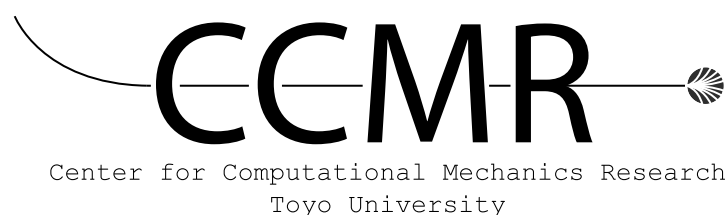


文部科学省私立大学学術研究高度化推進事業
(学術フロンティア推進事業)

2009年度

計算力学研究センター一年報



東洋大学計算力学研究センター

1. まえがき.....	1
2. 概要.....	2
2.1. センター設置について.....	2
2.2. 組織.....	2
2.3. 設備.....	4
2.4. 研究成果の概要.....	5
2.4.1. 構造健全性.....	5
2.4.2. 逆問題.....	5
2.4.3. 最適化.....	5
2.4.4. 大規模可視化.....	6
2.4.5. 大規模並列化.....	6
2.4.6. 統合化.....	7
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.....	8
2.5.1. 東洋大, 読売新聞, JST 国際シンポジウム.....	8
2.5.2. 計算力学フォーラム.....	8
2.5.3. 計算力学セミナー.....	8
2.5.4. CCMR－Sungkyunkwan University student workshop.....	9
2.5.5. 第 5 回計算力学シンポジウム.....	9
2.6. 産学協同活動.....	10
2.6.1. (株)日立製作所機械研究所との連携.....	10
2.6.2. 独立行政法人 原子力安全基盤機構との連携.....	10
2.6.3. 東京理科大との連携.....	10
2.6.4. 本田技術研究所との連携.....	10
2.6.5. インテグラル・テクノロジー株式会社との連携.....	10
2.7. 教育活動.....	11
3. 研究成果.....	12
3.1. 構造健全性.....	12
3.1.1. 構造健全性に関する研究の概要.....	12
3.1.2. 3 次元破壊力学解析の高度化に関する研究.....	13
3.1.3. 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.....	20
3.1.4. エルミート型 3 節点三角形要素への X-FEM の適用.....	26
3.1.5. 階層的なデータ構造を持つメッシュを用いた高速なアダプティブ解析 ...	36
3.1.6. 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 ..	45
3.1.7. Web ベース CAE システムのインタラクティブ化とマルチフィジクス解析へ向けたフレームワーク開発.....	56
3.2. 逆問題.....	62
3.2.1. 逆問題に関する研究の概要.....	62
3.2.2. ロボット潜水艇に働く流体力自己モニタリングのための逆解析手法の研究	63
3.2.3. カルマンフィルタを用いた配管内の腐食同定.....	68
3.3.4. 複合材料における材料同定.....	72
3.3.5. 表面反応のマルチスケール解析.....	80
3.3. 最適化.....	84
3.3.1. 最適化に関する研究の概要.....	84

3.3.2. 大規模構造問題における形状最適化問題の研究	85
3.3.3. 知識処理融合型複合熱流動数値解析による T 字形合流管内流れの評価	88
3.3.4. 階層メッシュと遺伝的アルゴリズムを用いたカソード防食の最適化	98
3.3.5. キューの最適設計の研究	102
3.4. 大規模可視化	108
3.4.1. 大規模可視化に関する研究の概要	108
3.4.2. 統合化に向けた可視化システムの構築	108
3.5. 大規模並列化	113
3.5.1. 大規模並列化に関する研究の概要	113
3.5.2. 大規模非圧縮性粘性流体解析システムの開発	114
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	117
3.6. 統合化	119
3.6.1. 統合化に関する研究の概要	119
3.6.2. システム統合化のイメージ	119
4. 産学協同活動	121
4.1. (株)日立製作所機械研究所との連携	121
4.2. 独立行政法人 原子力安全基盤機構との連携	130
4.3. 東京理科大との連携	131
4.4. 本田技術研究所との連携	131
4.5. インテグラル・テクノロジー株式会社	131
5. 国際協力	132
5.1. 成均館大学(Sungkyunkwan University)	132
6. 情報発信	133
6.1. 東洋大学・読売新聞 連続国際シンポジウム	133
6.2. 第 9 回計算力学フォーラム (工学院大学)	134
6.3. 第 10 回計算力学フォーラム (金沢大学)	135
6.4. 第 5 回計算力学シンポジウム (白山)	136
7. 教育活動	138
7.1. 教育活動風景	138
7.2. 卒論・修論の紹介	140
8. 業績リスト	144
8.1. 論文	144
8.2. 著書	147
8.3. 総説・解説・エッセイ	148
8.4. 招待講演	149
8.5. 講演論文・口頭発表	150
8.6. 受賞	157
9. 結び	158

1. まえがき

本年度はセンターが活動を開始してから 5 年目にあたる。この報告書はこの第 5 年度のセンター活動をとりまとめたものである。これまでの 4 年間と同様、本年度もほぼ順調に推移し、またセンターにとって充実した年であった。

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ップを行ったことがあげられる。両大学の教員も参加し多くの質疑が行きかう極めて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。

広報活動としては、東洋大学国際シンポジウムを読売新聞、科学技術振興機構(JST)と共に、安全と計算科学技術をテーマに開催した。また、可視化学会、日本流体力学会、日本機械学会計算力学講演会と協力して3回の計算力学フォーラムを主催した。

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、本センターで育った大学院生 3 名が本センターとしては初めて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。

2010 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

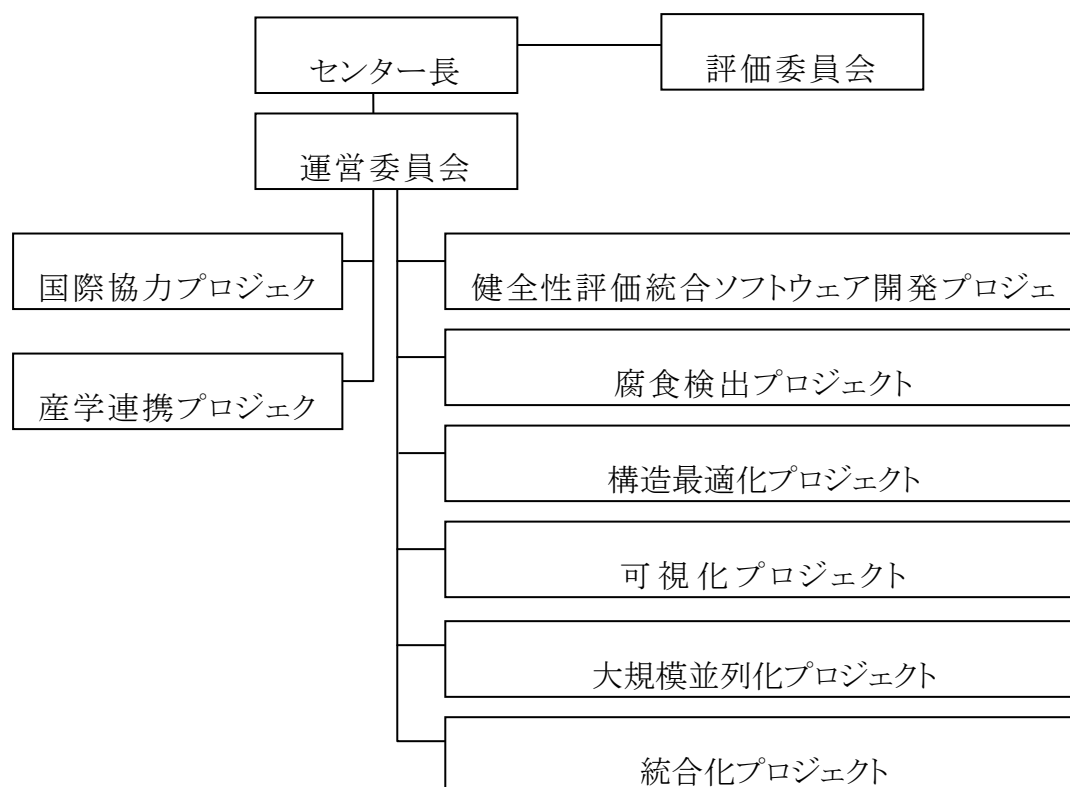
2.1. センター設置について

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)

●研究員

江澤 良孝 (東洋大学 総合情報学部)

田村 善昭 (東洋大学 総合情報学部)

塩谷 隆二 (東洋大学 総合情報学部)

中林 靖 (東洋大学 総合情報学部)

●研究助手

塩崎 聖治 (東洋大学 計算力学研究センター)

室谷 浩平 (東洋大学 計算力学研究センター)

●客員研究員

畔上 秀幸 (名古屋大学大学院 情報科学研究科 複雑系科学専攻)

天谷 賢治 (東京工業大学大学院 情報理工学研究科 情報環境学専攻)

岡田 裕 (東京理科大学 理工学部 機械工学科)

関東 康祐 (茨城大学 工学部 機械工学科)

北野 誠 (株式会社 日立製作所 機械研究所)

酒井 譲 (横浜国立大学 教育人間科学部)

谷江 尚史 (株式会社 日立製作所 機械研究所)

須賀 一博 (東京理科大学 理工学部 機械工学科)

中川 雅俊 (独立行政法人 科学技術振興機構)

西垣 一朗 (株式会社 日立製作所 機械研究所)

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)

松岡 浩 (独立行政法人 理化学研究所)

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)

村松 壽晴 (独立行政法人 日本原子力研究開発機構)

和田 義孝 (諏訪東京理科大学 システム工学部 機械システムデザイン工学科)

A. KAMAL (Univ.Kebangsaan, Malaysia)

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	7 2
	メモリPC/2700 DDR SDRAM 1024MB ECC Reg.	1 4 4
	システムHDD 80GB 7200rpm	3 6
	ケース 1U Rackmount	3 6
<データ用ストレージ>		
VCRVAL50016-3U	HDD S-ATA 500GB 7200rpm	1 6
	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液晶ディスプレイ	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	3 4

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、システムティックで迅速・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) 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。
 - (2) 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性。
- 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、次の6つのサブテーマにフォーカスし研究開発を実施している。

- (1) 3次元破壊力学解析の高度化に関する研究
- (2) 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
- (3) エルミート型3節点三角形要素へのX-FEMの適用
- (4) 階層的なデータ構造を持つメッシュを用いた高速なアダプティブ解析
- (5) 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
- (6) WebベースCAEシステムのインタラクティブ化とマルチフィジックス解析へ向けたフレームワーク開発

2.4.2. 逆問題

各種同定問題、モニタリング等に欠かせない逆問題技術を研究している。これまで、主に、(1) 腐食同定逆問題、(2) 複合材料における材料同定、(3) 表面反応のマルチスケール解析、(4) ロボット潜水艇に働く流体力自己モニタリングのための逆解析手法の研究等の研究を行ってきた。本年度は(1)ではカルマンフィルタを用いた腐食位置の同定を行った。(2)では非線形定数同定、複数台のカメラによるデータフュージョンなどの新技術を開発した。(4)では、ロボット潜水艇内部から直接計測が可能なある限定された場所の流体運動を計測し、得られた情報から潜水艇周辺領域全体の流体場を逆解析により求めた。とくに(4)では本年度は、遺伝的アルゴリズムの発想に基づく計算モデルを数種類構築し、3次元シミュレーションの試験的な比較計算を行い、検証を行った。

2.4.3. 最適化

構造健全性を高めるための最適化手法を研究している。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ている。これまでの研究により、3次元線形弾性問題を解析できるプログラムを開発し、基本的な問題に対する検証を終えた。また、構造の健全性評価においてはき裂の評価が重要なテーマになっている。そこで、構造最適化のベースとなるき裂、接触を含む構造の最適化の研究を行った。また、多目的最適化設計手法の実用化に向け開発を行ってきた「知識処理融合型複合熱流動数値解析による多目的最適設計システム」を用い、原子力発電所を初めとした各種プラントにおいて多用される T 次形合流管内の熱流動特性の評価を行った。また、階層メッシュと遺伝的アルゴリズムを用いたカソード防食の最適化手法を開発した。さらに従来は経験のみで設計されてきたビリヤードのキューのシミュレーション技術を開発し、キューの最適設計を可能とした。

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 21 年度は、プロジェクト最終年度であり、各サブプロジェクトが必要とする可視化のためのシステム開発を行った。具体的には、流体解析に対しては 10 億点規模の解析結果に対応するシステム、構造解析に対しては数千万〜1 億自由度規模の解析結果に対するシステムを開発し、検証を行った。

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「Roadrunner」のピーク性能は 1.1 PFlops となっており、このことから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) 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
- (2) 大規模非圧縮性粘性流体解析システムの開発
- (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

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)用の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。

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. 東洋大, 読売新聞, JST 国際シンポジウム

6 月 19 日に東洋大学白山キャンパス井上円了ホールにおいて, 東洋大学・読売新聞共催の連続国際シンポジウム「共生社会の実現と先端科学への挑戦 第 7 回 安全・安心とそのシミュレーション科学」を開催した.

2.5.2. 計算力学フォーラム

(1) 第 9 計算力学フォーラム (工学院大学)

7 月 21 日に工学院大学において開催された第 37 回可視化情報シンポジウムの中で第 9 回計算力学フォーラムを行った.

(2) 第 10 回計算力学フォーラム (金沢大学)

10 月 11 日に金沢大学において開催された日本機械学会 第 22 回計算力学講演会の中で第 10 回計算力学フォーラムを行った.

2.5.3. 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) 7 月 2 日

藤本 岳洋 准教授(神戸大学 大学院海事科学研究科)

“破壊現象などの超高速度撮影について”

(2) 9 月 29 日

Prof. Doosam Song

(Dept. of Architectural Engineering, Sungkyunkwan University)

“CFD Application in Built Environment”

(3) 1 月 14 日

Prof. Young Jin kim

(School of Mechanical Engineering, Sungkyunkwan University)

“Assurance of Structure Integrity of Operating Nuclear Power Plants in Korea”

Prof. Moon Ki Kim

(School of Mechanical Engineering, Sungkyunkwan University)

“Elastic Network Models: From Protein Dynamics to Computational Mechanics”

2.5.4. CCMR－Sungkyunkwan University student workshop

1 月 14 日に計算力学研究センター1 階会議室において“CCMR – Sungkyunkwan University student workshop”を開催した。

2.5.5. 第 5 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： 2010 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 21 年度の成果発表を中心に講演を行う予定である。

2.6. 産学協同活動

2.6.1. (株)日立製作所機械研究所との連携

(株)日立製作所機械研究所とは、(1)メッシュ生成技術、(2)構造健全性設計技術に関して連携を行っている。近年、産業界では解析主導設計による製品開発のスピードアップと設計上流段階での品質作り込みが最重要課題として進められている。そのためのCAEシステム技術の開発をこれまで行い、実用性の検証を実施した。そこで、本年度は、テーマ(2)に関する、き裂進展解析を用いた Cu コアはんだボールの接続信頼性評価メッシュ生成技術を中心に研究を行った。

2.6.2. 独立行政法人 原子力安全基盤機構との連携

当センターで開発を行っているフリーメッシュ法(以下 FMM)と仮想き裂閉口積分法(以下 VCCM)を融合した構造健全性評価システム FMM-VCCM の信頼性の検証と実務への応用を目的として、独立行政法人原子力安全基盤機構(以下 JNES)への技術支援を行う。また、JNES、株式会社テクノスター、プロメテック・ソフトウェア株式会社と連携し世界最先端レベルの破壊力学ソフトウェアの構築も行っている。

2.6.3. 東京理科大との連携

東京理科大学と共同で配管内の腐食同定問題について研究している。東京理科大学ではおもに実験を、本センターではシミュレーション方法について研究を行っている。本年度は、逆問題の観測方程式のモデル化について検討することを目指した。中性環境における金属部材の腐食は、溶存酸素によるカソード反応が支配的であるので、溶存酸素の金属部材表面への拡散速度が、カソード反応の律速反応になっていると考えられる。そこで、金属部材近傍の流体の速度勾配および溶存酸素の濃度分布に着目して、流れのある配管内の腐食を精度良くシミュレーションできるか考察を行った。更に、今年度から、これらの解析をアダプティブに行うために、階層メッシュを用いた手法も開発された。

2.6.4. 本田技術研究所との連携

本田技術研究所から、「ヘッドライト損傷解析手法の確立」と「永久変形量予測技術の開発」を依頼されている。従来は、衝突解析ソルバーRADIOSS を用いることによって、これらの解析していた。しかし、より詳細で正確な解析を求めたいという要望から RADIOSS にプリポスト処理を加えることによって、これらの問題を解決する。「ヘッドライト損傷解析手法の確立」に対しては、アダプティブな亀裂進展解析の機能を、「永久変形量予測技術の開発」に対しては、アダプティブな永久解析の機能を加えることになる。これらの機能を加えることによって、超大型の並列計算機や専用のソルバーで長時間かかった解析を、これまでと同じ計算機環境で一晩あれば解析できるようになる。

2.6.5. インテグラル・テクノロジー株式会社との連携

本連携は、「オーサリング機能をもつCAEソフトウェアの販売・カスタマイズ事業」という

題目で、経済産業省近畿経済産業局の新連携支援事業の審査を受け通過した事業である。連携の仕組みは、インテグラル・テクノロジー株式会社をコア企業、エンジニアス・ジャパン株式会社を連携企業、東洋大学計算力学センターとアルテアエンジニアリング株式会社を外部支援団体としている。当センターは、有限要素法の計算精度を保持したままメッシュの数を減らす技術を提供する形で協力している。

2.7. 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，システムティックで迅速・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) 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．つまり，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．
 - (2) マルチスケール・マルチフィジクス解析を精度良く効率よく解くことの重要性．
- 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，次の 6 つのサブテーマにフォーカスし研究開発を実施している．

- (1) 3次元破壊力学解析の高度化に関する研究
- (2) 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
- (3) エルミート型3節点三角形要素へのX-FEMの適用
- (4) 階層的なデータ構造を持つメッシュを用いた高速なアダプティブ解析
- (5) 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
- (6) WebベースCAEシステムのインタラクティブ化とマルチフィジクス解析へ向けたフレームワーク開発

我々は，6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．順解析を正解に解くために，サブテーマ1, 2, 3, 4がある．サブテーマ1, 4は，順解析を大規模高速に解く手法の確立を目指す．マルチスケール・マルチフィジクス解析に関しては，サブテーマ5で対応している．そして，これらのテーマを将来まとめて，一般ユーザーへの利用を可能にするために，サブテーマ1, 6がある．以上のように，我々は，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. 3次元破壊力学解析の高度化に関する研究

(1) 目標・計画

目標は、i) 大規模構造物中に発生したき裂の評価をタイムリーに実施可能な技術と、ii) 大規模構造物中の複雑形状き裂の三次元進展現象を完全自動でシミュレーションする技術の確立である。そこで、その要素技術である四面体有限要素用の高精度破壊力学パラメータ計算手法(仮想き裂閉口積分法:VCCM)を用い、破壊力学解析システムの構築とき裂進展方向・速度の予測手法の確立を目的として研究を進めている。

平成 19 年度までは、VCCM を用いた応力拡大係数解析に関する研究を主に行ってきた。混合モードき裂や三次元的な曲面を持ったき裂の解析を可能とした。そこで、平成 20 年度からは解析自動化に向けたシステム化を行うこととした。システム化においては、破壊力学研究者が容易にカスタマイズでき、様々なトライアルを行うことが可能なことをその要件に掲げた。これによって、三次元構造物中のき裂解析の高速化と様々なき裂進展則に基づいた解析が可能になり、実験結果との比較によってき裂進展方向・速度の予測手法を確立することが可能になる。また、将来的には複数の研究者が協調して破壊力学解析システムを開発していくことが可能になり、非線形破壊力学解析への拡張も可能である。

平成 20 年度までで、解析自動化のためのソフトウェアプラットフォームを構築し、三次元き裂問題の、例えば、き裂の大きさや形状に関する自動パラメトリック解析やモード I き裂進展解析を実施することに成功した。平成 21 年度は、混合モード荷重下におけるき裂進展解析を実行するための有限要素法解析モデル生成プログラムと溶接残留応力を考慮できる解析コードを整備することとした。

今年度の成果を検証し、さらに非線形破壊力学問題への対応を目指す。

(2) 意義・国際社会との比較

原子力関連施設等での SCC や疲労き裂の進展予測評価に関しては、実用上、感度解析も含めて 1 ヶ月程度で終了することが要求される。現在の四面体有限要素を用いたき裂進展解析では解析モデル生成にマニュアル操作が多く、一解析ケースあたり 4-6 ヶ月程度を要する。要求をまったく満足できていない。現在までに複雑な三次元形状をもつ構造物に発生したき裂の解析を短時間に行うことや、また、その進展予測をするき裂進展解析はほぼ不可能であった。

本研究の成果によって、自動モデル生成技術の確立された四面体有限要素を使用し、き裂の形状や大きさに関するパラメトリック解析やき裂進展解析の完全自動化を実現し、原子力関連施設の SCC や疲労き裂問題の解析をタイムリーに実行可能とすることが可能になる。そのため、原子力関連機器の安全性評価の高度化に対して大きく寄与するものである。

(3) 研究内容

平成 19 年度までに、VCCM を用いた三次元き裂の応力拡大係数算出に係る研究はほぼ終了している。モード I 埋没き裂、表面き裂、さらに混合モード解析により、計算精度の検証を行い、良好な精度で解析可能なことがわかった。研究成果は数報の論文によって発表

してきた。

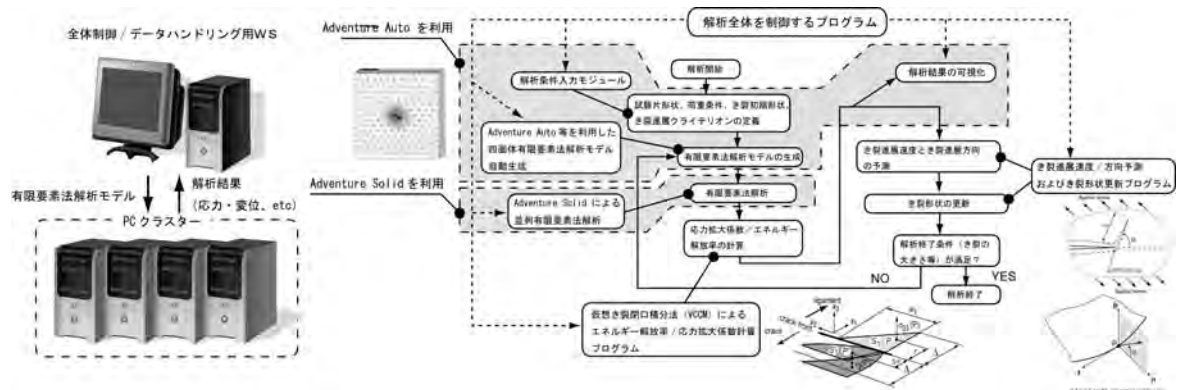


図 1 自動き裂パラメトリック／き裂進展解析システムの概要

平成 20 年度からは、図1に示すような、き裂・き裂進展解析自動化のためのソフトウェアプラットフォームの構築を進めている。その具体的内容は：

- Linux ワークステーション上で、「有限要素法モデル生成プログラム」、「VCCM インプットデータ自動生成プログラム」、「境界条件自動生成プログラム」、「有限要素法インプットデータ生成プログラム」、「有限要素法解析プログラム」、「VCCM による応力拡大係数解析プログラム」、「き裂形状のパラメトリック解析や進展解析におけるき裂形状の更新/定義プログラム」を自動で起動し、解析を実行するプログラムの構築。
- モデル規模が大規模となることを想定し、有限要素法解析には並列有限要素法プログラムである ADVENTURE システムを使用する。そのため、解析用ワークステーションクラスタへ有限要素法解析データを送信し、ADVENTURE システムによる解析を行う。
- 有限要素法解析データ自動生成プログラムは、河合浩志氏（東大）作成のプログラムを使用することを基本とする。
- 有限要素法解析データ生成には、テクノスター社製 TSV-PRE も使用する。
- VCCM インプットデータ生成プログラムでは、き裂メッシュデータから自動的に VCCM インプットデータの生成を可能とする。これによって、メッシュ生成プログラムはメッシュデータを生成するだけでなく、本システムがメッシュ生成プログラムを自由に選択できることになる。
- 解析結果のファイルを解析用ワークステーションから Linux ワークステーション上に送信し、VCCM による応力拡大係数解析プログラムで応力拡大係数を求める。
- き裂形状のパラメトリック解析や進展解析におけるき裂形状の更新/定義プログラムによって、き裂形状定義ファイルを生成し、それに基づき有限要素法解析データ自動生成プログラムでメッシュデータを生成する。

平成 21 年度は、混合モード荷重下におけるき裂進展解析を実行するための有限要素法解析モデル生成プログラムと溶接残留応力を考慮できる解析コード整備を行い、検証解析を行ってきた。その具体的な内容は：

- 任意方向にき裂が進展することを許容する有限要素法解析モデル生成プログラムの開発.

その具体的内訳は以下のとおり:

- 進展き裂を表現する節点群データ生成プログラム開発
- 進展き裂節点群と既存き裂節点群の合体プログラム開発
- ロバストなき裂表面抽出プログラム
- 曲面形状モデルへの対応(曲面部から発生したき裂モデル生成).

その具体的内容は以下のとおり:

- き裂モデル節点群の物体表面節点を物体表面への移動プログラム開発
- 内外判定を精密にする表面パッチ再構成プログラムの開発
- 溶接残留応力を考慮できる解析コード整備.

その具体的な内容は:

- 固有ひずみに対する等価節点力を計算するプログラム開発
- 固有ひずみによる残留応力場中の応力拡大係数を計算する VCCM プログラムの開発

(4) 平成 21年度進捗状況

上記のプログラム開発に対して, 進捗状況は以下の通りである.

任意方向にき裂が進展することを許容する有限要素法解析モデル生成プログラムの開発. 【達成度 90%】⇒ロバスト性に若干の問題があり, 問題によってはメッシュ静止が破綻する. 曲面形状モデルへの対応(曲面部から発生したき裂モデル生成). 【達成度 90%】⇒ロバスト性に若干の問題があり, 問題によってはメッシュ静止が破綻することがある.

溶接残留応力を考慮できる解析コード整備. 【達成度 70%】⇒コード開発はほぼ終了したが, き裂進展に関する例題解析を実施していない.

○解析例:ねじりと引張を受ける丸棒試験片表面き裂の進展解析

図 2 にねじりと引張を受ける丸棒試験片の図を示す. 丸棒表面におけるねじりによるせん断応力(τ)と引張による垂直応力(σ)の比を, 初期き裂が丸棒の軸に対して角度 $\pi/4$ 傾いているとき $\tau:\sigma = 0.9:0.1$, 垂直なときに $\tau:\sigma = 0.1:0.9$ に設定した. これにより, き裂進展に伴い, 進展方向にキンクが発生する. さらに, 図 2 中に典型的な有限要素法解析モデルを示す. 四面体 2 次要素を使用し, 初期き裂に対して 45~50 万要素, 65~70 万節点のモデルである. き裂の進展とともに, 総要素数と節点数が 70~80 万要素, 95~105 万節点程度まで増加した.

キンク角(φ)やねじれ角(ψ)の予測式は次のように与えられる(Richard ら(1)はキンク角(φ)やねじれ角(ψ)の予測式と等価応力拡大係数を与えている). 等価応力拡大係数を用いた Paris 則(2)によるき裂進展速度の予測式を使用する.

$$\varphi = - \left[140^\circ \left(\frac{|K_{II}|}{K_I + |K_{II}| + |K_{III}|} \right) - 70^\circ \left(\frac{|K_{II}|}{K_I + |K_{II}| + |K_{III}|} \right)^2 \right] \text{sgn}(K_{II}/K_I) \quad (1)$$

$$\psi = - \left[78^\circ \left(\frac{|K_{II}|}{K_I + |K_{II}| + |K_{III}|} \right) - 33^\circ \left(\frac{|K_{II}|}{K_I + |K_{II}| + |K_{III}|} \right)^2 \right] \text{sgn}(K_{II}/K_I) \quad (2)$$

さらに、等価応力拡大係数振幅 (ΔK_{eq}) を用いた Paris 則(2)によるき裂進展速度 (da/dN) を予測する.

$$\Delta K_{eq} = \frac{\Delta K_I}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta K_I^2 + 4(\alpha_1 \Delta K_{II})^2 + 4(\alpha_2 \Delta K_{III})^2} \quad (3)$$

$$\frac{da}{dN} = C(\Delta K_{eq})^n \quad (4)$$

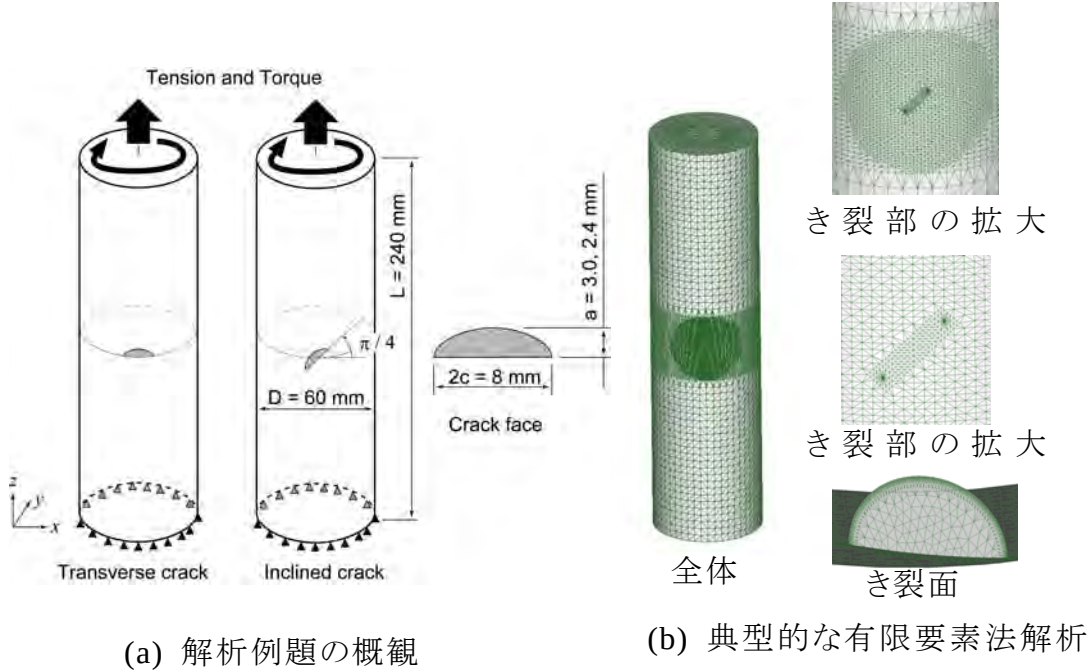


図 2 引張とねじりを受けるき裂付き丸棒の解析例題

なお、式(3)の定数は $\alpha_1 = 1.155$, $\alpha_2 = 1$ を用い、式(4)中の定数 C , n は材料定数である. 例えば、ステンレス鋼 (例えば、SUS316) に対して $C = 2.05 \times 10^{-12}$ と $n = 3.3$ が典型的な値として知られている. ただし、き裂のねじれ角を考慮すると、き裂前縁形状がファクトリールーフ状き裂 (例えば 3, 4) のように不連続になることを考慮しなければならない. 現在の三次元き裂解析の枠組みで表現することができない. そのため、本研究ではき裂のキンク角 (φ) だけを考慮する.

ここでは、解析結果として初期き裂の大きさが $c = 4.0 \text{ mm}$, $a = 3.0 \text{ mm}$ (アスペクト比 0.75) の場合についてき裂進展の様相を図 3 と 4 に示す. それらは、丸棒内部、丸棒の上部から下部に向かってき裂面の有限要素分割を観察した図である. 図からき裂が主に丸棒の引張によって進展する場合は、き裂の表面と最深部でほぼ同等のき裂進展量である. 一方、ねじり応力による場合は、物体表面における進展が、最深部に比較して速いという傾向が

見える。

○平成 21 年度進捗状況のまとめ

平成 21 年度の進捗状況として代表的なものは、三次元完全自動き裂進展解析の実現であった。また、溶接残留応力を含む問題にも対応できるようコード開発を行ったが、例題検証に至っていない。また、四面体有限要素用三次元 J 積分プログラムの開発にもほぼ成功している。

しかしながら、現在のところメッシュ生成プログラムのロバスト性にやや難があり、また、実験との比較もまだまだ不足気味である。今後はこれらの問題を解決するとともに、溶接残留応力下のき裂進展解析の実行と三次元 J 積分の精度検証などを行っていく予定である。

参考文献

Richard, H.A., Fulland, M., Buchholz, F.G. and Schöllmann, M., 3D Fracture Criteria for Structures with Cracks, Steel research, Vol. 74, pp. 491-497 (2003).

Paris, P. and Erdogan, F., A Critical Analysis of Crack Propagation Laws, J. Basic Engng, Vol. 85, pp. 528-534 (1963).

Yates, J.R. and Mohammed, R.A., The Determination of Fatigue Crack Propagation Rates under Mixed Mode (I+III) Loading, Int. J. of Fatigue, Vol. 18-3, pp. 197-203 (1996).

Pook, L.P., The Fatigue Crack Direction and Threshold Behavior of Mild Steel under Mixed Mode I and III Loading, Int. J. of Fatigue, Vol. 7-1, pp. 21-30 (1985).

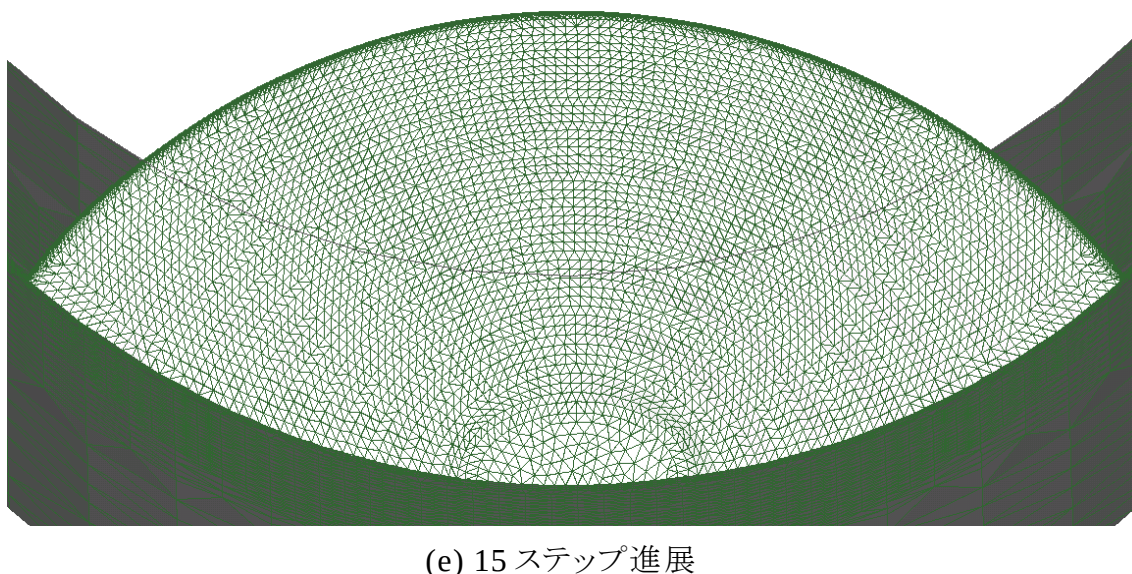
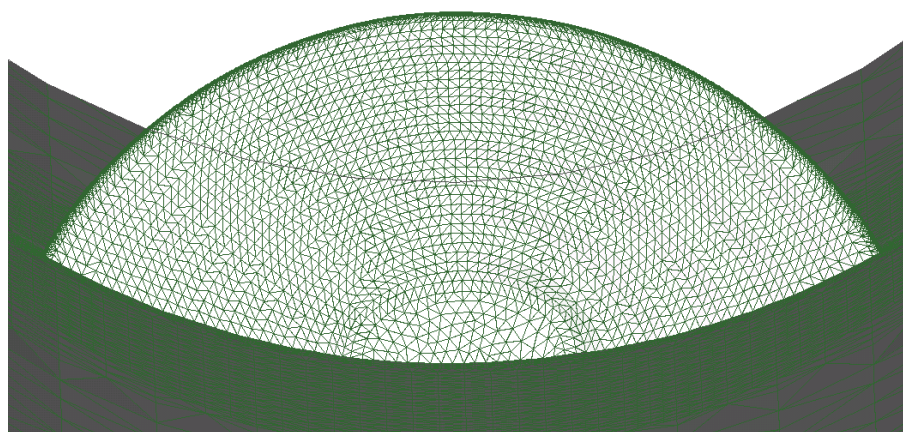
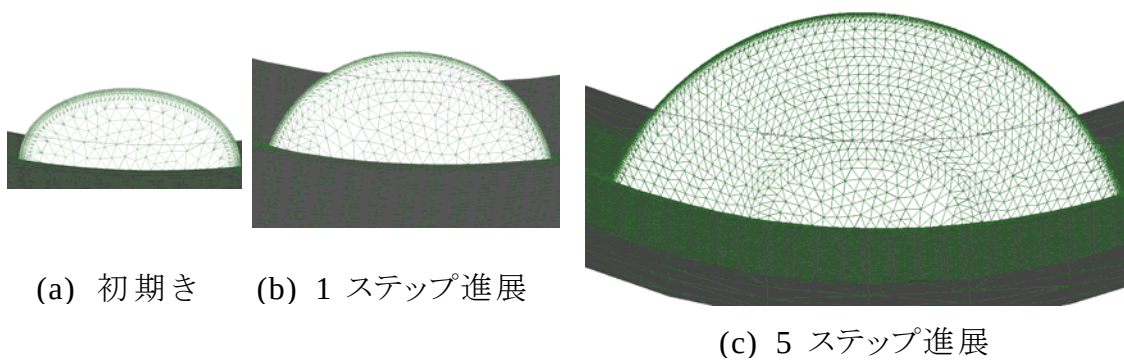
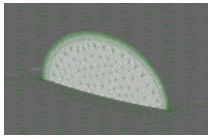
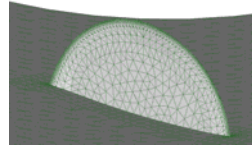


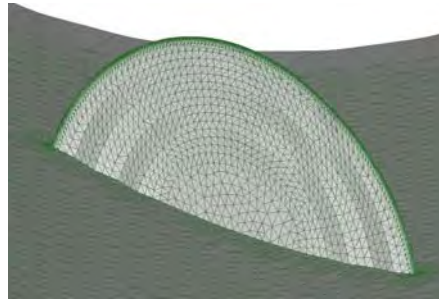
図 3 丸棒軸方向に垂直な初期き裂からのき裂進展の様相 ($\tau:\sigma = 0.1:0.9$)



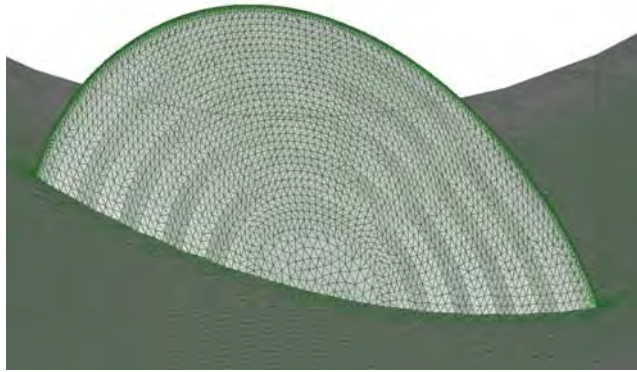
(a) 初期き裂



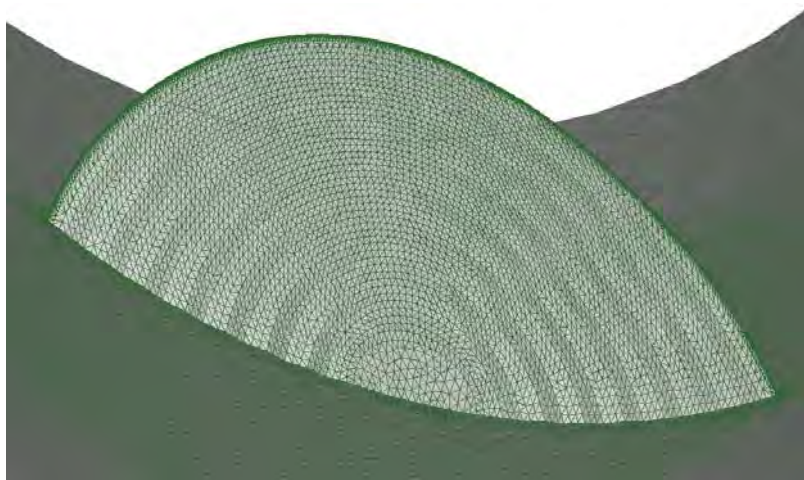
(b) 1 ステップ進展



(c) 5 ステップ進展



(d) 10 ステップ進展



(e) 15 ステップ進展

図 4 丸棒軸方向に角度 $\pi/4$ 傾いた初期き裂からのき裂進展の様相

3.1.3. 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

(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、実環境における混合モード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

混合モードき裂進展現象は未解明な部分が多く、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。特に、ひき裂き型とも呼ばれるモードⅢを含んだ疲労破壊問題は、構造物の健全性を検証する上で極めて重要であり、ロバストな 3 次元解析技術の確立が急務となっている。本研究は、リメッシングせずにき裂進展を実現する手法を取り入れることでロバストかつ実現象に合った解析技術进行研究するものである。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られる。

(3) 研究内容

(A) Smeared Crack model を用いた混合モードき裂進展解析

有限要素法によるき裂進展解析では、き裂面を境界として扱う Discrete crack model を採用する場合が多く、複雑なき裂形状に対してはき裂面の要素分割がボトルネックとなる。き裂進展の経路や破壊判定には、破壊力学パラメータが導入され、き裂部位の形状や応力状態を単純化する方法論が採用されている。昨年度まで、これらの手法に関する調査研究を実施してきたが、Discrete crack model をベースとした解析法では、極めて複雑な混合モードき裂(例えば、ファクトリーループ状の破断面が形成される繰返し振りによる疲労き裂など)を精度よく予測することは極めて難しく、現状とは異なる視点にて議論する必要性が確認された。そこで、今年度は、主にファクトリーループ状の破断面を数値シミュレーションにて再現することを指向し、初期き裂形状を仮定せずに任意のき裂進展を表現することができる Smeared crack model を金属のき裂進展問題に適用することを試みた。

Smeared crack model は、クラックが生じた要素の剛性を修正することによりクラックの直交異方性を表現するという特徴があり、主に岩やコンクリートの破壊解析に用いられている手法である。本モデルでは、クラックを材料特性の変化としてモデル化するために、解析領域のリメッシング等は必要なく、クラックを有する部材においても連続体として扱われる。すなわち、要素に関しては、クラック発生前は等方性材料、クラック発生後は直交異方性材料としてモデル化される(図 1 を参照)。したがって、き裂の方向を仮定するのみで解析を進めてゆくことが可能である。

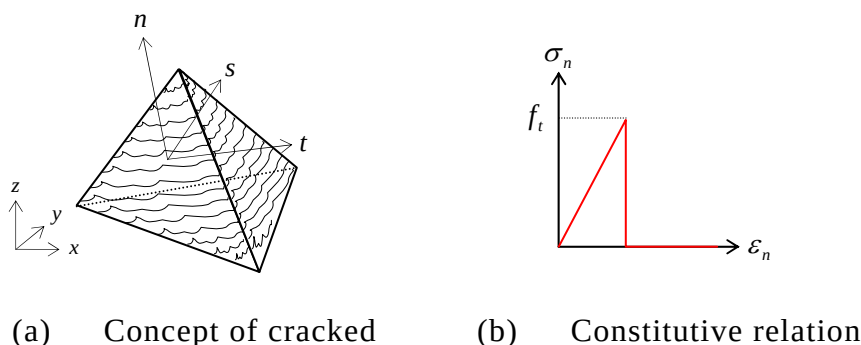


図 1 Smeared crack model と応力－ひずみ関係

さて、Smeared crack model は、クラック発生後のせん断特性の扱い方により、固定クラックモデルと回転クラックモデルに分類される。前者は、クラックの発生後、そのクラックの方向を固定し、主ひずみ方向が変化した場合に破断面でのせん断伝達を考えるものである。これに対して後者は、クラック発生後にクラック方向を最大主ひずみ方向に一致させるように回転させ、常に主軸が一致するようにしたモデルである。このモデルは、クラックが回転するという現象的には理解しがたい点があるものの、解析においては未だよく分かっていないせん断特性に関する材料パラメータを必要としないのが特徴である。本研究では、破断面のせん断破壊モデルの導入が可能な固定クラックモデルを採用することにした。また、固定クラックモデルにおいては、クラック要素のせん断特性を表わすパラメータの設定が必要であるが、このパラメータの決定法については研究途上段階にあり、未だ一般的な決定方法はない。そこで、本研究では、クラックが発生した後のせん断力はほぼ無視できる、と仮定して解析を行うことにした。

(B) 数値解析例～ファクトリールーフ状き裂形成条件の数値解析的検討～

本研究では、前述した Smeared crack model を用いて、図 2 に示す切欠きを有する棒が繰り返し振り外力を受けた場合のき裂進展解析を行った。ここで、切欠き幅とファクトリールーフ状のき裂形成との関係を抽出するために、切欠き幅の異なる 6 つのケースで検討することにした(図 2 の(a)～(f))。なお、ヤング率は 193GPa, ポアソン比は 0.31, 引張強度は 481MPa とした。また、繰り返し振り外力については、10 ステップ毎に正負逆の振りモーメントを載荷することでモデル化した。

図 3 から図 8 に切欠き幅の異なる model 1 から model 6 のクラック進展の様子を示す。図より、切欠き幅の違いによってクラックの形状が全く異なっていることがわかる。model 1, model 2 に関しては、ひとつのクロス状のクラックが切欠き底の一か所に集中して発生し、

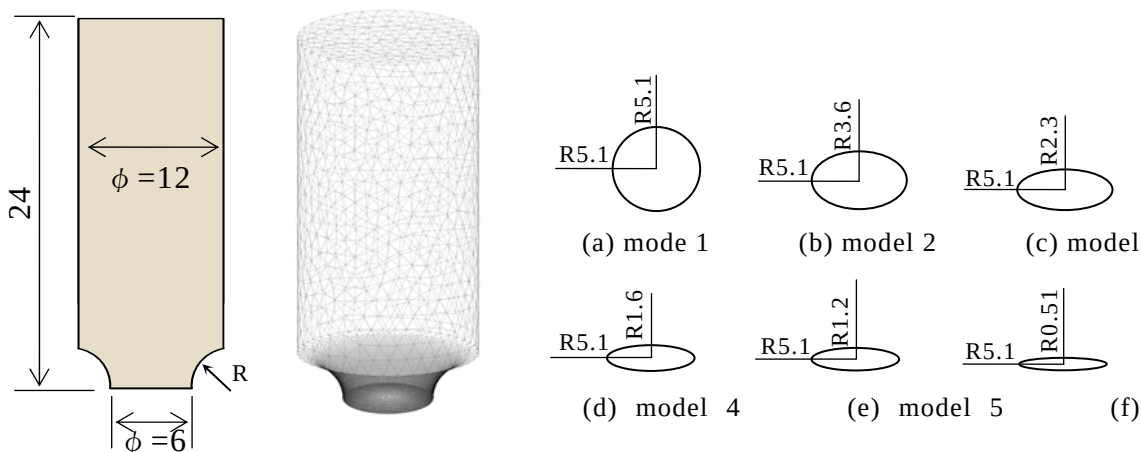


図 2 切欠きを有する棒の解析モデル:異なる切欠き幅を有する棒モデル

それが進展している. 一方, model 2 および model 3 に関しては, 切欠き底に微細なクラックが生じた後, ひとつのクロス状のクラックが集中的に進展している. model 5 に関しては, model 2 および model 3 同様に, はじめ, 切欠き底に微細なクラックが生じる. その後は, 複数のクロス状のクラックがあらゆる箇所が発生し, それらが連結してゆく様子がみられた. また, model 6 に関しては, 切欠き底に微細なクラックが生じたのみであり, クロス状のクラックは見られなかった. ただし, model 6 に関してはメッシュサイズの影響が懸念されるため, 今後更に大規模な計算を実行し, 詳細な検討を行う必要があると考えられる.

つぎに, 図 9 に振り角と繰返し载荷回数との関係を示す. 図より, 曲線のプロファイルは, 明らかに model 1-model 2-model 3 のグループと model 4 のグループ, model 5-model 6 のグループの 3 つに分けることができる. 第一のグループ(model 1-model 2-model 3 のグループ)に関しては, 振り角が繰返し载荷回数の増加とともに減少している. 一方, 第三のグループ(model 5-model 6 のグループ)の振り角は, 繰返し载荷回数が増すにつれて増加する傾向にある. また, model 4 は第一グループと第二グループの遷移領域と思われるプロファイルを呈している.

以上の考察により, 切欠きを有する棒が繰返し振り外力を受けた場合に生じるファクトリーループ状のき裂パターンは, model 4 のような遷移領域において発生することが示唆された. しかしながら, 以上の考察は, 切欠き幅の大きさのみをパラメータとした結果であり, 未だ確定的なものではない. 今後, 実験値との比較解析等, 更に踏み込んだ議論が必要である. これについては今後の課題としたい.

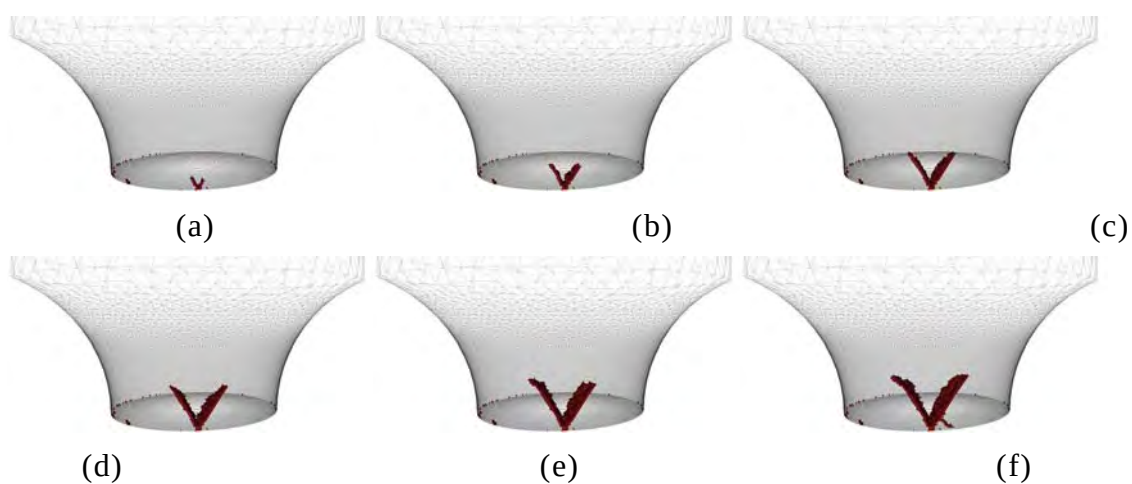


図 3 き裂進展の様子(model 1 の場合 : R5.1)

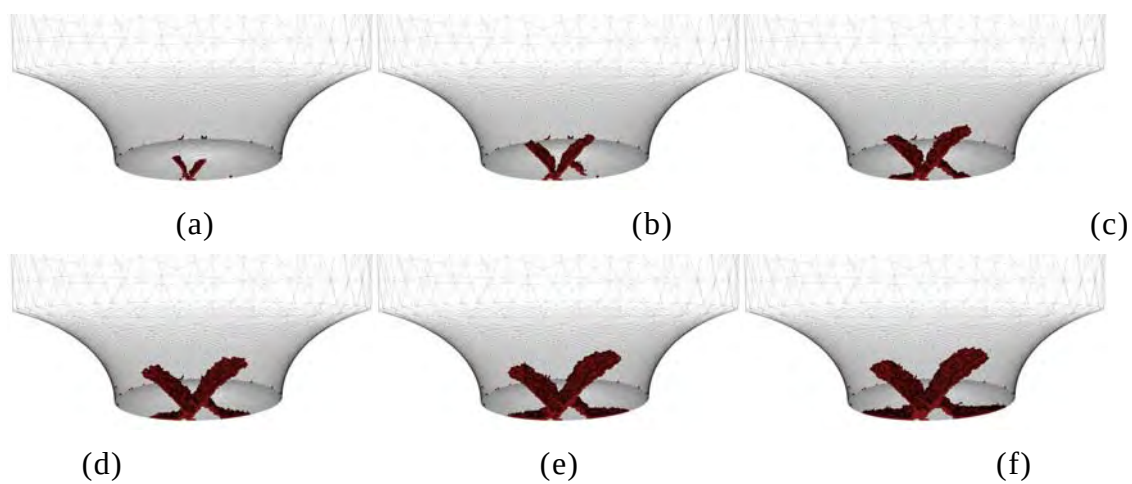


図 4 き裂進展の様子(model 2 の場合 : R3.6)

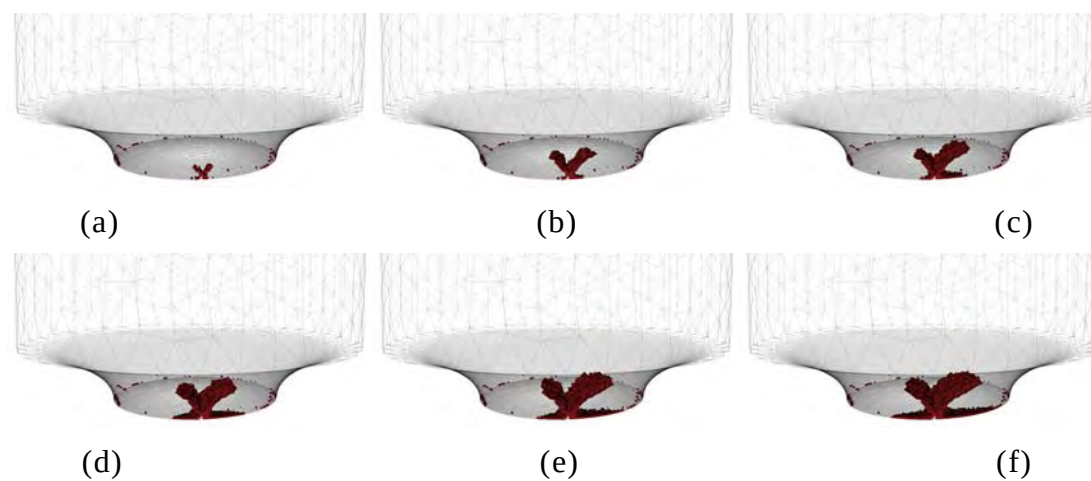


図 5 き裂進展の様子(model 3 の場合 : R2.3)

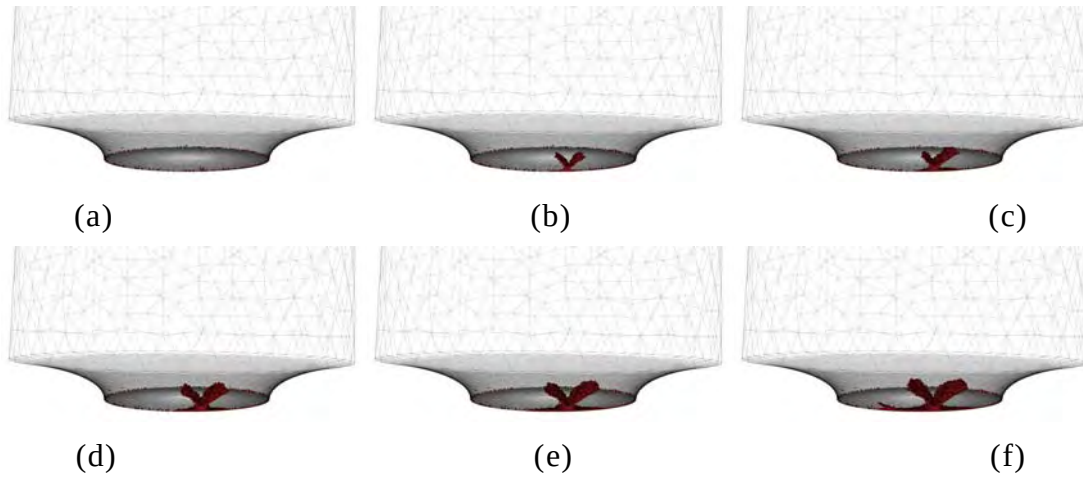


図 6 き裂進展の様子(model 4 の場合 : R1.6)

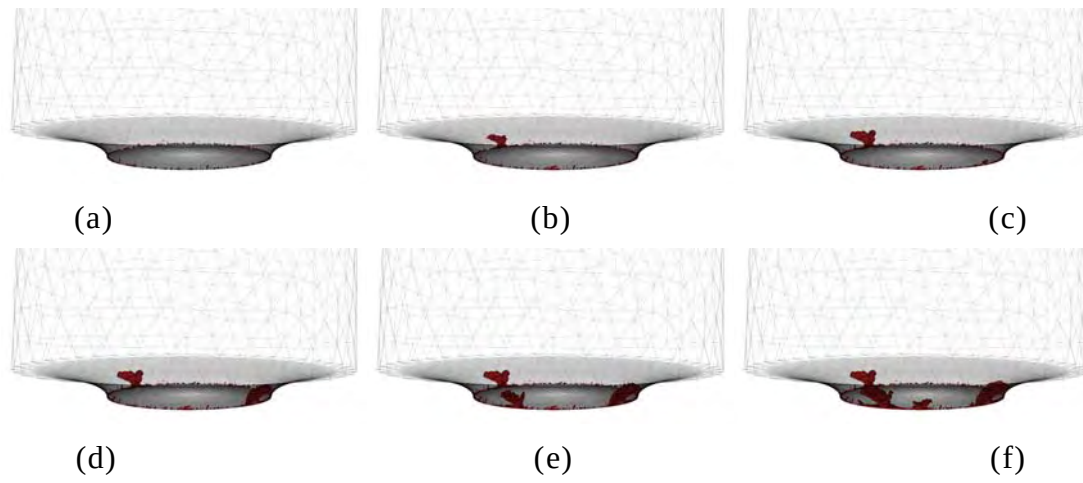


図 7 き裂進展の様子(model 5 の場合 : R1.2)

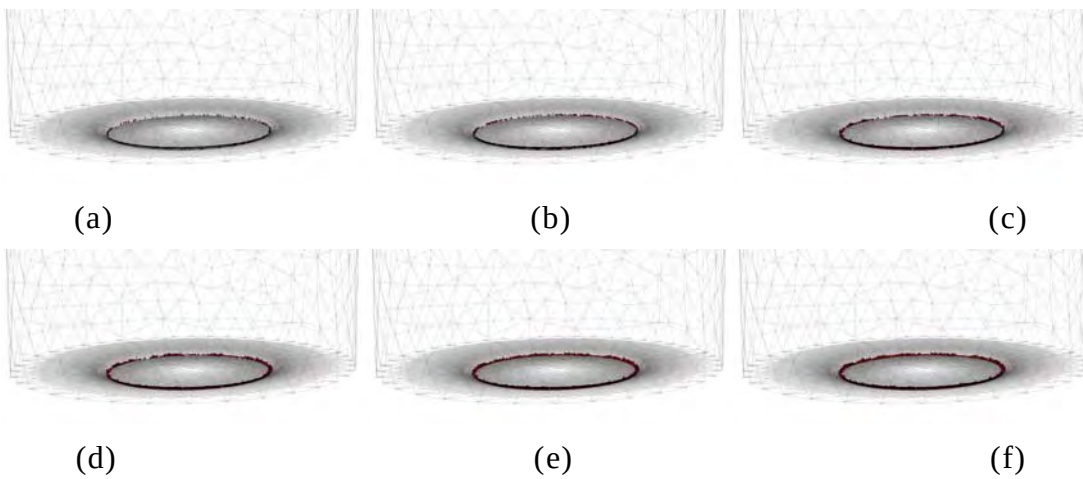


図 8 き裂進展の様子(model 6 の場合 : R0.51)

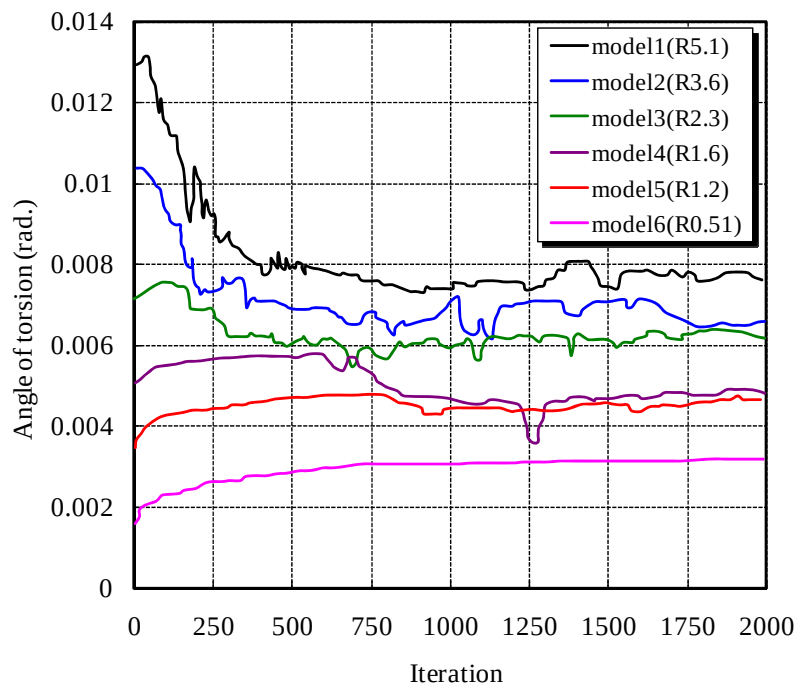


図 9 捩り角と繰返し载荷回数の関係

(4) 平成 21 年度進捗状況

今年度は、Smeared crack model を用いて、3 次元混合モードき裂進展解析を実施した。特に、ファクトリーループ状のき裂が形成される主な要因を探るために、切欠き幅を変数としたパラメータ解析を実施した。その結果、捩り外力を受ける部材におけるファクトリーループ状のき裂断面形成は、切欠き幅に大きく依存していることが考えられた。また、捩り角と繰返し载荷回数のプロファイルが、切欠き幅の違いによって明らかに異なることが分かった。この結果は、切欠き幅の大きさのみをパラメータとしたものであり、未だ確定的なものではない。今後、実験値との比較解析等、更に踏み込んだ議論が必要である。これについては今後の課題としたい。

3.1.4. エルミート型 3 節点三角形要素への X-FEM の適用

(1) 目標・計画

計算モデルの大規模化に伴い、自動要素分割が一般的になってきているが、Delauney 分割など数学的な単純さから、三角形要素や四面体要素が用いられることが多い。特に、粒子法的一种と考えられるフリーメッシュ法[1]では、自動分割を行いながら解析を進めるため、他の要素を選択することが出来ない。しかしながら、これらの要素は四辺形要素や六面体要素と比較して、精度が不十分であることが指摘され、高精度化の研究が続けられてきた。特に、フリーメッシュ法に適用することを目指した研究として、中間節点を自動生成する方法[2]、四辺形要素に変換する方法[3]、混合法を用いる方法[4]が提案されているが、これらは、データの取り扱いが複雑であったり、収束のための繰り返しを要したりするため、通常のフリーメッシュ法プログラムに組み込むには工夫をする必要があった。

近年、松原ら[5]は、節点に回転自由度を付与する方法を用いることにより、中間節点を有する要素から隅節点のみを有する要素を導き、フリーメッシュ法に応用した。しかし、導出方法が特殊であり、例えば、伝熱問題などへの適用が困難であるなどの欠点がある。一方、Hermite 型の内挿関数は一次元で定義され、これを組み合わせることにより、二次元、三次元に拡張するため、四辺形／六面体要素で使用されているが、三角形／四面体要素への適用は見当たらない。同様の形状関数を用いた要素は、板曲げ要素で実現されている[6]が、この要素では、一定ひずみを表すことができないため、ソリッド問題の高精度化に用いることはできない。

節点自由度として、変数の値だけでなくその微係数も採用する Hermite 型の定式化を行った三角形要素では、内挿関数の完全性から三角形内部に変数の値を自由度とする節点を持つ要素が存在するが、これも他の高精度要素と同じく、隅節点以外に節点を有するため、Delauney 分割を行った後、すぐに適用することはできない。ここで、使用する隅節点のみを有する Hermite 型要素は完全多項式の内挿関数ではないが、8 節点アイソパラメトリック要素と同様に適切な内挿を行える可能性を持つ。

この要素の欠点として、微係数の突然の変化に対応できないことがあげられる。例えば、異種材料をつなぎ合わせたような構造などには特殊な考慮が必要となる。同じようにき裂問題では、応力やひずみがき裂先端で急激に変化するため、き裂先端に必ず節点が存在する通常の有限要素によるモデル化では、適切な内挿近似を行うことができない。そこで、X-FEM を利用することが考えられる。本研究の目標はフリーメッシュ法などにも容易に適用でき、自動要素分割やアダプティブ法への親和性が高い隅節点のみを有する三角形要素、四面体要素へ、高精度き裂解析が可能となる X-FEM を適用することである。

既に、三角形高精度要素の定式化および通常の熱伝導問題、弾性問題への適用性は確かめられている。ここでは、X-FEM の定式化を示し、今後き裂問題への適用を行っていく予定である。

(2) 意義・国際社会との比較

本研究の意義は、使用しやすい高精度要素を提供し、要素の選択肢を広げることにある。国際的にも、特殊な条件に限定されない汎用的な要素の提案は行われておらず、独創的である。

(3) 研究内容

(3-1) Hermite 補間関数

まず、基本となる一次元内挿近似から説明する。一次元 2 節点の Hermite 補間関数は、 $-1 < \xi < 1$ の範囲で、2 点 1 次の Hermite 多項式を用いて次式のように表される。

$$\begin{aligned} H_{01}^1(\xi) &= (2 + \xi)(1 - \xi)^2 / 4 \\ H_{02}^1(\xi) &= (2 - \xi)(1 + \xi)^2 / 4 \\ H_{11}^1(\xi) &= (1 + \xi)(1 - \xi)^2 / 4 \\ H_{12}^1(\xi) &= -(1 - \xi)(1 + \xi)^2 / 4 \end{aligned} \quad (1)$$

上式のように、 ξ の 3 次式で表され、それぞれの節点自由度は、 u 、 du/dx の 2 つである。これを 2 方向／3 方向に組み合わせることにより、容易に 2 次元四辺形要素／3 次元六面体要素を構築することが出来る。

(3-2) 高精度 3 節点三角形要素

1 次関数で近似した 2 次元三角形要素の内挿関数は、面積座標と一致する。

$$\begin{aligned} N_i^0(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) &= \zeta_i \\ N_j^0(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) &= \zeta_j \\ N_k^0(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) &= \zeta_k \end{aligned} \quad (2)$$

ただし、 i, j, k は反時計回りに付けられた 3 つの節点のインデックス、 $\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k$ は面積座標であり、 $\zeta_i + \zeta_j + \zeta_k = 1$ である。

変数の微分に対応した内挿関数を構築するために、要素内にそれぞれの節点に対応した、斜交局所座標系を以下のように定義する。すなわち、節点 i に対応した座標系を (ξ_i, η_i) とする。ただし、 ξ_i は節点 i から節点 j に向かう座標であり、 η_i は節点 i から節点 k に向かう座標である。このとき、面積座標とは、 $\xi_i = \zeta_j, \eta_i = \zeta_k$ の関係がある。1 次元の

Hermite 内挿関数に準じて辺 $i-j$ 上で(1)式の H_{11}^1 に相当する関数を, 以下のように表す.

$$N_i(\xi_i, \eta_i) = \xi_i(1 - \xi_i - \eta_i)^2 \quad (3)$$

上式の関数の他の辺上での振る舞いを見ると, 辺 $i-k$ 上では, $\xi_i = \zeta_j$ であるので 0 になり, 辺 $j-k$ 上では, $1 - \xi_i - \eta_i = \zeta_i$ であるので, これも 0 となる. また, 辺 $i-j$ 上では, $\eta_i = \zeta_k = 0$ であるので, 定義域を $0 < \xi_i < 1$ に変更した(1)式の H_{11}^1 と一致する. すなわち, ξ_i 方向の傾きのみが 1 となり, それ以外の節点値および微分値が 0 となる関数となる. 面積座標を用いて表せば次式となる.

$$M_{i\xi}(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) = \zeta_j \zeta_i^2 \quad (4)$$

同様に, η_i 方向微分に対する内挿関数は次式となる.

$$M_{i\eta}(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) = \zeta_k \zeta_i^2 \quad (5)$$

さらに, 節点 j, k に対してもそれぞれの節点に対する局所座標を用いた微分に関する内挿関数を定義することが出来る.

節点値それ自身に対する内挿関数は, 線形の内挿関数から上記で求めた微分に関する内挿関数をその傾きに依じて差し引くことにより, 求めることが出来る. これは, 中間節点を有する高次要素での内挿関数の導出と同様の手法である. 最終的に, すべての内挿関数は以下のように求められる. ただし, 微分はそれぞれの対応する節点における局所座標の方向であり, 面積座標の関数として表している.

$$\begin{aligned} N_i(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) &= \zeta_i^2(3 - 2\zeta_i) + 2\zeta_i\zeta_j\zeta_k \\ M_{i\xi}(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) &= \zeta_i^2\zeta_j + \zeta_i\zeta_j\zeta_k/2 \\ M_{i\eta}(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) &= \zeta_i^2\zeta_k + \zeta_i\zeta_j\zeta_k/2 \\ N_j(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) &= \zeta_j^2(3 - 2\zeta_j) + 2\zeta_i\zeta_j\zeta_k \\ M_{j\xi}(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) &= \zeta_j^2\zeta_k + \zeta_i\zeta_j\zeta_k/2 \\ M_{j\eta}(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) &= \zeta_j^2\zeta_i + \zeta_i\zeta_j\zeta_k/2 \end{aligned} \quad (6)$$

$$N_k(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) = \zeta_k^2(3 - 2\zeta_k) + 2\zeta_i\zeta_j\zeta_k$$

$$M_{k\xi}(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) = \zeta_k^2\zeta_i + \zeta_i\zeta_j\zeta_k/2$$

$$M_{k\eta}(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) = \zeta_k^2\zeta_j + \zeta_i\zeta_j\zeta_k/2$$

ただし, $\zeta_i + \zeta_j + \zeta_k = 1$ である. なお, 各関数中の $\zeta_i\zeta_j\zeta_k$ の項は, 線形近似ができるために付け加えられたバブル関数(すべての節点上で形状関数の値が 0 となる関数)である. 上式を $x-y$ 座標に変換することにより, 通常の内挿関数を得ることが出来る. これらの内挿関数は, Zienkiewicz[6]が以前求めた3 三角形板曲げ要素の内挿関数と一致する. 例として, 節点 i に対する内挿関数を Fig.1 に示す.

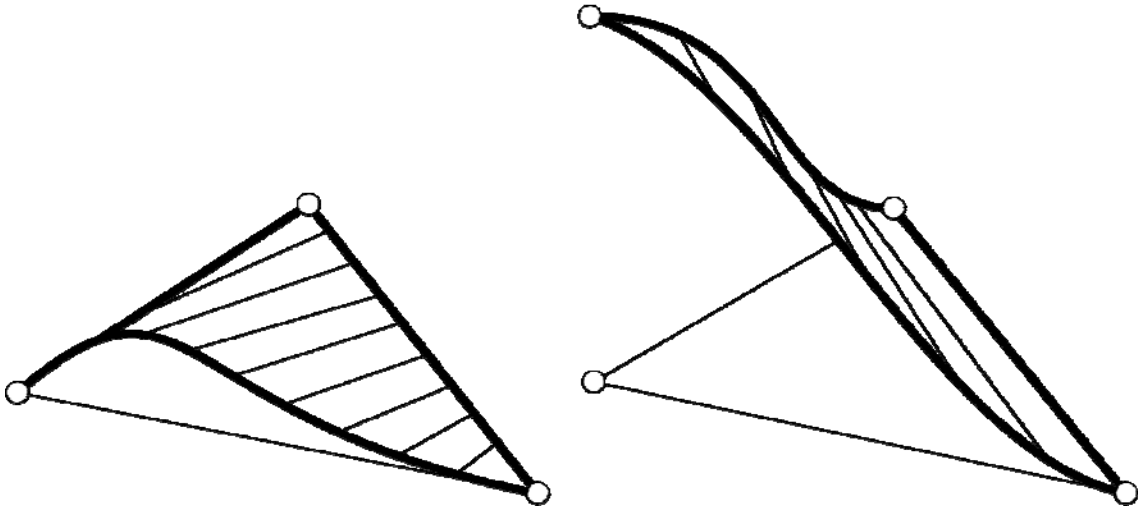


Fig.1 Shape functions of Hermitian type three-node element

内挿関数の微分も, 通常の局所座標を用いた要素と同様に表すことが出来る. その後の処理は, 通常 of 要素と同様である. ただし, $x-y$ 座標については, 低次の内挿 (sub-parametric 内挿)を行うことにより, 要素内積分を数値積分によらず, 次の公式を用いて正確に評価することが出来る.

$$\iint_{\Delta} \xi^l \eta^m \zeta^n dxdy = \frac{2\Delta l!m!n!}{(l+m+n+2)!} \quad (7)$$

ただし, Δ は三角形要素の面積である.

(3-3) Poisson 方程式への適用

前節に示した要素を Poisson 方程式に適用し, その精度を調べた. 問題は, 次式で定義される.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + 1 = 0, \quad (0 < x < 0.5, 0 < y < 0.5) \quad (8)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x} = 0, & \text{at } x = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial y} = 0, & \text{at } y = 0 \\ u = 0, & \text{at } x = 0.5 \text{ or } y = 0.5 \end{cases}$$

原点における値を他の手法および解析解と比較すると、Table 1 のようになる。表中、DOF は境界条件を除いた全自由度を表す。同程度の自由度を持つ低次の三角形要素と比べ、本要素が高精度であることが分かる。

Table 1 Results for Poisson equation: value at the origin

Model	Nodes	NDF	Value	Error(%)
Present-1	4	5	0.0759	3
Present-2	9	16	0.07455	1.2
Triangle-1	9	4	0.07813	6
Triangle-2	36	25	0.07485	1.6
FDM	9	4	0.07031	-7.7
Exact	-	-	0.07367	-

(3-5) 弾性問題：片持ちはり

次に、固体問題への適用例として片持ちはりの解析例を示す。2次元固体問題では、 x および y 方向の変位とそれぞれの変位の x および y 方向微分が自由度となるため、1節点あたりの自由度数は6となる。Sekiguchi ら[7]は x および y 方向変位に加え、 x - y 面内の回転自由度を持つ要素について、片持ちはりの精度について比較を行っている。そこで解析された問題を Fig.2 に示す。(a)は三角形要素を、(b)は四辺形要素を用いており、それぞれ等分割と不等分割メッシュを比較している。さらに、誤差の大きくなる(c)ユニオンジャック型の要素分割についても検討を加えている。

Table 2 に Sekiguchi らの比較結果に前節で示した Hermite 型三角形要素の結果を示す。表中の値は Fig.2 に示す荷重点 A の変位であり、Timoshenko 理論の結果で正規化している。Present の1節点あたりの自由度は6であり、それ以外の要素では回転自由度を持つため、3となる。表より、三角形要素では、回転自由度を加えた解析を行っても精

度低下はさけられず、四辺形要素に比べて精度が悪くなっている。しかし、ここで示した Hermite 型要素では、ほぼ四辺形要素と同等の精度が出ている。これは、等分割でも不等分割でも同様である。Hermite 型要素では、他の要素に比べ不等分割のときの性能も高いことが分かる。また、Sekiguchi らの要素は比較的高精度で解が得られているが、ユニオンジャック型の分割では、著しく精度が落ちていることがわかる。この場合でも Hermite 型要素は良い結果を与えている。

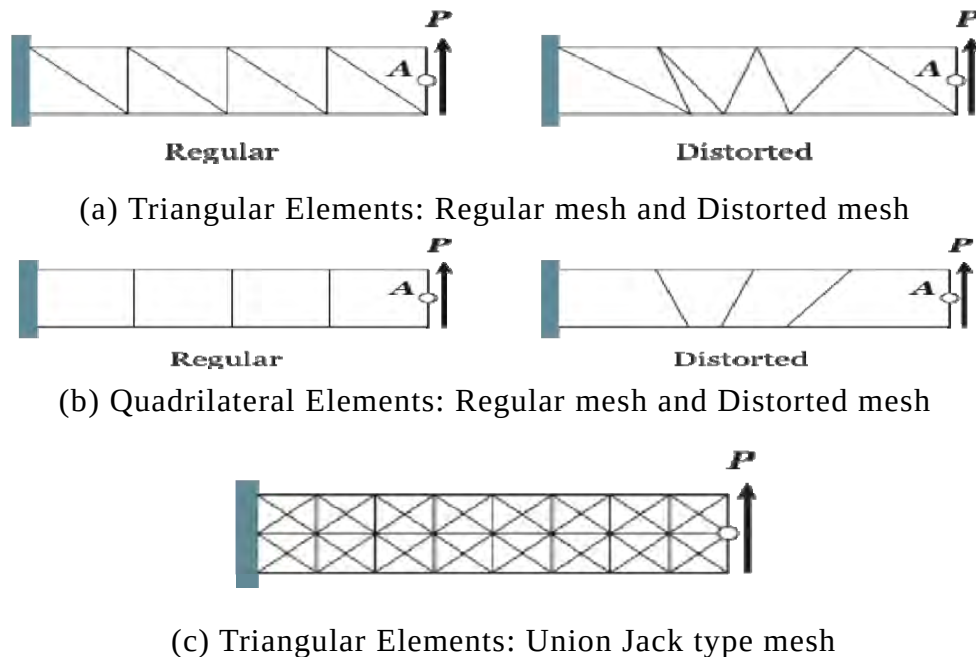


Fig. 2 Cantilever beam with various mesh patterns

Table 2 Results for Cantilever beam: Displacement at the point A

(Normalized by Timoshenko beam theory)

		Element	Regular	Distorted
(a)	Present	Tri	0.9869	0.9830
	Sekiguchi	Tri	0.7545	0.6991
	Allman	Tri	0.6991	0.6636
(b)	Sekiguchi	Quad	0.9188	0.9191
	Mixed	Quad	0.9776	0.9533
	Allman	Quad	0.8777	0.9034
	MacNeal	Quad	0.9338	0.9324
(c)	Present	Tri	0.9902	-
	Sekiguchi	Tri	0.4695	-

(4) 平成 21 年度進捗状況

(4-1) X-FEM 定式化(き裂問題)

X-FEM の主たる適用対象として、き裂問題がある。き裂周りの節点を Fig. 3 に示すように 3 種類に分けて解析を行う。C はき裂先端に隣接する節点であり、J はき裂面に隣接する節点である。

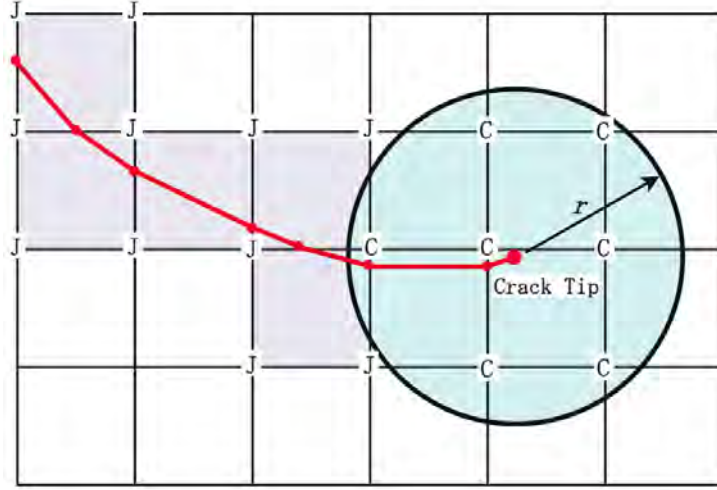


Fig. 3 Node classification around a crack

このとき、変位は次式のように近似される。

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^m \phi_I(\mathbf{x}) \mathbf{u}_I + \sum_{I \in C} \phi_I(\mathbf{x}) \left\{ \sum_{k=1}^4 \gamma_k(\mathbf{x}) \mathbf{a}_I^k \right\} + \sum_{I \in J} \phi_I(\mathbf{x}) H(\mathbf{x}) \mathbf{b}_I \quad (9)$$

ここで、 $\phi_I(\mathbf{x})$ は通常形状関数であり、 $H(\mathbf{x})$ はき裂面での不連続性を表すためのエンリッチ関数、 $\gamma_k(\mathbf{x})$ はき裂先端での特異性を表すためのエンリッチ関数であり、それぞれ次のように表される。ただし、 Ω_+ および Ω_- はき裂の上下に属する領域を表す。

$$\gamma_1 = \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2}, \gamma_2 = \sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2}, \gamma_3 = \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2} \sin \theta, \gamma_4 = \sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2} \sin \theta \quad (10)$$

$$H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & (\mathbf{x} \text{ in } \Omega_+) \\ -1 & (\mathbf{x} \text{ in } \Omega_-) \end{cases} \quad (11)$$

これに前項で定義した形状関数を用いれば次のようになる。

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^m N_I(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_I + \sum_{I \in C} \left\{ \sum_{k=1}^4 \gamma_k(\mathbf{x}) N_I(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{a}_I^k \right\} + \sum_{I \in J} H(\mathbf{x}) N_I(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{b}_I \quad (12)$$

ただし、

$$\mathbf{N}_I(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} N_I & 0 & M_{Ix} & 0 & M_{Iy} & 0 \\ 0 & N_I & 0 & M_{Ix} & 0 & M_{Iy} \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$\mathbf{u}_I^T = (u_I \quad v_I \quad u_{xI} \quad v_{xI} \quad u_{yI} \quad v_{yI}) \quad (14)$$

$$\mathbf{a}_I^{kT} = (a_{uI}^k \quad a_{vI}^k \quad a_{u,xI}^k \quad a_{v,xI}^k \quad a_{u,yI}^k \quad a_{v,yI}^k) \quad (15)$$

$$\mathbf{b}_I^T = (b_{uI} \quad b_{vI} \quad b_{u,xI} \quad b_{v,xI} \quad b_{u,yI} \quad b_{v,yI}) \quad (16)$$

1 節点あたりの自由度が次元数(この場合は 2)と異なることに注意が必要である. これらの内挿関数を用いて有限要素法の定式化を行えば, 自由表面問題と同じく Fig. 4 に示すような三角形要素の一部の積分を行うことで裂面に関わる要素内積分を行うことができる.

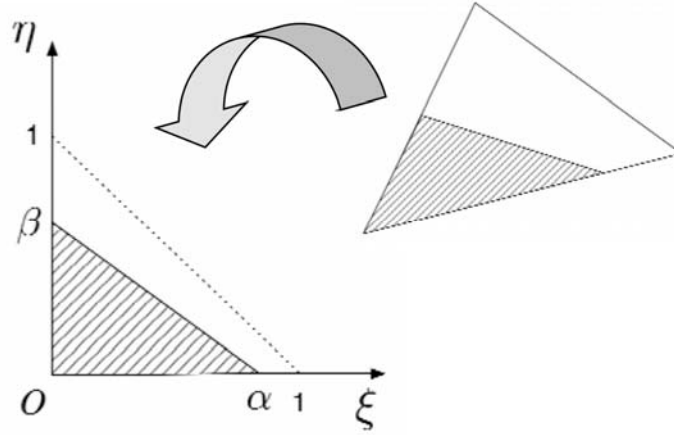


Fig. 4 Part of triangular element as integration area

このとき, Fig. 4 のようにパラメトリック座標に変換したときのサイズを表すパラメータを a と b とすると, (7)式に相当する積分公式は, 次式となる.

$$\iint_{\Delta} \xi^l \eta^m dx dy = \frac{2\Delta \alpha^{l+1} \beta^{m+1} l! m!}{(l+m+2)!} \quad (17)$$

また, き裂先端に隣接する節点(C 属性)に関する積分については, (17)式の公式を用いることができないため, 数値積分を行う. き裂先端を含む要素については, 被積分関数に特異項が含まれるため, 適宜積分領域を分割して精度を保つ工夫が必要である.

(4-2) 円孔付き平板の解析

試計算として, 1 次要素を用いた円孔付き平板の解析を行った. Fig. 5 のように矩形領

域を等間隔に分割した要素を用い, 円孔は XFEM により考慮した.

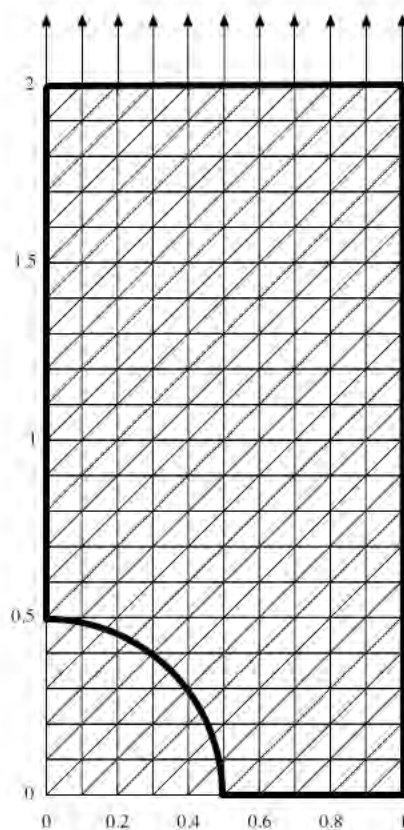


Fig. 5 XFEM model: plate with a circular hole

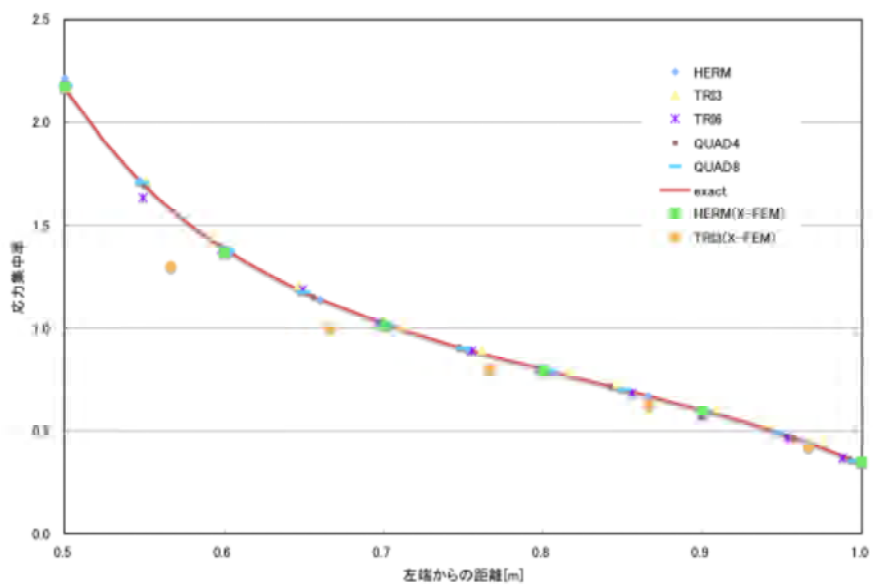


Fig. 6 Stress distribution along y axis

要素数 800, 節点数 441 を用いたときの最小断面積部の応力分布を Fig. 6 に示す. Hermite 型要素では, ほぼ厳密解に等しい値が得られている.

参考文献

- [1] G. Yagawa and T. Yamada, Free mesh method: A new meshless method, Computational Mechanics, Vol. 18, (1996), pp.383-386.
- [2] 矢川元基, 白崎実, フリーメッシュ法(一種のメッシュレス法)の流体解析への適用(高次フリーメッシュ法とその非線形問題への適用, 日本機械学会論文集(B編), 63巻, 614号, (1997), pp.3263-3268.
- [3] T. Furukawa, C. Yang, G. Yagawa and C. C. Wu, A memoryless free mesh method with quadrilateral elements, Proc. 75th JSME Spring Annual Meeting(I), Tokyo, (1998), pp.177-178.
- [4] 関東康祐, 混合法による高精度フリーメッシュ法, 日本計算工学会論文集, 論文番号 20000036, (2000)
- [5] 松原仁, 伊良波繁雄, 富山潤, 矢川元基, 回転自由度を有する3次元要素を用いたフリーメッシュ法, コンクリート工学年次論文集, 25巻, 2号, (2003), pp.67-72.
- [6] O. C. Zienkiewicz, Finite Element Method, (2001)
- [7] M. Sekiguchi, N. Kikuchi, Re-Examination of Membrane Elements with Drilling Freedom, WCCM V, Fifth World Congress on Computational Mechanics July 7-12, 2002, Vienna, Austria, Eds.: H.A. Mang, F.G. Rammerstorfer, J. Eberhardsteiner, (2002)

3.1.5. 階層的なデータ構造を持つメッシュを用いた高速なアダプティブ解析

(1) 目標・計画

コンピュータグラフィックを作成する時に、3 次元の対象物の詳細なメッシュを必要となることがしばしばある。しかし、そのようなデータを扱うのは、とても時間がかかる作業である。レンダリングを高速にする一つの方法には、level-of-detail (LOD) 近似を用いた近似メッシュによって複雑なメッシュを置き換える方法がある。LOD 近似とは、対象が視点から近い時には、詳細なメッシュを用い、対象が遠ざかるにつれて、徐々に粗い近似メッシュで置き換えていく手法である。LOD 近似は、メッシュ簡略化法を用いて自動的に前処理計算がされている。効率的な保存と転送を行うために、メッシュの圧縮法もまた開発されてきた。Hugues Hoppe が progressive mesh (PM) 表現を紹介して、この新しいメッシュフォーマットによって、この問題に統一的な解答がもたらされた。

本研究は、この手法を有限要素法のアダプティブ解析に応用するものである。アダプティブ法は、「事後誤差評価」と「誤差評価に基づく要素分割」が必要である。要素分割は、従来では事後誤差評価が済むたびに、ゼロから頂点密度を再計算して、それを元に全体を再メッシュ化していた。繰り返し計算を非常に沢山行うような解析では、このように全体を再メッシュ化するのは非効率である。このような理由から、毎回全体を再メッシュするのではなく、前回のメッシュを利用できる手法が望まれている。このような問題を解決するために、私達は、レンダリングで用いられてきた PM 表現を用いた高速なリメッシング法を提案する。

まず、前処理として、解析形状全体を最も細かい要素サイズを持つ全体メッシュを生成する。このメッシュをマザーメッシュと呼ぶ。このマザーメッシュに対して、プログレシブメッシュ化を行い、階層メッシュを生成する。このメッシュのデータ構造を基にして、FEM を解き事後誤差評価を行う。前処理には計算時間が多く掛かってしまうが、再メッシュの速さは非常に高速で殆ど時間を要しなくなる。このようにして、本手法は多くの場合有効であり、特に、アダプティブ解析の収束が遅い解析や、長時間に渡る時間発展モデルを解く場合に力を発揮する。

このように、解析時間を大幅に短縮されれば、初期値を気軽に変えて再計算を行うことが出来るようになる。また、アダプティブ解析が手軽に行えるようにもなるので、素人による解析でも解の信頼度が上がる。本研究によって、シミュレーションの大衆化を推し進める手助けになるとと思われる。

(2) 意義・国際社会との比較

大規模なデータを高速に扱うために、データを階層的なデータ構造にして扱うのは、どの分野でも行われてきた手法である。ただ、よく行われてきた手法は、二分木、四分木、八分木などのように、領域を比較的綺麗に分割して、データを分割統治してきた。本手法は、そのような綺麗に分割していくのではなく、データが最適と思われる所から整理していく手法である。更には、リアルタイムにデータの出し入れを可能にした手法である。

この手法は、1996 年にコンピュータグラフィックの分野の Hoppe H.が、「Progressive meshes」という名で開発された手法である。階層的なデータ構造を非構造メッシュに適用し、更には、リアルタイムで自由な解像度を抽出することに成功した。本手法の発表後、大規模なリアルタイムレンダリングの研究が大幅に進み、コンピュータグラフィックで最も有名な手法の一つとなった。

我々の提案する本手法は、これまでリアルタイムレンダリングに用いられてきた手法を、アダプティブ解析に応用したものである。アダプティブ解析の問題点であった、計算時間の大幅な短縮に、アルゴリズムの面から変える手法である。

(3) 研究内容

本節では、階層メッシュを用いたアダプティブ解析の今年度の成果を紹介する。まずは、アダプティブ解析の概要をフローチャートに示し、次に、階層メッシュの生成法を紹介する。計算結果の紹介では、3次元き裂進展解析と3次元非圧縮流を例にしている。

1. Adaptive analysis

図 1(a)は、アダプティブ解析の流れである。事後誤差の値が与えられた最大許容誤差よりも大きければ、その値に基づいてリメッシングを行い、そうでなければ解析は終了となる。図 1(b)にあるように、我々の手法は、階層メッシュを生成するという前処理がある。この階層メッシュを用いることによって、リメッシングにかかる時間が大幅に短縮される。

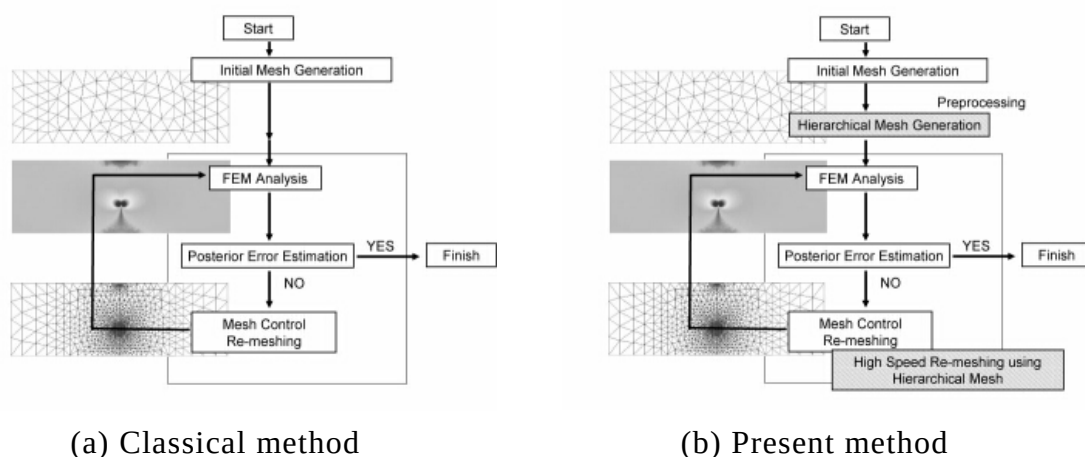


図 1 Flowchart of adaptive analysis.

2. Hierarchical mesh Generation

階層メッシュを生成するために、図 2 のような、edge collapse と vertex split の二つの変換が用いられる。edge collapse は一つの辺を潰して新しい頂点を生成する変換である。反対に、vertex split は、一つの頂点を引き裂いて前の辺に戻す変換である。図 2(a)は三角形メッシュに対する変換である、図 2(b)は四面体メッシュに対する変換である。

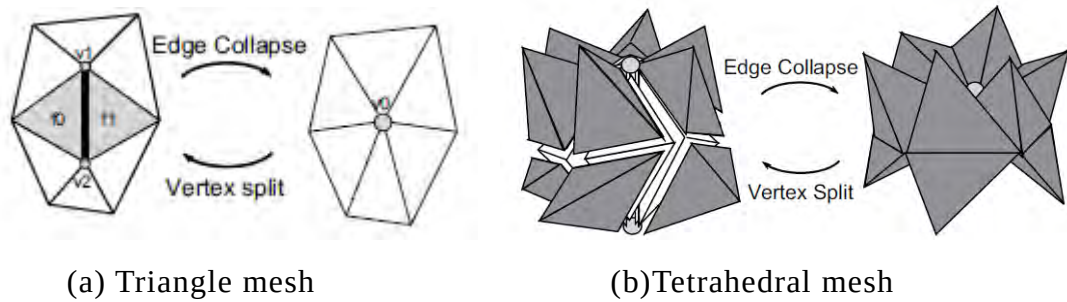


図 2 Edge collapses and vertex split.

edge collapse と vertex split を用いて、次のような手順で、階層メッシュを生成する。図 3 を用いながら説明する。

Step 1. 全ての辺の長さを計りヒープの中に入れソートする。

Step 2. ヒープから最も短い辺を取り出し、その辺の両端点を融合して 1 つの親頂点へと変換し、その両端点をヒープから取り除く。

Step 3. 新しく生成された親頂点につながる辺を全て再計算する。

Step 4. 頂点の数が 1 個になるまで、Step2 と Step3 を繰り返す。

各図の右側にある樹形図は、階層メッシュのデータ構造を示すものである。

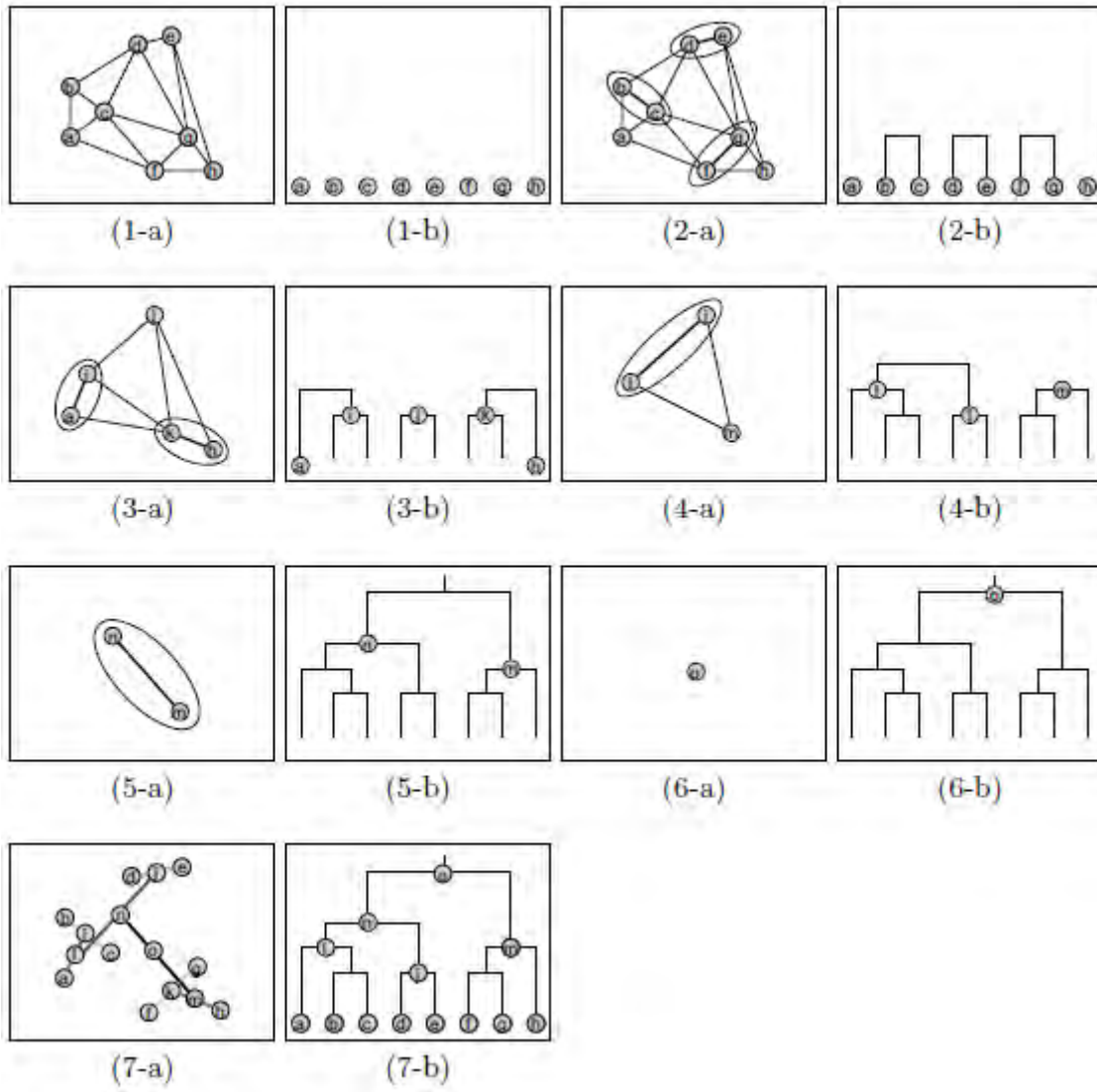


图 3 Generating hierarchical mesh

3. Hierarchical mesh and Adaptive mesh in 3D

本節では、3次元の階層メッシュを用いた解析例を紹介する。図4は、マザーメッシュから階層メッシュを生成する様子である。

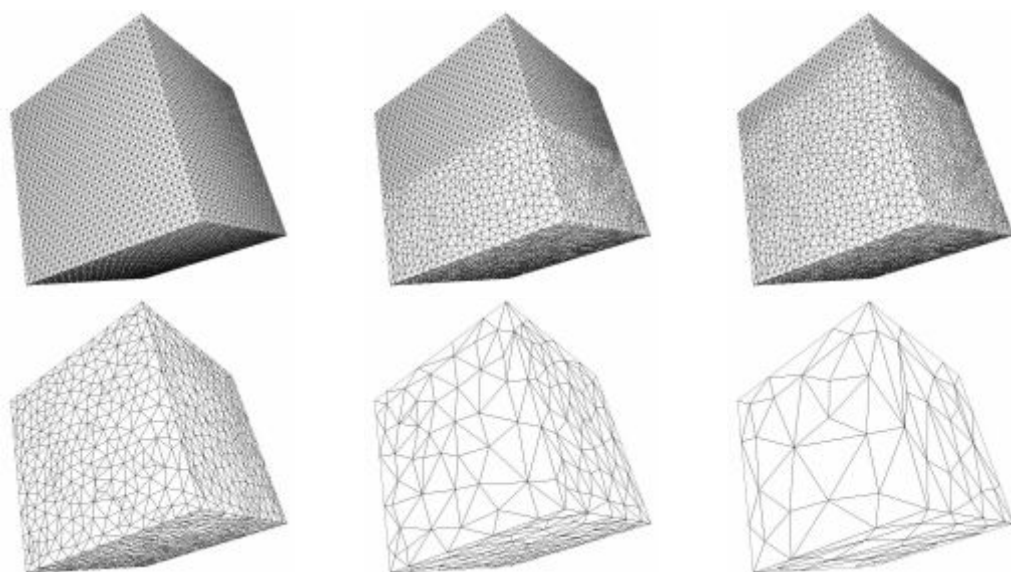


図4 Hierarchical meshes generated by edge collapse of tetrahedron.

図5と図6は、階層メッシュから生成された、アダプティブメッシュである。図5は、表面メッシュであり、図6は、四面体メッシュの辺を全て表示したものである。

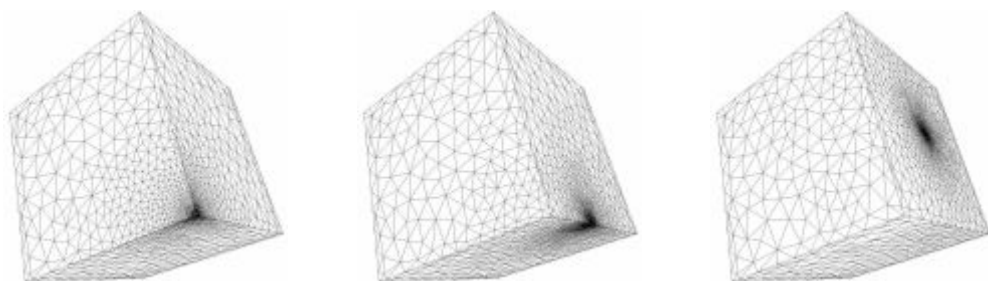


図5 Adaptive mesh (surface mesh).

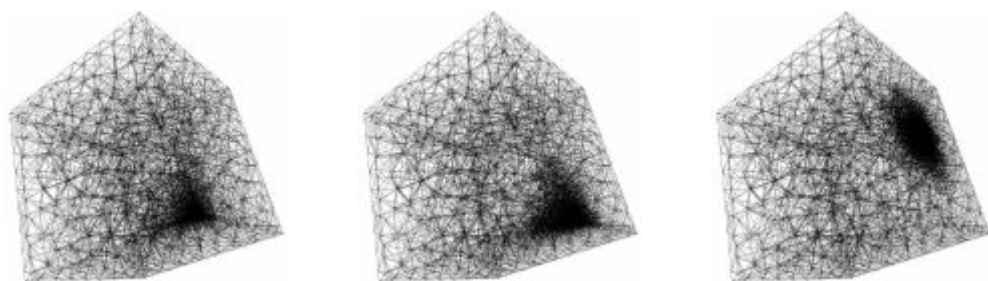


図6 Adaptive mesh (tetrahedron mesh).

図7は、3次元き裂進展解析を行った時のアダプティブなき裂メッシュである。全部で55回の解析を行い、アダプティブメッシュの要素数は、82,914 – 173,846、頂点数は15,918

- 32,394 であった. 図 8 は, き裂面付近の, メッシュと主応力分布と誤差分布である.

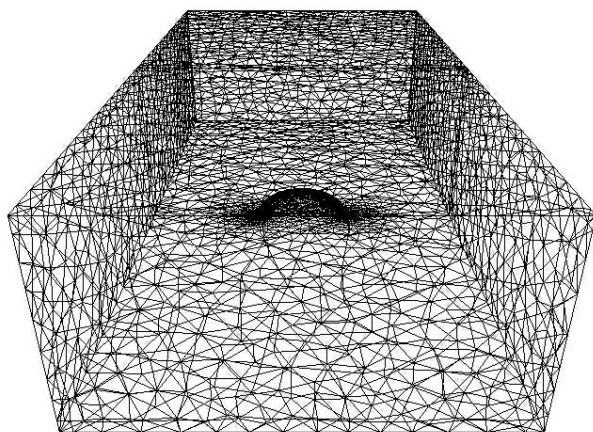
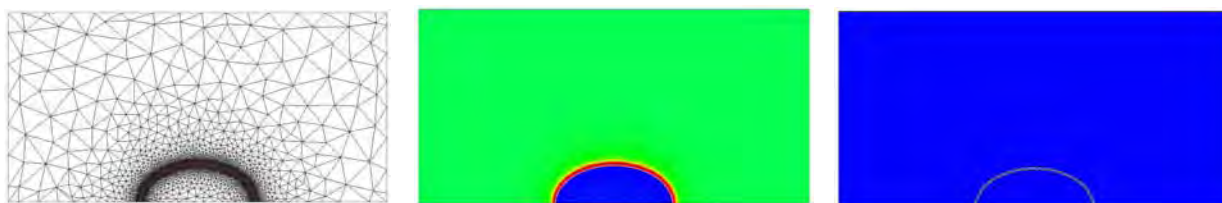


図 7 Adaptive crack mesh (tetrahedron mesh).



(a) メッシュ

(b) 主応力

(c) 誤差

図 8 Adaptive crack mesh (tetrahedron mesh).

最後に, 3 次元のキャビティー流解析の例を示す. 図 9 のように, 上面が移動して, 他の面は固定されている.

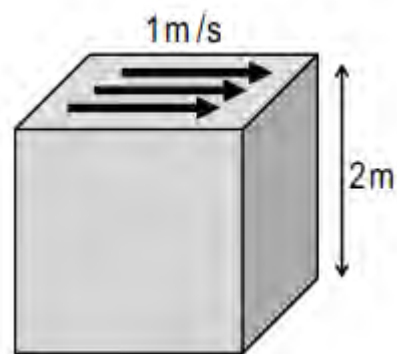


図 9 Model for Cavity flow.

図 10 と図 11 はレイノルド数が 200 の, 速度分布とアダプティブメッシュである. 図 12 と図 13 はレイノルド数が 20000 の, 速度分布とアダプティブメッシュである.

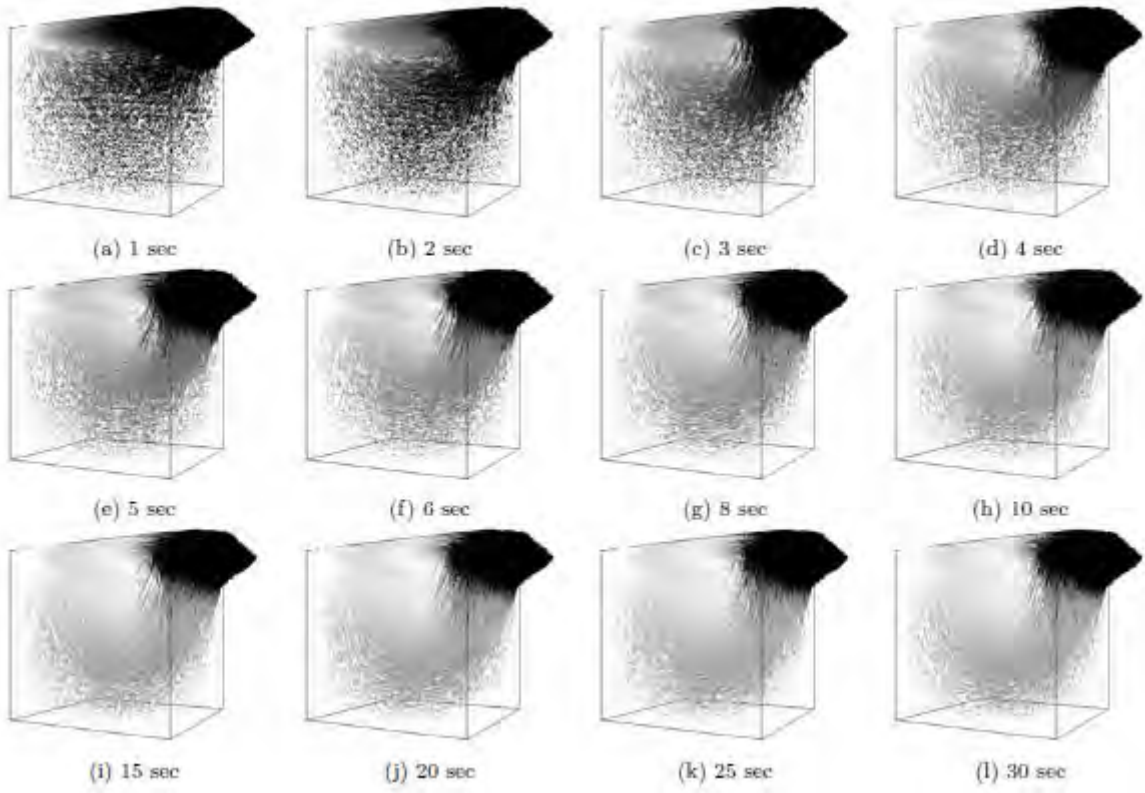


Figure 10 The distributions of the velocity for cavity of Reynolds number 200.

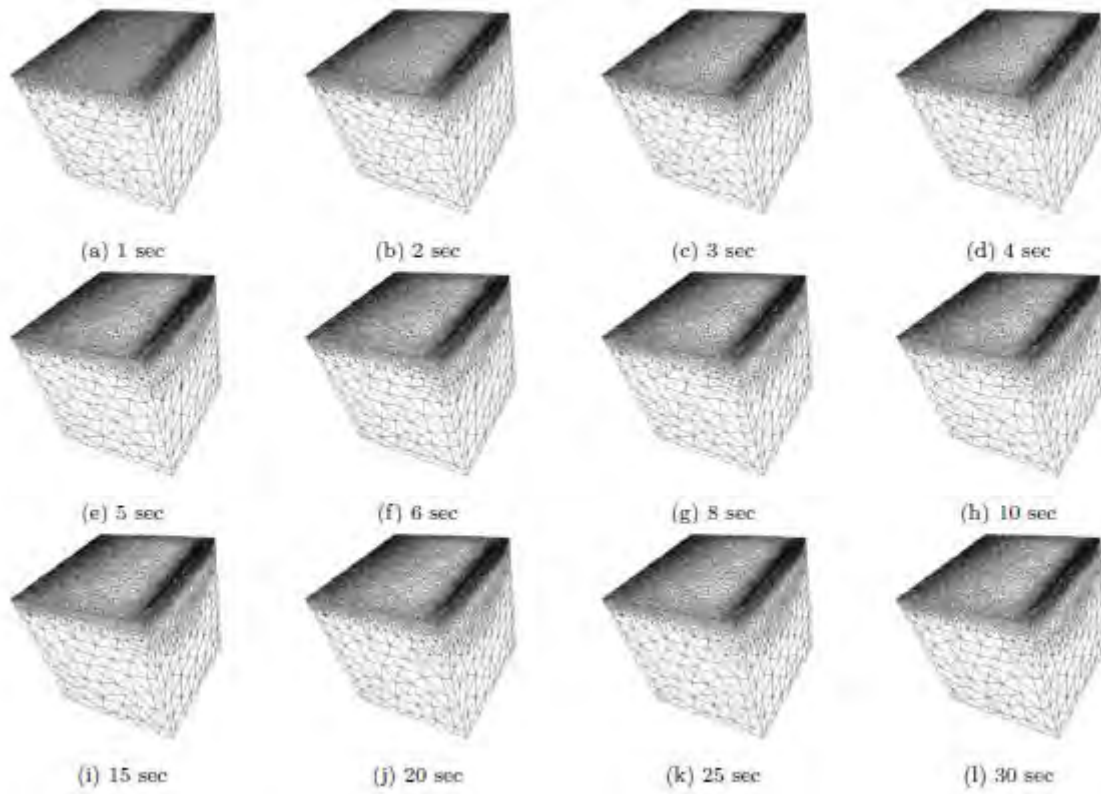
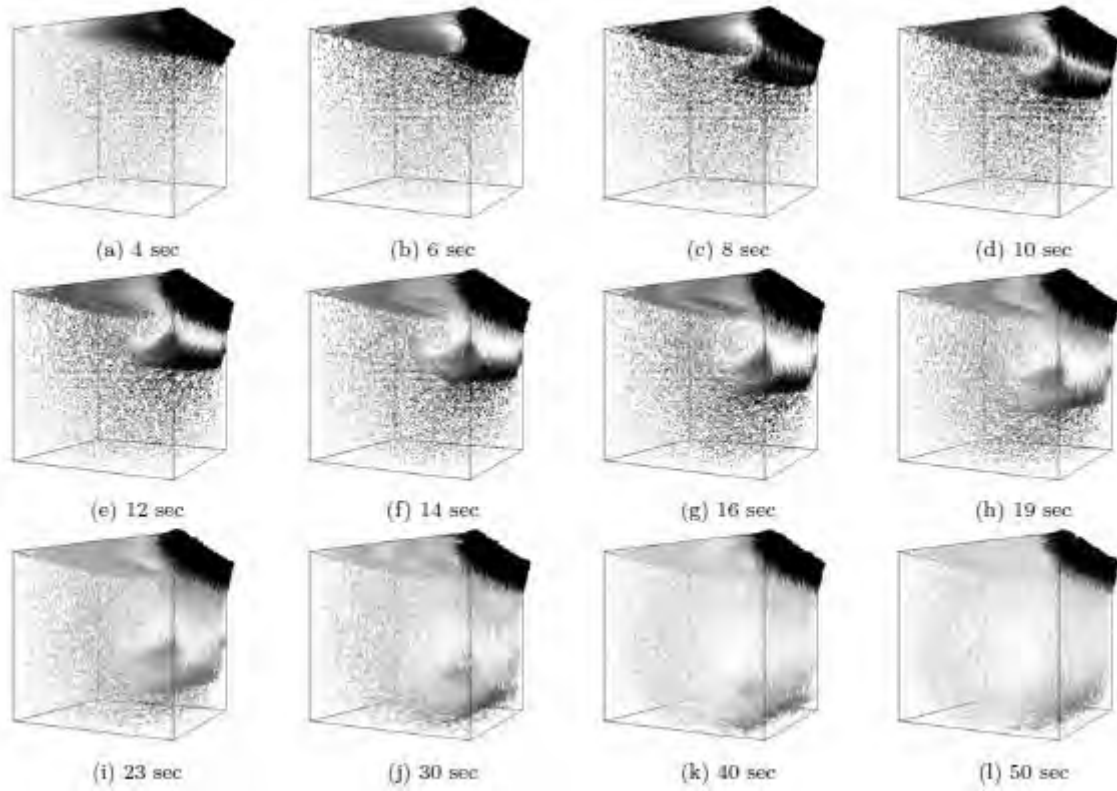
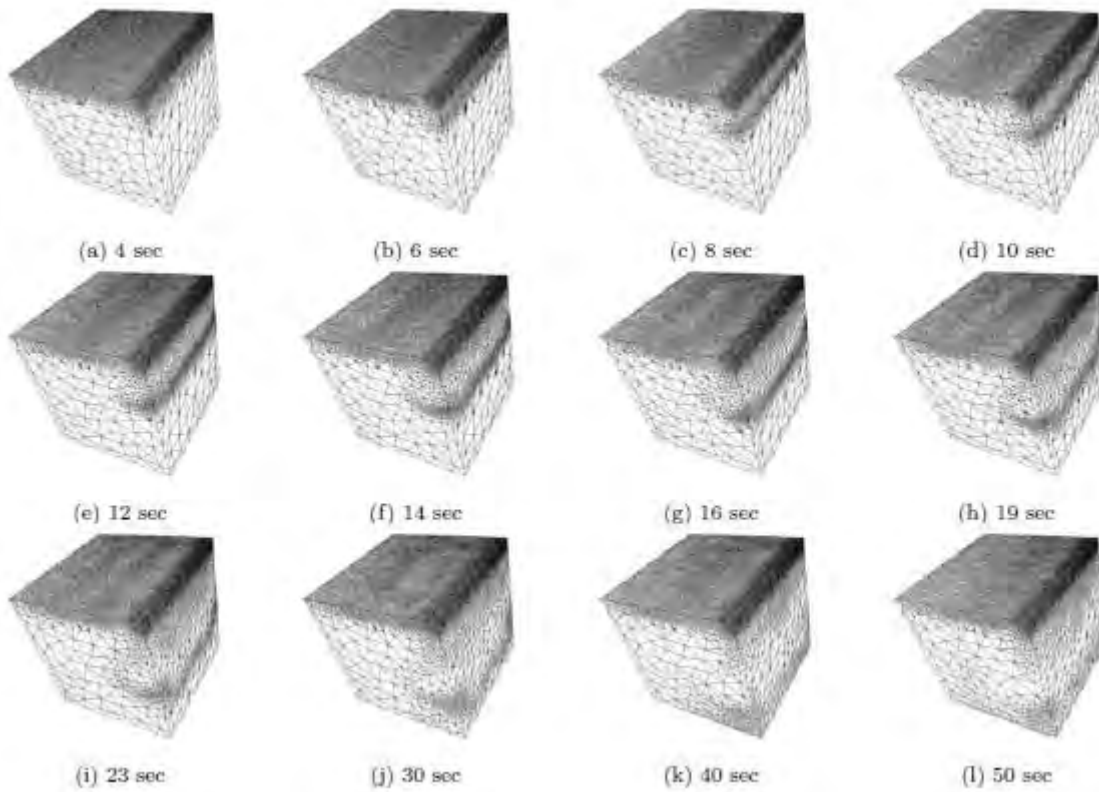


Figure 11 Adaptive mesh for cavity of Reynolds number 200.



⊠ 12 The distributions of the velocity for cavity of Reynolds number 20000.



⊠ 13 Adaptive mesh for cavity of Reynolds number 20000.

(4) 平成 21 年度進捗状況

本研究では、従来のアダプティブ解析で行われるリメッシングの時間を大幅に短縮する画期的な手法を提案するものである。

有限要素法を解く際に最も時間がかかる部分は、メッシュ生成の部分と連立一次方程式を解く所である。連立一次方程式を解く部分は、アダプティブ解析を行うことによって、前もって決めた誤差以内の解を少ない要素のメッシュを生成することによって効率よく出すことができる。では、メッシュ生成に関してはどうかというと、従来では、有限要素法の解から得られた誤差分布を用いて、非効率ではあるが毎回メッシュを生成していた。

このように、アダプティブ解析では何回もリメッシングを行うので、このリメッシング時間を大幅に短縮することが望まれている。我々は階層的なデータ構造を持つメッシュを用いることによって、3次元のアダプティブ解析をき裂進展とキャビティー流に適用し計算時間を短縮することに成功した。

3.1.6. 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、下記のような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

ば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) 概要

平成21年度は、平成19年度と同様にフッ化カルシウム(以下 CaF_2 と表記)単結晶を研究対象としてとりあげた。 CaF_2 単結晶は、真空紫外光に対する高い透過率と耐久性を持つ。そのため、半導体リソグラフィシステムにおける高性能光学素子の材料として、合成石英とともに用いられている。また、リソグラフィ用光学素子として使用する場合には、直径が10インチ以上の CaF_2 単結晶が必要となる。このような大口径単結晶は、チョクラルスキー法または垂直ブリッジマン法を用いて育成される。一般的に $\langle 111 \rangle$ 方向に育成した単結晶(以降では $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶と表記)は、その複屈折の小ささからレンズ材や窓材、プリズムの材料として用いられる。一方、 $\langle 100 \rangle$ 方向に育成した単結晶(以降では $\langle 100 \rangle$ 方向育成単結晶と表記)は、 CaF_2 単結晶の4回対称性を利用した真性複屈折補正レンズ等に使われている。電子デバイスの微細加工を行うためにはこれらの光学素子にも極めて高い光学的性能が要求され、とりわけ単結晶内の応力に起因した応力複屈折の低減が重要となる。電子デバイスの微細加工を行うためにはこれらの光学素子にも極めて高い光学的性能が要求され、とりわけ単結晶内の応力に起因した応力複屈折の低減が重要となる。チョクラルスキー法では、単結晶の育成中の温度分布の存在による熱応力が残留し、垂直ブリッジマン法では熱応力に加えて、るつぼとの接触により生じる機械的応力が残留する。ゆえに、育成直後の大口径単結晶には比較的大きな応力複屈折が存在する。そのため、高性能光学素子として CaF_2 単結晶を用いる場合には、応力を緩和することで応力複屈折を低減することを目的として、育成後の単結晶にアニール処理が実施される。しかしながら、目標値まで応力複屈折を抑えるには、長期間のアニール工程を要する。そこで、高効率なアニール条件の探索には、アニール後の残留応力および応力複屈折のシミュレーションが重要となる。

以前の研究では応力フリー温度という概念を用いて弾性応力解析により残留応力を評価した。ここで、応力フリー温度とはインゴットの平均温度がその温度以上では完全に無応力状態であるとし、インゴットの平均温度がその温度に達した時点を境として応力が発生するという温度のことである。これを定め、最終的にインゴットは一律に室温になるとすると、弾性熱応力解析により応力フリー温度時の温度分布に応じた残留応力が計算でき

る. しかし, このような残留応力算出法では, 応力フリー温度の選択に任意性があり, 応力フリー温度の選択により複屈折の大きさが変わり, 定量的な評価ができない. アニール工程後の残留応力は, 高温域でのクリープ変形に伴って起こる応力緩和の結果として生じる. そこで, シミュレーションにより定量的なアニール後の複屈折評価を行うためには, クリープ挙動を考慮した非弾性解析が必要となる.

本研究では, 高温域においてひずみ速度をパラメーターとした CaF_2 単結晶の圧縮試験を実施し, 同単結晶のクリープ構成式を決定した. さらに, このクリープ構成式を用いた非線形有限要素解析により, $\langle 100 \rangle$ 方向育成および $\langle 111 \rangle$ 方向育成の CaF_2 単結晶のアニール後の残留応力を求めた. その後, 得られた残留応力から平均応力法により光路差の値とその分布を算出し, 実験結果との比較を行った.

(b) 解析方法

本解析の流れは, 単結晶アニール過程の温度解析をまず行い, その結果をもとに熱応力解析によりアニール過程終了後の残留応力を算出し, さらに求められた残留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.

温度解析

温度解析には, 総合伝熱解析コード CrysVUn により, アニール炉内中のインゴット表面の温度分布を得る. 次に得られた表面温度データを境界条件として用い, 非定常熱伝導解析によりインゴット内部の温度分布を求める. この解析には汎用有限要素法解析コード MARC を用いた.

残留応力解析

高温下において CaF_2 単結晶をアニールした場合, 臨界分解せん断応力の低下により単結晶内に多数の転位生じ, 応力の緩和が引き起こされる. 残留応力を正しく評価するためには, この時間依存の非線形変形挙動であるクリープ変形を考慮する必要がある.

本研究では, 高温下においてひずみ速度をパラメーターとした CaF_2 単結晶インゴットの圧縮試験を行うことで, 同単結晶のクリープ構成式を求めた. 本研究ではクリープ挙動は等方的であると仮定し, クリープ構成式を作成するための単結晶圧縮試験を実施した. その結果, CaF_2 単結晶のクリープ構成式として次式で得られた.

$$\frac{d\epsilon^c}{dt} = 1.203 \times 10^{-10} \sigma^{3.794} \exp\left(-\frac{8.652 \times 10^{-19}}{kT}\right) \quad (1)$$

ここで ϵ^c はクリープひずみ, t は時間, k はボルツマン定数である. また, 負荷応力 σ と温度 T の単位はそれぞれ Pa と K である. 残留応力を求めるための有限要素クリープ解析では陰解法を用いた.

立方晶系である CaF_2 単結晶は弾性係数に異方性を有している. 残留応力を求める熱応力解析には等方性のクリープ挙動に加えて, この弾性係数の異方性を考慮する必要がある. この解析には前述の MSC MARC を用いた.

光路差の計算

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るので，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) 解析結果

解析対象は図 1 に示した直径 200mm, 厚さ 40mm の円板状の CaF_2 単結晶インゴットである． $\langle 100 \rangle$ 方向育成および $\langle 111 \rangle$ 方向育成の単結晶について解析を行った．残留応力解析には有限要素法を適用した．図 1 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，3456 要素，15885 節点である．14 日間アニールを解析対象とした．

まず，式(1)で表されるクリープ構成式を考慮した残留応力の解析結果を図 2 に示す．図 2 (a), (b)はそれぞれ $\langle 100 \rangle$ 方向育成単結晶と $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶における，アニール工程後のミーゼスの相当応力の分布を示している．残留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， x_3 軸方向から見た時に， $\langle 100 \rangle$ 方向育成単結晶では 4 回対称となり， $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶では 3 回対称となっている．このように育成方向により応力分布の対称性は異なるものの，表面中心部で応力が最大になるといったような，大まかな分布自体はよく似ていることが分かる．また，応力の大きさ自体は，両者間でほとんど同じオーダーである．

次に，残留応力解析結果を用いて複屈折計算を行い，光路差を算出した．図 3(a), (b) に $\langle 100 \rangle$ 方向育成および $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶の単位厚さ当たりの光路差分布をそれぞれ示す． $\langle 100 \rangle$ 方向育成単結晶， $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶のいずれの光路差分布でも，結晶異方性に起因した対称性が見られ，それぞれ 4 回対称および 6 回対称となっている． $\langle 100 \rangle$ 方向育成単結晶では光路差分布が応力分布と同じ対称性を持つのに対して， $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶では対称性が異なっているが，これは光路差が光の波面法線方向に平均化した応力に依存していることに起因する． $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶の応力分布は，インゴット上面と下面において共に 3 回対称であり，かつそれぞれがインゴット中心部を基準として点対称の分布を取る．これを厚さ方向に平均化することで，3 回対称が組み合わさり 6 回対称の分布となる．以上のことから，解析で得られたこれらの対称性は，立方晶である CaF_2 単結晶の対称性として妥当であるといえる．

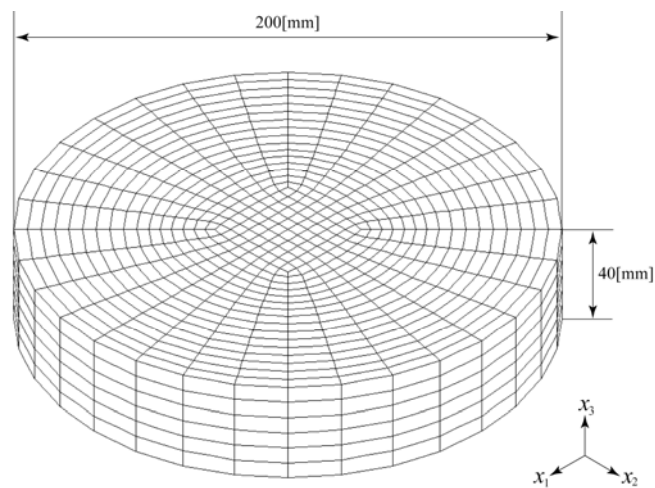
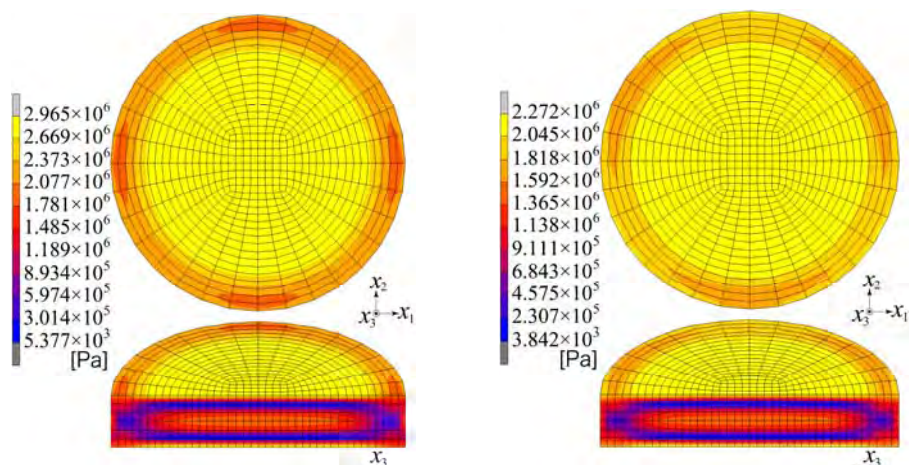
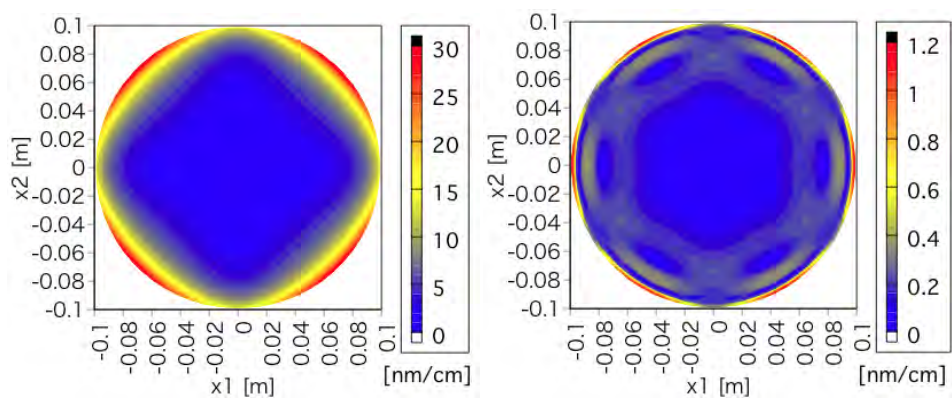


図 1 インゴットの形状と有限要素分割



(a)<100>方向育成単結晶 (b)<111>方向育成単結晶

図 2 残留応力の解析結果

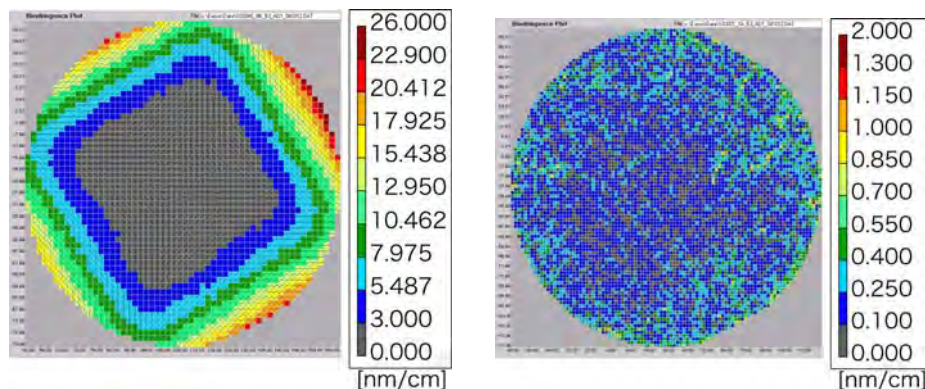


(a)<100>方向育成単結晶 (b)<111>方向育成単結晶

図 3 光路差分布の解析結果

図 4(a), (b)に実験から得られた典型的な光路差分布を示す. 図 3(a)と図 4(a)を見比べると, $\langle 100 \rangle$ 方向育成単結晶においては, 解析により光路差の分布形状およびその大きさを正しく評価できていることが確認できる. 一方, 図 3(b)と図 4(b)より $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶では, 解析と実験から得られた光路差の値は概ね一致しているものの, 解析結果で見られた 6 回対称の分布が実験結果では見られない. これは $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶の光路差が非常に小さく, 複屈折計測装置で分布を正確に確認できないことが原因となっている. 6 回対称の解析結果は立方晶系である CaF_2 単結晶の結晶対称性から考えて妥当であり, よって解析により正しく複屈折を評価できていると判断する.

以上の結果より, CaF_2 のクリープ構成式を用いた非線形解析を行うことにより, 応力フリー温度という任意性のある温度, 言い換えれば実験結果に適合するように適当に選ぶことができるパラメータを導入することなしに, CaF_2 のインゴットアニール後の複屈折現象を予測することが可能となった.



(a)<100>方向育成単結晶 (b)<111>方向育成単結晶
図 4 光路差分布の実験結果

(B) ミクロレベルの解析

(a) 概要

水素環境下では転位の射出が容易になることが実験的に観察されている. しかしながら, この現象の原因は未だ明確にされておらず, 十分に議論されていない. これまで, 水素による原子間結合エネルギーの減少, もしくは弾性係数の減少, などが原因であると考えられている.

一方, き裂先端からの転位射出応力拡大係数について, Rice は Peierls の概念に基づいて理論的な研究を行っている. Rice は転位射出を規定するパラメータとして積層欠陥エネルギーを提案しており, この値を用いて転位射出応力拡大係数を導いている.

本研究では, 原子モデルにもとづいた分子静力学解析を行うことで, き裂先端からの刃状転位射出に及ぼす水素の影響を検討した.

(b) 解析方法

本研究に用いた解析モデルを図 5 に示す. 半径 $R=8.9$ nm, 板厚 $B=2.0$ nm の円筒状の解析モデルを用いた. モード II き裂を導入するため, 図 5 に示すように円周部から x 軸方向に長さ 3.0 nm, 幅 0.4 nm の領域の鉄原子を取り除いた. これによって, き裂先端から x 軸方向に $\{112\}<111>$ すべり系が存在し, モード II 負荷応力条件で刃状転位が x 軸方向に射出する結晶方位となる. 鉄原子の総数は約 43,000 個であり, 周期境界条件を z 軸方向に適用した. 図 5 の灰色領域である円筒表面から 0.7 nm の範囲内の原子を境界原子とした. 転位射出の応力拡大係数(K_{IIc})を算出するため, 境界条件としてモード II き裂まわりの変位の線形弾性解である式(2)に従う強制変位増分を境界原子に与えることで, 転位射出シミュレーションを行う.

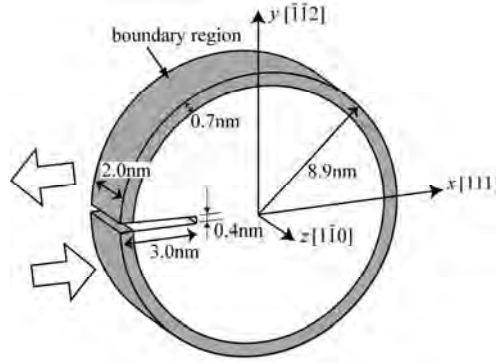


図5 解析モデル

$$\begin{Bmatrix} \Delta u \\ \Delta v \end{Bmatrix} = -\frac{\Delta K_{II}}{2G} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \begin{Bmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \left(\kappa + 1 + 2\cos^2 \frac{\theta}{2} \right) \\ -\cos \frac{\theta}{2} \left(\kappa - 1 - 2\sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \end{Bmatrix} \quad (2)$$

本解析では境界原子に $\Delta K_{II}=1.5 \times 10^{-3} \text{ MPam}^{1/2}$ を満たす強制変位増分を毎ステップ与え、共役勾配法(CG法)を用いて境界原子の xy 平面上の変位を拘束したまま鉄原子の構造緩和を行った。このステップを計400ステップ行い、負荷応力拡大係数が $K_{II}=0.6 \text{ MPam}^{1/2}$ になるまで解析を行った。

(c) 解析結果

転位射出応力拡大係数(水素の影響がない場合)

まず、水素が存在しない条件で、き裂先端からの転位射出応力拡大係数を求めた。ここで、系全体のポテンシャルエネルギーと負荷応力拡大係数の関係を図6に示す。負荷応力の増加に伴い、ポテンシャルエネルギーも徐々に増加する。応力拡大係数が、ある値になると刃状転位の射出をともなって系全体のポテンシャルエネルギーが急激に減少する。なお、図中のグラフの(a)点と(b)点でCNA(Common Neighbor Analysis)を用いて結晶構造解析を行っており、緑色部分がbcc構造以外の原子であることを示す。CNAによる結晶構造解析の結果より、(b)点で転位の射出が確認できる。

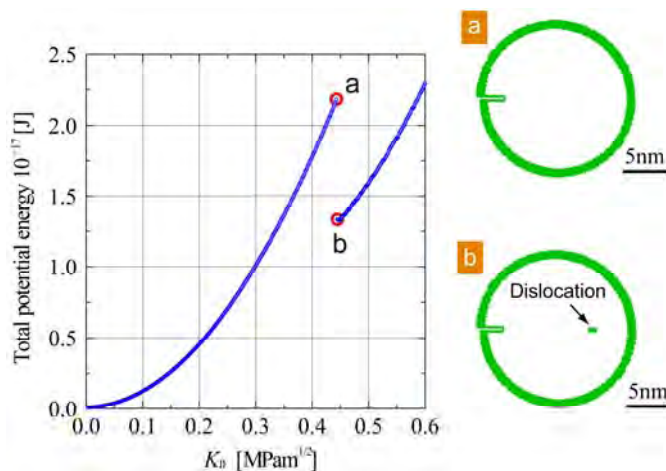


図6 変形過程における全ポテンシャルエネルギーの変化およびき裂先端部からの転位の射出状況

本解析結果より、転位射出時の応力拡大係数は $K_{IIc}=0.443 \text{ MPam}^{1/2}$ となる。応力拡大係数はステップ毎に増加しているため、精度は $\Delta K_{IIc}=+1.5 \times 10^{-3} \text{ MPam}^{1/2}$ で保証される。実際には、材料中の転位射出応力拡大係数はこの値よりも小さくなることが考えられる(3次元転位ループの射出、熱振動)。しかしながら、本解析条件は前述の Rice の理論と同様の条件である(き裂先端からの2次元刃状転位射出、絶対零度)。ここで、Rice の理論によると、転位射出応力拡大係数は次式で与えられる。

$$K_{IIc} = \sqrt{\frac{2G_{\text{slip}}\gamma_{\text{us}}}{1-\nu}} \quad (3)$$

ここで、 G_{slip} はすべり方向の横弾性係数、 γ_{us} は積層欠陥エネルギー、 ν はポアソン比である。立方格子中のすべり方向の横弾性係数は次式で与えられる。 $G_{\text{slip}}=(C_{11}+C_{12}-C_{44})/3$ 、ここで、本ポテンシャルから得られる弾性係数は $C_{11}=228.0 \text{ GPa}$, $C_{12}=134.6 \text{ GPa}$, $C_{44}=112.0 \text{ GPa}$ であるから、 $G_{\text{slip}}=68.5 \text{ GPa}$ となる。水素がない状態での本ポテンシャルにおける積層欠陥エネルギーは 1.03 J/m^2 となる。系のポアソン比は、Voigt 平均の考え方から、 $\nu=0.28$ となる。これらの値を(6-2)式に代入すると、 $K_{IIc}=0.489 \text{ MPam}^{1/2}$ が得られる。従って、分子静力学による解析結果と Rice による理論値は比較的良好に一致し、その誤差は 9.2% である。ただし、Rice の理論式は、簡便のため転位芯の効果を検討に入れていないことなどから誤差が生じたものと考えられる。

転位射出応力拡大係数におよぼす水素の影響

まず、水素 1 原子の存在による転位射出応力拡大係数の変化を調べた。初期水素導入

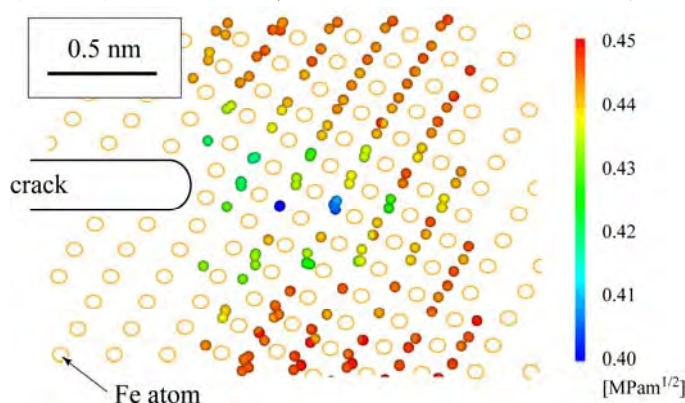


図 7 各水素占有位置における転位射出応力拡大係数の分布

位置を決定するため、ボロノイ分割を用いてき裂先端近傍の水素占有位置である T-site と O-site を特定した。 $K_{IIc}=0.4 \text{ MPam}^{1/2}$ における鉄原子の位置と、転位射出時におけるき裂先端近傍の水素トラップサイト、それぞれのサイトに水素が存在する場合の転位射出応力拡大係数を図 7 にあわせて示す。き裂先端のき裂面近傍に水素が存在する場合に、転位射出応力拡大係数は最小値 $K_{IIc}=0.402 \text{ MPam}^{1/2}$ となる。また、水素位置がき裂先端から遠ざかると、転位射出応力拡大係数は急速に水素がない場合の値に近づく。従って、き裂先端からの転位射出に影響を及ぼす水素の有効存在範囲は、き裂先端から数オングストローム以内の領域に限定される。ここで本結晶方位は、せん断応力によっても水素をトラップするため、水素はき裂先端近傍にも安定に存在しうる。従ってモード II き裂先端近傍に存在する水素原子が、実際に $\alpha\text{-Fe}$ の転位射出応力拡大係数を減少させると考えられる。

次に、各物性値に及ぼす水素の影響を調べるため、完全結晶中の水素濃度を変化させて解析を行った。単位体積あたりの水素濃度と弾性係数およびすべり方向の横弾性係数、Voigt 平均から算出したポアソン比の関係を図 8 に示す。また、単位面積あたりの水素濃度と積層欠陥エ

エネルギーの関係を図 9 に示す. これらの結果から, 水素濃度の上昇によって積層欠陥エネルギーは大きく減じているが, 弾性係数やポアソン比に大きな変化は見られない. オーステナイト系ステンレス鋼を用いた実験では, 水素チャージによって弾性係数の減少が報告されているが, これは材料中に転位や粒界などの欠陥が存在したためであると考えられる. 以上の結果より, 式 (3) から積層欠陥エネルギーの減少が転位の射出を容易にしたと考えられる. たしかに, き裂先端から 0.4 nm の位置に水素 1 原子が存在したと仮定すると, 解析モデルの板厚が 2.0 nm なので, き裂先端の局所的な水素濃度は 1.25 nm^{-2} となる. 図 9 より, 積層欠陥エネルギーは約 8.79 %減少する. その他の物性値が変化しないと仮定すると, 式(3)から転位射出応力拡大係数は 4.50 %減少して, $K_{IIc}=0.467 \text{ MPam}^{1/2}$ となる. この結果は分子静力学によって最小値をとった結果($K_{IIc}=0.402 \text{ MPam}^{1/2}$)とよく一致し, 誤差は 4.0 %である.

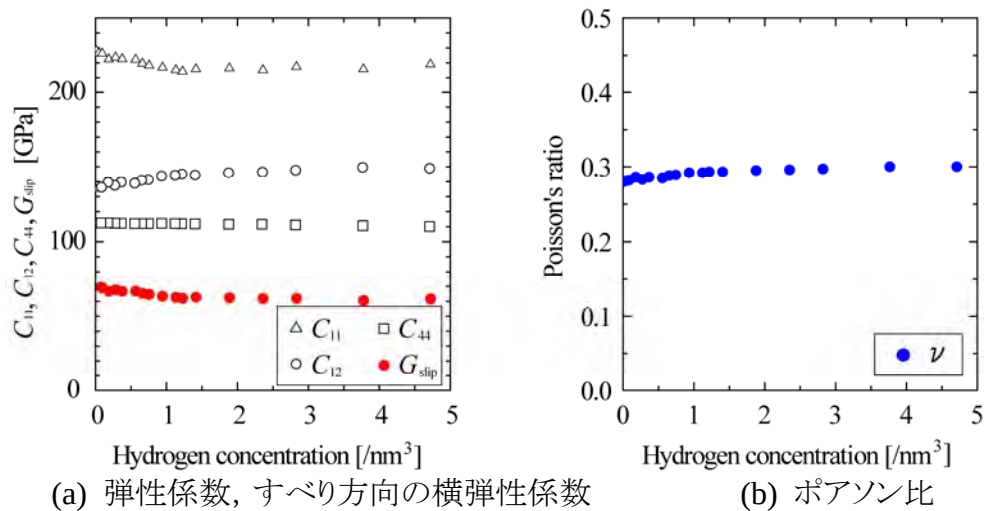


図 8 弾性係数, ポアソン比の水素濃度による変化

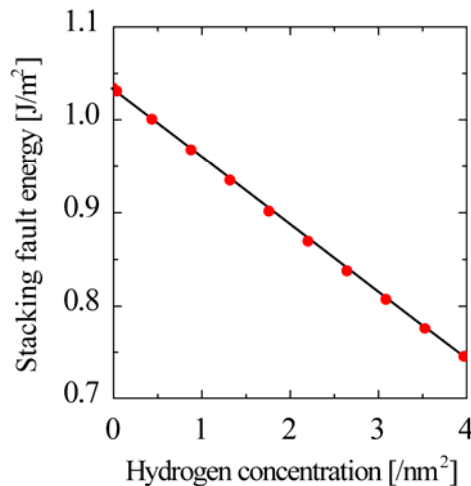


図 9 積層欠陥エネルギーの水素濃度による変化

(4) 平成 21 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。今年度には半導体リソグラフィ装置のレンズ用材料として用いられる立方晶系単結晶である CaF_2 について、応力フリー温度を用いず、 CaF_2 単結晶のクリープ構成式を用いて残留応力を評価し、それから複屈折特性を求めるシミュレーションプログラムを開発した。

(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ため、 $\alpha\text{-Fe}$ を対象として刃状転位射出に及ぼす水素の影響を分子静力学法を用いて明らかにした。その結果、き裂先端の局所領域に存在する水素によって、 $\alpha\text{-Fe}$ の積層欠陥エネルギーが減少するために、き裂先端からの刃状転位の射出が容易になることが示唆された。

3.1.7. Web ベース CAE システムのインタラクティブ化とマルチフィジクス解析へ向けたフレームワーク開発

(1) 目標・計画

Web ベース CAE システムは基礎的なインタラクティブ性の向上が可能なが確かめられた。目標は GUI 上で境界条件の設定および可視化手法の高度化を行う。この際、並列計算を念頭においた大規模な対象を扱えることが重要となる。

構造 FEM 解析と他の手法(流体, 熱, 最適化等)との協調作業ができることが示されている。昨年度は, 構造 FEM 解析とメッシュ生成機能を Web ベースシステム上で統合する実装を行った。本研究では, マルチフィジクス解析へ向けたメッシュ生成機能の向上のため 3 次元におけるメッシュ自動生成アルゴリズムの高度化を行い, Web ベースシステムに統合する。特にき裂進展解析に必要な機能を重点に開発を行い実用性の向上も図った。

(2) 意義・国際社会との比較

スーパーコンピュータやクラスタコンピュータなどのハイパフォーマンズコンピュータはその管理方法や利用するアプリケーションによって構成の違いなどが生じる。しかし, 実際のユーザが利用するにあたりその微妙な差異などは重要でない。効率よく解析を行えることが最も重要になる。これまでも, 問題解決環境や専用の設計システム等が様々な分野で開発されてきた。しかし, 汎用性と他のアプリケーション及びコンピュータとの有機的な結合は, 複雑なプロトコル(例えば CORBA や SOAP 等)を利用する他なく実質的な開発が困難であった。本研究では, ネットワーク(特にインターネット)を利用することによるユーザインターフェイスの統一が自然に行われることと, ネットワークにあるサーバが有機的に結合可能である。これにより, システムの大きな差異は, 適切にユーザインターフェイス上に反映され, 細かい差異はユーザインターフェイスで見せなくすることが可能になる。

(3) 研究内容

これまでに実装した機能は表 1 に示すクラスを用いて行った。これらの API は JavaScript により呼び出され, ネットワークを介して利用される。したがって, これらの API が公開されれば, 即外部のサーバが利用可能になる。もちろん認証により制限を設けることも可能である。クラスは主に 6 つのカテゴリに分れており, メッシュのデータを表現するもの, 境界条件を表現するもの, 解析結果を表現するものが表 1 の最初の 3 つのクラスである。残りの 3 つのクラスは, 解析の実行や停止を管理するもの, 実行中の解析を監視するもの, 可視化および解析結果の処理を行うものである。ここで重要な点は今回新たに追加したき裂進展解析用のメッシュは外部のサーバにあればよいということである。これはこれまで構築してきたマッシュアップを可能とするマルチフィジクス解析へ向けたフレームワークにより実現されている。

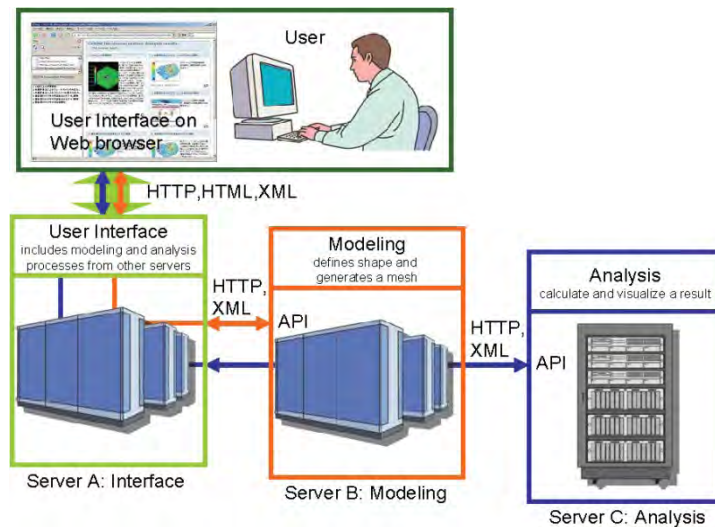


図 1 ネットワークサーバを用いた協調作業

(4) 平成 21 年度進捗状況

本年度は、主にメッシュ生成機能の高度化また具体的なアプリケーション例としてき裂進展解析を具体例に高度化を図った。メッシュは、テンプレートによるメッシュ生成、および ADVENTURE による 4 面体要素生成はすでに利用可能である。近年、需要があるき裂進展解析のための要素生成手法を提案し実装している。き裂進展解析手法にはいくつかのアプローチがあるが、FEM ベースの解析手法では一般の全自動要素生成アルゴリズムでは対応することが困難である。そこで、6 面体によるき裂進展解析用のメッシュ生成アルゴリズムの実装を行いシステムへ統合した。高精細な画像生成が可能な可視化ソフトウェア(Shade 昨年度済、フリーの POV-Ray および Blender など)との連携強化を図った。

図 2 および図 3 は Web インターフェース上に表示されたメッシュである。このメッシュはいくつかのパラメータ(領域サイズ、表面き裂サイズと向き、き裂先端の要素サイズと分割数)を入力することにより自動的に生成される。本システムではこのメッシュだけを生成することも想定した利用方法の 1 つである。ユーザインターフェイスでは、初期き裂の大きさ、角度、進展量、材料定数等を入力し、必要な回数だけのき裂進展解析を行った。定型解析の部類に入るので境界条件(荷重値以外)は入力を省略するインターフェイスとして実装した。

図 3 に示す 1 つの斜め表面き裂をもつモデルの解析を行った。解析では、水平方向を 0 度として、0 度、30 度、45 度、60 度の 4 ケースについて解析を行った。その結果を図 4 に示す。角度が 30 度以上では、初期状態では、 K_{III} が存在し、50 ステップ後にも K_{III} が存在する。このときの 30 ステップにおけるき裂形状を図 5 に示す。これは、実際ではファクトリーループ(図 6)に示すようなき裂進展になるが現在のき裂進展クライテリアの限界である。改善するためには新たなクライテリアの創出が不可欠である。また、機能の拡張として複数き裂のモデル化も可能となった。(図 7 および 8)

表 1 Ajax による CAE システムクラス定義

WORKING FUNCTION	CLASS NAME	ARGUMENTS
Representation of mesh	CDRMesh	CBCForce, CBCFix and so on
Representation of boundary condition	CDRBCForce CDRBCFix	node id, element id and so on
Storing analysis result	CDRResult	CCalculate
Control of analysis	CCTAnalysisSpc	CCalculate
Observing status of analysis	CCTCalculate	CMesh
Visualization to mesh and analysis result	CCTVisualize	CMesh, CResult

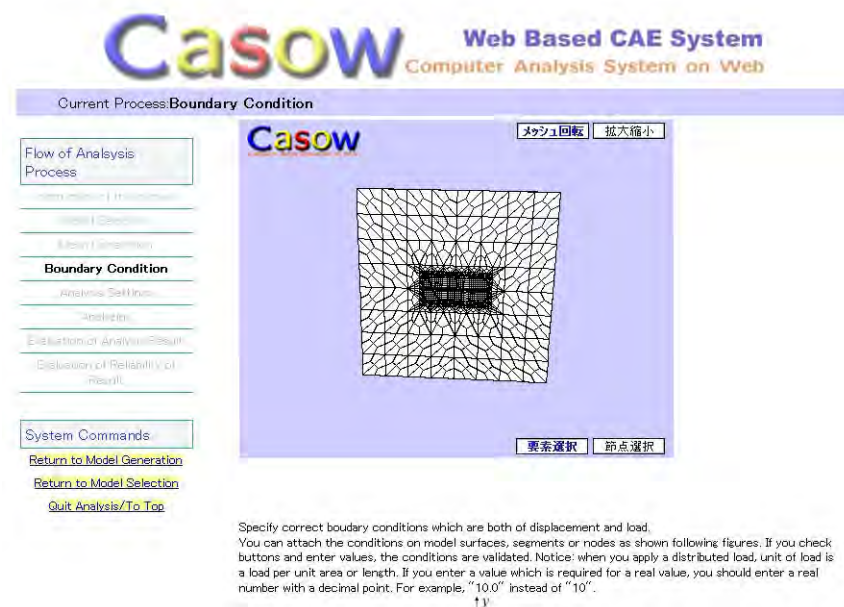


図 2 Web ブラウザ上におけるき裂進展解析用メッシュ表示

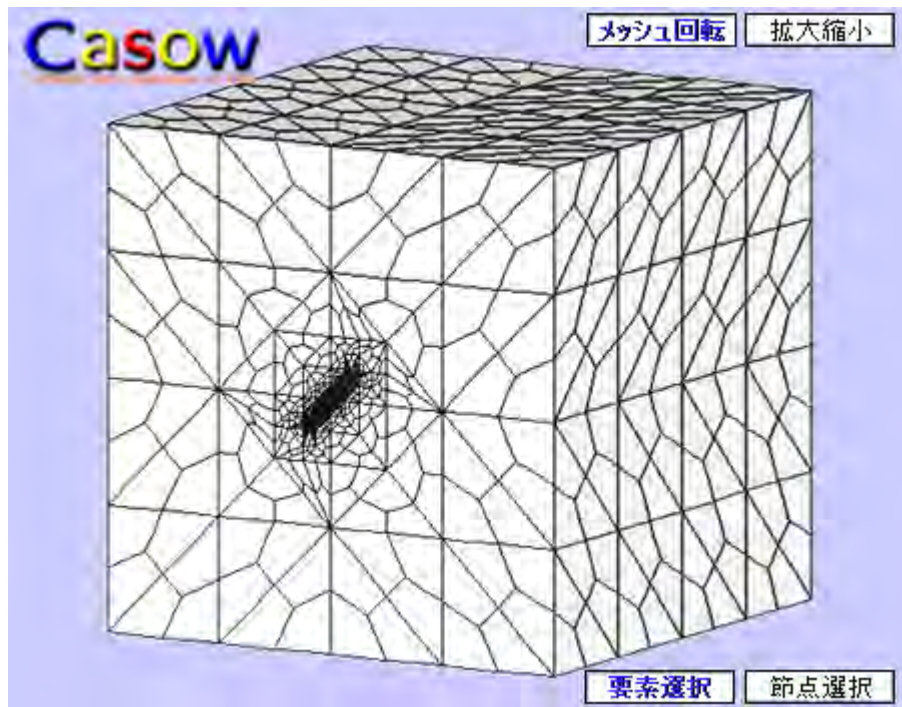


図 3 き裂進展解析用メッシュ:60 度

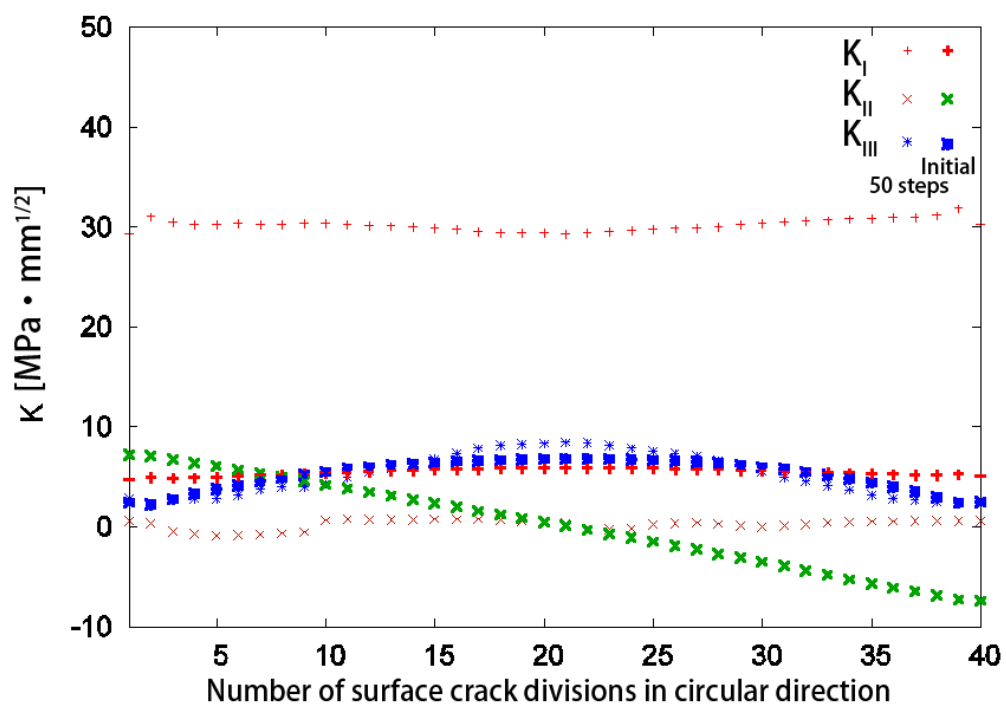


図 4 き裂進展解析におけるき裂前縁にそった応力拡大係数分布:60 度
(凡例細:50 steps, 凡例太:初期状態)

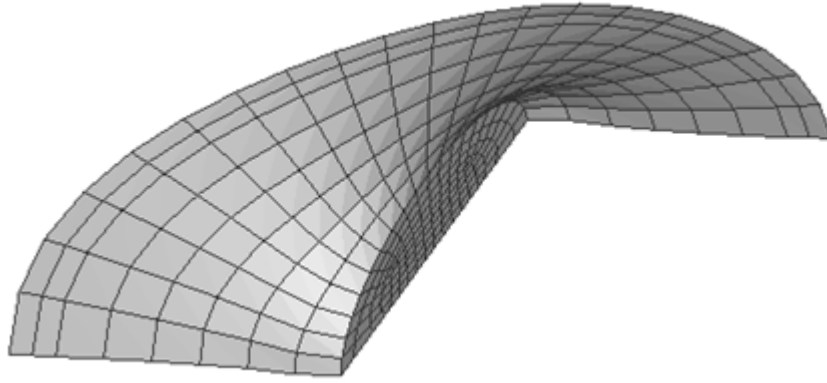


図 5 混合モードき裂進展解析結果:60 度, 30 steps

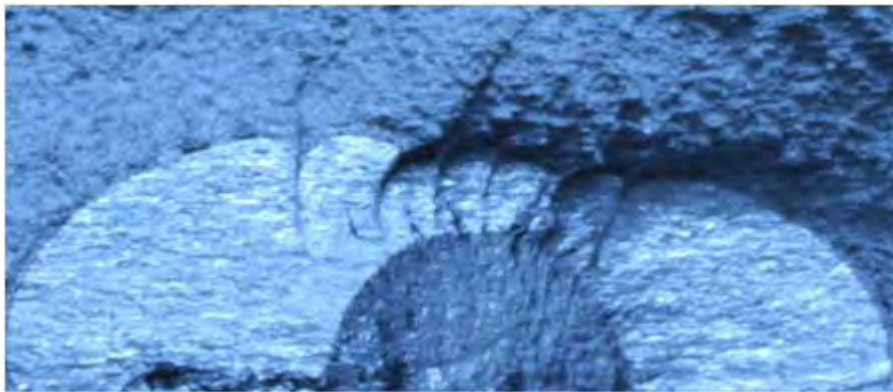


図 6 混合モードき裂進展におけるファクトリーループ

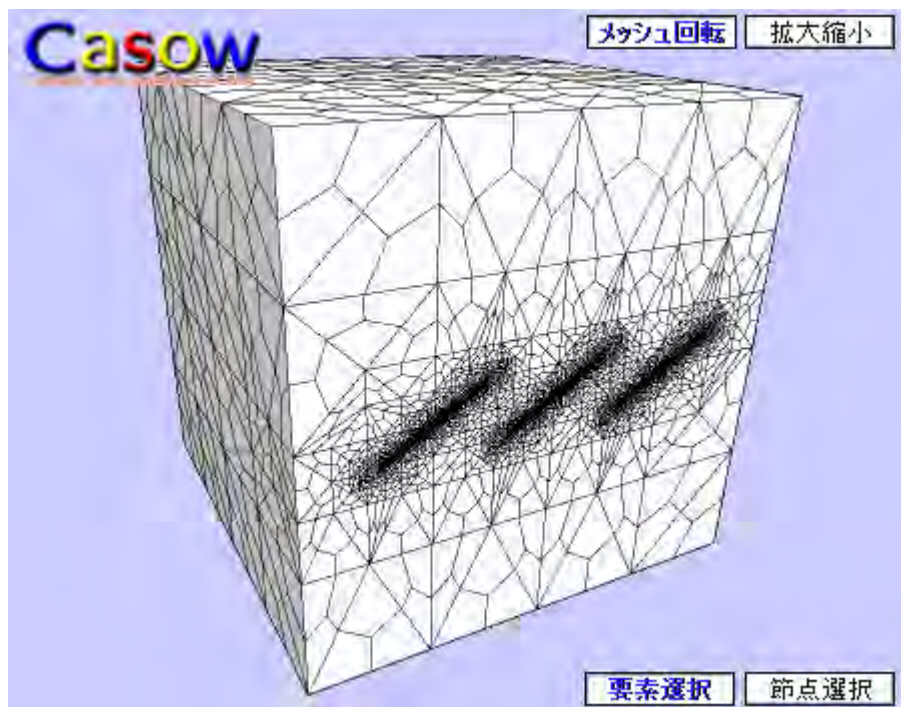


図 7 複数の表面き裂モデル

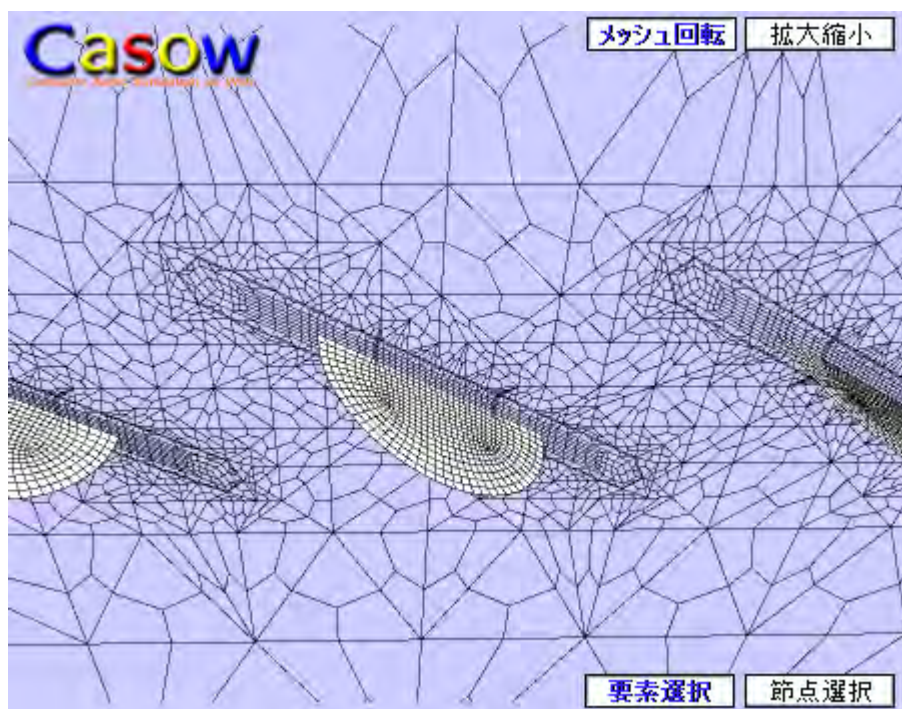


図 8 複数の表面き裂モデルにおけるき裂面

3.2. 逆問題

3.2.1. 逆問題に関する研究の概要

本研究では、大規模構造問題における最適化の研究、き裂、接触を含む構造の最適化の研究を行ってきた。

これまでに、(1) 流れ場における腐食同定、(2) 複合材料における材料同定、(3) 表面反応のマルチスケール解析、(4) ロボット潜水艇に働く流体力自己モニタリングのための逆解析手法の研究に関する逆問題解析の研究を進めた。

(1)は、流れのある配管内の腐食を精度良く予測するための逆解析手法を開発することを目的として研究を行ったもので、腐食が予想されるパイプを外部から打撃し、そのときのひずみ変化を測定することにより腐食位置を同定できる技術を開発した。

(2)は複合材料試験片を連続体力学的に評価し材料定数の同定を行うもので、これまでにエネルギー法、カルマンフィルタを用いた方法、内部ひずみの測定誤差を考慮した確率的手法などを開発してきた。本年度は非線形定数同定、複数台のカメラによるデータフュージョンなどの新技術を開発した。

(4)は、ロボット潜水艇内部から直接計測が可能なある限定された場所の流体運動を計測し、得られた情報から潜水艇周辺領域全体の流体場を逆解析により求め、さらに、流体が潜水艇構造物の表面各部に及ぼす力の詳細な空間分布とその時間変化をリアルタイムで推定できる情報処理システムを実現することを目的とし研究を進めた。本年度は、遺伝的アルゴリズムの発想に基づく計算モデルを数種類構築し、3次元シミュレーションの試験的な比較計算を行った。

3.2.2. ロボット潜水艇に働く流体力自己モニタリングのための逆解析手法の研究

(1) 目標・計画

将来的に目指す目標として、「ロボット潜水艇が流体中を航行する際に、潜水艇内部から直接計測が可能なある限定された場所の流体運動の情報を取得しつつ、潜水艇の周辺領域全体にわたる流体場を逆解析によって時々刻々と求めながら、周辺流体が潜水艇構造物の表面各部に及ぼす力の詳細な空間分布とその時間変化をリアルタイムで推定できる情報処理システムを実現する」ことを想定し、その基礎研究として、当該逆解析手法に関する研究を行う。

ただし、上記のとおり、ロボット潜水艇に搭載する情報処理システムへの応用を想定しているので、リアルタイムで行う逆解析のための数値計算は極力低消費電力で実行されることが望ましい。このような低消費電力化は、通常は、コンピュータのハードウェア性能の向上に頼るところであるが、ここでは、極限的に低消費電力化を追求していく観点から、計算モデルの構築という最も基本的なソフトウェア段階から最大限の方策を講じることを目指す。

(2) 意義・国際社会との比較

ロボット潜水艇は、海洋科学技術などの関連分野で、例えば、海底地殻変動の観測、海底地震計の設置、海中や海底における構造物や各種資源の状況把握、流速・水温・塩分濃度等の各種モニタリング、プランクトンの採取など、今後、様々な用途への利用拡大のニーズが増大していくものと考えられる。これに伴い、ロボット潜水艇の機能の高度化と潜水航行継続時間の長時間化が求められるので、いろいろな航行条件下において、潜水艇構造物が周辺流体からどのような力を受けるかを詳細に把握し、構造物の健全性確保上問題のないことを確認しておくことが大切である。

一般に、いろいろな観測や作業を行うロボット潜水艇は、各種計測装置やロボットアーム等の付属構造物をもつため、その潜水艇外形は複雑な形状をしている。このような形状の航行体は、周囲に複雑な流れを発生させながら、かつ、その流れから複雑な力を受けつつ進行する。場合によっては、付属構造物に予想外の力が繰り返しかかっているかもしれない。このような状況の履歴について、ロボット潜水艇自身が正しく自己モニタリングできるような手法を確立できれば、将来のロボット潜水艇の安全な利用に資する点が大きいと考えられる。

また、ここで考案する逆解析手法の計算モデルは、時間発展計算において実数を用いないため、トランジスタを数多く必要とする演算回路(例:浮動小数点表示された数の乗算回路)の使用を省略できる。従って、使用しない演算回路への電源供給を選択的に遮断できる次世代型汎用プロセッサや、使用しない演算回路をもともと組み込まない専用プロセッサあるいは回路をその都度再構成できるプロセッサを利用する場合、超低消費電力化に大きく貢献できる。

(3) 研究内容

本研究では、基本となる流体シミュレーションの手法として“格子ガス法”(LGM)を採用した。これは、流体が存在する空間中に張られた格子上を、仮想粒子が並進・衝突を繰り返しながら、その集団としての運動を自己組織化により形成していくものであり、最終的な流体運動は、これらの仮想粒子の運動を適当な大きさの時空間で平均化(疎視化)することによって得られる。本手法は、任意の複雑な形状をした境界条件に適用できるという特徴を有しているので、各種計測装置やロボットアーム等の付属構造物により複雑な形状をしている可能性が高いロボット潜水艇への応用では、大きなメリットとなる。

19年度は、2次元問題に絞って研究を進め、最も単純な計算モデルである“FHP-I モデル”によって、円柱後流のカルマン渦の発生を確認した。計算規模は、格子点数で約3億点であった。20年度は、上記の2次元問題の計算規模を数十億格子点の規模まで拡大するとともに、3次元問題の研究に着手した。21年度は、3次元計算モデルとして採用した“FCHC モデル”(面心超立

方モデル)”)について、遺伝的アルゴリズムの発想に基づく計算方法を導入し 3 次元シミュレーションの試験的な比較計算を行った。

①FCHC モデルにおいて仮想粒子がもつ速度ベクトルの条件

FCHC モデルは、仮想粒子の速度の大きさをひとつに限定した“単速度モデル”という意味では 2 次元 FHP モデルの自然な拡張となるが、仮想粒子の衝突の自由度をあげて十分な等方性を得るため、3 次元空間ではなく 4 次元空間内でモデルを構成する。FCHC モデルでは、まず、それぞれの格子点を始点にして、周辺に飛び移る仮想粒子の速度ベクトルを考える。4 次元空間で考えているので、その速度成分は 4 つある。

仮想粒子は、格子点上を飛び移りながら移動するが、その際、“速度ベクトルの第 1 条件”として、「4 成分のうち 2 つが 0 で、残りの成分が +1 または -1 である」と仮定する。例えば、(+1, +1, 0, 0) や (0, -1, 0, +1) の向きには移動が可能であるが、(+3, +1, 0, 0) や (0, -1, 0, 0) の向きには移動できない。この条件から、(i) ベクトルの各成分の 2 乗の和は常に 2 だから、ベクトルの大きさはすべて等しく 4 次元空間内で $\sqrt{2}$ の長さをもつこと、及び、(ii) ベクトルの 4 成分において 2 個の 0 の配置が 6 通り可能で残りの 2 成分の ± 1 の配置で 4 通りが可能だから、ベクトルの向きの種類が全部で 24 通り可能であることが導ける。

また、“速度ベクトルの第 2 条件”として、「ひとつの格子点上では、全く同じ速度ベクトルをもつ仮想粒子は同時に 2 個以上存在できない、すなわち、存在しないか存在しても 1 個だ」と仮定する。

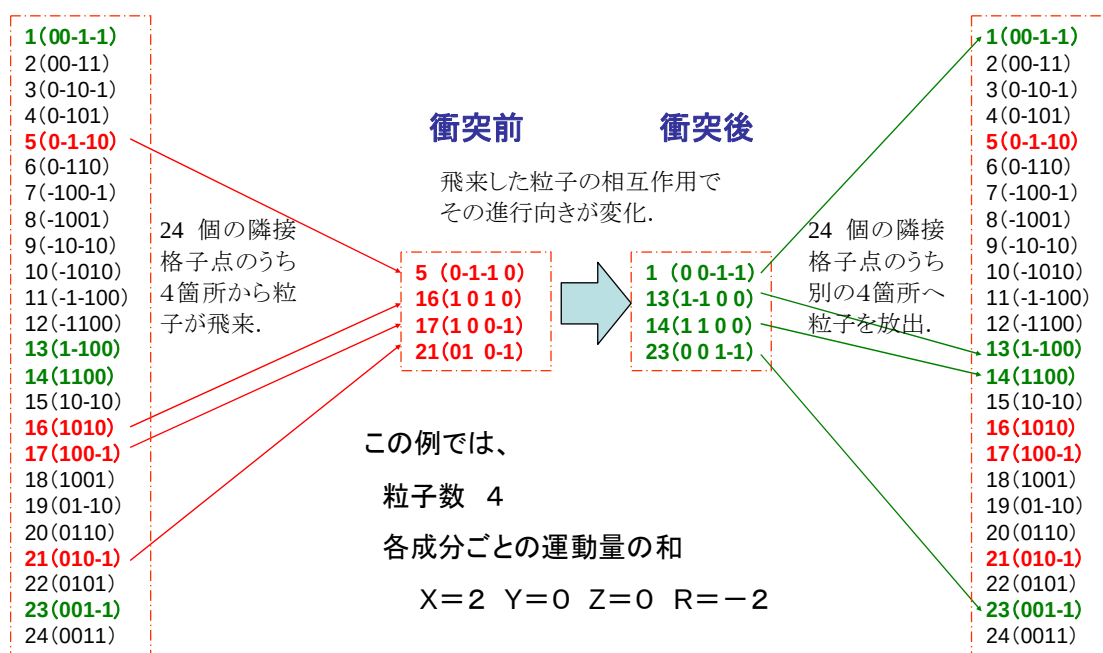
②流体内格子点における仮想粒子の並進と固体壁衝突時の反射

流体内における仮想粒子の並進運動については、例えば、速度ベクトル(1, -1, 0, 0)をもつ仮想粒子が、時刻 t に格子点(X, Y, Z, R)に居て、かつ、行き先格子点(X+1, Y-1, Z+0, R+0)が液体であれば、その仮想粒子は、時刻 $t+1$ に行き先格子点(X+1, Y-1, Z+0, R+0)に移動する。また、固体壁にぶつかったときの仮想粒子の運動については、例えば、速度ベクトル(1, -1, 0, 0)をもつ仮想粒子が、時刻 t に格子点(X, Y, Z, R)に居て、そのとき、行き先格子点(X+1, Y-1, Z+0, R+0)が固体であれば、その仮想粒子は、時刻 $t+1$ に同じ格子点(X, Y, Z, R)で反転した速度ベクトル(-1, 1, 0, 0)をもつ。これは、固体壁の一部をなす格子点が仮想粒子の進行方向前方にあれば、仮想粒子は、その格子点に到達する半分の距離の地点で反射されて戻ってくるモデルを採用したことになる。

③流体内格子点における仮想粒子どうしの衝突

FCHC モデルによって時間発展計算を行う場合、各格子点には、毎時間ステップごとに、24 個の向きから仮想粒子がやってくる可能性がある。このときの格子点の状態は、24 個の向きのそれぞれについて、その向きに進行する仮想粒子が存在するか(1)否か(0)で表現できるので、24 個の 1 か 0 の成分をもつ順列に 1 対 1 対応させることができる。従って、状態の種類は、2 の 24 乗 = 16777216 通りが可能である。

衝突の前後では、例えば、向き 5, 16, 17, 21 に進行する 4 粒子が存在していた状態(000100011000000000010000)が、衝突時の粒子間相互作用によって、向き 1, 13, 14, 23 に進行する 4 粒子が存在する状態(010000000011000000000001)にステップ的に変化する。このときの FCHC モデルにおける仮定は、粒子数と各運動量成分の保存である。この例の場合、衝突前後で粒子の数は 4 であり変化しない。また、各運動量成分は、衝突前が、向き 5:(0, -1, -1, 0) + 向き 16:(1, 0, 1, 0) + 向き 17:(1, 0, 0, -1) + 向き 21:(0, 1, 0, -1) = (2, 0, 0, -2) で、衝突後が、向き 1:(0, 0, -1, -1) + 向き 13:(1, -1, 0, 0) + 向き 14:(1, 1, 0, 0) + 向き 23:(0, 0, 1, -1) = (2, 0, 0, -2) であり、衝突の前後で、各運動量成分の和が保存されている。



④遺伝的アルゴリズム解釈による衝突則の簡略化

上記の例では、4 つの粒子間で運動量が交換された。しかし一般に、格子点に多数(最大 24 個)の粒子がやってきた場合、それらすべての粒子間における運動量交換の可能性を計算するのは面倒であり、計算時間の長時間化と消費電力量の増加を招く。そこで、以下に述べる遺伝的アルゴリズム解釈によって 2 個の粒子間における運動量交換のみをモデル化することにした。

仮想粒子の 4 つの速度成分を X, Y, Z, R とする。例えば、 $(X, Y, Z, R) = (1, 0, -1, 0)$ の速度をもっている仮想粒子を考えると、これは、「+X の向進みたい性質」と「-Z の向きに進みたい性質」の 2 つを兼ね備えた染色体を、隣接格子点にいた前世代の親が、その格子点に運んできたものと解釈できる。すなわち、この染色体は、 $(1, 0, -1, 0)$ という遺伝子型をもつ。一般には、各桁が 1, 0, -1 のいずれかの値をとりうる 3 値 4 桁の順列によって、この種の染色体の遺伝子型を表現できることがわかる。

⑤“交叉”に関する考察

各格子点には、毎時間ステップごとに最大 24 個の染色体が与えられ、それらの間では、例えば“交叉”が生じる。“交叉”は、X 成分, Y 成分, Z 成分, R 成分のそれぞれどうしの交換であるから、その格子点全体としては、成分ごとの合計量が保存される。これは、仮想粒子の質量が全て同一であると仮定すれば、“運動量保存則”に他ならない。

しかし“交叉”の結果、例えば、 $(1, 0, -1, 1)$ のような遺伝子型をもつ染色体が生じるかもしれない。この例の場合、1 成分の値しか 0 になっていない。「+X の向きに進みたい性質」と「-Z の向きに進みたい性質」と「+R の向きに進みたい性質」が同時に発現して $(1, 0, -1, 1)$ の向きに移動しようとしても、それは FCHC モデルで許された速度ベクトルの向きではないので移動できない。すなわち、隣接格子点に移動して次の世代のために新しい染色体を残すことができない。また、“交叉”の結果、2 成分が 0 の遺伝子型をもつ染色体がうまく生じたとしても、前述した「ひとつの格子点上では、全く同じ速度ベクトルをもつ仮想粒子は同時に 2 個以上存在できない」という FCHC モデルの条件があり、当該交叉に関与していない第 3 の粒子の動きによってはこの条件を満たせない場合も生じ得る。これらの交叉は、粒子を隣接格子点に移動させて次の世代のための新しい染色体を残すことができないので粒子の消滅を意味し、“粒子数保存則(質量保存

則)”)を満たせない。従って、遺伝的アルゴリズムの適応度評価の段階でこれらの交叉の実現結果は無かったことにするとともに、交叉に関与した 2 粒子は、粒子間相互作用を起こさずに衝突前の進行向きのまま通過(並進)させることにする。

⑥“逆位”に関する考察

ある格子点にやってきた 2 個の粒子について、そのある同じ方向成分が「1」と「-1」であったとする。この場合、どちらの粒子についても残り 3 個の方向成分のうち 2 個は「0」のはずであるから、少なくともひとつの同じ方向成分が必ず「0」と「0」になっているはずである。これを遺伝的アルゴリズムの用語で書けば、「2 つの染色体の対立遺伝子座に「1」と「-1」が現れた場合には、必ず、同じ染色体の別の対立遺伝子座において「0」と「0」が現れているはずである」ということになる。この場合、「1と-1」と「0と0」を置き換えることができる。こうしても、各染色体におけるゼロの数は 2 個に保存され、かつ、各成分の運動量もそれぞれ保存されるからである。これは、遺伝的アルゴリズムにおける“逆位”に対応している。ただし、前述した「ひとつの格子点上では、全く同じ速度ベクトルをもつ仮想粒子は同時に 2 個以上存在できない」という FCHC モデルの条件があり、当該逆位に関与していない第 3 の粒子の動きによってはこの条件を満たせない場合も生じ得る。従って、遺伝的アルゴリズムの適応度評価の段階でこのような逆位の実現結果は無かったことにするとともに、逆位に関与した 2 粒子は、粒子間相互作用を起こさずに衝突前の進行向きのまま通過(並進)させることにする。

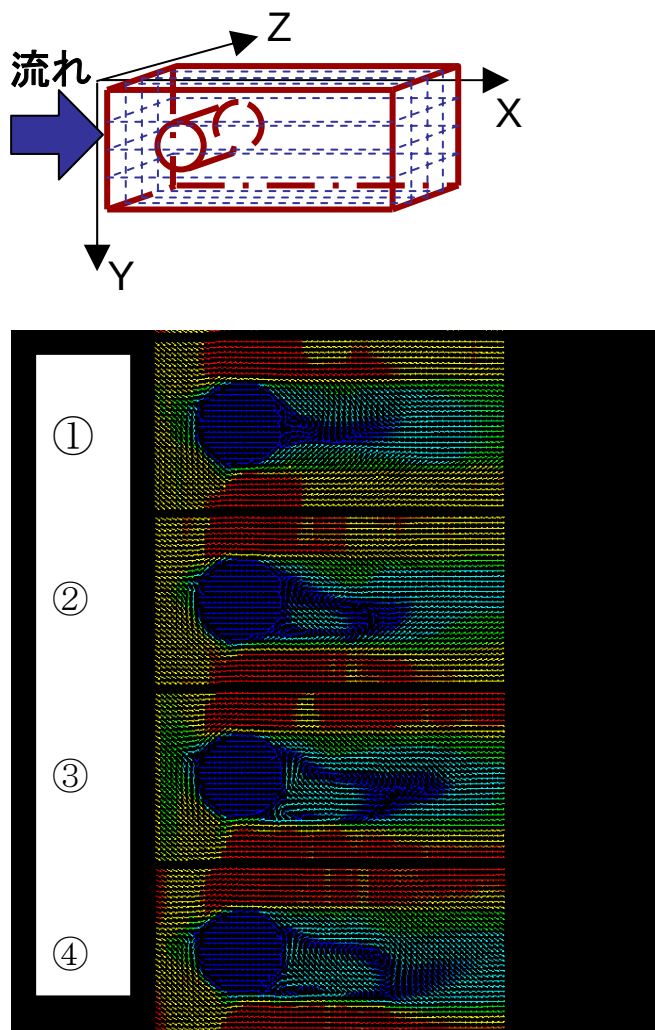
⑦“突然変異”に関する考察と逆解析

“突然変異”についても、有益な考察ができる。ある格子点にやってきた仮想粒子の速度成分について、「-1」を「1」に変えたり、「1」を「-1」に変えたりする“突然変異”は、4 成分のうち 2 個が「0」であるという条件を保存できる。この場合、個々の衝突過程において運動量保存則は破れることになるが、確率的に「1」と「-1」の変更がバランスするようにすれば、適当な時空間において平均化する格子ガス法の場合、シミュレーション結果においては、運動量保存則が満たされているはずであり問題はない。さらに、この“突然変異”は、要するに、各格子点においてランダムな向きに揺動力を与えているものなので、「非平衡系統計力学における揺動散逸定理」で示されるように、この“突然変異確率”を制御することで、流体の粘性を制御できる可能性があって、大変興味深い。また、「1」と「-1」の変更確率がわざとバランスしないように設定すれば、それは、ある向きに流体を加速していることになり、計測融合シミュレーションでは、“測定値”と“シミュレーション値”が一致するまでの過渡的な操作手段として利用することができる。

以上のように、突然変異に関する遺伝演算子が、計測融合シミュレーションにおける逆解析の実現に重要であり、具体的な制御方法を鋭意研究中である。

(4) 平成 21 年度進捗状況

平成 21 年度は, 遺伝的アルゴリズムの発想に基づく計算モデルを数種類構築し, 3 次元シミュレーションの試験的な比較計算を行った.



上図のような 3 次元流路中に水平円柱を配置し, 内部の流体を静止させる. 次に左側から流体を注入しはじめたときの過渡的な円柱後流の動きを計算すると, ある Z 断面で右図のような結果が得られた. (格子点数は, X 方向 512, Y 方向 256, Z 方向 256, R 方向 4)現在, このような試験計算の途上であり, 計算モデルを改良中である.

3.2.3. カルマンフィルタを用いた配管内の腐食同定

(1) 目標・計画

配管設備は家庭用から原子力発電所のような大型施設まで様々な施設に使用されている。これらの配管において、配管内部の腐食を広範囲かつ精度よく検出可能な非破壊検査技術が求められている。直接配管に衝撃力を与える場合に生じる弾性波は、腐食がない場合と比べて伝播する弾性波の波形に違いが生じる。これは腐食すると配管の断面形状および腐食部の材質が変化するためである。ある点を通過する弾性波の観測はひずみゲージを使用するため簡便であると考えられる。

本研究では、配管に衝撃力を加えたときに観測されるひずみから、大域的な腐食の位置と大きさを同定する逆問題を、カルマンフィルタと有限要素法を用いて解く^{(1)~(2)}。数値シミュレーションにより、提案する本手法の有効性を示す。

(2) 意義・国際社会との比較

カルマンフィルタを用いた最適化の研究は非常に多いが、この技術を有限要素法と組み合わせて腐食位置の同定に応用した例は、筆者らの知る限り存在しない。腐食は多くの構造物で問題になっているが、腐食位置は直接的には観察できない場所にあることが多く、間接的な測定データから同定する必要がでてくる。本研究はその意味で実用的意義が高いと考える。

(3) 研究内容

(a) カルマンフィルタを用いた逆解析

ひずみを観測量として使用する本手法において、含まれる誤差が問題となってくる。そこで本手法では、観測量の信頼度に対し重みを考慮した解析を行うことができるカルマンフィルタを採用した。カルマンフィルタを用いて腐食を同定する方法について説明する。

状態方程式と観測方程式を次式で表す。

$$x_{t+1} = x_t \quad (1)$$

$$z_t = h_t(x_t) + v_t \quad (t=1,2,\dots,N) \quad (2)$$

t はカルマンフィルタの段階であり、 N はカルマンフィルタの総段階数である。 x_t は腐食の位置と大きさを表す状態量ベクトル(以降腐食状態量と呼ぶ)であり次式で与えられる。

$$x_t = \begin{pmatrix} l \\ w \end{pmatrix} \quad (3)$$

l は配管端点から腐食までの長さを表す。 w は腐食の幅を表す。 z_t は観測ベクトルで各観測点でのひずみの値を表す。 v_t は平均値が 0、共分散行列が R_t のガウス分布に従う観測誤差である。

$h_t(x_t)$ は z_t と x_t を関連付ける既知の非線形関数である。

つぎに(1)、(2)式を拡張カルマンフィルタのアルゴリズムに適用する。観測量 z_t が与えられたときの事後推定量 $\hat{x}_t$ は次式で与えられる。

$$\hat{x}_t = \bar{x}_t + K_t(z_t - h_t(\bar{x}_t)) \quad (4)$$

$\bar{x}$ は事前推定量である。ここで、

$$K_t = P_t H_t^T R_t^{-1} \quad (5)$$

$$H_t = \left. \frac{\partial h_t(x_t)}{\partial x_t} \right|_{x_t = \bar{x}_t} \quad (6)$$

である。 P_t は推定誤差の共分散行列を表し、次式で与えられる。

$$P_t = M_t - M_t H_t^T (H_t M_t H_t + R_t)^{-1} H_t^T M_t \quad (7)$$

M_t は事前推定量の誤差共分散である。 $\bar{x}_{t+1}$ と M_{t+1} は次式を適用することにより得られる。

$$\bar{x}_{t+1} = \hat{x}_t \quad (8)$$

$$M_{t+1} = P_t \quad (9)$$

カルマンフィルタのステップを進めることにより、より確からしい腐食状態量を推定することができる。

本手法の有効性を検証するため、有限要素法を用いて数値シミュレーションを行う。直管とエルボ管の2つの配管を解析モデルとする。配管の材料としてステンレスを想定し、ヤング率 $E = 201 \text{ GPa}$ 、質量定数 $\rho = 7860 \text{ kg/m}^3$ 、ポアソン比 $\nu = 0.28$ とした。 $l = 0.1875$ 、 $w = 0.125$ を真の腐食状態量とした。 Fig.1 に示す最大荷重 1000 N の衝撃力を Fig.2, Fig.3 の A 点に加えた。 yz 平面での対称性を利用し、1/2 に分割した Fig.2, Fig.3 の三次元の配管を考える。なお Fig.3 のエルボ管曲がり部の長さは配管断面の中心を通る長さである。弾性波の伝播解析を行い、各観測点でひずみの時間変化を取得した。観測点の位置を Fig.2, Fig.3 に示す。

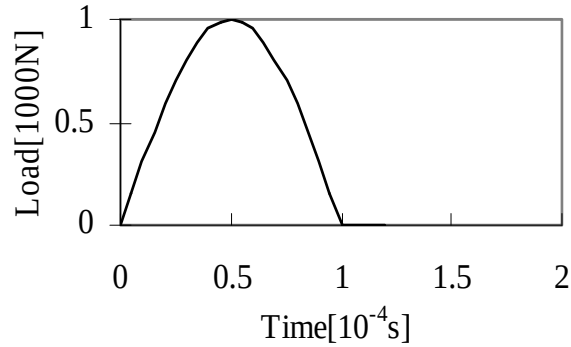


Fig.1 Impact Force

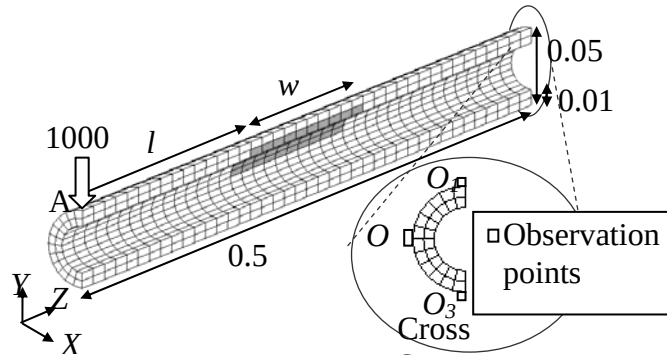


Fig.2 Analysis model of straight pipe

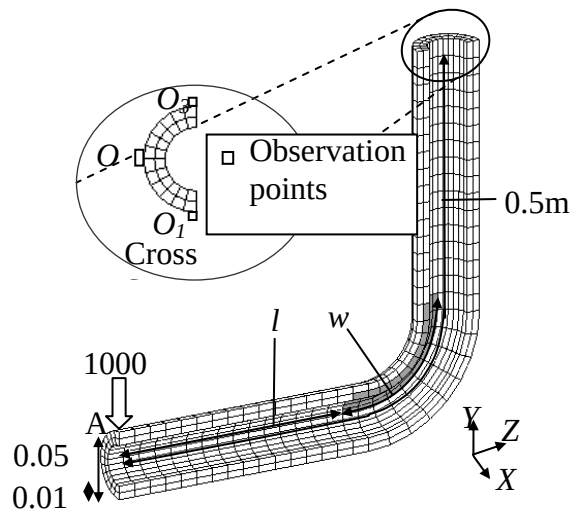


Fig.3 Analysis model of elbow pipe

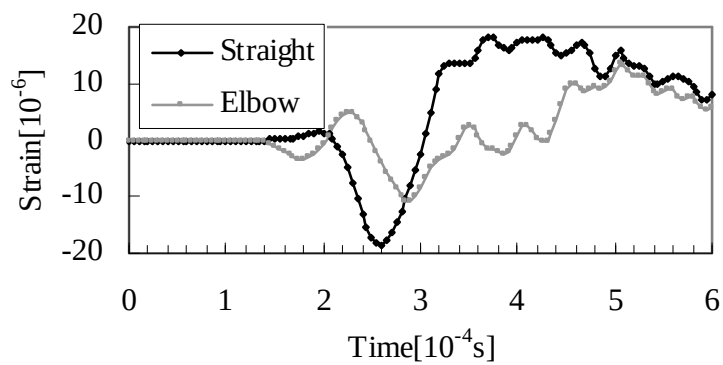


Fig.4 Time variation of Strain at O_1

初期値 $\bar{x}_0$ として, l と w をそれぞれ $0 \sim 0.5$ の範囲で 0.0125 刻みの値を選択し, 推定を行った. 得られた各観測点のひずみ(例として O_1 のひずみの時間変化を Fig.4 に示す.) に平均値 0 , 標準偏差 1×10^{-7} のガウス分布に従う誤差を加えた量を観測量とした. 全ての観測点における観測誤差 v_i は観測量に加えた値と等しい値の 1×10^{-7} とした. M は先験情報が無いものとし, それぞれ 0.25 とした. モデル Fig.2 の同定結果を Fig.5 に示す. 図中の点は, l , w の正解の値との差が,

共に 0.00625 以内に収束した場合の初期値を表す.

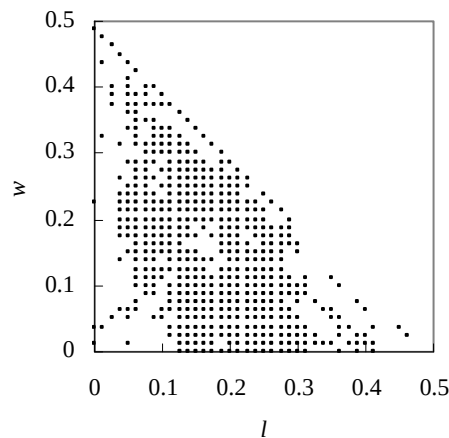


Fig.5 Initial values for successful estimation (straight pipe)

次に曲がり部のある配管で本手法が適用できるか検証するため Fig.3 のモデルで推定を行った. 結果を Fig.6 に示す. Fig.5, Fig.6 共に十分な収束結果が得られたと考えられる.

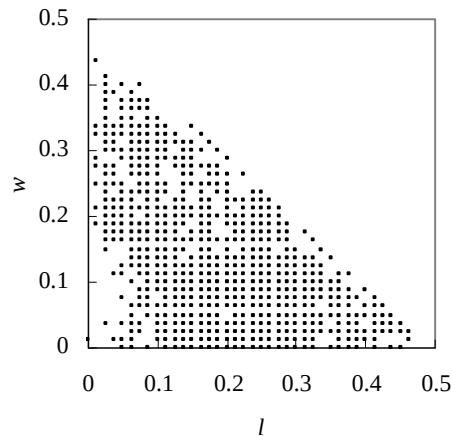


Fig.6 Initial values for successful estimation (elbow pipe)

(4) 平成 21 年度進捗状況

配管に衝撃力を与えたときのひずみからカルマンフィルタと有限要素法を併用して配管内の大域的な腐食を同定する手法を提案し, 様々な初期値から推定を行うことにより, 収束性を示した. また, モデル形状の違いによる適用性を示した.

参考文献

- (1) 青木 繁, 天谷 賢治, 照井 文彦, “カルマンフィルタによる弾／粘塑性体特性値の同定”, 日本機械学会論文集, A編, 64-618, pp.197-201(1998-2)
- (2) 村上 章, 登坂 宣好, 堀 宗朗, 鈴木 誠, 有限要素法・境界要素法による逆問題解析, (2002), コロナ社

3.3.4. 複合材料における材料同定

(1) 目標・計画

従来の材料定数同定は、簡単な形状を持つ試験片への単軸実験で得られた応力・ひずみデータを基に行われてきた。しかし複合材料における変形は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は、試験片の形状や構造ならびに実験の荷重条件を考慮した上で行われなければならない。そこで本研究では、複合材料試験片を連続体力学的に評価し材料定数の同定を行う、エネルギー法の開発を行った。19年度には、エネルギー法の解析手法として、擬似逆行列による確定的な手法に続いてカルマンフィルタによる確率的手法を開発し、両手法の長短所を数値解析を通じて分析した。これまでの確率的手法は試験片境界表面の測定誤差のみをモデル化していたため、内部ひずみの測定誤差が大きい場合材料同定が思うようにいかなかったため、20年度には、内部ひずみの測定誤差を考慮した確率的手法の開発を行いさらに実験にて有効性を検証した。今年度は、確率的手法と確定的手法の差異を理論的見地から検証し、さらに非線形材料定数同定へ応用することを目標とする。

(2) 意義・国際社会との比較

試験片の形状・構造、実験の荷重条件、試験機の性能および測定誤差を統合的に考慮し材料同定を行う手法は確立されていないため、本研究の意義は大変高い。研究者は材料同定分野においてこれまで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

$$\{M\} \boldsymbol{\sigma} = \{M\} \mathbf{Q} \{M\} \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (1)$$

で表される場合を考える。ここで $\boldsymbol{\sigma}$ 、 $\mathbf{Q}$ 、 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 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 $\{M\} \mathbf{q}$ とすると、大域的座標系における応力-ひずみ関係は

$$\{G\} \boldsymbol{\sigma} = \{G\} \mathbf{Q}(\boldsymbol{\theta}; \{M\} \mathbf{q}) \{G\} \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (2)$$

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

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

エネルギー法は、試験片に加えられた仕事 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

$$\delta \Delta \Phi = \delta \Delta U - \delta \Delta W, \quad (4)$$

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

$$\delta \Delta U = \frac{1}{2} \int_V \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{Q}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{q}_M) \Delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \left\{ \frac{1}{2} \sum_i^{n_s} \sum_{j=1}^{n_s} \int_V \Delta \varepsilon_i \Delta \varepsilon_j dV \mathbf{h}_{ij}(\boldsymbol{\theta}) \right\} \mathbf{q}_M, \quad (5a)$$

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

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は全て内部ひずみエネルギー

一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。

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

ここで

$$\mathbf{g}(\Delta\boldsymbol{\varepsilon}; \theta) = \frac{1}{2} \sum_i^{n_s} \sum_{j=1}^{n_s} \int_V \Delta\varepsilon_i \Delta\varepsilon_j dV \mathbf{h}_{ij}(\theta), \quad (7)$$

実験による $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^k$ と $\delta\Delta W^k$ をそれぞれ

$$\tilde{\mathbf{z}}_{\varepsilon}^k = \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^k + \mathbf{v}_{\varepsilon}^k \quad (8a)$$

$$\tilde{\mathbf{z}}_W^k = \delta\Delta W^k + v_W^k \quad (8b)$$

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

3-2 確定的手法による材料同定

確定的手法では観測値から直接材料定数を同定するため、それぞれの観測値を $\mathbf{z}_{\varepsilon}^k \equiv \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^k$ 、 $\mathbf{z}_W^k \equiv \delta\Delta W^k$ と仮定するため、

$$(\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \mathbf{q}_M = \tilde{\mathbf{z}}_W^k \quad (9)$$

ここで $\tilde{\mathbf{g}}^k = \mathbf{g}(\tilde{\mathbf{z}}_{\varepsilon}^k; \theta)$ 。 k 番目までの測定が得られた場合

$$\tilde{\mathbf{G}}^{1:k} \mathbf{q}_M = \tilde{\mathbf{z}}_W^{1:k}, \quad (10)$$

ここで $\tilde{\mathbf{G}}^{1:k} = [\tilde{\mathbf{g}}^1, \dots, \tilde{\mathbf{g}}^k]^T$ 。 $\mathbf{q}_M$ は

$$\mathbf{q}_M = (\tilde{\mathbf{G}}^{1:k})^+ \tilde{\mathbf{z}}_W^{1:k} \quad (11)$$

によって同定される。ここで $(\tilde{\mathbf{G}}^{1:k})^+$ は $\tilde{\mathbf{G}}^{1:k}$ の擬似逆行列

$$(\tilde{\mathbf{G}}^{1:k})^+ = \left[(\tilde{\mathbf{G}}^{1:k})^T (\tilde{\mathbf{G}}^{1:k}) \right]^{-1} (\tilde{\mathbf{G}}^{1:k})^T \quad (12)$$

である。

擬似逆行列法をより一般化した反復逆行列法は、まず $k-1$ 番目と k 番目までの測定から式を得る。

$$\bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} = (\tilde{\mathbf{G}}^{1:k-1})^+ \tilde{\mathbf{z}}_W^{1:k-1} \quad (13a)$$

$$\bar{\mathbf{q}}_M^k = (\tilde{\mathbf{G}}^{1:k})^+ \tilde{\mathbf{z}}_W^{1:k} \quad (13b)$$

k 番目を反復的に $k-1$ 番目の式から表すと、

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{q}}_M^k &= (\tilde{\mathbf{G}}^{1:k})^+ \tilde{\mathbf{z}}_W^{1:k} = \left[(\tilde{\mathbf{G}}^{1:k})^T (\tilde{\mathbf{G}}^{1:k}) \right]^{-1} (\tilde{\mathbf{G}}^{1:k})^T \tilde{\mathbf{z}}_W^{1:k} \\
&= \left(\left[\tilde{\mathbf{G}}^{1:k-1}, (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right]^T \left[\tilde{\mathbf{G}}^{1:k-1} \right] \right)^{-1} \left[\tilde{\mathbf{G}}^{1:k-1}, (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right]^T \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{z}}_W^{1:k-1} \\ \tilde{z}_W^k \end{bmatrix} \\
&= \left[\sum_{\kappa=1}^{k-1} \tilde{\mathbf{g}}^\kappa (\tilde{\mathbf{g}}^\kappa)^T + \tilde{\mathbf{g}}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right]^{-1} \left[(\tilde{\mathbf{G}}^{1:k-1})^T \tilde{\mathbf{z}}_W^{1:k-1} + \tilde{\mathbf{g}}^k \tilde{z}_W^k \right] \\
&= \left[\sum_{\kappa=1}^{k-1} \tilde{\mathbf{g}}^\kappa (\tilde{\mathbf{g}}^\kappa)^T + \tilde{\mathbf{g}}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right]^{-1} \left[(\tilde{\mathbf{G}}^{1:k-1})^T \tilde{\mathbf{G}}^{1:k-1} \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} + \tilde{\mathbf{g}}^k \tilde{z}_W^k \right] \quad (14) \\
&= \left[\sum_{\kappa=1}^{k-1} \tilde{\mathbf{g}}^\kappa (\tilde{\mathbf{g}}^\kappa)^T + \tilde{\mathbf{g}}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right]^{-1} \left[\sum_{\kappa=1}^{k-1} \tilde{\mathbf{g}}^\kappa (\tilde{\mathbf{g}}^\kappa)^T \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} + \tilde{\mathbf{g}}^k \tilde{z}_W^k \right] \\
&= \left[\mathbf{\Gamma}^{k-1} + \tilde{\mathbf{g}}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right]^{-1} \left[\mathbf{\Gamma}^{k-1} \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} + \tilde{\mathbf{g}}^k \tilde{z}_W^k \right] \\
&= \mathbf{A}_{PI}^k \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} + \mathbf{c}_{PI}^k \tilde{z}_W^k
\end{aligned}$$

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、

$$\mathbf{q}_M^k = \mathbf{I} \mathbf{q}_M^{k-1} \quad (15)$$

と表される。測定値は測定誤差をモデル化することから、

$$\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{z}}_\varepsilon^k; \theta) \cong \mathbf{g}(\Delta \varepsilon^k; \theta) + \mathbf{g}(\mathbf{v}_\varepsilon^k; \theta) \quad (16)$$

を仮定すると、測定モデルを次のように得る。

$$\tilde{z}_W^k = \left\{ \tilde{\mathbf{g}}^k - \mathbf{g}(\mathbf{v}_\varepsilon^k; \theta) \right\}^T \mathbf{q}_M^k + v_W^k \quad (17)$$

本定式化で問題になるのが、測定モデルの係数 $\left\{ \tilde{\mathbf{g}}^k - \mathbf{g}(\mathbf{v}_\varepsilon^k; \theta) \right\}$ 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。

$$\bar{\mathbf{q}}_M^{k|k-1} = \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1|k-1} \quad (18a)$$

$$\mathbf{P}^{k|k-1} = \mathbf{P}^{k-1|k-1} \quad (18b)$$

測定更新における推定値は、期待値が

$$E \langle \mathbf{q}_M^k \rangle := E \langle \mathbf{q}_M^k \rangle + E \left\langle \mathbf{K}^k \left[\tilde{z}_W^k - \left\{ \tilde{\mathbf{g}}^k - \mathbf{g}(\mathbf{v}_\varepsilon^k; \theta) \right\}^T \mathbf{q}_M^k - v_W^k \right] \right\rangle \quad (19)$$

であることから

$$\bar{\mathbf{q}}_M^{k|k} = \bar{\mathbf{q}}_M^{k|k-1} + \mathbf{K}^k \left\{ \tilde{z}_W^k - \left(\tilde{\mathbf{g}}^k \right)^T \bar{\mathbf{q}}_M^{k|k-1} \right\} \quad (20)$$

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。

$$\begin{aligned}\mathbf{e}^{k|k} &= \mathbf{q}_M - \mathbf{q}_M^k \\ &= \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{K}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right\} \mathbf{e}^{k|k-1} - \mathbf{K}^k \left\{ \mathbf{v}_W^k - \mathbf{g}(\mathbf{v}_\varepsilon^k; \theta)^T \mathbf{q}_M^k \right\}\end{aligned}\quad (21)$$

そこで残差の期待値は

$$\begin{aligned}E \left\langle \mathbf{e}^{k|k} (\mathbf{e}^{k|k})^T \right\rangle &= \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{K}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right\} E \left\langle \mathbf{e}^{k|k-1} (\mathbf{e}^{k|k-1})^T \right\rangle \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{K}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right\}^T \\ &\quad + \mathbf{K}^k E \left\langle (\mathbf{v}_W^k)^2 \right\rangle (\mathbf{K}^k)^T + \mathbf{K}^k \sum_{i=1}^4 (q_M^{k|k-1})_i^2 E \left\langle g_i(\mathbf{v}_\varepsilon^k; \theta)^2 \right\rangle (\mathbf{K}^k)^T\end{aligned}\quad (22)$$

となり、共分散行列は

$$\begin{aligned}\mathbf{P}^{k|k} &= \mathbf{P}^{k|k-1} - \mathbf{P}^{k|k-1} \tilde{\mathbf{g}}^k (\mathbf{K}^k)^T - \mathbf{K}^k \tilde{\mathbf{g}}^{kT} \mathbf{P}^{k|k-1} \\ &\quad + \mathbf{K}^k \left\{ \tilde{\mathbf{g}}^{kT} \mathbf{P}^{k|k-1} \tilde{\mathbf{g}}^k + P_W^k + \sum_{i=1}^4 (q_M^{k|k-1})_i^2 (P_g^k)_i \right\} (\mathbf{K}^k)^T\end{aligned}\quad (23)$$

と導出される。カルマンゲインによる共分散の微分値

$$\begin{aligned}\frac{\partial \text{Tr}(\mathbf{P}^{k|k})}{\partial \mathbf{K}^k} &= -2 \left\{ (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \mathbf{P}^{k|k-1} \right\}^T \\ &\quad + 2 \mathbf{K}^k \left\{ (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \mathbf{P}^{k|k-1} \tilde{\mathbf{g}}^k + P_W^k + \sum_{i=1}^4 (q_M^{k|k-1})_i^2 (P_g^k)_i \right\}\end{aligned}\quad (24)$$

をゼロするカルマンゲインは

$$\mathbf{K}^k = (\mathbf{P}^{k|k-1})^T \tilde{\mathbf{g}}^k \left\{ (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \mathbf{P}^{k|k-1} \tilde{\mathbf{g}}^k + P_W^k + \sum_{i=1}^4 (q_M^{k|k-1})_i^2 (P_g^k)_i \right\}^{-1}\quad (25)$$

となる。式(25)を式(23)に代入すると共分散行列は

$$\mathbf{P}^{k|k} = \mathbf{P}^{k|k-1} - \mathbf{K}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \mathbf{P}^{k|k-1}\quad (26)$$

と簡易化される。式(18)による時間更新と測定値が得られるたびの式(25)、(20)、(26)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

$$\bar{\mathbf{q}}_M^k = \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} + \mathbf{K}^k \left\{ \mathbf{z}_W^k - (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} \right\}\quad (27a)$$

$$\mathbf{P}^k = \mathbf{P}^{k-1} - \mathbf{K}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \mathbf{P}^{k-1}\quad (27b)$$

$$\mathbf{K}^k = (\mathbf{P}^{k-1})^T \tilde{\mathbf{g}}^k \left\{ (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \mathbf{P}^{k-1} \tilde{\mathbf{g}}^k + P_W^k + \sum_{i=1}^4 (q_M^{k-1})_i^2 (P_g^k)_i \right\}^{-1}\quad (27c)$$

ここで

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{q}}_M^k &= \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} + \mathbf{K}^k \left\{ \mathbf{z}_W^k - (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} \right\} \\ &= \left[\mathbf{I} - \mathbf{K}^k (\tilde{\mathbf{g}}^k)^T \right] \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} + \mathbf{K}^k \mathbf{z}_W^k \\ &= \mathbf{A}_{KF}^k \bar{\mathbf{q}}_M^{k-1} + \mathbf{c}^k \mathbf{z}_W^k\end{aligned}\quad (28)$$

3-4 確定的手法と確率的手法による数値比較

確定的手法と確率的手法の比較においては、まず異なる確率的手法における事前情報を用いて検討する。人工的にノイズを加えた測定値から確定的手法と確率的手法を用いて同定した結果を図1に示す。確率的手法におけるケース1-3での事前情報は、ケース1 ($[\bar{q}_1^0, \bar{q}_2^0] = [300, 500]$),

$[P_{11}^0, P_{22}^0] = [1, 1]$)、ケース2 ($[\bar{q}_1^0, \bar{q}_2^0] = [330, 460]$, $[P_{11}^0, P_{22}^0] = [200, 200]$)、ケース3 ($[\bar{q}_1^0, \bar{q}_2^0] = [0, 0]$, $[P_{11}^0, P_{22}^0] = [10^{10}, 10^{10}]$) が用いられた。結果から、まず事前情報に拘らず確定的手法、確率的手法ともに真の定数(Exact Solution)に収束しているのが分かる。ケース1は、情報が正確なために最初から真の定数を、ケース2は事前情報から徐々に同定している。ケース3は途中から確定的手法と同じ結果になっているのが分かる。確定的手法では事前情報を用いないため、事前情報を用いなければ確率的手法は確定的手法と変わらないことが分かる。

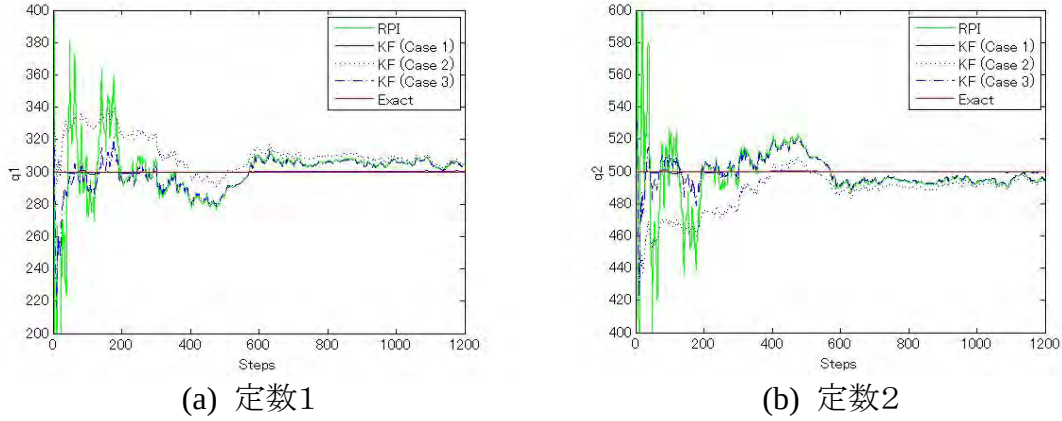


図1 異なる事前情報による結果

次に異なる測定情報を用いた場合の結果を図2に示す。ここではケース1 ($[(P_g)_1, (P_g)_2] = [0.02, 0.02]$, $P_w = 20$)、ケース2 ($[(P_g)_1, (P_g)_2] = [2, 2]$, $P_w = 2000$)、ケース3 ($[(P_g)_1, (P_g)_2] = [20, 20]$, $P_w = 20000$) が用いられた。ケース1では測定情報を確定的に扱っているため、確定的手法とほぼ同じ結果が得られている。それに対して、ケース2では事前情報が結果に影響を与えているのが分かる。ケース3では測定情報が不確実なため収束に時間がかかるのが分かる。

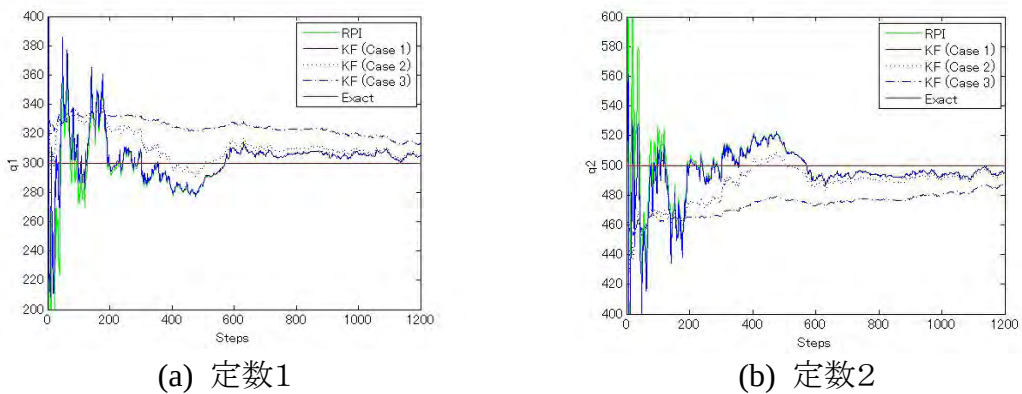


図2 異なる測定情報による結果

数値実験の最後に、異なる適切性を持つ問題による同定を行った。本問題では、測定値を次の式から生成している。

$$\tilde{\mathbf{g}}^k = \mathbf{g}^k + \mathbf{v}_g^k \quad (29a)$$

$$\tilde{\mathbf{z}}_w^k = (\mathbf{g}^k)^T \mathbf{q} = (\tilde{\mathbf{g}}^k - \mathbf{v}_g^k)^T \mathbf{q} + \mathbf{v}_w^k \quad (29b)$$

ここで、 g_i^k は一様分布の乱数 μ_i^k を用いて次の式にて生成される。

$$g_i^k = \mu_i^k (g_i^{\max} - g_i^{\min}) + g_i^{k-1} \quad (30)$$

本数値実験ではケース1 ($[g_1^{\min}, g_2^{\min}] = [0.2, 0.2]$, $[g_1^{\max}, g_2^{\max}] = [2, 2]$)、ケース2 ($[g_1^{\min}, g_2^{\min}] = [0.05, 0.2]$, $[g_1^{\max}, g_2^{\max}] = [0.5, 2]$)について検証した。ケース2はケース1に比べ逆問題が不適切であることから、適切性が確定的手法および確率的手法に及ぼす影響を調べることができる。図3にその結果を示す。まず異なる適切性においては、確率的手法のみならず、確定的手法も異なる結果となることが分かる。特に適切性が低い場合には確定的手法は妥当な解を見つけにくくなる。また比較的正確な事前情報を用いているために、確率的手法の方がいい解を常に同定しているのが伺える。先に行われた数値結果と合わせて、次のことが確定的手法と確率的手法において結論付けられる。

- 事前情報が全くない場合、確率的手法は確定的手法と同じ振る舞いを示す。また事前情報がある場合には確率的手法は事前情報の影響のもとに解を推定する。
- 測定情報が全くない場合、確率的手法は確定的手法と同じ振る舞いを示す。また測定情報がある場合には確率的手法は事前情報の影響のもとに解を推定する。
- 適切性が低い場合に情報が少なければ、良好な解を得ることはできない。

すなわち、確定的手法は特定の条件での確率的手法と捉えることができ、また不適切な問題では確率的手法しか良好な解を得ることはできないため、確率的手法を一般化手法として利用することが結論となる。

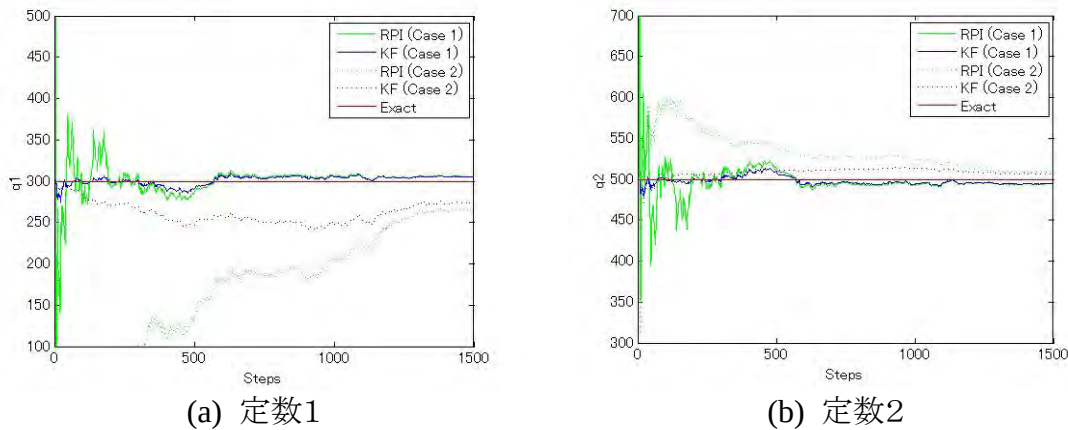
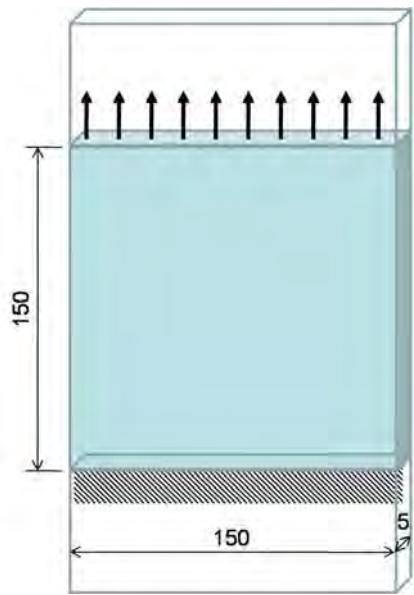
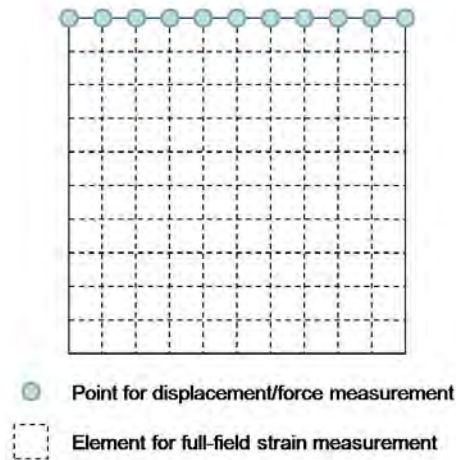


図3 異なる適切性による結果

一般化手法として確率的手法を用いることが結論付けられたのに伴い、確率的手法は複合材料AS4/3506-1の線形定数の同定に用いられた。試験片と境界条件を図4(a)に、境界の測定点と測定されたひずみ要素を図4(b)に示す。



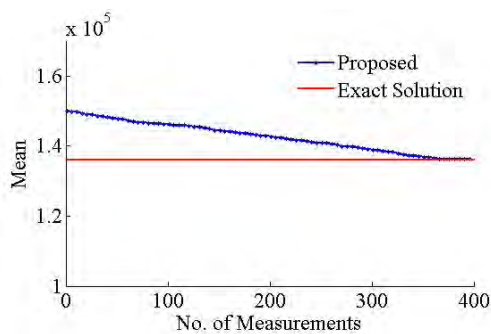
(a) 試験片と境界条件



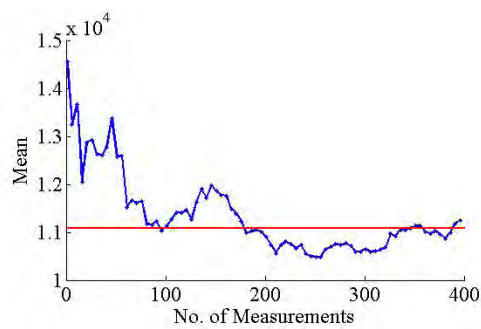
(b) 測定点と測定要素

図5 複合材料試験片引っ張り試験

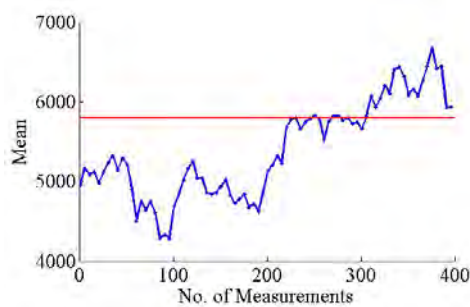
同定された材料定数の推移を図5に示す。Exact Solutionとして示されているのは既知の材料定数である。不確定さが残るものの、特に材料定数 q_{22} が既知の材料定数に収束していることが分かる。一方で q_{66} の結果が最も不安定かつ不正確である。引っ張り試験ではあまりせん断の成分が測定できないため、この不確実性も論理的に説明できる。



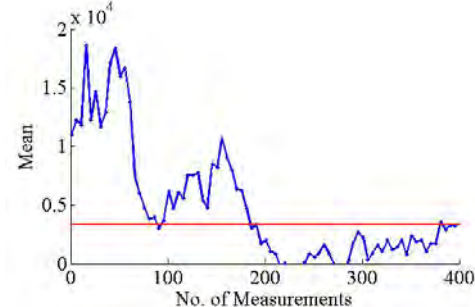
(a) q_{11}



(b) q_{22}



(a) q_{66}



(b) q_{12}

図5 AS4/3506-1材料定数同定結果

(4) 平成 21 年度進捗状況

平成 21 年度の研究では、さらに非線形定数同定、複数台のカメラによるデータフュージョンなどの新技術を開発した。また島津製作所の材料試験機を購入し、材料試験機用のソフトウェアの開発および実験による検証を即座に行っている。今後も新技術の確立、最終的な商品化へ向けて基礎研究を続けていくつもりである。

3.3.5. 表面反応のマルチスケール解析

(1) 目標・計画

本研究は表面反応を中心とした化学反応について、その反応メカニズムを反映した反応モデルを構築することを目的としている。通常、化学反応において、反応物から生成物へ至る反応機構の解析は、ある反応機構を仮定して、実験結果を基に逆問題を解くことによって行われている。しかしながら複雑な化学反応においては律速となる素反応を同定することさえ困難となり、適当な反応機構を推定するのは容易ではない。そこで、ここでは触媒反応、腐食等の表面反応について、その反応機構に関する知見を得る解析手法の開発を行う。ここではシリカ表面における酸素原子再結合反応という非常に単純な表面反応を対象として解析を行った。

(2) 意義・国際社会との比較

解析対象とする反応はシリカ表面における以下の反応である。



ここではシリカ表面が触媒の役割を果たしており、このように触媒(固体)と反応物(気体)の相が異なる反応を不均一触媒反応という。この反応が問題になる事例について以下に説明する。

宇宙往還機が大気圏に再突入する際に衝撃波後方で解離した O, N 原子が機体の断熱材コーティング表面で O₂, N₂ 等に再結合する触媒反応が空力加熱の増加に大きく影響していることがよく知られている。この触媒反応については、図 1 に示すような表面に吸着している原子と入射原子との反応である Eley-Rideal (E-R) 反応と吸着原子同士の反応である Langmuir-Hinshelwood (L-H) 反応の 2 種類の反応過程を考慮して、これまで実験、理論によるモデル化の両面から多くの研究が行われている。しかしながら、その反応メカニズムは未だに明らかにされているとは言い難い。そこで、本研究では第一原理計算及びモンテカルロ計算を用いたマルチスケール解析によって、断熱材コーティング表面での触媒反応のメカニズムについての知見を得ることを目指している。昨年度までに、触媒表面としてシリカを想定し、まず α -quartz (0001) 再構成表面に吸着している O 原子の脱離、及び熱拡散による表面移動の素過程についてモデル化を行った。本年度は E-R, L-H の両反応機構について第一原理計算による詳細な解析を行った。

本研究で扱う現象は、原子分子の電子状態($\sim 1\text{\AA}$, $\sim 1\text{ fs}$), 気体分子の入射・脱離や吸着原子の表面拡散等の素過程($\sim 1\text{ nm}$, $\sim 1\text{ ns}$), 触媒反応全体($\sim 1\text{ }\mu\text{m}$, $\sim 1\text{ }\mu\text{s}$)といった時空間的に異なる現象が相互に干渉している。このように時空間的に異なる現象を、スケール毎に適切にモデル化することによって非経験的なアプローチで表面反応を解析することが可能となり、その反応機構に関する知見を得ることが可能となる。

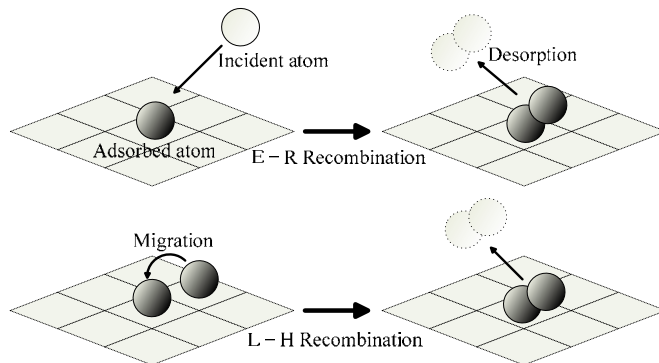


図 1: Schematic representation of E-R and L-H recombination mechanisms. Squares are adsorption sites. White particles are incoming and grey particles are adsorbed atom/molecules.

(3) 研究内容

(3-1) E-R 機構の詳細解析

E-R 反応について DFT による解析を行った。E-R 反応の解析においては、初期状態と終状態の原子移動距離が大きいこと、また最適化すべき自由度が多いことから、イメージの初期配置によって Nudged Elastic Band (NEB) 法によって求められる反応経路が大きく変わってしまい、最適な Minimum Energy Path (MEP) が得られないことが考えられる。そこで、まず E-R 反応の Potential Energy Surface (PES) を求め、初期状態、終状態、及びイメージの初期配置を決定し、CI-NEB 法によって反応経路、遷移状態の位置及び E-R 反応のエネルギー障壁を求めた。

E-R 反応の PES を図 2 に示す。縦軸、横軸はそれぞれ吸着原子の表面からの距離及び吸着原子と入射原子間の距離である。ここでは吸着サイト、吸着原子、入射原子は表面法線方向の直線上に配置されており、反応はその直線上で起こると仮定している。吸着原子の表面からの距離及び吸着原子と入射原子間の距離をパラメータとし 132 点計算を行い、それぞれの計算において最表面の酸素原子及び 2 層目のシリコン原子の位置の最適化を行った。この PES から、吸着原子の位置は入射原子との距離が 1.3Å 程度になるまでほとんど変化せず、 $1.2\sim 1.3\text{Å}$ 程度まで接近し酸素原子同士での結合を形成してから表面から離れていくという反応経路が考えられる。また、その反応経路中にはエネルギー障壁が存在していないように見える。

次に、8 イメージを用いた CI-NEB 法によって反応経路を求めた。CI-NEB 法で求めた反応経路に沿った PEC を図 2 右上に示す。CI-NEB 法の解析によって E-R 反応のエネルギー障壁は 0.03 eV と、非常に小さいことが分かった。これは、入射原子の反応性が非常に大きいためであり、このことから、E-R 反応の反応確率は入射原子と吸着原子の幾何的な条件及び入射原子の並進エネルギー等の条件によって大きく左右されると考えられる。

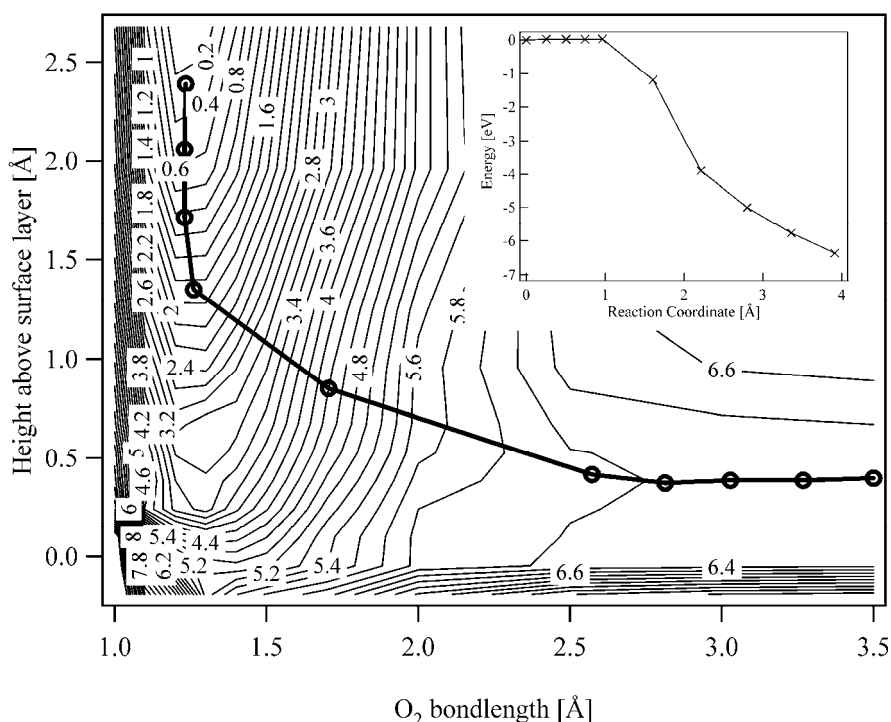


図 2: Potential energy surface (PES) for associative desorption of oxygen by E-R mechanism from 1-fold sites into an O_2 molecule with orientation perpendicular to the surface. The height above the topmost surface and the distance between the two oxygen atoms are used as coordinates of the plot. For every of the parallel O_2 molecule, atomic positions in first and second layer of the silica surface are relaxed.

(3-2) L-H 機構の詳細解析

L-H 反応についても E-R 反応と同様に PES を求め、CI-NEB 法による解析を行った。L-H 反応の PES を図 3 に示す。縦軸、横軸はそれぞれ吸着原子の表面からの距離及び吸着原子間の距離である。ここでは、2つの吸着原子は表面に平行な同一平面内にあると仮定して PES を描いている。吸着原子の表面からの距離及び吸着原子間の距離をパラメータとして 150 点計算を行い、それぞれの計算において E-R 反応の場合と同じように 2 層目のシリコン原子まで構造最適化している。この PES から、吸着原子の位置は徐々に表面から離れながら近づいて行き、 $1.3\text{ \AA}$ 程度まで接近し、酸素分子として表面から脱離して行く反応経路が考えられる。また、その反応経路中には 0.2 eV 程度のエネルギー障壁を持つ遷移状態が存在していると考えられる。次に、8 イメージを用いた CI-NEB 法によって反応経路を求めた。図 3 右上に反応経路に沿った PEC を示す。CI-NEB 法の解析に際しては 2 個の吸着原子が表面に平行な同一平面内に存在するという仮定を行わず、それぞれ独立した表面との距離を取る事ができるとしたが、PES から考えられる反応経路とイメージ位置が示す反応経路はよく一致している。このことから NEB 法による反応経路の探索は適切に行われたと考えられる。CI-NEB 法の計算結果から L-H 反応のエネルギー障壁は 0.25 eV であることが分かった。

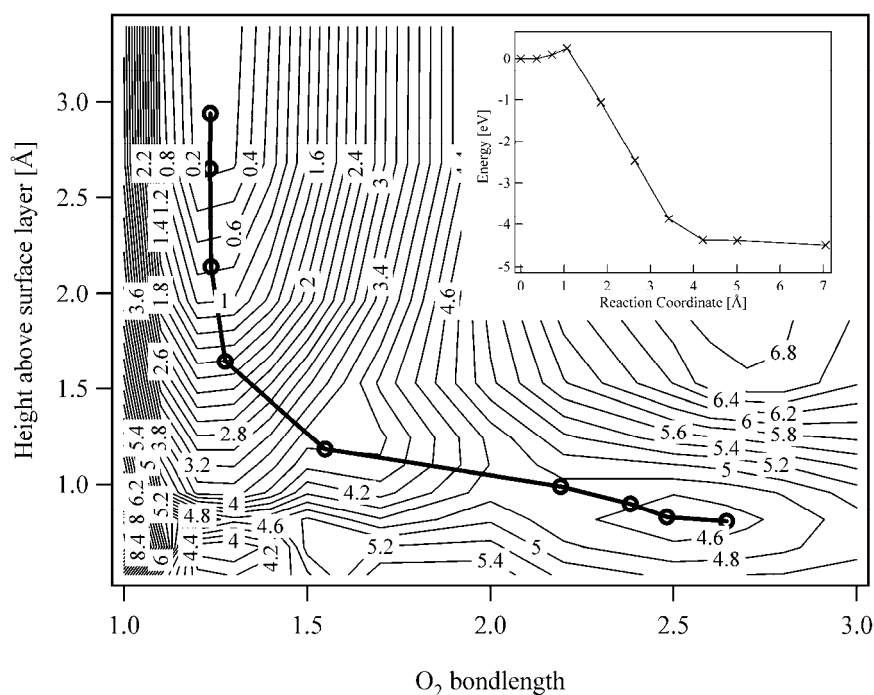


図 3: Potential energy surface (PES) for associative desorption of oxygen by L-H mechanism from two neighbouring 1-fold sites into an O_2 molecule with orientation parallel to the surface. The height above the topmost surface and the distance between the two oxygen atoms are used as coordinates of the plot. For every of the parallel O_2 molecule, atomic positions in first and second layer of the silica surface are relaxed.

ここで求めた L-H 反応のエネルギー障壁 0.25 eV は吸着原子の表面移動のエネルギー障壁 1.46 eV に比べて小さくなっている。即ち、最近接の吸着サイトに吸着原子が存在する場合、その吸着原子が他の最近接のサイトに移動する確率よりも L-H 反応が起こる確率の方が大きくなる

ということが言える. このとき, L-H 反応の律速となるのは, 隣り合う吸着サイトに吸着原子が存在する場合に再結合反応が起こる確率ではなく, 最近接の吸着サイトに吸着原子が移動してくる確率である. そこで, dense surface の単位格子 2 個を用いたスーパーセルにおいて, 吸着原子の最近接サイトに原子が移動してくる際のエネルギー障壁を CI-NEB 法によって求めたところ, 得られたエネルギー障壁は 1.12 eV となった.

図 4 に L-H 反応の反応経路をまとめる. 表面に吸着した 2 個の酸素原子は 1.46 eV のエネルギー障壁を越え, 表面での熱拡散を繰り返す. そして, 移動先の吸着サイトの近接サイトに酸素原子が吸着している場合, その吸着原子に引き寄せられる形で, 表面移動のエネルギー障壁は小さくなり, 1.12 eV となる. 近接サイトに 2 つの酸素原子が吸着している場合, お互い引かれ合うことによって, 非常に小さなエネルギー障壁, 0.25 eV によって再結合反応が起こり, 酸素分子として脱離する.

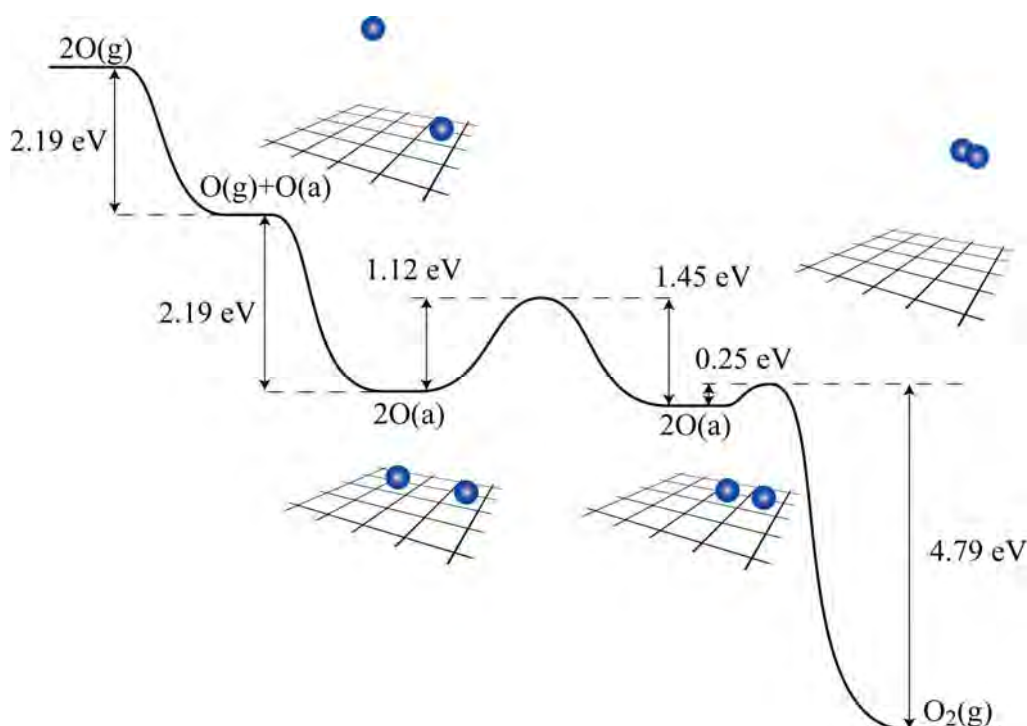


図 4: Reaction path of L-H recombination mechanism.

(4) 平成 21 年度進捗状況

シリカ表面における酸素原子再結合反応の E-R, L-H の反応機構について第一原理計算を用いてその詳細なエネルギー解析を行い, 以下の知見を得た.

- E-R 反応による再結合について, ポテンシャルエネルギー面を求め, その反応経路についての検討を行い, エネルギー障壁は非常に小さい値となることが分かった. そのため, 反応確率は入射原子と吸着原子の幾何的な条件及び入射原子の並進エネルギー等の条件によって大きく左右されると考えられる.

- L-H 反応による再結合について, ポテンシャルエネルギー面を求め, その反応経路についての検討を行った結果, そのエネルギー障壁が 0.25 eV となることが分かった.

この値は表面移動のエネルギー障壁に比べて小さく, L-H 反応の律速は「隣接する 2 つの吸着サイトに吸着原子が存在する確率」であることが分かった.

3.3. 最適化

3.3.1. 最適化に関する研究の概要

本研究では、大規模構造問題における最適化の研究、き裂、接触を含む構造の最適化の研究を行っている。

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ている。本研究では、最適化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した。また、構造の健全性評価においてはき裂の評価が重要なテーマになっている。そこで、構造最適化のベースとなるき裂、接触を含む構造の最適化の研究を行った。また、多目的最適化設計手法の実用化に向け開発を行ってきた「知識処理融合型複合熱流動数値解析による多目的最適設計システム」を用い、原子力発電所を初めとした各種プラントにおいて多用される T 次形合流管内の熱流動特性の評価を行った。また、階層メッシュと遺伝的アルゴリズムを用いたカソード防食の最適化手法を開発した。さらに従来は経験のみで設計されてきたビリヤードのキューのシミュレーション技術を開発し、最適化設計を可能とした。

3.3.2. 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^1 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^1 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 21 年度進捗状況

平成 21 年度は次のような成果が得られた。

(a) NURBS を用いた Galerkin 法による線形弾性問題の解法

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 C^1 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 C^2 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に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、基本的な問題に対する検証を終えた。本研究は、今後、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することを目指して続けていく予定である。

(b) 粒子法による非定常 Navier-Stokes 流れ場のシミュレーションと形状最適化の試み

非定常な流れ場をシミュレーションする方法として、粒子法が注目されている。粒子法では、差分法や有限要素法のような空間格子を必要とせず、粒子を配置するだけでモデル化が完了すること、さらに自由表面が大きく変化する現象も粒子を追跡することによって計算が破綻しないなどの優れた特徴がある。非圧縮性流体の Navier-Stokes 流れ場に対しては、越塚らが開発してきた MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法が良好な成果を収めている。

本研究では、非圧縮性流体の非定常 Navier-Stokes 流れ場を粒子法で解析した結果を用いて、形状微分を評価する方法を開発して、それに基づく形状最適化を実行することを目的とした。

今年度は、一様な流れ場に置かれた孤立物体に対するエネルギー損失最小化問題(図 1)の形状最適化を対象として、MPS 法による非定常 Navier-Stokes 流れ場のシミュレーションを行えるプログラムを開発した。さらに、その結果を用いて形状微分を計算するアルゴリズムを検討した。流速から形状微分を計算する方法では、有限要素法を用いて計算された結果と比較して、滑らかさが確保できないことが判明した。今後は、圧力を用いる方法や平滑化の方法を検討する予定である。

(c) 材料強度規準に基づくリンク機構の形状最適化

昨年度の研究により、リンク結合された線形弾性体(図 2)が外力を受けて運動するリンク機構を取り上げ、線形弾性体の境界形状を設計対象とした最適化問題の定式化と形状勾配の評価方法を明らかにした。その結果、質量制約付き平均コンプライアンス最小化問題では、質量が単調に増加するリンクと単調に減少するリンクに 2 分され、その変化は自明の結果に陥っていた。

今年度は、形状最適化問題の定式化と形状微分の評価方法が明らかになってことを踏まえて、最大 Mises 応力に対する制約を取り入れた質量最小化問題に取り組んだ。最大 Mises 応力を評価汎関数に選ぶと形状微分の評価が困難になる。したがって、本研究では、最大 Mises 応力に代わる評価汎関数として Mises 応力に対する KS (Kreisselmeier-Steinhauser) 汎関数を用いることにした。

KS 汎関数の形状微分を評価するプログラムは、これまで開発されてきた理論に基づいて作成した。そのプログラムを用いて、簡単な 2 次元ピストン・クランク機構を解析した結果、KS 汎関数の制約を満たしながら、単調に質量が減少し、収束する傾向が得られた。今後は、この結果を踏まえて、実用的な 3 次元問題に適用していく予定である。

(d) 連続体の形状最適化問題に対する H^1 勾配法の妥当性

昨年度までの理論研究により、連続体の形状最適化問題では形状微分は評価できるが、平滑性が不足することを示し、その不足を補うために H^1 勾配法と称した汎用解法が考えられることを示してきた。

今年度は、さらに、関数解析の結果に基づいて、形状微分で必要となる条件を明らかにした。その結果、外力項の関数の平滑性を向上させるだけでは必要な条件を満たすことはできず、境界形状が C^1 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 C^2 連続性を備える必要があることを明らかにした。この結果は、これまで、評価汎関数の形状微分に平均曲率が現れる場合に、評価汎関数がロックされるなどの現象が観察されたが、高次の H^1 勾配法などを適用することで、それらの現象が改善される可能性を示唆している。

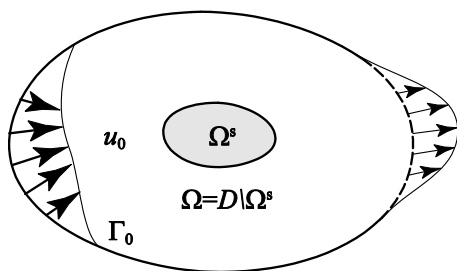


図 1. 障害物を囲む Navier-Stokes 流れ場

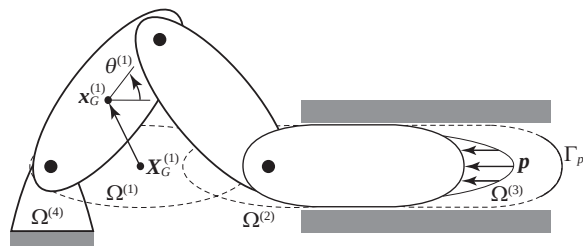


図 2. リンク結合された線形弾性体

3.3.3. 知識処理融合型複合熱流動数値解析による T 字形合流管内流れの評価

(1) 目標・計画

本研究は、多目的最適化設計手法の実用化に向け開発を行ってきた「知識処理融合型複合熱流動数値解析による多目的最適設計システム」を用い、原子力発電所を初めとした各種プラントにおいて多用される T 字形合流管内の熱流動特性を評価するものである。

一般的に、分岐・合流部では流れが複雑となるため、流体混合に起因したさまざまな問題が発生する。特に、主管に枝管が直角に接続する T 字形配管合流部では、高温と低温の流体が混合する際に、合流部下流に低周波の温度ゆらぎ(振動)が発生し、これにより機器や管に高サイクルの熱疲労が生じることが報告されている。同疲労は管路などでのき裂発生の要因となることから、プラントの設計においては十分な注意が必要となり、配管合流部の流れ場の詳細な情報が求められている¹⁾。

しかしながら、従来の配管合流部の損失に関する多くの研究に加え、高温流体と低温流体との混合によって生じる温度変動特性を実験的あるいは数値解析により評価した結果などはこれまで報告されているものの、熱疲労評価に必要な合流領域の流れの挙動について、系統的に詳しく評価した例は見当たらない。

以上より、T 字形合流管を対象とし、主管流のレイノルズ数 Re 、流速比 β (主管流と枝管流の断面平均流速の比) および口径比 α (主管と枝管の口径比) を広範に変えた流れの可視化実験が行われた。この結果、ある実験条件下で周期的な渦放出現象が生じることが見出された。

本節では、可視化実験および数値解析により検討された同渦放出機構とその特性について紹介する。

(2) 意義・国際社会との比較

(A) 背景

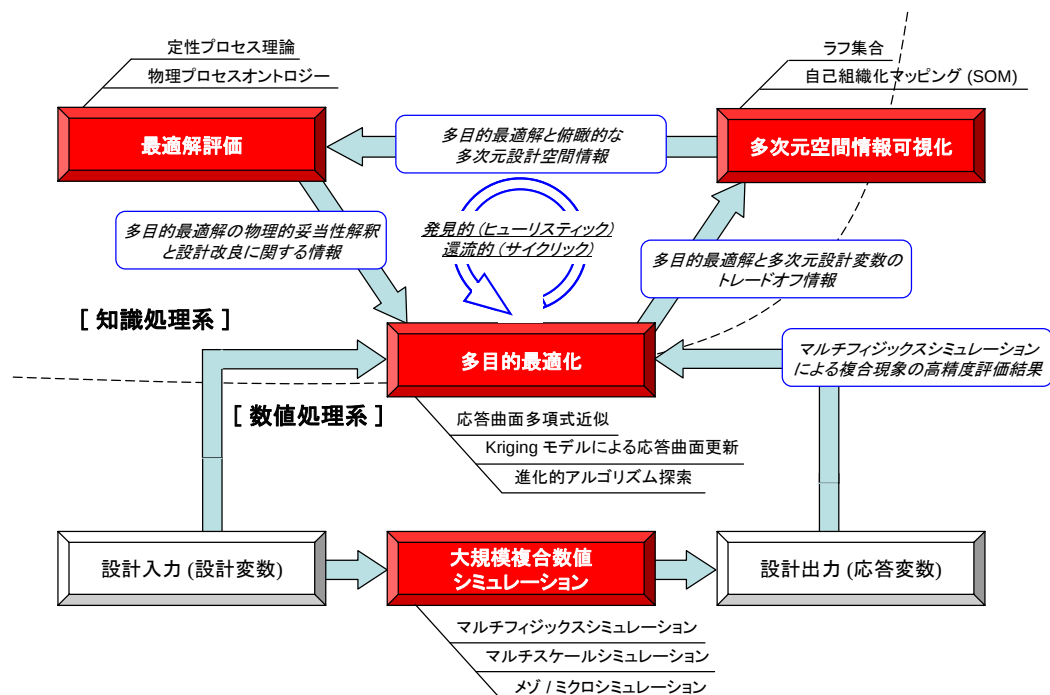
国家基幹技術の一つに挙げられている「高速増殖炉サイクルの実用化研究開発」におけるナトリウム冷却高速増殖炉では、プラント物量を大幅に削減して経済性を向上させる観点から、高速増殖原型炉「もんじゅ」と同規模の原子炉容器(直径 ~ 10 m)の中に約5倍の出力を持つ炉心を装荷し、ここでの発熱を約4倍の冷却材流量により除熱する革新的システムを採用する計画であり、このため原子炉出口配管(50B)換算のレイノルズ数は 10^7 を超える超高乱流場となる。この高乱流・高流速条件に対し、反応度異常を引き起こす可能性のある冷却材中へのカバーガス巻き込みを防止する観点から、原子炉容器内流動の適正化問題が、当該プラント概念の成立性を左右する重要課題として挙げられている。さらに、液体金属ナトリウムを冷却材として用いる高速増殖炉では、プラントシステム内の温度差が大きく(~ 150 °C)、またナトリウムの熱伝導度が良好(水の約100倍)であるため、熱荷重に対するプラント設計上の配慮が必要である。

(B) これまでの研究成果

上記のようなトレードオフ問題を設計作業において的確に取扱えるようにするため、多目的最適化設計手法の実用化に向けて「知識処理融合型複合熱流動数値解析による多目的最適設計システム (図 1)」の概念構築を進めてきている。同システムは、開発中のものも含め、以下の 4 サブシステムから構成される。

- (1) 大規模複合数値シミュレーション: マルチスケール・マルチフィジックス現象の数値シミュレーション(数値処理)
- (2) 多目的最適化システム: 応答曲面近似, 多目的最適解探索(数値・知識処理)

- (3) 多次元空間情報可視化システム:俯瞰的な多次元設計空間情報の可視化(知識処理)
 (4) 最適解評価システム:最適設計作業のための知的判断サポート(知識処理)



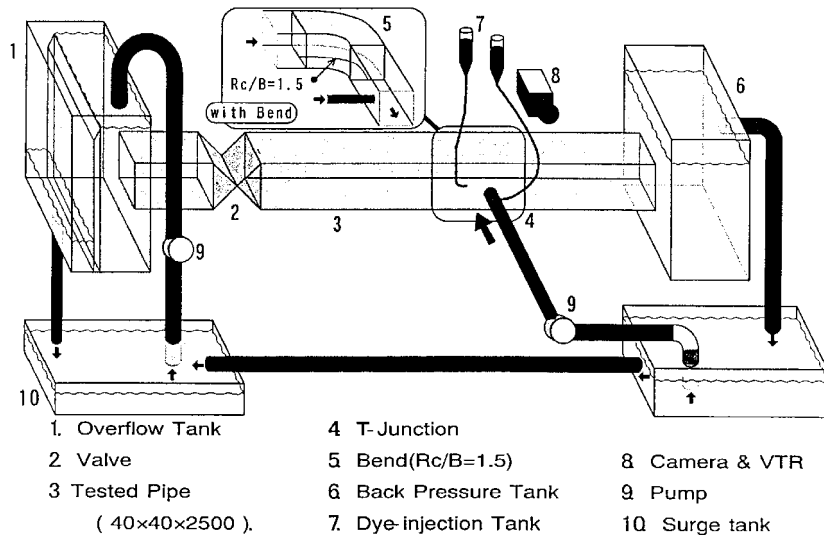


図 2 水実験装置

A.2 実験方法

流れの可視化には、色素流脈法が用いられた。同法では、主管流には主管内に挿入したステンレスパイプ(外径 2.4mm, 内径 1.8mm)を通してメチレンブルー(青: $C_{16}H_{18}N_3SCl$)を、枝管流にはポンプとバルブの間に設けた色素注入口より容量 12ml の注射器を用いてウラニン(黄: $C_{20}H_{10}O_5Na_2$)を注入し、それぞれの色素の作る流脈をデジタルビデオカメラにより撮影した。なお、色素の注入によって流れが乱されないように、色素の注入速度は色素注入タンクの高さを変えて調整した。

A.3 実験条件

可視化実験は、3 種類の口径比 α の下で、主管レイノルズ数 $Re=500\sim 5000$ 、流速比 $\beta=0.1\sim 10.0$ に変えて行われた。

なお、可視化実験に先立つ予備実験として、合流点より $2D$ (D :主管径)上流の主流および枝管流の管軸方向速度の分布を水素気泡法により測定し、 $Re=1000\sim 2000$ の範囲においては概ね放物線分布を示すことを確認した。したがって、合流部には主管・枝管の両方から十分に発達した流れが流入していると思ふことができる。

A.4 実験結果および考察

A.4.1 流れ場の概略

可視化試験により、合流部の流れは大きく 3 種類のパターン、すなわち成層分離流(パターン A)、偏向噴流(パターン B)、衝突噴流(パターン C)に分類できることが確認された。各流動パターンの可視化写真を図 3 に示す。

(1) 成層分離流(パターン A: 図 3(a))

流速比 β が大きい場合、すなわち枝管流速が主管流速に比べて遅い場合、枝管からの流れは主管内に流入後急激に主管軸方向に偏向し、枝管側の壁面に沿って流下する。この間、主流と枝管からの流れは層状に分離し、下流まで混合しない。

(2) 偏向噴流(パターン B: 図 3 (b))

パターン A よりも流速比 β が小さい場合、すなわち枝管流と主管流の速度がほぼ同程度の場合、枝管からの流れは主管内に流入後、穏やかに主管軸方向へ偏向する偏向噴流となる。この過程で枝管からの流れはアーチ状の渦を形成し、その渦は周期的に放出されて渦列となり、管中央部を流下する。

(3) 衝突噴流(パターン C: 図 3 (c))

枝管流の速度が主管流の速度の 2 倍以上速い場合、枝管からの流れは枝管と反対側の主管壁面に衝突した後、急速に主流と混合しながら流下する。

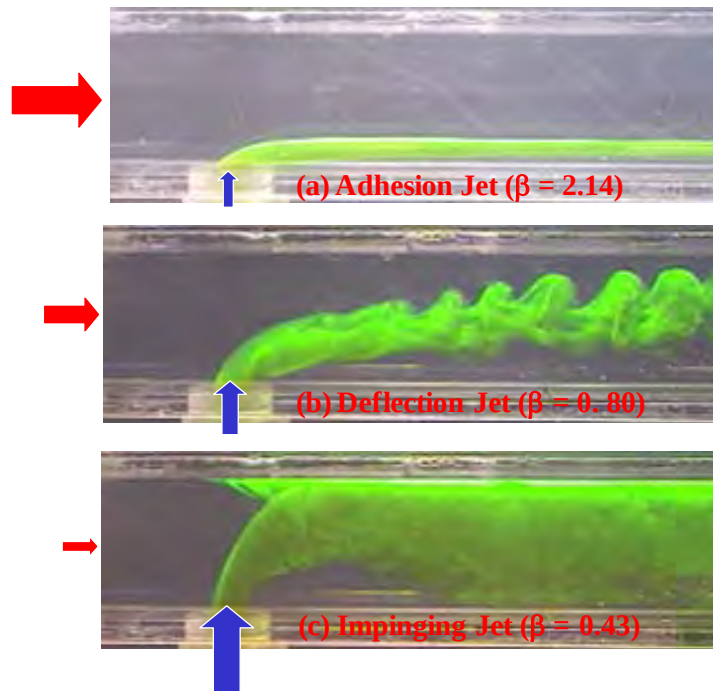


図 3 可視化実験により確認された各種流れ場

A.4.2 流動パターンの分類

合流部の流動パターンは、枝管流に衝突する主管流と枝管流の受ける慣性抵抗⁴⁾の比により決まると考えられる。そこで、枝管流を主管内に設置した円柱と見立てて、この円柱(枝管流)が主管流から受ける慣性抵抗 M_m と円柱(枝管流の影響を受ける主流部)が枝管流から受ける慣性抵抗 M_b により流動パターンを分類した。なお本研究の場合、水温一定の下で実験を行っていることから、それぞれの慣性抵抗には、 $M_m \propto \alpha^{-1} \cdot Re^2$ および $M_b \propto \alpha^{-2} \cdot \beta^2 \cdot Re^2$ なる関係が成立する。そこで慣性抵抗の代わりに $\alpha^{-1} \cdot Re^2$ および $\alpha^{-2} \cdot \beta^2 \cdot Re^2$ を用いて流動パターンを分類し、簡便な形に整理すると、 $G_1(\alpha, \beta, Re) = 20.8 \cdot \alpha \cdot \beta^{1.26} \cdot Re^{-0.737}$ および $G_2(\alpha, \beta, Re) = 2.01 \cdot \alpha \cdot \beta^{1.86} \cdot Re^{-0.138}$ を用いて、合流部の流れは、主管レイノルズ数 $Re = 500 \sim 5000$ 、流速比 $\beta = 0.1 \sim 10$ 、口径比 $\alpha = 2.0 \sim 5.0$ の範囲では、

$G_1(\alpha, \beta, Re) \geq 1$: 成層分離流(パターン A)

$G_1(\alpha, \beta, Re) < 1$ かつ $G_2(\alpha, \beta, Re) \geq 1$: 偏向噴流(パターン B)

$G_2(\alpha, \beta, Re) < 1$: 衝突噴流(パターン C)

となることが確認された(図 4)。

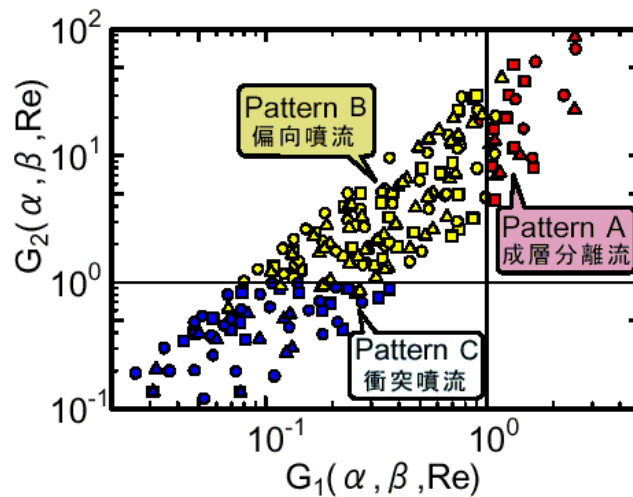


図 4 可視化実験により確認された流れ場の分類

A.4.3 アーチ渦

配管合流部の流れのパターンを観察した結果、流動パターン B の偏向噴流の場合には、周期的な渦放出現象が認められた。

アーチ渦列 (図 3 (b); $Re=1000$, 流速比 $\beta=1.22$, 口径比 $\alpha=3.33$ の場合) の模式図を図 5 に示す。アーチ渦の生成メカニズムは以下のとおりである。

- ① 枝管からの流れの背後に生じる低圧の死水領域に、主管流が枝管からの流れを迂回しながら吸い込まれる。
- ② 死水領域に流入した主管流は、死水領域中の低速流体とともに管中心側に巻き上がり、枝管流からの流れの中央部を突き抜けた後、その向きを下流方向に変える。
- ③ 一方、枝管からの流れは、合流部に流入すると主管流の衝突によりその向きを枝管の管軸方向から主管の管軸方向へと変える。この過程で枝管からの流れには、遠心力の作用により、あたかも曲がり管内流れと同様な二次流れが誘起され、合流後の枝管からの流れは中央対称面に対してほぼ対称の一对の縦渦を形成する。
- ④ ③により形成された縦渦は、②の主管流の振舞いにより、管中心方向へ巻き上がる。
- ⑤ また偏向後の枝管からの流れには、管中心側の主管流との界面付近においてケルビンヘルムホルツ不安定性により界面に振動現象が発生し、その後下流では、薄い渦層が形成される。さらに下流に進むとこの渦層は巻き上がり、大きな横渦へと成長する。
- ⑥ ⑤の横渦と④の縦渦が合わさって、アーチ渦が形成される。

以上のアーチ渦の生成メカニズムは、境界層中におけるヘアピン渦の生成メカニズム^{5), 6)}と酷似している。

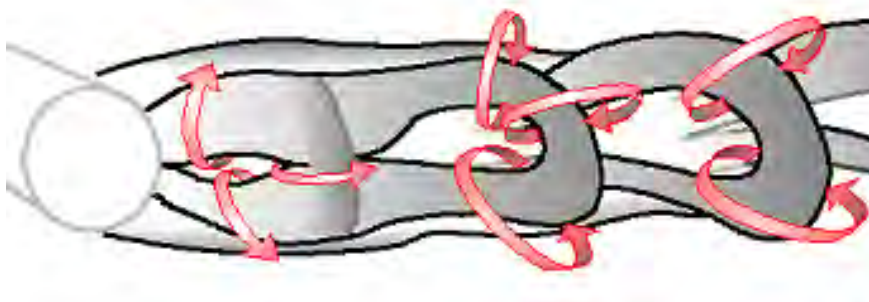


図 5 アーチ状渦の概念図

(B) 数値解析

B.1 数値計算法

数値計算には、局所・瞬時ナビエ・ストークス方程式を高次精度で離散化した擬似 DNS コードが利用された。

B.2 数値計算体系

計算体系を図 6 に示す。数値解析では、水流動実験装置の試験部の内、主管部主流方向 96mm を評価の対象とした。なお当該形状での口径比 α は 5.0 に相当する。解析モデルの規定では、同計算体系を x-y-z 直交座標でモデル化し、各方向 0.5mm の等メッシュで分割した。

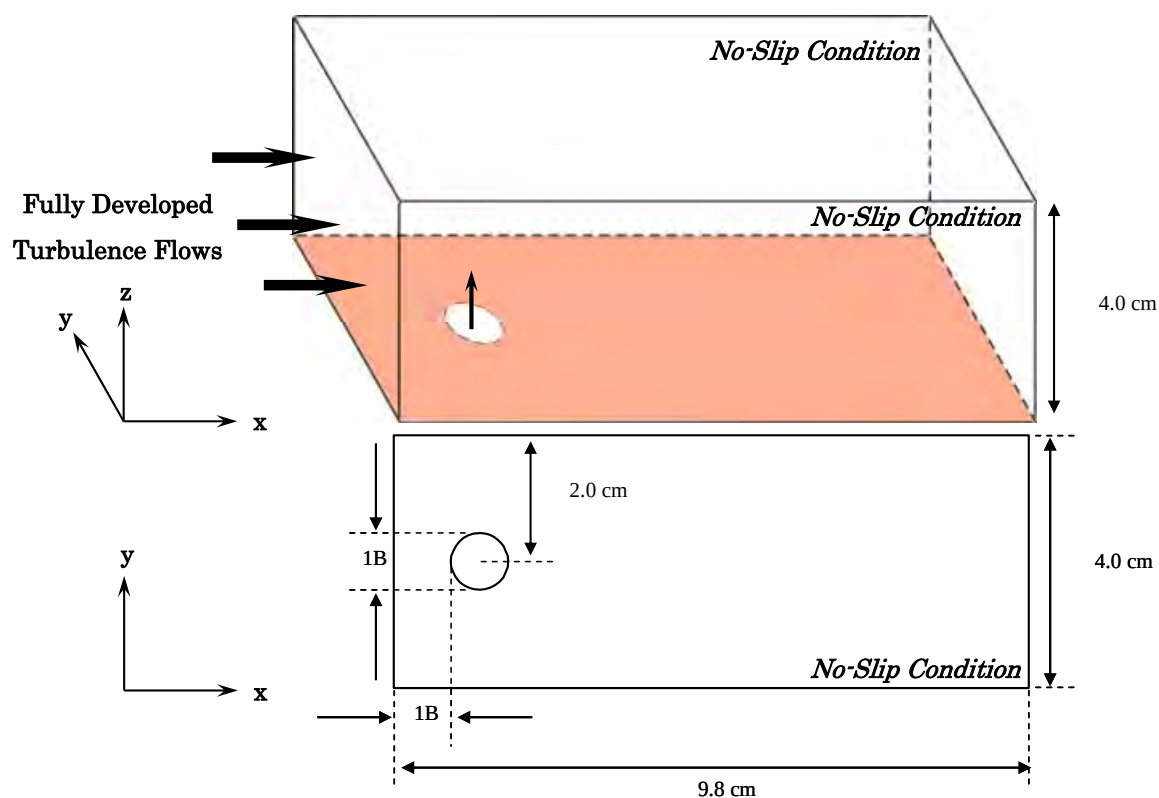


図 6 数値解析体系

B.3 解析ケースおよび境界条件

数値解析は、実験結果に基づき、流速比 β とレイノルズ数 Re を変化させた以下の 5 ケースを選定して行った。

- (a) $\beta=0.2$, $Re=600$: 衝突噴流
- (b) $\beta=1.0$, $Re=600$: 偏向噴流
- (c) $\beta=1.0$, $Re=1050$: 偏向噴流
- (d) $\beta=3.0$, $Re=5000$: 偏向噴流
- (e) $\beta=2.6$, $Re=600$: 成層分離流

矩形主管路および円形枝管路の入口流速分布は、それぞれ Melling ら⁷⁾による矩形流路内発達乱流条件および Laufer⁸⁾による円形流路内発達乱流条件での結果を、レイノルズ数 Re により内挿することによって規定した。一方矩形主管路の上下左右の固体壁については、完全粘着条件を課した。

B.4 解析結果および考察

B.4.1 流れ場の概略

流速比 β とレイノルズ数 Re を変化させた場合の渦度および流線の瞬時分布を図 7 に示す。

(1) 衝突噴流 (図 7 (a))

枝管流の速度が主管流の速度に比べて大きい場合、枝管からの流れは枝管と反対側の主管壁面に衝突した後、急速に主流と混合しながら流下する。なお、枝管からの流れの両脇には、回転の向きが異なる剪断渦層が形成される。

(2) 偏向噴流 (図 7 (b)-(d))

衝突噴流よりも流速比 β が大きい場合、枝管からの流れは主管内に流入後、穏やかに主管流れ方向に偏向する噴流形態(偏向噴流)を示す。この過程で枝管からの流れはアーチ状の大規模な渦を形成し、その渦は下流側に周期的に放出して渦列を形成する。

(3) 成層分離流 (図 7 (e))

流速比 β が大きい場合、すなわち枝管流速が主管流速に比べて遅い場合、枝管からの流れは主管内に流入後、急激に主管流れ方向に偏向し、枝管側の側面に沿って流下する。この間、主流と枝管流は層状に分離し、比較的下流まで混合しない状態を保つ。

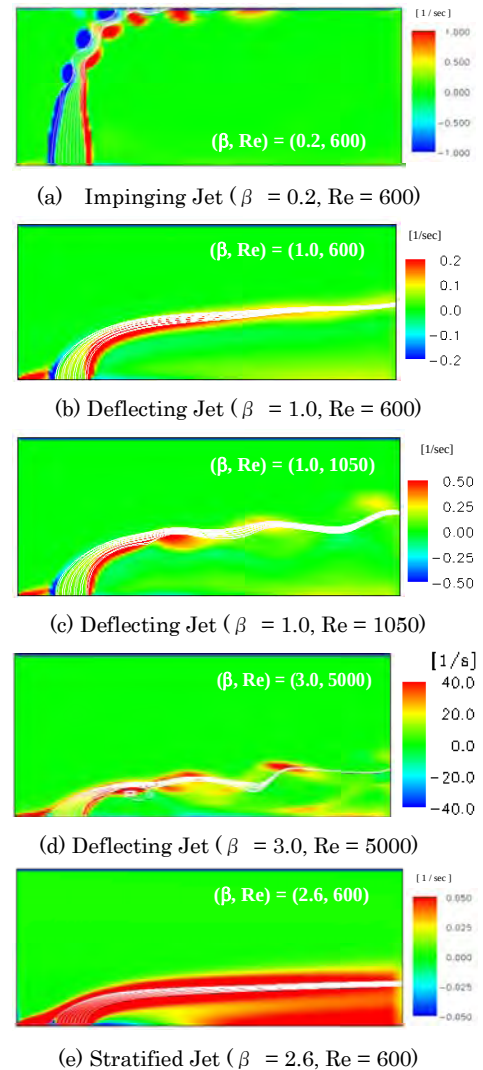


図 7 渦度および流線の瞬時分布

B.4.2 アーチ渦の構造

上記の水実験および数値解析より、合流部での流れパターンが偏向噴流の場合、枝管からの流れはアーチ状の渦を形成し、その渦は主管下流側に周期的に放出されて渦列となることが確認された。以下では、流速比 $\beta=1.0$ 、レイノルズ数 $Re=600$ の条件におけるアーチ渦の構造を詳細に検討する。

(1) アーチ渦の生成過程

アーチ渦の生成過程を可視化するため、枝管流下流位置から粒子を連続放出した。結果を図 8 に示す。図に示したアーチ渦列の生成過程は、境界層中におけるヘアピン渦のそれに酷似し、以下の過程を進る。

- ① 枝管噴流のポテンシャルコアに沿って、粒子が流下を始める (図 8 (a), (b)). 枝管噴流の背後に生じる低圧の死水領域に、主流が枝管噴流を迂回しながら吸込まれるため、枝管噴流背後に循環渦が形成される (図 8 (c), (d)).
 - ② 循環渦による回転によって、大規模渦塊が枝管噴流端から離脱し、アーチ渦形状を保って流下する ((図 8 (e) ~ (f)).
- 上記 ① ~ ③ の過程が繰返され、渦列を形成する ((図 8 (g)).

(2) 輸送特性

主管流れ方向に直交する流速 2 成分合成値の等値面(0.001 m/s)の過渡挙動を図 9 に示す。枝管噴流端から離脱する大規模渦塊(図 9 (a)~(b))は、急速にアーチ渦形状を整えた後、主流により下流側に輸送される。なお、枝管噴流端から離脱した後のアーチ渦は、そのアーチ渦頭部および両脚部での回転を伴いながら流下する。

ここでアーチ渦の輸送時間を、他 2 ケース ($(\beta, Re): (1.0, 1050)$

および(3.0, 5000))の結果を含め、流速 2 成分合成値の等値面により表示されたアーチ渦頭部の移行時間から算出し、ストローハル数 St に換算して実験結果と比較すると図 10 のようになる。なお実験結果は、統計処理上の母集団が大きく、比較的測定精度の良い高レイノルズ数 ($5000 < Re < 50000$ での流速測定値を対象とした FFT 処理)データに基づいてまとめられたものである。星印で示した数値解析による結果 3 点は、多くの実験結果による近似式($St=1.06(\alpha^{-1} \cdot \beta \cdot Re^{0.2})^{-0.353}$)と良好な一致を示した。以上より、口径比 α 、流速比 β およびレイノルズ数 Re に依存するストローハル数 St をここで紹介した数値解析手法によって再現できることが確認された。

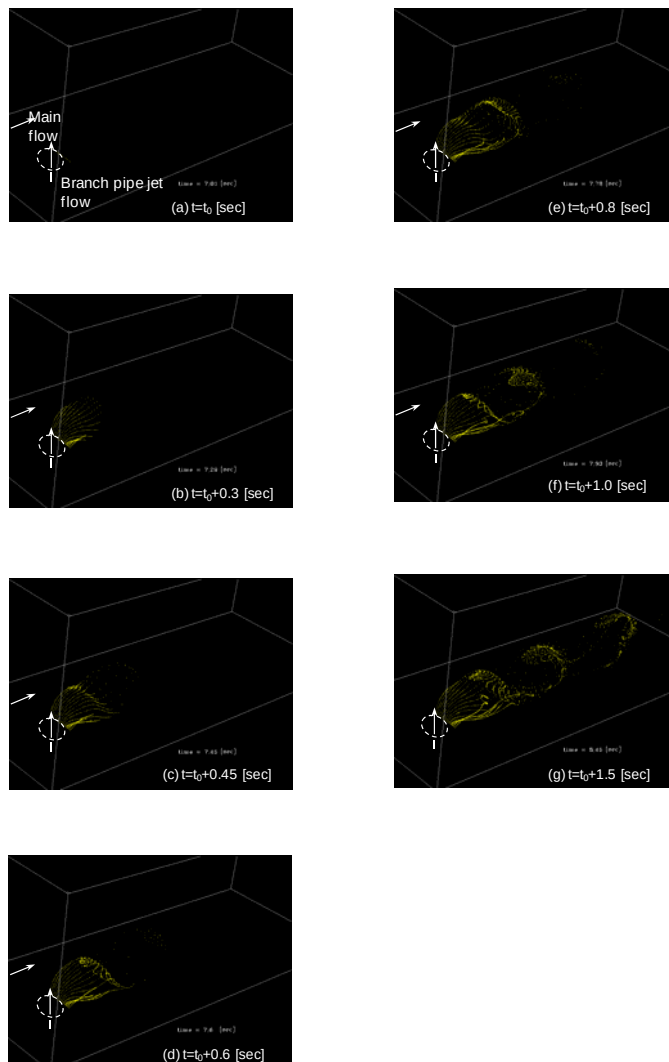


図 8 数値解析により得られたアーチ状渦の生成挙動

(3) 内部構造

アーチ渦の内部構造を確認するため、主管流と枝管流との間に浮力の影響が現れない程度の温度差(0.01℃)を与え、それぞれの流体をマーキングすることにより可視化を行った。図11は、アーチ渦が枝管噴流から離脱し、主流によって下流側に輸送されている過程での流速2成分合成値の瞬時等値面分布(0.001 m/s)に、流体温度を重ね合わせた結果である。

結果に見られるように、アーチ渦頭部の表層上部領域(A部)は、高温流体でマーキングした主管流の影響を受け、同頭部の内部に向かうに従って主管流の影響が減少する。他方、アーチ渦頭部の表層下部領域(B部)については、低温流体でマーキングした枝管流の影響を受ける部位が確認できる。両脚部についても同様に、表層両脇(C部)から内部に向かうに従って、主管流の影響が徐々に低下する。

(C) 結論

T字形合流管領域を対象として、主管流のレイノルズ数 Re 、口径比 α および流速比 β を変化させた流れの可視化水実験および数値解析を行い、以下の知見を得た。

(1) 合流領域の流れは、大きく三種類のパターン、すなわち成層分離

離流、偏向噴流および衝突噴流に分類され、

$$G_1(\alpha, \beta, Re) \geq 1: \text{成層分離}$$

$$G_1(\alpha, \beta, Re) < 1 \text{ かつ } G_2(\alpha, \beta, Re) \geq 1$$

: 偏向噴流

$$G_2(\alpha, \beta, Re) < 1: \text{衝突噴流}$$

となる。ここで、

$$G_1(\alpha, \beta, Re) = 20.8 \cdot \alpha \cdot \beta^{1.26} \cdot Re^{-0.737}$$

$$G_2(\alpha, \beta, Re) = 2.01 \cdot \alpha \cdot \beta^{1.86} \cdot Re^{-0.138}$$

(2) 合流後の流動パターンが偏向噴流の場合には、枝管からの流れはアーチ状の渦を形成し、この渦は周期的に放出されて渦列を作る。このアーチ渦は、主管内に流入後の枝管からの流れの偏向による遠心力的作用により誘起される縦渦と主流と枝管流の界面近傍の不安定性により生じる横渦が合わさって形成される。

(3) アーチ渦頭部の表層上部領域および表層下部領域は、それぞれ主管流および枝管流の影響を大きく受ける。

他方、アーチ渦脚部は、枝管流の影響を大きく受ける。

各種プラントにおける T 字形合流管の熱流動・構造設計では、その健全性担保の観点から十分な配慮が必要となる。とりわけ、本節で紹介したような周期的渦放出による流動振動現象は、機械的熱的な高サイクル疲労を誘起する可能性

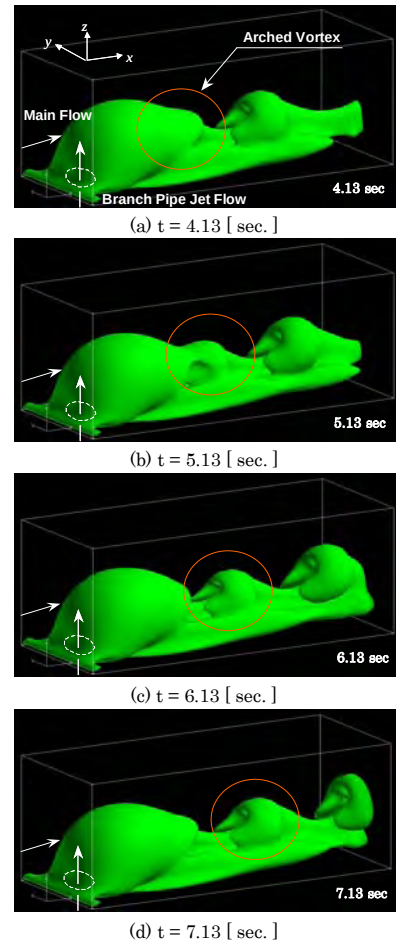


図 9 数値解析により得られたアーチ状渦の過渡挙動

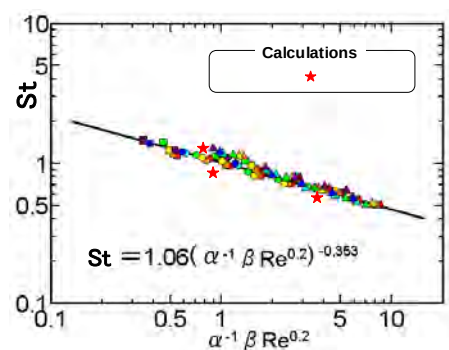


図 10 アーチ状渦輸送特性の比較

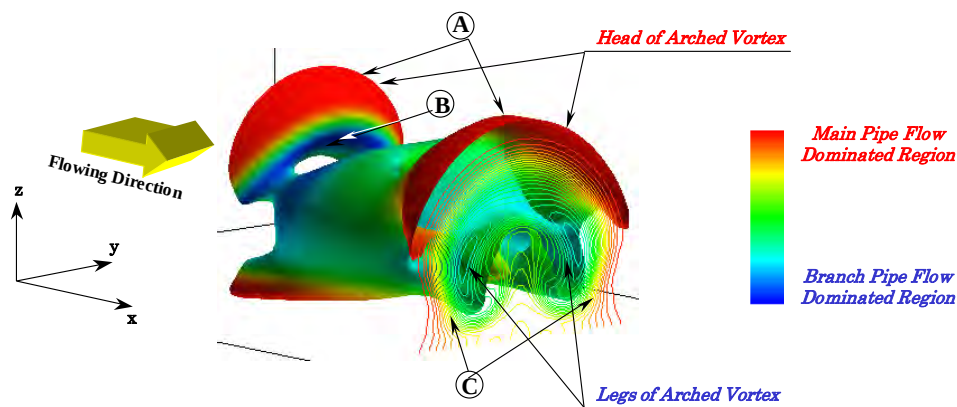


図 11 数値解析により得られたアーチ状渦の構造

がある。今後の同設計などでは、実験結果と数値解析結果を相補的に活用し、現象論に立脚した設計手法を確立する必要がある。

参考文献

- 1) 通産省・資源エネルギー庁編：高サイクル熱疲労に関する技術基準運用ガイドライン(1999).
- 2) Muramatsu, T. and Yagawa, G., Adaptive Control System Using the Fuzzy Theory for Transient Multi-physics Numerical Simulations, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 54, pp. 805-830 (2007).
- 3) 村松 壽晴, ファジィ推論, 機械工学便覧, 基礎編 α6 計算力学, 日本機械学会, pp. 168-171 (2008).
- 4) 松信八十男:変形と流れの力学, 朝倉書店 (1981) p.115.
- 5) Acariar, M.S. and Smith, C.R., J. Fluid Mech., No.175 (1987) pp.1-41.
- 6) Acariar, M.S. and Smith, C.R., J. Fluid Mech., No.175 (1987) pp.43-83.
- 7) Melling, A. and Whitelaw, J.H., J. Fluid Mech, , No.78 (1976) p.289.
- 8) Laufer, J.J., NACA Rep.,No.1174 (1954).

2009 年度成果(関連分野)

- 1) 村松 壽晴, 檜原 秀樹, 平田 直樹, 須藤 浩三, T 次形合流管内の流れ ～実験および数値解析～, 可視化情報学会誌, Vol.29, No.114, pp.160-164(2009.10).
- 2) 村松 壽晴, 檜原 秀樹, 平田 直樹, 須藤 浩三, T 次形合流管内の多次元熱流動特性, 配管技術(2010.2).

3.3.4. 階層メッシュと遺伝的アルゴリズムを用いたカソード防食の最適化

(1) 目標・計画

カソード防食法により、過不足のない防食を達成するためには、電極の位置や印加する電流の大きさを合理的に決定する必要がある。境界要素法による電場解析と種々の最適化手法を組合せ、最適な電極位置と印加する電流の大きさを決定する研究がなされている[1]。電場解析では、密行列の非線形行列方程式を解くため計算コストが高い。最適化では、繰り返し電場解析を行う必要があるため、計算コストがさらに高くなる。本研究では、階層メッシュ[2]と遺伝的アルゴリズム(GA)を用いたカソード防食の最適化手法を提案する。電極からの距離に応じて粗密を制御したメッシュを自動かつ短時間で生成する。生成されたメッシュを用いて電場解析を行い、計算コストを削減する。

(2) 意義・国際社会との比較

実構造物に対して、カソード防食の最適化が適用できれば、より経済的かつ安全に構造物を運用することができる。しかしながら実構造物に対してカソード防食の最適化を適用するためには、計算コストを削減する必要がある。本研究は、実構造物に対してカソード防食を適用するための効率的な手法の開発を目指す点が特徴である。

(3) 研究内容

電解質の占める領域を Ω とする。領域内部に電極 e を配置すると、領域内の電位 ϕ は次式を満足する。

$$\kappa \nabla^2 \phi = I_e \delta(x - x_e) \quad (e = 1 \dots m) \quad (1)$$

κ は電気伝導度、 m は電極の数、 I_e は電極 e の電流量、 δ はディラックのデルタ関数、 x_e は電極 e の位置である。領域 Ω は、電位の指定された境界 Γ_d 、電流密度の指定された境界 Γ_n 、金属表面で電位と電流密度 i との関係が指定された境界 Γ_m に囲まれているとする。カソード防食の最適化を行うためには、電極を配置した際の金属表面での電位分布を知る必要がある。境界条件が与えられたとき、式(1)を境界要素法により解くことで、金属表面における電位分布を決定する。

金属が防食状態にあるとき、金属表面の電位 ϕ は式(2)を満足する。ただし、 E_p は防食電位を表す。

$$-\phi \leq E_p \quad (\text{on } \Gamma_m) \quad (2)$$

境界要素法解析に用いるメッシュの作成方法を説明する。図 1(a) のように、解析対象を最も細かな要素サイズで分割したメッシュを生成する。 $n_1, n_2 \dots$ は節点を表す。節点間の距離の短いものから順に節点同士を結合する。図1では、 l_1 の距離にある節点 n_2 と n_3 が結合され n_7 が生成される。また、 n_4 と n_5 から n_8 が生成される。同様にして、節点同士を(b), (c), (d)と結合していく。図1中の樹形図は、結合の過程を表している。節点間距離の大小と階層と上下が対応する。したがって、階層という指標で樹形図を辿ることで、任意の粗密を持ったメッシュを生成できる。

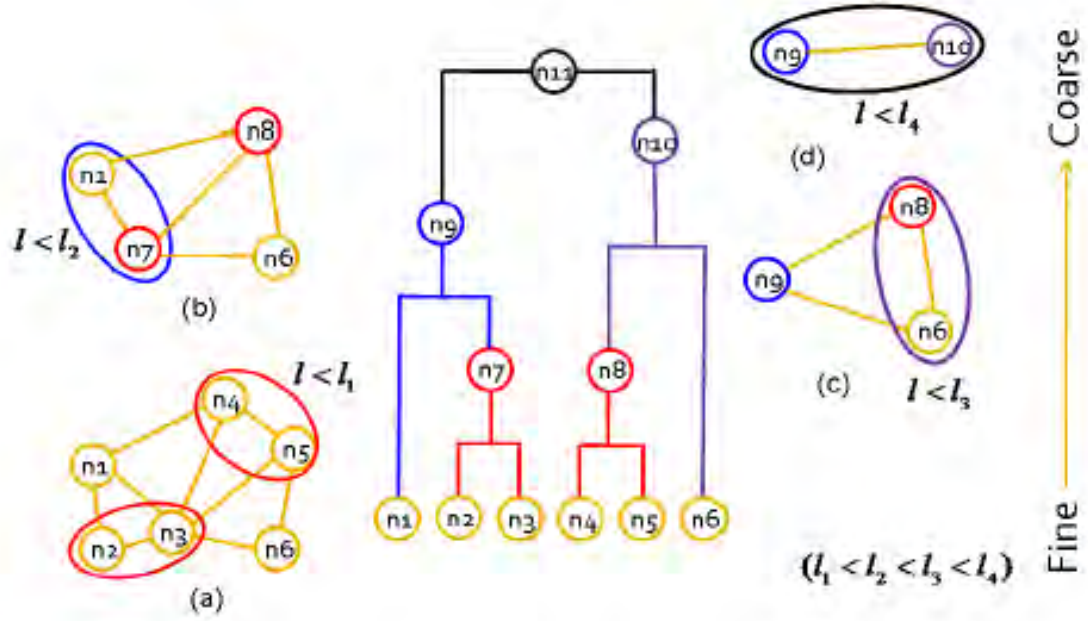


Fig. 1 Tree diagram for hierarchical mesh

次に、配置した電極と境界との距離に応じてメッシュの粗密を制御するために、式(3)を定義する。

$$l_{\max} := \begin{cases} r_{je} \times w & (r_{je} < \min(\frac{L_x}{m}, \frac{L_y}{m}, \frac{L_z}{m})) \\ \min(\frac{L_x}{m}, \frac{L_y}{m}, \frac{L_z}{m}) & (\text{else}) \end{cases} \quad (3)$$

ただし、 r_{je} は電極 e と j 番目要素の図心との距離、 w は重み定数、 L_x, L_y, L_z は領域 Ω の x, y, z 方向の代表長さ、 m は x, y, z 方向の最小分割数を表す。式(3)により各要素の最大辺長さ $l_{\max}$ を決定する。決定された辺長さと図 1 中の樹形図を用いて自動メッシュ生成を行う。 $l_{\max}$ が r_{je} に比例することから、電極と境界の位置が近くなると密なメッシュが生成されることが分かる。

最適化手法として GA を用いる。領域 Ω を有限個のサブ領域に分割する。分割されたサブ領域の中心にのみ電極が配置できるものとする。電極を配置するサブ領域を 1、それ以外を 0 で表現すると、ビット列の並びによって電極の配置を表現できる。このビット列を GA の染色体として用いる。各染色体の適応度を式(4)で与える。

$$F(x_e) := \frac{1}{C(x_e)} \quad (4)$$

C は、式(5)で与えられ、右辺第 1 項は、 j 番目の観測点における金属表面の電位 ϕ_j と防食電位 E_p との差を表す。 N は観測点の数である。 p はペナルティ関数を表し、防食条件を

満足しない場合には大きな値をとる(式(6)).

$$C(x_e) := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |\phi_j(x_e) - E_p| + p(x_e) \quad (5)$$

$$p(x_e) := \begin{cases} 10^{10} & (-\phi > E_p) \\ 0 & (\text{else}) \end{cases} \quad (6)$$

提案した手法を用いて数値シミュレーションを行った結果を示す. 図 2 に示すような一辺 2m の

立方体領域を考える. 底面において $\phi = 0$, その他の面において $i = \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right) = 0$ とする. $\mathbf{n}$ は外向き法線ベクトルを表す.

電極を配置することができる位置を赤丸で示す. 腐食電位 $E_p = 100$ V とした. 電流量は $I_e = 100$ A/m² として固定し, 電極位置の最適化を行った. GA の設定を表 1 に示す.

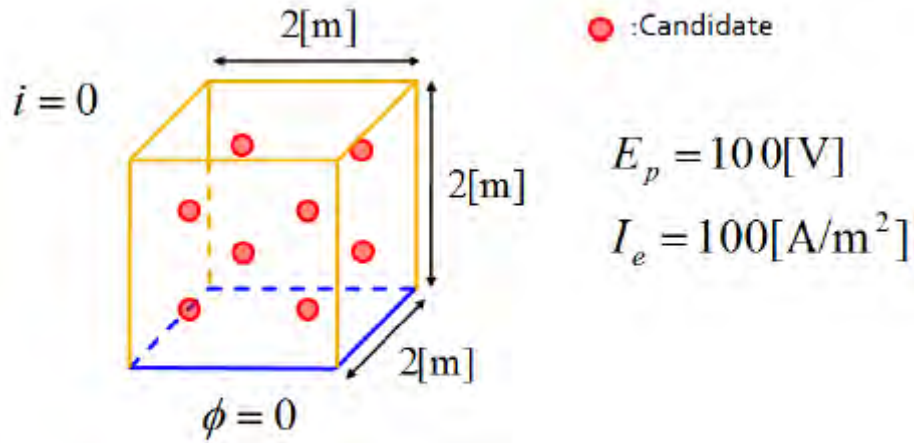


Fig. 2 Analysis model

Number of population	5
Number of generation	10
Crossover ratio	0.8
Mutation ratio	0.1
Selection method	roulette

Table 1 Setup of GA

以上の設定のもと, 電極配置の最適化を行った. 結果を図 3 に示す. 図の中心に電極配置 (赤丸で示す), A~C に各矢印の方向から見たときの電位を示す. 防食条件が満足されている

領域を赤色，それ以外の領域を青色で示している．ほぼ全域で防食条件が満足されていることが分かる．

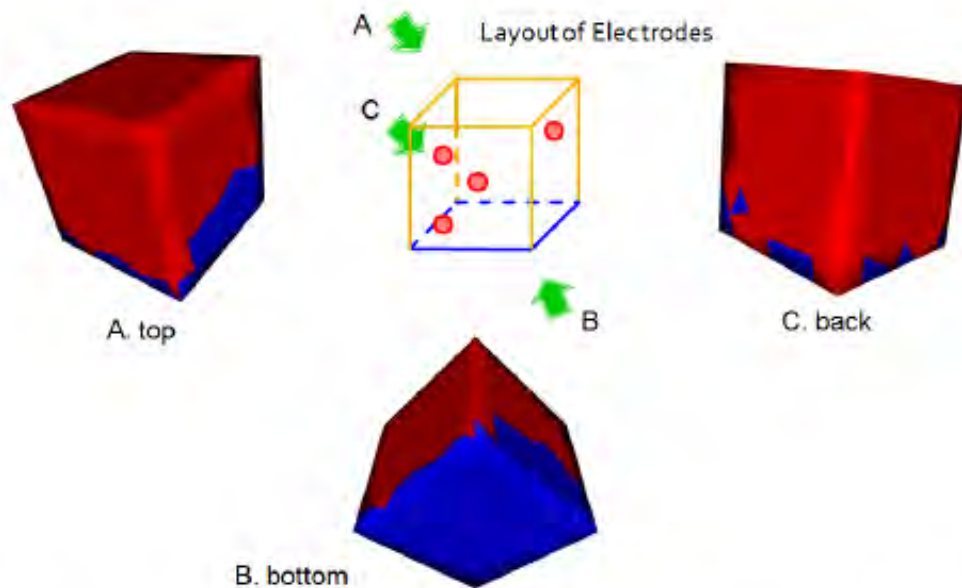


Fig. 3 Alignment of electrodes and potential distribution after optimization

計算時間の比較を行った結果を式(7) に示す．

$$\frac{\text{Presented}}{\text{Full Search}} = \frac{30 [\text{min}]}{119[\text{min}]} \quad (7)$$

参考文献

- [1] Luiz C. Wrobel, Panayiotis Miltiadou, Genetic algorithms for inverse cathodic protection problems, Engineering Analysis with Boundary Elements, 28, (2004), pp.267-277 など．
- [2] K. MUROTANI, G. YAGAWA, Hierarchical meshing for the adaptive finite elements, Computational Methods in Applied Sciences, 14, Springer Verlag 2008, J. Eberhardsteiner, et al. (Editor), pp.291-305.

(4) 平成 20 年度進捗状況

階層メッシュと遺伝的アルゴリズムを用いたカソード防食の最適化手法を提案した．提案した手法を用いて，カソード防食の最適化問題を解く数値シミュレーションを行い有効性，妥当性の検証を行った．今後は任意形状の領域，大規模な問題への適用を進める．

3.3.5. キューの最適設計の研究

(1) 目標・計画

ビリヤードは人気が高いにも拘わらず、キューの設計に関する研究は少ない。キュー各部の材質、形状および寸法が衝撃力の時間的変化、球の軌道、速度、回転、球と台の間のすべりなどの衝突特性に影響を与えると思われるが、不明な点が多いため、キューの設計は経験に頼って行われている。そこで、本研究では、衝突特性を簡便に評価する方法を開発し、キューの設計を合理的に行えるようにすることを目的とした。

(2) 意義・国際社会との比較

前節で述べたようにビリヤードは人気が高いにも拘わらず、キューの設計に関する研究は少ない。特にシミュレーションを使ってキューの評価を行ったものは見あたらない。キューの設計はこれまでは経験に頼って行われており、シミュレーションによって定量的に評価する技術の開発は意義が大きいと考える。

(3) 研究内容

図 1 に示すような基本的な場合に対して、球を剛体と仮定し C++を用いてその運動を有限差分解析し、キューを弾性体と仮定し汎用コード(Nastran)を利用してその変位を有限要素(図 3)解析し、両者を連成するプログラムを開発した。

また、衝突時のキュー先端部のひずみについて、この方法による解析結果が実験による結果に良く一致した(図 2)。さらに解析時間は、詳細な衝突有限要素解析に比べて 1/30 程度に短縮された。

さらに、本解析方法により、キューの縦弾性係数を高くすると衝撃力が上昇すること、衝撃力の持続時間はキュー中の応力波の伝播速度が速いほど短くなることなどを明らかにした。

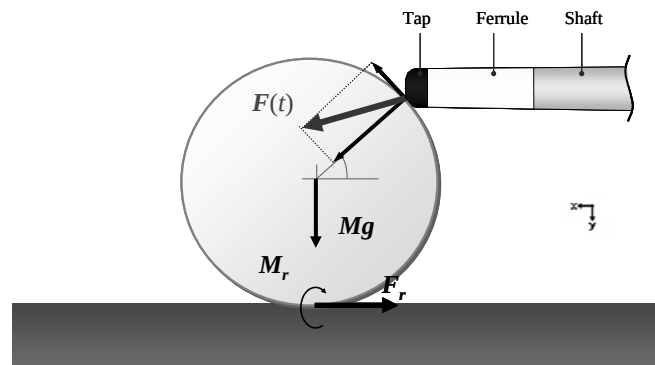


Fig.1 Model for analysis.

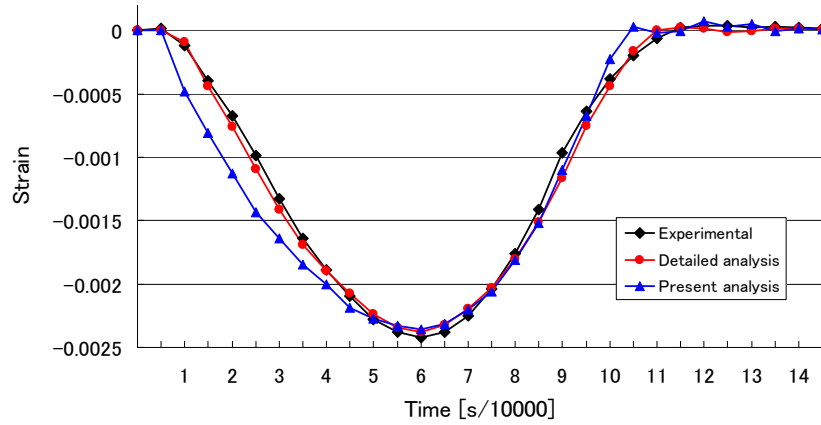
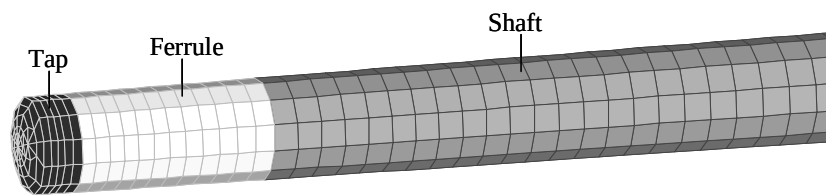
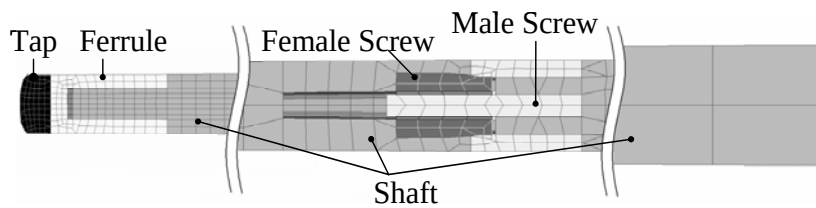


Fig.2 Comparison of experimental and numerical results.



(a) Finite element mesh of main part of cue



(b) Cross-section

Fig.3 Finite element discretization of cue.

図 4 に示すように, 球の下部をついて球に逆回転を与える(ドローショット)場合に対して本解析法を拡張した. ドローショットにおける球中心の変位と球の回転角について, この方法による解析結果を高速カメラによる実験結果と比較し, 両者が良く一致した(図 5). また, ドローショットでは, 衝突後球と台の間に大きなすべりを伴いながら逆回転し, やがてすべりが減少し正回転に変わり, その後すべりがなくなり正回転だけになること, このすべりと回転の時間的变化が最も早く起きるキューの縦弾性係数が存在することなどが, 本解析により明らかになった.

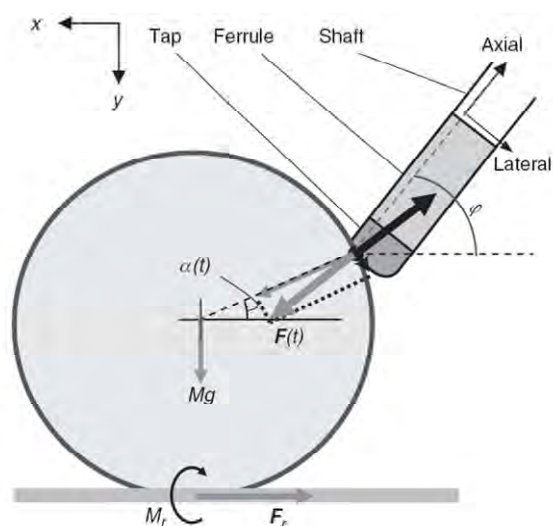


Fig.4 Ball hit in inclined direction and forces acting on it.

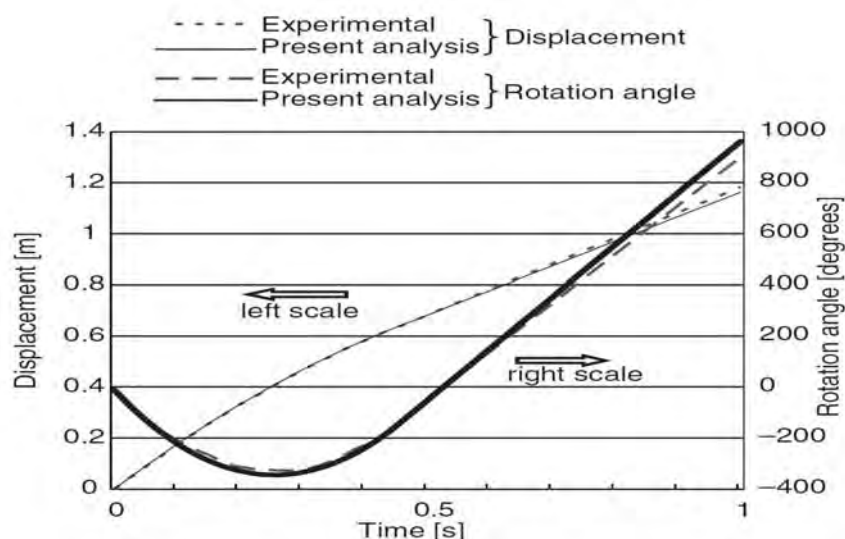


Fig.5 Comparison of experimental and predicted results on displacement and rotation angle of ball as a function of time.

図 6 に示すように、球の右または左部を撞いて球にスピンを与える場合に対して、本解析方法を拡張した。この方法による解析結果を、高速カメラによる実験結果と比較し、本方法により球がスピンを伴いながら軌道が撞いた方向からわずかに逸れる挙動が定量的に予測できるが分かった(図 7)。

また、キューのシャフトの縦弾性係数と密度を種々に変えた解析により、(1)衝撃力の大きさ(2)撞いた方向からの球の軌道の逸れ(図 8)(3)球と台の間のすべり速度および(4)球の転がり速度、はシャフトの縦弾性係数または密度が大きいほど増大することなどを明らかにした。

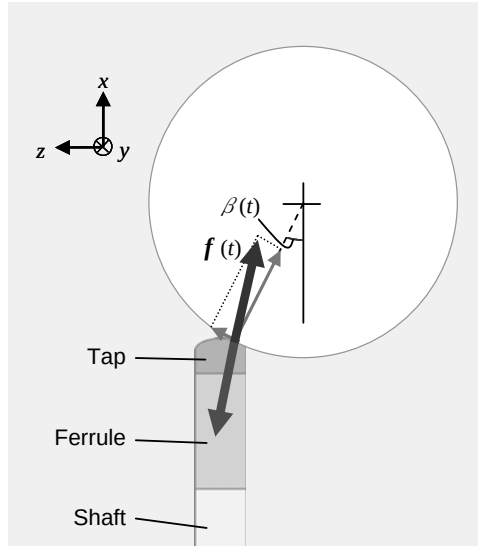


Fig. 6 Ball hit on the left part to give a spin on it.

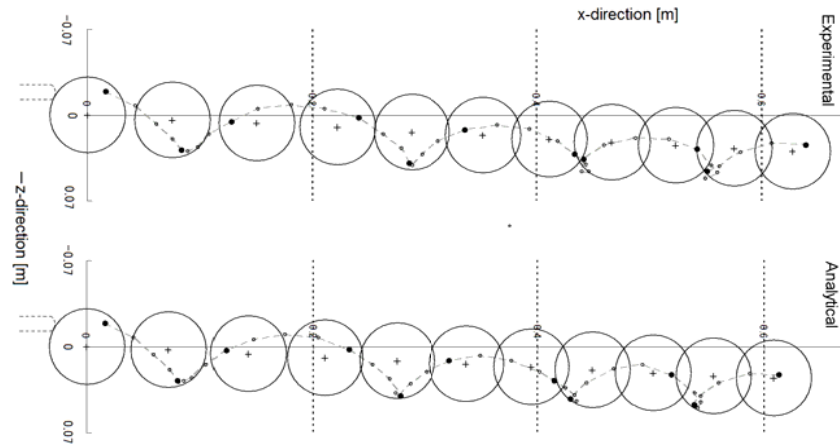


Fig.7 Experimental and numerical displacements of ball as a function of time.

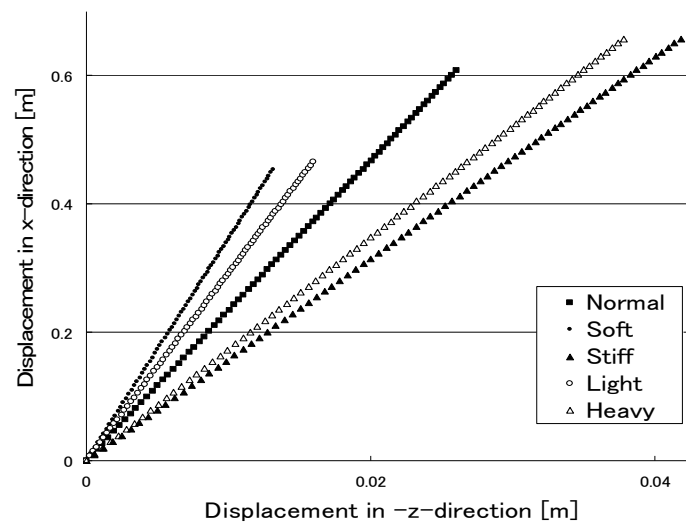


Fig. 8 Effect of material properties of shaft on ball trajectory.

図 9 に示すように、球の斜め上部を斜め下方に撞いて球の軌道をカーブさせる場合に適用できるように本解析方法を拡張した。球の軌道について、解析結果が高速カメラを用いた実験結果と良く一致することが明らかになった(図 10)。

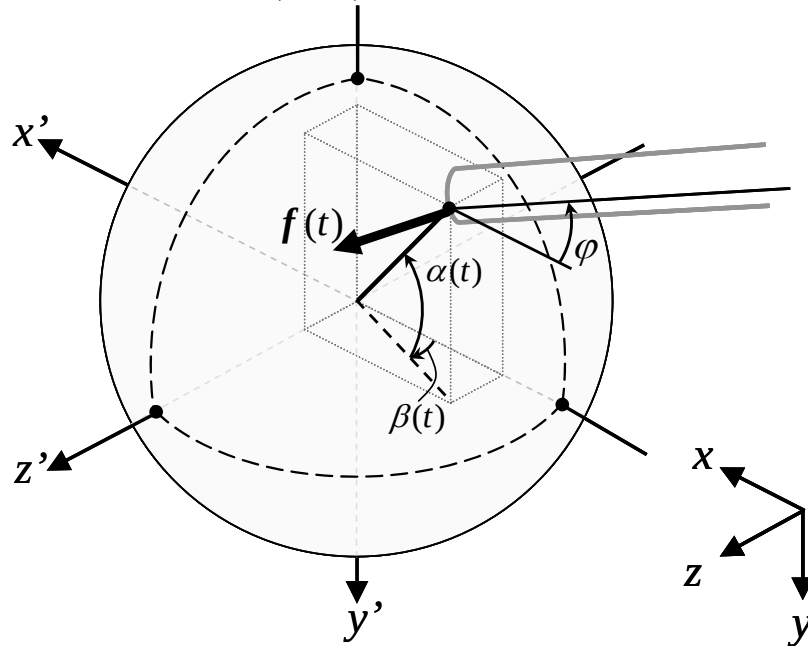


Fig.9 Ball hit on its upper left part with inclined cue.

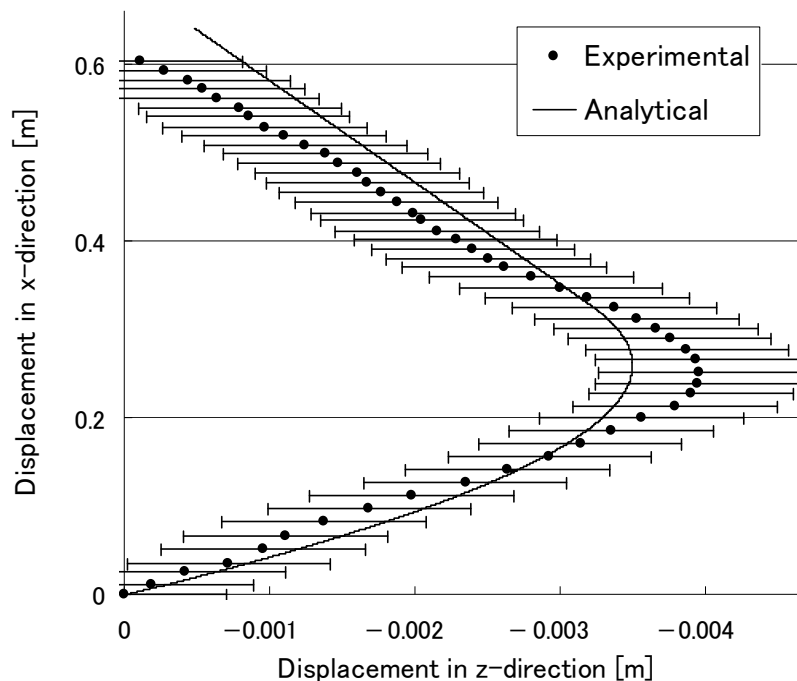


Fig.10 Comparison of analytical and experimental results of ball trajectories.

また、この方法を用いて、球の斜め上部を斜め下方に撞いた場合キューのシャフト部の縦弾性係数または密度を大きくする程、球の軌道は衝突直後に撞いた方向から大きく逸れ、大きな曲率半径で湾曲すること、球は衝突後すべりを伴った転がりにより湾曲しながら進むが、やがてすべり速度が 0 になり、シャフトの材質に応じた方向に直線的に転がることなどが明らかになった。

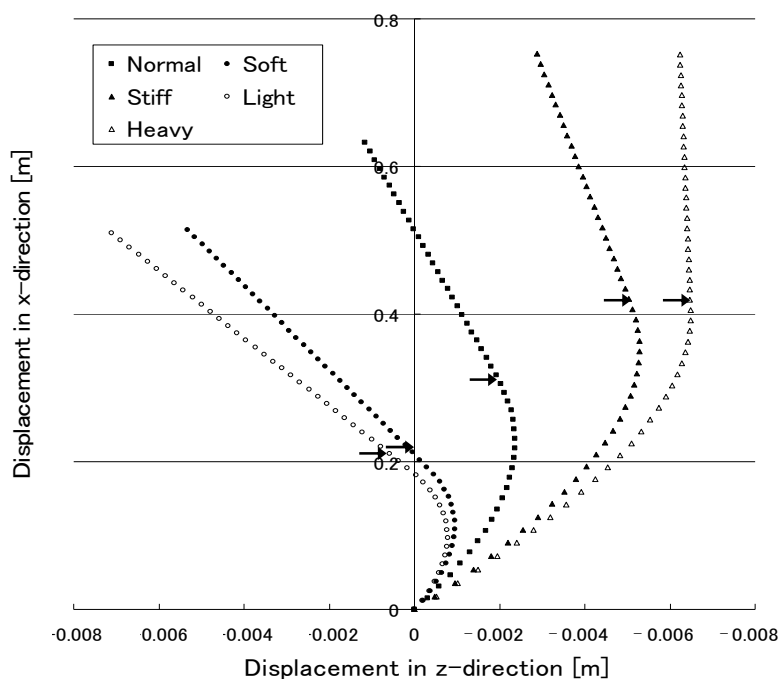


Fig.10 Effect of material properties on ball trajectory.

以上の研究成果をもとに、キューの最適設計を下図のような手順で行うことができるようになった。

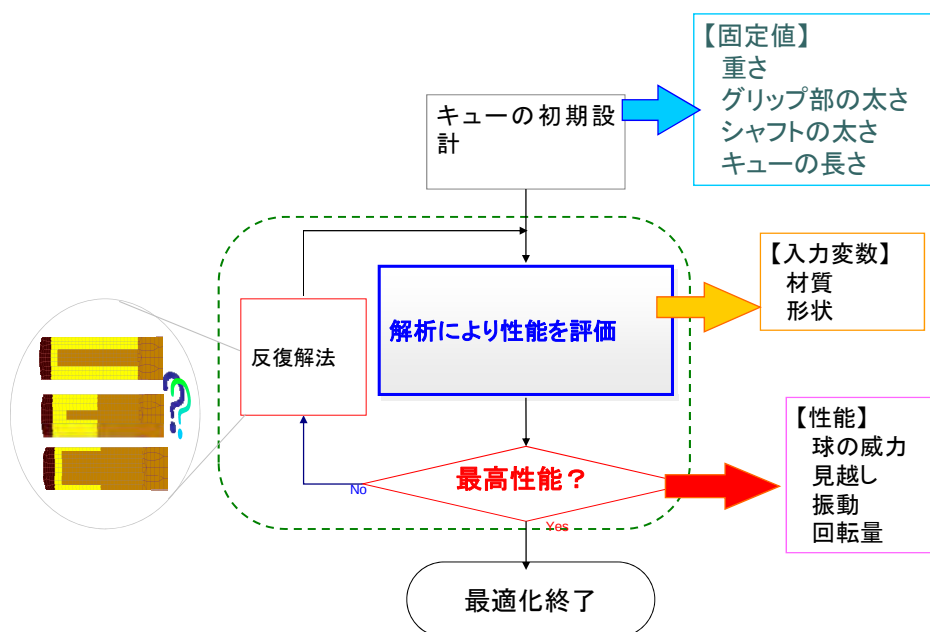


Fig. 11 Optimal design of cue

(4) 平成 21 年度進捗状況

有限要素法を使ったキューの性能評価方法を開発し、シミュレーションにより最適化が可能になった。

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 21 年度は、プロジェクト最終年度であり、各サブプロジェクトが必要とする可視化のためのシステム開発を行った。具体的には、流体解析に対しては 10 億点規模の解析結果に対応するシステム、構造解析に対しては数千万〜1 億自由度規模の解析結果に対するシステムを開発し、検証を行った。以下にその詳細を述べる。

3.4.2. 統合化に向けた可視化システムの構築

(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す。これまで、その準備として、これからの計算機環境に対応する可視化システムの開発を行ってきた。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 21 年度は、プロジェクトの最終年度であり、各サブプロジェクトで必要とされる可視化を行うシステムの開発が期待される。そこで、前年度までの研究をふまえて、構造解析用、流体解析用の 2 つのシステムを開発する。構造解析用は 4 面体データをベースとし、流体解析用は 6 面体の構造格子をベースとする。それぞれデータの形式が異なるため、システムも別々に開発することとした。

(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 21 年度進捗状況

まず、H18 年度には図 1 に示すような可視化処理の概念設計を行っていた。

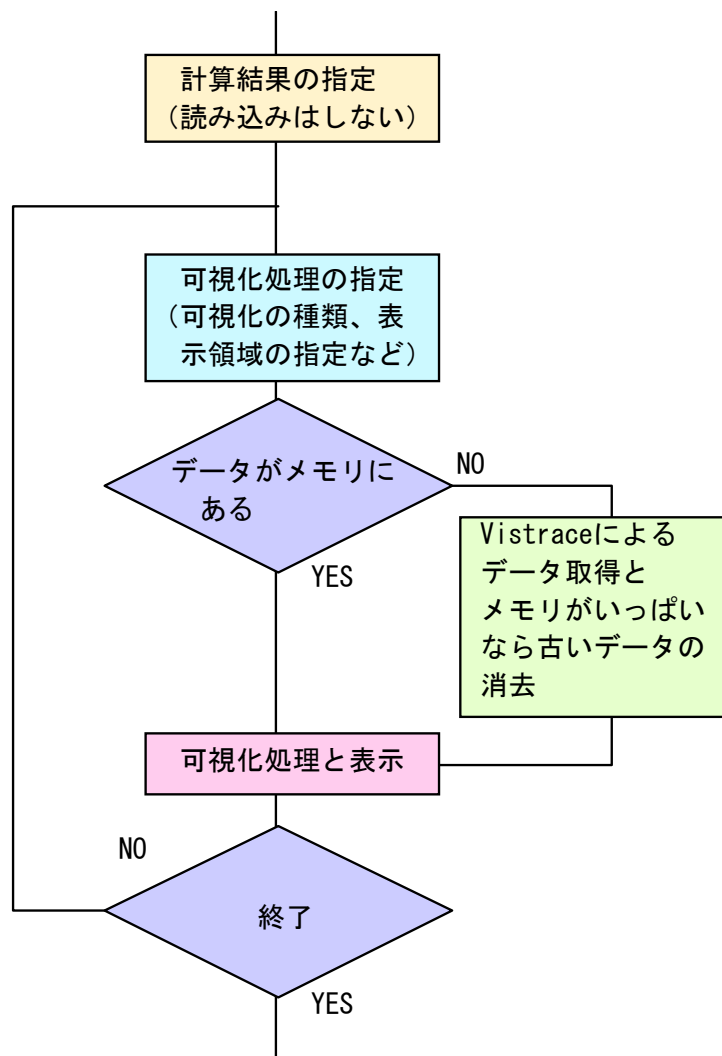


図 1 新しい可視化処理の概念

これは、従来の可視化ソフトウェアが、まず計算結果(や途中結果)をまるごと、あるいは間引いて読み込み、次にこれらに対して可視化処理を行い、表示するというプロセスをとっているのに

対し、計算結果を指定した時点ではデータは読み込まず、実際に可視化処理を行う段階でそれに必要なデータだけを **VisTrace** によってもって来るという動作をするものである。可視化処理の内容にもよるが、多くの可視化処理は同時に計算結果の全部は利用しないことが多いので、このように必要なときに必要なデータだけを転送することにすれば、より膨大な計算結果に対しても現実的な時間で処理が可能となるというものである。

まず、構造解析用では、サーバ上で動作するプログラムを作った。これは、データのすべてをメモリーに読み込んだ後、会話的な処理によって、必要なデータだけを取り出して、メモリーに連続的に並べるというものである。このとき、メモリーは動的に確保するが、確保したメモリーの先頭アドレスは外部参照できる変数に入れておく。こうすることで、**VisTrace** によりローカルの PC からデータを読み出すことが可能になる。このイメージを図 2 に示す。

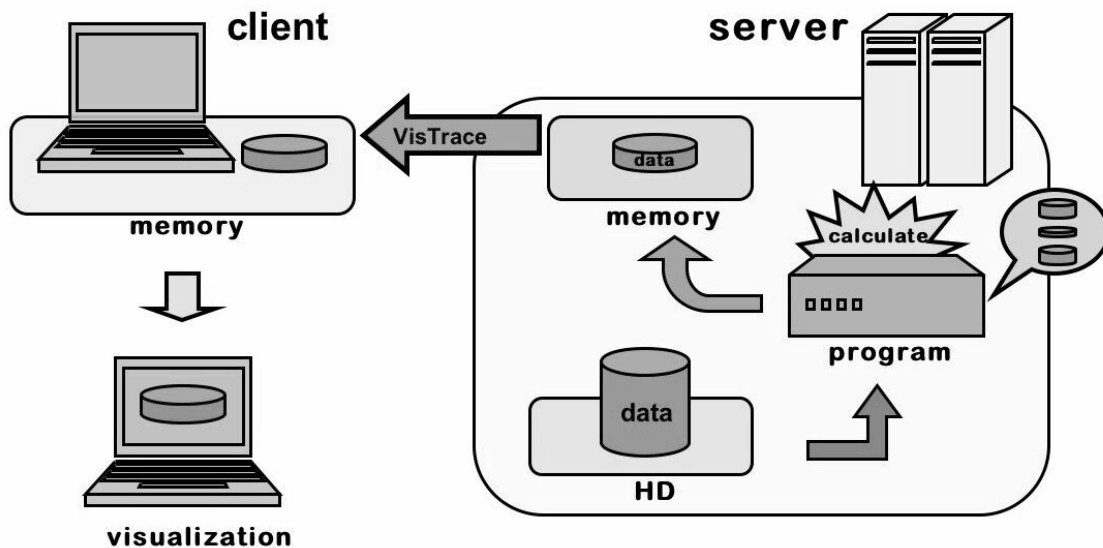


図 2 構造解析データ処理の概念

これによって行った可視化例を以下に示す。図 3 はパンテオンドームの可視化(要素数 4,138,488, 節点数 6, 090,997)である。(a)はすべてを表示しているが、(b)以下は部分的にデータを取り出して転送、可視化している。まず(b)は入り口部分のみを抽出するため、ある平面を指定してその片側を残すようにし、さらに表面パッチのみを転送した。結果として、データ量は約 1/100 になっている。(c)は断面抽出の例である。垂直と水平の 2 つの断面を取り、全体の形状を示すため表面パッチのエッジ抽出を合わせて行っている。これもデータ量は 1/70 くらいになっている。(d)は等値面の例である。これも全体の形状を見るためエッジ抽出も行っている。データ量は(c)とほぼ同じである。表示に要する時間も現実的な範囲に収まっている。これらをまとめて表 1 に示す。

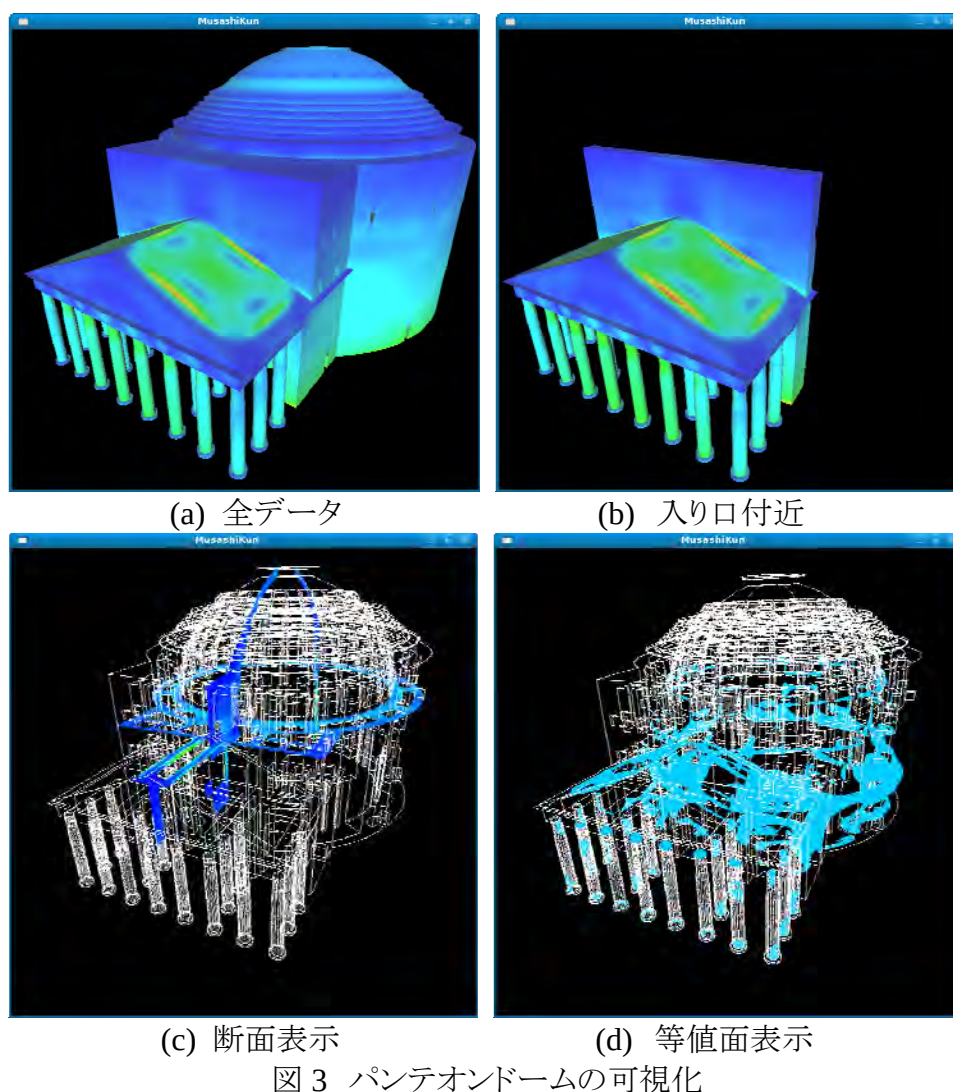


図 3 パンテオンドームの可視化

表 1 パンテオンドーム可視化のデータ量と処理時間

	データサイズ(MB)	抽出時間(s)	転送時間(s)
(a) 全データ	943		
(b) 入り口付近	10.4	1.61	8.04
(c) 断面	14.6	22.74	37.42
(d) 等値面	14.5	20.67	38.57

次に、流体解析のためのシステムについて述べる。ここで言う流体解析は、構造格子に基づくものの意味であり、非構造格子、例えば 4 面体要素に基づく流体解析は前者のシステムを用いる。構造格子では、データの並びに規則性があるので、データを部分的に取り出すのは配列のインデックスを指定するようにして得ることが可能である。そこで、流体解析用システムでは、図 2 の概念図に対し、サーバで特別なプログラムは走らせず、Vistrace のサーバプログラムのみを起動し、クライアントである PC からの要求によって、ファイルもしくはメモリのデータ(配列)の一部を転送するようにしている。図 4 に 10 億点(1000×1000×1000)の解析結果の可視化例を示す。データは収束超音波の解析結果であり、球面状の圧力波が集束点に向かって伝播している様子を表している。図は、ある 2 つの計算面上の圧力の等高線である。データは大規模なため、計算格子、計算結果とも 16 のファイルに分割されているが、図ではそれをうまく集めて可視化して

いる。データ量は、格子が 12.8GB、結果が 20.8GB であるのに対し、可視化に用いたのはそれぞれわずかに 25MB, 40MB である。

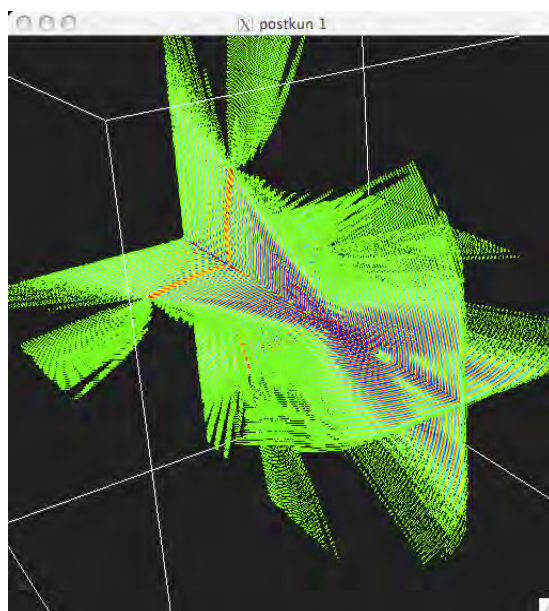


図 4 集束超音波のシミュレーション(面内の圧力分布)

一方、等値面のように、表示をしてみないとどの領域が描かれるか分からないものは少し工夫が必要である。ここでは、データをより小さなブロック(ここでは $64 \times 64 \times 64$ を 1 ブロックとする)に分けて、ブロックごとに必要かどうかの判断をし、必要なもののみを可視化処理するようにしている。必要かどうかの判断は、サーバでもクライアントでも可能であるが、ここではクライアントで行うようにした。そのため、最初の 1 回は最大で全ブロックを読み込む必要があるが、2 回目以降は、1 回目のときに各ブロックが持っているデータの範囲を記録することで、不必要なデータの転送／読み込みをさけるようにしている。図 5 は圧力の等値面で、必要な部分のみ転送／可視化することで、表示をすばやくかつ軽くして会話的な操作を可能としている。

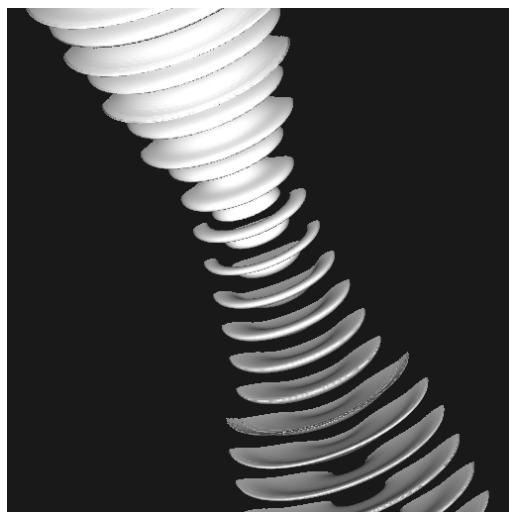


図 5 集束超音波の圧力の等値面表示(集束点付近)

以上により、本プロジェクトで要求される機能を満たす可視化システムを開発することができた。

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 2010 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. つい最近まで国内はもとより世界最速であった地球シミュレータは, 2002 年に登場しそのピーク性能は約 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) 大規模構造解析システムの開発
- (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行った。

(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 21 年度年度進捗状況

本年度に本システムに対して実施した主な改良点として、ソルバーのさらなる高速化を目指して行列記憶方式の改善を行った。

ADVENTURE_Fluid はこれまで、アルゴリズムの容易さやキャッシュ効率の良さなどの理由により、行列記憶方式として Element-by-Element 型のソルバー、すなわち、要素毎に行列ベクトル積を行い、最後に全体ベクトルへ足し合わせるという方式を採用してきた(図 1)。しかしながら、この方式ではトータルの演算量が増えてしまうために、例えキャッシュ効率が良くとも実行時間がそれほど速くないという欠点があった。

近年の PC 性能の向上により、メモリアクセス速度が大幅に向上し、また 2 次、3 次キャッシュの大型化により行列記憶方式として非ゼロ型の方式を用いても十分な性能が出せるようになってきた。そこで、非ゼロ型の行列記憶方式のひとつである Block CRS 方式を用いてソルバーの高速化を行った。ADVENTURE_Fluid で 1 節点あたりに速度ベクトル 3 成分と圧力の合計 4 自由度を持っている。この 4 自由度を一つのブロックとして、図 2 に示すような Block CRS 方式の行列記憶方式を採用した。

この行列記憶方式の改善により、結果として、ソルバーは平均的に 4~5 倍程度高速化された。

また、この変更に伴い、行列ベクトル積を行う際に必要となる総メモリ量がどのように変化したか調べたところ、以下ようになった。

(例)10×10×10 分割立方キャビティ問題(1,331 節点, 5000 要素(四面体))

○ Element-by-Element 方式の場合

行列: $256 \times \text{Nelem} \times \text{sizeof}(\text{double})$

ベクトル: $4 \times \text{Nnode} \times \text{sizeof}(\text{double})$

要素節点関係: $4 \times \text{Nelem} \times \text{sizeof}(\text{int})$

⇒ 10.4 MBytes

○ Block CRS 方式の場合(非ゼロ成分 15,191 個)

行列: $16 \times N \text{ 非ゼロ} \times \text{sizeof}(\text{double/float})$

ベクトル: $4 \times \text{Nnode} \times \text{sizeof}(\text{double/float})$

CRS_index: $1 \times N \text{ 非ゼロ} \times \text{sizeof}(\text{int})$

CRS_pointer: $1 \times \text{Nnode} \times \text{sizeof}(\text{int})$

⇒ 2.1 Mbytes

このことから分かるように、行列ベクトル積に必要な総メモリ量も約 5 分の 1 になり、この値は丁度高速化した割合と等しくなったことから、どちらの方式でも十分なメモリアクセス性能を示している事が分かった。

本年度実施した ADVENTURE_Fluid に対する改良点として、GPU への実装も挙げられる。近年、GPU の高速化と CUDA に代表される GPU で動作するアプリケーションの開発環境の整備などにより、所謂 GPGPU に関する研究が盛んに行われているが、ADVENTURE_Fluid もより安価で高速な環境で動作させるために CUDA を用いた GPU への実装を試みた。現時点では、ソルバーのうち最も演算量の多い行列ベクトル積の部分のみを GPU 上へ実行するという方法で実装を試みているため、単一 CPU で動作するのとほぼ同程度の速度で計算するに留まっているが、ソルバー全体を GPU 上で実行するように改良することにより、CPU-GPU 間のメモリ転送回数を大幅に削減し、単一 GPU で数 10GFlops 程度の高速化が実現できる見込みである。

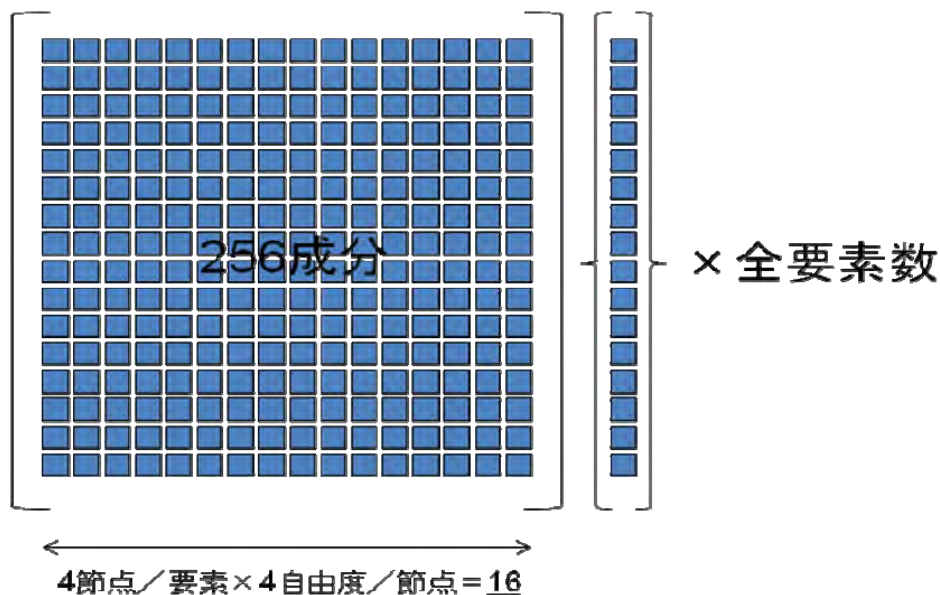


図 1 Element by Element 型ソルバーの模式図

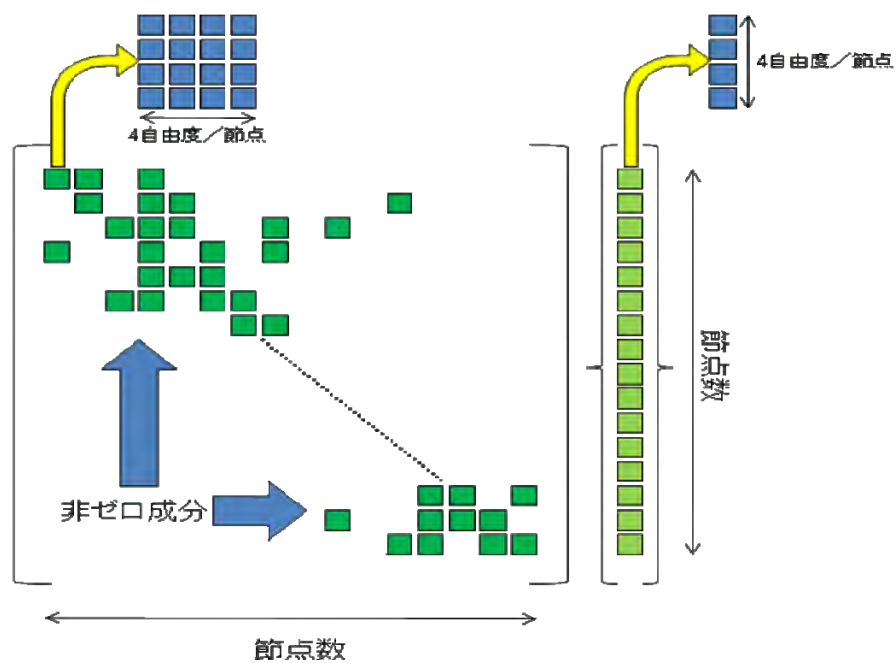


図 2 Block CRS 型ソルバーの模式図

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認し、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 21 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を行った。

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 への移植については、試験片レベル(～100 万節点)の三次元完全自動疲労き裂進展解析を行うためのプログラム群を整備し、完全自動疲労き裂進展解析が可能になった。なお、複数き裂問題の試行にも成功している。

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実装方法の検討とそのプログラム実装を行い、マップドメッシュモデルでは六面体要素による結果と同等であることを確認した。

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については、ES2 への移植にともない、ピーク性能比が約 30%から 10%へと低下が生じたため、ES2 向けのチューニングを行うことにより、約 30%の性能達成の見通しを得た。

大規模き裂入りモデルの作成の準備として、簡易モデルの作成と応力解析を実現した。図 1 に今回作成した、き裂入り 1,700 万自由度規模簡易モデルのメッシュ図を示す。簡易圧力容器モデルのノズル付け根部分にき裂を挿入している。このモデルを ES2, 16 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 2 に示す。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。

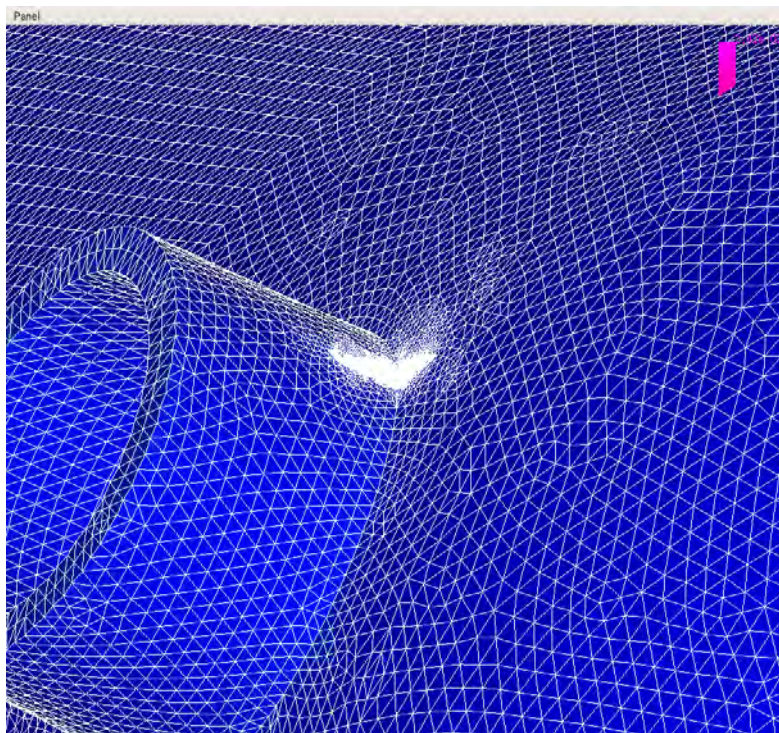


図 1 き裂入り簡易モデルメッシュ図

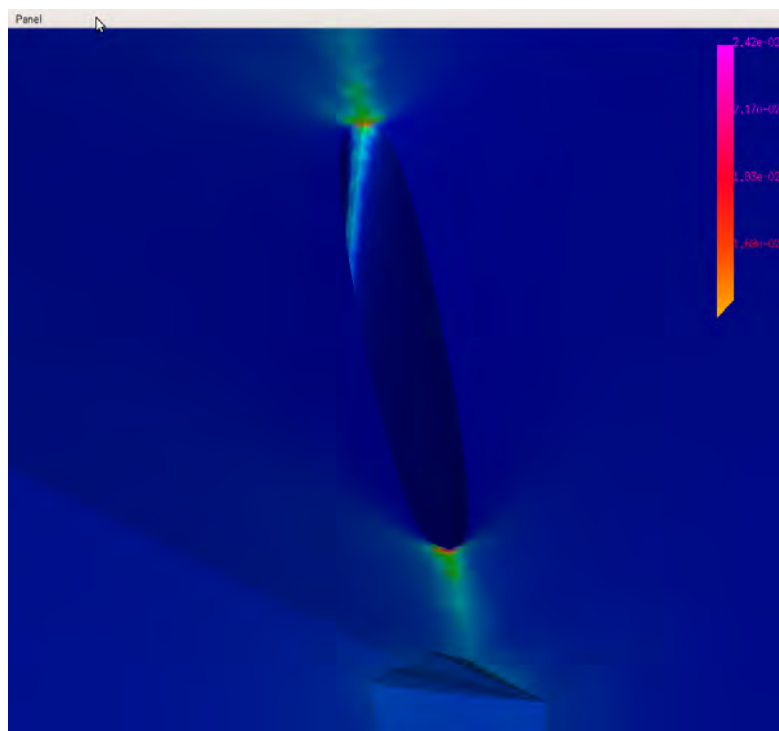


図 2 相当応力分布図

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る様々な構造物・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る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。

3.6.2. システム統合化のイメージ

これまでに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。

今後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ていきたい。

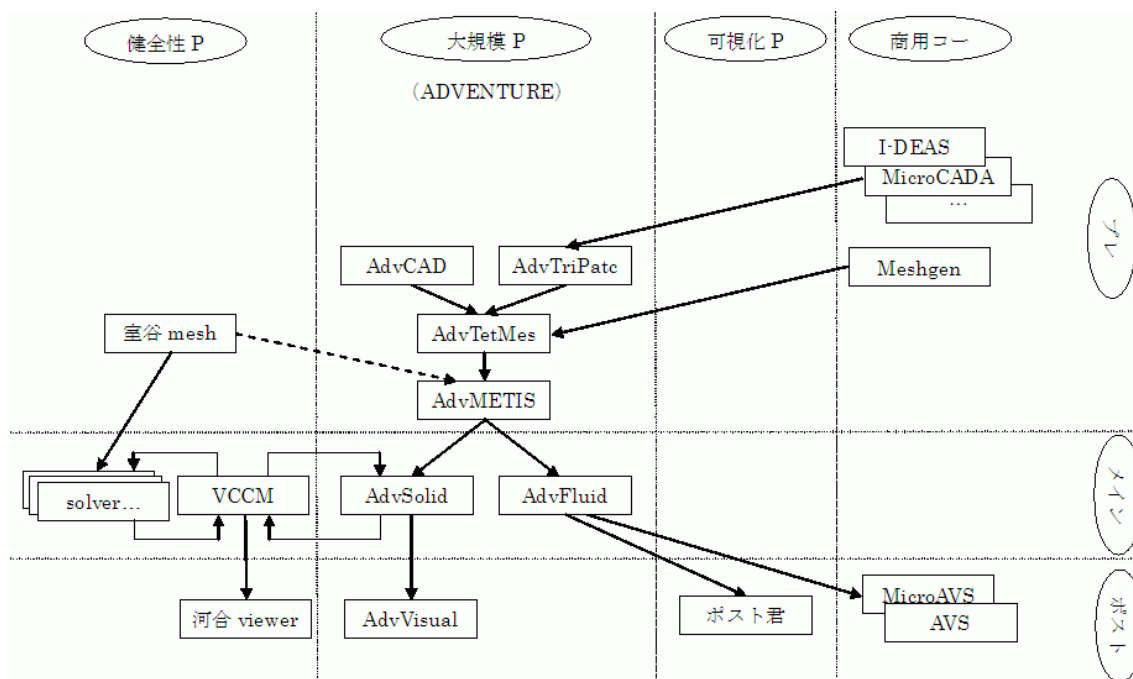


図 1 システム統合化イメージ図

4. 産学協同活動

4.1. (株)日立製作所機械研究所との連携

(1) 目標・計画

半導体実装製品の高速化や微細化に伴い、はんだ接続部には放熱性、インピーダンス特性、寸法精度の向上が求められている。これらの課題を解決するため、現在、はんだボール内部に Cu 球を配置した Cu コアはんだボール接続構造の開発を行っている。本接続構造は、はんだ内部に Cu を配置することによって、接続部の熱抵抗を低減し、インピーダンスを低減できる。さらに、リフロー工程中にはんだが潰れることを防止できるため、接続高さの精度向上にも適している。

コアを持たない従来のはんだボールと Cu コアはんだボールでは、破壊挙動や接続信頼性が異なる。従来はんだボールの破壊挙動や接続信頼性についてはこれまでに様々な研究が報告されているが、Cu コアはんだボールに関する研究例は少なく、その破壊挙動は明らかにされていない。本報では、Cu コアはんだボールの破壊挙動を解析的に解明すると共に、従来はんだボールとの接続信頼性の違いを明らかにすることを目標とした。

(2) 意義・国際社会との比較

微細はんだ接続部の信頼性評価は、日本が世界をリードしている分野の一つである。Cu コアはんだボールによる接続信頼性向上技術は、今後薄型化や微細化が進むはんだ接続部の信頼性確保において強力な手法となる。

(3) 研究内容

1. Cu コアはんだ接続構造の寿命解析手法

1.1 Cu コアはんだ接続構造

Fig.1 に、Cu コアはんだ接続構造の断面模式図を示す。半導体パッケージを Cu コアはんだ接続を用いて基板に実装した例であり、各はんだの中央部に球形の Cu コア材を配置していることが本接続構造の特徴である。本構造は、Cu コア表面にはんだめっきを施し、リフロー工程においてははんだを溶融させることで半導体パッケージを基板上に実装して製造される。このとき、はんだよりも融点の高い Cu は溶融しない。そのため、リフロー後のいずれの接続高さもコアの直径以上となり、反りや重量が大きい半導体パッケージを実装する場合であってもはんだが潰れることを防止できる。その結果、ばらつきの小さい安定した接続高さを確保できる。また、はんだ内部にはんだよりも熱伝導性や電気伝導性の高い Cu が存在することで、熱的、電氣的に優れた特性を持つ。

上記の接続高さ、高さの低ばらつき、はんだ内部にはんだとはヤング率や線膨張係数の異なる Cu が存在するといった特徴は、接続信頼性にも大きく寄与すると考えられる。

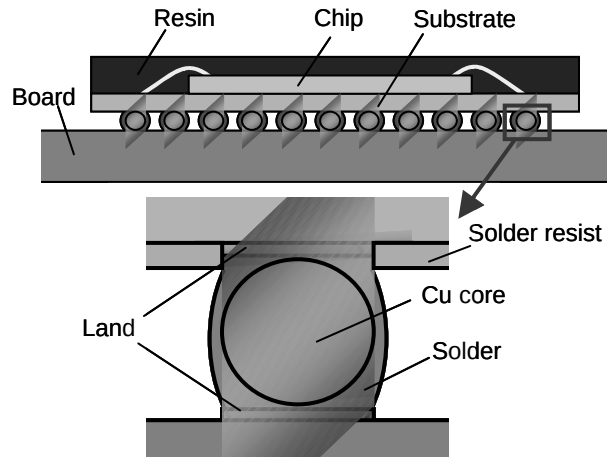


Fig.1 Cu-cored solder joint

1.2 接続寿命解析手法

従来、はんだボール接続部の低サイクル疲労寿命は、次式に示す Coffin-Manson 則^{2, 3)}で評価されてきた。

$$\Delta \varepsilon_p = C_p N_f^{-\alpha_p} \quad (1)$$

ここで、 $\Delta \varepsilon_p$ ははんだ接続端部に生じる塑性ひずみ範囲、 N_f ははんだ材料の低サイクル疲労寿命、 C_p や α_p は疲労試験から求まる係数であり、接続部の材料、形状、寸法によって決まる。 C_p や α_p が材料だけでなく形状や寸法にも依存するのは、本来は材料のき裂発生寿命を評価する式(1)を用いて、き裂進展の影響を含む接続部の寿命を評価するためである。き裂進展の影響が未知な構造ではこれらの係数が求まらないため、式(1)による接続寿命評価は困難である。

コア材を持たない従来のはんだボール接続構造では、はんだとランドの接続端部に微小き裂が発生した後、ランド界面近傍のはんだ内部をき裂が進展して破断に至ることが知られている⁴⁾。一方、Cu コアはんだボール接続構造では、ランド界面近傍には Cu コアがあるため、従来のはんだボール接続部とは破断に至るまでのき裂の進展挙動が異なると考えられるが、その進展挙動は明らかになっていない。き裂進展挙動が未知の構造を扱うことができない式(1)では、Cu コアはんだ接続構造の接続寿命評価は困難であった。

筆者らはこれまでに、き裂進展挙動を考慮できる寿命評価手法を開発し、様々なはんだ接続部の寿命評価に適用してきた^{4, 5)}。この手法では、き裂の発生や進展時に累積するダメージに基づいてはんだ各位置の寿命を評価することで、き裂進展経路や接続寿命を算出する。き裂発生位置やその後の進展経路を自動的に算出できるため、き裂進展挙動が未知な構造の寿命評価が可能である。本手法を用いて、Cu コアはんだボール接続部のき裂進展挙動を解明し、従来のはんだボール接続部との接続寿命の違いを評価した。

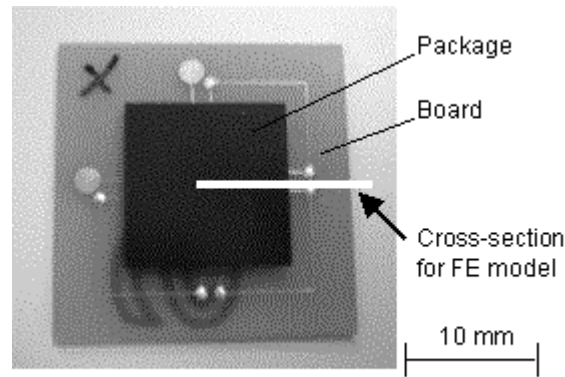


Fig.2 Analysis object

2. Cu コアはんだ接続構造の寿命評価

2.1 解析条件

Cu コアはんだ接続部の特徴が接続寿命に及ぼす影響を明らかにするため、温度サイクル試験を模擬したき裂進展解析を実施した。解析は Cu コア有無と接続高さの条件が異なる 5 条件で実施した。解析対象は Fig.2 に外観を示す 1 辺 24 mm の実装基板上に 1 辺 13 mm の半導体パッケージを片面実装した構造である。解析は、Fig.3 に示す様に解析対象中央部の断面形状をモデル化した 2 次元一般化平面ひずみ条件で実施し、形状の対称性を用いて断面の 1/2 形状をモデル化した。パッケージ内部のチップ寸法は 1 辺 7.2mm、厚さ 0.4mm である。接続部はパッケージ中央部に 9 個とパッケージ周辺部に 6 個(1/2 形状のためモデル化した接続数は各半分)を 0.5 mm ピッチで配置し、周辺部に配置した片側 3 つの接続部のき裂進展挙動を評価した。き裂進展解析には自社開発コードを用いた。はんだは温度依存弾塑性体、その他の材料は温度非依存弾性体と仮定した。温度サイクル条件は 125°C/-40°C である。

なお、実際の温度サイクル試験において初めに破断するのはパッケージ角部の接続部であるため、接続寿命の絶対値を評価する場合には角部の接続部を評価できる 3 次元モデルを用いる。今回は Cu コアはんだ接続構造の破壊メカニズム解明や接続構造の特徴が接続寿命に及ぼす影響の評価が目的であるので絶対値の評価は行わず、計算コストの小さい 2 次元モデルを用いた。また、き裂進展解析を用いて接続寿命の絶対値を評価する場合には要素寸法の影響を補正する必要があるが⁵⁾、今回は絶対値を評価しないので補正は行わない。

Fig.3 に 5 条件の解析モデルを示す。き裂進展を許容するはんだ領域は、1 辺 2 μm 寸法に要素分割した。ケース 1 と 2 は実際の試験片寸法に基づく条件であり、ケース 1 が Cu コア有りの条件、ケース 2 が Cu コア無し(従来はんだボール接続構造)の条件である。ケース 1 がケース 2 より接続部が高いのは、ケース 1 が直径 260 μm のコア材を持つことで 260 μm 以上の接続高さを確保できるのに対して、ケース 2 はパッケージ重量によってはんだが潰されるためである。ケース 3 ～5 は、接続高さの確保や高さばらつき低減といった Cu コアはんだボール接続部の特徴の効果を検討するための仮想的な条件である。ケース 3 は接続高さの影響を評価するために Cu コア無しはんだ接続構造の接続高さを Cu コアはんだ接続構造と同じにした条件である。ケース 4 と 5 は接続高さばらつきが接続寿命に及ぼす影響を評価するためにパッケージ周辺部に反り変形を与えて接続部毎に高さを変化させた条件である。

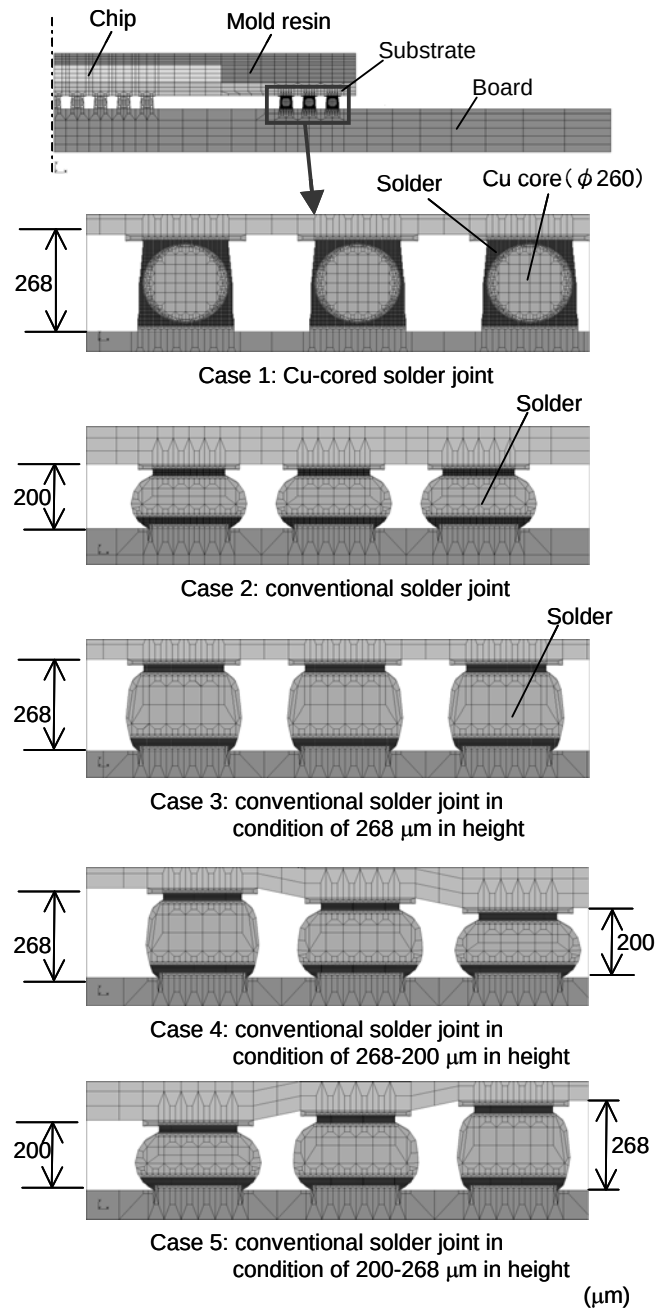


Fig.3: analysis conditions

2.2 解析結果

Fig.4にケース1(Cuコア有りの条件)の解析結果を示す. 図中に黒色で示す箇所がき裂である. 500 サイクルで3つの接続部それぞれのパッケージ基板側接続部近傍に微小き裂が発生し, その後き裂がランド界面近傍を進展して1700サイクルで破断に至った. また, 1700サイクル時点では, ランドの界面近傍だけでなく, コアとはんだの界面近傍にもき裂が発生・進展している. このコア界面のき裂は, Cu とはんだの線膨張係数差によって界面近傍にダメージが累積されることで生じる Cu コアはんだ接続特有のき裂進展挙動と考えられる. Fig.5にケース2(Cu コア無しの条件)の解析結果を示す. 300 サイクル時点で3つの接続部それぞれのパッケージ基板側接続部近傍にき裂が進展しており, 500 サイクルで破断に近づき, 最終的に 1100 サイクルで破断に至った. 500サイクルから1100サイクルの間でき裂の進展速度が非常に遅いのは, 3つの接続部全てがほぼ同時に破断に近づいたことで剛性の大きい箇所が無くなり, 熱変形を吸収しやすく

なったためと考えられる。実際には奥行き方向にも接続部は存在しており、それら全ての接続部が同時に破断に近づくことは考え難い。したがって、この現象は今回 2 次元モデルを用いたために生じたものであり、実際の破断寿命は 1100 サイクルよりも短いと考えられる。ケース 1 と 2 の結果と比較すると、Cu コアが有るケース 1 は、き裂発生寿命と破断寿命が共に長い。き裂発生寿命が長くなるのは、コア材による接続部の剛性向上の効果と考えられる。Fig.6 に初期形状(き裂発生前)の塑性ひずみ分布を示す。ケース 2 では上部のランド界面近傍のはんだに塑性ひずみが集中するのに対して、Cu コアが有るケース 1 では上部のランド界面とコア界面近傍に塑性ひずみが分散し、最大値は小さい。

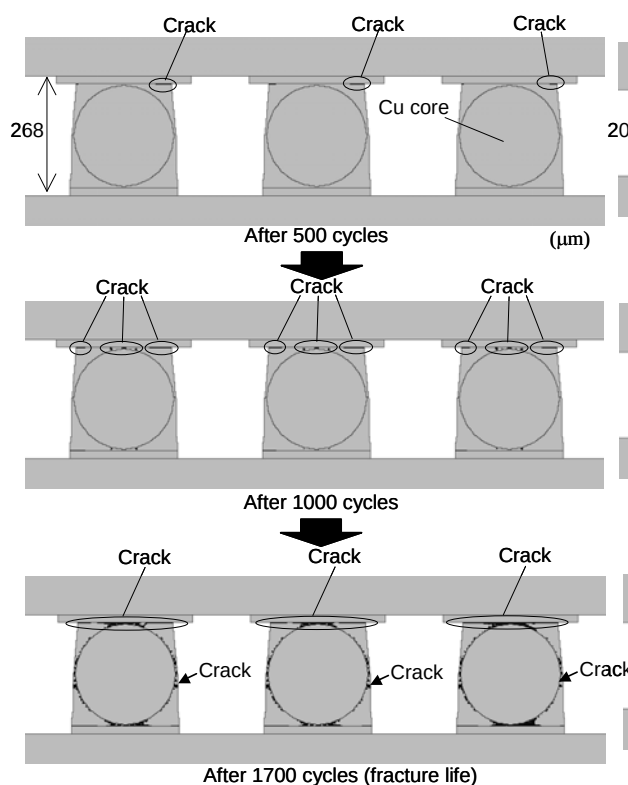


Fig.4 Crack-propagation analysis result of case 1 (Cu-cored solder joint)

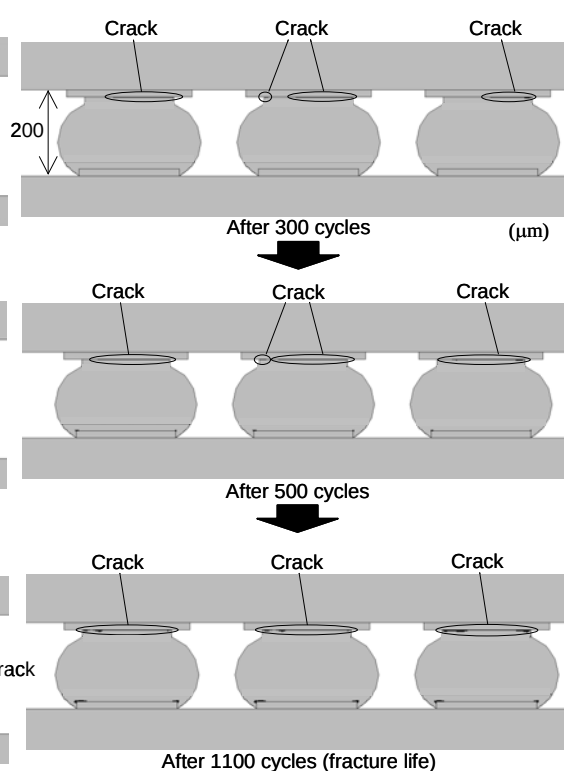


Fig.5 Crack-propagation analysis result of case 2 (conventional solder joint)

このひずみ分布の違いが、き裂発生寿命の差の原因である。き裂進展寿命が長くなる原因として、き裂進展挙動の違いが考えられる。ケース 2 ではき裂はランド界面近傍のみを進展して破断に至った。一方、ケース 1 ではランド界面近傍だけでなく、コアとはんだの界面近傍にもき裂が進展した。この様に、複数のき裂進展経路を持つことで、それぞれのき裂を進展させる駆動力が分散されて進展速度が低下すると共に、破断するまでの総き裂長さが大きくなる。これらの効果によって、き裂進展寿命が長くなったと考えられる。

Fig.7 に、ケース 3(仮想的に接続高さをケース 1 と同じにした条件)の解析結果を示す。300 サイクルで外側 2 つの接続部のパッケージ基板側接続部近傍に微小き裂が発生し、800 サイクルで破断に至った。ケース 2 と比較すると、300, 500 サイクルのいずれにおいても接続部の高いケース 3 の方がき裂長さは短く、接続高さの増加が長寿命化に寄与していることが分かる(ケース 2 の破断寿命がケース 3 よりも長いのは上記解析モデル上の理由と考える)。ただし、本条件は接続高さがケース 1 と同じであるにも関わらず、き裂発生寿命、破断寿命ともにケース 1 よりも短い。このことから、Cu コアはんだ接続構造が長寿命になる原因は、接続高さの大きさだけではないことも確認できる。

Fig.8, 9 にケース 4, 5(仮想的にパッケージ端部に反り変形を与えた条件)の解析結果を示す。

破断寿命はそれぞれ 600 サイクルと 700 サイクルであり、高さばらつきによって短寿命になることが確認できた。Cu コアはんだ接続構造が持つ接続高さの低ばらつきといった特徴も、長寿命化に寄与している。

Table 1 と Fig.10 に解析結果のまとめを示す。今回解析した全条件の中で、ケース 1(Cu コア有りの条件)が最も長寿命であった。Cu コアはんだ接続構造では、接続部の剛性増加、接続高さの大きさや高さの低ばらつきといった特長によって、き裂発生寿命が長くなる。さらに、き裂発生後には、き裂がランド界面近傍だけでなくコア界面近傍に分散して進展することでき裂進展寿命が長くなる。これらの効果によって、破断寿命が長くなったと考えられる。

2.3 実測結果との比較

前節の解析結果を温度サイクル試験の実測結果と比較し、解析結果の妥当性を検証した。Fig.11 に、2236 サイクル後の Cu コアはんだ接続構造の断面写真を示す。パッケージ基板側ランド界面近傍だけでなく、Cu コア界面近傍にもき裂が進展していることが観察される。解析結果において Cu コアはんだ接続特有のき裂進展挙動として表れたコア界面近傍のき裂が実測でも見られることから、解析で得られたき裂進展挙動の妥当性が確認できる。

Fig.12 に、Cu コア有無の 2 条件(解析ケース 1 と 2 に対応)で実施した温度サイクル試験結果を示す。Cu コア無しの条件と比較して Cu コア有りの条件の方が長寿命であり、前章の解析で示した Cu コアによる長寿命化の効果が確認できる。

これらの様に、前節において示したき裂進展解析結果は、き裂進展経路や破断寿命の傾向が実測結果と良く一致した

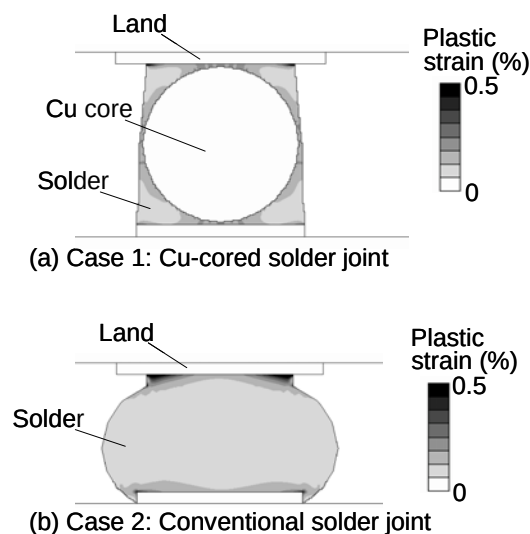


Fig.6 Plastic strain distribution of initial shape

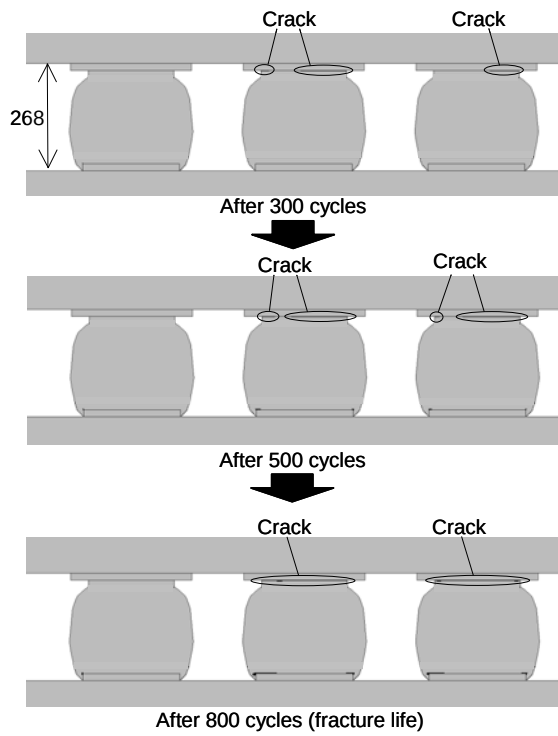


Fig.7 Crack-propagation analysis result of case 3 (conventional solder joint in condition of 268 μm in height)

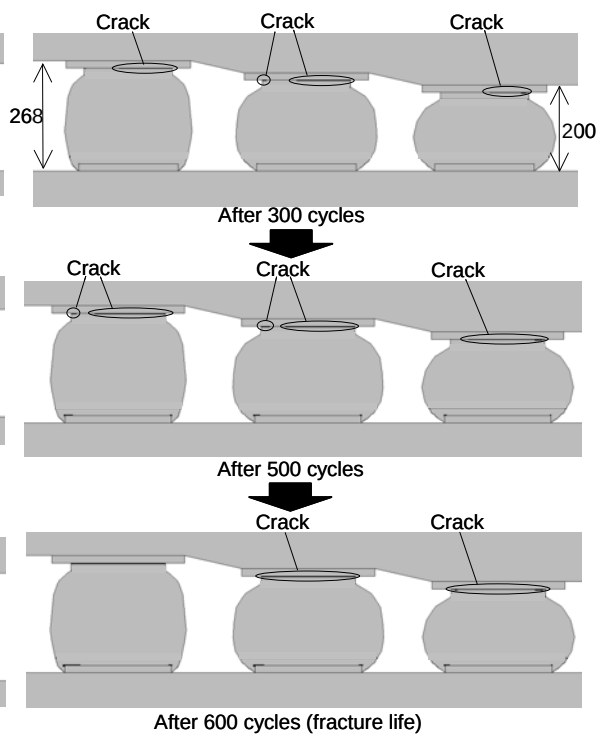


Fig.8 Crack-propagation analysis result of case 4 (conventional solder joint in condition of 268-200 μm in height)

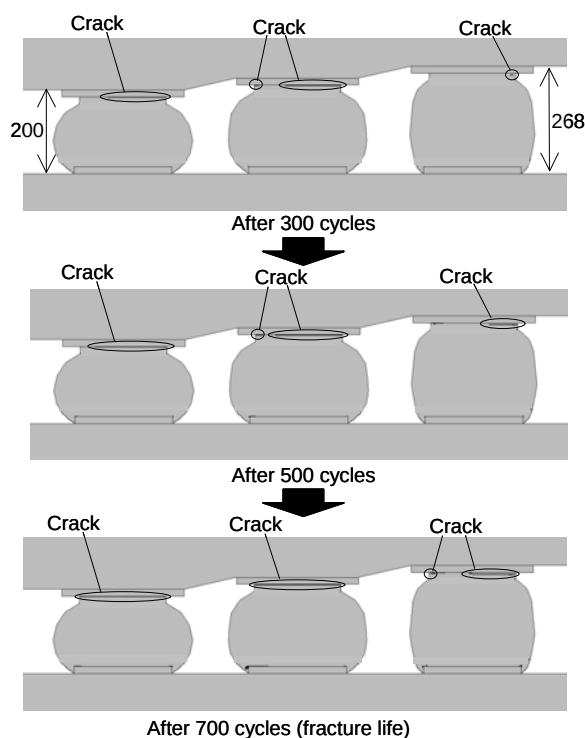


Fig.9 Crack-propagation analysis result of case 4 (conventional solder joint in condition of 200-268 μm in height)

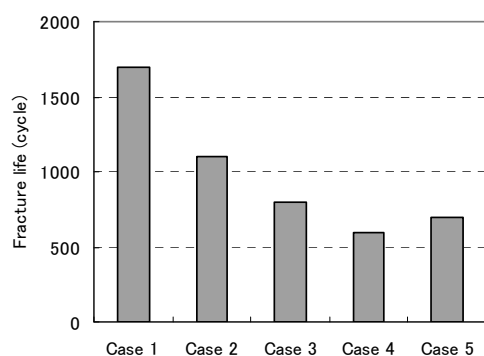


Fig.10 Comparison of fracture life

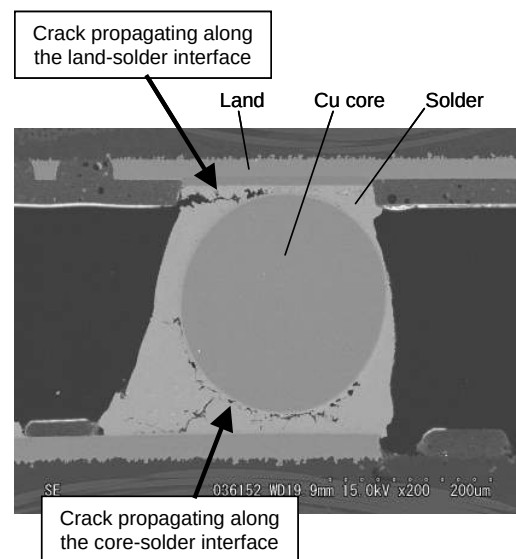


Fig.11 SEM cross-sectional micrographs of Cu-cored solder joint after thermal fatigue test (after 2236 cycles)

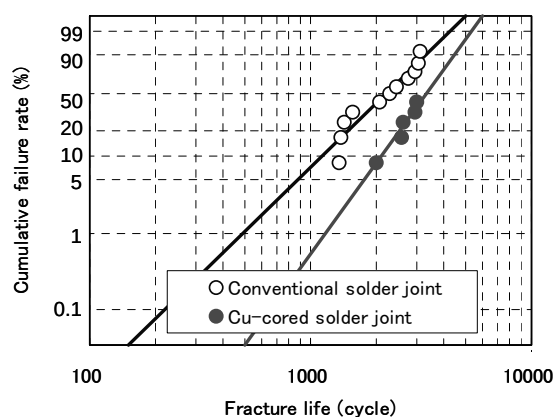


Fig.12 Comparison of thermal fatigue test result

Table 1 Comparison of fracture life

Case	Joint structure	Joint height (μm)	Condition of joint height	Fracture life (cycle)
1	Cu-cored solder ball	268	Measured condition	1700
2	Conventional solder ball (non-cored)	200	↑	1100
3	↑	268	Virtual condition	800
4	↑	268-200	↑	600
5	↑	200-268	↑	700

(4) 平成 21 年度進捗状況

き裂進展解析手法を用いて Cu コアはんだ接続構造の接続信頼性を評価し、温度サイクル試験による破壊メカニズムを検討し、以下の結論を得た。

- (1) Cu コアはんだ接続構造は、ランド界面近傍にき裂が進展した後にコア界面近傍にもき裂が発生し、き裂が分散して進展した後に破断することを明らかにした。

- (2) Cu コアはんだ接続構造が持つ接続部の剛性増加や接続高さばらつき低減といった特徴によってき裂発生寿命が長くなる効果と、き裂が分散して進展することでき裂進展寿命が長くなる効果を活用することで、耐温度サイクル性を向上できることを明らかにした。
- (3) 解析結果を実測結果と比較し、き裂進展経路や破断寿命の傾向は実測結果と良く一致することを確認した。

参考文献

- 1) 若野基樹, 千綿伸彦, "Cu コア Sn-Ag-Cu はんだボールのはんだ接続信頼性", 14th Symposium on "Microjoining and Assembly Technology in Electronics", 2008, pp.223-228
- 2) Coffin, L.F., Jr.: A Study of Cyclic-Thermal Stress in a Ductile Metal, Transactions of the ASME:76 (1954), 931.
- 3) Manson, S. S.: Behavior of Materials Transactions: 1 (1970), p. 805.
- 4) 谷江尚史, 寺崎健, "半導体微細はんだ接続部き裂経路を再現するき裂進展モデル", 日本機械学会論文集(A編), 第72巻717号, 2006, pp.638-645
- 5) 谷江尚史, 寺崎健, "き裂進展解析による半導体はんだ接続寿命評価手法", 日本機械学会論文集(A編), 第73巻727号, 2007, pp.372-378

4.2. 独立行政法人 原子力安全基盤機構との連携

当センターで開発する構造健全性評価システムの信頼性の検証と実務への応用を目的として、独立行政法人原子力安全基盤機構(以下 JNES)への技術支援を行う。当センターは、基盤要素技術である FMM と VCCM による四面体有限要素を利用したき裂進展解析より得られる新しい知見、混合モードき裂進展予測モデルの開発、高精度 FMM などの先進的かつ学術的な研究開発を行う。一方、JNES では各種のき裂試験を実施し、き裂進展システムとの比較検討を通して、開発するシステムの信頼性や妥当性を検討する。さらに、実際の健全性評価業務への適用結果を当センターにフィードバックすることにより、開発したシステムの有効性を実証し、また、システムのユーザービリティを向上させることを目指す。(詳細は構造健全性の項を参照)

また、当センターで開発した構造解析システム(FMM-VCCM)より得られる知見をベースにして、JNES、株式会社テクノスター、プロメテック・ソフトウェア株式会社と共同でプリ・ソルバー・ポストを完備した世界最先端レベルの破壊力学解析ソフトを構築する。図 1 に複雑形状き裂を挿入した有限要素法モデル作成状況を示す。このような複雑形状のき裂を、ユーザーが任意箇所に設定でき、入力として初期ひずみまたは初期応力を選択し解析できるソフトウェアは世界でも例は少ないため、実業務における構造健全性解析や構造設計において非常に強力なツールを提供することが出来る。

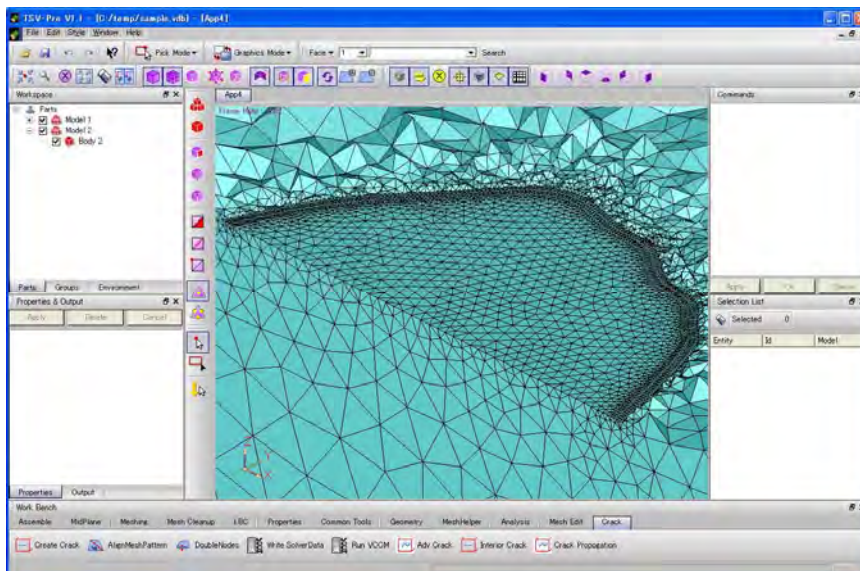


図 1 複雑形状のき裂を挿入した要素分割モデル

4.3. 東京理科大との連携

東京理科大学の早瀬研究室と流れのある配管内の腐食を同定する問題について共同研究をおこなっている。配管は各種プラントや上下水道・ガスなどの社会インフラの構成部材として広く利用されており、配管の腐食による事故の防止と保守コストの低減を図るために、精度よく配管の腐食を同定する手法を開発することを目標としている。東京理科大学ではおもに実験を、本センターではシミュレーション方法について研究を行っている。本年度は、逆問題の観測方程式のモデル化について検討することを目標とした。中性環境における金属部材の腐食は、溶存酸素によるカソード反応が支配的であるので、溶存酸素の金属部材表面への拡散速度が、カソード反応の律速反応になっていると考えられる。そこで、金属部材近傍の流体の速度勾配、および腐食反応を律速している溶存酸素の濃度分布に着目して、流れのある配管内の腐食を精度良くシミュレーションできるか考察を行っている。更に、今年度から、これらの解析をアダプティブに行うために、階層メッシュを用いた手法も開発された。

4.4. 本田技術研究所との連携

本田技術研究所から、「ヘッドライト損傷解析手法の確立」と「永久変形量予測技術の開発」を依頼されている。従来は、衝突解析ソルバーRADIOSS を用いることによって、これらの解析していた。しかし、より詳細で正確な解析を求めたいという要望から RADIOSS にプリポスト処理を加えることによって、これらの問題を解決する。「ヘッドライト損傷解析手法の確立」に対しては、アダプティブな亀裂進展解析の機能を、「永久変形量予測技術の開発」に対しては、アダプティブな永久解析の機能を加えることになる。これらの機能を加えることによって、超大型の並列計算機や専用のソルバーで長時間かかった解析を、これまでと同じ計算機環境で一晩あれば解析できるようになる。

4.5. インテグラル・テクノロジー株式会社

本連携は、「オーサリング機能をもつCAEソフトウェアの販売・カスタマイズ事業」という題目で、経済産業省近畿経済産業局の新連携支援事業の審査を受け通過した事業である。連携の仕組みは、インテグラル・テクノロジー株式会社をコア企業、エンジニアス・ジャパン株式会社を連携企業、東洋大学計算力学センターとアルテアエンジニアリング株式会社を外部支援団体としている。当センターは、有限要素法の計算精度を保持したままメッシュの数を減らす技術を提供する形で協力している。

5. 国際協力

5.1. 成均館大学(Sungkyunkwan University)

1 月 14 日に計算力学研究センター1 階会議室において“CCMR – Sungkyunkwan University student workshop”を開催した. 下記にプログラムと会場の様子を示す.

Korea1	A Numerical Approach to Evaluate Thermal Stratification and Wall Thinning Sun-Hye, Kim (M.S Student)
Japan1	Fluid - Structure Coupled Analysis Using Enriched Free Mesh Method S. Nagaoka (Ph. D Student)
Korea2	Physical Phenomena of Towers Built by the Manicure Crab <i>Cleistostoma Dilatatum</i> in the Korean Mudflat Dae-Geun, Cho (Ph. D Student)
Japan2	Eigen-frequency Analysis Using Enriched Free Mesh Method Y. Kobayashi (Ph. D Student)
Korea3	Numerical Simulation of Bio-molecule Mixing and Reaction in Cilia-induced Flow Field Hyun-Boo, Lee (M.S Student)
Japan3	Study on the Enriched Free Mesh Method and its Application to Fracture Mechanics H. Suzuki (Ph. D Student)
Korea4	2D FE Model of Shear Mechanism for Rolling Contact Fatigue Crack in Rails Doo-Ho, Cho (Ph. D Student)
Japan4	Development of the Free-Kick Suport System using Self-Organizing Map M. Masuda (Ph. D Student)
Korea5	Convergence Design Project Won-Seok, Choi (M.S Student)



図 1 講演風景



図 2 会場の様子

6. 情報発信

6.1. 東洋大学・読売新聞 連続国際シンポジウム

6月19日に東洋大学白山キャンパス井上円了ホールにおいて、東洋大学・読売新聞共催の連続国際シンポジウム“共生社会の実現と先端科学への挑戦 第7回 安全・安心とそのシミュレーション科学”を開催した。プログラムは以下の通りである。

安全・安心とそのシミュレーション科学

主催 東洋大学計算力学研究センター
共催 (独)科学技術振興機構
後援 読売新聞東京本社

日時 6月19日(月) 13:00-17:30
場所 東洋大学白山キャンパス井上円了ホール
URL <http://www.ccmr.toyo.ac.jp/sympo2009.html>

主催者代表挨拶 松尾友矩(東洋大学 学長)
共催者挨拶 市丸修(科学技術振興機構イノベーション推進本部総括参事)
シンポジウム議長挨拶 矢川元基(東洋大学計算力学研究センター長 大学院教授)

プレナリ講演

司会: 高橋桂子(海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター プログラムディレクター)
パネリスト

Y-J. Kim (韓国 成均館大学 教授)
N. Nikiforakis (英国 ケンブリッジ大学 教授)
Meike Vogt (スイス スイス工科大学 研究員)
矢川元基

パネルディスカッション コーディネータ 矢川元基

Y-J. Kim
N. Nikiforakis
塩谷隆二 (東洋大学 総合情報学部 教授)
高橋桂子
田村善昭 (東洋大学 総合情報学部 教授)
Meike Vogt
山中康裕 (北海道大学 大学院地球環境科学研究所 准教授)

閉会挨拶 矢川元基



図 1 パネリスト



図 2 会場の様子

6.2. 第 9 回計算力学フォーラム (工学院大学)

7 月 21 日に工学院大学において開催された第 37 回可視化情報シンポジウムの中で第 9 回計算力学フォーラムを行った。プログラムは以下の通りである。

第 37 回可視化情報シンポジウム

URL : <http://www.visualization.jp/event/detail/symp2009.html>

計算力学と可視化

座長 矢川元基(東洋大), 田村善昭(東洋大)

日時 7 月 21 日(月) 12:40-14:00

1. Level-of-detail を用いた有限要素解析と可視化
室谷浩平(東洋大), 矢川元基
2. 大規模計算力学解析結果可視化のためのデータ解析
田村善昭(東洋大), 古澤寛行(東洋大院), 藤井秀典, 宮本勇輝
3. 地球シミュレータによる 2 億自由度構造解析とオフライン可視化
河合浩志(東大), 荻野正雄(九大院), 塩谷隆二(東洋大), 吉村忍(東大)
4. パネルディスカッション

6.3. 第 10 回計算力学フォーラム (金沢大学)

10 月 11 日に金沢大学において開催された日本機械学会 第 22 回計算力学講演会の中で第 10 回計算力学フォーラムを行った. 東洋大学からの研究成果だけでなく, 企業等の研究成果も発表され, 議論された. プログラムは以下の通りである.

日本機械学会 第 22 回計算力学講演会 CMD2009

URL : <http://www.jsme.or.jp/conference/cmdconf09/>

構造物の健全性評価と計算力学技術

企画 矢川元基(東洋大), 塩谷隆二(東洋大)

司会 塩谷隆二(東洋大)

日時 10 月 11 日(日) 10:00-12:00

1. 三次元複雑形状き裂解析のための四面体自動メッシュ生成について
河合浩志(東大), 岡田 裕(理科大)
2. 中立面抽出による三次元モデルのシェル化
立石 勝(テクノスター), 四條清文, 藤田大輔
3. 3 次元階層メッシュを用いた亀裂進展解析
室谷浩平(東洋大), 塩谷隆二, 矢川元基
4. き裂進展解析コードの検証解析
土居博昭(JNES), 柴田 悟, 井上博登
5. 粒子法によるマルチフィジックスシミュレーション
入部綱清(プロメテック)
6. 異物検出のためのシミュレーション
江澤良孝(東洋大), 古舘裕樹, 須賀一博(東理大), 青木 繁(東洋大)



図 3 会場の様子



図 4 会場の様子

6.4. 第5回計算力学シンポジウム (白山)

表記行事を、下記のとおり企画している。

日時：2010年3月24日

場所：東洋大学白山キャンパス2号館16階スカイホール

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)など詳細は未定であるが、上記参加者の平成21年度の成果発表を中心に講演を行う予定である。講演される予定のプログラムは以下の通りである。

文部科学省私立大学学術研究高度化推進事業(学術フロンティア推進事業)

東洋大学計算力学研究センター

第5回計算力学シンポジウム

平成22年3月24日(水)

東洋大学白山キャンパス2号館16階スカイホール

13:00-13:10 開会挨拶 矢川元基(東洋大学)

13:10-14:20 構造健全性

矢川元基(東洋大学)「計算力学の将来ビジョン」

岡田裕(東京理科大学)「三次元破壊力学解析の高度化に関する研究」

松原仁(琉球大学)「3次元混合モードき裂進展シミュレーション」

関東康祐(茨城大学)「Hermite型要素を用いたき裂問題へのXFEMの適用」

酒井譲(横浜国立大学)「SPH法によるクラック進展解析」

谷江尚史(日立製作所)「半導体Cuコアはんだ接続部のき裂進展解析」

古川知成(バージニア工科大学)「非接触センサのデータフュージョンによる構造健全性評価」

14:20-15:10 逆問題・最適化

畔上秀幸(名古屋大学)「材料強度規準に基づくリンク機構の形状最適化」

江澤良孝(東洋大学)「逆解析と最適化シミュレーションの効率化」

村松壽晴(日本原子力研究開発機構)「知識処理融合型複合熱流動数値解析によるT字形合流管内流れの評価」

須賀一博(東京理科大学)「階層メッシュと遺伝的アルゴリズムを用いた最適化手法の開発」

塩崎聖治(東洋大学)「分子シミュレーションによる表面反応の解析」

15:10-15:20 休憩

15:20-16:20 大規模シミュレーション

宮崎則幸(京都大学)「原子シミュレーションによる水素脆化機構の解明」

藤澤智光(プロメテック)「GPUを活用した粒子法シミュレーション」

松岡浩(理化学研究所)「ビット演算によるシームレスな流体シミュレーションの展開」

中林靖(東洋大学)「大規模流体解析システムの高速度化とその最適化問題への応用」

和田義孝(諏訪東京理科大学)「WebベースCAEの疲労き裂進展解析への適用」

塩谷隆二(東洋大学)「地球シミュレータによる大規模シミュレーション」

16:20-16:40 プレ・ポストプロセッシング

室谷浩平(東洋大学) 「階層メッシュを用いたアダプティブ解析とその応用」

田村善昭(東洋大学) 「大規模解析データに対する可視化システムの構築」

16:40-17:20 パネルディスカッション

17:20-17:30 閉会の辞 矢川元基(東洋大学)

7. 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。

7.1. 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 4 名と修士課程の学生 2 名で各週程度セミナーを開き、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 を発展させる研究や、き裂進展解析を様々な角度から解析を行う研究、PC クラスタを用いた大規模計算を効率よく行う研究が主に行われている。

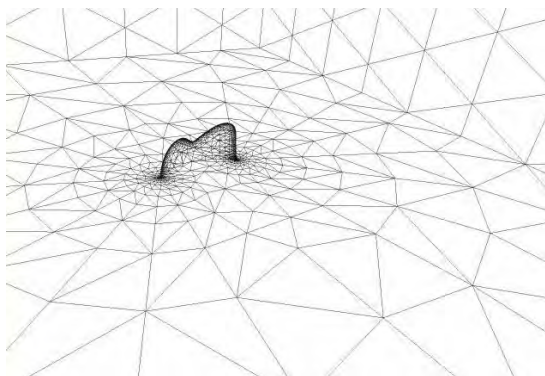


図 1 3次元き裂入りメッシュ

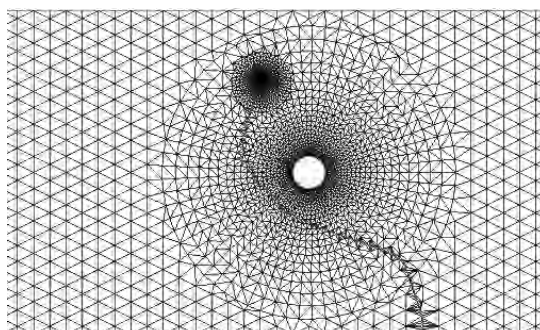


図 2 2次元のき裂入りメッシュ

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 6 名の修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 回の輪読で学术论文紹介を行っている。図 5 はセミナーの様子である。

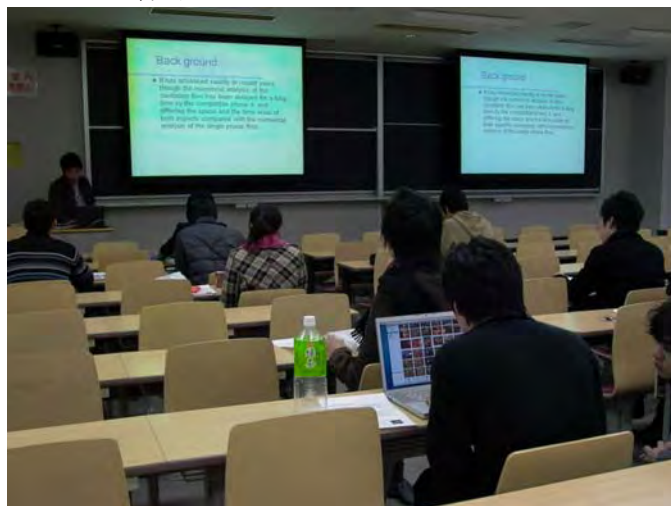


図 5 セミナーの様子

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 回の輪読では専門書を読み、学术论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 9 名が卒業研究を行い、大学院生 2 名がそれぞれ修士論文・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学部学生 3 名と大学院生 1 名が研究発表を行う。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

7.2. 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に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。

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) 画像に基づく流体解析手法の開発

複雑な実形状まわりの流れを解析するには、物体形状に関する詳細な3次元データが必要であり、またそれを元に計算格子(要素)を生成するには専用のツールやプログラムをもってしてもかなりの時間と手間を要することが知られている。そこでここではそのような詳細なデータがない場合でも流体解析ができるようにするための手法として、画像をベースとしてその流れ場を解く方法を研究している。

(2) 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、血管内の流れ、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。

(3) 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, キャビテーションを気泡としてモデル化することで, 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.

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, VCCM を用いたき裂進展システムと応力解析システムを結合するために入力データの修正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) 非定常熱伝導解析に関する研究

本研究では, 大規模有限要素並列計算を行う汎用熱伝導解析ソフトウェアの非定常解析機能に関して, 後退差分法とクランク・ニコルソン法の比較を行い, それぞれの手法の評価と, いくつかの問題に対して有効性の検討を行った. 大規模問題では, 有限要素サイズが小さくなるため, 時間ステップ幅の最適化の検討を行った.

(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. 300 万自由度規模の大規模問題について, ネットワークの負荷にあまり依存しない解析を実現した.

(4) サッカーにおける選手の優勢領域

サッカーでは, 選手個々の能力に加えて, チームプレーの良さによって, 勝敗が左右されることがある. 特に近年では, 選手間の距離や細かな動き出しなどが重視されており, 以下に上手くパスを回し, 高い確率でゴールが決まる状況を作り出すかが求められている. 本研究ではゴールが決まる直前の動きやパスを, 優勢領域を用いて, ゴール前の決定機を評価するシミュレーションを行った.

(5) 表面反応の分子シミュレーション

宇宙往還機が大気圏に再突入した際非常に強い衝撃波が発生し, 衝撃波の内側では大気中の N_2 , O_2 が N と O に解離する. 発生した N , O は機体表面で N_2 , O_2 へと再結合する. この再結合反応は発熱反応であるため, 空力加熱の増加に大きな影響を与えている. 本研究では, この再結合反応を解析するために, モンテカルロ法によるプログラムを作成した. そして, 理論式と作成したプログラムの結果とを比較することで, その妥当性を検証した.

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, 空力抵抗を低減するための自転車の乗車姿勢の最適化などのテーマに取り組んでいる.

(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 2009 大阪)で準優勝の成績を挙げた. また, 世界大会(RoboCup 2009 Graz)の予選も突破し, 世界ランキング 13 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, 若干ユビキタスからは外れるが, GPU を用いた計算環境の構築や, SONY の Play Station 3 を用いた計算環境の構築に取り組んだ.

(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.

8. 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。

8.1. 論文

1. C. F. CHUNG and T. FURUKAWA, “Coordinated Pursuer Control Using Particle Filters for Autonomous Search-and-Capture”, *Robotics and Autonomous Systems*, Vol. 57, No. 6-7, pp.700-711, 2009.
2. M. A. A. FENELON and T. FURUKAWA, “Design of an Active Flapping Wing Mechanism and a Micro Aerial Vehicle Using a Rotary Actuator”, *International Journal of Mechanism and Machine Theory*, Vol. 45, Issue. 2, pp.137-146, 2010.
3. T. FURUKAWA and J. W. PAN, “Stochastic Identification of Elastic Constants for Anisotropic Materials”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 81, Issue 4, pp.429-452, 2009.
4. T. FURUKAWA, J. G. MICHPOPOULOS and J. W. PAN, “The Energy-based Characterization – Theoretical Framework and Numerical Techniques”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, submitted, 2010.
5. Y. KANDA, H. OKADA, S. IRAHA, J. TOMIYAMA and G. YAGAWA, “A Virtual Crack Closure-Integral Method for Generalized Finite Element with Drilling and Strain Degrees of Freedoms”, *Journal of Computational Science and Technology*, Vol.3, No.1, pp.303-314, 2009.
6. Y. KANTO, “A Hermitian Type Triangular Element only with Corner Nodes and its Application to XFEM”, *Key Engineering Materials* Vol.417-418(2010) pp.405-408, 2010.
7. Y. KANTO, K. ONIZAWA, H. MACHIDA, Y. ISOBE and S. YOSHIMURA, “Recent Japanese research activities on probabilistic fracture mechanics for pressure vessel and piping of nuclear power plant”, *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, In Press, 2010.
8. Y. KITAMURA, N. MIYAZAKI, T. MABUCHI and T. NAWATA, “Birefringence Simulation of Annealed Ingot of Magnesium Fluoride Single Crystal”, *Journal of Crystal Growth*, Vol.311, No.15, pp.3954-3962, 2009.
9. Y. KOBAYASHI and G. YAGAWA, “Compatibility of Enriched Free Mesh Method and Ultra Large Scale Parallel Structural Analysis”, *Theoretical and Applied Mechanics*, Vol.57, pp.377-383, Feb. 2009.
10. L. C. MAK, M. KUMON, M. WHITTY, J. KATUPITIYA and T. FURUKAWA, “Design and Development of Micro Aerial Vehicles and their Cooperative Systems for Target Search and Tracking”, Vol. 1, No. 2, pp.139-153, 2009.
11. H. MAN and T. FURUKAWA, “Neural Network Constitutive Modelling of Anisotropic Materials Using Energy-based Characterization”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, submitted, 2010.
12. H. MATSUBARA and G. YAGAWA, “Convergence studies for Enriched Free Mesh Method and its application to fracture mechanics”, *Interaction and Multiscale Mechanics: An International Journal*, Vol. 2, No. 3, pp.277-293, 2009.
13. R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI, S. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, “Atomistic Simulations of Hydrogen Embrittlement”, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol.34, No.23, pp.9576-9598, 2009.
14. R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI, N. MIYAZAKI and Y. INOUE, “Estimation of Hydrogen Distribution around Dislocations Based on First Principles Calculations”, *Effect of Hydrogen*, *Proceedings of the 2008 International Hydrogen Conference*, ASM International, pp.663-670,

2009.

15. N. MATSUMOTO, R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, “Estimation of Shear-Banding Resistance in Metallic Glass Containing Nano-Crystalline Particles”, *Journal of Non-Crystalline Solids*, Vol.355, No.1, pp.29-32, 2009.
16. R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI and N. MIYAZAKI, “Influence of Shear Strain on the Hydrogen Trapped in bcc-Fe: A First-Principles-Based Study”, *Scripta Materialia*, Vol.60, No.7, pp.555-558, 2009.
17. K. MUROTANI, G. YAGAWA and J.B.CHOI, “Adaptive analysis of 3D cavity flow using hierarchical mesh”, *Computational Mechanics (FEF09 special issue)*, Tezduyar Tayfun, et al.(Editor), to appear, DOI: 10.1007/s00466-009-0437-9, Published online, Nov. 4, 2009.
18. K. MUROTANI and G. YAGAWA, “Hierarchical meshing for the adaptive finite elements”, *Computational Methods in Applied Sciences*, Springer, pp.291-305, 2009.
19. S. NAGAOKA and G. YAGAWA, “Fracture Analysis Using Enriched Free Mesh Method with a New Boundary Treatment”, *Theoretical and Applied Mechanics*, Vol.57, pp.411-420, Feb. 2009.
20. Y. NOMURA, T. IKEDA and N. MIYAZAKI, “Stress Intensity Factor Analysis at an Interfacial Corner between Anisotropic Bimaterials under Thermal Stress”, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol.78, No. 2, pp.221-235, 2009.
21. H. OSAKI, Y. NAKABAYASHI, G. YAGAWA and Y. J. KIM, “Application of Crack Propagation Simulation to Crack Arrestor”, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, Vol. 58, 2010.
22. J. W. PAN, T. FURUKAWA, H. MAN, A. P. ILLIOPOULOS, J. G. MICHOPPOULOS and J. C. HERMANSON, “The Energy-based Characterization: Experimental Method and System for Elastic Characterization”, *Experimental Mechanics*, submitted, 2010.
23. S. SHIMAMURA, K. SUGA, Y. EZAWA and S. AOKI, “Effects of Material Properties of Cue on Ball Trajectory in Billiards”, *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*, Vol.3, No.7, pp.978-989, 2009.
24. S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, “Atomistic Study of Hydrogen Diffusion around a Dislocations in Alpha Iron”, *Effect of Hydrogen, Proceedings of the 2008 International Hydrogen Conference*, ASM International, pp.655-662, 2009.
25. Y. TAMURA and Y. MATSUMOTO, “Improvement of Bubble Model for Cavitating Flow Simulations”, *Journal of Hydrodynamics, Ser. B*, Vol.21, No.1, pp.41-46, Feb. 2009.
26. 畔上秀幸, “境界値問題が定義された領域の形状および位相最適化問題の正則化解法”, *数理解析研究所講究録 1638*, pp.1-17, 2009 年 4 月 1 日.
27. 上田真広, 穴戸信之, 池田徹, 宮崎則幸, “固体状ゴム粒子変成エポキシ樹脂接着剤層中のき裂の破壊靱性値とき裂先端ひずみ分布に対する接着剤層厚さの影響”, *日本機械学会論文集 A 編*, 第 15 巻 d 第 759 号, pp.1516-1525, 2009 年.
28. 上田真広, 穴戸信之, 池田徹, 宮崎則幸, “固体状ゴム粒子強化エポキシ樹脂のき裂先端ひずみ場の測定と解析”, *日本計算工学会論文集*, 第 2009 巻, 論文番号 2009007, 2009 年.
29. 尾崎弘明, 中林靖, 矢川元基, 金永鎮, “階層型ニューラルネットワークとき裂進展解析によるクラックアレスター位置の推定”, *日本機械学会論文集 A 編*, 印刷中, 2010 年.
30. 河合浩志, 荻野正雄, 塩谷隆二, 吉村忍, “大規模構造解析の並列可視化における画像合成のための差分符号化画像圧縮”, *Transaction of JSCES*, Vol. 2009, 20090009, pp.1-9, 2009 年 5 月.
31. 小金丸正明, 池田徹, 宮崎則幸, 友景肇, “ドリフト拡散デバイスシミュレーションを用いた実装応力に起因する nMOSFET の DC 特性変動評価”, *エレクトロニクス実装学会誌*, 第 12 巻 第 3 号, pp.208-220, 2009 年.
32. 小林陽介, 矢川元基, “Enriched Free Mesh Method における並列処理効率の向上手法について”, *日本機械学会論文集 A 編*, 75 巻, 750 号, pp.135-141, 2009 年 2 月.

33. 塩崎聖治, 崎山幸紀, 高木周, 松本洋一郎, “シリカ表面における触媒反応機構のマルチスケール解析 - 密度汎関数法による表面素過程のモデル化 -”, 日本航空宇宙学会論文集, Vol. 57, No. 669, pp.391-396, 2009 年.
34. 田中智行, 岡田裕, 岡澤重信, 藤久保昌彦, “ウェーブレットガラーキン法を用いた破壊力学解析に関する研究”, 日本機械学会論文集 A 編, 75 巻, 51 号, pp. 296-303, 2009 年 3 月.
35. 中林靖, “パラメトリック最適化による RoboCup サッカーシミュレーションリーグ 2D のエージェント開発”, 人工知能学会誌, Vol.25, No.2, 2010 年.
36. 水谷友徳, 池田徹, 三宅清, 宮崎則幸, “LCD パネルにおける水分拡散と膨潤応力による反り解析”, エレクトロニクス実装学会誌, 第 12 巻第 2 号, pp.144-153, 2009 年.

8.2. 著書

1. 小柳義夫, 土居範久, 松田卓也, 矢川元基 監修, 奥田洋司, 塩谷隆二, 谷啓二 編集幹事, 日本計算工学会・財団法人計算科学振興財団 編, “計算力学シミュレーションハンドブック—超ペタスケールコンピューティングの描象—”, 丸善, 2009 年 12 月.

8.3. 総説・解説・エッセイ

1. 古川知成, “Virginia Tech での Multi-physics 研究環境紹介”, 計算工学会誌, Vol.15, No.1, pp.2258-2259, 2010 年.
2. 村松壽晴, 檜原秀樹, 平田直樹, 須藤浩三, “T字形合流管内の流れ＜実験および数値解析＞”, 配管技術, Vol.52, No.2, 2010 年 2 月.
3. 村松壽晴, 檜原秀樹, 平田直樹, 須藤浩三, “T字形合流管内の流れ—実験および数値解析—”, 可視化情報学会誌 7 月号, Vol.29, No.114, 2009 年 7 月.
4. 矢川元基, “巻頭言: 日本学士院賞及び東レ科学技術賞を受賞して”, 日本シミュレーション学会『シミュレーション』, Vol28, p.1, 2009 年 9 月.
5. 矢川元基, “シミュレーション雑感”, 日本シミュレーション学会『シミュレーション』, Vol28, pp.131-132, 2009 年 9 月.

8. 4. 招待講演

1. T. FURUKAWA, “Micro Aerial Vehicles: State-of-the-art of Flapping-wing and Rotary-wing MAVs”, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, Mar. 29-31, 2010.
2. T. FURUKAWA, “The Energy-based Characterization: A New Method for Characterizing Anisotropic Materials”, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, Mar. 29-31, 2010.
3. N. MIYAZAKI, “Applications of Computational Mechanics to Hydrogen Embrittlement”, ACES Symposium on Computational Mechanics cum SACM Annual Meeting 2009, Singapore, Nov. 30, 2009.
4. N. MIYAZAKI, “Applications of Computational Solid Mechanics to Material Strengths of Single Crystals for Electronic/Optical Use”, Short Course at University of Greenwich, Failure Analysis and Modelling for Microsystems Packaging, London, UK, Mar. 18, 2009.
5. N. MIYAZAKI, “Birefringence Simulations of Annealed Ingot of Calcium Fluoride Single Crystal by Considering Creep Behavior of Ingot during Annealing Process”, IMPACT (International Microsystems, Packaging, Assembly and Circuits Technology) Conference 2009 and International 3D IC Conference, Taipei, Taiwan, Oct. 21, 2009.
6. N. MIYAZAKI, “Computational Mechanics Simulations for Hydrogen Embrittlement : Nano to Macro-Scale Simulations”, International Hydrogen Energy Development Forum 2009, Fukuoka, Japan, Feb. 5, 2009.
7. G. YAGAWA, “Large scale simulation of growing crack and comparison with experiment”, (Keynote Lecture), The 1st Joint Workshop on Simulation Based Engineering and Science, Suwon, Korea, Aug. 31, 2009.
8. G. YAGAWA, “Large-Scale Computing for Growing Cracks”, (Plenary Lecture), International Conference on Fracture, Ottawa, Canada, Jul. 14, 2009.
9. G. YAGAWA, “The Role of the Computer Simulation for Safer Society and Living Life”, (Plenary Lecture), International Symposium on Safety and Computing, Tokyo, Japan, Jun. 19, 2009.
10. 矢川元基, “安全な社会の構築と科学技術の役割”, (特別講演), 徳島クラブ例会, 東京, 2009年6月5日.
11. 矢川元基, “計算科学シミュレーションの発展”, (特別講演), 第28回日本シミュレーション学会大会, 東京, 2009年6月11日.
12. 矢川元基, “計算力学と計算科学の発展”, (招待講演), 日本原子力学会秋季講演会, 仙台, 2009年9月16日.
13. 矢川元基, “計算力学の進展とその課題”, (特別講演), 神戸大学特別講演会「最先端科学技術の未来社会へのインパクト」, 神戸, 2009年10月23日.
14. 矢川元基, “これからの計算力学”, (基調講演), 平成20年度数値震動台研究開発分科会研究成果発表会, 東京, 2009年6月12日.
15. 矢川元基, “大規模計算は科学や技術をどう変えたか”, (特別講演), 第59回東レ科学講演会, 東京, 2009年9月18日.
16. 矢川元基, “大規模シミュレーション解の精度向上について”, (基調講演), 「災害予測シミュレーションの高度化」公開シンポジウム, 東京, 2009年3月11日.
17. 矢川元基, “発展する計算力学”, (特別講演), 第50回超並列計算研究会, 京都, 2009年5月15日.

8. 5. 講演論文・口頭発表

1. H. AZEGAMI, Y. IWATA and E. KATAMINE, “Numerical solution of shape optimization problems for Navier-Stokes problems”The 8th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization, Lisbon, Portugal, Jun. 2, 2009.
2. Y. EZAWA, Y. FURUTACHI, K. SUGA and S. AOKI, “Simulation Technique for detecting a different substance (in Japanese)”, JSME 22th Computational Mechanics Conference, Kanazawa, Japan, Oct. 10-12, 2009.
3. M. FUKAYA, Y. TAMURA and Y. MATSUMOTO, “Prediction of Impeller Speed Dependency of Cavitation Intensity in Centrifugal Pump Using Cavitating Flow Simulation with Bubble Flow Model”, The 7th of International Symposium on Cavitation, Ann Arbor, Michigan, USA, Aug. 17-22, 2009.
4. T. FURUKAWA, J. W. PAN and J. G. MICHOPoulos, “Energy-based Characterization for Nonlinear Material Behavior”, 8th International Conference on Fracture and Strength of Solids, Kuala Lumpur, Jun. 2010.
5. T. FURUKAWA, “Micro Aerial Vehicles: State-of-the-art of Flapping-wing and Rotary-wing MAVs”, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, Mar. 29-31, 2010.
6. T. FURUKAWA, B. LAVIS and H. F. D. WHYTE, “Parallel Grid-based Recursive Bayesian Estimation Using GPU for Real-time Autonomous Navigation”, International Conference on Robotics and Automation, Alaska, May. 2010.
7. T. FURUKAWA, X. TONG and 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, Jun. 27-30, 2010.
8. T. FURUKAWA, “Recursive Bayesian Estimation and Control for Inverse Analysis: Theory and its Application to Non-destructive Testing”, US National Congress on Computational Mechanics, Aug. 2009.
9. T. FURUKAWA, J. G. MICHOPoulos and J. W. PAN, “The Deterministic and Stochastic Energy-based Characterization of Composites: A Generalized Theoretical Framework”, 8th International Conference on Composite Materials, Edinburgh, Jul. 2009.
10. T. FURUKAWA, “The Energy-based Characterization: A New Method for Characterizing Anisotropic Materials”, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, Mar. 29-31, 2010.
11. Y. FURUTACHI, K. SUGA and Y. EZAWA, “Efficient finite element method for elastic object with uniform cross-section including a different substance (in Japanese)”, Material & Mechanics Conference 2009, Sapporo, Japan, Jul. 24-26, 2009.
12. Y. HAN, M. KOGANEMARU, T. IKEDA, N. MIYAZAKI, Y. KIYOTA, W. CHOI and H. TOMOKAGE, “Effect of Uni-axial Mechanical Stress on the Scattering Parameters of Metal-oxide-semiconductor Field Effect Transistors”, International Conference on Electronics Packaging 2009 (ICEP2009), Paper No.15K-1-1 (in CD), Kyoto, Japan, Apr. 2009.
13. T. IKEDA, T. MIZYTANI and N. MIYAZAKI, “Hygro-Mechanical Analysis of LCD Panels”, ASME/Pacific Rim Technical Conference and Exhibition on Packaging and Integration of Electronic and Photonic Systems, MEMS, and NEMS (InterPACK'09), InterPACK2009-89267 (in DVD), San Francisco, USA, Jul. 7, 2009.
14. T. IKEDA, T. KANNO, N. SHISHIDO, N. MIYAZAKI, H. TANAKA and T. HATANO, “Measurement of Strain in Microelectronic Package Using the Digital Image Correlation Method for the Reliable Numerical Analysis”, The 11 th International Conference on Electronic Materials and Packaging (EMAP 2009), (in CD), Penang, Malaysia, Oct. 2009.
15. T. KANNO, T. IKEDA, N. MIYAZAKI, H. TANAKA and T. HATANO, “Reliability Evaluation of Flip Chip Packages Using the Digital Image Correlation Method and the FEM Analyses”,

- International Conference on Electronics Packaging 2009 (ICEP2009), Paper NoP-01 (in CD), Kyoto, Japan, Apr. 2009.
16. Y. KANTO and 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, Jun. 6-9, 2010.
 17. Y. KANTO, "XFEM Formulation of a Hermitian Type Triangular Element only with Corner Nodes", International Conference on Numerical Analyses in Engineering, Lombok, Indonesia, May. 14-15, 2009.
 18. S. H. LIM and T. FURUKAWA, "The Mechanistic Deconvolutive Image Sensor Model for an Arbitrary Pan-Tilt Plane of View", International Conference on Control, Automation, Robotics and Vision, Paris, 2009.
 19. L. C. MAK and T. FURUKAWA, "Non-Line-of-Sight Localization of a Controlled Sound Source", IEEE/ASME International Conference on Advanced Intelligent Mechatronics, 2009.
 20. R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI and N. MIYAZAKI, "Atomistic Study of Hydrogen Distributions around Lattice Defects and Defect Energies under Hydrogen Environment", 12th International Conference on Fracture (ICF12), Paper: T19.012 (in CD), Ottawa, Canada, Jul. 7, 2009.
 21. R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI and N. MIYAZAKI, "Atomistic Study of Hydrogen Effect on Cohesive Energy of Grain Boundaries in Alpha Iron", 10th US National Congress on Computational Mechanics (USNCCM X), Columbus, USA, Jul. 7, 2009.
 22. R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI, N. MIYAZAKI, Y. INOUE and M. RIKU, "Interaction between Hydrogen and Lattice Defects in Alpha Iron", International Hydrogen Energy Development Forum 2009, Fukuoka, Japan, Feb. 2009.
 23. J. G. MICHPOULOS, A. A. ILLIOPOULOS and T. FURUKAWA, "A Framework for the Automated Data-driven Constitutive Characterization of Composites", International Conference on Composite Materials, Jul. 2009.
 24. J. G. MICHPOULOS, A. A. ILLIOPOULOS and T. FURUKAWA, "Accuracy of Inverse Composite Laminate Characterization Via the Mesh Free Random Grid Method", IDETC/CIE 2009, Nov. 2009.
 25. N. MIYAZAKI, H. OGINO, Y. KITAMURA, T. MABUCHI and T. NAWATA, "Birefringence Simulations of Annealed Ingot of Calcium Fluoride Single Crystal (Consideration of Creep Behavior of Ingot during Annealing Process)", SPIE Advanced Lithography 2009, San Jose, USA, Feb. 2009.
 26. N. MIYAZAKI, H. KOTAKE, R. MATSUMOTO and S. TAKETOMI, "Transient Hydrogen Diffusion Analyses of a Surface Crack in a Three-Dimensional Body", 12th International Conference on Fracture (ICF12), Paper: T19.013 (in CD), Ottawa, Canada, Jul. 7, 2009.
 27. K. MUROTANI and G. YAGAWA, "Large-sized Adaptive Fluid Analysis using Progressive Tetrahedralization", The 15th International Conference on Finite Elements in Flow Problems, Book of Abstract, Tokyo, Japan, Apr. 1-3, 2009.
 28. H. OKADA, T. TOKUDA, H. KAWAI and Y. FUKUI, "Analysis of arbitrary shaped three-dimensional cracks by using a virtual crack-closure integral method (VCCM) for tetrahedral finite element", TRANSFERABILITY AND APPLICABILITY OF CURRENT MECHANICS APPROACHES(MF2009), pp.59-64, Oct. 2009.
 29. J. W. PAN, J. CHENG and T. FURUKAWA, "Energy-based Characterization based on Multi-sensor Data Fusion", 8th International Conference on Fracture and Strength of Solids, Kuala Lumpur, Jun. 2010.
 30. J. W. PAN, J. CHENG, T. FURUKAWA, J. G. MICHPOULOS and A. P. ILLIOPOULOS, "The Online Material Characterization: Experimental Validation", 8th International Conference on Fracture and Strength of Solids, Kuala Lumpur, Jun. 2010.

31. J. W. PAN, T. FURUKAWA and H. MAN, "Validation of the Stochastic Elastic Energy-based Characterization", US National Congress on Computational Mechanics, Aug, 2009.
32. M. SHIMODA, K. IWASA and H. AZEGAMI, "A Shape Optimization Method for the Optimal Free-form Design of Shell Structures" The 8th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization, Lisbon, Portugal, Jun. 2, 2009.
33. N. SHISHIDO, T. IKEDA and N. MIYAZAKI, "Measurement of Three-dimensional Surface Displacement Using the Digital Image Correlation with AFM Image", International Conference on Electronics Packaging 2009 (ICEP2009), Paper No.15K-3-1 (in CD), Kyoto, Japan, Apr. 2009.
34. K. SUGA, "Hierarchical Optimization for Cathodic Protection", mini symposium on Fracture and Strength of Solids 2009, Penang, MALAYSIA, Jun. 4-5, 2009.
35. K. SUGA, "Optimization for Cathodic Protection with Hierarchical Mesh and Genetic Algorithm (in Japanese)", JSME 22th Computational Mechanics Conference, Kanazawa, Japan, Oct. 10-12, 2009.
36. K. SUGA, "Optimizing using Hierarchical GA and BEM for Cathodic Protection", 10th US National Congress on Computational Mechanics, Columbus, Ohio, USA, Jul. 16-19, 2009.
37. S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, "Atomic Study of the Effect of Hydrogen on Dislocation Emission from Crack Tip in Alpha Iron", 10th US National Congress on Computational Mechanics (USNCCM X), Columbus, USA, Jul. 7, 2009.
38. S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, "Effect of Hydrogen on Edge Dislocation Emission from Mode II Crack Tip in Alpha Iron", International Hydrogen Energy Development Forum 2009, Fukuoka, Japan, Feb. 2009.
39. S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, "Hydrogen Effect on Dislocation Emission from a Crack Tip in Alpha Iron", 12th International Conference on Fracture (ICF12), Paper: T19.019 (in CD), Ottawa, Canada, Jul. 7, 2009.
40. J. UEBAYASHI, Y. TAMURA and Y. MATSUMOTO, "Large-Scale Analysis of Focused Ultrasound in Heterogeneous Media", 9th International Symposium on Therapeutic Ultrasound (ISTU 2009), Aix en Provence, France, Sep. 23-26, 2009.
41. Y. WADA, T. HAYASHI and M. KIKUCHI, "Mesh Generation for Surface Crack Propagation Analysis", Tokyo University of Science, Suwa, Virginia Tech, Department of Mechanical Engineering, Graduate Seminar Series, 1870 Litton Reeves, Nov. 11, 2009.
42. Y. WADA, Y. ORITA and M. KIKUCHI, "Surface crack mesh generation method using hexahedral element (#158256)", Abstracts of 10th U.S. National Congress on Computational Mechanics, CD-ROM 1 page, Columbus, OHIO, USA, Jul. 16-19, 2009.
43. Y. YAMAGUCHI, J. KATSUYAMA, K. ONIZAWA, H. SUGINO, Y. LI and G. YAGAWA, "Experimental and Analytical Studies on the Effect of Excessive Loading on Fatigue Crack Propagation in Piping Materials", ASME Pressure Vessels and Piping Division Conference, Prague, Czech Republic, Jul. 26-30, 2009.
44. K. YOSHIDA, T. IKEDA, N. MIYAZAKI and H. TOMOKAGE, "Device Simulations of Mechanical Stress Effects on Electrical Characteristics of nMOSFETs: Impact of Local Stress in nMOSFETs", ASME/Pacific Rim Technical Conference and Exhibition on Packaging and Integration of Electronic and Photonic Systems, MEMS, and NEMS (InterPACK'09), InterPACK2009-89112 (in DVD), San Francisco, USA, Jul. 7, 2009.
45. 畔上秀幸, "境界値問題に対する形状最適化理論の再検討", 日本応用数理学会研究部会, 特異性を持つ連続体力学第9回ワークショップ, 湘南国際村センター, 2009年11月22日.
46. 畔上秀幸, 岩田侑太郎, 片峯英次, "非定常 Navier-Stokes 問題における形状最適化問題の数値解法", 日本応用数理学会, 2009年度年会講演予稿集, pp.325-326, 2009年9月30日.
47. 畔上秀幸, "領域摂動による形状最適化問題の応用", CoMFoS, ワークショップ「変分法と領

- 域摂動」, 神戸インスティテュート, 2010 年 2 月 11-13 日.
48. 畔上秀幸, “領域摂動による形状最適化問題の基礎”, CoMFoS, ワークショップ「変分法と領域摂動」, 神戸インスティテュート, 2010 年 2 月 11-13 日.
 49. 池田徹, 堀池弘一, 松本龍介, 宮崎則幸, “分子シミュレーションによる異種結晶接合角部の応力場と破壊靱性評価”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月.
 50. 岩井孝広, 畔上秀幸, “大変形接触する弾性体の形状同定問題の解法”, 日本応用数理学会, 2009 年研究部会連合発表会, 京都大学理学部, 京都, 2009 年 3 月 7 日.
 51. 上林純子, 田村善昭, 松本洋一郎, “頭蓋骨と脳の影響を考慮した集束超音波の大規模解析”, 第 23 回数値流体力学シンポジウム, 仙台, 2009 年 12 月 16-18 日.
 52. 梅村公博, 畔上秀幸, “リンク結合された線形弾性体の形状最適化問題の解法”, 日本応用数理学会, 2009 年研究部会連合発表会, 京都大学理学部, 京都, 2009 年 3 月 7 日.
 53. 榎本龍博, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, “第一原理計算に基づく水素ガス環境下における Al 中の格子欠陥まわりの水素占有率の評価”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月.
 54. 榎本龍博, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, “第一原理計算を用いた Al 中の格子欠陥と水素の相互作用エネルギーの評価”第 14 回分子動力学シンポジウム, 松山, 2009 年 5 月.
 55. 岡田裕, 河合浩志, 徳田貴志, “き裂メッシュ自動生成手法と四面体二次要素用 VCCM を用いた三次元き裂(進展)解析”, 第 58 理論応用力学講演会, 講演論文集, NCTAM2009, p.421-422, 東京 2009 年 6 月.
 56. 岡田裕, “三次元破壊力学解析の高度化に関する研究”, 東洋大学計算力学研究センター第 4 回計算力学シンポジウム, 東京, 2009 年 3 月.
 57. 岡田裕, 河合浩志, 徳田貴志, 福井泰好, “四面体 2 次有限要素を用いたき裂進展解析”, 第 22 回計算力学講演会 CMD2009, CD-ROM, 金沢, 2009 年 10 月.
 58. 岡田裕, 大屋賢典, 田中智行, “重合メッシュ法解析における変位関数の一次独立性に関する問題とそのき裂問題への応用”, 計算工学講演会論文集, 第 14 巻, 第 1 号, p.397-400, 2009 年 5 月.
 59. 荻野正雄, 河合浩志, 塩谷隆二, 吉村忍, “BDD 法のマルチコア向け実装と収束性評価”, 日本計算工学会, 第 14 回計算工学講演会, Vol.14, No.1, pp.221-224, 東京大学産技術研究所, 2009 年 5 月 13 日.
 60. 尾崎弘明, 中林靖, 矢川元基, 金永鎮, “亀裂進展シミュレーションのクラックアレスターへの応用”, 第 58 回理論応用力学講演会, 東京, 2009 年 6 月 9 日.
 61. 尾崎弘明, 中林靖, 矢川元基, “3 点曲げ試験解析におけるニューラルネットワークによるクラックアレスターの評価”, M&M2009 材料力学カンファレンス, 札幌, 2009 年 7 月 24 日.
 62. 尾崎弘明, 中林靖, 矢川元基, 金永鎮, “内部き裂問題における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”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, No.1308, 金沢大学, 金沢, 2009 年 10 月 10-12 日.
 63. 落合和明, 中林靖, “GPU を用いた流体解析コードの高速化”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, No.403, 金沢大学, 金沢, 2009 年 10 月 10-12 日.
 64. 折田陽平, 和田義孝, 菊池正紀, “1318 6面体要素生成技術を用いた混合モード表面き裂進展解析”, 日本機械学会第 22 回計算力学講演論文集, CD-ROM, No.08-33, p. 2, 金沢, 2009 年 10 月 10-12 日.
 65. 片峯英次, 箕浦好二, 三ヶ田真吾, 畔上秀幸, “熱伝導率の温度依存性を考慮した定常熱伝導場の形状最適化”, 日本応用数理学会, 2009 年度年会講演予稿集, pp.317-318, 2009 年 9 月 30 日.

66. 河合浩志, 岡田裕, “三次元複雑形状き裂解析のための四面体自動メッシュ生成について”, 第 22 回計算力学講演会 CMD2009, CD-ROM, 金沢, 2009 年 10 月.
67. 河合浩志, 荻野正雄, 塩谷隆二, 吉村忍, “地球シミュレータによる 2 億自由度構造解析とオフライン可視化”, 第 37 回可視化情報シンポジウム, 東京, 2009 年 7 月.
68. 河合浩志, 岡田裕, “破壊力学解析のためのき裂付きメッシュ自動生成について”, 第 22 回計算力学講演会 CMD2009, CD-ROM, 金沢, 2009 年 10 月.
69. 河合浩志, 岡田裕, “破壊力学解析のための四面体メッシュ生成の曲面形状への対応”, 計算工学講演会論文集, 第 14 巻, 第 1 号, p.379-380, 2009 年 5 月.
70. 川澄拓矢, 関東康祐, “Option パターンを用いた FEM プログラムへの非線形解析機能拡張について”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 金沢, 2009 年 10 月 10-12 日.
71. 関東康祐, “Hermite 型要素を用いた XFEM き裂解析”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 金沢, 2009 年 10 月 10-12 日.
72. 貫野敏史, 穴戸信之, 池田徹, 宮崎則幸, 田中宏之, 畑尾卓也, “デジタル画像相関法と有限要素法を用いた Flip chip パッケージのはんだ接合部の熱疲労信頼性評価”, 日本機械学会 2009 年度年次大会, 盛岡, 2009 年 9 月.
73. 貫野敏史, 池田徹, 宮崎則幸, 田中宏之, 畑尾卓也, “デジタル画像相関法による Flip Chip パッケージ内部のひずみ測定と FEM 解析精度の向上”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月.
74. 北村優太, 宮崎則幸, 荻野洋岳, 真淵俊朗, 縄田輝彦, “任意方向育成フッ化カルシウム単結晶のアニール後の複屈折解析(クリープ挙動を考慮した解析)”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月.
75. 木村隆, 松原仁, 伊良波繁雄, “3 次元 Enriched Free Mesh Method の開発及び性能評価”, 土木学会第 64 回年次学術講演概要集, I-638, pp.1275-1276, 2009 年.
76. 小金丸正明, 吉田圭祐, 池田徹, 宮崎則幸, 友景肇, “NMOSFET 内部の応力分布を考慮したデバイス DC 特性変動シミュレーション”, 日本機械学会 2009 年度年次大会, 盛岡, 2009 年 9 月.
77. 小林陽介, 塩谷隆二, 矢川元基, “EFMM 離散化モデルの大規模並列固有値解析”, 第 58 回理論応用力学講演会, 東京, 2009 年 6 月.
78. 小林陽介, 塩谷隆二, 矢川元基, “Enriched Free Mesh Method による超大規模並列固有振動解析”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, CMD2009, 金沢, 2009 年 10 月.
79. 小林陽介, 塩谷隆二, 矢川元基, “並列 Enriched Free Mesh Method による固有振動解析”, 第 28 回日本シミュレーション学会大会, 東京, 2009 年 6 月.
80. 穴戸信之, 桑原達彦, 松本龍介, 池田徹, 宮崎則幸, “画像ゆがみ補正を用いた AFM 画像へのデジタル画像相関法の適用”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月.
81. 鈴木隼人, 松原仁, 江澤良孝, 矢川元基, “Enriched Free Mesh Method のき裂問題への適用”, 日本機械学会, M&M2009 材料力学カンファレンス, 札幌, 2009 年 7 月 25 日.
82. 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 Enriched Free Mesh Method”, 日本機械学会, 関東支部ブロック合同講演会 2009, 群馬, 2009 年 9 月 26 日.
83. 鈴木隼人, 松原仁, 江澤良孝, 矢川元基, “回転とひずみ自由度を考慮した Enriched Free Mesh Method”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月 10-12 日.
84. 鈴木隼人, 江澤良孝, 矢川元基, “三次元 Enriched Free Mesh Method の動弾性問題への適用”, 第 58 回理論応用力学講演会, 東京, 2009 年 6 月 9-11 日.
85. 高山和則, 宮崎則幸, 松本龍介, 武富紳也, “有限要素法を用いたき裂を含む内圧負荷円

- 筒の水素拡散解析”，日本機械学会，第 22 回計算力学講演会，金沢，2009 年 10 月。
86. 武富紳也，松本龍介，宮崎則幸，“ α 鉄中の転位及び水素の運動に要するエネルギー障壁に関する研究”第 14 回分子動力学シンポジウム，松山，2009 年 5 月。
 87. 武富紳也，松本龍介，宮崎則幸，“ α 鉄における転位芯近傍の水素拡散障壁に関する検討”，日本機械学会，第 22 回計算力学講演会，金沢，2009 年 10 月。
 88. 田中智行，岡田裕，岡澤重信，“ウェーブレットガラーキン法を用いた三次元き裂解析に関する研究”，第 22 回計算力学講演会 CMD2009, CD-ROM, 金沢，2009 年 10 月。
 89. 田中智行，岡田裕，岡澤重信，“ウェーブレットガラーキン法を用いた三次元破壊力学解析”，計算工学講演会論文集，第 14 巻，第 2 号，p.669-672，2009 年 5 月。
 90. 田中智行，岡田裕，岡澤重信，“ウェーブレット有限要素法の破壊力学解析への適用”，第 58 理論応用力学講演会，講演論文集，NCTAM2009, p.89-90，東京 2009 年 6 月。
 91. 田中智行，安瑋，岡田裕，岡澤重信，“溶接継手部に発生するき裂の三次元破壊力学解析”，計算工学講演会論文集，第 14 巻，第 1 号，p.381-384，2009 年 5 月。
 92. 田村善昭，古澤寛行，藤井秀典，宮本勇輝，“大規模計算力学解析結果可視化のためのデータ処理”，第 37 回可視化情報シンポジウム講演論文集，可視化情報 29-Suppl, No.1, pp.129-132，東京，2009 年 7 月。
 93. 鶴見伸夫，田村善昭，松本洋一郎，“キャビテーション流れ解析のための気泡モデルの改良”，第 23 回数値流体力学シンポジウム，仙台，2009 年 12 月 16-18 日。
 94. 鶴見伸夫，田村善昭，松本洋一郎，“キャビテーション流れ解析のための気泡流モデル”，第 58 回理論応用力学講演会，東京 2009 年 6 月。
 95. 鶴見伸夫，田村善昭，“キャビテーション流れ解析のためのモデルの提案と検証”，キャビテーションに関するシンポジウム(第 14 回)，仙台，2009 年 3 月 19-20 日。
 96. 土居博昭，柴田悟，岡田裕，矢川元基，“き裂進展解析システムの開発”，日本機械学会，2009 年度年次大会，岩手，2009 年 9 月 13-16 日。
 97. 徳田貴志，岡田裕，河合浩志，福井泰好，“三次元形状を有するき裂の有限要素法モデル生成”，第 22 回計算力学講演会 CMD2009, CD-ROM, 金沢，2009 年 10 月。
 98. 長岡慎介，中林靖，矢川元基，“EFMM の連成解析における有効性の検証”，日本機械学会，第 22 回計算力学講演会，No.2425，金沢大学，金沢，2009 年 10 月 10-12 日。
 99. 西口直，松本龍介，武富紳也，宮崎則幸，“水素が α -Fe 中の空孔濃度に及ぼす影響に関する原子モデル解析”，日本機械学会，第 22 回計算力学講演会，金沢，2009 年 10 月。
 100. 西口直，松本龍介，武富紳也，宮崎則幸，“水素による原子空孔の増殖機構に関する原子モデル解析”第 14 回分子動力学シンポジウム，松山，2009 年 5 月。
 101. 平井宏，池田徹，宮崎則幸，“圧電効果を考慮した異種材接合端部の特異応力場解析”，日本機械学会，第 22 回計算力学講演会，金沢，2009 年 10 月。
 102. 平野和也，田村善昭，“Level-Set 法を用いた圧縮性気液二相流の数値解析”，第 23 回数値流体力学シンポジウム，仙台，2009 年 12 月 16-18 日。
 103. 深谷征史，田村善昭，松本洋一郎，“気泡流モデルキャビテーション流れ解析による遠心ポンプ内のキャビテーション強さの回転数速度依存性予測”，キャビテーションに関するシンポジウム(第 14 回)，仙台，2009 年 3 月 19-20 日。
 104. 藤井秀典，古澤寛行，田村善昭，“大規模解析結果の可視化における処理の改良”，第 37 回可視化情報シンポジウム講演論文集，可視化情報 29-Suppl, No.1, pp.285-290，東京，2009 年 7 月。
 105. 藤井秀典，古澤寛行，田村善昭，“大規模流体解析結果の可視化処理の改良”，第 23 回数値流体力学シンポジウム，仙台，2009 年 12 月 16-18 日。

- 106.古舘裕樹, 須賀一博, 江澤良孝, “異物を含む一様断面弾性体に対する有限要素解析の効率化”, 日本機械学会, M&M2009 材料力学カンファレンス, 札幌, 2009 年 7 月 25 日.
- 107.増田正人, 中林靖, “フリーキック・サポート・システムへの自己組織化マップの適応”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, No.818, 金沢大学, 金沢, 2009 年 10 月 10-12 日.
- 108.松本龍介, 宮崎則幸, “金属ガラス中のせん断帯の生成・成長挙動に関するモデル解析”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月.
- 109.松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, “電子・原子レベル解析を用いた格子欠陥の水素トラップエネルギーの評価”第 14 回分子動力学シンポジウム, 松山, 2009 年 5 月.
- 110.宮里真也, 山城建樹, 松原仁, 富山潤, “高精度粗骨材ポリゴンモデル作成システムの開発”, 土木学会第 64 回年次学術講演概要集, V-585, pp.1167-1168, 2009 年.
- 111.宮本勇輝, 田村善昭, “大規模数値計算結果のための可視化処理”, 第 37 回可視化情報シンポジウム講演論文集, 可視化情報 29-Suppl, No.1, pp.291-294, 東京, 2009 年 7 月.
- 112.室谷浩平, 塩谷隆二, 矢川元基, “3 次元階層メッシュを用いた亀裂進展解析”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 金沢, 2009 年 10 月 10-12 日.
- 113.室谷浩平, 矢川元基, “Level-of-detail を用いた有限要素解析と可視化”, 第 37 回可視化情報シンポジウム, 東京, 2009 年 7 月.
- 114.吉田圭佑, 小金丸正明, 池田徹, 宮崎則幸, 友景肇, “応力効果を考慮したデバイスシミュレーションによるナノデバイス(nMOSFET)特性変動評価”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月.
- 115.吉田圭祐, 池田徹, 宮崎則幸, 小金丸正明, 友景肇, “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”, 第 19 回マイクロエレクトロニクスシンポジウム(MES2009), 福岡, 2009 年 9 月.
- 116.李銀生, 長谷川邦夫, 土居博昭, 矢川元基, “配管の塑性崩壊曲げ応力に及ぼす内圧と管半径の影響に関する考察”, 日本機械学会, 2009 年度年次大会, 岩手, 2009 年 9 月 13-16 日.
- 117.陸茉莉花, 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電子・原子シミュレーション”, 日本機械学会, 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月.
- 118.陸茉莉花, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, “水素環境下の α 鉄における粒界凝集得ベルギーに関する原子モデル解析”第 14 回分子動力学シンポジウム, 松山, 2009 年 5 月.

8.6. 受賞

1. 岡田裕, JACM Fellow Award, 2009 年 7 月 16 日.
2. 岡田裕, 日本機械学会計算力学部門業績賞, 2009 年 10 月 11 日.
3. 宍戸信之, 池田徹, 宮崎則幸, MES2008 ベストペーパー賞, 2009 年 9 月.
4. 中林靖, 人工知能学会賞, 2009 年 5 月.
5. 野村吉昭, 池田徹, 宮崎則幸, 日本機械学会賞論文賞, 2009 年 4 月.
6. 矢川元基, 東レ科学技術賞, 2009 年 3 月 18 日.
7. 矢川元基, 日本学士院賞, 2009 年 6 月 1 日.

9. 結び

本報は、2009 年度の活動を取りまとめたものである。なお、2010 年 3 月に予定されているセンター評価委員会に間に合わせるために原稿締め切りを 1 月 10 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。

東洋大学計算力学研究センター
〒112-0001
東京都 文京区 白山 2-36-5
TEL: 03-5844-2411
FAX: 03-5844-2431
<http://www.ccmr.toyo.ac.jp>