,9261,17576,29791
並列数	1,2,3,4,5,6,7,8
音速	343[m/s]
解析周波数	500[Hz]
空気密度	1.3[kg/m ³]
線形ソルバー	COCG 法
収束判定値	1.0×10^{-10}
最大反復数	10000

4. 並列化

(1) 並列化とは

並列化とはコンピュータである処理をする際、処理を細分化し複数のプロセッサで同時に処理を実行することである。本研究では開発した三次元 Helmholtz 方程式ソルバに領域分割法を適用した並列計算を実装した。なお、並列計算ライブラリとして MPI(message passing interface) を用いた。

(2) 並列化結果

並列化精度検証として、Helmholtz 方程式の代数的理論解による精度検証問題に並列計算を適用し性能評価を行う。図 8 は 8 並列時の領域分割である。図 8 の黒く塗られた要素が Overlapping 領域を表している。

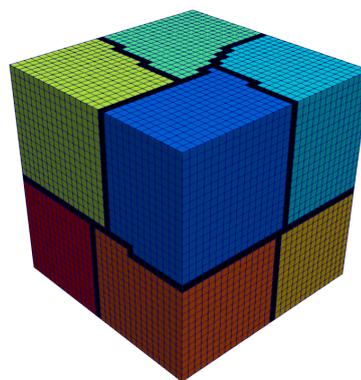


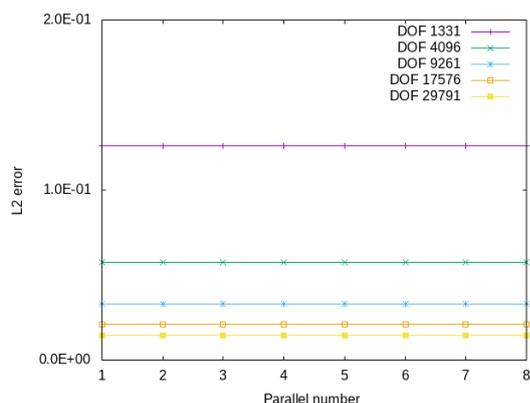
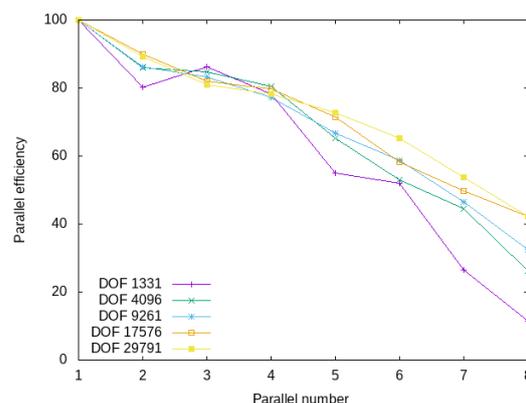
図-8 8 並列時領域分割

また、本研究において用いる並列計算環境は、Intel Core i7 11700(2.50 GHz/Smart Cache 16MB) のマルチコア CPU および 32GB のメモリが搭載されている PC を使用した。本研究では共有メモリ型計算機での検証であるが、開発コードは MPI を用いており分散メモリ型並列計算機に対応している。表 3 に本検証の解析条件を示す。

a) 解の不変性検証

図 9 は並列数を変化させたときの L^2 誤差ノルムを示したものである。

全ての節点数で、並列数を変化させても L^2 誤差ノルムが一定である。並列数を変えても解が変化しておらず解の不変性が保たれており、正しく並列計算を実装できていると言える。

図-9 並列数と L^2 誤差ノルム図-11 並列数と並列化効率 E_n [%]

b) 並列性能評価

並列性能の評価指標として、式 (30) と式 (31) に示す加速率 S_n と並列化効率 E_n [%] を用いる。

$$S_n = \frac{T_1}{T_n} \quad (30)$$

$$E_n = \frac{S_n}{n} \times 100 \quad (31)$$

ここで n は並列数であり、 T_n は n 並列時の計算時間である。

図 10 と図 11 はそれぞれ並列数 n に対する加速率 S_n と並列化効率 E_n [%] である。

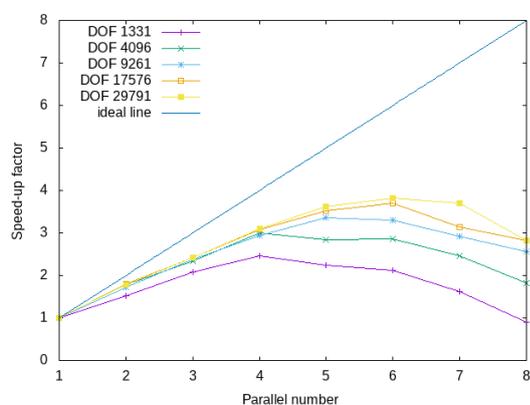
図-10 並列数と加速率 S_n

図 10 より並列数 n に比例して加速率 S_n が増加しており、並列化による計算時間の短縮が確認できる。図 11 の並列化効率 E_n は並列数の増加とともに低下している。これは並列数が増加し通信量が増加することによるオーバーヘッド増加のためだと考えられる。また、加速率 S_n と並列化効率 E_n は総節点数が増加するほど高くなっていることがわかる。総節点数が多い場合は、1 プロセッサあたりの担当節点数が大きくなり、通信量に対するプロセス内の計算時間の割合が増加するため、並列化効率 E_n が向上していると考えられる。

以上の結果より三次元 Helmholtz 方程式の領域分割法を用いた有限要素法への並列計算の実装をし、計算時間の短縮を達成した。

5. 結論

本研究では、有限要素法による音場の周波数領域音響解析のための、Helmholtz 方程式ソルバの開発を行った。開発ソルバにて、Helmholtz 方程式理論検証と管路内音波伝搬問題での検証を行いすべての検証において、良好な精度と誤差収束が確認できた。また領域分割型並列計算の実装を行い、計算の高速化を達成した。謝辞: 本研究は、JST 創発的研究支援事業 JPMJFR215S および JSPS 科研費 22H03601 の支援を受けたものである。ここに記して謝意を表す。

参考文献

- [1] 高橋 顕吾, 山川 高史. 建築音響ホール設計-より良い響きの追求-. 計測と制御, 43(4):348-352, 2004.
- [2] 佐久間 哲哉. 室内音響設計におけるシミュレーション技術の活用. 日本音響学会誌, 57(7):463-469, 2001.
- [3] NVIDIA. Nvidia omniverse, 2023. <https://www.nvidia.com/ja-jp/omniverse/>.
- [4] Takatoshi Yokota, Shinichi Sakamoto, and Hideki Tachibana. Visualization of sound propagation and scattering in rooms. *Acoustical science and technology*, 23(1):40-46, 2002.
- [5] 岡本則子, 大鶴徹, 富来礼次, 藤野清次. 有限要素法による室内音場解析における cocg 法の収束性. 日本計算工学会論文集, 2005:20050027-20050027, 2005.
- [6] 山本広太, 工藤彰洋, 武居周. 並列有限要素法に基づく大規模音響解析手法の基礎検討. In 電気関係学会九州支部連合大会講演論文集 平成 28 年度電気・情報関係学会九州支部連合大会 (第 69 回連合大会) 講演論文集, pages 180-180. 電気・情報関係学会九州支部連合大会委員会, 2016.
- [7] 田口東, 吉澤哲也, 佐藤克昌, 芹川光彦. 幾何音響学的シミュレーションにおける音線反射径路の効率的な計算法. 日本音響学会誌, 41(8):542-545, 1985.
- [8] Henk A van der Vorst and Jan BM Melissen. A petrov-galerkin type method for solving $axk=b$, where a is symmetric complex. *IEEE Transactions on Magnetics*, 26(2):706-708, 1990.

Improved Ghost Cell Boundary モデル を用いた ISPH 法による流体剛体連成解析

Fluid-Rigid Body Interaction Analysis
Using ISPH Method with Improved Ghost Cell Boundary Model

常見隆幸¹⁾ 大村浩之¹⁾ 三目直登²⁾
Takayuki Tsunemi, Hiroyuki Omura and Naoto Mitsume

¹⁾筑波大学大学院システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

²⁾筑波大学システム情報系 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

This study develops a coupling analysis model between particle-based free-surface flow and mesh based rigid body dynamics in two-dimensional space. We have developed the improved ghost cell boundary (IGCB) model, which is characterized by its ability to use finite elements directly as wall boundaries and to treat boundary conditions with high accuracy. In this study, we extended the model for coupling analysis that guarantees momentum conservation by applying the reaction forces of fluid particles to each integration points in the elements. We introduced the developed model to the incompressible smoothed particle hydrodynamics (ISPH) method and verified its accuracy.

Key Words : Particle Method, Incompressible SPH, Ghost Cell Boundary Model, Fluid-Rigid Body Interaction

1. 序論

粒子法による自由表面流れを対象とし、粒子のような点群の情報ではなく、メッシュのような面の情報を直接的に扱う手法の研究は国内外で盛んに行われている [1,2]。発表者らは、有限要素法との連成を想定しメッシュで表された壁境界を直接扱うための手法である ghost cell boundary (GCB) モデル [2] を改良した improved ghost cell boundary (IGCB) モデルを開発してきた。GCB モデルの基本コンセプトは、メッシュ領域内の体積積分により物理量の壁面寄与分を計算するというものである。従来の粒子法の計算における「壁領域を離散化するための粒子」を用いることなく他手法と連結させることが可能であり、複雑な形状を持つ壁境界への応用にも期待できる。さらに IGCB モデルでは境界条件を設定するための仮想点を流体領域内に配置することで、従来の GCB モデルの課題であった精度を改善し、圧力を高精度に計算できる半陰解法ベースの粒子法への適用が可能になった。

本研究では、IGCB モデルを拡張することによる二次元の流体剛体連成解析手法の開発を目的とする。連成解析では境界面において運動量が保存されることが求められる。そこで本研究では、IGCB モデルで用いる有限要素内の各積分点に、流体粒子が受ける力の反作用を直接与えることで運動量保存性を担保した連成解析手法を開発する。そして安定化 incompressible smoothed particle hydrodynamics (ISPH) 法 [3] に開発手法を導入して解析を行い、本手法の精度を検証する。

2. 安定化 Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics (ISPH) 法

(1) 支配方程式

非圧縮性流れの運動は次式の質量と運動量の保存則によって記述される。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{u} + \mathbf{g} \quad (2)$$

ここで、 D/Dt は Lagrange 微分である。また、 \mathbf{u} は流速、 ρ は密度、 p は圧力、 ν は動粘性係数、 \mathbf{g} は重力加速度である。

(2) Fractional Step 法に基づく離散化

以下では、各種物理量の右上添え字はタイムステップ番号を表す。 \mathbf{u}^* は、粘性項と重力項を計算後の中間状態における速度であり、 Δt は解析の時間刻み幅である。安定化 ISPH 法は、fractional step 法と同様に、非圧縮性流れの支配方程式を以下の 3 つの方程式に分割して計算する。

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \nu\nabla^2\mathbf{u}^n + \mathbf{g} \quad (3)$$

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{\rho^0}{\Delta t}\nabla \cdot \mathbf{u}^* + \alpha\frac{\rho^0 - \rho^n}{\Delta t^2} \quad (4)$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho}\nabla p^{n+1} \quad (5)$$

安定化 ISPH 法において特徴的なのは、上式のうち、一般に圧力 Poisson 方程式と呼ばれる式 (4) の右辺第 2 項が安定化項として追加されている点である。この項の α は、安定化の度合いを調節するパラメータである。

(3) 粒子による空間の離散化

SPH 法では、空間中の点 \mathbf{x} で定義される任意のスカラー値 $\phi(\mathbf{x})$ を、重み関数 W による重み付き積分の式でまず近似する。

$$\phi(\mathbf{x}) \approx \int_{\Omega} \phi(\xi)W(|\mathbf{x} - \xi|, h)d\xi \quad (6)$$

ここで、 Ω は解析領域を表す。式中の h は重み関数の影響範囲を決める距離指標である。そして、解析領域を有限個の粒子（計算点）で離散

化することで、式 (6) は次式のように粒子に関する重み付き総和に近似できる。

$$\phi(\mathbf{x}_i) \approx \langle \phi_i \rangle = \sum_{j=1}^{N_p} \phi_j W(|\mathbf{r}_{ij}|, h) V_j \quad (7)$$

$$= \sum_{j=1}^{N_p} \frac{m_j}{\rho_j} W(|\mathbf{r}_{ij}|, h) \phi_j \quad (8)$$

ここで、 $\langle \rangle$ は SPH 法の離散化による近似値を表す。 N_p は粒子の総数であり、 i と j は粒子番号である。 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ は粒子 j に対する粒子 i の相対位置ベクトルである。以降は $W(|\mathbf{r}_{ij}|, h) = W_{ij}$ と略記する。また、 V_j は粒子 j が代表する体積であり、 ρ_j と m_j はそれぞれ粒子の密度と質量である。

物理量の空間微分に関しては様々なスキームが提案されているが、本研究では [3] の文献と同じ以下の離散化式を用いる。

$$\langle \nabla p_i \rangle = \rho_i \sum_{j=1}^{N_p} m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \nabla W_{ij} \quad (9)$$

$$\langle \nabla^2 p_i \rangle = \frac{2}{\rho_i} \sum_{j=1}^{N_p} m_j \frac{p_i - p_j}{|\mathbf{r}_{ij}|} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|} \cdot \nabla W_{ij} \quad (10)$$

$$\langle \nabla^2 \mathbf{u}_i \rangle = \frac{2}{\rho_i} \sum_{j=1}^{N_p} m_j \frac{\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j}{|\mathbf{r}_{ij}|} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|} \cdot \nabla W_{ij} \quad (11)$$

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{u}_i \rangle = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^{N_p} m_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla W_{ij} \quad (12)$$

また、式 (4) に現れる ρ^n は、各時刻での粒子配置を参照し、次式により計算する。

$$\rho_i^n \approx \langle \rho_i^n \rangle = \sum_{j=1}^{N_p} m_j W_{ij} \quad (13)$$

3. Improved Ghost Cell Boundary (IGCB) モデル

(1) 物理量とその微分の壁面寄与分の計算

IGCB モデルではまず、壁面近傍の流体粒子 i が持つ物理量 $\phi(\mathbf{x}_i)$ を、流体粒子からの寄与と壁面からの寄与の和として計算する。

$$\phi(\mathbf{x}_i) = \phi(\mathbf{x}_i)^{\text{fluid}} + \phi(\mathbf{x}_i)^{\text{wall}} \quad (14)$$

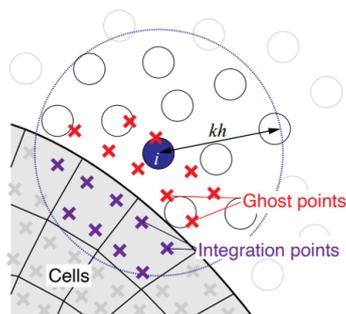


図-1: GCB モデルにおける流体粒子と積分点

その上で、図1のように壁領域がセルによって離散化されているとして、壁面領域における式(6)の積分を、各セル内のガウス求積により計算したものを壁面からの寄与とする。

$$\phi(\mathbf{x}_i)^{\text{wall}} \simeq \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \int_{\Omega_c} \phi(\mathbf{x}) W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}|, h) d\mathbf{x} \quad (15)$$

$$\simeq \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{ip}}} \phi(\mathbf{x}_c(\boldsymbol{\xi}_m)) W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_c(\boldsymbol{\xi}_m)|, h) H_m |\mathbf{J}_c(\boldsymbol{\xi}_m)| \quad (16)$$

ここで、 c はセル番号、 N_{cell} はセルの総数である。また、 N_{ip} はセル内の積分点数、 H_m はガウス求積の重み係数、 $\mathbf{x}_c(\boldsymbol{\xi}_m)$ はセル c に対応する正規空間内の m 番目の積分点の実空間での位置である。 $\mathbf{x}_{c,m} = \mathbf{x}_c(\boldsymbol{\xi}_m)$ 、 $W_{i(c,m)} = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_c(\boldsymbol{\xi}_m)|, h)$ 、 $\mathbf{J}_{c,m} = \mathbf{J}_c(\boldsymbol{\xi}_m)$ と表すことにすれば、

$$\langle \phi_i \rangle^{\text{wall}} = \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{ip}}} \phi(\mathbf{x}_{c,m}) W_{i(c,m)} H_m |\mathbf{J}_{c,m}| \quad (17)$$

となる。ここで、近似値を $\langle \phi_i \rangle^{\text{wall}}$ で表した。上式を用いて、式(13)により求める密度の壁面寄与分は、次式より計算する。

$$\langle \rho_i \rangle^{\text{wall}} = \rho_c \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{ip}}} W_{i(c,m)} H_m |\mathbf{J}_{c,m}| \quad (18)$$

ここで、 ρ_c は密度の物性値である。

物理量の空間微分の壁面寄与分は、式(9)から式(12)を倣い以下の式より計算する。

$$\langle \nabla p_i \rangle^{\text{wall}} = \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{ip}}} (p_{c,m} + p_i) \nabla W_{i(c,m)} H_m |\mathbf{J}_{c,m}| \quad (19)$$

$$\langle \nabla^2 p_i \rangle^{\text{wall}} \quad (20)$$

$$= 2 \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{ip}}} \frac{p_i - p_{c,m}}{|\mathbf{r}_{i(c,m)}|} \frac{\mathbf{r}_{i(c,m)}}{|\mathbf{r}_{i(c,m)}|} \cdot \nabla W_{i(c,m)} H_m |\mathbf{J}_{c,m}|$$

$$\langle \nabla^2 \mathbf{u}_i \rangle^{\text{wall}} \quad (21)$$

$$= 2 \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{ip}}} \frac{\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_{c,m}}{|\mathbf{r}_{i(c,m)}|} \frac{\mathbf{r}_{i(c,m)}}{|\mathbf{r}_{i(c,m)}|} \cdot \nabla W_{i(c,m)} H_m |\mathbf{J}_{c,m}|$$

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{u}_i \rangle^{\text{wall}} = \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{ip}}} (\mathbf{u}_{c,m} - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla W_{i(c,m)} H_m |\mathbf{J}_{c,m}| \quad (22)$$

(2) 積分点上の物理量の計算

前節の壁面寄与分の計算には、セル内の積分点上での値が必要である。IGCB モデルでは、図1にあるように、各積分点对して鏡映対称の位置に仮想点 (ghost 点) を配置し、この仮想点上の物理量から対応する各積分点上の値を決定することにより、各種境界条件を満足させる。ここで、仮想点における物理量は、仮想点周囲の流体粒子が持つ値から、浅井ら [4] を倣い以下の式より計算する。

$$\langle \phi_i \rangle = \sum_{j=1}^{N_p} \frac{m_j}{\rho_j} \tilde{W}_{ij} \phi_j \quad (23)$$

$$\tilde{W}_{ij} = \frac{W_{ij}}{\sum_{j=1}^{N_p} \frac{m_j}{\rho_j} W_{ij}} \quad (24)$$

次に、圧力と速度の各種境界条件に合わせて、対応する仮想点の値から積分点の値を求める。本研究では次式で表される圧力の Neumann 条件を設定する。

$$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = \rho(\mathbf{g} - \mathbf{a}_\Gamma) \cdot \mathbf{n} \quad (25)$$

ここで、 \mathbf{n} は流体領域から壁領域に向かう向きの壁面の法線ベクトルであり、 \mathbf{a}_Γ は壁面が移動する加速度である。上式を満たすために、積分点の圧力 p_{ip} は対応する仮想点での圧力 p_g を用いて次式により計算する。

$$p_{\text{ip}} = p_g + d\rho(\mathbf{g} - \mathbf{a}_\Gamma) \cdot \mathbf{n} \quad (26)$$

ここで、 d は積分点と対応する仮想点間の距離である。

続いて、速度の境界条件を満たす積分点上の流速ベクトルの計算方法を示す。slip 条件を与える場合は、積分点上の流速 \mathbf{u}_{ip} と壁面の移動速度 \mathbf{v}_Γ の相対ベクトルが、仮想点上の流速 \mathbf{u}_g と \mathbf{v}_Γ の相対ベクトルと壁面に対して鏡映対称になるように変換する。

$$\mathbf{u}_{ip} - \mathbf{v}_\Gamma = \mathbf{M}(\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_\Gamma) \quad (27)$$

ここで、 \mathbf{M} は鏡映操作を与えるための 2 階のテンソルであり、壁面の法線ベクトル \mathbf{n} と単位テンソル \mathbf{I} を用いて次のように与えられる。

$$\mathbf{M} = \mathbf{I} - 2\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad (28)$$

ここで、 \otimes はテンソル積である。no-slip 条件の場合は、相対ベクトルが点対称となるように変換する。

$$\mathbf{u}_{ip} - \mathbf{v}_\Gamma = \mathbf{R}(\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_\Gamma) \quad (29)$$

$$\mathbf{R} = -\mathbf{I} \quad (30)$$

4. IGC B モデルを用いた流体剛体連成手法

(1) 剛体運動の支配方程式

剛体に流体力 \mathbf{F} と重力のみが作用するとすると、二次元の剛体運動の支配方程式は次式で表される。

$$\rho_r A \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \mathbf{F} + \rho_r A \mathbf{g} \quad (31)$$

$$I_o \frac{D\boldsymbol{\omega}}{Dt} = \mathbf{M} \quad (32)$$

ここで、 ρ_r と A はそれぞれ剛体の密度と面積、 \mathbf{v} は重心の速度である。また、 I_o は重心周りの慣性モーメント、 $\boldsymbol{\omega}$ は重心周りの角速度、 \mathbf{M} は剛体に作用するモーメントである。

(2) セルで表された剛体の面積、重心、慣性モーメントの計算

本研究では、剛体も図 1 のようにセルでモデル化されているとする。式 (31) と式 (32) を計算するためには、事前に A と I_o と剛体重心の座標 \mathbf{x}_g を求めておく必要がある。これらの値は、次式のように剛体領域 Ω_r 内の積分をガウ

ス求積により近似して計算する。

$$A = \int_{\Omega_r} d\Omega \approx \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{ip}} H_m |\mathbf{J}_{c,m}| \quad (33)$$

$$\mathbf{x}_g = \frac{1}{A} \int_{\Omega_r} \mathbf{x} d\Omega \approx \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{ip}} \mathbf{x}_{c,m} H_m |\mathbf{J}_{c,m}| \quad (34)$$

$$I_o = \rho_r \int_{\Omega_r} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_g|^2 d\Omega \\ \approx \rho_r \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{ip}} |\mathbf{x}_{c,m} - \mathbf{x}_g|^2 H_m |\mathbf{J}_{c,m}| \quad (35)$$

(3) 流体力とモーメントの計算

式 (31) と式 (32) 中の流体力 \mathbf{F} とモーメント \mathbf{M} はそれぞれ、セル内の積分点に与えられた流体力から次式により計算する。

$$\mathbf{F} = \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{ip}} \mathbf{f}_{c,m}^{\text{fluid}} \quad (36)$$

$$\mathbf{M} = \sum_{c=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{m=1}^{N_{ip}} (\mathbf{x}_{c,m} - \mathbf{x}_g) \times \mathbf{f}_{c,m}^{\text{fluid}} \quad (37)$$

ここで、セル c の m 番目の積分点を (c, m) で表すとすると、 $\mathbf{f}_{c,m}^{\text{fluid}}$ は (c, m) が受ける流体力である。

次に $\mathbf{f}_{c,m}^{\text{fluid}}$ を求める。式 (2) より流体力は圧力勾配項と粘性項の和であることがわかる。質量 m_i を持つ流体粒子 i の運動を計算するとき、粒子 i が受ける流体力の壁面寄与分 $\mathbf{f}_i^{\text{wall}}$ は式 (19) と式 (21) を用いて次のように表せる。

$$\mathbf{f}_i^{\text{wall}} = m_i \left(-\frac{\langle \nabla p_i \rangle^{\text{wall}}}{\rho} + \nu \langle \nabla^2 \mathbf{u}_i \rangle^{\text{wall}} \right) \quad (38)$$

上式の $\langle \nabla p_i \rangle^{\text{wall}}$ と $\langle \nabla^2 \mathbf{u}_i \rangle^{\text{wall}}$ はセル c と積分点 m に関する総和計算により求めるので、流体粒子 i がセル内積分点 (c, m) から受ける流体力 $\mathbf{f}_{i(c,m)}^{\text{wall}}$ を考えることができ、それは次式で表される。

$$\mathbf{f}_{i(c,m)}^{\text{wall}} = m_i \left(-\frac{\langle \nabla p_i \rangle_{c,m}^{\text{wall}}}{\rho} + \nu \langle \nabla^2 \mathbf{u}_i \rangle_{c,m}^{\text{wall}} \right) \quad (39)$$

ここで、 $\langle \nabla p_i \rangle_{c,m}^{\text{wall}}$ と $\langle \nabla^2 \mathbf{u}_i \rangle_{c,m}^{\text{wall}}$ はそれぞれ式 (19) と式 (21) から総和計算を除いたものであり、次

のように表される。

$$\langle \nabla p_i \rangle_{c,m}^{\text{wall}} = (p_{c,m} + p_i) \nabla W_{i(c,m)} H_m |J_{c,m}| \quad (40)$$

$$\langle \nabla^2 \mathbf{u}_i \rangle_{c,m}^{\text{wall}} = 2 \frac{\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_{c,m}}{|\mathbf{r}_{i(c,m)}|} \frac{\mathbf{r}_{i(c,m)}}{|\mathbf{r}_{i(c,m)}|} \cdot \nabla W_{i(c,m)} H_m |J_{c,m}| \quad (41)$$

そして、セル内積分点 (c, m) が流体粒子 i から受ける流体力 $\mathbf{f}_{(c,m)i}^{\text{fluid}}$ は、 $\mathbf{f}_{i(c,m)}^{\text{wall}}$ の反作用と考える。

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{(c,m)i}^{\text{fluid}} &= -\mathbf{f}_{i(c,m)}^{\text{wall}} \\ &= -m_i \left(-\frac{\langle \nabla p_i \rangle_{c,m}^{\text{wall}}}{\rho} + \nu \langle \nabla^2 \mathbf{u}_i \rangle_{c,m}^{\text{wall}} \right) \end{aligned} \quad (42)$$

$\mathbf{f}_{(c,m)i}^{\text{fluid}}$ を流体粒子に関して総和をとることで $\mathbf{f}_{c,m}^{\text{fluid}}$ が求められる。

$$\mathbf{f}_{c,m}^{\text{fluid}} = \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{f}_{(c,m)i}^{\text{fluid}} \quad (43)$$

積分点に与える流体力は、流体粒子が受ける力の反作用であるため、運動量が保存される。

(4) 連成解析手法

本研究では、流体解析と剛体解析の連成に conventional serial staggered (CSS) 法 [5] を用いた弱連成解析を行う。この場合、ある時間ステップでの剛体解析の結果を用いて次の時間ステップでの流体解析を行う。剛体運動の計算(式(31)と式(32))にはオイラー法を用いる。また、流体解析と剛体解析には同じ時間刻み幅を用いる。

5. 提案モデルの検証

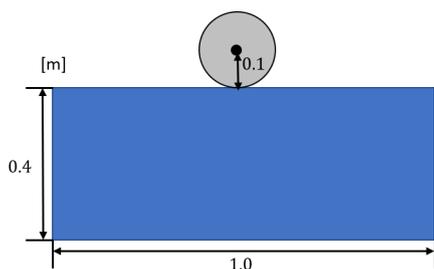


図-2: 初期状態の概観

円柱の自由落下問題の解析により提案モデルの妥当性を検証する。図2に解析の初期状態の

表-1: 解析条件

Parameter	Value
時間刻み幅 Δt	5.0×10^{-3} s
計算ステップ数	20000
粒子数	16000
初期粒子間距離 l_0	5.0×10^{-3} m
影響半径	$3.3l_0$ m
流体密度 ρ_f	1000 kg/m ³
剛体密度 ρ_r	800 kg/m ³
動粘性係数 ν	1.0×10^{-3} m ² /s
重力加速度	9.8 m/s ²
安定化パラメータ α	5.0×10^{-3}

概観を示す。解析条件は表1に示す。流体の表面と円柱の下端が接した状態から円柱を自由落下させ、10 s まで解析を行う。流体を囲む壁面は正方形、円柱は四辺形で構成し、セルの大きさはどちらも流体粒子の初期粒子間距離と同程度とする。また、IGCB モデルの積分点数は一点とし、速度の境界条件は no-slip 条件とする。

2 s までの 0.5 s 間隔の解析結果のスナップショットを図3に示す。なお、各図においては圧力を可視化している。これらの図から、円柱が流体の中に沈み込んだ後に、浮力によって浮かび上がる様子が定性的に解析できていることがわかる。また、圧力についても定性的に妥当な解が得られていることがわかる。定量的な検証については省略し、口頭発表にて詳述する。

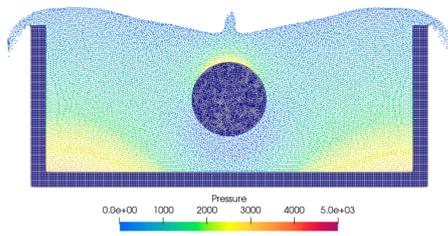
6. 結論

本研究では、発表者らが開発してきた、粒子法と有限要素法との連成を想定し、メッシュで表された壁境界を直接扱う高精度な壁境界モデルである IGCB モデルを拡張した流体剛体連成手法を開発した。具体的には、IGCB モデルで用いる有限要素内の各積分点に流体粒子が受ける力の反作用を直接与えることで、流体と剛体の境界面における運動量保存性を担保させた。そして、本提案手法を安定化 ISPH 法に導入して二次元円柱の自由落下問題を解析し、提案手法の精度を検証した。

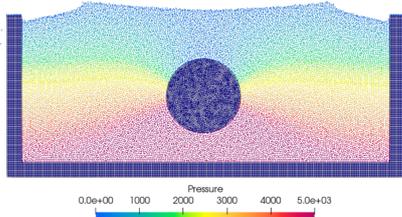
謝辞: 本研究は、JST 創発的研究支援事業 JP-MJFR215S および JSPS 科研費 22H03601 の支援を受けたものである。ここに記して謝意を表す。

参考文献

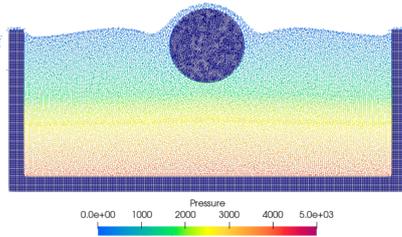
- [1] 松永拓也, 柴田和也, 越塚誠一.: MPS 法における境界積分を用いたポリゴン壁境界表現, 日本機械学会論文集, Vol.84, No.864, p. 18-00197, 2018.
- [2] Z. Zheng, G. Duan, N. Mitsume, S. Chen, S. Yoshimura.: A novel ghost cell boundary model for the explicit moving particle simulation method in two dimensions, Computational Mechanics, Vol.66, pp.87-102, 2020.
- [3] M. Asai, A. M. Aly, Y. Sonoda, Y. Sakai.: A stabilized incompressible SPH method by relaxing the density invariance condition, Journal of Applied Mathematics, Vol.2012, 139583, 2012.
- [4] 浅井光輝, 藤本啓介, 田邊将一, 別府万寿博.: 階段状の非適合境界を有する粒子法解析における仮想マーカーを用いたすべり・非すべり境界処理法, 日本計算工学会論文集, 20130011, 2013.
- [5] C. Farhat, M. Lesoinne.: Two efficient staggered algorithms for the serial and parallel solution of three-dimensional nonlinear transient aeroelastic problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.182, pp.499-515, 2000.



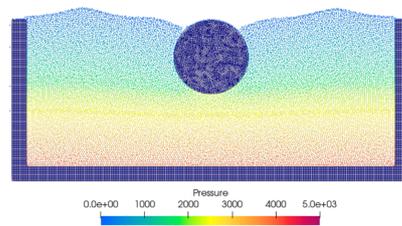
(a) 0.5 [s]



(b) 1.0 [s]



(c) 1.5 [s]



(d) 2.0 [s]

図-3: 解析結果のスナップショット

セラミックス材料に対するマイクロカンチレバー試験の 数値シミュレーション

Numerical simulation of microcantilever testing for ceramic materials

犬塚康介¹⁾, 村本真悠子²⁾, 松井和己³⁾, 山田貴博⁴⁾, 多々見純一⁵⁾

Kosuke Inuzuka, Mayuko Muramoto, Kazumi Matsui, Takayuki Yamada, and Junichi Tatami

1) 横浜国立大学 理工学部(工) (〒240-8501神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台79番5号, E-mail: ko1205suke@gmail.com)

2) 横浜国立大学 理工学部(化) (〒240-8501神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台79番5号)

3) 横浜国立大学 環境情報研究院 准教授 (〒240-0081 神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台79番7号)

4) 横浜国立大学 環境情報研究院 教授 (〒240-0081 神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台79番7号)

5) 横浜国立大学 環境情報研究院 准教授 (〒240-0081 神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台79番7号)

In this study, the simulation models for so-called “micro cantilever beam testing” are developed to determine the material properties of ceramic materials considering their anisotropic crystal structures. After some V&V processes to the FE models, such as observation of exact dimension of the each specimens, mesh resolutions, simplification for loading condition or boundary conditions, the response surface would be evaluated against 6 elastic-plastic material parameters. Then, optimization problems to minimize the gaps in mechanical responses between the experiments and simulations, could be solved as typical inverse problems.

Key Words : Ceramics material, FEM, Anisotropy, Optimization by Response Surface

1. 緒言

セラミックス材料は、多結晶体の微細構造を有することが特徴で、バルク材の力学挙動はそれらの微細構造における力学現象に支配される。この材料は、巨視的には等方的であるとみなしてモデル化することが多い。なぜなら、結晶方位一つ一つがランダムな方位を向いていることを想定すればバルクレベルの結晶粒の集合体では、単結晶がもつ異方的な特性を打ち消すからである。しかしながら、ごく僅かな結晶しか存在しないようなスケールで現象をモデル化するには、それぞれの結晶粒が持つ異方的な機械特性が支配的となることが考えられる。

そこで本研究では、問題として立方晶の結晶構造をとりうる8YSZ (8mol%Y2O3添加安定化ZrO2) に対し、単結晶から構成される約10 μ mのマイクロカンチレバー試験¹⁾を設定し、材料の結晶構造に起因する機械的特性の異方性を考慮したFEMによるシミュレーションモデルを作成する。

さらに、実験で得られた荷重変位曲線から異方性弾性パラメータ及び塑性パラメータを逆推定し、解析結果と実験データを比較し、シミュレーションモデル及び逆推定手法の妥当性を確認することを目的とする。

2. 異方性を考慮した材料構成則

異方性の弾性挙動は一般化フックの法則をもちいて次のようにモデル化する。

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} \quad (1)$$

ここで、 σ_{ij} は応力テンソル、 ε_{kl} はひずみテンソル、 C_{ijkl} は剛性(弾性)テンソルである。

本研究で用いている8YSZは立方晶系の結晶構造を持つことがわかっており²⁾、ノイマンの原理に基づく点群と対称性により、剛性マトリクス C は、次式のように3つの独立した弾性定数のみで示すことができる²⁾。

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (2)$$

さらに立方晶系の結晶構造の対称性を考慮し、降伏関数は次のようなHillの異方性条件式⁴⁾を採用する。

$$f(\sigma, \sigma_y) = \frac{3}{2} \{ (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + (\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 \} + \frac{3}{R_{12}} (\sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2 + \sigma_{12}^2) - \sigma^0 = 0 \quad (3)$$

加工硬化挙動には、非線形等硬化化を仮定して、べき乗硬化則によって次のように記述する。

$$\frac{\sigma_y}{\sigma_0} = \left(\frac{\sigma_y}{\sigma_0} + \frac{3C_{44}}{\sigma_0} \varepsilon^{pl} \right)^n \quad (4)$$

式(1)~(4)より、立方晶系単結晶の弾塑性変形は、3つの弾性定数 C_{11}, C_{12}, C_{44} と初期降伏応力 σ_y 、硬化指数 n 、降伏応力比 R_{12} の6つの独立したパラメータで表現できることになる。

3. マイクロカンチレバー法に基づく現象のモデル化

本研究の対象とするマイクロカンチレバービーム法¹⁾は、セラミックスの局所的な機械的特性を推定する手法であることが知られており、本研究では、多々見教授に実験を依頼した。

試料には、表面に(110)結晶面を持つ市販の単結晶 8YSZ 基板を使用する。加工観察装置(FIB-SEM)を使用して、断面が $2.5 \times 1.5 \mu\text{m}$ の五角形で長さが約 $12 \mu\text{m}$ のマイクロカンチレバー試験片を試料表面に作製した。代表的な試験片形状を Fig.1 に示す。梁の上面が試料表面の(110)結晶面、梁の中立軸が<001>結晶方位となるようなマイクロカンチレバーを作成する。さらに<001>方向に対する中立軸の向きを変化させた6種類(0, 5, 10, 20, 30, 54.7°)のマイクロカンチレバーを作成した。作成した試験片に対してナノインデンテーション装置を用いて、載荷と除荷を行った。実験データとして、荷重変位データおよびSPM像によって観察した梁の断面形状寸法および梁の根本から荷重点の距離を取得した。

シミュレーションモデルの基本形状はマイクロカンチレバー試験の基本寸法を踏襲するが、以下の点については結果に与える影響が大きいと考え、慎重に検討した。

(1) 梁には実寸法を適用する

実際の試験片には加工による寸法のばらつきが生じるため、すべての試験片に対して寸法を計測し、それに基づいてジオメトリを $1/1000 \mu\text{m}$ 単位で修正する。

(2) 載荷点周辺の単純化

実験で曲げ試験をする際には、ダイヤモンド圧子を使って梁の先端付近に荷重を与えるため、めり込みが発生する。その影響を評価するため、同じ材料に対して通常のナノインデンテーション試験⁹⁾を行った。このとき観察されためり込み量は梁のたわみ量の $1/100$ 程度であったので、マイクロカンチレバー試験におけるめり込みの影響は小さいと判断した。したがって、梁の根元付近に生じる応力状態を評価するためのシミュレーションモデルでは、載荷点周辺の詳細は考慮せず、載荷点を通る断面に直接面荷重を定義することにした。

(3) 固定位置の検討

マイクロカンチレバー試験片は試料表面に作成するため、実際の固定位置は試料底部である。モデル規模を小さくするために、モデル寸法を変化させながら梁の変形に影響を及ぼさない範囲を特定した。

さらに、梁の中立軸方向の結晶方位と梁の上面の結晶面方位を再現した局所座標軸を作成し、異方性弾塑性モデルの主軸として定義した。

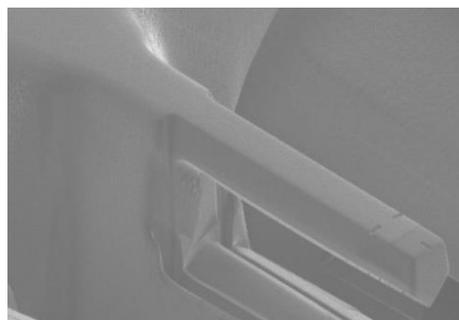


Fig.1 Typical microcantilever specimen prepared by FIB method.

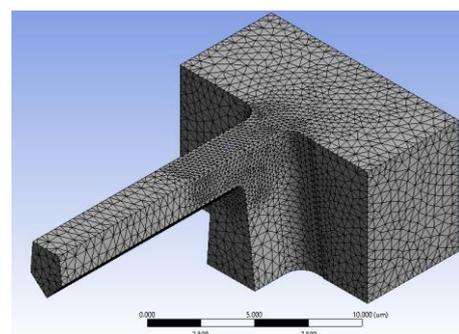


Fig.2 Typical FEM mesh created for a microcantilever.

4. Verification

ジオメトリを複数のソリッドに分割し、接続面のトポロジーを共有することで、メッシュ形状を6面体2次要素で離散化した。メッシュサイズは、最大応力が発生すると考えられる梁の根元部分を最小で設定した。そのメッシュサイズを変化させながら梁の変形および根本の応力状態に影響を及ぼさず計算時間もかかりすぎないサイズを検討したところ $0.2 \mu\text{m}$ であった。

後述する逆解析を行う際は、四面体2次要素を用いて離散化し、Fig.2に示すようなFEMメッシュを作成した。章の見出し

5. 弾塑性パラメータ推定

(1) 最適化法による逆推定

実験結果から弾塑性パラメータを逆推定するために、2章で定義した弾塑性パラメータ6つを入力値として数値シミュレーションを1試験あたり30回繰り返し、その解析結果から遺伝的集合アルゴリズム⁹⁾で応答曲面を作成した。次に、弾塑性パラメータを先端の変位の計算における残留誤差を減らすため、多目的遺伝的アルゴリズム(MOGA)⁹⁾を用いて最適化をした。最適化した弾塑性パラメータを使って入力した荷重に対する変位を計算し、一例をFig.3に示した。

(2) パラメータの面内方位による変化

試験片ごとに最適化したパラメータを6試験片同時に最適化したもので正規化した、方位による変

動をFig.4に示し、方位とパラメータの相関を得た。平均値である1から大きくばらついている箇所は信頼性が低いと考える。

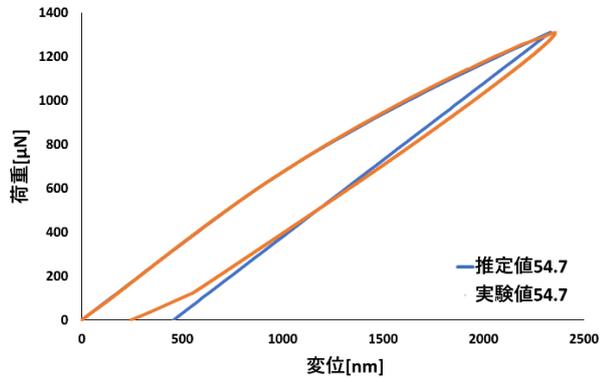


Fig.3 Comparison of calculations using experimental and estimated values at 54.7°.

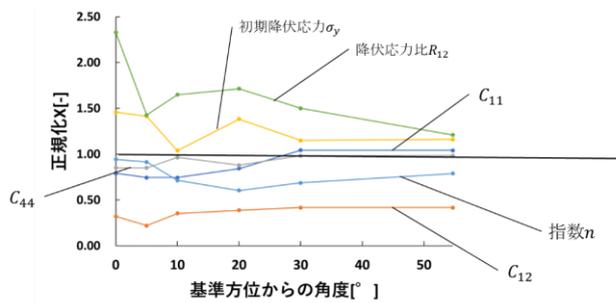


Fig.4 Variation of normalized estimated parameters with respect to crystal orientation

6. 結論

マイクロカンチレバー試験から得られた荷重変位データを用いて弾塑性係数を逆推定する手法を確立し、その手法の妥当性を確認した。推定した弾塑性パラメータそれぞれの信頼性は、扱う試験片の持つ結晶方位によって変化する。

そのため、求めたい弾塑性パラメータにより、結晶方位を使い分けることで、信頼性の高い逆解析を行うことができる。

参考文献

- 1) J. Tatami, et al. Local fracture toughness of Si3N4 ceramics measured using single-edge notched microcantilever beam specimens. J. Am. Ceram. Soc., 98, pp. 965-971, 2015.
- 2) Mikhail A. Borik, et al. Single crystal solid state electrolytes based on yttria, ytterbia and gadolinia doped zirconia. Materials Chemistry and Physics. Volume 277, 125499, 2022
- 3) 今野 豊彦, 物質の対称性と群論, 東京: 共立出版, 2001.
- 4) Cheng Luo, Huang Yuan. Determination of elastoplastic properties in anisotropic materials with cubic symmetry by instrumented indentation. Mechanics of Materials. Volume 174, November, 104461, 2022.
- 5) ANSYS Inc: Design Exploration User's Guide. Canonsburg, 2013.
- 6) G.M. Pharr, W.C. Oliver. Measurement of thin film mechanical properties using nanoindentation. MRS Bull., 17, pp. 28-33, 1992.