1.	まえがき	<u>+</u>	3
2.	概要		4
	2.1. セン	/ター設置について	4
	2.2. 組約	截	4
	2.3. 設任	備	6
	2.4. 研究	究成果の概要	7
	2.4.1.	構造健全性	7
	2.4.2.	材料データベースとシミュレーションの統合	7
	2.4.3.	最適化•逆問題	7
	2.4.4.	大規模可視化	7
	2.4.5.	大規模並列化	8
	2.4.6.	統合化	8
	2.4.7.	4次元を理解するための表現方法や解釈方法の開発・検討	9
	2.5. フォ	ナーラム・セミナー・ワークショップ・シンポジウムなどの企画と開催	10
	2.5.1.	計算力学フォーラム	10
	2.5.2.	計算力学セミナー	10
	2.5.3.	CCMR-Sungkyunkwan University student workshop	10
	2.5.4.	第6回計算力学シンポジウム	10
	2.6. 教	育活動	10
3.	研究成	果	11
	3.1. 構造	告健全性	11
	3.1.1.	構造健全性に関する研究の概要	11
	3.1.2.	結晶異方性や粒界を考慮した材料強度に関するマルチスケール解析	12
	3.1.3.	全領域ひずみ・形状計測と計算力学による構造健全性評価	25
	3.1.4.	構造物の3次元き裂進展問題における高性能計算力学手法に関する研究	32
	3.1.5.	EFMM による流体-構造連成問題における新しい解析手法に関する研究	39
	3.2. 材料	料データベースとシミュレーションの統合	45
	3.2.1.	材料データベースとシミュレーションの統合に関する研究の概要	45
	3.2.2.	材料データ共通スキーマ,オントロジーの開発	46
	3.3. 最i	窗化•逆問題	53
	3.3.1.	最適化・逆問題研究の概要	53
	3.3.2.	応答曲面法のための効率的曲面生成技術	54
	3.3.3.	大規模構造問題における形状最適化問題の研究	57
	3.4. 大邦	規模可視化	60
	3.4.1.	大規模可視化に関する研究の概要	60
	3.4.2.	統合化のための可視化システム	61
	3.5. 大邦	見模並列化	64
	3.5.1.	大規模並列化に関する研究の概要	64
	3.5.2.	大規模非圧縮性粘性流体解析システムの開発	65
	3.5.3.	汎用 CAE システムによる地球シミュレータ上での大規模構造解析	68
	3.6. 統合		70
	3.6.1.	統合化に関する研究の概要	70
	3.6.2.	システム統合化のイメージ	71
	3.7.4 次	、元を理解するための表現方法や解釈方法の開発・検討	74

3.7.1.4 次元の表現に関する研究の概要	74
3.7.2.4 次元空間を理解するための新たな表現の開発	75
4. 国際協力	79
4.1. 成均館大学(Sungkyunkwan University)	79
5. 情報発信	81
5.1. 第 11 回計算力学フォーラム (FEOFS 2010 / マレーシア)	81
5.2. 第 12 回計算力学フォーラム (WCCM/APCOM 2010 / オーストラリア)	
5.3. 第13回計算力学フォーラム (CMD / 北海道)	82
6. 教育活動	83
6.1. 教育活動風景	83
6.2. 卒論・修論の紹介	
7. 業績リスト	90
7.1. 論文	90
7.2. 総説・解説・エッセイ	92
7.3. 招待講演	93
7.4. 講演論文·口頭発表	94
7.5. 受賞	99
8. 結び	100

1. まえがき

本年度はセンターが活動を開始してから6年目にあたる.この報告書はこの第6年度のセンター活動を取りまとめたものである.これまでの5年間と同様,本年度もほぼ順調に推移した.

本年度の国際活動としては、まず、韓国成均館大学と本センターの大学院学生によるワークショプを2回行ったことがあげられる. すなわち昨年8月に韓国成均館大学にて、また今年1月に東洋大学計算力学研究センター(白山第2キャンパス)にてそれぞれ両国から大学院学生、ポストドク、教員が総勢約20名で活発な議論をおこなった.昨年度までと同様、ユニークで教育的価値が高い試みであった.参加した両方の多くの教員からも大成功であったとのコメントがあり、今後も継続的にこのような国際的な教育の催しを開くことを考えたい. 関連して当計算力学研究センターの教員数名が昨年夏と今春に先方で集中講義を数回にわたって行った. このように韓国成均館大学との協力はほぼ定着してきたといえよう.

さらに、マレーシア・クアラルンプル、オーストラリア・シドニー、北海道・北見において当地での 学術講演会を利用してそれぞれ計算力学フォーラムを成功裏に開催した。

広報活動としては、昨年11月に開催された東洋大学アカデミックシリーズ展に参加協力したことがあげられる。

センター公式行事としては毎年3月に計算力学シンポジウムを開催してきたが本年度も3月に 白山キャンパスにおいて予定している.その他のアドホックなセンター行事としてはセンター内で の学生の教育もかねて開催する計算力学セミナーがあるが、本年度はこれまでに内外の講師を 招き数回開催した.学生諸君にとっても世界の最先端の話題を目の前で聴講でき大きな刺激と なっていることと思われる.

研究面においても、多くの成果が得られつつあり、査読論文、講演論文も質量ともにますます 充実してきている。関連して、内外のいくつかの賞をメンバーが受賞した。なお、この3月には本 センターで育った大学院生1名が本センターとしては4番目の博士号取得の予定である。

以上本年度のセンター活動概要を述べさせていただいた.関係各位からのご批判とご指導を 賜れば幸いである.

> 2011年3月 東洋大学計算力学研究センター長 矢川元基

2. 概要

2.1. センター設置について

文部科学省学術フロンティア推進事業「計算力学研究センター」(5年プロジェクト)の設置の経 過は以下のとおりである.

- ・ 平成 16 年 12 月 文部科学省に申請
- ·平成17年3月内定通知
- ·平成17年5月理事会決定
- ・ 平成 17 年 6月 センター発足

・ 平成 17 年 12 月 センター開所式開催のあと, 白山第 2 キャンパス内計算力学研究センター 棟に入居し本格活動開始

2.2. 組織

センターの組織とメンバーは以下のとおりである.



メンバー

●センター長 矢川 元基 (東洋大学大学院 工学研究科 機能システム専攻教授)

●研究員

芦野	俊宏	(東洋大学	国際地域学部	国際地域学科	教授)
江澤	良孝	(東洋大学	総合情報学部	総合情報学科	教授)
田村	善昭	(東洋大学	総合情報学部	総合情報学科	教授)
塩谷	隆二	(東洋大学	総合情報学部	総合情報学科	教授)
中林	靖	(東洋大学	総合情報学部	総合情報学科	准教授)
吉野	隆	(東洋大学	理工学部 機械	江学科 准教授	Ż)

●研究助手

	-		
小林 隊	 身介	(東洋大学	計算力学研究センター)
長岡 惛	真介	(東洋大学	計算力学研究センター)

●客員研究員

中川 雅俊 (独立行政法人	科学技術振興機構)

- 藤澤 智光 (プロメテック・ソフトウェア株式会社)
- 古川 知成 (Institute for Advanced Learning and Research, Virginia Tech, USA)
- 松原 仁 (琉球大学 工学部 環境建設工学科)
- 宮崎 則幸 (京都大学大学院 工学研究科 機械理工学専攻)

2.3. 設備

センターの主要な設備である PC クラスタは下記の仕様を有している.

計算力学センター クラスタシン	ステム 一式			
<管理用計算機/解析用計算機	>			
VC83800-1UXESP	Intel Xeon 3.8 512K-L2 / 2M-L3	72		
	メモリPC/2700 DDR SDRAM 1024MB ECC Reg.	14 4		
	システムHDD 80GB 7200rpm	36		
	ケース 1U Rackmount	36		
<データ用ストレージ>				
VCRVAL50016-3U	HDD S-ATA 500GB 7200rpm	16		
	キャッシュ 1GB	1		
	ケース 3U Rackmount	1		
<スイッチ関連>	HP ProCurve Switch 4160GL	1		
	HP ProCurve Switch 2650	1		
<キャビネット,周辺機器>	25U ラックキャビネット一式	2		
	17型TFT液晶ディスプレー	1		
	キーボード,マウス	1		
<ソフトウェア>	Fedora Core, クラスタソフトScoreインストール	34		

2.4. 研究成果の概要

2.4.1. 構造健全性

原子力関連設備,化学プラント,航空宇宙システム等の高度の安全性が求められる構造物の 設計や運用においては,SCC・疲労・腐食等に関連する劣化予測,実験が困難なシビアアクシ デント時における挙動予測,事故要因の分析や補修工事の妥当性評価のための逆問題解析等 の健全性評価手法を確立することが極めて重要である.しかし,構造健全性評価のための数値 シミュレーションには,未だに熟練した解析技術者の経験と勘に頼っている要素が多く,システ マティックで迅速・正確な解析手法は,まだ確立されていないというのが実情である.その主な要 因として,

(1) マルチスケール・マルチフィジックス解析を精度良く効率よく解くことの重要さ.

(2) 大規模構造物に生じる 3 次元複雑形状のき裂を正確に表現する計算力学モデルの構築の困難さ. すなわち, 複雑形状・複雑き裂に対するプリプロセッシングの困難さ.

(3) 構造物とそれ以外の力学現象が相互関連することにより生じる連成現象を考慮した数値 解析の困難さ.

が挙げられる. そこで, 当センターの構造健全性に関する研究として, 上記の 3 つのサブテー マにフォーカスし, 下記の研究開発を実施している.

- (1) 結晶異方性や粒界を考慮した材料強度に関するマルチスケール解析
- (2) 全領域ひずみ・形状計測と計算力学による構造健全性評価
- (3) 構造物の3次元き裂進展問題における高性能計算力学手法に関する研究
- (4) EFMM による流体-構造連成問題における新しい解析手法に関する研究

2.4.2. 材料データベースとシミュレーションの統合

材料に関する基礎データは、計算力学のみならず、製造物に関する数値シミュレーション、環 境影響評価などの基本データとして欠くことのできないものである。しかしながら、必要とされるデ ータは各国・各所において独立に開発されており、異なったデータフォーマット、構造を持ってい るためにこれらを相互に交換、また、シミュレーション等の入力データとして用いるためには個別 にデータを変換する必要がある。このために、従来から材料に関する標準データフォーマットが 提案されているが、材料の特性、種類などは多岐にわたるため、現在広く普及した標準は存在し ていない、本研究では、材料データを交換するための標準となるスキーマ、オントロジーの研究 開発を行う。

2.4.3. 最適化·逆問題

大規模構造物を対象とした各種最適化技術の開発に取り組んでいる. そのひとつは応答曲 面法の効率的な曲面生成技術で,サンプリング点を減少させることに成功した. さらに構造の位 相最適化においては, NURBS を基底関数に用いた線形弾性問題の数値解析と形状最適化, および密度型位相最適化問題の数値解法についての研究を行い,実用性を検証した.

2.4.4. 大規模可視化

解析が大規模化・複雑化してくると、膨大な解析結果の評価方法が問題となってくる. その解決策の1つとして挙げられるのが可視化である. 計算機による解析結果の可視化は、1960年代から行われてきた比較的歴史ある技術であるが、特に 1980年代以降、計算機、特にグラフィックス機能を強化したワークステーション等の出現により急速に進歩した. その後、機器の高性能化、低価格化により広く用いられるようになり、またこれに伴って可視化のためのソフトウェアも多く発売されるようになった. しかし、2000年に入り、計算機環境が複雑化し、解析対象も多岐に亘っ

てくると、これまでの可視化ソフトウェアでは対応できないことが多くなってきた.そこでここでは、 様々な分野の数値解析に対して、その規模や計算機環境によらず統一的に利用できるような次 世代の可視化環境の構築を目指す.

平成 22 年度は,前年度に終了したプロジェクトのまとめと,次年度からの新しいプロジェクトに向けての課題の検討を行った.

2.4.5. 大規模並列化

2002年に登場し、当時世界最速のコンピュータであった「地球シミュレータ」のピーク性能は約40 TFlops であるが、現在世界最速のコンピュータである「天河一号 A」のピーク性能は 4.7 PFlops となっており、このことからもハードウェアとしてコンピュータの性能が向上するスピードがいかに速いかが分かる。一方、これらの大規模なコンピュータ上で動作する効率的なソフトウェアの開発に関しては、その開発スピードもソフトウェアの品質もまだまだ十分とは言えず、多くのソフトウェアが 20 世紀の主要なソフトウェアを修正し続けて用いられているのが実情である. 特に、1970~1980 年台に既に確立されているアルゴリズムに対して、並列化の実装のみを加えた物が多く見られる.

このような背景のもと、本プロジェクトでは様々な計算機プラットフォーム上で効率的に動作する、次世代の構造解析・流体解析システムを構築するとともに、これらを組み合わせた連成解析システムの構築を行った.具体的には以下の項目をテーマとした.

- (1) 大規模非圧縮性粘性流体解析システムの開発
- (2) 汎用 CAE システムによる地球シミュレータ上での大規模構造解析
- (3) 大規模流体構造連成解析システムの開発
- (4) 流体構造連成解析の最適化問題/逆問題への応用
- (5) 大規模解析結果の効率的な可視化手法について

本プロジェクトのベースとなっている汎用 CAE システムとしては ADVENTURE システムを用い, 特に構造解析 (ADVENTURE_Solid) と流体解析 (ADVENTURE_Fluid) 用に開発されたモジュ ールをベースに様々な改良及び応用を行った.

2.4.6. 統合化

本センターの研究プロジェクト「数値逆解析手法の開発とその構造健全性向上のための応用」には5つのサブプロジェクトがあるが、これらを有機的に結合し、1つの大きなシステムとして利用できるようにするために平成19年度より6つめのサブプロジェクト「統合化」を立ち上げた. 統合化サブプロジェクトの目的は従って、各サブプロジェクトで開発されるソフトウェア群をまとめて1つの大きなシステムとして使えるようにすることであるが、これまでに実施してきた各サブプロジェクトで開発された、あるいは開発中のソフトウェアを解析し、どのようなシステムとしてまとめあげることが適当であるかについての調査・検討を基に、統合化の基礎となる各ソフトウェア間のフロー図を形成し、システム全体としての統合化イメージを作成してきた.

本年度は、これまでよりより多くのモジュールやツール類との接続関係を具体的に示す事が出来、5 つのサブプロジェクト全部についてその関係性を明示する事が出来た.これは、統合化サブプロジェクトが目指して来た目的、すなわち、本センターの研究プロジェクト全体として一つのシステムを構築するという目的の第一段階が達成出来たことを意味する.

また,単に全体的なフロー図を作成するだけではなく、ある特定の解析を実行する際に必要と なるシステムとそれらの接続関係を具体例としていくつか提示し、統合されたシステムを利用する ユーザにとっての利便性を高めるようにした.一例として、大規模並列化サブプロジェクトで開発 された非圧縮性粘性流体解析システムと大規模可視化サブプロジェクトで開発された可視化シ ステムを統合し,教育用流体解析システムとして提示し,実際の教育活動で活用した.なお,この教育用流体解析システムを用いた演習は,日本機械学会の計算力学技術者認定事業(流体系・初級)の公認講習となっている.

2.4.7.4 次元を理解するための表現方法や解釈方法の開発・検討

ものづくりが対象とする次元は、多くの場合たかだか空間3次元+時間1次元である.相対論 や量子論を考えなければ(すなわち我々の考察を古典力学の枠組みに限定すれば)、空間がた かだか3次元までであることは我々が存在する次元が3次元空間で十分に記述できることを、時 間が1次元であることは我々が同一の時の流れに乗って生きていることを意味している.コンピュ ータシミュレーションの立場から言い直すのであれば、「質点の静力学的な問題は自由度が3で あり、動力学的な問題は自由度が4である」ということになるだろう.

数学や物理学では空間として3次元よりも大きな次元を考えることがある.例えば,繰り込み理 論は次元を変数と考えて,(4-d)次元における物理モデルを考えることがある.また,信号理論 では,情報の伝達として2バイトという単位を考えるときに 256次元の球の充填問題を考えるとい った研究も行われている.さらに,4次元における周期的な構造から3次元における複雑な構造 をデザインするといった試みもある(例えば宮崎).そのため,3次元よりも大きな次元を考えてそ の空間の幾何学的な性質を理解することは,決して小さな課題ではない.

4次元を理解することは困難である.2次元と3次元の関係から直感的に4次元を理解すること は、うまくいく場合もあるが、そうでない場合も多い.うまくいく場合に我々が使うのは、2次元人が 3次元の形状を理解するためにはどうすればいいのかを考える手法である(Abbott[1], Dewdney[3]).しかし、この方法が常にうまくいくわけではない.その例として、球の体積を考えて みる(Rucker[7]).

広義の球は、与えられた点(中心)からの距離が一定の長さ(半径)以内にある点の集合と定義される. この半径を r とおく. 1次元では直線、2次元では円、3 次元では球、4 次元以上では超球である. その体積(空間についての積分)は、それぞれ、 2r、 πr^2 、 $4\pi r^3/3$ 、そして $\pi^2 r^4/2$ である. この4つの係数を次元 d と関係して推定することは難しい.

4 次元上の点を 3 次元に射影することを考える. 4次元空間内での座標を, 直交4座標軸を用 いて (*x*,*y*,*z*,*w*) と表すこととし, 与えられた変換によって投影される点の座標を, 直交3座標軸 を用いて (*α*,*β*,*γ*)と表すことにする. 4次元空間を3次元で表現するということは, 4つの変数の 組み合わせを3つの変数を用いて表現するということに他ならない.

これまでに行われてきた射影の方法は、主に「平行投影」と「中心投影」である. 平行投影は 平行な光を多胞体に当てて光の先にある3次元の壁に影を映すものである. 特に光の向きと直 交する3次元壁への投影を「直投影」と呼ぶ. 中心投影は多胞体の外にある点光源が反対側の 壁に影を映すものである. 平行投影も中心投影も必ず強調される方向が存在している. これは、 光源と投影面が存在する以上は避けられない状況である. これらの変換は線形な変換(4行3列 の行列による変換)であるが、変換は非線形なものであっても構わない. 例えば3次元の立体を 表すのに用いられる平面グラフはその代表例だろう.

3次元の図形を印刷物でみるためには、得られた立体図形をさらに 2 次元に変換する必要が 生じる.本研究では、一般的な CG 技術を用いて立体を表現している.4次元→3次元という変換 のほかに3次元→2次元という変換の特性も知らないと理解が難しいというのは、4次元の形を紙 の上で議論するときの問題点のひとつである.

2.5. フォーラム・セミナー・ワークショップ・シンポジウムなどの企画と開催

2.5.1. 計算力学フォーラム

(1) 第 11 計算力学フォーラム (FEOFS 2010 / マレーシア)

2010年6月7日から9日の3日間に亘りマレーシアのクアラルンプールで行われた The Far East and Oceanic Fracture Society 2010 (FEOFS 2010)の2日目に, 2部構成のセッションで第11回計算力学フォーラムを行った.

(2) 第 12 回計算力学フォーラム (WCCM/APCOM 2010 / オーストラリア)

2010 年 7 月 23 日にオーストラリアのシドニーで行われた WCCM/APCOM 2010 にて, 第 12 回計算力学フォーラムを行った.

(3) 第13回計算力学フォーラム CMD / 北海道)

2010年9月24日,25日の2日間に亘り北海道の北見工業大学で行われた CMD2010 にて, 第13回計算力学フォーラムを行った.

2.5.2. 計算力学セミナー

以下のセミナーが計算力学研究センター1 階会議室で開催され, 活発な討論が行われた. (1) 2011 年 1 月 21 日

Prof. Moon-Ki Kim

(School of Mechanical Engineering, Sungkyunkwan University)

"Simulation Based Nono and Bio Engineering : From CNT to DNA Tile Design"

Prof. Yoon-Suk CHANG

(Department of Nuclear Engineering, Kyung Hee University) "Numerical approaches for industrial applications"

2.5.3. CCMR-Sungkyunkwan University student workshop

(1) 2010年8月11日に韓国の成均館大学(SKKU)水原キャンパスにて"The 2nd SKKU-TU Joint Student Workshop"を開催した.

(2) 2011 年 1 月 21 日に計算力学研究センター1階会議室において"The 3rd SKKU-TU Joint Student Workshop"を開催した.

2.5.4. 第6回計算力学シンポジウム

表記行事を,下記のとおり企画している. 日時: 2011年3月24日 場所: 東洋大学 白山キャンパス

参加予定者:計算力学研究センター研究員,研究助手,客員研究員,オブザーバー(学生)など 上記参加者の平成22年度の成果発表を中心に講演を行う予定である.

2.6. 教育活動

センター研究員らの指導のもとで,東洋大学工学部卒論学生,工学研究科大学院学生がセンターにおいて様々な研究活動を行っている.当センター所有の PC クラスターや高速度カメラなどを利用した最先端の研究を行える環境を提供して,当センターでは,学生の教育活動にも力を入れている.

3. 研究成果

3.1. 構造健全性

3.1.1. 構造健全性に関する研究の概要

原子力関連設備,化学プラント,航空宇宙システム等の高度の安全性が求められる構造物の 設計や運用においては,SCC・疲労・腐食等に関連する劣化予測,実験が困難なシビアアクシ デント時における挙動予測,事故要因の分析や補修工事の妥当性評価のための逆問題解析等 の健全性評価手法を確立することが極めて重要である.しかし,構造健全性評価のための数値 シミュレーションには,未だに熟練した解析技術者の経験と勘に頼っている要素が多く,システ マティックで迅速・正確な解析手法は,まだ確立されていないというのが実情である.その主な要 因として,

(1) マルチスケール・マルチフィジックス解析を精度良く効率よく解くことの重要さ.

(2) 大規模構造物に生じる 3 次元複雑形状のき裂を正確に表現する計算力学モデルの構築の困難さ. すなわち, 複雑形状・複雑き裂に対するプリプロセッシングの困難さ.

(3) 構造物とそれ以外の力学現象が相互関連することにより生じる連成現象を考慮した数値 解析の困難さ.

が挙げられる. そこで, 当センターの構造健全性に関する研究として, 上記の3 つのサブテーマにフォーカスし, 下記の4つの研究開発を実施している.

(1) 結晶異方性や粒界を考慮した材料強度に関するマルチスケール解析

(2) 全領域ひずみ・形状計測と計算力学による構造健全性評価

(3) 構造物の3次元き裂進展問題における高性能計算力学手法に関する研究

(4) EFMM による流体-構造連成問題における新しい解析手法に関する研究

我々は、3つのサブテーマを次のような位置付けで取り組んでいる.

サブテーマ1では、材料強度研究への計算力学手法の適用を、有限要素法を用いたマクロレベルの解析と分子動力学法等の原子レベルシミュレーション手法を用いたミクロレベルの解析の 両面から行い、マルチスケール・マルチフィジクス解析に対応する.また、複合材料における変形は金属材料とは異なり、微視的な亀裂や繊維の破断など複雑なメカニズムにより生じる.その 為、複合材料を含む構造物の構造健全性評価を行う為には、これらのメカニズムを考慮する必要がある.そこで、これらのメカニズムを考慮した材料定数同定および欠陥同定などの構造健全 性評価法を開発する.

サブテーマ 2 では,構造物の3次元き裂進展問題における高性能計算力学手法を研究開発し,実環境における高精度なき裂進展解析技術の確立を目指す.

最後に, サブテーマ3では, EFMM を使用することで, 計算力学の分野でも解析が特に困難な 事象の1つである連成現象を解く為の新しい解析手法を提案, 確立を目指す.

以上のように, 我々は, 様々な実問題に対応するために, 多方面の視点から構造健全性の確 立に取り組んでいる.

3.1.2. 結晶異方性や粒界を考慮した材料強度に関するマルチスケール解析

(1) 目標·計画

材料強度研究への計算力学手法の適用を,有限要素法を用いたマクロレベルの解析と分子 動力学法等の原子レベルシミュレーション手法を用いたミクロレベルの解析の両面から行う.マク ロレベルの解析では,電子デバイス/光学デバイス用単結晶材料を取り上げ,単結晶引き上げ プロセスからデバイス作成のための成膜プロセスまでの転位密度評価,およびマクロな単結晶の 割れ評価手法の確立を目指す(以降,マクロレベルの解析と呼称する).一方,ミクロレベルの解 析では,大規模分子動力学解析コードを開発し,それを用いることにより材料強度に粒界がどの ような影響を及ぼすかを検討する(以降,ミクロレベルの解析と呼称する).とりわけ,燃料電池等 で注目を浴びている水素利用に関連して重要となってきた水素環境下での材料強度劣化のメカ ニズムを明らかにする.

(2) 意義・国際社会との比較

(A)マクロレベルの解析

単結晶製造プロセスに関連したシミュレーションは流動・伝熱分野では多数行われているが, 結晶の品質に直接的な影響を及ぼす固体力学分野の研究は少ない.その中で,本研究では, 結晶異方性を厳密に考慮した単結晶育成過程の熱応力解析を三次元有限要素法を用いて行 い,結晶育成方向と結晶の品質との関連をはじめて明らかにするという先駆的な研究を実施した. また,クリープひずみ速度が転位密度の関数として与えられるクリープ構成式 Haasen-Alexander-Sumino モデルを用いて,単結晶引き上げ過程における非定常状態での転 位密度の定量的解析を世界に先駆けて行った.その後,これを結晶異方性を考慮した三次元 解析への拡張,さらにはインゴットアニールプロセス,デバイス作成時の成膜プロセスにおける転 位密度の定量的評価解析へ拡張するなど世界最先端の研究を行っている.

(B)ミクロマクロレベルの解析

これまで、Johnsonポテンシャルのような経験ポテンシャルを用いた分子動力学解析プログラム を開発し、数百万粒子程度の比較的小規模なモデルを用いてき裂とごく少数の粒界がある体系 について、単調負荷と疲労を模擬した繰り返し負荷について解析を行い、き裂端から射出される 転位と粒界の相互作用、および繰り返し負荷による疲労の初期過程のメカニズムについて明ら かにした.本研究では、このような研究を発展させ、下記のよう研究項目を実施する.

- ① 領域分割法を用いて並列計算機環境で動作するプログラムを開発し、1億-10億粒子程度 の解析を行うことを最終目標とする.
- ② 上記の解析コードを用いて、き裂と粒界があるモデルの解析を行い、粒界が材料の強度に 及ぼす影響について検討する.
- ③ 水素が材料強度に及ぼす影響を検討するために、き裂と粒界があるモデルに水素原子を 導入して水素脆化および疲労強度に水素がどのようなメカニズムで影響を及ぼすかを明ら かにする。

これまでも、Abrahamらの研究グループにより1億-10億粒子程度の大規模分子動力学解析 は行われているが、この解析は Lenard-Jones ポテンシャルというモデルポテンシャルを用い、単 結晶材料の解析を行っているにすぎず、材料の持つ複雑な内部構造は一切考慮されていない。 我々が実施しようとしている研究の特徴は、粒界を持つような実際的な材料、あるいは水素によ る材料強度の低下といった工学的に重要な分野を取り扱っている点に特徴がある。

(3) 研究内容

(A)マクロレベルの解析

(a)緒言

CaF2単結晶は真空紫外光への高い透過率,耐久性を有することから,半導体リソグラフィに用いられる ArF エキシマレーザー光源用のチャンバウィンドー材として使用されている.光源の高効率化,高性能化のためにチャンバウィンドー材には高い光学的性能が要求され,とりわけ応力 複屈折の低減が重要となる. CaF2単結晶がチャンバウィンドーとして使用される際には,図1に示すような機械的負荷により応力が生じる.単結晶はウィンドーホルダーにより固定され,レーザーガスとパージガスを封入するために上下面にOリングが設置されている.このOリングを通じて 負荷が加わる.また,ウィンドー両面はそれぞれレーザーガスとパージガスにさらされており,こ れらのガスからも負荷を受ける.ガスレーザーはブリュースター角で入射させる.このようにレー ザーを斜入射させる場合,ウィンドーの回転方位によって複屈折が変化する.これらの条件が複 屈折現象をより複雑にする.そこで,CaF2単結晶チャンバウィンドーの最適な使用条件の探索の ためには、実験よりもシミュレーションが有用である.よって本研究では、ArF エキシマレーザー 光源用のチャンバウィンドーとして使用される CaF2単結晶の応力複屈折を定量的に評価するシ ミュレーション手法を開発した.また、{111}面で切り出した単結晶に関して解析を行い、実験と の比較から、構築した手法の有効性を検証した.



図1 CaF2単結晶に作用している機械的荷重

(b)解析方法

本解析の流れは、図1に示す負荷条件における CaF2 単結晶体の応力解析を行い,さらに求められた応力から光路差を計算するというものである.以下にその概要を記述する.

応力解析

CaF2単結晶体の応力解析には汎用有限要素解析プログラムMSC Marcを用いた. CaF2単結 晶は立方晶であり、応力解析には結晶異方性を考慮した.

<u>光路差の計算</u>

光路差の計算方法としては、ジョーンズ計算という厳密な手法と光路に沿う平均的な力値を用いる近似的な手法がある。光弾性効果が小さい材料に対しては、後者の近似的な手法で十分な精度が出ることが証明されている¹⁾ので、本研究ではこの近似的な手法により光路差を計算した.

(c)解析条件

解析対象は図2に示した直径50mm,厚さ7mmの円板状のCaF2単結晶インゴットである. <111> 方向育成の単結晶について解析を行った. すなわち,チャンバウィンドー材の平坦面は{111}面で ある.図2には,この解析に使用した有限要素メッシュも示す.20節点アイソパラメトリック要素を用 いており、3108要素,14055節点である.図3に解析モデルの結晶方位示す.解析座標のx3軸を 単結晶の<111>方向に,x1軸を<110>に一致するようにした.



図4 回転角,入射角および光軸座標系の定義

(d)解析結果

レーザーの波長は 633nm であり, 図 4 に示すように, 入射角はブリュースター角 55.7°とする. 光の進行方向の x_1 - x_2 平面への正射影と<001>方向の x_1 - x_2 平面への正射影とのなす角を, 回転角 θ と定義する. レーザーガス圧は400kPa, パージガス圧は100kPa, また, ウィンドーホルダーの 締付けトルクは 265N とする.

応力解析結果を図5に示す.結果はミーゼスの相当応力で示してある.応力分布には弾性係数の異方性に起因する対称性が見られ、x1-x2平面内おいて3回対称となっている.同図より、応力は単結晶の上下面の中心部で最も高くなっていることがわかる.また、応力は厚さ方向に連続的に変化しており、上下面において最大となり、厚さ方向の中央付近でほぼ無応力状態となっている.これはレーザーガスとパージガス間のガス圧差により生じる曲げモーメントが応力に対して支配的となっていることを意味する.Oリングを通して加わる機械的負荷は、Oリング接触部から厚さ方向へは大きいものの、径方向へは減衰しており、レーザーが通過する領域へ与える影響はほとんどないといえる.

図 6~図 8 に解析により求まった単位厚さ当たりの光路差分布と速軸分布を, θ=0°, 30°, 60° の場合についてそれぞれ示す. 複屈折計算は単結晶上面の直径 25mm の領域で行った. <001>方向を黒実線で図 6~図 8 中に書き入れている. この図から, 光路差および速軸の分布 の仕方は, 回転角 θの影響を大きく受けることが分かる. 一方, 光路差の大きさ自体は, 回転角

によらずほとんど同じである.







続いて、実験から得られた光路差分布と速軸分布を図 9~図 11 にそれぞれ示す. 図 6~図 8 の解析結果と図 9~図 11 の実験結果を比較すると、光路差分布、速軸分布ともによく一致して いることがわかる. これらの図から、最適な入射条件を考察する. 入射角は p 偏光の反射を発生 させないようにブリュースター角であることが望ましい. 入射光の成分を p 偏光のみにした場合, 図 6~図 8 中の u₁- u₂ 平面内において偏光方向は u₁方向に一致する. この時、速軸の方向が u₁方向または u₂方向した場合には、偏光の分解が生じず、複屈折現象は発生しない. この観点 から図 6~図 8 の速軸分布を見ると、これら3 種類の回転角の中で、 0=60°の時の速軸分布が最 も優れていると言える. 以上のことから、開発したシミュレーション手法により複屈折の定量的な 評価が可能となり、その有効性が示された.

(e)結言

CaF₂単結晶チャンバウィンドーの結晶異方性を考慮した応力解析による応力評価を行い,その結果から複屈折を求める手法を開発した.これにより求められた光路差と速軸の分布は実験結果とよく一致した.このことから,この手法が有用であることが証明された.





(b) 速軸の分布

図9 θ=0°の場合の複屈折の実験結果



参考文献

1) H. Ogino, N. Miyazaki, T. Mabuchi, T. Nawata, Journal of Crystal Growth, 30, (2008), p.221.

(B)ミクロレベルの解析

(a)緒言

水素が固溶することでほとんどすべての材料の力学特性が劣化することが知られている.近年,水素エネルギー社会の構築について検討が進められているが,水素利用の増大に伴い水素脆化による破壊事故の増加が懸念される.このような水素による破壊を高精度に予測し,また耐水素脆性に優れる材料を開発するためには,様々な水素脆化素過程を解明し,発現条件を分類することが重要である.

これまでの研究で、水素ガス環境においては、鉄中で原子空孔、高エネルギー粒界、転位芯 が水素原子を強くトラップすることがわかっている¹⁾. 粒界や転位と水素との相互作用については 別報に報告した通りである^{2),3)}.本報では、水素と原子空孔の相互作用について検討を行う.こ れまでに、水素によって空孔が安定化することで、空孔濃度が増加し破壊につながるという事例 が報告されている.アルミニウムの場合では常温で保持することで材料中の空孔が安定化・凝集 しボイドが生成されるという解析結果⁴⁾が、また鉄の場合には水素をチャージした後引張試験を 行うと、生成した空孔によって破壊ひずみが減少するという実験結果⁵⁾が報告されている.このよ うに水素が原子空孔を安定化させ、その結果としてボイド生成による延性破壊を促進するモデル は、水素助長ひずみ誘起空孔機構(HESIV=Hydrogen Enhanced Strain Induced Vacancy)と呼ば れている⁶⁾. 本報では, 第一原理計算とNEB(Nudged Elastic Band)法を用いて, 空孔増殖の素 過程について明らかにする.

(b)評価方法

<u>第一原理計算</u>

本研究では第一原理計算ソフト VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)⁷⁾⁻⁹⁾を用いて密度 汎関数法(DFT)による計算を行う.全ての系について Projector Augmented Wave(PAW)法¹⁰⁾を 用いる.交換相関エネルギー項の取扱いに関しては一般化勾配近似(GGA)¹¹⁾を用い,電子の スピンを考慮する.k点の取り方については Monkhorst-Pack¹²⁾の特殊点法を用いる.k点数とカ ットオフエネルギーは,それぞれ単位 bcc 格子あたり10×10×10,425eV とする.解析には,2×2×2 の bcc 格子中に1個の空孔を含むモデル(15原子)を用いる.Wenらの EAM ポテンシャル¹³⁾を 用いた予備検討により,より大きな系を用いると空孔の拡散係数が小さくなる傾向が確認された ものの,20×20×20 のサイズでも違いは約8%であった.ここでの第一原理計算では,計算コスト の制約により解析モデルのサイズが強く制限されているが,そのことによる影響は小さいと考えら れる.

<u>NEB法</u>

NEB 法は、ある反応における反応前の原子配置(初期状態)と反応後の原子配置(最終状態) が与えられたとき、その反応が起こるために必要な最小エネルギーと、初期状態からどのような 原子配置の遷移をたどって最終状態に至ったのか(最小エネルギー経路(MEP))を見つけ出す 手法である.本研究では、Graeme Henkelmanらによって公開されている VASP 用のプログラム¹⁴⁾ を用い Climbing-Image NEB 法¹⁵⁾を用いて両端を除く位相点数を4点として解析を行う. 平衡空孔濃度の評価式⁶⁾

空孔の形成エネルギーを用いて、いくつかの近似の下で次式から温度 T の熱平衡状態における空孔濃度を計算することができる.

$$C_0 = \exp\left(-\frac{W_{\rm f}}{kT}\right) \tag{1}$$

Wfは空孔形成エネルギー, k はボルツマン定数である.

空孔移動頻度

次式から温度 T での空孔の移動頻度を計算する.

$$\Gamma = v \exp\left(-\frac{W_{\rm m}}{kT}\right) \tag{2}$$

ここで,・は振動数(= $5 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$), W_{m} は空孔拡散の活性化エネルギーである.

<u>初期配置の出現確率</u>

空孔に水素がトラップされる際,空孔と水素の相対位置によって系のエネルギーが異なるため, それぞれの配置の出現確率が異なる.本研究では,系が最安定な状態(i)から別の状態(ii)にな っている確率を次式によって求める.

$$P_{(ii)(i)} = \exp\left(-\frac{E_{(ii)} - E_{(i)}}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$$
(3)

らせん転位ジョグの移動速度¹⁶⁾

らせん転位中に形成されたジョグは応力下において空孔を形成しながら移動し軌跡上に空孔 列を生成する. せん断応力でが働く場合のジョグの移動速度は次式によって求める.

$$v = a v \exp\left(-\frac{W_{\rm f} + W_{\rm m}}{kT}\right) \exp\left(\frac{tbla}{kT}\right)$$
(4)

ここで, a は最隣接原子間距離, b はバーガースベクトル, l はジョグ間距離である. 空孔濃度分布¹⁷⁾

ジョグから列状に生成された空孔は時間とともに拡散し、それによって移動ジョグまわりには空

孔濃度の分布が生じる.ジョグの移動速度を一定(v)とすると、ジョグまわりの空孔濃度 Cpは3次元媒体中の点熱源の移動問題とのアナロジーから次式のように表される.

$$C_{\rm p} = C_0 + \frac{v}{4 D_v bR} \exp\left(\frac{-v(+R)}{2D_v}\right)$$

(5)

ここで, D_V は空孔の拡散係数(= $8a^2\Pi$ 6), R はジョグからの距離である.

(c) 熱平衡状態における空孔濃度の計算評価方法

水素は空孔にトラップされることで安定な状態となり、空孔の見かけのエネルギーが減少する. 図 12 にα鉄中の空孔に *i* 個目の水素を配位(トラップ)させた場合のトラップエネルギーを、図 13 に 300K において 0.01MPa から 100MPa の水素ガス圧力での水素原子のトラップサイト占有率と トラップエネルギーの関係をそれぞれ示す¹⁾.図 12 中には我々が行った DFTとEAM(Wen)ポテ ンシャルによる計算結果に加え、DFT 計算の文献値¹⁸⁾も示されている.図 1 より空孔の水素トラ ップエネルギーが 1 個目の水素で約 0.64eV, 2 個目で約 0.66eV, 3 個目で約 0.34eV である.こ れから、図 13 で示した水素ガス圧力の範囲ではほぼ 100%の確率で 1 個の空孔あたり 2 つの水 素がトラップされることがわかる.したがって、以降の解析では空孔まわりに 2 個の水素が存在す る場合について検討を行う.水素が存在しない時の原子空孔のエネルギーは約 2.14eV である が、2 個の水素が空孔にトラップされると考えることにより空孔の見かけのエネルギーは 0.84eV(2.14eV-(0.64 eV+0.66eV))に大幅に減少する.

表1に,鉄中の空孔に2つ水素がトラップされた場合の平衡空孔濃度を式(1)により評価した結果を示す.空孔濃度を計算する際の温度は300Kとしている.参考のため,アルミニウムに対して評価された結果⁴⁾も示す.見かけの空孔エネルギーが低下することで空孔濃度は大幅に増加することがわかる.しかし,アルミニウムやパラジウム¹⁹⁾の場合とは異なり,鉄では水素環境においても空孔濃度は7.74×10⁻¹⁵と非常に小さく,これだけで材料強度に大きな影響を及ぼすとは考えにくい.したがって,α鉄では空孔形成エネルギーの低下による平衡空孔濃度の増加以外のメカニズムが必要となることがわかる.



図 12 複数の水素原子を配位させた場合の トラップエネルギ



図 13 水素原子のトラップサイト占有率 トラップエネルギーの関係

表1 300KでのAlとFeの平衡空孔濃度			
	$Al^{4)}$	Fe	
Without			
hydrogen	2.56×10^{-12}	1.12×10^{-36}	
With hydrogen	9.46×10 ⁻⁴	7.74×10^{-15}	

(d) 空孔の移動頻度に関する検討

一般的に一度生成した空孔が消滅する原因として,他の転位や粒界,または表面まで空孔が 拡散する必要がある.そこで,空孔に水素がトラップされることによって空孔の拡散頻度が減少し, 塑性変形によって過飽和に生成した空孔が消滅しにくくなり,その結果,空孔濃度が大幅に増 加する可能性が考えられる.そこで,NEB 法を用いて空孔の拡散に要する活性化エネルギーを 計算し,空孔の移動頻度について検討する.

NEB 法を用いて図 14 に示す空孔と水素の配置における空孔のみの拡散に要する活性化エネルギーの解析を行い, それによって求めた活性化エネルギーを用いて式(2)によって移動頻度を計算する.また,初期状態(B)が最も安定であり, (C)~(E)のエネルギーが異なるため,式(3)を用いて,初期配置の存在確率を計算し,拡散頻度×存在確率を空孔の拡散速度の指標として,空孔の拡散速度への水素の影響について評価する.移動頻度を計算する際の温度には300Kを用いる.解析結果を表2に示す.まず,水素をトラップすることで空孔拡散に要する活性化エネルギーは大きくなり,空孔の移動頻度は大幅に減少する.また,空孔と水素の配置によって系の出現確率は変化し, (C)~(E)では0.004と小さくなる.しかし, (E)の拡散頻度は(B)の拡散頻度に比べて約 10⁷ 倍大きいため拡散頻度×出現確率の値は(E)の拡散過程が一番大きくなる.以上の結果から,空孔は水素をトラップすることで,空孔だけの場合に比べて移動頻度が約10⁻¹⁰ 倍になり,ほとんど移動しなくなることが明らかになった.なお,トラップされた水素原子と原子空孔が同時に動く場合についても活性化エネルギーの評価を行ったが,それらは非常に大きいものとなった.



図 14 空孔拡散に要する活性化エネルギー計算のための解析モデル

	Activation energy [eV]	Diffusion frequency [s ⁻¹]	Existence probability	Existence probability × Diffusion frequency
(A)	0.62	1.71×10^{2}	—	—
(B)	1.51	1.84×10^{-13}	1	1.84×10^{-13}
(C)	1.19	5.30×10 ⁻⁸	0.004	2.36×10^{-10}
(D)	1.39	2.32×10 ⁻¹¹	0.004	1.03×10^{-13}
(E)	1.07	6.42×10 ⁻⁶	0.004	2.86×10 ⁻⁸

表2 300Kにおける空孔拡散の活性化エネルギーおよび初期配置の出現確率

(e) らせん転位ジョグによる空孔増殖機構に関する検討

塑性変形によって過飽和に空孔が生成する機構の1つとして,らせん転位ジョグの引きずり運動が考えられる.ここでは,まず,せん断応力下におけるジョグの運動速度を解析することで空孔の生成速度を評価する.次に,ジョグの運動によってジョグ後方に生成した空孔列の拡散挙動を評価する.結晶格子中の水素原子の拡散が十分に速いとして,計算には(c)項で求めた空孔拡散の活性化エネルギーを用いる.

せん断応力下において、らせん転位ジョグは1原子間距離移動するごとに1つの空孔をジョ グ後方に生成しながら移動する.そのため、ジョグの運動速度と空孔の生成速度は比例関係に ある.せん断応力下におけるらせん転位ジョグの運動速度を、式(4)を用いて計算する.解析に 用いるパラメータを表3にまとめる.なお、列状に空孔が形成する場合には空孔のエネルギーが 低下するが、10%程度であり結果に極端な違いは生じない.ここでは代表的な値として、ジョグ高 さを1b、ジョグ間距離を100b¹⁶とする.計算結果を図15に示す.同じせん断応力下では水素が 存在するとジョグの運動速度が速くなることがわかる.したがって、水素が存在することで空孔の 生成速度は速くなる.これは、式(4)中の空孔形成エネルギーと空孔拡散の活性化エネルギーの 和(W_f+W_m)が、水素をトラップすることで小さくるためである.

次に、式(5)を用いて移動するジョグ後方における空孔濃度分布への水素の影響を評価する. ジョグの移動速度を、 1×10^{-8} 、 2×10^{-7} 、 1×10^{-3} m/sの3通りで計算を行う.計算結果を図16に示す. ジョグの位置から、ジョグの運動方向に ξ 軸を定義し、空孔濃度の下限の色の平衡空孔濃度 C_0 とし、距離の単位はbで無次元化している.

水素が存在する場合は、生成した空孔はジョグの軌跡上に空孔列として高濃度で残っている のに対し、水素が存在しない場合は空孔はジョグの軌跡上から広く拡散しており、広い範囲に空 孔濃度分布が見られる.このことから、水素が侵入することで塑性変形によって生成された空孔 は拡散・消滅することなくジョグの軌跡上に高濃度の空孔列として長時間残存し、それが脆化を 引き起こす1つの原因となるのではないかと考えられる.なお、本報では空孔生成機構としてら せん転位中のジョグのひきずり運動を取り上げたが、他の素過程によって空孔が過飽和に形成 される場合においても、同様に空孔の拡散係数の減少から空孔濃度が局所的に高い状態にな ると考えられる.

(f) 結言

第一原理計算を用いて a 鉄中の空孔と水素の相互作用について, 空孔の熱平衡濃度, 移動 頻度, 移動ジョグ後方における空孔濃度分布から評価した.水素によって a 鉄中の平衡空孔濃 度は増加するが脆化に直結するほど大きくならない.一方, 空孔の移動頻度は大幅に減少し, ジョグの運動によって生成された空孔は, 拡散することなくジョグの軌跡上に高濃度の空孔列と して残存することがわかった. つまり, 塑性変形によって過飽和に形成される空孔が, 水素の寄 与によって残存し, 空孔濃度が局所的に非常に高くなることが, 延性破壊を助長すると考えられ る.

表3 ジョグ速度計算のためのパラメーター			
	With	Without	
	hydrogen		
	hydrogen		
Formation energy	0.84	2 1/	
$W_{\rm f} [{ m eV}]$	0.04	2.14	
Migration energy	1.07	0.62	
$W_{\rm m} [{\rm eV}]$	1.07	0.02	
Temperature T [K]	300	300	
Jog space <i>l</i>	100 <i>b</i>	100 <i>b</i>	





図 16 ジョグ後方における空孔濃度分布(水素を含む場合と含まない場合)

参考文献

1)松本龍介 他,日本材料学会第14回分子動力学シンポジウム講演論文集,(2009-5),85. 2)陸茉莉花 他,材料,59,8,(2010).(印刷中)

3) S. Taketomi, R. Matsumoto and N. Miyazaki, "Atomistic Study of the Competitive Relationship between Edge Dislocation Motion and Hydrogen Diffusion in Alpha Iron", (2010). (submitted)

4) D.Tanguy and M.Mareschal, Phys. Rev. B, 72, (2005), 174116.

5) K. Takai and H. Shoda, Acta Materialia, 56, (2008), 5158.

6)南雲道彦, "水素脆性の基礎", (2008), 内田老鶴圃.

7) G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B*, **48**, (1993), 13115.

8) G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, **54**, (1996), 11169.

- 9) G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci., 6, (1996), 15.
- 10) P.E. Blöchl, Phys. Rev. B, 50, (1994), 17953.
- 11) J.P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B, 45, (1992), 13244.
- 12) H. J. Monkhorst et al., Phys. Rev. B, 13, (1976), 5188.
- 13) M. Wen, et. al., Journal of Materials Research, 16, (2001), 3496.
- 14) http://theory.cm.utexas.edu/vtsttools/
- 15) G. Henkelman and H. J. Jónsson, Chem Phys, 113, 22, 2000, 9978.
- 16) J. P. Hirth and J.Lothe, "Theory of dislocation", (1968), Krieger.

- 17) S. Karthikeyan, Acta Materialia, 52, (2004), 2577.
- 18) Y. Tateyama and T. Ohno, *Phys. Rev. B*, **67**, (2003), 174105.
- 19) Y. Fukai and N. Okuma, Phys. Rev. Lett., 73, (1994), 1640.

(4) 平成 22 年度進捗状況

(A) マクロレベルの解析

単結晶引き上げプロセスの転位密度評価についてはほぼ研究が収束したので、平成19年度 より、応力が結晶の光学特性に及ぼす影響(複屈折現象)についとりあげ、結晶の残留応力分 布から複屈折現象まで取り扱うことができる解析システムを開発に着手している. 今年度は半導 体リソグラフィに用いられる ArF エキシマレーザー光源用のチャンバウィンドー材として使用され る CaF₂について単結晶について取り上げ、この結晶には作用する機械的荷重により生じる複屈 折現象をシミュレーションし.実験結果と比較することによりシミュレーション手法の有効性を示し た.

(B) ミクロレベルの解析

水素脆性破壊に重要な役割を果たすと考えられる,材料中の様々な欠陥と水素の相互作用 を明らかにする研究の一環として,本年度は水素助長ひずみ誘起空孔機構・HESIV=Hydrogen Enhanced Strain Induced Vacancy)と呼ばれる水素脆化機構を原子レベルのシミュレーション手 法を用いて検討した.その結果,本機構は有力な水素脆化機構であることがわかった.

3.1.3. 全領域ひずみ・形状計測と計算力学による構造健全性評価

(1) 目標·計画

複合材料における変形は、金属材料と異なり微視的な亀裂や繊維の破断など複雑なメカニズムにより生じる。そのため材料定数同定および欠陥同定などの構造健全性評価法は、それらのメカニズムを考慮した上で開発されなければならない。20 年度までには材料定数同定のためにエネルギー法を開発し、数値解析および実験にてその有効性を検証した。21 年度は非線形材料定数同定・形状計測を行いエネルギー法を完成させるとともに、超音波による欠陥同定を可能にする。

(2) 意義・国際社会との比較

材料同定法、欠陥同定法ともに複数台のセンサーとセンサーフュージョンにより同定を行う。、 構造健全性評価分野でのセンサーネットワークの応用はまだ未開発で、本研究の意義は大変 高い。研究者は材料同定・欠陥同定分野においてこれまでにも第一線で活躍してきており、また その研究成果を基に海外にて職務についており、国際的にも一定の評価を既に得ている。

(3) 研究内容

3-1 エネルギー法

複合材料を構成する異方性材料の板の一枚が

$${}^{\{M\}}\boldsymbol{\sigma} = {}^{\{M\}}\boldsymbol{Q} {}^{\{M\}}\boldsymbol{\epsilon}, \qquad (1)$$

で表される場合を考える。ここで σ 、Q、 ϵ は応力、線形係数及びひずみを、 $\{M\}$ は材料座標系を表す。さらに非ゼロの材料定数を $\{M\}$ qとすると、大域的座標系における応力ーひずみ関係は

$${}^{\{G\}}\boldsymbol{\sigma} = {}^{\{G\}}\mathbf{Q}\left(\boldsymbol{\theta}; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right){}^{\{G\}}\boldsymbol{\varepsilon}, \qquad (2)$$

ここで $\boldsymbol{\theta}$ は異方性ベクトルを表す。マトリクスの成分 ${}^{\{G\}}q_{ij}\left(\boldsymbol{\theta};{}^{\{M\}}\mathbf{q}\right)$ は ${}^{\{M\}}\mathbf{q}$ に対して線形に次のように表される。

$${}^{\{G\}}q_{ij}\left(\boldsymbol{\theta};{}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) \equiv {}^{\{G\}}_{\{M\}}\mathbf{h}_{ij}\left(\boldsymbol{\theta}\right)^{T}{}^{\{M\}}\mathbf{q}.$$
(3)

エネルギー法は、試験片に加えられた仕事がW、変換された内部ひずみエネルギーがUの 場合、ポテンシャルエネルギーの増分が

$$\delta\Delta\Phi = \delta\Delta U - \delta\Delta W \,, \tag{4}$$

となることに基づく。ここで弾性変形においては \mathbf{f} 、 \mathbf{u} を外力、変位、また $\mathbf{q}_M = {}^{M}\mathbf{q}$ とした場合

$$\delta \Delta U = \frac{1}{2} \int_{V} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{T} \mathbf{Q} \left(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{q}_{M} \right) \Delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i}^{n_{s}} \sum_{j=1}^{n_{s}} \int_{V} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{i} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{j} dV \mathbf{h}_{ij} \left(\boldsymbol{\theta} \right) \right\} \mathbf{q}_{M}, \quad (5a)$$

$$\delta \Delta W = \frac{1}{2} \int_{S} \Delta \mathbf{u} \Delta \mathbf{f} dS , \qquad (5b)$$

となる。k番目の変形においては、エネルギー保存則により外部仕事が全て内部ひずみエネ ルギーとして蓄えられたと仮定すると、次の線形方程式が構築される。

$$\mathbf{g} \left(\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^k; \boldsymbol{\theta} \right)^T \mathbf{q}_M = \delta \Delta W^k \tag{6}$$

ここで

$$\mathbf{g}(\Delta \boldsymbol{\varepsilon}; \boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2} \sum_{i}^{n_s} \sum_{j=1}^{n_s} \int_{V} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_i \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_j dV \mathbf{h}_{ij}(\boldsymbol{\theta}), \qquad (7)$$

実験による $\Delta \varepsilon^k \ge \delta \Delta W^k$ をそれぞれ

$$\tilde{\mathbf{z}}_{\varepsilon}^{k} = \Delta \varepsilon^{k} + \mathbf{v}_{\varepsilon}^{k} \tag{8a}$$

$$\tilde{z}_W^k = \delta \Delta W^k + v_W^k \tag{8b}$$

とすると、エネルギー法は $\tilde{\mathbf{z}}_{\epsilon}^{k}$ と $\tilde{\mathbf{z}}_{W}^{k}$ から \mathbf{q}_{M} を同定する。

3-2 エネルギー法

複合材料を構成する異方性材料の板の一枚が

非線形材料挙動同定への拡張は、構成式を多直線近似するアプローチを採用することにより、 変更することなく簡単に行える。図1に二次元同定の場合の方法を例示する。今、計測されたひ ずみが1、2、6軸方向に α,β,γ 番目の区分に存在したとする。その状態での微小ひずみ増分を $\Delta \varepsilon_{i}^{*},i \in \{1,2,6\}$ とすると、応力は α,β,γ 番目の線形定数を用いて

$$\begin{bmatrix} \Delta \sigma_{1}^{k} \\ \Delta \sigma_{2}^{k} \\ \Delta \sigma_{6}^{k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{1}^{k} - \sigma_{1}^{k-1} \\ \sigma_{2}^{k} - \sigma_{2}^{k-1} \\ \sigma_{6}^{k} - \sigma_{6}^{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} {}^{\alpha}q_{11} & {}^{\beta}q_{12} & 0 \\ {}^{\alpha}q_{12} & {}^{\beta}q_{22} & 0 \\ 0 & 0 & {}^{\gamma}q_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \varepsilon_{1}^{k} \\ \Delta \varepsilon_{2}^{k} \\ \Delta \varepsilon_{6}^{k} \end{bmatrix},$$
(9)

と表される。その結果ある状態での非線形挙動は、線形の場合の4パラメータではなく、5パラ メータに表される。

$$\mathbf{q}_{M} \equiv \left[{}^{\alpha}q_{11}, {}^{\beta}q_{22}, {}^{\alpha}q_{12}, {}^{\beta}q_{12}, {}^{\gamma}q_{66}\right].$$
(10)



3-3 確率的手法による材料同定

カルマンフィルタによる確率的材料同定では最初に状態遷移モデルと測定モデルが構築され なければならない。状態遷移モデルについては材料定数が不変の値であることから、

$$\mathbf{q}_M^k = \mathbf{I} \mathbf{q}_M^{k-1} \tag{11}$$

と表される。測定値は測定誤差をモデル化することから、

$$\mathbf{g}\left(\tilde{\mathbf{z}}_{\varepsilon}^{k};\theta\right) \cong \mathbf{g}\left(\Delta\varepsilon^{k};\theta\right) + \mathbf{g}\left(\mathbf{v}_{\varepsilon}^{k};\theta\right)$$
(12)

を仮定すると、測定モデルを次のように得る。

$$\tilde{z}_{W}^{k} = \left\{ \tilde{\mathbf{g}}^{k} - \mathbf{g} \left(\mathbf{v}_{\varepsilon}^{k}; \theta \right) \right\}^{T} \mathbf{q}_{M} + v_{W}^{k}$$
(13)

本定式化で問題になるのが、測定モデルの係数 $\{\tilde{\mathbf{g}}^{t} - \mathbf{g}(\mathbf{v}_{\epsilon}^{t}; \theta)\}$ である。これが定数でないため、線形問題でのカルマンフィルタの推定式が応用できない。そのため、カルマンフィルタが定

式化された同様、分散の最小化によるカルマンゲインの導出を行う必要性がある。

カルマンフィルタは反復的に時間更新と測定更新を行う。そのため、カルマンフィルタを用いるにあたっては状態遷移モデルと測定モデルの構築に続いて、時間更新と測定更新のモデル 化が必要となる。まず時間更新は、材料定数が時間に依存していないため、推定値とその分散 も変化しない。

$$\overline{\mathbf{q}}_{M}^{k|k-1} = \overline{\mathbf{q}}_{M}^{k-1|k-1} \tag{14a}$$

$$\mathbf{P}^{k|k-1} = \mathbf{P}^{k-1|k-1} \tag{14b}$$

測定更新における推定値は、期待値が

$$E\left\langle \mathbf{q}_{M}^{k}\right\rangle := E\left\langle \mathbf{q}_{M}^{k}\right\rangle + E\left\langle \mathbf{K}^{k}\left[\tilde{z}_{W}^{k} - \left\{\tilde{\mathbf{g}}^{k} - \mathbf{g}\left(\mathbf{v}_{\varepsilon}^{k};\boldsymbol{\theta}\right)\right\}^{T}\mathbf{q}_{M}^{k} - v_{W}^{k}\right]\right\rangle$$
(15)

であることから

$$\overline{\mathbf{q}}_{M}^{k|k} = \overline{\mathbf{q}}_{M}^{k|k-1} + \mathbf{K}^{k} \left\{ z \widetilde{z}_{W}^{k} - \left(\widetilde{\mathbf{g}}^{k} \right)^{T} \overline{\mathbf{q}}_{M}^{k|k-1} \right\}$$
(16)

となる。共分散の測定更新は推定値の残差の導出から始める。

$$\mathbf{e}^{k|k} = \mathbf{q}_{M} - \mathbf{q}_{M}^{k}$$
$$= \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{K}^{k} \left(\tilde{\mathbf{g}}^{k} \right)^{T} \right\} \mathbf{e}^{k|k-1} - \mathbf{K}^{k} \left\{ v_{W}^{k} - \mathbf{g} \left(\mathbf{v}_{\varepsilon}^{k}; \theta \right)^{T} \mathbf{q}_{M}^{k} \right\}$$
(17)

そこで残差の期待値は

$$E\left\langle \mathbf{e}^{k|k} \left(\mathbf{e}^{k|k} \right)^{T} \right\rangle = \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{K}^{k} \left(\tilde{\mathbf{g}}^{k} \right)^{T} \right\} E\left\langle \mathbf{e}^{k|k-1} \left(\mathbf{e}^{k|k-1} \right)^{T} \right\rangle \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{K}^{k} \left(\tilde{\mathbf{g}}^{k} \right)^{T} \right\}^{T} + \mathbf{K}^{k} E\left\langle \left(v_{W}^{k} \right)^{2} \right\rangle \left(\mathbf{K}^{k} \right)^{T} + \mathbf{K}^{k} \sum_{i=1}^{4} \left(q_{M}^{k|k-1} \right)_{i}^{2} E\left\langle g_{i} \left(v_{\varepsilon}^{k}; \theta \right)^{2} \right\rangle \left(\mathbf{K}^{k} \right)^{T} \right\}$$

$$(18)$$

となり、共分散行列は

$$\mathbf{P}^{k|k} = \mathbf{P}^{k|k-1} - \mathbf{P}^{k|k-1} \tilde{\mathbf{g}}^{k} \left(\mathbf{K}^{k}\right)^{T} - \mathbf{K}^{k} \tilde{\mathbf{g}}^{kT} \mathbf{P}^{k|k-1} + \mathbf{K}^{k} \left\{ \tilde{\mathbf{g}}^{kT} \mathbf{P}^{k|k-1} \tilde{\mathbf{g}}^{k} + P_{W}^{k} + \sum_{i=1}^{4} \left(q_{M}^{k|k-1} \right)_{i}^{2} \left(P_{\mathbf{g}}^{k} \right)_{i} \right\} \left(\mathbf{K}^{k} \right)^{T}$$

$$(19)$$

と導出される。カルマンゲインによる共分散の微分値

$$\frac{\partial Tr\left(\mathbf{P}^{k|k}\right)}{\partial \mathbf{K}^{k}} = -2\left\{ \left(\tilde{\mathbf{g}}^{k}\right)^{T} \mathbf{P}^{k|k-1} \right\}^{T} + 2\mathbf{K}^{k} \left\{ \left(\tilde{\mathbf{g}}^{k}\right)^{T} \mathbf{P}^{k|k-1} \tilde{\mathbf{g}}^{k} + P_{W}^{k} + \sum_{i=1}^{4} \left(q_{M}^{k|k-1}\right)_{i}^{2} \left(P_{g}^{k}\right)_{i} \right\}$$

$$(20)$$

をゼロするカルマンゲインは

$$\mathbf{K}^{k} = \left(\mathbf{P}^{k|k-1}\right)^{T} \tilde{\mathbf{g}}^{k} \left\{ \left(\tilde{\mathbf{g}}^{k}\right)^{T} \mathbf{P}^{k|k-1} \tilde{\mathbf{g}}^{k} + P_{W}^{k} + \sum_{i=1}^{4} \left(q_{M}^{k|k-1}\right)_{i}^{2} \left(P_{g}^{k}\right)_{i} \right\}^{-1}$$
(21)

となる。式(21)を式(19)に代入すると共分散行列は

$$\mathbf{P}^{k|k} = \mathbf{P}^{k|k-1} - \mathbf{K}^{k} \left(\tilde{\mathbf{g}}^{k} \right)^{T} \mathbf{P}^{k|k-1}$$
(22)

と簡易化される。式(14)による時間更新と測定値が得られるたびの式(21)、(16)、(22)による測定更新を反復的に繰り返すことにより、材料定数の推定値と分散は常に更新される。時間更新が情報を変えないため、確定的手法と同じ表現を用いると確率的手法は

$$\overline{\mathbf{q}}_{M}^{k} = \overline{\mathbf{q}}_{M}^{k-1} + \mathbf{K}^{k} \left\{ z_{W}^{k} - \left(\widetilde{\mathbf{g}}^{k} \right)^{T} \overline{\mathbf{q}}_{M}^{k-1} \right\}$$
(23a)

$$\mathbf{P}^{k} = \mathbf{P}^{k-1} - \mathbf{K}^{k} \left(\tilde{\mathbf{g}}^{k} \right)^{T} \mathbf{P}^{k-1}$$
(23b)

$$\mathbf{K}^{k} = \left(\mathbf{P}^{k-1}\right)^{T} \tilde{\mathbf{g}}^{k} \left\{ \left(\tilde{\mathbf{g}}^{k}\right)^{T} \mathbf{P}^{k-1} \tilde{\mathbf{g}}^{k} + P_{W}^{k} + \sum_{i=1}^{4} \left(q_{M}^{k-1}\right)_{i}^{2} \left(P_{g}^{k}\right)_{i} \right\}^{-1}$$
(23c)

ここで

$$\overline{\mathbf{q}}_{M}^{k} = \overline{\mathbf{q}}_{M}^{k-1} + \mathbf{K}^{k} \left\{ \widetilde{z}_{W}^{k} - \left(\widetilde{\mathbf{g}}^{k} \right)^{T} \overline{\mathbf{q}}_{M}^{k-1} \right\} \\
= \left[\mathbf{I} - \mathbf{K}^{k} \left(\widetilde{\mathbf{g}}^{k} \right)^{T} \right] \overline{\mathbf{q}}_{M}^{k-1} + \mathbf{K}^{k} \widetilde{z}_{W}^{k} \tag{24}$$

$$= \mathbf{A}_{KF}^{k} \overline{\mathbf{q}}_{M}^{k-1} + \mathbf{c}^{k} \widetilde{z}_{W}^{k}$$

非線形挙動までの同定の場合、これらの式のみならず、事前知識についても詳しく理解して おくことがある。非線形同定では、材料定数 q_Mが毎回違う可能性がある。すなわち、あるひずみ が増加し、現在のパーティションから次のパーティションに移った場合は、そのパーティションの 材料定数が用いられる。その場合事前知識は現在のパーティションを用いるのが最も無難と言 える。一方でひずみが減少し、元のパーティションに戻った場合は、最後に推定した値を利用す るのが最も無難と言える。

3-4 数值解析

本手法の有効性を検証するために、平面応力仮定が成り立つ薄肉の材料試験片で非線形材料同定が行われた。実験データは本手法の有効性が分かりやすいように、3パーティションから成り立つ材料構成式を用いて擬似的に有限要素法により作られた。そのため、有限要素法で用いられた材料定数を同定できたかどうかで本手法の有効性を検証できる。

同定された材料定数および計算された分散をそれぞれ図2と図3に示す。まず図2から、全ての材料定数が150測定値を越えるあたりで求まっているのが分かる。引っ張り試験による材料定数同定のため、q₁₂とq₆₆により多くの測定点が必要なのも伺える。2つ目と3つ目のパーティションの材料定数同定は、そのパーティションへのひずみの移動が行われたときに生じている。q₆₆では、最初の材料定数がよく推定されなかったため、2つ目の材料定数と同時に同定されているのが分かる。



図 3 は測定値の増加に伴い、分散が減少していることが伺える。引っ張り試験であることから q22の分散値は特に低く、同定値の信頼性も高いことが分かる。q66は100測定点を越えるまで最初の材料定数の分散値が高い。実際に100測定点を越えるまで材料定数の同定ができていないことから、分散値が同定結果の信頼性の指標として有効であることを結論付けられる。



次に同定された材料定数を基に可視化された材料構成式とその情報エントロピーを図4に示 す。本手法が最も優れている点は、一試験片で図4(a)-(c)に示される全ての材料構成式を構築 できることにある。さらにカルマンフィルタを用いた確率統計学的な手法であることから、同定した 材料定数の信頼性を情報エントロピーで評価することができる。図4(d)で情報エントロピーが測 定点の増加とともに減少しているのは、同定した材料定数の信頼性が増してきていることを示し ている。150測定点を越えた点で情報エントロピーが停留し始めていることから、3パーティション の本問題においては、150測定点を越えた時点で同定を終えることが考えられる。実際に150 測定点を越えた時点で精度の高い材料定数が同定されている。



(4) 平成 22 年度進捗状況

平成23年度の研究では、形状計測を用いた亀裂進展計測および損傷・破壊予測、さらには、 超音波センサーのセンサーフュージョンによる亀裂同定も行っている。これらの技術全てを駆使 して、材料物性同定から欠陥同定までの構造健全性評価を一つの枠組みで引き続き体系化さ せていくつもりである。

3.1.4. 構造物の3次元き裂進展問題における高性能計算力学手法に関する研究

(1) 目標·計画

き裂を含む構造物の実環境における信頼性を検証・解析するためには、3次元複合荷重下に おける混合モード破壊現象を高精度に解析できる技術が必要である.特に、材料非線形を伴う 疲労き裂現象の3次元数値解析技術の確立は、構造物の健全性を検証する上で重要である. 本研究では、構造物の3次元き裂進展問題における高性能計算力学手法を研究開発し、実環 境における高精度なき裂進展解析技術の確立を目標とする.

(2) 意義・国際社会との比較

移動最小自乗法は、メッシュフリー法の基盤となる手法であり、国内外を問わず、多くの研究 者らによって研究されている.本手法は、単一の物理量に対する誤差を評価するものであり、複 数の物理量を同時に評価することはできない.しかしながら、回転やせん断ひずみに代表される ように、物理量として定義される量は、複数の物理量を介して定義される場合がある.したがって、 移動最小自乗法においても複数の物理量に対する誤差を同時に評価できるように拡張すること は、高精度な数値解析解を得るためにも極めて重要な要求である.また、このような高精度な手 法をき裂問題に適用することは、構造物の健全性を検証する上で極めて重要である.本研究は、 複数の物理量に対する誤差を同時に評価することができる移動最小自乗法を開発し、本手法を 破壊力学問題に応用展開することを目的としている.したがって、学術的かつ実用的な側面を 兼ね備えており、国際社会においても重要な研究のひとつであると考える.

(3) 研究内容

(A) 付帯条件付き多次元移動最小自乗法(C-MultiMLS法)

本研究で議論する移動最小自乗法は, Lancaster & Salkauskas によって開発された, 1次元の 誤差空間(図-1(a))における移動最小自乗法を, 多次元の誤差空間における近似法に拡張し, さらに, 回転やひずみ等の物理量が粒子の変位関数の自由度として定義付けることができるよう な付帯条件を付与した新しい手法である. 図-1 の δf_1 , δf_2 および δf_3 は, 任意の物理量 $\cdot f_1$, f_2 および f_3 と関数値との誤差量を意味している.



図-1 多次元移動最小自乗法の概念図

本手法は,付帯条件付き多次元移動最小自乗法(C-MultiMLS 法: Multi-dimensional Moving Least Squares Method with Constraint condition)と呼ばれ,与えられた微分方程式を近似的に解く方法への適用が期待されるものである.

今, 粒子 *i* にて設定された影響半径(任意の粒子に影響を及ぼす一定領域の半径)内に存在する*n* 個の近傍粒子の物理量を利用して粒子 *i* の物理量を補間する問題を考える.ここで, *l* 個の物理量 $f_1(x, y)$, $f_2(x, y)$,..., $f_i(x, y)$ は, *m* 個のパラメータ α_1 , α_2 ,…, α_m を介して関連付けられているとする.このとき, 粒子 *i* の関数値と計算値の間に生じる重み付き残差の平方和は次式となる.

$$J_{i} = \sum_{j=1}^{n} \left(W(r_{ij}, h) \sum_{k=1}^{l} \left(f_{j}(\tilde{x}_{j}, \alpha_{1}, \alpha_{2}, \cdots , \alpha_{m}) - (f_{k})_{j} \right)^{2} \right) , \quad r_{j} = |x - x_{j}|$$
(1)

ここで、 J_i は残差の平方和、 $W(r_i,h)$ は重み関数、 r_i は粒子 iと粒子 j の距離、hは影響半径、 $\tilde{x}_j = x_j - x_i$, $\tilde{y}_j = y_j - y_i$ である. なお、重み関数は、影響領域の範囲外でゼロとなるような関数 である. したがって、評価関数 J_i の値が最小になるように $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_m$ を決定すればよい. ここで、 付帯条件とは、評価点において内挿された変位の値を、その点に離散化された変位の値に拘 束するという条件である. 具体的には、次式で示すように、粒子 iの関数値がその点の値を通過 するように仮定する.

$$f_i(x, y) = a_1(x - x_i) + a_2(y - y_i) + f_i$$
⁽²⁾

したがって, C-MultiMLS 法は, 図-1(b)に示しているように, 一般的な移動最小二乗法に付帯 条件を追加し, 多次元の誤差空間に拡張した手法であると言える.

(B) Generalized Particle Method の定式化

(1) 粒子における変位場の導出

デカルトの直交座標系(x,y)上の座標(x_i, y_i)に位置する粒子 *i* について考える. 粒子 *i* まわりにおける変位を(u,v)とすると, *i* 点周りで 2 次の項まで Taylor 展開することによって, 次式が得られる.

$$u = u_i + \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_i \widetilde{x}_i + \frac{\partial u}{\partial y}\Big|_i \widetilde{y}_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_i \widetilde{x}_i^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\Big|_i \widetilde{y}_i^2 + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\Big|_i \widetilde{x}_i \widetilde{y}_i$$
(3)

$$v = v_i + \frac{\partial v}{\partial x} \bigg|_i \widetilde{x}_i + \frac{\partial v}{\partial y} \bigg|_i \widetilde{y}_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \bigg|_i \widetilde{x}_i^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \bigg|_i \widetilde{y}_i^2 + \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} \bigg|_i \widetilde{x}_i \widetilde{y}_i$$
(4)

一方,弾性理論(微少変形理論)によって,ひずみおよび回転は,

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x}$$
, $\varepsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y}$, $\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)$ (5a)

$$\theta = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right)$$
(5b)

のように定義される. ここで, ϵ_x はx方向のひずみ, ϵ_y はy方向のひずみ, は ϵ_x , せん断ひずみ, θ は回転である. したがって, 式(3)および式(4)に式(5)の関係式を適用すると, 粒子 i まわりに おける変位 (u,v) は次式のようになる.

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = F_2^u(x, y) \boldsymbol{D}^u$$
(6)

$$\mathbf{D}^{u} = \left(u_{i} v_{i} \theta_{i} \varepsilon_{ix} \varepsilon_{iy} \varepsilon_{ixy} \varepsilon_{ix,x} \varepsilon_{ix,y} \varepsilon_{iy,x} \varepsilon_{iy,y} \varepsilon_{ixy,x} \varepsilon_{ixy,y}\right)^{t}$$
(7b)

となる. 式(7b)において, u_i および v_i は粒子iの並進方向変位, θ_i は粒子iの回転, ε_{ix} , ε_{iy} , ε_{ixy} は粒子iのひずみ, $\varepsilon_{ix,x}$, $\varepsilon_{ix,y}$, $\varepsilon_{iy,y}$, $\varepsilon_{iy,y}$, $\varepsilon_{ixy,x}$, $\varepsilon_{ixy,y}$ は粒子iのひずみの微分量であり, ","はx方向微分, ","はy方向微分を意味し, "T"は転置を意味している. 本論文では, ひずみの空間 微分量, すなわち $\varepsilon_{ix,x}$, $\varepsilon_{ix,y}$, $\varepsilon_{iy,y}$, $\varepsilon_{ixy,x}$, $\varepsilon_{ixy,y}$ を曲率自由度と呼んでおり, この項を考慮するこ とで曲げが卓越する問題や比較的複雑な応力場を持つような問題に対して高精度な解が期待 できる. なお, 変位(u,v)に対して, 1次の項までのTaylor展開(回転およびひずみを考慮)を考 えた場合のマトリックス $F_{i}^{**}(x,y)$ およびD "は次式となる.

$$\boldsymbol{F}_{1}^{u}(x,y) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\widetilde{y}_{i} & \widetilde{x}_{i} & 0 & \frac{1}{2}\widetilde{y}_{i} \\ 0 & 1 & \widetilde{x}_{i} & 0 & \widetilde{y}_{i} & \frac{1}{2}\widetilde{x}_{i} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{D}^{u} = \begin{pmatrix} u_{i} \, v_{i} \, \theta_{i} \, \varepsilon_{ix} \, \varepsilon_{iy} \, \varepsilon_{ixy} \end{pmatrix}^{T}$$
(8a)
(8b)

つぎに,式(6)で仮定された粒子 *i* の変位 (*u*,*v*)を付帯条件付き多次元移動最小自乗法 に適用する.このとき,式(6),式(7a)および式(7b)を用いると,式(1)は次式のように書くことができ る.

$$J_{i} = \sum_{j=1}^{n} W(r_{ij}, h) \left[\left(\widetilde{u}_{ji} + \widetilde{y}_{ji} \theta_{i} - \widetilde{x}_{ji} \varepsilon_{ix} - \frac{1}{2} \widetilde{y}_{ji} \varepsilon_{ixy} - \frac{1}{2} \widetilde{x}_{ji}^{2} \varepsilon_{ix,x} - \widetilde{x}_{ji} \widetilde{y}_{ji} \varepsilon_{ix,y} + \frac{1}{2} \widetilde{y}_{ji}^{2} \varepsilon_{iy,x} - \frac{1}{2} \widetilde{y}_{ji}^{2} \varepsilon_{ixy,y} \right)^{2} + \left(\widetilde{v}_{ji} - \widetilde{x}_{ji} \theta_{i} - \widetilde{y}_{ji} \varepsilon_{iy} - \frac{1}{2} \widetilde{x}_{ji} \varepsilon_{ixy} + \frac{1}{2} \widetilde{x}_{ji}^{2} \varepsilon_{ix,y} - \widetilde{x}_{ji} \widetilde{y}_{ji} \varepsilon_{iy,x} - \frac{1}{2} \widetilde{y}_{ji}^{2} \varepsilon_{iy,y} - \frac{1}{2} \widetilde{x}_{ji}^{2} \varepsilon_{ixy,x} \right)^{2} \right]$$

$$= \sum_{j=1}^{n} W(r_{ij}, h) \left(J_{u}^{2} + J_{v}^{2} \right)$$

$$(9)$$

ここで, *n* は近傍粒子数, $\tilde{u}_{ji} = u_j - u_i$, $\tilde{v}_{ji} = v_j - v_i$, $\tilde{x}_{ji} = x_j - x_i$, $\tilde{y}_{ji} = y_j - y_i$ である. 式(9)の評価 関数が最小となるためには, 次式を満足する必要がある.

$$\frac{\partial J_i}{\partial \boldsymbol{D}^{\boldsymbol{u}^T}} = 0 \tag{10}$$

したがって,式(10)を係数ベクトルD"でまとめると次のマトリックス方程式が得られる.

$$\boldsymbol{A}_{2}^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\boldsymbol{D}^{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{b}^{\boldsymbol{u}} \tag{11}$$

ここで,式(11)の A^{*}₂(x,y) (12×12 マトリックス)や **b**^{*} は式(10)をマトリックス形にまとめることで得られる.式(11)より,式(6)で求める粒子 *i* の変位関数は次式のようになる.

$$\binom{u}{v} = \boldsymbol{F}_{2}^{u}(x,y) \cdot (\boldsymbol{A}_{2}^{u}(x,y))^{-1} \cdot \boldsymbol{b}^{u}$$
(12)

ここで,式(12)の b^uは次式のようになる.

$$\boldsymbol{b}^{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{C}^{\boldsymbol{u}} \cdot \boldsymbol{u}_{j} \tag{13a}$$

$$\mathbf{u}_{j} = (u_{i} \quad v_{i} \quad u_{1} \quad v_{1} \quad \cdots \quad u_{n-1} \quad v_{n-1})^{T}$$
(13b)

式(13a)の マトリックス C^{u} は、ベクトル b^{u} に含まれている係数をマトリックス形式に展開したもの である. \mathbf{u}_{j} は着目粒子 iおよび近傍粒子の自由度 (u_{j}, v_{j}) である. 式(13)を式(12)に代入する ことにより、評価点 iの変位場 $(u v)^{T}$ は、近傍粒子の自由度にて離散化することができる. すな わち、

$$\binom{u}{v} = N \cdot \mathbf{u}_{j} \tag{14}$$

で表わすことができる.ただし,

$$\mathbf{N} = \mathbf{F}_{2}^{u}(x, y) \cdot (\mathbf{A}_{2}^{u}(x, y))^{-1} \cdot \mathbf{C}^{u}$$
(15)

である. なお, 粒子 i の変位場として式(8a)の $F_{i}(x,y)$ を適用した場合における N の導出方法も上記と同様であり, この場合の $A_{i}(x,y)$ マトリックスのサイズは, 6×6 となる.

(2) 粒子における剛性マトリックスの導出

ここでは,式(14)で表わされる粒子の変位場を利用して,粒子における剛性マトリックスを導出する. 今,式(15)の空間微分をとれば,

$$\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{F}_2^u(x,y)}{\partial x} \cdot (\mathbf{A}_2^u(x,y))^{-1} \cdot \mathbf{C}^u + \mathbf{F}_2^u(x,y) \cdot \frac{\partial (\mathbf{A}_2^u(x,y))^{-1}}{\partial x} \cdot \mathbf{C}^u + \mathbf{F}_2^u(x,y) \cdot (\mathbf{A}_2^u(x,y))^{-1} \cdot \frac{\partial \mathbf{C}^u}{\partial x}$$
(16)

となる. したがって, 粒子 i の剛性マトリックス K は仮想仕事の原理より, 有限要素法と同様な形式で次式のように求めることができる.

$$\int_{\Omega} \varepsilon^{r} \sigma d\Omega = \mathbf{K} \mathbf{u} \tag{17}$$

ただし,

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_{G}^{T} \mathbf{D} \mathbf{B}_{G} d\Omega \tag{18}$$

 $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} \tag{19}$

とし、マトリックス B_G は、有限要素法における変位-ひずみマトリックスに相当するものであり、式 (16)を用いることで求められる.また、 Ω は体積、Dは応力-ひずみマトリックスである.本論文で は、以後、式(19)で定義される粒子の剛性マトリックスを用いて解を導き出す手法を Generalized Particle Method: GPM と呼ぶことにする.

(3) 粒子積分の評価法

式(17)を用いて、粒子 *i* における剛性マトリックスを得るためには、粒子ごとに領域積分を実行する 必要がある.本研究では、図-2 に示すように粒子ごとに影響領域を定義し、Gauss の数値積分を用 いて行うことにした.具体的には、解析領域全体における積分の重複評価を避けるために、着目粒 子 *i* および近傍粒子2つを用いた三角形領域(図-2の波線の三角形)を考え、粒子*i*周りの全て の三角形を集合させた領域を積分領域とした.



図-2 粒子の積分領域

(C) Generalized Particle Method の性能評価

ここでは、GPM の弾性問題における理論解に対する精度を検証する.これ以降,表記を簡単にするために,式(7)に示した2次の変位場を用いた場合のGPMを"GPM-quadratic",式(8)に示した1次の変位場を用いた場合のGPMを"GPM-linear"と呼び,定ひずみ三角形要素を用いた有限要素法を"FEM-TRI",線形ひずみ三角形要素を用いた有限要素法を"FEM-TRI2"と呼ぶことにする.

(1) Cook の片持ち梁モデルにおける変位の精度

ここでは、図-3 に示す Cook の片持ち梁問題における GPM の精度を検証する.本例題にお いては、図-4(a)~(c)に示すように 2×2, 4×4, 8×8 の 3 パターンにて検証した.また,自由端(x = L)において荷重 P(=1.0)を与え、ヤング率 Eは 1.0、ポアソン比 vは 1/3 を仮定した(図-3 参 照).また、固定端においては x, y方向固定とした.表-1 に、図-3 の C 点における垂直変位を参 照解にて正規化した値を示す.また、図-4(a)~(c)に示すように、各モデルで総粒子数が 9, 25, 64と異なるため、各モデルにおいて各粒子おける影響領域内の最小粒子数を GPM-linear にお いては、それぞれ、8, 10, 11、GPM-quadratic においては、それぞれ、7, 14, 18 に設定した. GPM-linear と GPM-quadratic の粒子数が異なっているが、これは GPM-linear と GPM-quadratic とでは解を算出する過程で必要とする粒子数が異なることに起因するものであり、本質的な問題ではないことを明記しておく.なお、本研究では、得られる解の数値のみに着目して議論を進めるため、単位については特に指定しない.

表-1 に解析結果を示す. 同表において, GPM-linear および GPM-quadratic は, GPM の変位 場にそれぞれ式(8a)および式(7a)を用いた場合の解であり, FEM-TRI および FEM-TRI2 は変位 仮定型有限要素法のそれぞれ定ひずみ三角形要素, 線形ひずみ三角形要素による解を表して いる. 表-1 より, GPM-linear および GPM-quadratic の精度は, FEM-TRI より高く, かつ FEM-TRI2 と同等もしくはそれ以上であることがわかった. この結果から, 本例題における GPM の変位の精度は, 極めて高いと判断される.



図-3 Cook の片持ち梁モデル



図-4 Cookの片持ち梁モデル解析用の粒子配置図

�� 「 COUR W/ III つ 木 ビ / / / COUR W/ の	表-1	·1 Cookの	片持ち梁モ	デルにお	ける角	24
--	-----	----------	-------	------	-----	----

		Mesh	
Method	2×2	4×4	8 × 8
FEM-TRI	0.29	0.47	0.73
FEM-TRI2	0.89	0.99	1.00
Gpm-linear	0.94	1.00	0.99
Gpm-quadratic	0.88	1.01	1.02
Reference value		23.91	


図-5 片持ち梁モデル(Timoshenkoによる解)

ここでは、図-5 に示すような片持ち梁(L=48, D=12, t=1)の自由端に放物線状の荷重(P = 1000.0)が作用する静弾性問題を対象として、変位、応力および次式に示す変位ノルム||E||_uと エネルギーノルム||E||_eの収束性について検討する.

$$\|E\|_{u} = \sqrt{\int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{u}^{exact})^{T} (\mathbf{u} - \mathbf{u}^{exact}) d\Omega}$$
(25a)

$$||E||_{e} = \sqrt{\int_{\Omega} \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{exact})^{T} (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^{exact}) d\Omega}$$
(25b)

ただし,

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u & v \end{pmatrix}^T \tag{26a}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & \varepsilon_y & \varepsilon_{xy} \end{pmatrix}^T \tag{26b}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_y & \sigma_{xy} \end{pmatrix}^T \tag{26c}$$

である. ここで, u, ε および σ はそれぞれ変位, ひずみおよび応力の数値解析解であり, u^{exact}, ε^{exact} および σ^{exact} はそれぞれひずみおよび応力の厳密解であり, 変位および応力の厳密解は次式にて表わすことができる.

$$u^{exact} = -\frac{Py}{6EI} \left((6L - 3x)x + (2 + \nu) \left(y^2 - \frac{D^2}{4} \right) \right)$$
(27a)

$$v^{exact} = \frac{P}{6EI} \left(3vy^2 (L-x) + \frac{D^2 x}{4} (4+5v) + (3L-x)x^2 \right)$$
(27b)

$$\sigma_x^{exact} = -P(L-x)y/I \tag{27c}$$

$$\sigma_y^{exact} = 0 \tag{27d}$$

$$\sigma_{xy}^{exact} = \frac{P}{2I} \left[\frac{D^2}{4} - y^2 \right]$$
(27e)

ここで, I (= D³/12)は断面二次モーメントである.また,ひずみの厳密解は,次式に示すよう に応力の厳密解に応力-ひずみマトリックスの逆行列**D**⁻¹を乗じて算出した.

 $\boldsymbol{\varepsilon}^{exact} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{\sigma}^{exact}$

(28)

固定端 (図-6 の左側) における境界条件は, 図-5 に示しているように, 変位の厳密解を強制 変位として与えた. ヤング率 E は 3.0e+7, ポアソン比v は 0.3 を仮定した(図-5 参照). またこの 問題において, 各粒子における影響領域内の粒子数は 14 とし, 粒子は等間隔に配置し, 9×3 (図-5 参照), 17×5, 25×7, 33×9, 41×11, 49×13, 57×15, 65×17, 73×19, 81×21, 89×23, 97×25 の 12 パターンを用意した. 図-6 および図-7 に, それぞれ, 粒子数と変位誤差ノルムおよび粒子数とエネルギー誤差ノルムの関係を示した. なお, 水平軸は粒子数の平方根を対数化した値, 鉛直軸にはそれぞれの誤差ノルムを対数化した値を示している. なお, 参考までに FEM-TRI を用いた場合の解も同時に示した.

図-6より、変位誤差ノルムの値は、17×5において、GPM-linearでは1.80×10⁻³、GPM-quadraticでは 1.24×10⁻³、FEM-TRIでは 1.78×10⁻²となり、GPM-linear および GPM-quadratic ともに、FEM-TRIよりも高い精度となった.また、GPM-linear は GPM-quadratic よりも精度が悪いが、厳密解に対する収束率Rを比較すると、GPM-lnearはR=2.8、GPM-quadraticはR=1.4、FEM-TRIは R=2.0となり、本例題においては、GPM-linear が最もよい結果となった.

図-7より、17×5において、GPM-linearは3.16×10⁻¹、GPM-quadraticは1.57×10⁻¹、FEM-TRIは7.63×10⁻¹となり、変位誤差ノルム同様に、GPM-linearおよびGPM-quadraticによる解は、FEM-TRIの解より精度が高いことがわかった.また、厳密解に対する収束率の比較を行うと、GPM-linearはR=1.4、GPM-quadraticはR=0.7、FEM-TRIはR=1.0となり、これも変位誤差ノルムと同様に、GPM-linearが最も高い収束率となった.以上のことから、パッチテストにおいてはGPMの収束性は見られなかったが、誤差ノルムの検証により、GPMの収束性が判明したと同時に、FEM-TRIよりも高い精度を有した解析手法だということがわかった.



図-6 節点数と変位誤差ノルムの関係



図-7 節点数とエネルギー誤差ノルムの関係

(4) 平成 22 年度進捗状況

今年度は、付帯条件付き多次元移動最小自乗法(C-MutliMLS 法)を提案し、弾性固体問題 へ適用する方法論について議論した.その結果、少ない自由度で高い精度が得られる新しい数 値計算手法を提案することができた.今後は、本手法の三次元化およびき裂進展問題に適用す る必要があり、今後の課題としたい.

3.1.5. EFMM による流体-構造連成問題における新しい解析手法に関する研究

(1) 目標·計画

本研究では,計算力学の分野において,徐々に需要が高まりつつある連成現象を解く為の新 しい解析手法を提案することを目的としている.連成現象には様々な組み合わせの現象が存在 するが,本研究では流体と構造の連成現象をその対象としている.

近年,計算機の性能は飛躍的に向上してきているにもかかわらず,未だに連成現象を対象とした解析は単一の現象を対象とした解析と比較して非常に少ないのが現状である.連成現象を 解く際には,単一の現象を対象とした解析を行う場合と比較して,様々な問題が生じてくる,これ らの問題が連成解析をより困難なものにする原因となっていると考えられる.本研究の目的であ り,提案する新しい流体-構造連成解析手法は,これら連成現象を取り扱った際に生じる様々な 問題点を抑制する事が可能であるという特徴を有する.

平成22年度は、本研究で2つの解析場で用いる解析手法のシステムを構築し、その有効性を 検証し、次年度以降にこれらの手法を組み合わせた流体-構造連成解析手法の開発を行う.

(2) 意義・国際社会との比較

前述の通り,計算力学の分野において,流体-構造連成現象を対象とした解析の事例は,単 一の現象を対象とした解析のケースと比較して非常に少ない.しかしながら,我々の身の周りで 生じている現象のほとんどは,何らかの力学現象が相互関連する連成現象である.

流体-構造連成現象が原因となった事故が過去に多発している.特に有名な事故の事例として、タコマナローズ橋の崩落事故が挙げられる.タコマナローズ橋はアメリカ合衆国、ワシントン州のピュージェット湾にあるタコマナローズ海峡に架かる吊橋である.タコマナローズ橋は風力を静荷重として考慮した設計では、風速 60m/sec の強風まで耐えられる設計が施されていた.しかしながら、実際には風速 19m/sec の風が吹いた折に崩落してしまった.これは風速 19m/sec の風が吹いた際に、橋の周りにカルマン渦と呼ばれる渦が生じ、その渦から橋に加えられる周期的な力と橋のねじれ振動が共振を起こし、振幅が増大してケーブルが破断した為に起きた事故である.この事故をきっかけに、風の動的メカニズムを考慮に入れた橋の設計が行われるようになってきた.この事例からも、流体-構造連成現象は、一般的に構造物を設計する立場からは、その発生を回避すべき対象であり、このような事故の再発を未然に防ぐ為にも、数値計算によって、構造物の安全性を検証することは非常に重要であり、今後ますますその需要は増していくことが予想される.

(3) 研究内容

ここでの目標は,前述の通り,連成現象を対象とした解析を行う際に生じてくる様々な問題を 解消する新しい解析手法の提案とそのシステムの構築である.

本研究で提案する新しい流体-構造連成解析手法は、メッシュレス法の一種である EFMM(Enriched Free Mesh Method)が、高次要素を用いないにもかかわらず、従来の線形要素 を使用した FEM(Finite Element Method)と比較してその解析精度が向上するという特徴に着目 をした.連成解析を行う際には図1(a)に示したように、各境界間の要素形状に整合性が得られて いる事が望ましい.各境界間の要素形状に整合性が得られていないと、流体が構造物に与える トラクションや、構造物の変位などの節点上を与える際に、その都度データのやり取りに伴う補間 作業が必要となるからである.この補間作業は、解析効率を低下させ、さらには解析過程をより 煩雑にするという問題が生じる.各解析領域で用いる要素形状が一致していれば、連成効果を 考慮する際にも、対応する節点が持つ流体が構造に与えるトラクションや、構造物の変位などの 節点情報のやり取りのもを行えば良いので、計算効率、解析精度の低下を抑制するという利点 がある.



図1(a) 整合性の得られたメッシュ分割例 (b)整合性の得られていないメッシュ分割例

構造解析においては、前述の通り、メッシュレス法の一種である EFMM は、静的弾性解析において、その解析精度は同じ線形要素を使用した FEM と比較して高精度な解析結果が得られる事が報告されている。一方、FEM による非圧縮性粘性流体解析においては、速度場を圧力場と比較して高次の要素で離散化を行う混合補間法が広く使われている。これは、速度場と圧力場を同次要素で離散化をすると解析が安定しないことに起因する。しかしながら、混合補間法で離散化を行った流体解析手法と、EFMM を用いた構造解析手法とを組み合わせると、図1(b)のように各解析場で整合性の得られた連成解析を行うことが出来ない。そこで、流体場の解析手法としは、速度場、圧力場を線形要素で離散化し SUPG 法、PSPG 法を安定化手法として導入するSUPG/PSPG Stabilized FEMを使用する。この手法は、使用する要素は線形要素のみであるにもかかわらず、高精度な解析を安定して行えることが報告されている。

これらの手法を組み合わせることで、各解析境界間に整合性が得られた流体-構造連成解析 を行うことが可能になると考えられる.考えられる本手法の利点を以下に纏める.

- 高次要素を使用しないので、解析時間、計算機リソースの大幅な増加を抑制することが可能 である。
- 高次要素を使用していないにも関わらず、解析精度の低下を抑制することが可能である。
- 特殊な要素形状を使用していないので、各解析場で安定した解析結果を得られる事が保障 されている。
- 相互間作用を考慮する際に補間作業が必要ない.

(4) 平成 22 年度進捗状況

今年度までに、本研究で流体解析場、構造解析場でそれぞれ使用する2つの解析システムを 構築した.具体的には、流体解析場で使用する SUPG/PSPG Stabilized FEM と構造解析場で使 用する Enriched Free Mesh Method(EFMM)である.

構造解析用に開発した EFMM は,静的弾性解析においてはその解析精度の有効性につい て実証されているが,本研究で対象とする流体-構造連成現象を解く場合には,動的解析へ拡 張する必要がある.

本研究で使用する EFMM の動的弾性解析における有効性と,構築したコードの健全性を示 す為, FEM を使用した解析結果と,理論解, 2つの結果と本解析手法による解析結果との比較, 検証を行った.

精度検証に使用する解析モデルを図2にメッシュ分割図を図3にそれぞれ示す.



解析精度の比較,検証は FEM(Linear), EFMM でそれぞれ同じ解析条件の下,同一の解析 を行い理論解との比較を行った.なお,本研究では Newmark's β 法を時間積分法として使用し ている.

図4は,解析結果例を示したものであり,図5は,EFMMによる解析結果とFEM(Linear)による解析結果および理論解の解析精度の比較図である.

図 5 から明らかであるが、同じ線形要素を用いているにも関わらず、FEM(Linear)と EFMM の 解析結果は大きく異なる. この時、EFMM の解析結果は理論解とほぼ一致しているにもかかわら ず、FEM(Linear)の解析結果は大きくズレがあることが分かる.

この結果から,構造解析手法として, EFMMを動的解析へ適用することで,線形要素を使用しても,解析精度を大きく向上させることが可能であることが分かった.



図4 解析結果例



図5 解析精度比較 (FEM(Linear vs EFMM vs Theory)

次に、本研究で流体解析手法として用いる SUPG/PSPG Stabilized FEM の有効性と構築コードの健全性の評価を、解析解と実験値とで比較することで示した.

解析の対象として図 6 に示す Cavity モデルを使用した. なお図 7 が解析に用いるメッシュモデルである.



図6 解析モデル(Cavity)

I





図9 解析精度比較(SUPG/PSPG stabilized FEM vs Experimental data)

図 9 は解析結果と実験値との比較である. 図中黒色で示しているのが, Cavity モデルの中心 線上の x 方向流速で, それぞれ実線が解析結果, 黒丸が実験結果である. 同様に, 灰色で示し ているのが Cavity 中心線上の y 方向流速で, 実線が解析結果で, 三角で示しているのが実験 結果である. 同図より解析結果と実験値がほぼ一致していることが分かる.

この解析結果から、本研究の目的となる新しい流体-構造連成解析手法の各解析場での解析 手法の有効性とその構築コードの健全性を実証することができた. このように、本研究で各解析場に用いる解析手法の有効性とその構築コードの健全性を実証することが出来た.

今後の課題としては、多くの流体-構造連成問題には解析対象の形状変形を伴うものが多い ことから、リメッシングをいかに素早く正確に行うかが大きな課題となることが予想される.また解 析時間や今後の大規模化を考慮すると、並列システムの導入は必要不可欠である.

これらの問題点を対処したうえで、今年度構築した解析システムを用いた流体-構造連成解析 性システムを完成させ、その有効性を実証する.

3.2. 材料データベースとシミュレーションの統合

3.2.1. 材料データベースとシミュレーションの統合に関する研究の概要

材料に関する基礎データは、計算力学のみならず、製造物に関する数値シミュレーション、環 境影響評価などの基本データとして欠くことのできないものである。しかしながら、必要とされるデ ータは各国・各所において独立に開発されており、異なったデータフォーマット、構造を持ってい るためにこれらを相互に交換、また、シミュレーション等の入力データとして用いるためには個別 にデータを変換する必要がある。このために、従来から材料に関する標準データフォーマットが 提案されているが、材料の特性、種類などは多岐にわたるため、現在広く普及した標準は存在し ていない、本研究では、材料データを交換するための標準となるスキーマ、オントロジーの研究 開発を行う。

3.2.2. 材料データ共通スキーマ, オントロジーの開発

(1) 目標·計画

本研究では、材料物性に関するデータ構造、オントロジーを開発するとともに、国際的な共通 フォーマットの確立に向けて、CODATA、VAMAS などを通じて海外の材料データベース研究者 と連携して国際的な材料データベースのメタデータ収集、国際的な標準フォーマット作成の動き に参画する.

(2) 意義・国際社会との比較

材料データベースは各国の研究機関・学会において開発されており、それぞれが独自のメタ データを持つためにデータ交換が妨げられている.このため、従来から米国NIST/AMSを中心と するMatML、我が国のNIMS/NMSを中心とするMatDB(EU JRC Petten において開発されてい る材料データスキーマも MatDBと呼ばれるため、以下我が国のものをNMC-MatDB、EUのもの を JRC-MatDBと標記)などが開発されてきた.しかしながら、材料データの複雑性などから、 MatML は単なるデータのコンテナとして材料特性などについての語彙を一切定義しておらず、 逆にNMC-MatDBはクリープ・疲労特性に関する専門家が開発したため、これらの細部にわたっ て定義されているが、本来ネットワーク構造をもつデータ構造をスキーマ言語によって記述して いるために、冗長性が大きく、複雑な構造となって開発に長期を要したが応用は進んでいない.

これに対し,著者は知識工学で用いられるオントロジーを用いて材料データの語彙や関連する知識を記述する方法を研究し,代表者として,平成18,19年度の二年間にわたり,NEDO知的基盤創成・利用促進研究開発事業の採択を受け,物質・材料研究機構,産業技術総合研究所,高知工科大学,東京大学を分担者として「材料データベース共通プラットフォームの開発」 受託研究を実施し,材料に関する語彙を構造化した材料オントロジーを開発し,これによって異なった構造を持つ熱物性データベースを相互に交換するデモンストレーションを行った¹⁾⁻².

また,2006 年には、CODATA に材料データに関するタスクグループ Task Group for Exchangeable Materials Data Representation の設置を提案して認められ、芦野が議長として日 米欧、ロシア、オーストラリア、インド、韓国、中国の材料データベース研究者を招いてインド、NPL にて研究会を開催した.タスクグループは、その後、2008 年、2010 年の CODATA 総会に おいて継続を認められ、2012 年まで継続して活動する予定である.

2009 年,材料データスキーマ,オントロジーの標準化に関して複数の国際的な動きが組織さ れた. EU では標準規格委員会, CEN (European Committee on Standardization)によって専門家 のワークショップである, ELSSI-EMD (Economics and Logistics of Standards complaint Schemas and ontologies for Interoperability - Engineering Materials Data) が組織され,一年間の活動を 行った. このワークショップでは,材料の機械試験に関するテストデータ,試験方法を記述するス キーマ,オントロジーを開発し,材料供給者,利用者,品質保証機関の三者の間でのデータ交 換を電子化することを目的として検討を行った.また,VAMAS (Versailles Project on Advanced Materials and Standards) では,新しくTWA (Technical Working Area) 35 Materials Databases Interoperability の設置が採択され,活動を開始した.TWA35 は CEN のワークショップと協調し ており,製造物に関する情報の規格である ISO10303 の中で材料に関するバルクの特性を記述 した Section235 を拡張して,機械試験の方法,実験データなどに関するデータ構造を定義する ことを第一段階の目標として活動している.ELSSI-EMD の報告書は CWA (CEN Workshop Agreement) 16200 として公開されている³.

また、アジアでは、2007年に韓国 KIMS (Korean Institute of Materials Science)の発案により、 Asian Materials Database Symposium が開催され、日中韓の研究者が参加した. 2010年には第 二回のシンポジウムが北京科学技術大学の主催にて開催され、日中韓に加え、ロシア、インド、 EU などから招待講演があった. 第二回の席においては, AMDC (Asian Materials Database Committee) を組織し, 日中韓, ロシア, インドの研究者が参加して, 継続的に活動を行うこととなった. 2012 年には日本において第三回のシンポジウムが予定されている.

(3) 研究内容

材料データを含む科学技術データの交換を表現するため、データフォーマット、基本的なデ ータ構造を定義するスキーマに加えて、用いられている用語、概念のネットワークを定義するオ ントロジーが注目されており、生命科学、地球科学など多くの科学技術分野でその分野に関連 するオントロジーをまとめたドメインオントロジーが開発されている.オントロジーは、概念とその属 性、集合論に基づいたこれらの関係を表現することが可能で、材料データに適用した場合、材 料の分類、物性値とその単位、同義語、類義語の関係などを表現することができる(図1).現在、 材料に関するドメインオントロジーの開発には、我々のグループが NEDO 知的基盤創成・利用 促進事業において行った材料オントロジーとオーストラリア、クイーンズランド大学のグループに よる MatONT がある.



図1 オントロジーのネットワーク構造を用いた材料分類記述の例

材料オントロジーの応用として考えられるものとしては,

- セマンティック・サーチ 単なるキーワード検索とは異なり、オントロジーの持つ同義語、 包含関係などの関係を用いることで、関連情報、同義語の検索などを可能とする.
- 知識ベース 物理乗数,実験手法,結果の解析手順などを形式的に定義することができる.
- データのマッピング 構造化された辞書として用いることで、データ項目間の変換、単位の変換などを自動化することが可能となる.

などがある.オントロジーは,セマンティック・ウェブと呼ばれる情報技術の一部であり,多くの研究・開発が行われているところから,オントロジー開発・検証のためのエディタ,推論エンジンなど今後利用可能なツールの開発が進むものと考えられる.

NEDO 知的基盤創成・利用促進事業では、材料工学・材料科学に関連する基礎的な語彙を 集めた材料オントロジーを、Substance,Environment,Process,Properties,それぞれ、物質・材料 の分類、試験時などの環境条件、試験方法などを含むプロセス、これらの測定を通じて得られる 物性値の四つのグループに分けて約 600 のクラス定義を作成し、これに基づいて産業技術総合 研究所、物質・材料研究機構の持つ熱物性データベースの構造を変換するというデモンストレ ーションを行った.図2には、当該事業によって作成したオントロジーのうち、物性値を表すクラス 階層構造を示す.ここでは、物性値という名前、値、単位を持ったクラスに対して、化学的特性、 機械的特性など、段階的に詳細な物性値に関する定義を加えていっている.またここで定義し たオントロジーを用いて、図 3 に示すように、上部にある物質・材料研究機構のデータベースに ある熱物性データの定義と、下部にある産業技術総合研究所の同様のデータを含むが異なった スキーマ定義をもつデータベースを、中央にある材料オントロジーを用いて対応させ、変換でき ることを示した.



図2 材料オントロジーにおいて定義された物性値のクラス構造



図3 材料オントロジーによる異なったデータスキーマのマッピング.上段が物質・材料研究機構(NIMS)による熱物性に関するスキーマ.下段が産業技術総合研究所(AIST)によるスキーマ

また,関連する知識に関する記述については,物質・材料研究機構のクリープデータベース 開発者の協力を得て,クリープの実験データを解析し,クリープ曲線などの手順を経て特に高温 で用いられる機器の寿命にかかわる,使用温度,使用時間,破断時間の関係を表すためのデザ イン曲線を導き出すデータ解析の手順(図4)をオントロジーとして記述することが出来ることを示 すとともに,図 5 に示したセマンティック・ウェブ技術におけるスキーマ,オントロジー,ロジックな どの階層が材料に関連する知識を記述するうえでどのようなプロセスに対応するかを示した(図 6)⁵⁾.



図4 クリープの実験データから得られた個々のクリープ曲線から,温度・応力と材料の寿命を 求めるためのデザインカーブを導く過程⁵⁾



図 5 W3 によるセマンティック・ウェブ技術の階層構造⁴⁾



図6 セマンティック・ウェブ技術と材料データ解析過程の対応.データセットはスキーマ,クリ ープ曲線などの概念はオントロジーで定義することが可能で,これに対して,どのような回帰式を 用いるか,材料の種類などに関していかなるモデルを用いるかなどは手続き,ロジックとして定義 することが出来る⁵⁾

これらは独自の試みであるが、2009年5月から2010年5月まではヨーロッパ規格委員会の組織したワークショップ(WS ELSSI-EMD)に参加し、材料の性能に関する認証に用いられる材料デ ータスキーマ・オントロジーの標準化に関する検討を行った.同ワークショップには、Alstom、 JRC-Petten、Granta Design などからメンバーがミーティングに参加するとともに、Airbus Industries、Alstom、Volvo Airospace など EU 諸国の材料ユーザが組織としてサポートしている. ここでは、図7 に示すように材料の調達の過程において、規格化された各種の試験方法につい て試験方法、関連するパラメータ、試験結果を記述するデータスキーマとオントロジーを標準化 し、材料の調達サイクルにおけるレポーティングを電子化することを目的としている.第一段階と して、ISO6892 に記述された機械試験の試験方法をオントロジーとして記述した.WS ELSSI-EMD は VAMAS TWA35と連携しており、TWA35では、同様に機械試験の記述を STEP として知られる ISO10303 のセクション 235 に対する拡張として記述することを目指して ISO TC184 SC4と協同して作業を開始している(図8).また、WS ELSSI-EMD のコアメンバーは、後継 のプロジェクトとして SERES (Standards for Electronic Reporting in Engineering Sector)としてよ り包括的なレポーティングのための規格の開発を提案している.



図7 CEN WS ELSSI-EMD による材料データフロー概念図³⁾



図8 CEN WS ELSSI-EMD による今後の材料データ標準化の目標³⁾

(4) 平成 22 年度進捗状況

平成22年度はWS ELSSI-EMD が5月に終了し,最終報告書のとりまとめを行った.材料オントロジーに関しては、昨年度執筆した査読論文がCODATA Data Science Journal に掲載された. また、10月の CODATA 国際会議では材料データベースに関するオーガナイズド・セッションを 企画し,日本の他,オーストラリア,インド,アメリカの研究者より発表があった.同国際会議では, タスク・グループの議長として活動について報告し,その後の総会において,タスク・グループの 二年間の継続が可決された.この他,5月の情報知識学会シンポジウムにて招待講演,12月, 熱物性データに関する国際シンポジウム,e-Therm2010にて研究発表を行った.22年度予算に よって,計算力学のための材料データベースについて,海外のデータベース,その内容などに ついて調査し,NEDO予算によって開発した調査結果を更新する.

参考文献

- 芦野俊宏,門馬義雄,馬場哲也,山崎政義,岡伸人,材料データベース共通プラットフォームの開発,構造物の安全性及び信頼性に関する国内シンポジウム JCOSSAR2007 論文集 (2007) 663-669
- 2) T. Ashino, Materials Ontology: An Infrastructure for Exchanging Materials Information and Knowledge, Data Science Journal, 9 (2010) 54-61
- 3) CEN Workshop Agreement: CWA16200:2010, 'A Guide to the development and use of standards complaint data formats for engineering material test data', (2010), available from ftp://ftp.cen.eu/CEN/Sectors/List/ICT/CWAs/CWA16200_2C010_ELSSI.pdf.
- 4) Current Semantic Web Layer Cake, http://www.w3.org/2007/03/layerCake.png, 2010 年 12 月 27 日参照
- 5) T. Ashino and M. Fujita, Definition of Web Ontology for Design-Oriented Material Selection, Data Science Journal, 5 (2006) 52-63

3.3. 最適化·逆問題

3.3.1. 最適化・逆問題研究の概要

大規模構造物を対象とした各種最適化技術の開発に取り組んでいる. そのひとつは応答曲 面法の効率的な曲面生成技術で, サンプリング点を減少させることに成功した. さらに構造の位 相最適化においては, NURBS を基底関数に用いた線形弾性問題の数値解析と形状に構造の 位相最適化, および密度型位相最適化問題の数値解法についての研究を行い, 実用性を検証 した.

3.3.2. 応答曲面法のための効率的曲面生成技術

(1) 目標·計画

応答曲面法は最適化手法の代表的な手法であるが,応答曲面法の精度はいかに応答曲面 を生成するかにかかっている.精度の高い応答曲面を生成するには,サンプリング点の数を増 やせばよいが,サンプリング点の増加は計算コストの増大を招いてしまう.そこで本研究では地 球統計学で用いられるクリギングに着目し,少ないサンプリング点で高精度な応答曲面を生成す る手法を研究する.

(2) 意義・国際社会との比較

地球統計学は,鉱物資源埋蔵量の算出法を改善する目的で南アフリカの鉱山技師の D.R.Krige と統計学者の H.S.Sichel によって始められたものである. クリギングは彼らによって開 発された回帰法の一種で,各種のクリギングが提案されている.本研究は,そのクリギングを利用 した Efficent Global Optimization (EGO) における,メタモデルの Infill Criterion を改良すること によってサンプリング点の減少と応答曲面の高精度化を図るものである.

(3) 研究内容

研究コストの高い目的関数を主な対象としてメタモデルを用いた最適化は広く利用されており、 中でも Infill Criterion として Expected Improvement(EI)を、メタモデルとしてクリギングを利用した Efficent Global Oprimization (EGO) はその代表であろう. EGO ではまず何点かの初期サンプ ルを評価してクリギングモデルを作成した後、終了条件が満たされるまで EI によるサンプル地点 の決定、その点の評価、モデルの更新を繰り返す. Infill Criteria は出来るだけ少ないサンプル で最適解を得るための重要な要素だが、EI には数々の優れた特性がある一方で欠点が指摘さ れており、本研究ではその問題をベイズ的手法によって解決する方法を提案する.

EGO の流れは下図に示す通りである.



このフローでのEIは次式で定義される

$$EI(\mathbf{x}) = \int_0^\infty I\left\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}s(\mathbf{x})}\exp\left[-\frac{(f_{min} - I - \hat{y}(\mathbf{x}))^2}{2s^2(\mathbf{x})}\right]\right\} dI$$

ここに、 f_{\min} はサンプルの最小値、 $\hat{y}(x)$ はクリギングモデル、s(x)は平均二乗誤差を表す. つぎのサンプル点は $\arg\max{EI(x)}$ に選ぶ.



図1 クリギングモデルとそのEIの例

図 1 の例ではサンプルが疎な右部において 95%信頼区間から目的関数が大幅にはみ出している. 疎なサンプルから最尤推定されるクリギングの超パラメータは信頼性に欠け, そこから導かれるエラーも大きく誤る場合がある. またエラーを過小に推定する傾向もあり, 式(1)による EIが狙い通りに機能しない場合が発生する.

Infill Criteria のひとつ goal-seeking は,まず予想される最小値"goal"を設定しモデルが goal を通る尤度が最大となる座標を次のサンプル点に選ぶ.これで前述のエラーの使用を避ける事 ができるがパラメータ goal の設定が難しい.そこで提案手法ではこの座標を点ではなく事前分 布として表現しベイズ推定を行う.事前分布は一様分布のような無情報事前分布(図2左)を用 いるか,目的関数について過去の経験等からの知識があればそれらを分布で表わすこともでき る(図2 中央,右).得られた事後分布から EI と同様に期待値を求め,それが最大となる場所を 次のサンプル点とする.



図3の丸印・三角印がそれぞれ図2の左・中央の事前分布を用いた結果である. どちらも EI と 比ベ少ないサンプルで最小値を見つける事が出来た.



(4) 平成 22 年度進捗状況

本年度は大規模最適化技術開発の一環として、メタモデルによる最適化の効率的な InfillCriterion を研究した. その結果, 従来より少ない評価回数で精度のよいモデルを構築でき る技術を開発した. 今後はこの技術をベイズ推定などと組み合わせたより効率的な最適化技術 の開発をめざす.

3.3.3. 大規模構造問題における形状最適化問題の研究

(1) 目標·計画

計算力学的手法は、実験では困難な現象のシミュレーションや詳細なデータが取得できることから、機能に基づく構造の性能を評価する上で重要な役割を演ずるようになってきた.さらに性能を高めるためには、現状モデルで発生している現象が望みの現象に近づくように構造を変えていくための最適化手法を開発する必要がある.本研究では、計算力学的手法によって解かれてきた大規模構造問題に対して、大規模な数値モデルのまま評価汎関数が最適化するように数値モデルの位相を含めた形状を最適化する手法を開発することを目標とする.

(2) 意義・国際社会との比較

これまで最適構造設計と呼ばれてきた研究分野では、長さや断面積などの有限個のパラメー タを設計変数に選んだパラメトリック形状最適化問題が扱われてきた。それに対して本研究では、 形状変動を写像で定義したノンパラメトリック形状最適化問題を扱った。ノンパラメトリック形状最 適化問題による定式化は、計算力学の手続きで作成された離散化モデルに応じた設計自由度 を確保できる点が優れている。

ノンパラメトリック形状最適化問題に関する理論研究はフランスの応用数学者らが先駆的な研究を行ってきた.その結果に基づけば,それぞれの形状最適化問題に対して形状変動に対する 目的汎関数の第1変分から形状勾配が評価可能であることは示せる.しかしながら,形状勾配 は滑らかさが不足するために,形状勾配を直接用いた勾配法では形状の滑らかさが維持できな いという問題があった.本研究では,形状勾配を第2種あるいは第3種境界条件に用いた楕円 型偏微分方程式の境界値問題の解を用いることで滑らかさを保持する方法を開発してきた.こ の方法は,楕円型偏微分方程式の境界値問題用に開発されたプログラムが利用できることから, プログラム開発が容易であり,大規模な問題にも適している.

一方, ノンパラメトリック位相最適化問題に関する研究はデンマークなどの応用数学者や工学者らによって密度を変化させることで最適な位相を近似的に求めるいくつかの方法が提案されてきた.しかしながら,これらの方法においても,チェッカーボード現象などの数値不安定が発生することが問題とされてきた.これまでは,フィルタを用いた平滑化処理が使われてきた.本研究では,形状最適化問題の解法と同様の原理に基づく解法を開発する.その解法によれば,数値不安定が原理的に防止できることが予想される.

(3)研究内容

上記目標に対して、これまでの研究により、関数空間の勾配法を応用した汎用的な形状最適 化問題の解法(力法、あるいは形状最適化問題のための H 勾配法)を開発し、弾性体、流れ場、 熱伝導場、音場を対象とした形状最適化問題が解けることを示してきた.本研究では、その解法 を各種連成問題にも適用して、大規模な構造連成問題を解くことのできるプログラムを開発す る.

一方,連続体の位相を設計対象にした最適化問題に対しては,均質化法あるいは密度法により密度と材料特性が関連付けられた下で最適な密度分布を求める問題として定式化されてきた.その際,密度を有限要素ごとに離散化する方法ではチェッカーボード現象やメッシュ依存性などの数値的な不安定が現れることが知られてきた.本研究では,形状最適化問題において 我々が開発した H 勾配法を位相最適化問題にも適用することによって,正則な位相最適化問題の解法を開発する.

(4) 平成 22 年度進捗状況

平成22年度は次のような成果が得られた.

(a) NURBS を基底関数に用いた線形弾性問題の数値解析と形状最適化

大規模な構造の設計においては CAD システムが使われている.一方,弾性変形や応力など の数値解析では有限要素法が使われている. CAD システムでは NURBS (Non-Uniform Rational B-Splines) 関数を用いて形状が記述されているのに対して,通常,広く使われている Lagrange 型の有限要素法では,有限要素内で低次多項式,有限要素境界では連続な基底関 数が使われてきた.したがって, CAD システムで設計されたモデルを使って数値解析を行うた めには,形状データを変換しなければならなかった.

これら2つのシステムで使われている基底関数を比較すれば、次のようになる. NURBS 関数は 平滑さ(必要な階数までの導関数の連続性)は必要に応じて自由に制御できる. 一方, Lagrange 型の有限要素法で使われている基底関数は, 有限要素内では多項式の次数を変えることがで きても, 有限要素境界では連続であるのみで, 必要な階数までの導関数の連続性は保障されな い. したがって, 一般には, 形状データの変換には誤差が生ずることになる.

また、本研究で課題とする形状最適化問題の理論においては、境界形状は C¹ 連続性、評価 汎関数の形状微分に平均曲率が現れる場合には C² 連続性が必要となる. これらを厳密に満た すためには、Lagrange 型の有限要素法では不可能であり、節点における導関数を変数に加え た Hermite 型の有限要素法を用いるか、あるいは NURBS 関数を基底関数にした有限要素法 を用いるかを選択する必要がある.

本研究では、CAD システムからの誤差を伴わない変換を可能にして、かつ形状最適化問題 で必要な滑らかさを保障できる方法として、NURBS 関数を基底関数にした有限要素法の開発 を試みた.この開発に当たっては、Thomas J. R Hughes らによる先行研究を参考にした.彼らは、 NURBS 関数を基底関数にした有限要素法を Isogeometric Analysis と呼んで普及を図ってい る.

今年度までの研究により、3次元線形弾性問題を解析できるプログラムを開発し、形状微分の 計算ができることを確認し、それを用いた形状最適化が実行できることを実証した.

(b) 密度型位相最適化問題の数値解法とその応用に関する研究

偏微分方程式の境界値問題が定義された領域の最適な穴配置を求める問題は位相最適化 問題とよばれる.領域を特性関数(0-1 関数)で記述した位相最適化問題は不正則となる.問 題を正則化する方法の一つは,密度を用いて最適化問題を記述することである.しかし,その解 法も適切な密度の仮定と解法を用いなければ数値不安定が発生する.本研究では,正則性が 保障された,適切な数値解法を開発することを目的とした.

昨年度までの研究により H1 勾配法の理論的な基盤を整備した. 今年度は, 適切な数値解法 の開発に重点をおいた. 密度型位相最適化問題では, 領域 D を固定して, 密度は D 上で定 義された関数で, 値域を [0,1] に制限する必要がある. 本研究では, 密度とは別に, 値域に制 限を設けない関数を設計変数に選び, 密度はその設計変数のシグモイド関数による変換により 値域を [0,1] に制限する形式で理論を書き換え, さらに, アルゴリズムの改良により, 安定した 解が得られるプログラムを完成させた.

また,密度型位相最適化問題の構成法をいくつかの問題に応用できることを示した.一つは, 特発性側弯症の成因解明を目指して,正常な骨格系の有限要素モデルから疾患の有限要素モ デルを形状変動によって構築する問題に応用した.疾患の境界形状は,医用画像に基づいて, 正常モデルの部分境界で参照変位として与えられると仮定した.正常な有限要素モデルの密度 に関する設計変数を変化させて,疾患形状に対する正常モデルの超弾性変形の2乗誤差積分 が最小となる変形を求める問題を構成した.変位2乗誤差積分の設計変数に対する微分の評価 方法とH1勾配法による数値解法を示し,脊柱に対する数値例を示した.もう一つは,線形弾性 体の欠陥同定問題に応用した.線形弾性体の欠陥を密度の低下による剛性の低下であると仮 定して,評価関数には,欠陥モデルと同定モデルの振動固有対(固有値と固有モード)の2乗誤 差和を選び,設計変数に対する微分の評価方法とH1勾配法による数値解法を示し,欠陥同定 が可能なことを数値例により示した.

3.4. 大規模可視化

3.4.1. 大規模可視化に関する研究の概要

解析が大規模化・複雑化してくると、膨大な解析結果の評価方法が問題となってくる. その解決策の1つとして挙げられるのが可視化である. 計算機による解析結果の可視化は、1960年代から行われてきた比較的歴史ある技術であるが、特に 1980年代以降、計算機、特にグラフィックス機能を強化したワークステーション等の出現により急速に進歩した. その後、機器の高性能化、低価格化により広く用いられるようになり、またこれに伴って可視化のためのソフトウェアも多く発売されるようになった. しかし、2000年に入り、計算機環境が複雑化し、解析対象も多岐に亘ってくると、これまでの可視化ソフトウェアでは対応できないことが多くなってきた. そこでここでは、様々な分野の数値解析に対して、その規模や計算機環境によらず統一的に利用できるような次世代の可視化環境の構築を目指す.

平成 22 年度は,前年度に終了したプロジェクトのまとめと,次年度からの新しいプロジェクトに向けての調査を行った.以下にその詳細を述べる.

3.4.2. 統合化のための可視化システム

(1) 目標·計画

本研究では、各サブプロジェクトが行う設計・解析に用いることのできる可視化システムの構築 を目指してきた.現在、計算力学に関連する研究を行う計算機が、個人で所有する PC から地球 シミュレータクラスの超大型並列計算機まで様々であるが、可視化についてはその規模を問わ ず、同じ環境で行いたいという考えに沿ったものである.

平成 22 年度は,前年度に終了したプロジェクトのまとめとして,開発した構造解析用,流体解 析用の2つのシステムをまとめ,次年度以降への課題の検討を行った.

(2) 意義・国際社会との比較

先にも述べたように、従来の可視化ソフト/システムではこれからの解析には対応できない. 特に本研究センターのように他に先駆けて大規模・複雑な解析を行っているところでは可視化は さらに重要な問題である.

これまで、可視化ソフトウェアは米国や欧州を中心に開発されたものが製品として我が国に入ってくることが多かった.しかし、計算機環境は現在でも日本は最も進んでおり、諸外国でも大規模な解析のための新しい可視化システムの開発はこれからである.逆に我が国では可視化情報学会に次世代可視化に関する研究会が発足するなどこの分野では諸外国に先んじており、本研究もそのように位置づけられると考えられる.

(3) 研究内容

ここでの目標は,先にも述べたように,本プロジェクトで利用する可視化システムの構築である. 対象は構造解析と流体解析である.共通する特徴は以下のとおりである.

・データは演算機(サーバ)にあるとし、その大きさは原則として問わない.

・データは時系列も取り扱う.

・画像化(CG 処理)は手元(ローカル)の PC で対話的に行うとする.

これらを実現するにあたり、一昨年度までに開発したリモートデータ取得ツールである Vistrace を利用する.しかし、構造解析と流体解析ではデータの形式が大きく異なるため、実際のシステムは別々に開発した.

まず,構造解析は,4 面体データはデータの並びが不規則であるので,可視化に必要なデー タはハードディスク上でもメモリー上でも連続していない.そこで,必要なデータをサーバ上で用 意する仕組みを新たに開発し,システムとして利用できる形にする.一方,流体解析は,データ に規則性があるため,サーバ側では特別な処理は行わず,必要なデータの切り出しは PC 側で 行うようにした.前者はサーバにある程度の負荷を要求するが,手元の PC は比較的処理が単純 である.一方,後者は,サーバの負担が軽いが,その分 PC での処理が多くなる.どちらをよしと するかは,解析データの量や形態によるだろう.いずれにしても,ここではその両者を利用できる ようにする.

(4) 平成 22 年度進捗状況

H21 年度までに構築した可視化システムは2つで、1つは主に構造解析用、もう1つは流体解析用である.

構造解析用については、これまでその性能を客観的に評価していなかったので、市販ソフトウ ェアとの比較を行った.



(a) MicroAVS のワイヤフレーム図 (b) 本システムのワイヤフレーム図



(c) MicroAVS の相当応力図 (d) 本システムの相当応力図 図1 本システムと MicroAVS の比較

比較は, 単一 PC 上での動作を前提とする MicroAVS と行った. 用いた計算機は Intel Core 2 Duo E8400 でクロック 3.0GHz, メモリー2GB の 32bitPC である. 主な比較は次の通りで, 表示ま でにかかる時間が MicroAVS 480 秒に対して本システムが 166 秒(以下同様), 表示内容の変更 が 20 秒に対して 1 秒, オブジェクトの回転等が 0.8fps(1秒間に平均して 0.8 回画像の描き換え が起こる)に対して 3.2fps, 使用メモリーサイズが 943MB に対して 54.6MB などとなっており, 総じ て数倍から 10 倍程度の性能があることが分かった.



(a) 表示対象のブロックとその内容 (b) 左図の上部のアップ 図2 ブロック分割されたデータの等値面表示

次に、流体解析については、データの転送が複雑になる等値面表示について、性能評価を 行った.具体的には先の検証と同じPCを用い、514×514×65の大きさのデータに対して、これ を64分割(1つのブロックは65×65×65程度)し、ブロックごとの処理時間等を計測した.その結 果、1ブロックでは約5秒、2ブロックで約7秒、7ブロック(必要な全ブロック、残りの57ブロックは 等値面が存在しない)で約14秒であった.これに対して、ブロック分割をせずに可視化表示する と、約31秒を要した.時間もさることながら、全体を可視化表示するにはその分メモリーが必要と なるので、この例では全体を可視化できるのは、このデータ量2倍程度がこのPCの上限である. それに対して、ブロック分割を行えば、20倍程度のデータ量までは扱えるので、十分に実用的で あると考える.なお、この例では表示しないブロックはあらかじめ分かっているものとして処理して いないので、実際には最初の1回で必要なブロックかどうかの判断をすることになるが、それは計 算時間だけの問題であり、メモリーには影響しないので、上記の推算はその場合も有効である.

今後の課題としては、構造解析用は、計算サーバで前処理を行うのを前提としているのに対して、流体解析用はできるだけ計算サーバに負荷をかけないようにするという方針から、前処理を行っていない分、ローカルのPCに負荷をかけている.次のプロジェクトではまた新たな可視化装置や可視化システムを検討することになるが、その際には、計算サーバにどれだけの処理を負わせるかが重要な課題となろう.

3.5. 大規模並列化

3.5.1. 大規模並列化に関する研究の概要

日本国内では 2012 年を目途に 10 ペタフロップス規模の世界最速計算機を構築しようという 計画が着々と進んでいる. 2002 年に国内はもとより世界最速であった地球シミュレータは, その ピーク性能が約 40 テラフロップスであり, 10 年も経たずに数百倍の速度を目指すことになる. こ のことからもハードウェアとしてコンピュータの性能が向上するスピードがいかに速いかが分か る.

その一方で、これらの大規模なコンピュータ上で動作する効率的なソフトウェアの開発に関しては、その開発スピードもソフトウェアの品質もまだまだ十分とは言えず、多くのソフトウェアが20世紀の主要なソフトウェアを修正し続けて用いられているのが実情である。特に、1970~1980年 台に既に確立されているアルゴリズムに対して、並列化の実装のみを加えた物が多く見られる。

このような背景のもと、本プロジェクトでは様々な計算機プラットフォーム上で効率的に動作する、次世代の構造解析・流体解析システムを構築するとともに、これらを組み合わせた連成解析システムの構築を行った、具体的には以下の項目をテーマとした.

- (1) 大規模非圧縮性粘性流体解析システムの開発
- (2) 汎用 CAE システムによる地球シミュレータ上での大規模構造解析
- (3) 大規模流体構造連成解析システムの開発
- (4) 流体構造連成解析の最適化問題/逆問題への応用
- (5) 大規模解析結果の効率的な可視化手法について

3.5.2. 大規模非圧縮性粘性流体解析システムの開発

(1) 目標·計画

日本学術振興会未来開拓プロジェクトの1プロジェクトであった「ADVENTURE プロジェクト」 で開発された計算力学システム「ADVENTURE システム」の1モジュールとして、これまでに開 発が続けられてきた汎用の非圧縮性粘性流体解析システム「ADVENTURE_Fluid システム」を ベースとして、超並列計算機やPCクラスタ上でより効率的に動作する大規模非圧縮性粘性流体 解析システムを構築する.また、システムとしての機能拡張を行うとともに、流体解析で問題とな るロバスト性を向上させることを目的とする.近い将来の計画として、構造解析システムと統合し、 大規模な流体構造連成解析を効率よく行えるシステムの構築を目指す.

(2) 意義・国際社会との比較

本システムは、有限要素法による定式化を行っており、また、ADVENTURE システムで提供さ れている簡易 CAD モジュールやメッシュ生成モジュール、境界条件貼付モジュールらとの連携 が確立されているため、極めて自由度の高い任意形状の解析領域に対して用いることが可能で ある.また、有限要素法による非圧縮粘性流体解析分野で最も安定性に優れていると考えられ ている SUPG/PSPG 法をベースとした安定化手法を導入することにより、これまでに解析不可能 であった高レイノルズ数の問題等に対して、極めて精度が高く効率の良い解析を実施することが 可能となっている.

(3) 研究内容

本システムは、安定化手法を適用した有限要素法による定式化を行っているため、最終的に 解くべきマトリックスが非対称なものとなる.この非対称マトリックスは反復法ソルバーの収束性が 極めて悪いことが特徴であり、この問題に対処するために Bi-CGSTAB 法、GPBi-CG 法、 GMRES(m)法などの種々の非対称マトリックス用ソルバーが提供されている.これらのソルバーと 適当な前処理を組み合わせることにより、安定した解析が可能となる.また、前節で述べた通り、 ADVENTURE システムの特徴であるモジュール型システムアーキテクチャを採用することで、標 準化された I/O を介して他のモジュールと強調して稼動することも可能となっている.これは、近 い将来に計画されている、流体構造連成解析システムの構築を行う際に極めて有効な特徴であ ると考えられる.

(4) 平成 22 年度年度進捗状況

本年度実施した主な内容は、システムそのものの開発ではなく、開発したシステムを用いた実 問題への適用である.具体的には、図1に示すような海岸付近の地形及び人工建造物の周りの 流れ解析を行い、結果として得られた流れ場(図 2)を基にして、ランダム・ウォーク法による飛来 塩分の解析を行った.図3に示すのが結果として得られた飛来塩分の分布の時間変化である.

この研究のように、大規模非圧縮性粘性流体解析システムの開発プロジェクトでは、これまで に開発してきたシステムを実際に使って、実問題への取り組みを中心に活動を行っている.特に 力を入れているのが環境問題であり、本年度は飛来塩分による塩害について研究を行ったが、 次年度以降は風力発電ブレードの発電効率向上のための最適化設計を計画している.具体的 には、5000×5000×5000 格子程度の超大規模 LES 解析を行い、風力発電ブレードのパラメトリ ック形状最適化を行う予定であり、今年度は基礎的な調査を行い、モデル作りを開始した.





図2. 流れ解析結果





3.5.3. 汎用 CAE システムによる地球シミュレータ上での大規模構造解析

(1) 目標·計画

既に多くの超並列計算機や PC クラスタ上において実績を示している,1 億自由度級の大規 模メッシュを用いた人工物や自然物の丸ごと詳細解析を可能とする汎用計算力学システム ADVENTURE を地球シミュレータに導入することで,数億自由度規模の有限要素メッシュを用 いた非定常非線形解析を実用時間で可能とする技術を確立し,実験および解析不可能であっ た問題規模での現象解明,産業界への貢献を目的としてきた.

(2) 意義・国際社会との比較

本システムにより、1つのアプリケーションとして、地震荷重負荷時の原子力圧力容器実機の 応答から複合的な損傷の発生・進行・拡大、そして極限強度に至るまでの全プロセスのシミュレ ーションを実現することとなる.これらを実現できるシミュレータは世界的に例がなく、このような極 限強度に至る解析例も存在せず、極めて独創性が高く、本シミュレータを用いることにより、たと えば原子力システムの極限強度を大型耐震試験によらずに正確に予測できることが期待され る.

(3) 研究内容

本システムでは、超大規模解析における優れた実行性能、拡張性・保守性・開放性に重点を置き、モジュール型システムアーキテクチャを採用することで、各モジュールが独立したプロ グラムとして単独でも、また標準化された I/O を介して他のモジュールと協調しても稼動すること を実現している.主要並列ソルバの1つである構造解析モジュール ADVENTURE_Solid では、 階層型領域分割法に基づく並列負荷分散を行い、さらに高速安定な線形ソルバとして BDD 法 を採用している.これまで、地球シミュレータ 256 ノード(2,048 プロセッサ)上において、1 億自由 度規模の非構造メッシュを用いた簡易原子炉圧力容器モデルの静応力解析に成功し、実行性 能 31.75% (5.08TFLOPS)を示してきた.また地球シミュレータが平成 21 年度よりシステムの更新 により地球シミュレータ 2(ES2)に入れ替わったのに伴い、実用大規模構造材料・機器の直接破 壊シミュレータを開発し、低炭素社会構築のカギを握る小型高圧水素貯蔵タンクの超精密破壊 解析や、安全・安心社会の基盤である経年化した社会的インフラストラクチャーの超精密破壊解 析の実現に向けた準備を行ってきた.

(4) 平成 22 年度進捗状況

本年度は、地球シミュレータが ES2 に入れ替わったのに伴い、保有システムを統合した三次 元き裂進展解析システムの構築並びに ES2 への移植、四面体有限要素用三次元 J 積分プログ ラムの開発、並列有限要素法アルゴリズムの ES2 向け改良による線形問題計算の高速化、大規 模解析用メッシュモデルの作成を行った.

四面体有限要素用三次元 J 積分プログラムの開発については,領域積分法に基づく四面体 有限要素のためのプログラム実装を行い,自動生成されたき裂解析モデルで VCCM(仮想き裂 閉口積分法)の結果と比較して同等であることを確認した.また,積分領域の大きさなどに対して, J 積分計算の精度保障のための条件について検討した.

大規模解析用メッシュモデルについては、2.4 億自由度、5.2 億自由度モデルの作成を行い、 大規模き裂入りモデルの解析試行として、64 ノード上での2億自由度圧力容器モデル及び2.4 億自由度規模モデルの応力解析を実現した.このモデルをES2、64 ノードを用いて応力解析を 行った.解析結果の相当応力分布図を図3.5.3.1 に示す.277回のCG反復計算を行い、1反復 当り2.48秒、トータル18.6分、6.5TFLOPS、V.OP.Ratio 98.57%での解析を実現した.これらの技 術を用いてES2、16ノード1時間を使用し、3,000万自由度規模程度の問題の有限要素解析を、 き裂進展の繰り返し計算を考慮し、400ケース実行が実現できる見込みである.



.Zx



3.6. 統合化

3.6.1. 統合化に関する研究の概要

本センターの研究プロジェクト「数値逆解析手法の開発とその構造健全性向上のための応用」の目的の1つは、本センターで開発した手法を組み合わせて様々な構造物・機器の構造健 全性向上に資することである.このためには、単に個々の要素技術を開発するだけではなく、それらを組み合わせて使えるような仕組みが必要であると考えられる.そこで、研究プロジェクト3年 目の平成 19 年度から、「統合化サブプロジェクト」を立ち上げ、上記目的のための研究・開発を 行ってきた.

19 年度には統合化のための準備として各サブプロジェクトで開発された,あるいは開発中の 個々の手法について調査・検討を行ってきたが,20 年度から 21 年度にかけて,これらの調査・ 検討を基にシステム統合のイメージを作成した.

22 年度には、単に全体的なフロー図を作成するだけではなく、ある特定の解析を実行する際 に必要となるシステムとそれらの接続関係を具体例としていくつか提示し、統合されたシステムを 利用するユーザにとっての利便性を高めるようにした.

3.6.2. システム統合化のイメージ

これまでにおこなってきた統合化に向けての調査結果より、図1のようなシステム統合化イメージの雛型を作成した.この統合化イメージ図では、まず開発したソフトウェアを機能毎にプレ、メイン、ポストの3種類に分類する.図中の縦軸方向がこの分類を表している.一方各プロジェクトで開発したソフトウェア間の接続関係を矢印で示し、これが各種データのフローとなる.これまでに、構造健全性サブプロジェクト、最適化サブプロジェクト、大規模並列化サブプロジェクト、大規模可視化サブプロジェクトの各種ソフトウェアと、CAD ソフトなどの各種商用コード間のデータフローを取りまとめた.

図の中で中央に当たるのが、大規模並列化サブプロジェクトである. このサブプロジェクトは ADVENTURE System をベースとしており、特にその中の大規模構造解析モジュールである ADVENTURE_Solidと大規模非圧縮性粘性流体解析ツールである、ADVENTURE_Fluid が中 心となり、これらに他のプレ・ポストモジュールが接合している関係となっている. 特に、プレに関 しては ADVENTURE System のモジュールの一つである簡易 CAD システム ADVENTURE_CAD を用いることも出来るが、より汎用性の高い I-DEAS、MicroCADAM、 DESIGNBASEなどの商用 CAD ソフトとの連携も実現している. さらに、構造健全性サブプロジェ クトで開発された階層型大規模メッシュ生成ツールとの連携も実現している. また、ポスト処理に 関しては、同じくADVENTURE Systemで開発された ADVENTURE_Visual による可視化も行え、 また、大規模可視化サブプロジェクトで開発されたポスト君との連携も実現しており、より大規模 で汎用性の高い可視化環境が構築されている.

22 年度はさらに各サブプロジェクトで用いられている多くのツール類とのソフトウェア間の接続 関係を明示し、また、本システムのユーザがある種の解析を試みようとした際にどのようなフロー でシステムを利用すれば良いのかが分かるような解析事例別フロー図の作成等を行った.その 一例を図2~4に示す.



図 1. システム統合化イメージ

事例1: 大規模破壊力学シミュレータ



事例2: 多目的最適設計システム

最適化P + 構造健全性P


事例3: 教育用数値流体力学システム



3.7.4 次元を理解するための表現方法や解釈方法の開発・検討

3.7.1.4 次元の表現に関する研究の概要

ものづくりが対象とする次元は、多くの場合たかだか空間3次元+時間1次元である.相対論 や量子論を考えなければ(すなわち我々の考察を古典力学の枠組みに限定すれば)、空間がた かだか3次元までであることは我々が存在する次元が3次元空間で十分に記述できることを、時 間が1次元であることは我々が同一の時の流れに乗って生きていることを意味している.コンピュ ータシミュレーションの立場から言い直すのであれば、「質点の静力学的な問題は自由度が3で あり、動力学的な問題は自由度が4である」ということになるだろう.

数学や物理学では空間として3次元よりも大きな次元を考えることがある.例えば,繰り込み理 論は次元を変数と考えて,(4-d)次元における物理モデルを考えることがある.また,信号理論 では,情報の伝達として2バイトという単位を考えるときに 256次元の球の充填問題を考えるとい った研究も行われている.さらに,4次元における周期的な構造から3次元における複雑な構造 をデザインするといった試みもある(例えば宮崎).そのため,3次元よりも大きな次元を考えてそ の空間の幾何学的な性質を理解することは,決して小さな課題ではない.

4次元を理解することは困難である.2次元と3次元の関係から直感的に4次元を理解することは、うまくいく場合もあるが、そうでない場合も多い.うまくいく場合に我々が使うのは、2次元人が3次元の形状を理解するためにはどうすればいいのかを考える手法である(Abbott[1]、Dewdney[3]).しかし、この方法が常にうまくいくわけではない.その例として、球の体積を考えてみる(Rucker[7]).

広義の球は、与えられた点(中心)からの距離が一定の長さ(半径)以内にある点の集合と定義される. この半径を r とおく. 1次元では直線、2次元では円、3 次元では球、4 次元以上では超球である. その体積(空間についての積分)は、それぞれ、 2r、 πr^2 、 $4\pi r^3/3$ 、そして $\pi^2 r^4/2$ である. この4つの係数を次元 d と関係して推定することは難しい.

4次元上の点を3次元に射影することを考える.4次元空間内での座標を,直交4座標軸を用いて (x,y,z,w) と表すこととし,与えられた変換によって投影される点の座標を,直交3座標軸を用いて (α,β,γ) と表すことにする.4次元空間を3次元で表現するということは,4つの変数の組み合わせを3つの変数を用いて表現するということに他ならない.

これまでに行われてきた射影の方法は,主に「平行投影」と「中心投影」である. 平行投影は 平行な光を多胞体に当てて光の先にある3次元の壁に影を映すものである. 特に光の向きと直 交する3次元壁への投影を「直投影」と呼ぶ. 中心投影は多胞体の外にある点光源が反対側 の壁に影を映すものである. 平行投影も中心投影も必ず強調される方向が存在している. これ は,光源と投影面が存在する以上は避けられない状況である. これらの変換は線形な変換(4 行 3 列の行列による変換)であるが,変換は非線形なものであっても構わない. 例えば3次元の立 体を表すのに用いられる平面グラフはその代表例だろう.

3次元の図形を印刷物でみるためには、得られた立体図形をさらに 2 次元に変換する必要が 生じる.本研究では、一般的なCG技術を用いて立体を表現している.4次元→3次元という変換 のほかに3次元→2次元という変換の特性も知らないと理解が難しいというのは、4次元の形を紙 の上で議論するときの問題点のひとつである.

3.7.2.4 次元空間を理解するための新たな表現の開発

(1) 目標·計画

本研究の目標は,正4次元空間を理解するための新たな表現方法を開発し,四面体座標系によって4次元を表現したときの特徴を明らかにしることである.今年度は主に「正四面体座標系による4次元正多胞体の表現」に取り組み,来年度は主に「球錐曲線」に取り組む予定である.

(2) 意義・国際社会との比較

4次元の多胞体を掘り下げは,新しい幾何学的なデザインの可能性を秘めている.例えば,2次元の準結晶(非周期な構造を持つ単一モジュールによるタイリング)は4次元の単純な結晶から2次元への投影として得ることができることが知られている(宮崎[4]).国際的にも4次元の認識については議論が多くなされている.

(3) 研究内容

4次元を理解する方法として、ふたつの手法に注目 している.ひとつは、「正四面体座標系による4次元正 多胞体の表現」であり、もうひとつは「球錐曲線」であ る.

「正四面体座標系による4次元正多胞体の表現」は, 近年小川によって再提案された,4次元の表現方法で ある.それ以前にも宮崎[5]で等測軸という名前で言及 されているようである.図1のように,正四面体の中心に 原点 O をとり,中心から各頂点へ向かうベクトルを座標 軸に設定することで,4次元を3次元に投影しようとする ものである.小川はこの表現方法によって4次元のリサ ージュ図形について詳細な検討を行っている.しかし, 4次元において最も理解されている正多胞体について 議論がなされていない.本研究では正4面体座標系に よる表現によって正多胞体を視覚化し,この表現方法 の性質について検討する.



「球錐曲線」は、円錐曲線の4次元に拡張したものである.円錐曲線とは円錐を切った断面に 現れる曲面について検討することである.これを4次元に拡張するには、4次元空間に一定の割 合で半径が変わる「球錐」を平面で切ったときの断面に出現する立体を検討するものである.こ れについては、検討を開始したばかりなので以下では触れない.

(4) 平成 22 年度進捗状況

以下では、平成22年度に検討し始めた、「正四面体座標系による4次元正多胞体の表現」について、その進捗状況を説明する.これまで説明してきたような、4次元座標系における任意座標を正四面体座標系の座標に変換する行列のひとつは、

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{6}}{3} & -\frac{\sqrt{6}}{3} & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{3} & \frac{2\sqrt{2}}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{pmatrix}$$

である.ここで、変換行列を構成する縦ベクトルは、正四面体の4つの頂点の位置ベクトルに 相当している.この変換は線形な変換であるため、平行移動については不変である.したがって、 正多胞体がある場所によって表示が異なることはない.そこで、以下では原点付近にある正多胞 体およびその正多胞体を任意平面(4次元なので回転の中心は面になる)周りで回転させた結 果として得られる正多胞体を考察の対象とする.

4次元の正多胞体(3次元における正多面体に相当)は6種類存在する. その概要を表1に示す(Coxeter[2]).

☆↓衣↓衣↓衣↓					
名称	表面の立 体	頂点の数	辺の数	面の数	シュレーフリ記号
正5胞体	正4面体	5	10	10	{3,3,3}
正8胞体	立方体	16	32	24	{4,3,3}
正16胞体	正4面体	8	24	32	{3,3,4}
正24胞体	正8面体	24	96	96	{3,4,3}
正120胞体	正12面体	600	1200	720	{5,3,3}
正600胞体	正20面体	120	720	1200	{33,5}



図2 正5胞体



図3 正8胞体

正 5 胞体は、回転のさせ方によって、素直に正四面体に見えるときがある(図2).他の場合、 この変換によってふたつの異なる四面体をつなげたような非対称な六面体形状に変換される. 点が等価であることが素直にみえないことが興味深い.

正8胞体は,外形は菱形12面体の形状をもつ.zu平面について回転させた場合,正5胞体と は異なり常に対称性の良さを保つことがわかった(図3).ただし,回転の度合いによって,見た 目は異なる.外形は菱形12面体と正6角柱が交互に出現する.内部の構造はその都度かわる.

正 16 胞体は「よい方向」の場合には、外形が立方体になることがある(図4). 一般的には、それほど良い対称性は見られない. 正16 胞体の投影図が与えるねじれ感は正四面体座標系の場合でも残る.



図4 正16胞体

図5 正24胞体

正 24 胞体は外形が菱形12面体に変換される. zu 平面周りで回転させても外形の菱形 12 面体構造は不変である(図5). 見える向きと内部の構造のみが変化する.

正 120 胞体(図6)と正 600 胞体(図7)は直投影とよく似た図形に変換されることがある.現在 のところ新しい見方による利点を見つけることはできていない.

以下はまとめである. 正四面体座標系による4次元正多胞体の表現をおこなった. これは現在 のところあまり行われていない方法である. 正四面体座標系には,表現の仕方が唯一であるとい う特徴を持っているが,座標系の選び方(回転のさせかた)によって正多胞体の見え方が異なる. (直投影の投影方向による形状の違いに相当?)現在のところ,自分自身があまり見慣れていな いため,また個々の多胞体表現をうまく解釈しできていないため,この表現によって得られる情 報は多くない. 今後はこの表現が正多胞体を理解する上でどのような長所を持つのかをさらに検 討する必要があるだろう.



図6 正160胞体



図7 正600胞体

参考文献

- [1] Edwin A. Abbott, Flatland, 1884
- [2] H. S. M. Coxeter, Regular Polytopes, Dover, 1973
- [3] Alexander K. Dewdney, Planiverse, Springer, 2000
- [4] 宮崎興二,山口哲,石井源久,高次元図形サイエンス,京都大学学術出版会,2005
- [5] 宮崎興二, 石原慶一, 4次元グラフィックス: 高次元 CG への道, 朝倉書店, 1989
- [6] 小川泰, 美の幾何学 VII, 形の科学会誌 22(1),17-18(講演要旨), 2007, ほか
- [7] Rudolf Rucker, Geometry, Relativity and Fourth Dimension, Dover, 1977

4. 国際協力

4.1. 成均館大学(Sungkyunkwan University)

(1) 2010年8月11日

2010 年 8 月 11 日に韓国の成均館大学(SKKU)水原キャンパスにて"The 2nd SKKU-TU Joint Student Workshop"を開催した.

2010 年 8 月 11 日, 韓国の成均館大学(SKKU)と当センターによるワークショップ(The 2nd SKKU-TU Joint Students Workshop)が, 成均館大学水原キャンパスにて開催されました. 8 月 9 日から 11 日(現地時間)までの 3 日間, CCMR メンバーが現地に滞在し成均館大メンバーと交流しました. 最終日に開かれたワークショップでは, 成均館大学から研究助手 1 名と学生 2 名, 東京大学から研究助手 1 名, そして東洋大学から研究助手 2 名と学生 2 名の 3 大学計 8 名が, それぞれ 20 分から 40 分の発表を行いました.

このワークショップは, 昨年度に CCMR で初めて開催されたものです. そこでの高い評価を受け, このような若手教育のための国際交流を今後も継続しようと, 2 回目の開催に至りました. 今回も充実した会となり, 両校の教員と学生達の間では大変活発な議論が交わされました. また, 現地の学生が聴講者として多数参加していたことからも, 本会へのニーズや関心の高さが伺えました.

成均館大学の手厚いサポートにより,本会は大成功に終わりました.滞在期間中は,多くの方が 集う懇親会を何度も開いて頂き,音楽会も共催されました.このような国際交流は,学生達はもち ろん CCMR メンバー全員にとって,大変良い刺激になりました.



図1 両校の参加者で記念撮影

(2) 2011 年 1 月 21 日

2011 年 1 月 21 日に計算力学研究センター1階会議室において"The 3rd SKKU-TU Joint Student Workshop"を開催した.

2011 年 1 月 21 日,韓国の成均館大学(SKKU) と当センター(CCMR)によるワークショップ (The 3rd TU-SKKU Joint Students' Workshop)が、東洋大学白山第2キャンパス東洋大学計 算力学研究センターにて開催されました.成均館大学は、韓国で最も歴史が古いトップクラスの 大学であり、工学系はもちろんのこと、文系、芸術系、体育系、医学系と幅広い分野を網羅した 総合大学です. CCMRセンター長の矢川元基工学研究科教授は、2008年から同大学で客員教 授を務めています.

当日の午前中は,成均館大学の教授陣により2件の講演をして頂きました.午後のワークショップでは,成均館大学の学生5名,東洋大学から研究助手2名と学生3名の2大学計10名が, それぞれ20分程の発表を行いました.

このワークショップは、一昨年に CCMR で初めて開催されたものです。そこでの高い評価を受け、このような若手教育のための国際交流を今後も継続しようと、昨年夏に韓国の成均館大学で第2回を催しました。それから半年後に第3回を開催できたことから、本ワークショップへのニーズや関心の高さが伺えます。今回も最新の発表が充実した会となり、近い研究テーマの発表では意識しあい、異なる研究テーマの発表では普段以上に英語に集中する様が多く見られました。また、懇親会では教授陣テーブルも学生テーブルも変わらず盛り上がっておりました。このことからも、会を重ねるにあたり両校の絆が近くなっていることを感じることができました。



図2 両校の参加者で記念撮影

5. 情報発信

5.1. 第 11 回計算力学フォーラム (FEOFS 2010 / マレーシア)

2010 年 6 月 7 日から 9 日の3日間に亘りマレーシアのクアラルンプールで行われた The Far East and Oceanic Fracture Society 2010 (FEOFS 2010)の2日目に, 2部セッションで第 11 回計算 力学フォーラムを行った.

第 11 回計算力学フォーラムを, Far East and Oceanic Fracture Society 2010 (FEOFS 2010) の 2 日目に, 2 部構成のセッションで開催した.

FEOFS は、1988 年に東京工業大学で開かれた、アジア地区の破壊力学者の集まりを出発点とする学会です。今年はマレーシアの首都、クアラルンプールに建つ Istana ホテルで(現地時間)6月7日から9日まで開催されました。参加国は21ヶ国、講演件数は300件でした。

本フォーラムは、破壊力学に対する計算力学からのアプローチを幅広く受け付けた結果、40 席程の部屋が各国の研究者でほぼ満席になりました。例として、東京理科大の岡田先生から 「VCCM による自動き裂進展解析」、Kuala Univ.の Ridha 先生から「津波によって引き起こされる ビルの腐食問題」、CCMR の小林から「EFMM による固有振動解析」についての発表がありまし た.また、CCMR の長岡は、別セッションで「EFMM による流体構造連成解析」について発表しま した.なお、FEOFS 2010 の最終日には、計算力学フォーラムの座長を務めた塩谷先生から、大 規模並列計算に関する基調講演がありました。その中では、超大規模解析についてのニュース と、スーパーコンピュータに関する日本の現状について発信されました。大ホールの席は 9 割方 埋まっており、反応も大変充実しておりました。



図1 フォーラム会場の様子

5.2. 第 12 回計算力学フォーラム (WCCM/APCOM 2010 / オーストラリア)

2010 年 7 月 23 日にオーストラリアのシドニーで行われた WCCM/APCOM 2010 にて, 第 12 回計算力学フォーラムを行った.

第 12 回計算力学フォーラムを, 9th World Congress on Computational Mechanics (WCCM2010) 内の Minisymposium (MS9043) Computational Methods for Environmental Problems の一環として開催した.

なお、このミニシンポジウムは韓国成均館大学のD.Song教授と東洋大学計算力学研究センター長である矢川元基教授,東洋大学総合情報学部の中林准教授の3名がオーガナイザとして 企画されたものである.

WCCM は、2年に1度開催される世界で最も大きな計算力学の会議であり、アジア太平洋地域の APCOM, 北米の US National Congress, ヨーロッパの ECOMAS という3つの大きな国際会議の上に位置するものである.本会議は参加者が 1500名, 論文が 1000 件近い大規模なもので、最大 14 セッションが同時に行われた.

本フォーラムでは、東洋大学計算力学センターのグループから3件の発表と、韓国成均館大 学から2件の発表、さらに米国アイオワ州立大学から1件の発表があり、合計で6件の環境問題 に関する最新のテーマが集まり、2時間にわたってスライドによる講演や活発な議論が行われた.

5.3. 第13回計算力学フォーラム (CMD / 北海道)

2010年9月24日,25日の2日間に亘り北海道の北見工業大学で行われた CMD2010 にて, 第13回計算力学フォーラムを行った.

第 13 回計算力学フォーラムとして,北海道北見市にある北見工業大学で開催された JSME 23rd Computational Mechanics Division Conference 2010 (CMD2010)内で,オーガナイズドセッション「大規模並列・連成解析と関連話題」を開催した.

CMD2010 は約 380 名の参加と, ポスター発表を含む約 300 件の講演と特別講演, フォーラム, 部門表彰式, 部門懇親会などが開かれた.

本フォーラムは3つのセッションから構成され以下の12の講演が行われた.

- MRIの磁場-構造並列連成動解析
- LS-DYNA によるショックアブソーバ用ダンパーの流体構造連成解析
- 分離反復型解法によるアコースティック流体・構造連成解析システム
- バランシング領域分割法による三次元アコースティック流体-構造連成解析手法の開発
- 非圧縮性流体解析システムの高速化とその環境問題への適用
- GPGPUを用いたセルラオートマトン法による簡易弾性体解析
- アクセラレータクラスタによる並列有限要素解析
- BDD 法における局所ファイン修正法の検討
- ADVENTURE Solid の BDD 前処理への並列直接法ソルバーの導入
- 非線形動解析に対応した ADVENTUR Solid の開発
- メッシュ細分割を用いた階層型領域分割法のための大規模並列メッシュ生成法
- ADVENTURE2 における大規模並列解析結果の可視化技術

これらの講演と議論を通し、大規模計算を中心とした現状と今後の課題に関する議論が行われた.

6. 教育活動

センター研究員らの指導のもとで,東洋大学工学部卒論学生,工学研究科大学院学生がセンターにおいて研究活動を行っている.

6.1. 教育活動風景

矢川研究室

矢川研究室では、博士課程の学生2名で月に数回セミナーを開き、進捗状況を報告し、議論を 行なっている.大学院生は、各自が計算力学を用いた独自のテーマを持ち、研究に取り組み、 Java やC 言語で実装している. Free Mesh Method の高精度化手法である Enriched Free Mesh Method のき裂問題に対する有効性の検討や、精度の向上、六面体要素への拡張についての 研究や、粒子(節点)に回転やひずみ、曲率などの物理自由度を直接定義することができ、低自 由度でありながら高精度な解が得られる"付帯条件付き多次元型移動最小自乗法"を用いた三 次元弾性固体解析に関する研究が行われている.



図1 3 次元き裂進展解析

図2 解析精度検証結果

江澤研究室

江澤研究室では、学部学生12名卒業研究および大学院生4名の修士研究および博士研究 を行っている.学部学生は毎週1回セミナーを開き、勉強会や進捗状況報告をしてもらっている. 大学院生は、月に数回各自の研究の進捗状況報告および勉強会を実施している.学部学生は まず汎用構造解析プログラムANSYSを習得してもらい、つぎに3次元 CADの勉強をしてもらっ ている.大学院生は独自に開発したプログラム等を使って研究を行っている.図3はセミナーで の勉強会風景である.図4はANSYSを使って解析をしている様子である.



図3 セミナー風景



図4 研究風景

田村研究室

田村研究室では、学部生 11 名の卒業研究および大学院生 1 名の修士研究と1 名の博士研究を行っている.

週1回のセミナーでは、大学院生1名、学部生2,3名が研究発表を行う.またそれ以外の学生は1週間の進捗を報告する.これにはオブザーバーとして仮配属されている3年生も参加している.また、学部生は週1回の輪読で専門書を読み、大学院生は週1回の輪読で学術論文紹介を行っている.図5はセミナーの様子である.



図5 セミナーの様子

塩谷研究室

塩谷研究室では、学部学生12名の卒業研究を行っている.毎週1回開催されるセミナーでは 学生が研究進捗状況についての発表を行う.これにはオブザーバーとして仮配属されている3 年生も参加している.また、週1回の輪講では専門書を読み、学術論文紹介などを行っている. 図6は研究室の様子であり、図7はゼミ合宿での研究発表会の様子である.



図6 研究室の様子

図7 ゼミ合宿研究発表会

中林研究室

中林研究室では、学部学生10名が卒業研究を行い、大学院生1名が博士論文のための研究を行っている。毎週1回開催されるセミナーでは各回とも4名が研究発表を行い研究の進捗状況の報告や内容について議論する。また、卒業論文提出締切が近くなると全員が週1回の進捗状況を行うことになっている。卒論発表会は研究内容の近い田村研究室と合同で行っている。図8は研究室の様子であり、図9は研究発表会の様子である。



図8 研究室の様子



図9 研究発表会

6.2. 卒論・修論の紹介

矢川研究室

(1) Enriched Free Mesh Methodのき裂問題への適用

Free Mesh Method の高精度化手法である Enriched Free Mesh Method について, 3 次元弾性 問題における収束性の評価と,き裂解析に対する有効性についての検討を行った.数値解析の 結果から,従来法と比較して,精度が大幅に向上することが確認された.

(2) ニューラルネットワークを用いた円孔によるき裂進展阻止シミュレーション

き裂が進展する事により起こる破壊を防止する事を目的に研究を行っている. き裂進展を阻止する方法はき裂が円孔に貫入して停止する方法とした. 解析では, 3 点曲げ試験解析で検証し, 節点処理型の有限要素法であるフリーメッシュ法を適用し, き裂進展を阻止できる最適な円孔位置の予測において, ニューラルネットワークを用いている.

(3) クローン的な階層メッシュを用いた大規模なアダプティブ解析

階層メッシュを構築するには、マザーメッシュを全てメモリに載せなければならない. そのため、 階層メッシュの大きさには制限があった. 本研究では、 階層メッシュを複数個並べて繋げることで 大規模なメッシュを生成できるようにした. そして、 アダプティブ解析を行った.

(4) EFMMの導入による動的解析の高精度化

一般的に,有限要素法における解析を行う際には解析精度向上の為中間節点を有する高次 要素を用いる.しかし,高次要素の使用は様々な問題点も含んでいる. 特に,動的解析の解法 に陰解法を用いる際には,各ステップ毎に連立方程式を解く必要があり,マトリックスの肥大化は 計算効率を大幅に低下させる.本研究成果により EFMM を使用することで,高次要素を用いる 事無く解析精度を向上させた動的解析を行うことが可能である事を示した.

(5) Enriched Free Mesh Method による大規模並列解析

本研究の目的は, EFMMと並列処計算の親和性の検証である.現在,並列CG法で解いた2次元静的構造問題において, FMMと同等の並列化効率を確認している.並列解析に使ったコンピュータ・ノード数は70,解析規模は1億自由度規模である.今後は,3次元問題へ実装する.

(6) EFMM の剛性行列を用いた大規模固有振動解析

EFMM の剛性行列は FEM と比較すると狭く,固有値分布は低周波領域に密集していること が知られている.本研究では,EFMM の剛性行列を用いた並列固有値解析を良好な並列化効 率で解くこと,そして EFMM の音響解析へ発展させることを目的としている.並列固有値解析に 用いる手法は Lanczos 法である.

(7) 高精度フリーメッシュ法の応用と展開に関する研究

本研究は、大規模数値解析手法である Enriched Free Mesh Method (EFMM) のより実用的な 問題への拡張と更なる解析精度の向上を実現し、一般的な構造解析手法として展開するもので ある.精度を向上させるため、変位場に様々な特性を持つ基底関数を適用した EFMM を提案し た.提案手法の精度は中間節点を有する二次要素に勝ることが分かった. EFMM は常に並列 解析を前提としてきたが、二次要素を上回ったことにより、通常の高精度有限要素としても利用 することが可能となった.さらに、変位場の基底関数は任意に選択できることが明らかになり、そ の範囲は四面体要素にとどまらず,六面体要素にも適用可能であることが分かった.

Free Mesh Method の高精度化手法である Enriched Free Mesh Method について,3次元弾性 問題における収束性の評価と、き裂解析に対する有効性についての検討を行った.数値解析の 結果から、従来法と比較して、精度が大幅に向上することが確認された.

江澤研究室

(1) 位相最適化の研究

構造の最適化手法にはいろいろあるが、そのひとつに位相最適化がある。密度法など各種の 手法を用いて最適化を行っている。また、音響工学に関連したものとしてはスピーカのコーンと 筐体の振動の研究も行っている。コーン形状で振動の様子が変化し、音を汚す要因を除去でき る形状を探索している。

(2) ゲームプログラミングの研究

ゲームプログラムでは、局面の正確な評価が重要な要素となる. そこで、オセロゲームを例として、局面の評価関数がゲームの強さに与える影響を調査し、より強くするにはどうしたらよいかを研究している. また、探索のスピードを速めるにはどうしたらよいかも重要なテーマである.

(3) 防食の研究

金属配管の腐食では, 流路の流れ速度, 速度勾配, 電位場等が腐食に関係してくる. そこで, それらの影響を定量的にシミュレーションし, よりよい防食をどうしたらよいかを, 各種の最適化手 法, 逆問題手法を併用しながら研究している.

(4) CAE 向き有限要素の開発の研究

有限要素法では要素分割がいまだ重要なテーマになっている.ここでは従来とは逆に要素分割しやすい,高精度な要素を探ることをテーマとして研究を行っている.

田村研究室

(1) 医療分野での流体解析技術の利用

コンピュータによる流体解析,いわゆる CFD (Computational Fluid Dynamics)の進歩は目覚ま しいが,まだまだ実用分野は限られている.ここでは,CFD の適用範囲を広げることを目的として, 特に医療分野への応用について研究を行っている.具体的には,超音波による治療,体内での キャビテーションなどについて解析を行っている.

(2) キャビテーション/キャビテーション流れ解析手法の開発

キャビテーションは流体機械のみならず,化学や環境にも影響する重要な現象であるが,流体力学的には混相流であり,またキャビテーション気泡と流れのスケールに差があるため,数値的な解析が難しい問題の1つである.ここでは,1つのキャビテーション気泡の運動を詳細に解析する手法と,キャビテーション気泡をモデル化し,キャビテーション流れを効率的かつ精度よく解析する手法の開発を行っている.

(3) 高速度ビデオを用いた運動解析

近年,高速度ビデオの性能が向上し,また使い勝手も向上している.ここでは,各種高速運動 を高速度ビデオで撮影し,画像解析を施すことで物体の運動の詳細を調べている.平成 22 年 度は,野球のボールについて,ピッチャーの投球と,バットに当たる前後のボールの運動につい て研究を行った.

塩谷研究室

(1) 三次元き裂進展解析システムのためのソフトウェアの開発

地球シミュレータなどを用いて、これまで大規模有限要素並列計算を行う汎用構造解析ソフト ウェアの開発を行ってきたが、これに三次元き裂進展シミュレーション機能を追加すること目的と して、新たに CAD ソフトウェアを導入し、モデルデータから解析システムへの入力データを作成 するプログラムを作成した.大規模き裂入りモデルの作成準備として、簡易モデルの作成と応力 解析を行った.

(2) Windows 版熱伝導解析モジュール開発

計算サーバ上で実行される大規模有限要素並列計算を, 簡易に実現する Windows 版システムとして開発された構造解析のシステムに, 熱伝導解析機能を追加することを目的として, モジュールの開発を行い, いくつかの問題に対して有効性の検討を行った.

(3) ネットワーク型 CAE ソフトウェアの開発

本研究では、遠隔地で運用される並列計算機システムを、インターネットを介して利用するネットワーク型 CAE システムについて、九州大学と共同研究を行うことにより、関東と九州間での遠隔利用実験を行った.解析結果の可視化機能の拡張を行い、可視化可能な物理量の選択肢を広げることを実現した.

(4) マルチメディアデバイスを用いたシミュレーション

近年普及が進んでいるスマートフォンと呼ばれるポータブルマルチメディアデバイス端末について,その直感的かつ簡易な操作性に着目し,クラウド型 CAE システムの入出力端末としての利用を目的とし,マルチメディアデバイス上での可視化システムの構築を行なった.

(5) マルチメディアデバイス操作時の脳波測定

CAE システム利用時などにおける,パソコンでのマウス操作と,スマートフォンと呼ばれるポー タブルマルチメディアデバイス端末での指によるタッチ操作について,ユーザに与えるストレスな どの影響を調べるために,簡易脳波測定装置を用いて,同様の操作をそれぞれの端末を用い て行った際の脳波測定を行い,より快適なシステムの構築について検討を行った.

中林研究室

(1) 数値流体解析の最適化問題への応用

非圧縮性粘性流体の解析システムを用いて,各種設計問題・最適化問題に取り組んでいる. 具体的には,ある制約条件の中で解析モデルを自動生成し,遺伝的アルゴリズムによる反復計 算をすることにより流体力学的効果を考慮した最適化問題を解いたりする.本年度は,室内に置 かれた扇風機により,体感温度が出来るだけ快適になるような最適レイアウト問題に関する研究 を行っている.

(2) マルチエージェントシステム・人工知能に関する研究

特に, RoboCup サッカーシミュレーションリーグを題材として, マルチエージェントシステムの開発を行っている. 18年度から参加してきた, サッカーシミュレーションリーグ 2D では, 今年度国内の大会 (JapanOpen 2010 大阪) で5位の成績を挙げた. また, 世界大会 (RoboCup 2010 Singapore)の予選も突破し, 世界ランキング 14 位の成績だった.

(3) ユビキタスコンピューティングに関する研究

従来のPCを中心としたコンピューティング環境だけではなく、身の回りの様々な情報機器を数値シミュレーションに応用する研究を行っている.具体的には、汎用携帯ゲーム機を用いたクラスタの構築、携帯電話を用いたクラスタの構築、デジタルカメラを用いたイメージベース CAE システムの開発などである.本年度は、オートバイ用燃費計を用いた燃料消費量低減化を目的としたルート検索システムの構築や、加速度センサーを用いた自動車運転アドバイスシステムの構築を行った.

(4) 計算力学のスポーツへの応用に関する研究

スポーツの中でも特にサッカーを題材として,サッカーボール周りの流れ解析により変化球のメカ ニズムを解明したり,逆問題としてフリーキックをサポートするシステムの開発を行っている.

7. 業績リスト

本年度の当センターに関係する業績リストを記載する.

7.1. 論文

- 1. S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO, N. MIYAZAKI, "Atomistic Study of the Effect of Hydrogen on Dislocation Emission from a Mode II Crack Tip in Alpha Iron", International Journal of Mechanical Sciences, Vol. 52, No. 2, pp.334-338, February 2010.
- H. Kawai, M. Ogino, R. Shioya, S. Yoshimura "Large Scale Elasto-Plastic Analysis Using Domain Decomposition Method Optimized for Multi-core CPU Architecture", Key Engineering Materials, Vols.462-463, pp.605-610 2011
- 3. Y. Kobayashi, R. Shioya, G. Yagawa "Parallel Eigen Frequency Analysis Using Enriched Free Mesh Method", Key Engineering Materials, Vols.462-463, pp.628-633 2011
- 4. S. NAGAOKA, Y. NAKABAYASHI, G. YAGAWA "Fluid-Structure Coupled Analysis Using Enriched Free Mesh Method", Key Engineering Materials, Vols. 462-463, pp 1238-1243, 2011
- 5. Y. KITAMURA, H. OGINO, N. MIYAZAKI, T. MABUCHI, T. NAWATA "Birefringence Simulations for Annealed Ingots of the <001>- and <111>-Growth Calcium Fluoride Single Crystals with Consideration of Creep Deformation" IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, Vol.10, Paper No. 012075 2010.7
- 6. T. ASHINO "Materials Ontology: An Infrastructure for Exchanging Materials Information and Knowledge" Data Science Journal, vol. 9, (2010) , pp.54-61 2010
- 7. Y. NOMURA, T. IKEDA, N. MIYAZAKI "Stress Intensity Factor Analysis of a Three-Dimensional Interface Corner between Anisotropic Bimaterials under Thermal Stress" International Journal of Solids and Structures, Vol,47, Nos.14-15, pp.1777-1784 2010.7
- 8. M. KOGANEMARU, T. IKEDA, N. MIYAZAKI, H. TOMOKAGE "Evaluation of Stress Effects on Electrical Characteristics of N-Type MOSFETs : Variations of DC Characteristics during the Resin-Molding Process" ASME Journal of Electronic Packaging, Vol.132, No.1, Paper No. 011003, pp.1-8 2010.3
- M. KOGANEMARU, T. IKEDA, N. MIYAZAKI, H. TOMOKAGE "Experimental Study of Uniaxial-Stress Effects on DC Characteristics of nMOSFETs" IEEE Transactions on Components and Packaging Technologies, Vol.33, No.2, pp.278-286 2010.7
- Y. HAN, M. KOGANEMARU, T. IKEDA, N. MIYAZAKI, W. CHOI, H. TOMOKAGE "Influence of Uniaxial Mechanical Stress on the High Frequency Performance of Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistors on (100) Si Wafer" Applied Physics Letters, Vol.96, No.21, Paper No. 213515 2010.5
- 11. M. FUKAYA, Y. TAMURA, Y. MATSUMOTO "Prediction of Cavitation Intensity and Erosion Area in Centrifugal Pump by Using Cavitating Flow Simulation with Bubble Flow Model", Journal of Fluid Science and Technology 2010.6
- 12. K. MUROTANI, G. YAGAWA, J.B. CHOI "Adaptive Analysis of 3D Cavity Flow Using Hierarchical Mesh", Computational Mechanics, Vol.46, No.1, pp.135-145, 2010.6
- 13. Hitoshi Matsubara, Shigeo Iraga, Genki Yagawa and Doosam Song "Some consideration on derivative approximation of particle methods", Particle-Based Method (Onate Eugenio and Owen Roger Eds.) Springer 2011
- 14. 松田和敏,池田 徹,宮崎則幸 "多層基板の熱変形挙動の予測およびそのパッケージの反り 解析への適用",日本機械学会論文集 (A 編),第76巻第762号,pp.127-135,2010年2月
- 15. 松原仁, 入部綱清, 伊良波繁雄 "粒子法の微分精度に関する一考察および物理自由度を有

する移動最小自乗法", 土木学会論文集 A, Vol. 66, No.4, pp.723-736, 2010

- 16. 堀池弘一,池田徹,松本龍介,宮崎則幸 "分子静力学法を用いた異種結晶材料接合角部の 特異応力場解析と混合モード破壊じん性値の評価",材料,第 59 巻第 8 号, pp.908-915, 2010.12
- 17. 鈴木隼人, 松原仁, 江澤良孝, 矢川元基"回転自由度を考慮した三次元 ENRICHED FREE MESH METHOD", 日本機械学会論文集 A 編, 76 巻, 771 号, pp.14-20 2010.11
- 18. 黒川哲郎, 室谷浩平, 矢川元基 "視点依存プログレッシブメッシュとそのアダプティブ弾塑性 解析への応用", 日本機械学会、日本機械学会論文集 A 編, 76 巻, 769 号, 2010.9
- 19. 北村優太, 宮崎則幸, 荻野岳洋, 真淵俊朗, 縄田輝彦 "フッ化カルシウム単結晶アニール後の複屈折シミュレーション (クリープ変形を考慮した残留応力による解析)"日本機械学会, 日本機械学会論文集(A 編), Vol.76, No.770, pp.1247-1254 2010.10
- 20. 水田雄造, 松原仁, 伊良波繁雄 "モンテカルロ積分を利用した有限要素法の開発とその性能評価"土木学会, 応用力学論文集, Vol.13, pp.141-149, 2010.8
- 江戸孝昭, 松原仁, 原久夫 "ろ過型沈砂池における赤土濁水流の有限要素解析"土木学会, 応用力学論文集, Vol.13, pp. 211-220, 2010.8
- 22. 陸茉莉花,松本龍介,武富紳也,宮崎則幸 "水素ガス環境下のα鉄における粒界凝集エネ ルギーに関する原子シミュレーション"材料,第 59 巻第 8 号, pp.589-595 2010.8
- 複本龍博・松本龍介・武富紳也・宮崎則幸 "第一原理計算に基づくAI中の格子欠陥まわりの 水素占有率の評価"材料、第59巻第8号, pp.596-603 2010.8
- 24. 池田徹, 貫野敏史, 宍戸信之, 宮崎則幸, 田中宏之, 畑尾卓也 "デジタル画像相関法による 微細実装接合部のひずみ計測"溶接学会誌, 第 79 巻第 3 号, pp.237-242 2010.4
- 25. 長岡慎介, 中林靖, 矢川元基 "EFMM を使用した流体-構造連成解析", 日本機械学会, 日本機械学会論文集 A 編, Vol.76, No.764, pp.449-457, 2010.4

7.2. 総説・解説・エッセイ

- 1. 矢川元基, "応用数理の遊歩道""(62)安全・安心とシミュレーション科学"応用数理, Vol.20, No.3, pp.64-67, 2010.9
- 2. 矢川元基, "総合工学委員会について"学術の動向, 第15巻, 第12号 pp.25-28, 2010.12.1
- 3. 小林陽介, "FEOFS2010 参加報告"計算工学, Vol.15, No.4, pp.49-50, 2010.10.31
- 4. 宮崎則幸, "水素脆弱化現象の原子シミュレーション", CMD Newsletter, No.44 2010.4
- 5. 矢川元基, "スーパーコンピューティング(続)", 応用数理, Vol.20, No.2, pp.77-80, 2010.6

7.3. 招待講演

- 1. 矢川元基 "これからの計算力学", (特別講演), 国際連携溶接計算科学研究拠点主催 第 4 回講演会「日本発の独自シミュレーション技術の開発と世界への展開」,大阪, 2011.1.14.
- N. MIYAZAKI "Atomic Simulations of Hydrogen Embrittlement", 9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010), Sydney, Australia, 2010.7
- 3. N. MIYAZAKI "Birefringence Simulations of Calcium Fluoride Single Crystal Used as Chamber Window of Gas Laser Light Source" International Conference on Computational Methods 2010 (ICCM2010), Zhangjiajie, China, 2010.11.20
- 4. T. ASHINO "International Activities for Interoperability of Material Databases CODATA/CEN-ELSSI/VAMAS", (Invited Lecture) The 2nd Asian Materials Database Symposium, AMDS2010, China, Sanya 2010.3.11
- 5. G. YAGAWA "Recent Advances in Computational Structural Mechanics" Seminar at University of Ulsan 2010.8.25
- 6. G. YAGAWA "Fluid Structure Coupled Analysis Using Enriched Free Mesh Method" Honorary Doctor Award Ceremony at IASI Technical University 2010.6.18
- 7. G. YAGAWA "Hierarchical Meshing for Large Scale Simulations of High Accurary" (Plenary Lecture) WCCM/APCOM2010 2010.7.21
- 8. G. YAGAWA "Eigen Frequency Analysis by Enriched Free Mesh Method" (Keynote Lecture) WCCM/APCOM2010 2010.7.20
- 9. G. YAGAWA "Accurate Fluid/Structure Coupled Simulation Using Elements without Mid-side Nodes" (Invited Lecture) WCCM/APCOM2010 2010.7.19
- 10. 田村善昭, 古澤寛行, 藤井秀典, 宮本勇輝 "Visualization Systems for Very Large-Scale Data on Desktop PC", 大規模可視化ワークショップ ペタスケールコンピューティング時代に向けた 可視化解析技術の挑戦 2010.10.25
- 11. 芦野俊宏 "材料科学におけるデータベース共通プラットフォームの開発と課題" 情報知識学会第18回(2010年度)年次大会記念シンポジウム「科学技術コモンズと情報知識学の挑戦」 (招待講演) 2010.5.15
- 12. 矢川元基 "総合工学委員会について" 日本学術会議総合工学シンポジウム 2010.7.16
- 13. 矢川元基 "科学・技術・社会とコンピュータ" 徳島城南塾 SSH 特別講演会 2010.6.29
- N. MIYAZAKI "Atomic Simulations of Hydrogen Embrittlement" 9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010) 2010.7

7.4. 講演論文・口頭発表

- 1. R.MATSUMOTO, N. NISHIGUTI, S.TAKETOMI, N. MIYAZAKI, "Atomic Study of Hydrogen Effects on Vacancy Concentration in a-Fe", International Hydrogen Energy Development Forum 2010, Fukuoka, Japan, February 2010.
- 2. T. Ashino "Materials Data Representation for Data Exchange and Electronic Reporting", 2nd International Symposium on Thermal Design and Thermophysical Properties for Electronics and Energy, e-Therm (Tsukuba), 2010.12.
- 3. T. Ashino and L. Bartolo "CODATA Task Group on Materials Data in support of Research & Education", 22nd International CODATA Conference, CapeTown, 2010.10.26.
- 4. T. Ashino "International activities for Interoperability of Material Databases, CEN WS ELSSI-EMD/VAMAS TWA35/AMDC and CODATA", 22nd International CODATA Conference, Cape Town, 2010.10.25.
- N. SHISHIDO, T. KANNO, S. KAWAHARA, T. IKEDA, N. MIYAZAKI, H. LU, C. BAILEY, O. THOMAS, D. D. MAINO, C. HUNT "An Analysis of Local Deformation of SnAgCu Solder Joint Using Digital Image Coreelation", 2010 11th International Conference on Electronic Packaging Technology & High Density Packaging (ICEPT-HDP2010), Xi'an, China, 2010.8
- 6. Masashi Fukaya, Ren Morinaka, Noboru Saito, Hisamitsu Hatou, Yoshiaki Tamura, Yoichiro Matsumoto "Prediction of Residual Stress Improvement by Water Jet Peening Using Cavitating Jet Simulation with Bubble Flow Model", FEDSM2010-ICNMM2010 2010.8.1-5
- T. IKEDA, S. KAWAHARA, N. MIYAZAKI "Evaluation of Strain in a 3D Package by the Combination of the digital Image Correlation Method with a Microscope and the finite Element Method" 12th International Conference on Electronics Materials and Packaging (EMAP2010), 2010.10
- 8. R. MATSUMOTO, M. RIKU, S. TAKETOMI, N. MIYAZAKI "Hydrogen-Grain Boundary Interaction in Fe, Fe-C, and Fe-N Systems" Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2010 (SNA+MC2010) 2010.10
- M. KOGANEMARU, K. YOSHIDA, T. IKEDA, N. MIYAZAKI, H. TOMOKAGE "Device Simulation for Evaluating Effects of Mechanical Stress on Semiconductor Devices : Impact of Stress-Induced Variation of Electron Effective Mass" Electronics System Integration Technology Conferences (ESTC2010) 2010.9
- Y. HAN, M. KOGANEMARU, T. IKEDA, N. MIYAZAKI, W. CHOI, H. TOMOKAGE "Impact of Uniaxial Mechanical Stress on High Frequency Performance of MOSFETs" Electronics System Integration Technology Conferences (ESTC2010) 2010.9
- T. ASHINO "Development of Materials Data and Knowledge Representation with Ontology Language" " 3rd Plenary meeting of CEN WS ELSSI-EMD(European Commitee for Standardization, Workshop on 'Economics and Logistics of Standards compliant Schemas and ontologies forInteroperability - Engineering Materials Data'), UK, London BSI, " 2010.2.23
- 12. Y. TAMURA, K. HIRANO, N. TSURUMI "Development of Simulation Method for Cavitation Bubble Collapse", WCCM / APCOM 2010 2010.7.19-23
- K. YOSHIDA, M. KOGANEMARU, T. IKEDA, N. MIYAZAKI "A Study on Device Simulation Model for the Stress Effects of Semiconductor Devices : Device Simulation Using Electron Mobility Model Including "Intervalley Scattering" International Conference on Electronics Packaging 2010 (ICEP2010) 2010.5
- 14. G. YAGAWA, K Murotani and H Matsubara "Hierarchical meshing for large scale Simulations Of high accuracy (invited)", Proceeding of 9th World Congress on Computational Mechanics (WCCM), July 2010.
- 15. Y. KITAMURA, H. OGINO, N. MIYAZAKI, T. MABUCHI, T. NAWATA "Birefringence

Simulations for Annealed Ingots of the <001>- and <111>-Growth Calcium Fluoride Single Crystals with Consideration of Creep Deformation" 9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010) 2010.7

- R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI, T. ENOMOTO, N. MIYAZAKI "DFT-based Study of Hydrogen Occupancy around Lattice Defects in Al" 9th World Congress on Computational Mechanes and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010) 2010.7
- T. IKEDA, T. KANNO, N. SHISHIDO, N. MIYAZAKI, H. TANAKA, T. HATANO "Improvement of the Accuracy of Non-Linear Finite Element Analyses of Micro Electronic Packages Using the Digital" International Conference on Electronics Packaging 2010 (ICEP2010) 2010.5
- S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO, N. MIYAZAKI "Simulation of the Competitive Relationship between Edge Dislocation Motion and Hydrogen Diffusion in Alpha Iron" 9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010) 2010.7
- T. IKEDA, H. HIRAI, M. CHIBA, N. MIYAZAKI "Stress Intensity Factor Analysis of an Interfacial Corner between Piezoelectric Dissimilar materials using the H-integral Method" 9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010) 2010.7
- M. KOGANEMARU, K. YOSHIDA, T. IKEDA, N. MIYAZAKI, H. TOMOKAGE "Study on Device Simulation Model for Analyzing Effects of Stress on Semiconductor Devices: Device Simulation Using Electron Mobility Model Including the Variation of Electron Effective Mass" 9th World Congress on Computational Mechanes and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010) 2010.7
- 21. N. SHISHIDO, T. KUWAHARA, R. MATSUMOTO, T. IKEDA, N. MIYAZAKI "Investigation of the Thermal Strain Measurement in a Micro-Region Using the Combination of an Atomic Force Microscope with Digital Image Correlation Method" 9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010) 2010.7
- Y.KOBAYASHI, R.SHIOYA, G.YAGAWA "Parallel Eigen Frequency Analysis Using Enriched Free Mesh Method" 8th International Conference on Fracture & Strength of Solids 2010 (FEOFS 2010) 2010.6.8
- 23. N. TSURUMI, Y. TAMURA, Y. MATSUMOTO "Bubble Model for Cavitating Flow Simulation Including High Void Fraction Region", V European Conference on Computational Fluid Dynamics 2010.6.14-17
- J. W. PAN, J. CHENG, T. FURUKAWA "Energy-based Characterization based on Multi-sensor Data Fusion", 8th International Conference on Fracture and Strength of Solids, Kuala Lumpur, 2010.6
- T. FURUKAWA, J. W. PAN, J. G. MICHOPOULOS "Energy-based Characterization for Nonlinear Material Behavior", 8th International Conference on Fracture and Strength of Solids, Kuala Lumpur, 2010.6
- 26. Y. TAMURA, N. TSURUMI, Y. MATSUMOTO "Numerical Simulation of Cavitation in Ultrasound Field", 10th International Symposium on Therapeutic Ultrasound 2010.6.9-12
- 27. T. FURUKAWA, B. LAVIS, H. F. D. WHYTE "Parallel Grid-based Recursive Bayesian Estimation Using GPU for Real-time Autonomous Navigation", International Conference on Robotics and Automation, Alaska, 2010.5

- T. FURUKAWA, X. TONG, C. WOOLSEY "Real-time Non-Gaussian Estimation for Cooperative SAT: Formulation and Platform-in-the-loop Simulation", 2010 Robotics: Science and Systems Conference, Zaragoza, Spain, 2010.6.27-30
- 29. Y. KANTO, S. YOSHIMURA "Sensitive Analyses of Probabilistic Fracture Mechanics for Reactor Pressure Vessel During Pressurized Thermal Shock and Comparison with the Results of International Round Robin Analyses in Asian Countries", The 8th International Conference on Fracture and Strength of Solids, FEOFS 2010, Kuala Lumpur, Malaysia, 2010.6.6-9
- J. W. PAN, J. CHENG, T. FURUKAWA, J. G. MICHOPOULOS, A. P. ILLIOPOULOS "The Online Material Characterization: Experimental Validation", 8th International Conference on Fracture and Strength of Solids, Kuala Lumpur, 2010.6
- 31. 貫野敏史, 宍戸信之, 池田 徹, 宮崎則幸, 田中宏之, 畑尾卓也, "デジタル画像相関法を 用いたフリップチップパッケージ内部の非線形熱応力解析精度の改善", 第 16 回エレクトロニ クスにおけるマイクロ接合・実装技術シンポジウム (Mate 2010), 2010 年 2 月(横浜市).
- 32. 松本龍介,武富紳也,宮崎則幸 "α鉄における格子欠陥と水素との相互作用-電子・原子レベルシミュレーションによる評価-",第20回日本MRS学術シンポジウム「エコイノベーションを切り拓く先進材料研究Ⅱ」(横浜市) 2010/12/20
- 33. 阪上恭之, 榎本龍博, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸 "DFT 計算に基づく水素ガス環境に おけるアルミニウム中への水素固溶量の評価", 第20回日本 MRS 学術シンポジウム「エコイノ ベーションを切り拓く先進材料研究Ⅱ」(横浜市) 2010/12/20
- 34. 武富紳也, 松本龍介, 宮崎則幸 "格子欠陥の挙動に及ぼす水素の影響", 第20回格子欠陥 フォーラム, 2010.9.22
- 35. 深谷征史, 守中廉, 齋藤昇, 波東久光, 田村善昭, 松本洋一郎 "ウォータージェットピーニン グ(WJP)の開発と性能予測 (3) 気泡崩壊エネルギー解析", M&M2010 材料力学カンファレ ンス 2010.11.22-23
- 36. 深谷征史, 守中廉, 齋藤昇, 波東久光, 田村善昭, 松本洋一郎 "気泡流モデルキャビテーション噴流解析によるウォータージェットピーニング用ノズルの性能予測", キャビテーションに関 するシンポジウム(第15回) 2010.11.22-23
- 37. 鶴見伸夫,田村善昭,松本洋一郎 "高ボイド率領域のための気泡モデルの改良",キャビテ ーションに関するシンポジウム(第16回) 2010.11.22-23
- 38. 江戸孝昭, 原久夫, 松原仁 "浸潤面を考慮した赤土濁水流への有限要素法の適用"第 23 回沖縄地盤工学研究発表会講演概要集, pp. 28-31, 2010.11.
- 39. 吉野隆, 小川泰 "正四面体座標系による4次元正多胞体の表現について"形の科学シンポジ ウム(加古川), 2010.11.19
- 40. 松岡篤, 吉野隆, 栗原敏之, 石田直人, 木元克典, 岸本直子, 松浦執 "中生代放散虫 Pantanellium の形態形質とその分類学的評価"形の科学シンポジウム(加古川), 2010.11.20
- 41. 小金丸正明,吉田圭佑,池田徹,宮崎 則幸 "半導体デバイスにおける応力効果を予測する デバイスシミュレーション技術の開発" エレクトロニクス実装学会 2010 ワークショップ:新産業 創出の鍵を握る実装イノベーション-環境調和と創エネ・省エネを担う実装技術を探る-2010.10.28
- 42. 小金丸正明, 吉田圭佑, 池田徹, 宮崎 則幸, 友景肇"1 軸負荷に起因する nMOSFET の 電気特性変動デバイスシミュレーション", 日本機械学会第 23 回計算力学講演会 2010.9.24
- 43. 松本龍介, 西口直, 武富紳也, 宮崎則幸 "α鉄における水素助長ひずみ誘起空孔機構に関 する検討"日本機械学会第23回計算力学講演会 2010.9.24
- 44. 阿部光利,池田徹,宮崎則幸 "異方性異種圧電材料接合角部近傍の特異応力場解析"日

本機械学会第 23 回計算力学講演会 2010.9.25

- 45. 北村優太,宮崎則幸,熊崎貴仁,永倉直人,橋本健宏,正田 勲 "ArF エキシマレーザー光 源用フッ化カルシウム単結晶チャンバウィンドウの使用環境下における複屈折解析",日本機 械学会第23回計算力学講演会 2010.9.24
- 46. 武富紳也,陸茉莉花,松本龍介,宮崎則幸"水素ガス環境における Fe,Fe-C,Fe-N 系の粒 界凝集エネルギーの第一原理計算"日本機械学会第23回計算力学講演会 2010.9.24
- 47. 榎本龍博, 阪上恭之, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸 "第一原理計算に基づく Al 中の水 素分布の評価"日本機械学会第23回計算力学講演会 2010.9.24
- 48. 松田和敏,池田徹,宮崎則幸 "ピエゾ抵抗チップとディジタル画像相関法を用いたパッケージ構成材料に起因するチップ表面の残留応力評価"日本機械学会第23回計算力学講演会2010.9.24
- 49. 高山和則, 宮崎則幸, 松本龍介, 武富 紳也 "フェーズフィールド法を用いたき裂まわりの相 変態を伴う水素拡散解析"日本機械学会第23回計算力学講演会 2010.9.23
- 50. 照屋将司, 松原仁,宇座俊吉"亜熱帯沿岸環境に適した新規モルタルの開発~機械的性質 および実環境における適応性評価~"土木学会, 大 65 回年次学術講演会 2010.9
- 51. 越智啓人, 松原仁, 伊良波繁雄 "2 層化された金属材料の分岐き裂進展シミュレーション" 日本機械学会第23回計算力学講演会 2010.9.23~25
- 52. 松原仁 "非セメント系多孔質モルタルの開発と亜熱帯沿岸環境への適応性評価"平成 22 年度 沖縄建設弘済会技術環境研究所研究発表会論文集, pp.55-62, 2010.9.
- 53. 松原仁, 伊良波繁雄"付帯条件付き多次元移動最少自乗法の開発とその性能評価"土木 学会大 65 回年次学術講演会 2010.9
- 54. 江戸孝昭, 原久夫,松原仁"有限要素法による砂ろ過層中の赤土濁水流解析"土木学会, 第65回年次学術講演会 2010.9
- 55. 崎原康平, 松原仁, 伊良波繁雄, 矢川元基"粒子法の精度向上に関する研究"日本機械 学会第23回計算力学講演会 2010.9.23~25
- 56. 原久夫, 松原仁, 江戸孝昭 "赤土等流出防止に関するろ過型沈砂池の実験および解析", 沖縄ブロック国土交通研究会, pp.69-74, 2010.7.
- 57. 吉田圭佑, 小金丸正明, 池田徹, 宮崎則幸, 友景肇 "せん断応力効果を考慮した nMOSFET の電気特性変動評価" 第 20 回マイクロエレクトロニクスシンポジウム (MES2010)(草津市) 2010.9.10
- 58. 池田 徹, 貫野敏史, 宍戸信之, 宮崎 則幸, 田中宏之, 畑尾卓也"デジタル画像相関法を 用いたひずみ計測による, 電子実装部内部の非線形応力解析精度の向上"日本機械学会 2010年次大会(名古屋市) 2010.9.8
- 59. 畑尾卓也,田中宏之, 貫野敏史,池田徹,宮崎則幸 "フリップチップ接合半導体パッケージ の信頼性解析 III" 化学工学会第42 期秋季大会(京都市) 2010.9.6
- 60. 畑尾卓也,田中宏之, 貫野敏史,池田徹,宮崎則幸 "フリップチップ接合半導体パッケージ の信頼性解析 –封止材体積弾性率の影響–"第 20 回マイクロエレクトロニクスシンポジウム (MES2010)(草津市) 2010.9.10
- 61. 武富紳也, 松本龍介, 宮崎則幸 " α 鉄中の転位 {112} <111> 刃状転位のに及ぼす水素の影響に関する研究" 第15回分子動力学シンポジウム 2010.5
- 62. 榎本龍博,松本龍介,武富紳也,宮崎則幸 "Al 中の格子欠陥まわりの水素占有率評価のための第一原理計算" 第15回分子動力学シンポジウム 2010.5
- 63. 阪上恭之, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸 "第一原理計算を用いた水素ガス環境における Al 完全結晶中への水素固溶量の評価" 第15回分子動力学シンポジウム 2010.5
- 64. 久保田真光, 桑原達彦, 宍戸信之, 松本龍介, 池田 徹, 宮崎則幸 "デジタル画像相関法を

用いた空間解像度の異なる観察系で連携した変形場評価手法の開発と多結晶金属への適用"日本材料学会第59期通常総会・学術講演会2010.6

- 65. 松岡篤, 吉野隆, 栗原敏之, 石田直人, 木元克典, 岸本直子, 松浦執 "中生代放散虫 Pantanellium の外層殻にみられる 27 個の殻孔の配列"形の科学シンポジウム(東京学芸大 学), 2010.6.25
- 66. 岸本直子, 吉野隆, 石田直人, 木元克典, 栗原敏之, 松岡篤, 松浦執 "放散虫 Mirifusus 属の殻形態から着想した3次元フレーム構造の力学特性"形の科学シンポジウム(東京学芸大学), 2010.6.25
- 67. 武富紳也,松本龍介,宮崎則幸, "活性化過程にもとづくα鉄中の刃状転位の運動速度に 及ぼす水素の影響",日本材料強度学会学術講演会,2010年6月(東京都)
- 68. 吉野隆, 岸本直子, 松岡篤, 栗原敏之, 石田直人, 木元克典, 松浦執 "球面上の Vertex Dynamics モデル"形の科学シンポジウム(東京学芸大学), 2010.6.26
- 69. 関章一, 松本龍介, 宮崎則幸 "パイルアップ転位による粒界はく離のクライテリオンの考察" 第15回分子動力学シンポジウム 2010.5
- 70. 小林陽介, 塩谷隆二, 矢川元基 "Enriched Free Mesh Method による並列解析"日本計算工 学会, 第15回計算工学講演会 2010.5.27

7.5. 受賞

- 1. 宮崎則幸 EMAP Excellence Award, 2010.10.25
- 2. 吉田圭佑, 小金丸正明, 池田徹, 宮崎則幸, 友景肇 MES2009 ベストペーパー賞, "半導体 ナノデバイス内部応力分布を考慮したデバイスシミュレーション", 2010.9
- 3. 小金丸正明,池田徹,宮崎則幸 エレクロトニクス実装学会論文賞 エレクトロニクス実装学会 2010.5

8. 結び

本報は、2010年度の活動をとりまとめたものである. なお、2011年3月24日に予定されている 第6回計算力学シンポジウムに間に合わせるために原稿締め切りを1月7日とした. したがって、 それ以降のデータについては掲載されていないことをお断りしたい.

社会が抱える問題,あるいは産業界が抱える問題を発掘しながらソリューションを見出していく ことをセンターに関係するすべての研究者が使命として共有しながら今後の活動や研究開発を 進めていきたい.