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)

2008年度

計算力学研究センター年報



Toyo University



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	6
2.4.4. 大規模可視化	6
2.4.5. 大規模並列化	7
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. 計算力学フォーラム	8
2.5.2. 第3回計算科学フロンティアフォーラム (湯島)	8
2.5.3. 第4回計算力学シンポジウム (白山)	8
2.5.5. 計算力学セミナー (白山)	8
2.6. 産学協同活動	9
2.6.1. (株)日立製作所機械研究所との連携	9
2.6.2. 独立行政法人 原子力安全基盤機構との連携	9
2.6.3. 東京理科大との連携	9
2.6.4. イノベーション・ジャパン 2008 への出展	10
2.7. 教育活動	10
3. 研究成果	11
3.1. 構造健全性	11
3.1.1. 構造健全性に関する研究の概要	11
3.1.2. 3 次元破壊力学解析の高度化に関する研究	12
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	£19
3.1.4. エルミート型3節点三角形要素へのX-FEMの適用	24
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	
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	
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	ョけたフレー
ムワーク開発	52
318 臨海施設の安全性評価のための自由表面流れ解析システムの開発	56
3.1.0 知識処理融合刑旗合執流動数値解析による人口的最高設計システムの開	
	رو 66
3.2 逆問題	
3.2.1	
3.2.1 〜 「ALLE CRATER AND CRATER	
3.2.2 約4%になける肉はただ三番	
3.4.3. 液口的附にやりる的料用化	
3.2.4. 衣田以心りマルフ ヘクール所行	
3.2.3. ロホット	102
ここの 段週1日	10/

3.3.1. 最適化に関する研究の概要	107
3.3.2. 大規模構造問題における形状最適化問題の研究	
3.3.3. 自動分割に適した高精度可変節点数要素の研究	
3.3.4. めっき,防食の最適化(めっき厚さの均一化)	
3.3.5. カソード防食の最適化	119
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	124
3.4.2. 統合化に向けた可視化システムの構築	
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	130
3.5.2. 大規模非圧縮性粘性流体解析システムの開発	
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	
3.6. 統合化	
3.6.1. 統合化に関する研究の概要	135
3.6.2. システム統合のイメージ作成	
4. 産学協同活動	
4.1. (株)日立製作所機械研究所との連携	
4.2. 独立行政法人 原子力安全基盤機構との連携	143
4.3. 東京理科大との連携	144
4.4. イノベーション・ジャパン 2008 への出展	144
5. 国際協力	
5.1. 第7回計算力学フォーフム(韓国成均館大学)	
6.	
0.1. 用3回訂昇件子/ロンブイノノオーノム (<i>())</i> (<i>)</i> (()) () () () () () () () () () () () (147
0.2. 第 6 回前昇刀子/ オーノム (加水八子)	130
7. 教育活動	152
7.1. 教育活動風景	
7.2. 卒論・修論の紹介	
8. 業績リスト	159
8.1. 論文	159
8.2. 総説・解説・エッセイ	164
8.3. 招待講演	165
8.4. 講演論文·口頭発表	167
8.5. 受賞	
9. 結び	179

1. まえがき

本年度はセンターが活動を開始してから4年目にあたる.この報告書はこの第4年度のセンター活動を取りまとめたものである.

これまでの3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.まず,特筆すべきは,このたびおこなわれた当センターに対する文部科学省による中間評価が最高位のAAであったことである.このことに慢心することなく,我われ一同さらなる発展・展開を図っていく所存である.

本年度の国際活動としては,韓国成均館大学において第7回計算力学フォーラム を開催したことがあげられる.韓国の計算力学はアジア各国のなかでも日本に次いで 最も進んでおり今回のフォーラムも大変充実したものであった.当センターとしても今 後継続的に韓国との協力関係を継続する予定である.

国内においては、名古屋大学、東京理科大学と共催の第3回計算科学フロンティア フォーラム開催、東京国際フォーラムで開催されたイノベーションジャパンへの出展、 琉球大学で開催された日本機械学会計算力学講演会と同時開催の第8回計算力学 フォーラムへの参加など成果の広報につとめた.

センター成果公開の公式行事としては毎年3月に計算力学シンポジウムをこれまで 白山または川越キャンパスで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.その他のセンター公式行事としてはセンター内での学生の教育もかね て開催する計算力学セミナーがあるが、本年度はこれまでに内外の講師を招き数回 開催した.学生諸君にとっては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. センター発足当初は個別のグループにおいての縦割りの研究が中心であったが昨年 度から研究統合化に向けて新たなスタートを切った.目に見えるような成果はまだであ るが最終年度までには多くの人たちに使っていただけるような統合ソフトの完成を目指 している.

今後とも関係各位からのご批判とご指導を賜れば幸いである.

2009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	工学部	コンピュテーショナル工学科)
田村	* 善昭	(東洋大学	工学部	コンピュテーショナル工学科)
塩谷	:隆二	(東洋大学	工学部	コンピュテーショナル工学科)
中林	、靖	(東洋大学	工学部	コンピュテーショナル工学科)

●研究助手

塩﨑	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 季去

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)
入部 綱清	(プロメテック・ソフトウェア株式会社)
岡田 裕	(鹿児島大学大学院 理工学研究科)
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)
佐々木 康二	(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	(Department of Mechanical Engineering Virginia Tech Institute for
	Advanced Learning and Research)
松岡 浩	(独立行政法人 日本原子力研究開発機構)
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 72			
	メモリPC/2700 DDR SDRAM 1024MB ECC			
	Reg.	144		
	システムHDD 80GB 7200rpm	36		
	ケース 1U Rackmount	36		
<データ用ストレージ>				
VCRVAL50016-3U	HDD S-ATA 500GB 7200rpm	16		
	キャッシュ 1GB	1		
	ケース 3U Rackmount	1		
<スイッチ関連>	HP ProCurve Switch 4160GL	1		
	HP ProCurve Switch 2650	1		
<キャビネット,周辺機器>	25U ラックキャビネット一式	2		
	17型TFT液晶ディスプレー	1		
	キーボード,マウス	1		
~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~	Fedora Core, クラスタソフトScoreインストー			
	1V	54		

#### **2.4.** 研究成果の概要

#### 2.4.1. 構造健全性

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

- (1) 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・マルチフィジクス解析を精度良く効率よく解くことの重要さ.

が挙げられる. そこで, 当センターの構造健全性に関する研究として, 次の8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
- 7. 臨海施設の安全性評価のための自由表面流れ解析システムの開発
- 8. 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の開発
- 9. SPH 法による 3 次元熱伝導解析

#### 2.4.2. 逆問題

本年度は、(1)流れ場における腐食同定逆問題、(2)複合材料における材料 同、(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)では、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、本年度は、昨年度得られた成果を基に、流れのある 配管内において、管壁近傍の流体の速度勾配を考慮したカソード防食の最適化 を行った。

(2)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い,ひずみ測定誤差を考慮したカルマンフィルタに基づく確率的手法による複合材料の材料同定を可能にした.

(3)では、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.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 を行うことを目的とし研究を進め、本年度は、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.

(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、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.

#### 2.4.3. 最適化

構造健全性を高めるための最適化手法を引き続き研究している.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おり,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 ムを開発する.また,構造の健全性評価においては要素分割が複雑になる.そこで, メッシュを効率的に作成するための手法も最適化技術開発の一環として研究した.ま た,構造物においては腐食は重要なテーマであり,その防食の最適化がキーテクノロ ジーになっている.そこで,防食の最適化をいかに行うかについて,最適化技術の応 用として研究を行った.

#### 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 20 年度は,各サブプロジェクトが必要とする可視化について行った前年度の調査を受け,主に4面体要素をベースとする非構造格子の構造解析データに対する可視化システムの構築を行った.特に,これまで開発したシステムやツールの利用により,大規模・分散データへの対応に配慮した.

#### 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、このことからもハードウェアとしてコンピュータの性能が向上するスピードがいかに速いかが分かる。一方、これらの大規模なコンピュータ上で動作する効率的なソフトウェアの開発に関しては、その開発スピードもソフトウェアの品質もまだまだ十分とは言えず、多くのソフトウェアが 20 世紀の主要なソフトウェアを修正し続けて用いられているのが実情である。特に、1970~1980 年台に既に確立されているアルゴリズムに対して、並列化の実装のみを加えた物が多く見られる。

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

- (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) 用に開発されたモジュールをベースに様々な改良及び応用を行っていく.

#### 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、昨年度実施し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、本年度は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た.

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

#### 2.5.1. 計算力学フォーラム

- (1) 第7回計算力学フォーラム(韓国成均館大学)
   8月29日に成均館大学(SKKU, Sungkyunkwan University), Suwon, Koreaで第7回計算力学フォーラムを行った.
- (2) 第8回計算力学フォーラム(琉球大学)

11月3日に琉球大学において開催された日本機械学会第21回計算力学講演会の中で第8回計算力学フォーラムを行った.

#### 2.5.2. 第3回計算科学フロンティアフォーラム(湯島)

9月9日に東京ガーデンパレスにおいて第3回計算科学フロンティアフォーラムを名 古屋大学,東京理科大学と共催した.

#### 2.5.3. 第4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: 2009年3月17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

詳細は未定であるが,上記参加者の平成20年度の成果発表を中心に講演を行う予 定である.

#### 2.5.5. 計算力学セミナー(白山)

以下のセミナーが CCMR1階会議室で開催され,活発な討論が行われた.

- 11月6日「超大規模マトリックスの解法について」
   町田 昌彦 氏(JAEA システム計算科学センター研究員)
   山田 進 氏(JAEA システム計算科学センター研究員)
   今村 俊幸 准教授(電気通信大学)
- 11月21日「Industrial Use of Computational Weld Modeling Tools for Optimization of Weld Residual Stresses, Distortions, and Micro-Structure Control」
  - Dr. Frederick W. Brust Jr.

(Senior Research Leader, Engineering Mechanics Corporation of Columbus)

#### 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.本年 度においても、メッシュ生成技術を中心に研究を行った.本研究では従来の3次元C AD(ソリッドモデル)を対象としたメッシュ生成では無く、3次元形状撮像から得られる STLデータやCAE解析で使用した解析メッシュデータ等のメッシュモデルとして表現 された形状データを主体としたメッシュベースのCAEシステムの開発を目的としている. 本年度はエンジンブロックとコネクティングロッドへの適用を中心に技術の検証を行っ 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.

#### 2.6.4. イノベーション・ジャパン 2008 への出展

今回で 5 回目を迎える「イノベーション・ジャパン 2008-大学見本市」は、大学の技術シーズと産業界のニーズの出会いを目的とした国内最大のマッチングイベントである.このイベントによって、産学の多くの出会いの場として活用され、技術移転が進み、新産業が創出され、日本経済がますます発展していくことを期待されている.当センターでは、産学協同活動を促進する目的があるため、本年度も出展した.

会期: 2008年9月16日(火)~18日(木) 10:00~18:00

会場:東京国際フォーラム[東京・有楽町]

主催:科学技術振興機構(JST),新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO) 来場者:企業の研究開発担当者,経営者,マーケティング担当者,大学関係者, 研究者など 45,345 人が来場

#### 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,システマティックで迅速・正確な解析手法は, まだ確立されていないというのが実情である.その主な要因として,

- (1) 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さ.

が挙げられる. そこで, 当センターの構造健全性に関する研究として, 次の8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
- 7. 臨海施設の安全性評価のための自由表面流れ解析システムの開発
- 8. 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の開発
- 9. SPH 法による 3 次元熱伝導解析

我々は、9 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. 順解析の問題 に取り組むために、サブテーマ 1、2、3、4、5、7、9 がある. サブテーマ 1、4、7、9 は、 その順解析を正確に、しかも大規模高速に解く手法の確立を目指す. 次に、逆問題 最適化に関しては、サブテーマ 8 が対応している. 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、6、7、8、9 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3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3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、3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.

具体的な平成20年度の計画は,解析自動化のためのソフトウエアプラットフ オームを構築し、3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き裂進展解析を実施することである.

今年度の成果を検証し、今後は混合モードき裂問題の進展解析と溶接残留応 力を考慮した解析コードの構築、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.現在の六面体有限 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 3 次元形状をもつ構造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.



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

#### (3) 研究内容

平成19年度までに、VCCMを用いた3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.

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 ソフトウエ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」、「有限要素法解析プログラム」、「を裂形状のパラメトリック解析や進展解析の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、CCMR 客員研究員でもある、 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よく、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、それを基づき有限 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.
 以上のようなソフトウェア開発を行い、実証計算を行ってきた.



図3 き裂進展に伴うき裂形状の変化

#### (4) 平成 20 年度進捗状況

現在までに、上記のソフトウェア開発を行い、き裂のパラメトリック解析と モード I 表面き裂の進展解析を行った.その概要を以下に示す.

#### ○表面き裂の進展解析

Newman and Raju*に示された,材表面き裂の進展解析結果を示す.図2に示 すような初期き裂を持つ板材に対してき裂進展解析を行った.き裂進展則は Newman and Raju*と同じものを用いた (Paris 則**).図3に初期き裂深さ a/t と アスペクト比が 0.2 と 0.4, 0.25 と 0.5 の場合のき裂進展の様相を示す.いずれ の場合も、き裂の進展とともにそのアスペクト比が 0.8 程度に収斂し、Newman and Raju*の結果と同様のものが得られている.他の初期き裂形状に対しても解 析を行ったが、同様な傾向の結果が得られている.

#### 参考文献

* J.C. Newman, Jr., I.S. Raju, Engineering Fracture Mechanics, 15, No. 1-2, 185-192 (1981).

** P. Paris, F. Erdogan, J. of Basic Engineering, 85, 528-534, (1963).



図5 解析に使用したモデルの例

Inclination angle =  $\pi$  / 6



図6 き裂の自動パラメトリック解析結果の例

遠方で一様引張応力を受ける弾性体中の埋め込みき裂問題において,き裂の 傾斜角とアスペクト比に関する自動パラメトリック解析を行った.問題の定義 を図4に示す.図5に示すようなメッシュを自動生成しながらパラメトリック 解析を行った.モデルの総要素数と節点数はおよそ400000と600000である. 決して小さい規模の解析ではないが,PCクラスタを利用すれば高速に実行可能 である.図6にパラメトリック解析で得られたき裂前縁の応力拡大係数のうち 数例を示す.本解析システムを用いれば,このような解析結果を自動生成する ことが可能である.

#### ○ TSV-PRE を用いたき裂解析例

テクノスター社製有限要素法メッシュ生成ソフトウェア TSV-PRE によって き裂メッシュを生成して解析した例を示す.前述のように,き裂メッシュが用 意できれば,応力拡大係数の計算まで自動で解析を進めることが可能である.

はじめに、薄板中の表面き裂の例題解析を示す. 図 7 に板材やき裂の寸法と 解析に使用した有限要素法モデルを示す. モデルの総要素数と総節点数はそれ ぞれ 155494 と 237215 であった.また、TSV-PRE 上でモデル生成に要した時間 はおよそ 15 分である.本解析システムで求めた応力拡大係数のき裂前縁分布と 表面での相当応力の分布を図 8 に示す.なお、応力拡大係数は  $\sigma\sqrt{m/\Phi}$ 

 $(\Phi = 1 + 1.464 \left( \frac{a}{c} \right)^{1.65}$ : シェイプファクター)で正規化してプロットしてある.板の 表面近傍を除けば、参照解(Raju-Newman)と十分な一致を得られたと言える.板 表面近傍で参照解との相違が発生する原因は、TSV-PRE で生成したき裂メッシ ュの表面近傍で、き裂前縁形状が半楕円形になっていないためである.

さらに、複数き裂問題の解析も行った. 図 9 に板材やき裂の寸法と解析に使 用した有限要素法モデルを示す. モデルの総要素数と総節点数はそれぞれ



図 7 TSV-PRE でメッシュ生成を行った表面き裂問題[(a) 板材やき裂の寸法, (b) 全 体メッシュ図, (c) き裂面のメッシュ分割]



図 8 TSV-PRE で生成したメッシュによるモード I 表面き裂の解析結果[(a) 応力拡大 係数の分布,(b) 相当応力の分布(0.5*σ*~3*σ*)]

187278 と 273656 であった.また,TSV-PRE 上でモデル生成に要した時間は, き裂一つのときとほぼ同じであった(およそ 15分).図 10 にモデル右側のき裂 に対する応力拡大係数計算結果とモデル表面の相当応力分布を示す.応力拡大 係数はき裂一つのときと同様に, $\sigma\sqrt{m/\Phi}$  ( $\Phi$ =1+1.464 $\left(\frac{a}{c}\right)^{1.65}$ :シェイプファクタ ー)で正規化しプロットしてある.また,モデルの対称性から,モデル左側の き裂で求めた応力拡大係数の分布は同じである.二つのき裂の干渉,あるいは 有効断面積減少によって応力拡大係数の値がき裂一つのときより若干大きくな る傾向にある.

本解析例題によって、き裂メッシュの生成が行えれば、本き裂解析システムでほぼ自動的(マニュアル操作はほとんどなし)にき裂解析が可能なことが実



図 9 TSV-PRE でメッシュ生成を行った複数表面き裂問題[(a) 板材やき裂の寸法,(b) 全体メッシュ図,(c) き裂面のメッシュ分割]



図 10 TSV-PRE で生成したメッシュによるモード I 複数表面き裂の解析結果
 (a) 応力拡大係数の分布,(b) 相当応力の分布(0.5σ~3σ)]

証された.

#### ○ 平成 20 年度進捗状況のまとめ

平成 20 年度の進捗状況として,様々な解析例題を挙げた.それらによって, 本研究で開発中のき裂解析システムによって様々なき裂の解析をほぼ自動的に 行えることを示した.また,得られた応力拡大係数は十分な精度を有する.

現在,河合浩志氏(東大)作成の有限要素法解析モデル生成プログラムをカ スタマイズすることによって,3次元的曲面やキンクを有するき裂モデル生成を 可能にする作業が進行中である.これが終了すれば,混合モード下の3次元き 裂の進展解析を行うことが可能になる.

# 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.今年度は、研究の第一歩として、3次元 き裂解析手法の高精度化に関する研究を実施した.今後は、本技術を礎とし、 実環境における混合モード破壊解析への展開を図る.

#### (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、き裂進展解析に 適した解析手法であるフリーメッシュ法を高精度化し、き裂先端応力場の評価 方法として、これまでの線形破壊力学に基づいた解析法に加え、き裂先端の破 壊プロセスゾーンを考慮できる手法を新たに組み込むことでロバストかつ高精 度な解析技術を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る.

#### (3) 研究内容

#### (A)3次元フリーメッシュ法の高精度化

有限要素法は、要素ごとに仮定された変位場や応力場を領域全体に足し込む ことで対象物の応力状態を表現する Element by Element 型の解析法である.本手 法では、幾何形状の定義、材料特性の設定、境界条件の付与など、すべての処 理が要素ごとに行われる.したがって、得られる解の精度も要素形状や種類に 依存することから、高精度な解が期待できる高品質メッシュを生成するための 技術が不可欠となっている.

フリーメッシュ法は、有限要素法の全体メッシュ生成労力の軽減化を目的として開発された Node by Node 型の解析手法である.本手法では、節点に接続している要素群(局所パッチと呼ぶ)を節点ごとに作成し、同時に剛性行列を作

成することで全体メッシュ生成に係る労力を低減している.しかしながら,局 所パッチ生成アルゴリズムの制約により,中間節点を有するような高精度要素 の使用は困難であるため,対象とする問題によっては解析精度の問題が指摘さ れてきた.

フリーメッシュ法の高精度化に関しては、現在までに多くの研究者らによっ て研究されている.本研究では、要素上で変位場を仮定し、局所パッチ上で応 力場またはひずみ場を仮定する Enriched Free Mesh Method (EFMM)に着目する. 本手法は、フリーメッシュ法の局所パッチ生成過程について、有限要素法のメ ッシュ生成の煩雑さの軽減化だけでなく、解の高精度化も同時に期待して開発 された手法である.以下に EFMM を概説する.

EFMMでは、図1に示すように変位場は要素ごとに仮定し、応力・ひずみ場 に関しては局所パッチにて仮定する.要素ごとの変位場と局所パッチごとの応 力場またはひずみ場はそれぞれ独立に定義されており、Hellinger-Reissnerの原理 によって関連付けられる.3次元領域における定式化は2次元領域と同様である が、局所パッチは図2に示すような四面体要素群で構成される.また、ひずみ 評価点は、中心節点周りの四面体要素ごとに一時的に作成された六面体領域内 にて定義される.本領域は任意に仮定できるが、中心節点を一頂点とする六面 体領域を仮定することで、六面体内部の Gauss 積分点をひずみ評価点として利 用することが可能となる.

EFMM の精度は、図3 で示した片持ちはりの曲げ問題にて精度を検証した結果、図4より、EFMM の解は FEM よりも少ない自由度で厳密解に達することが分かる. この傾向は2 次元問題でも同様に検証されており、本例題によって3 次元領域においても EFMM の有効性が確認されたことになる.







図5 CG法が解に至るまでの反復回数の比較

次に、EFMM 大規模計算への親和性を検討するために、大規模並列計算で主 に適用されている CG 法(線形代数ソルバー)の収束性について検討する.図5 は、前数値解析例で示した片持はりモデルを用いて、CG 法が収束に至るまでの 反復回数と自由度との関係が示されている.EFMM の結果は FEM と比較して、 少ない反復回数で収束に至っている.特に、解析規模が大きくなるにつれてそ の差が顕著に現れているのが分かる(30,000 自由度では約 6 割も低減できてい る).これは、局所パッチ上にて応力場を仮定することで場の平均化が起こり、 それが原因で最終的に得られる剛性行列の性質が変化しているためと考えられ る. したがって、大規模問題に対しても親和性が高いと考えられる.

#### (B) ロバストな3次元破壊力学計算技術の開発

き裂解析を実施するにあたり,解の高精度化を図るために,図6に示すようなき裂先端の微視的特性である破壊プロセスゾーンを考慮できる破壊力学モデルを構築する.



図6破壊プロセスゾーン(破壊進行領域)

#### (4) 平成 20 年度進捗状況

今年度は、(a) 2 次元 Enriched Free Mesh Method で得られた計算結果の妥当性 を検討するとともに、(b) 3 次元領域への拡張定式化および(c)き裂先端応力場の 算出と実装に取り組んだ.(a)については、Enriched Free Mesh Method で得られる 剛性行列の固有値分布の特徴や Super-convergence patch recovery 法との比較解析 において、EFMM の高精度解に対する新しい知見が得られた.(b)については、3 次元 EFMM コードの開発および整備により、フリーメッシュ法の高精度化に成 功している(上記(3)(A)を参照).(c)については、精度面で未だ問題があり、今 後更なる検討が必要である.一方、破壊プロセスゾーンモデルに関しては、現 在、文献調査等を実施しており、次年度以降に具体な展開を図る予定である.

### 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,粒子法の一種と考えられるフリーメッシュ法では,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,四辺形要素に変換する方法,混合法を用いる 方法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 要素で実現されてはいるが,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 できなう. 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< < <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.

$$H_{01}^{1}(\xi) = (2+\xi)(1-\xi)^{2}/4$$

$$H_{02}^{1}(\xi) = (2-\xi)(1+\xi)^{2}/4$$

$$H_{11}^{1}(\xi) = (1+\xi)(1-\xi)^{2}/4$$

$$H_{12}^{1}(\xi) = -(1-\xi)(1+\xi)^{2}/4$$
(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.

$$N_{i}^{0}(\zeta_{i},\zeta_{j},\zeta_{k}) = \zeta_{i}$$

$$N_{j}^{0}(\zeta_{i},\zeta_{j},\zeta_{k}) = \zeta_{j}$$

$$N_{k}^{0}(\zeta_{i},\zeta_{j},\zeta_{k}) = \zeta_{k}$$
(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,  $\zeta_i + \zeta_i + \zeta_k = 1$ 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( $\xi_i$ ,  $\eta_i$ )とする. ただし,  $\xi_i$ は節点 *i*から節点 *j*に向かう座標であり,  $\eta_i$ 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.

$$N_{i}(\xi_{i},\eta_{i}) = \xi_{i}(1-\xi_{i}-\eta_{i})^{2}$$
(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 $H^1_{11}$ と一致する.すなわち、  $\xi_i$ 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.

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

同様に、η,方向微分に対する内挿関数は次式となる.

$$N_{i\eta}(\zeta_i, \zeta_j, \zeta_k) = \zeta_k \zeta_i^2$$
⁽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応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.

$$N_{i}(\zeta_{i}, \zeta_{j}, \zeta_{k}) = \zeta_{i}^{2}(3 - 2\zeta_{i}) + 2\zeta_{i}\zeta_{j}\zeta_{k}$$

$$N_{i\xi}(\zeta_{i}, \zeta_{j}, \zeta_{k}) = \zeta_{i}^{2}\zeta_{j} + \zeta_{i}\zeta_{j}\zeta_{k}/2$$

$$N_{i\eta}(\zeta_{i}, \zeta_{j}, \zeta_{k}) = \zeta_{i}^{2}\zeta_{k} + \zeta_{i}\zeta_{j}\zeta_{k}/2$$

$$N_{j}(\zeta_{i}, \zeta_{j}, \zeta_{k}) = \zeta_{j}^{2}(3 - 2\zeta_{j}) + 2\zeta_{i}\zeta_{j}\zeta_{k}$$

$$N_{j\xi}(\zeta_{i}, \zeta_{j}, \zeta_{k}) = \zeta_{j}^{2}\zeta_{k} + \zeta_{i}\zeta_{j}\zeta_{k}/2$$

$$N_{j\eta}(\zeta_{i}, \zeta_{j}, \zeta_{k}) = \zeta_{j}^{2}\zeta_{i} + \zeta_{i}\zeta_{j}\zeta_{k}/2$$

$$N_{k\xi}(\zeta_{i}, \zeta_{j}, \zeta_{k}) = \zeta_{k}^{2}(3 - 2\zeta_{k}) + 2\zeta_{i}\zeta_{j}\zeta_{k}$$

$$N_{k\xi}(\zeta_{i}, \zeta_{j}, \zeta_{k}) = \zeta_{k}^{2}\zeta_{i} + \zeta_{i}\zeta_{j}\zeta_{k}/2$$

$$N_{k\eta}(\zeta_{i}, \zeta_{j}, \zeta_{k}) = \zeta_{k}^{2}\zeta_{j} + \zeta_{i}\zeta_{j}\zeta_{k}/2$$

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, Zienkiewitcz[6]が以前求めた 3 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図1に示す.



☑ 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,通常の要素と同様である. 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.

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

ただし、ム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.

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

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x} = 0, & \text{at } x = 0\\ \frac{\partial u}{\partial y} = 0, & \text{at } y = 0\\ u = 0, & \text{at } x = 0.5 \text{ or } y = 0.5 \end{cases}$$
(8)

原点における値を他の手法および解析解と比較すると,表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.

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	_

表 1 Results for Poisson equation: value at the origin

#### (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図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.

表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.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.



(a) Triangular Elements: Regular mesh and Distorted mesh



Regular

Distorted

(b) Quadrilateral Elements: Regular mesh and Distorted mesh



(c) Triangular Elements: Union Jack type mesh

🗵 2 Cantilever beam with various mesh patterns

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

		Element	Regular	Distorted	Exact
(a)	Present	Tri	1.0332	1.0291	1
	Sekiguchi	Tri	0.7899	0.7319	1
	Allman	Tri	0.7319	0.6947	1
(b)	Sekiguchi	Quad	0.9619	0.9622	1
	Mixed	Quad	1.0234	0.998	1
	Allman	Quad	0.9188	0.9457	1
	MacNeal	Quad	0.9776	0.9761	1
(c)	Present	Tri	1.0366	-	1
	Sekiguchi	Tri	0.4915	-	1

### (4) 平成 20 年度進捗状況

#### (4-1) X-FEM 定式化(自由境界問題)

X-FEM は主にき裂問題へ適用されているが、材料の境界が変動し要素分割が 煩雑になるような問題に対しても有効である.図3のような材料の境界と要素 分割が一致しない問題に対しての定式化を示す.







ここで、V(x)はエンリッチ関数であり、自由境界問題ではステップ関数となる.  $\phi_i(x)$ は通常の形状関数である.この内挿関数を用いて有限要素法の定式化を行 えば、図4に示すような三角形要素の一部の積分を行う必要がある.



I 4 Part of triangular element as integration area

このとき,図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αとβとすると,(7)式に相当する積分公式は,次式となる.

$$\iint_{\Delta} \xi^{l} \eta^{m} dx dy = \frac{2\Delta \alpha^{l+1} \beta^{m+1} l! m!}{(l+m+2)!}$$
(10)

#### (4-2) 円孔付き平板の解析(1次要素)

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.図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.



S XFEM model: plate with a circular hole

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図 6 に示 す. 厳密解に一致してはいないが, ほぼ妥当な結果が得られていると言える. 今後, Hermite 型要素を用いた解析を行い, 改善状況を調べる予定である.



 $\boxtimes$  6 Stress distribution along y axis

# 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、2次元のき裂進展解析を例にしている.最後に、3次元の階層メッシュの進捗状況を報告して終わりとする.

#### 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.



(a) Classical method




## 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.



☑ 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.



# 3. Crack propagation analysis in 2D (Four point shear loading)

本節では、図4のように、き裂の入った150mm×20mmの長方形の板の4箇所に、50Nと10Nの荷重を掛けた、き裂進展解析を考える. ヤング率210GPa、ポアソン比0.3とする. 応力腐食割れ(SCC)を仮定して、パリス則 $\frac{de}{dN} = c \times K^m$ を用いる. da はき裂進展量、K は応力拡大係数、dN は荷重数(時間間隔)、c とm は物性値として、それぞれ、da = 1.0 mm、c = 10⁻¹⁵、m = 3 とし、dN を変数とする.



 $\boxtimes$  4 Model and boundary conditions.

次に、マザーメッシュを生成する. このマザーメッシュは、図 5(1)に示さ、 301,701 頂点, 600,000 要素である. このマザーメッシュから階層メッシュを生 成する. 図 5 は edge collapse を行う過程で生成されたメッシュである. この階層 メッシュを生成するのにかかった時間は, 783 秒(約13分)である.



☑ 5. Meshes generated by edge collapse (Number is that of edge collapses).

事前に生成した階層メッシュを用いて、き裂進展解析を行う.解析の際、もし、き裂線がアダプティブメッシュの頂点上に載っていなければ、最も近い頂点がき裂線の上に移動させている.

図1のアダプティブ解析のフローチャートのように, step1 で初期メッシュを 作り,2次要素のFEM を解き, 誤差解析を行う.この時, 誤差が収束するまで, ループを5回繰り返した.Step6 では, 誤差が大きい所に3次要素を当て嵌めた. その解を用いて VCCM とパリス則によって, step7 でき裂を進展させた.アダプ ティブな収束計算の結果で, き裂を1回進展させ, 合計7回き裂を進展させた.

図 6 は、誤差が収束した時の(各アダプティブ解析の最終結果)のアダプティブメッシュと主応力分布である.





図7は、step31の結果によって、step32で進展させた後、step36までにアダプ ティブ解析が収束する様子を、アダプティブメッシュと誤差ノルムの分布で示 した様子である.き裂が進展した直後の step32 では、誤差が大きい部分がある が、アダプティブ解析が進むにつれて、誤差が小さくなっている様子を見るこ とができる.



37



(6-a) Adaptive mesh after 36 steps (6-b) Error after 36 steps  $\boxtimes$  7 Adaptive mesh and Error norm.

クラシカルなリメッシングでは合計で 2,340 秒(FEM と誤差解析の時間を含めれば, 2,630 秒である)かかった.一方,階層メッシュを用いたメッシュ生成では,合計で 1.8 秒かった(FEM と誤差解析の時間を含めれば, 294 秒である). この解析では,階層メッシュを生成するのに 783 秒しか掛かっていないため, 全体としても,クラシカルなメッシング法で行った解析の 2,340 秒よりも時間が 短縮されている.

## 4. 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.3 次元の階層メ ッシュを生成するためには、図9のような、四面体の edge collapse と vertex split が必要になる.



☑ 9 Edge collapses and vertex split of tetrahedron.

図10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.



 $\boxtimes$  10 Hierarchical meshes generated by edge collapse of tetrahedron.

図 11 と図 12 は, 階層メッシュから生成された, アダピティブメッシュである. 図 11 は, 表面メッシュであり, 図 12 は, 四面体メッシュの辺を全て表示したものである.



⊠ 11 Adaptive mesh (surface mesh).



⊠ 12 Adaptive mesh (tetrahedron mesh).

最後に、3次元の解析例を示す.図13のように、上面の中央に荷重をかける 解析を行う.



 $\boxtimes$  13 Model and boundary conditions.

図 14 は初期メッシュであり、図 15 はアダプティブメッシュである.



図 14 の初期メッシュを用いて弾性解析を行うと、図 16 のような主応力分布 が得られる.この主応力分布から図 17 のような誤差分布が得られ、誤差が大き い部分が細かい要素に分割れる.その結果、図 15 のようなアダプティブメッシ ュが生成される.図 18 は、アダプティブメッシュを用いて弾性解析を行った、 主応力文応であり、図 19 は、誤差分布である.図 17 と図 19 を比べると、誤差 が減っているのが分かる.









図 19 Error by adaptive mesh.

# (4) 平成 20 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、2次元のアダプティブ解析をき裂進 展解析に適用し計算時間を短縮することに成功した.

更に、3次元の階層メッシュを生成し、アダプティブな弾性解析に成功した.

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3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3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ぜい化および疲労強度に水素がどのようなメカニ ズムで影響を及ぼすかを明らかにする。

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

# (3) 研究内容

## (A) マクロレベルの解析

#### (a) 概要

平成 20 年度はフッ化マグネシウム(以下 MgF₂と表記)単結晶を研究対象と してとりあげた. MgF₂単結晶は真空紫外光まで高い透過率を有すること,真 空紫外光に対して高い耐久性を持つことなどから,現在主流の水晶に代わる半 導体フォトリソグラフィシステムの光学素子として,その利用が期待されてい る.このシステムにおいては,入射光を偏光させるために偏光子が必要となる. 偏光子が小型であるほど入射光を強くする必要があり,結果として偏光子の寿 命が短くなるため,メンテナンスフリーの要望から偏光子の大型化が望まれる. 現在この偏光子の材料として水晶が使用されているが,水晶の結晶は育成に時 間がかかるため大型化に限界がある.そこで,大型化が可能な MgF₂単結晶が偏 光子の材料として期待されている.

大型の MgF₂ 単結晶の育成技術としてはチョクラルスキー法が用いられる. 電子デバイスの微細加工のためのフォトリソグラフィシステムの光学素子には 高い光学的性能が要求され、とりわけ複屈折の均質化は重要である. MgF₂単結 晶の複屈折は結晶の対称性に起因する真性複屈折と残留応力に起因する応力複 屈折から成る.前者は偏光素子などに利用する際に必要不可欠であるが、後者 は光の乱れにつながる.よって、応力複屈折を低減することが重要となる.チ ョクラルスキー法では、育成中の温度分布の存在による熱応力に起因する残留 応力により、育成直後では比較的大きな応力複屈折が残留する.一般に結晶が 大口径になるほど、単結晶中に大きな応力複屈折が存在している.よって、高 性能光学素子として大型 MgF₂単結晶を用いる場合、応力複屈折を低減して、光 学的な均質性を改善することを目的として、育成後に単結晶のアニール処理が 実施される.このアニール過程により残留応力を小さくし、応力複屈折を低く 抑える.しかし、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、できるだけ効率の良いアニール工程の探索のために、アニ ール後の残留応力、およびその結果として生じる応力複屈折の評価が重要であ る.

以前,著者らの研究グループでは、半導体フォトリソグラフィシステムにお けるレンズ硝材として用いられるフッ化カルシウム(以下 CaF₂と表記)単結晶 について複屈折現象のシミュレーション手法を開発した. MgF₂単結晶は正方晶 に属するため、立方晶に属する CaF₂単結晶とは異なる複雑な複屈折現象を示す と考えられる.平成 20 年度には正方晶に属する MgF₂単結晶の複屈折現象のシ ミュレーション手法を開発し、同単結晶のアニール後の複屈折現象の解析を実 施した.

## (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

前述の非定常熱伝導解析から求まるインゴット内部の温度分布から,残留応 力解析を求める. MgF2単結晶については高温での非弾性挙動(クリープ挙動) に関するデータが現状では全くないことから,非弾性挙動熱応力解析から残留 応力を求めることはできない. そこで,本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. 以下に応力フリー温度につ いて説明する.

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 ットは一様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.なお、MgF2単結晶は正方晶であり弾 性係数と線膨張係数に異方性を有している.残留応力を求める弾性熱応力解析 にはこの結晶異方性を考慮する必要がある.この解析にも汎用有限要素法解析

#### 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 平均的な応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 に示すように直径が 100mm, 厚さが 100 mm の円柱状 MgF₂ 単結晶



図1 解析対象のインゴット形状および解析に使用した有限要素メッシュ

インゴットである. <001>育成単結晶, <100>育成単結晶および<111>育成単結晶 の3種類の単結晶で,育成軸に垂直に試料を切り出した場合のインゴットを解 析した. つまり,厚さ方向に解析座標系のx₃軸をとった場合,それぞれの場合 において,x₃軸と<001>方向,<100>方向および<111>方向が一致する. アニー ル期間は,約17日間である. 同図には非定常熱伝導解析に用いた有限要素メッ シュも示す. 20節点アイソパラメトリック要素を用い,要素数は5680,節点数 は24357である.

非定常熱伝導解析に引き続いて、弾性熱応力解析に基づいた残留応力評価を 行った.用いた有限要素モデルは非定常熱伝導解析の場合と同じである.また、 この解析では応力フリー温度を仮定しなければならないが、本解析では、これ を 800 K とした.この応力フリー温度設定の妥当性は後述するように光路差の 値について解析結果と実験値を比較することにより検証される.弾性熱応力解 析は弾性異方性を考慮して行った.

上記の残留応力解析の結果から光路差を求めた. 図 2 に解析により求まった

単位厚さ当たりの光路差分布を. <001>育成単結晶, <100>育成単結晶および <111>育成単結晶の場合についてそれぞれ示す. それぞれ,結晶異方性による残 留応力の対称性に起因する4回対称性(<001>育成単結晶)と2回対称性(<100> 育成単結晶および<111>育成単結晶)が観察される. さらに, <100>育成単結晶 および<111>育成単結晶の場合については大きな光路差が生じているが,これは 真性複屈折が存在することに起因する. <100>育成単結晶および<111>育成単結 晶では,無応力時においての光路差(真性複屈折により生じる光路差はそれぞ れ 117800nm/cm, 96500nm/cm となり,応力がかかることで光弾性効果により, 光路差が増減し分布が生じる. これらの真性複屈折の値は文献値と一致する. よって,開発したプログラムの有効性が示された.

図3に<001>育成単結晶の場合について光路差の測定結果を示す.測定結果と 解析結果である図2(a)を比較すると両者は分布状態が良く一致するとともに,定 量的にも,比較的良く一致していることがわかる.





図3 <001>育成単結晶の光路差分布の測定結果

## (B) ミクロレベルの解析

## (a) 概要

金属中へ水素が侵入することによって、破断伸びが減少したり、疲労き裂の 成長速度が加速したりする、いわゆる水素脆化現象が広く知られている.低強 度鋼においても粒内破壊が支配的な水素脆化を生じることが示されており、水 素による強度低下を生じない金属はほとんど存在しない.近年、大気汚染によ る環境悪化や地球温暖化の問題が顕在化しており、その解決のために水素を有 効利用する社会システムを構築しようという動きが活発になっている.しかし ながら、水素利用頻度が増大すれば材料内に侵入した水素に起因する破壊事故 の割合が増加することが危惧される.

水素脆化に関する研究の歴史は長く、これまでにも多くのメカニズムが提案 されている.古くから提案されている代表的なものとしては Hydrogen Enhanced Decohesion (HDED)説がある.これは水素原子により原子間の結合力が低下する ために容易に破壊を生じるというものであるが、金属材料中の水素濃度は一般 的に極めて低く、結合力の低下を生じるような濃度にはならないとする意見が 多い.一方で、水素脆化は水素が塑性変形挙動に影響を及ぼすためであるとす る説が、近年有力視されている.Beachem によって最初に提唱された水素によ る軟化説は Hydrogen Enhanced Localized Plasticity (HELP)と呼ばれ、その後も多 くの報告が行われている。例えば、松井・木村は 170 K から約 300 K の範囲で 水素チャージを行いながら超高純度鉄の引張り試験を行い、温度が 200 K 以上 の時には急激な軟化を示すことを、イリノイ大学を中心とする研究グループは 様々な材料において塑性変形の局在化や転位のモビリティーが増加することを 透過型電子顕微鏡 (TEM) 内での転位の直接観察や解析によって示している.

水素脆化メカニズムの解明が困難な理由として、極めて低い水素濃度で影響 が現れること、金属中での水素の拡散が非常に速いこと、水素分布を直接観察 するのが非常に難しいことなどが挙げられる.分子静力学法、分子動力学法と いった原子モデルを用いたシミュレーション手法は金属中の水素の動きを詳細 に調べることができるため、水素脆化メカニズムに関する洞察を与える有効な 手段になり得ると考えられる.平成 20 年度には、HELP 説の根拠となっている 転位と水素の相互作用を分子静力学法を用いて検討したので、その結果を示す.

#### (b) 解析方法,および(c) 解析結果

## 転位芯近傍の水素の占有位置

鉄-水素系の原子間ポテンシャルとして Wen が提案した EAM ポテンシャルを 用いた.水素と転位の相互作用を考える場合,転位芯の構造を考慮しないと弾 性論的には刃状転位のみ相互作用を持つ.また,水素の存在によって転位の刃 状成分が安定化し,らせん成分が減少するという報告もなされている.一方, らせん転位も芯構造まで考慮にいれると水素と相互作用を持つが,刃状転位と の相互作用に比べて十分小さく,らせん成分の寄与は小さいと考えられる.し たがって、本解析では(112)面上に存在する刃状転位を解析対象とした.刃状転 位はすべり面が x-z 平面に、すべり方向が x 軸方向となるように配置した原子モ デルから原子列を一列ぬきとり、共役勾配法を用いて構造緩和を行い導入した. 同手法を用いて、初期状態の原子配列と転位が x 軸方向に 1b (b はバーガース ベクトルの大きさ)運動した後の最終状態の原子配列を作成した.解析モデル のすべり面やすべり方向を図 4 に示す.転位の可動性を評価する際に用いた解 析モデルとしては、鉄原子 8054 個、水素原子 1 個から構成され、x,y,z 軸方 向にそれぞれ 11.05nm, 4.91nm, 2.02nm の基本セルを x,z 軸方向に周期境界 条件を適用したものを用いた.転位密度は 0.018nm⁻²である.

得られた刃状転位芯の近傍で、T site および O site に1 個ずつ順番に水素を導入し、共役勾配法を用いて鉄原子と水素原子の位置をエネルギーが最安定になるよう構造緩和した.この時のトラップエネルギーム*E*_dの分布を図5に示す.図より、最もトラップエネルギーが強い領域は転位芯に沿うように分布することがわかる.また、刃状転位の引張側(図5の領域 A)においてもトラップエネルギーは強くなる.一方、すべり面上にもトラップエネルギーが強くなるサイトが存在する(図5の領域 B).以後、簡便のためこの領域を転位芯の左側と呼ぶ.この図より、約2×10²⁰ J 程度の強いトラップエネルギーを持つサイトが、転位芯の左側に約2nmの範囲にわたって分布していることがわかる.このように、高静水圧応力領域(図5の領域 A)で現れるトラップエネルギーと同程度のトラップエネルギーが転位芯左側で見られることは、水素による格子膨張と転位によって発生する静水圧応力が相互作用を生じるとする弾性論からの導出は困難であり、さらには、このことは転位の存在するすべり面上に大量の水素が分布する可能性を示唆している.



水素トラップエネルギーの分布

## 転位の可動性に及ぼす水素の影響

Robertson らは *in situ* で TEM 観察を行い,水素ガスを導入した際に試験片中の転位間距離が狭くなる様子を観察している.この観察結果は HELP 説の論拠として知られている.Sofronis は HELP の理論的根拠として,転位間の相互作用力が減少することを弾性論に基づく解析によって導いている.すなわち,金属内の水素によって転位間の弾性相互作用力が減少することで転位間距離が狭く

なることが HELP の本質であるとしている.しかしながら Robertson の実験では 転位間距離が狭まる現象は観察されているものの,その原因が相互作用力の減 少によるのか,もしくはその他(例えば,転位のモビリティー変化やガス環境 による外力)の影響を受けた結果であるかは明らかでない.また Sofronis の解析 では,弾性解析であるため転位芯の部分における水素の影響を評価できていな い.そこで,原子モデルを用いることでα鉄中の刃状転位のモビリティーに及ぼ す水素の影響を,転位芯近傍での影響も含めて解析する.さらに転位間の相互 作用力についても解析し,実験において観察されている転位間距離の減少の原 因について検討する.

前述の解析で、水素の存在確率が一番高くなるのは転位芯であることがわか った. そこで、水素が転位の可動性に及ぼす影響を検討するために、図4に示 す刃状転位を有する解析モデルの転位芯中央部分に一つの水素原子を導入し, 分子静力学法の一種である NEB (Nudged Elastic Band) 法を用いて,初期状態か ら最終状態へ転位が 1b 運動する遷移過程のエネルギー変化(転位運動のエネル ギー障壁)を求めた. 解析は三つの場合について行った. すなわち, (a)水素を含 まない場合,(b)転位芯に水素を含んだ転位が1b移動する場合,および(c)1bだ け前方にある水素に転位が移動して転位芯に水素を含むようになる場合である. 本解析手法において、転位芯にトラップされた水素原子を転位の運動とともに 移動させると、転位運動のエネルギー障壁だけでなく水素拡散のエネルギー障 壁も同時に評価してしまうため、転位運動のエネルギー障壁のみの評価が困難 となる. したがって、本解析では転位運動の前後において水素原子の移動は生 じないと仮定した.このときの系全体に対する水素濃度は 2.24mass ppm となり、 転位線方向の単位長さあたりの水素原子数は 0.49nm⁻¹となる。解析結果を図 6 に示す.図に示すように、水素がない場合には転位運動のエネルギー障壁は 2.65×10⁻²⁰J であるが,水素が転位芯に存在する場合には,(b)の場合で2.35×10⁻²⁰J, (c)の場合で 1.18×10⁻²⁰J というように、水素の存在によって転位運動のエネルギ ー障壁が低下し、転位の可動性が増すことがわかる.

## 転位間に働く相互作用力に及ぼす水素の影響

Sofronis らは水素の存在によって転位間の弾性相互作用力が減少することを 示し、これを Hydrogen Shielding 効果と呼んでいる.本解析では、刃状転位間の 相互作用力に及ぼす水素の影響を、弾性解が適用できない転位芯の領域まで含 めて解析した.すなわち、図 4 の刃状転位解析モデルの転位芯に水素を配置し て、分子静力学法によりせん断応力分布を求めた.転位芯を含むすべり面から 一原子離れた原子列におけるその分布を図 7 に示す.転位芯近傍には水素を導 入したことによってせん断応力分布に乱れが生じているが、十分離れた距離で は滑らかな分布を示す.周期境界条件を与える z 軸方向の板厚を増加して、転 位線方向の単位長さあたりの水素原子数を 7.35nm⁻¹まで増やしても、せん断応 力の分布に有意な差は認められなかった.本解析条件においては転位芯の構造 まで考慮に入れても、水素の存在によって転位間の相互作用力に差が生じない ことがわかった.



図7 転位芯近傍のすべり面におけるせん断応力分布

# 平成 20 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、 昨年度より、応力が結晶の光学特性に及ぼす影響(複屈折現象)についてとり 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.平成19年度には半導体リソグラフィー装置のレン ズ用材料として用いられる立方晶系単結晶である CaF₂について残留応力起因の 複屈折シミュレーションプログラムを開発したが、今年度は半導体リソグラフ ィー装置の偏光板として用いられる正方晶単結晶である MgF₂について同様な 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

本年度は鋼材の水素脆化メカニズムとして有力視されている Hydrogen Enhanced Localized Plasticity (HELP)に関連して、転位の共同に及ぼす水素の影響、 すなわち転位芯近傍の水素の占有位置、転位の可動性に及ぼす水素の影響、転 位間に働く相互作用力に及ぼす水素の影響について原子モデルを用いたシミュ レーションを行った.その結果、以下のことが明らかとなった.

- 水素は転位芯近傍の高静水圧領域だけでなく転位芯近傍のすべり面上 にもトラップエネルギーが強くなるサイトが存在することがわかった.
- ② 水素の存在によって転位運動のエネルギー障壁が低下し、転位の可動性 が増すことがわかった.
- ③ 水素脆化が問題となるような比較的低い水素濃度では、水素の存在によって転位間の相互作用力に差が生じないことがわかった.

# 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こと 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 が示されているが,実際に行われていない.そこで,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過去に行った.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新規提案を行い,Web ベースシステムに統合 する.

## (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スコ 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 20 年度進捗状況

本年度は、主にメッシュ生成機能の強化につとめた.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.このため、新たに API の整理とインターフェイスの拡張を行った.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 など)との連携強化を図っており、現在、高精細

図2および図3はWeb インターフェイ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,表面きれつサイズと向き,きれつ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.図4は内部に存在する表面きれつを表すイメージ図である.実際の解析ではこのき裂メッシュを更新してき裂進展解析を行う.

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 fo mesh and analysis result	CCTVisualize	CMesh, CResult

# 表1 Ajax による CAE システムクラス定義



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





# 3.1.8. 臨海施設の安全性評価のための自由表面流れ解析システムの開発

# (1) 目標·計画

本研究では臨海施設の安全性評価を行うことを目的とした自由表面流れ解析 システムの開発を行う.計算手法としては流体の動きを粒子で計算する粒子法 を採用する.粒子法は波の遡上のような自由表面流れの大変形問題に対し適用 性が高く,流体の分離・合体を安定して解くことが可能である.本研究では, 実形状に基づいた地形や構造物を考慮できるように,それらをメッシュデータ として扱い,粒子とメッシュの連成解析を行う.

# (2) 意義・国際社会との比較

2004 年のインド洋大津波は,被災地域がインド洋沿岸の国々におよび,津波 による浸水被害だけではなく,構造物の破損や漂流物による二次的被害が多数 発生した.日本では,原子力施設を代表とするエネルギー関連施設の多くが臨海 地域に設置されているため,このような大津波に対する臨海施設の安全性を検 討することは重要であると考えられる.本研究で開発する自由表面流れ解析シ ステムでは,臨海施設に作用する波の波力を解析し,臨海施設の安全性の検討 を行うことが可能である.

# (3) 研究内容

本研究では、下記の3項目について検討および開発を行う.

①遡上した波の波力の定量評価

波力の定量評価として、津波防護構造物への波の衝突解析を行い実験結果と 比較する.

②計算の並列化による大規模解析対応および高速演算

解析領域の大規模化と、それに伴う計算時間の増加を軽減するために計算の 並列化を行う.

③粒子とメッシュの連成解析

自由表面流れを粒子で、臨海施設をメッシュでモデル化し連成解析を行う.

①遡上した波の波力の定量評価について

図1 に示すモデルを使用し波高と波力の関係を評価した.造波装置によって 周期的な波を発生させ、津波防護構造物に作用する波力を解析した.定量的評 価は谷本ら¹⁾が提案した沖合波高と波圧の算定式(図2),有川ら²⁾が実験より得た護岸前面波高と波圧の実験値の近似直線(図3)との比較を行なった.本解析では沖合波高,護岸前面波高と波圧の関係は定量的に近い値を示した.

1)谷本勝利,鶴谷広一,中野晋: 1983 年日本海中部地震波における津波力と埋立護岸の被災原因の検討,第31回海岸工 学講演会論文集, pp.257-261, 1984.

2) 有川太郎,池辺将光,山田文則,下迫健一郎,今村文彦:護岸・陸上構造物に対する津波力の大規模実験,海岸工学 論文集,第 52巻, pp.746-750, 2005.



# (4) 平成 20 年度進捗状況

本年度は「②計算の並列化による大規模解析対応および高速演算」の開発を 行った.逐次計算では1ノード約170万粒子(メモリ4GB)までしか扱うこと はできないが、4ノード使用することで、約630万粒子使用して解析することが できた.本研究で開発したコードでは32コア使用した場合、連立一次方程式の 求解は8.39倍、近傍探索は16.08倍の加速率であった.



(a) 5.0s



(b)15.0s



(c)35.0s



(d) 60.0s

図4 大規模流体解析(約630万粒子)

※図4のような解析では,解析結果のデータ量が大きくなるため可視化に時間を費やす.そこで, 流体を水表面のみのデータに変換し可視化を行うようにしている.

# 3.1.9. 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 テムの開発

# (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」を構築しようとするものであり、 昨年度は過渡熱流動現象を定性推論する上で不可欠となる原因と結果の間の時 間遅れ(時区間)等に関する関係を体系的に整理した.すなわち、時区間概念の定 式化に必要な「時間概念を含む因果的定性プロセスオントロジー」を構築する ため、流体挙動に関する「物理的因果性」と「認知的因果性」の関係を定式化 した.

平成 20 年度は,設計といった観点から定性推論研究の流れを概観し,定性推 論に関する諸技術でどのようなことが可能であって,どのような問題が課題と して残されているのかについて整理する.

# (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10⁷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 )、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.

従来はこのような複数の設計課題それぞれについての対応策(単一評価関数の 局所的最適解)を見つけ出すため、様々なスケールの実験装置を製作し、水およ びナトリウムを作動流体とした実験が試行錯誤的に行われてきた.しかしなが ら、実験に必要となる年間費用は百億円規模となるにも拘らず、最終的に得ら れる設計解の多目的な観点からのトレードオフ最適性は保証されないことにな 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1 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

この内,大規模複合数値シミュレーションでは、タイムスケールの大きく異なるマルチスケール・マルチフィジックス現象を安定且つ高精度で数値計算を行うため、時間刻み幅に対するファジィ適応制御システムを開発し、多次元熱流動乱流解析コードに導入した.同システムでは、流速3成分、エンタルピ、乱流諸量の相対変動率(( iⁿ⁺¹- iⁿ)/ iⁿ;n:時間レベル)を観測変数として用い、数値計算系の状態に応じて次時間ステップで使用すべき緩和係数 (クーラン条件に掛かる係数)を制御変数として出力する.

このファジィ適応制御システムを流体-構造熱的連成現象の大規模数値解析に 適用し、タイムスケールの大きく異なるマルチスケール・マルチフィジックス 現象への適用性とその有効性を確認している.

# (3) 研究内容

# (A) 設計支援の方法論と定性推論

所謂深い知識/推論を伴う設計用エキスパートシステムは、これまで実用に近いものも構築されて来たものの、対象システムの種類と粒度あるいは解決すべき問題内容を限定したものがその大半を占める.これらの限定操作は、従来のエキスパートシステム研究が「任意の特定タスクの自動化」を強く意識した結果であると考えられ、設計支援の観点、特に CAD(Computer Aided Design)システムのような人間とシステムとが協調して設計作業を進めるような環境から見た場合には、これらの研究は設計といった広範な作業の内の特定の一部を自動化したものであると解釈できる.

一般に設計といった問題解決は、「解くべき問題」が事前に明らかではなく、 設計の各場面において様々な形態を取る特定タスクを必要に応じて実行すると いったプロセスで進行する場合が多い.より正確には、設計支援の高度化のた めに現時点で要求される機能/能力は、「柔軟性の高い対象表現」、「設計プロセス の記述」、「特定タスクを実行するシステム群」である.

「柔軟性のある対象表現能力」では、対象とするシステムに関する事前の制限が少ないほど良く、対象システムの多様な側面、すなわち力学的、熱的、電磁気的など各分野に亘る柔軟な表現能力が要求される.一般的に、設計における任意の場面において対象の全ての側面を同時に考慮していることは稀であり、特定の視点から見た場合の対象システムに対して評価・変更などを行うのが通例である.この観点から、任意の側面での変更が他の側面に与える影響を推論する機能/能力も求められる.

「設計プロセスの記述」では、CAD システムの構築において重要となるが、 定性推論研究とは切り離して考えることができる.しかしながら、計算機支援 を前提とした設計の流れや設計の効率は、計算機上での対象表現能力の枠組み の影響を強く受けるものであり、対象表現能力の向上は、間接的に設計プロセ スの効率向上に直接寄与する.

「特定タスクを実行するシステム群」では、数多くのシステム開発がなされているものの、今後問題となる点は、対象システムの種類や粒度から可能な限り独立な問題解決メカニズムを構築することである.

以上のように,設計支援の観点から定性推論を眺めた場合,定性推論に対し ては以下のような役割が期待される.

- (1) 対象表現の方法論
  - オントロジー研究で扱う物理的実体の記述に関する方法論では,対象表 現のための基礎的な枠組みを与えること
- (2) シミュレーションの自動化・高度化 数値シミュレーションの自動化・高度化に定性推論の手法が応用可能で あること

(3) 設計対象の変更操作の導出

設計対象の一部分に変更を加えた際,対象とする系の挙動がどのように 変化するのかの同定,更には期待される系の挙動を達成するためには, 対象とする系のどの部分にどのような変更を加えれば良いのかの同定 など,比較解析の技術が利用可能であること

以下では、上記技術に関して定性推論で行われている研究を整理する.

# (B) オントロジー

オントロジーとは、「存在をどのように記述するか」といった哲学的問題を取 り扱う研究分野であり、定性推論では「対象とする物理世界をどのようにモデ リングするか」を取り扱う研究分野を総称するものである.

オントロジーを用いて物理世界の形式的な表現を最初に行ったのは、Hayes³⁾ である. Hayes は、「水」の表現として、容器に入った(全体としての)水 contained liquid,また流れたり変形したりする(一部としての)水 piece-of-staff という2通り の表現方法を伴用するオントロジーを提示した. この記述は、Forbus による後 の定性プロセス理論⁴⁾に反映されている. この定性プロセス理論では、物理的対 象の記述にあたり、個体ヴュー(individual view)とプロセス(process)という記述の 単位を用いた. 個体ビューは、幾つかの「もの」の集まりで成り立つある種の 物理的実体を表し、プロセスはそれらの枠組み内で生起する物理現象を表現す る. 例えば、「容器」の中に「水」が入っている場合には contained liquid なるク ラスの個体ヴューが一つインスタンシエイトされ、更にその下に「ヒータ」が あり、それが点火されている場合には heated なるクラスのプロセスがインスタ ンシエイトされる. プロセスの記述では、関連する変数間に成立する定性的関 係(定性微分方程式)を含み、これを用いて状態遷移の推論が行われる. この定性 プロセス理論は、「物理現象を記述するための形式的言語」といった側面を持ち、 その記述力は多くの種類の対象システムに対して高度な能力を有する.

# (B-1) 微視的/巨視的オントロジー

Collins, Forbus らは piece-of-staff オントロジーに加えて,液体の粒度レベルでの状態を参照するため,molecular-collections という記述方法を提案した.これは 例えば,冷房機の冷媒のように,対象システム内を移動しながらその性質を変 えてゆく実体に対して,実体の移動を追いながらその性質が変化する前後の状態間の関係を定性的に記述し,対象とするシステム全体の挙動を推論しようと するものである.

この研究は、ごく普通の対象システムの挙動推論を行う際にも複数の視点から対象システムを眺めることが必要であり、かつ人間はそのような視点の変換を実に効率良く自然に行っていることを示唆している.現在では、複数の表現系を伴う物理世界のモデル化が重要であることは広く認識されている.例えば、水を容器に入れておくと少しづつ蒸発してゆく.この様な物理現象の説明のた

めには、一旦分子レベルでの現象へと視点を変更し、この系で起こっている現象を推定し、更にその結果をマクロな現象として説明し直す必要がある.

この様な微視的/巨視的なオントロジーを融合した挙動推論の手法としては, Raiamonevらの研究⁶, Liuらの研究⁷⁾などが挙げられる. Raiamonevらの研究は,

「容器にアルコールが入っていると、アルコールが蒸発し、容器内のアルコールの温度が低下する」といった現象の説明を生成することがその目的である. また「容器に蓋がある場合」や「アルコールに食塩が含まれている場合」などとの比較説明の生成も行われる.

この研究では、巨視的な状態の記述が与えられた時、その状況を微視的な表 現に変換した上で状態遷移の可能性を推論する.例えば、「アルコールが蓋の無 い容器に入っている」といった記述を、まずアルコール分子の運動記述に変換 する.具体的には、「標準的な分子」、「速度の速い分子」、「表面近くに存在する 分子」というように、その属性を述語と定性表現を組み合わせて記述する.更 にそれらの分子運動(例えば、速度が速く表面近くの分子は空気中に飛び出すな ど)を特定した上で、その影響を巨視的なパラメータへと翻訳する.この研究の 特徴は、粒子をその代表元によって単純化し、それらの代表元の運動の推論結 果を定性的に巨視的パラメータに伝播させるなどの巧妙な方法を利用している 部分にあり、多くの問題に対応できるシステムとなっている.

Liu らは、電子回路を例題として、同様に微視的/巨視的な 2 種類のオントロ ジーを併用した推論手法を提案している.この研究では、巨視的なオントロジ ーとして、de Kleer が提案したようなデバイストポロジーを利用し、微視的なオ ントロジーとして荷電粒子・電場などを要素とするオントロジーを提案してい る.更に、この2 種類のオントロジーの接点として、region として定義した直方 体空間を仮定し、この空間において電圧、電場、電流、荷電粒子などを対応付 ける.この結果、region の表現能力にオントロジーとしての翻訳能力が強く依存 することになる.

対象とするシステムの表現において多重オントロジーの重要性は上記の通り であるが、複数のオントロジーを併用する際にはオントロジー変換を推論過程 のどの局面で行うかといった問題が発生する. Liu らの研究では、2 種類の存在 論を切り替えて推論を進めるためのヒューリスティクスが与えられており、オ ントロジーの切り替えをその局面で行うかの指示が可能である. しかしながら、 複数のオントロジーにおける対象システムの表現では1対1とは限らず、オン トロジー間での表現の翻訳方法についての更なる研究が必要となる.

# (B-2) 大規模システムの表現と推論

大規模なシステムの表現とその挙動推論は大きな計算量を必要とするもので あり、何らかの抽象化や近似、単純化などを必要とする.このような大規模シ ステムの抽象化の方法については、多くの研究が行われて来ている(例えば、 Falkenhainer⁹).また、比較的強い関連性を持つ多くのモデル群をどのように管 理してゆくかが大きな課題となる.このようなモデル群の管理アルゴリズムと して、Addanki らはモデル群のグラフ表現を提案している.この研究では、各モ デルをそのモデルが成立するための仮定とともに管理し、より最適なモデルの 選択やモデルの変更によって、対象とするシステムの挙動予測にどのような変 化が生じるのか推論を実現する.モデル群のグラフ表現においては、モデル間 の関係を記述する内容は、述語表現された夫々のモデルを成立させている仮定 だけであり、Weld は approximation reformulation といったモデル間の関係変数の 定性値を関係付ける手法を提案している.

以上,オントロジーに関する研究の拝啓には,物理現象記述のための形式的 言語といった考え方が存在する.これは,CADシステム,特に機械設計の様に 物理現象をいわば「生のままで」取り扱う必要のある領域における対象表現に とって,重要な基礎を与えるものである.

多重オントロジーは一見特殊な技術と見做されがちであるが、実際の多くの 設計場面において単一のオントロジーを用いていることは寧ろ稀であり、必要 に応じてオントロジーを切り替えるような人間が得意とするメカニズムの解明 とモデル化が今後の研究要素として挙げられる.またこれは、大規模システム の抽象化やモデル群の管理などの問題とも大きく関係している.

上記研究では、対象システムはそれ自身独立した存在であり、いわば「自律 的」に動作するような系を想定してきている.しかしながら、一般的に完全に 自立した系は存在せず、特に人工物は他の相互作用によってその動作が決定さ れてゆく特質を持つものであり、今後の更なる展開が必要である.

## (C) 数値情報を伴う定性推論

オントロジーの研究は、設計対象物の表現に対する方法論を与えるものの、 定性推論の他の一面、すなわち挙動推論の研究は、設計におけるシミュレーシ ョンタスクの自動化・高度化に応用が可能である.

現在の設計プロセスにおいては、数値シミュレーションが非常に大きな役割 を担っている.これは従来、計算機の利用技術として数値計算が非常に発展し てきたことに深い関係があるが、これ以外にも設計者が持つ工学的な道具立て が解析的なタスクに有用なように構成されている点が本質的な理由でもある.

現在の数値シミュレーションでは、その準備や結果の解釈などを全て人間が 行っており、工学的な観点からその自動化は非常に重要である.以下では、図1 に示した多目的最適設計システムの実用化において、これに必要となる機能/能 力などを整理する.

(1) 数値シミュレーションの実行スケジューリング/管理

オントロジーとしての記述,すなわち対象システムの構造(要素と要素 との関係)から,そのシステムを支配する方程式を導出すること.また, 定性シミュレーションを数値シミュレーションと併用することにより, 無用な数値シミュレーションの実行を抑制したり,数値シミュレーショ ンの繰り返しでは見落とされるような挙動の数値シミュレーションの 実行など,実行的なスケジューリング/管理が行えること.

- (2) 数値シミュレーション結果の分類,解釈,説明
  - 定性シミュレーションの結果得られる挙動は,数値シミュレーションの 各々の解を元とする集合であると解釈できる.この観点より,数値シミ ュレーションに定性シミュレーションを併用することにより,数値シミ ュレーション結果の分類,解釈,説明が行えること.
- (3) 数値シミュレーションの再実行スケジューリング
  - 数値シミュレーション結果の解釈・分析,あるいは定性推論技術の一手 法である比較解析などにより,方程式に現れるパラメータに変更を加え た場合,対象とするシステムの挙動がどのように変化するのかを認識す ること.
- (4) 対象システムの挙動(機能)に関する規則性の学習 数値シミュレーションのスケジューリング、実行、解釈の各課程における対象システムへの変更、およびそれらの変更の結果としての挙動変化の規則性の(機械的)学習が行えること.

# 3.1.10. SPH 法による 3 次元熱伝導解析

## (1) 目標·計画

SPH 粒子法は完全メッシュレス解析手法であり,FEM などのメッシュ使用解 法では困難であった複雑形状解析,連成の複雑な現象など様々な新しい分野へ の応用がはじまっている.本研究では,精度の検証が比較的容易な熱伝導現象 に着目し,SPH 法の工学的利用法における精度を把握し,複雑な三次元問題へ 適用する基礎的な研究をおこなった.

研究計画では、3次元のクラック進展解析を平行しておこない、本研究である 熱伝導現象を開発し解析精度を保障しつつ非線形問題への適用をおこなうのが 2008 年度の研究計画であり、3次元クラック進展解析の結果も得られている. ただし、3次元クラック解析では破壊のクライテリオンの定義が、破壊力学の分 野でも定まっておらず、次年度において明瞭な3次元クラック進展解析のアル ゴリズムを完成させる.

# (2) 意義・国際社会との比較

SPH 粒子法は、メッシュレス手法として高い技術力をもっていて、構造解析、 流体解析(圧縮性、非圧縮性),生体解析などへの応用が進められている.こ の技術を3次元解析において実用化することはきわめて意義の高い技術開発と なる.

国際的には、水解析のような非圧縮流体解析研究が盛んであり、3次元の構造 解析はそれほどおこなわれていない.本研究の、熱伝導、クラック進展構造解 析は国際的に見ても先端的な研究である.

# (3) 研究内容

## 1. 序論

近年、コンピュータ等の電子機器は小型化が急速に進んだため構成部品のより密な実装が求められている。そのため部品から発生する熱が、集積回路基盤などの精密部品に熱負荷を与え故障の主たる原因になっている。この熱除去法として、強制対流熱伝達などの方法がとられているが、その効率的な設計には熱伝導・対流などの数値解析が有力な手段となっている。従来、熱伝導解析においては差分法や有限要素法をはじめとするメッシュ依存型のシミュレーションが行われてきたが、コネクティビティ情報を必要とするメッシュデータ作成には多大な労力がかかる。たとえば1台のコンピュータを想定し、その熱解析をおこなう場合、現状ではきわめて局所的な簡易モデル作成による解析が限界であり、複雑な3次元構造物であるコンピュータの主要部分を内部構造を含めて詳細にメッシュデータ化することは極めて困難な作業となる。しかしながら、PC などに限らず、内燃機関、熱交換機など様々な複雑形状構造物の詳細な熱解

析は今後いよいよニーズを増大して行くことは間違いない.一方,SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 粒子法は連続体を近似的に多数の粒子の集合 で表現し,その粒子挙動を運動方程式や流体方程式に従って求める新しい手法 である.現在まで弾性解析,弾塑性解析,流体解析などに導入され,そのメッシュレス・アルゴリズムの有効性が実証されてきている.

また近年,SPH 粒子法の基礎的な研究が進み,この手法が,様々な偏微分方程 式をメッシュレス・アルゴリズムで解く一般的な数値解法であることが示され た.すなわち1階の空間微分形とともに2階の空間微分形がSPH 理論によって 定式化され,一般的な多くの2階偏微分方程式がSPH 理論によって解く事がで き,流体,熱,固体さらに電磁場解析などを含めたマルチフィジックスへの応 用研究が示されつつある.ところで近年の研究で示された2階空間微分に関す るSPH 法のアルゴリズムは,まだその精度に関して十分な研究が行われていな い.熱伝導方程式は代表的な2階偏微分方程式であり,熱変形を無視した場合 はオイラリアン記述形のため差分法などの他の手法と精度検証が容易におこな える.本研究では熱伝導解析にSPH 法を適用し,その精度検証を差分法,理論 解との比較によりおこなう.

### 2. 熱伝導問題の基礎式

ようになる.

 $q = -k\nabla T$ 

流体流れにおける最も一般的なエネルギー方程式は¹⁾

$$\rho \frac{DU}{Dt} = -\nabla \cdot q - P(\nabla \cdot v) - (\tau : \nabla v) \qquad \cdots \cdots (1)$$

であり,ここで*U*は体積あたり温度エネルギー, $\rho$ は密度,Pは圧力,vは速度,  $\tau$ は応力とする. 熱伝導的な熱流束は次の式で与えられる.

 $\cdots (2)$ 

ここで T は温度であり k は熱伝導率である. k は T や他の材料定数に影響される. 流体が Newtonian allows に従うと仮定すれば粘性の消滅は  $\Phi_v$  と書き換えることができるので、エネルギー方程式は次のようになる.

$$p\frac{DU}{Dt} = -\nabla \cdot (k\nabla T) - P(\nabla \cdot v) + \mu \Phi_v \qquad \cdots (3)$$

この式の派生に伴い、特に仮定は必要とされない.続けて温度に関して次のように変形できる.

ここでVは体積/unit massであり、 $\mu$ は動粘性係数である. もし流体が理想状態であれば流れは断熱で可逆である.理想気体の条件は次の

$$P = \rho RT$$
, implying  $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V} = \frac{P}{T}$  ....(5)

以上のことを踏まえて、エネルギー方程式を温度Tに関して拡張すると、

$$\rho c_{v} \frac{DU}{Dt} = -\nabla \cdot (k \nabla T) - P(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \mu \Phi_{v} \qquad \cdots (6)$$

熱流束問題に限定した場合,内部エネルギーや温度は単一の変数として扱うこ とができない.もし内部エネルギーと温度間の関係が単純であるとすれば,

$$U = c_v T$$

とでき、このとき式(4)より即座に式(6)を導くことができる.熱拡散や単位体積 当たりの減衰 ε も式(4),式(6)の右辺に加えることができる.

結局,非圧縮である固体を対象にした熱伝導におけるエネルギー方程式は次式 のようになる.

$$\rho \frac{dU}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) \tag{8}$$

 $\cdots (7)$ 

## 3. SPH 解析の基礎式

### (3-1)1 階空間微分式

*Monaghan* らによって開発された SPH 法 ¹⁾³⁾は, 偏微分方程式の1階の空間微分項を *Kernel* 関数を用いて積分近似する手法であり, 流速, 密度, 温度などの物理量 f(x)は, 次式の *Kernel* 関数 W 近似を用いて積分表現することができる.

$$f(x) \approx \int f(x')W(x-x',h)dx' \qquad \cdots \cdots (9)$$

ここで,*h*は影響半径をあらわし*x*は*Kernel* 関数の評価点の座標ベクトルであり, *x*'は影響半径内の他の粒子の座標ベクトルである. *Kernel* 関数 W は現在 3 次以上の *Spline* 関数が使用されている.

また,影響半径の性質を利用すると,任意の物理量の偏微分項は,kernel 関数に 関する1階微分のみを考慮した次式となる.

$$\nabla f(x) \approx -\int f(x') [\nabla W(x-x',h)] dx'$$
 ....(10)

ここで、ある空間内部に有限個の評価点を考え、kernel 関数 W を用いて、空間内部に分布する物理量を次式により中心の評価点に内挿する.

$$f(x) \approx \sum_{J=1}^{N} \frac{m^{J}}{\rho^{J}} f(x^{J}) W(x - x^{J}, h) \qquad \cdots \cdots (11)$$

指数 J は影響半径内部に存在する他の粒子群の数値であり,ρ は密度, m は質量である. Spline 補間の性質から,上式は評価点数が増大すると正解にかぎりなく近接する.式(11)を式(10)に代入すると Kernel 近似による1 階の偏微分を粒子場へ離散化した下式が求められる.

$$\nabla f(x) \approx -\sum_{J=1}^{N} \frac{m^{J}}{\rho^{J}} f(x^{J}) \nabla W(x - x^{J}, h) \qquad \cdots \cdots (12)$$

上式で,上付きの指数Jは評価点x以外のある長さ2h内に他の粒子群の数値で,粒子群の個数であるN個の和を考える.微分操作により次式の表現と同等であることも証明できる.

$$\nabla f(x^{I}) \approx \frac{1}{\rho^{I}} \sum_{J=1}^{N} m^{J} \left[ f(x^{I}) - f(x^{J}) \right]$$
  
$$\cdot \nabla W(x^{I} - x^{J}, h)$$
  
$$\cdots \cdots (13)$$

ここで、上付きの指数 I はある空間内部に内挿した中心評価点の数値である. 上記式(12)~(14)は任意の物理量の空間に関する 1 階の偏微分項を、粒子場によって表現した式であり、一般の偏微分方程式にたいして適用が可能となる.

### (3-2) 2 階空間微分式

2 階の空間微分項の離散化式はテイラー展開を利用する. 評価する場において, 評価量 *Y(x)*の近傍 *Y(xj)*のについて, *Y(xi)*に関してテイラー近似を考慮することができる.

$$Y(x_{j}) - Y(x_{i}) = \nabla Y \Big|_{x_{i}} \cdot (x_{j} - x_{i})$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} Y}{\partial x_{s} \partial x_{k}} \Big|_{x_{i}} (x_{j} - x_{i})_{s} (x_{j} - x_{i})_{k}$$

$$+ o(x_{i} - x_{i})^{3}$$
(15)

上式の右辺の第1項は1階の偏微分項,第2項は2階の偏微分項をふくむ. いま3階以上の高階の微分項を無視し,上式に SPH カーネルの1階微分式を含 んだ下式をかけ,

$$\frac{\left(x_{j}-x_{i}\right)\nabla_{i}W(x_{j}-x_{i})}{\left|x_{j}-x_{i}\right|^{2}}$$
(16)

体積積分を考える.ここでは球対称なカーネル近似を選んでいる.いま $x_{ij}=x_j-x_i$ と $W_{ij}=W(x_j-x_i)$ と置き換えている.ここで両辺を体積積分すると、左辺はゼロとなり、一方右辺の第1項の体積積分は

$$\int x_{ij} \frac{x_{ij} \nabla_i W_{ij}}{|x_{ij}|^2} d^3 x_j = 0,$$
(17)

であるためゼロとなる.一方,第二項の偏微分にかかる係数は

$$\int (x_{ij})_{s} (x_{ij})_{k} \frac{x_{ij} \nabla_{i} W_{ij}}{|x_{ij}|^{2}} d^{3} x_{j} = \delta_{sk}$$
(18)

となり Yのヘッセ・マトリックス (Hesse matrix) の非対角項の要素 (off-diagonal elements) を含んでいる項は消える. そのため, 第2の項にわたる合計は単に  ${}^{2}Y$ に減る. それゆえに,下の式が得られる.

$$\nabla^2 Y \bigg|_{x_i} = -2 \int \frac{Y(x_j) - Y(x_i)}{|x_{ij}|^2} x_{ij} \nabla_i W_{ij} d^3 x_j$$
(19)
このラプラシアン(Laplacian)近似は、このため SPH カーネル近似に簡単に 変換されることができる.このためには、jによって全ての粒子インデックス

(particles indexed) をもとめて全体の合計とすることができ、そのとき、体積積 分の $d^3x$  は個々の粒子の体積、すなわち SPH 近似における個々の粒子の体積 $m_i/\rho_i$ によって置き換えることができる. 粒子座標の場 Y(x)の値は、展開する固有の既 存粒子の特性値  $Y(x_i)=Y_i$ の値と同一と見なすことができる. すなわち SPH 補間 においては、その空間に関する 2 解の微分値は、積分形では (18)式であったが、以下の粒子場の離散形式

$$\left\langle Y_i \right\rangle = \sum_j Y_j \frac{m_j}{\rho_j} W(x_{ij}) \tag{20}$$

を用いれば

$$\nabla^2 Y \bigg|_i = -2\sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{Y_j - Y_i}{\left|x_{ij}\right|^2} x_{ij} \nabla_i W_{ij}$$
(21)

と表すことができる.

以下のような2階の偏微分項∇²Yにたいする SPH 離散化式がえられる.

$$\nabla^2 Y \bigg|_{x_i} = -2 \int \frac{Y(x_j) - Y(x_i)}{\left|x_{ij}\right|^2} x_{ij} \nabla_i W_{ij} d^3 x_j$$
(22)

この積分形は容易に SPH カーネル積分で離散的に表現できる.

$$\nabla^2 Y \bigg|_i = -2\sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{Y_j - Y_i}{\left|\mathbf{x}_{ij}\right|^2} \mathbf{x}_{ij} \nabla_i W_{ij}$$
⁽²³⁾

またここでは下の離散化式を使用している.

$$\left\langle Y_i \right\rangle = \sum_j Y_j \, \frac{m_j}{\rho_j} W(x_{ij}) \tag{24}$$

熱伝導方程式のラプラシアンにたいしては、上記の関係を用いると

$$\nabla(\kappa\nabla T) = \frac{1}{2} \Big[ \nabla^2(\kappa T) - T \nabla^2 \kappa + \kappa \nabla^2 T \Big]$$
(25)

となり、最終的に次の SPH 解析のための 2 階編微分の離散化形が求められる.  $\frac{du_i}{dt} \sum_j \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \frac{(\kappa_j + \kappa_i)(T_j - T_i)}{|x_{ij}|^2} x_{ij} \nabla_i W_{ij}$ (26)

#### 4. 熱伝導解析

#### (4-1) 1次元非定常熱伝導問題

1次元非定常熱伝導解析問題として次のモデルを考える.長さ100mmの棒において、下図のように両端の初期温度をそれぞれ 100℃ 及び 0℃に設定し 500 秒後の温度分布を求める.



#### 理論解

はじめの温度が $\theta_0$ の長さlの棒において両端の温度をそれぞれ $\theta_0$ , 0 とした 場合の非定常熱伝導の Laplace 変換による Carslaw-Jaeger の解は以下に示す.



1次元非定常熱伝導問題を行う理由として、定数βを決定.さらに従来まで正 確であるとされてきた理論解(差分法)との比較という目的がある.

ここで主な解析の条件を以下に示す. ・時間刻み  $\Delta t = 0.01 \text{ (sec)}$ ・有効半径 *h*=0.27313E+1 (mm) · 粒子間距離  $\Delta x=1.0 \text{ (mm)}$ ・粒子数 101 ・材料はFe(鉄鋼)を想定する. • 密度 ρ=7800.0 (kg/m3) *k*=54.0 (W/m.K) ・熱伝導率 • 比熱 c=0.452(kJ/kg.K)ちなみに差分法における主な解析の条件は以下に示す. ・時間刻み  $\Delta t=0.01$  (sec) 計算点間距離  $\Delta x=1.0 \text{ (mm)}$ • 計算点総数 101



表1 誤差

x	理論解(℃)	差分法(℃)	誤差(%)	SPH(℃)	誤差(%)
0	100.00000	100.00000	0.00000	100.00000	0.00000
5	99.82363	99.82348	-0.00015	99.82348	-0.00015
10	99.60786	99.60759	-0.00027	99.60759	-0.00027
15	99.30882	99.30842	-0.00040	99.30842	-0.00040
20	98.87376	98.87329	-0.00048	98.87329	-0.00048
25	98.23734	98.23683	-0.00052	98.23683	-0.00052
30	97.31853	97.31806	-0.00048	97.31806	-0.00048
35	96.01900	96.01864	-0.00037	96.01864	-0.00037
40	94.22334	94.22317	-0.00018	94.22317	-0.00018
45	91.80178	91.80192	0.00015	91.80192	0.00015
50	88.61595	88.61648	0.00060	88.61648	0.00060
55	84.52759	84.52856	0.00115	84.52856	0.00115
60	79.41010	79.41153	0.00180	79.41153	0.00180
65	73.16223	73.16407	0.00251	73.16407	0.00251
70	65.72218	65.72433	0.00327	65.72433	0.00327
75	57.08079	57.08307	0.00399	57.08307	0.00399
80	47.29134	47.29355	0.00467	47.29355	0.00467
85	36.47458	36.47650	0.00526	36.47650	0.00526
90	24.81718	24.81860	0.00572	24.81860	0.00572
95	12.56336	12.56412	0.00605	12.56412	0.00605

表 4.1 にあきらかなように, 差分解と SPH 法による解は完全に一致する.理論 解にたいして誤差は 0.01%以下であり両者とも精度は高い.

#### (4-2) 2 次元非定常熱伝導問題

前項にて取り組んだ1次元非定常熱伝導解析を踏まえ,2次元非定常熱伝導問題に取り組んだ.解析モデルは次のFig.2に示す.

2次元非定常熱伝導解析の解析モデルを以下のように示す.

2次元熱伝導解析問題のモデルにおいては、長さ、高さとも 100mm の板にお いて、下図のように四方の初期温度をそれぞれ AB が 100℃ 及び BC, CD 及び DA が 0℃に設定する. 経過時間が 1000sec における結果の正方形の中心 (y=50mm)を評価し比較した.



図3 2次元熱伝導解析のモデル図

$$t = \frac{4t_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \sin \frac{(2k+1)\pi}{a} x \frac{\sinh \frac{(2k+1)\pi}{a} (b-y)}{\sinh \frac{(2k+1)\pi b}{a}}$$
(28)

*a*=*b*(正方形)ならば,

$$t = \frac{4t_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \sin \frac{(2k+1)\pi}{a} x \frac{\sinh(2k+1)\pi \left(1 - \frac{y}{a}\right)}{\sinh(2k+1)\pi}$$
(29)

となる.  

$$x = y = \frac{a}{2} \quad (正方形の中心) \quad では,$$

$$t = \frac{2t_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin\frac{(2k+1)\pi}{2}}{(2k+1)\cosh\frac{(2k+1)\pi}{2}}$$
(30)

【境界条件】

・両端の温度を 500K に固定する. (赤色)

・その他の内部の初期温度は300Kとする.

また,同様のモデルを有限要素法 (FEM) にて解析し,解析結果を比較した. 尚,FEM における解析条件は以下の通りである.

- ・節点数 231
- ·要素数 200
- ・(その他の条件は SPH 法と同一である)



図6 誤差曲線

表2 誤差

x	理論解(℃)	差分法(℃)	誤差(%)	SPH(°C)	誤差(%)
0	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
5	4.14935	4.15008	0.01759	4.14982	0.01133
10	8.15883	8.16011	0.01569	8.15973	0.01103
15	11.90196	11.90350	0.01294	11.90320	0.01042
20	15.27535	15.27688	0.01002	15.27685	0.00982
25	18.20283	18.20412	0.00709	18.20449	0.00912
30	20.63411	20.63505	0.00456	20.63585	0.00843
35	22.53997	22.54053	0.00248	22.54174	0.00785
40	23.90595	23.90622	0.00113	23.90774	0.00749
45	24.72645	24.72652	0.00028	24.72824	0.00724
50	25.00000	25.00000	0.00000	25.00179	0.00716
55	24.72645	24.72652	0.00028	24.72824	0.00724
60	23.90595	23.90622	0.00113	23.90774	0.00749
65	22.53996	22.54053	0.00253	22.54174	0.00790
70	20.63411	20.63505	0.00456	20.63585	0.00843
75	18.20283	18.20412	0.00709	18.20449	0.00912
80	15.27535	15.27688	0.01002	15.27685	0.00982
85	11.90195	11.90350	0.01302	11.90320	0.01050
90	8.15882	8.16011	0.01581	8.15973	0.01115
95	4.14934	4.15008	0.01783	4.14982	0.01157
100	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

1次元問題とはことなり、2次元問題では差分解と SPH 解は完全には一致しない.しかし誤差のレベルはほぼ同じ(差分2次精度レベル)といえる.温度勾配が急な両端では SPH 解がやや精度は高く,中央部の勾配が緩やかな部分では,差分解の精度が高い.

差分法では(中心差分式による) x 方向2階微分は pl,p3 からまた y 方向2階 微分は p2,p4 を用いてその値を下式でもとめる.

$$\frac{d^2 u}{dx^2}\Big|_{x=x_i} \approx \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2}$$

すなわち、周囲の4個の情報により中央の値を決定する.

一方 SPH 法では 2 次元場において使用する SPH 法で参照する周辺の評価点は影響半径を 2 h としたとき,図にしめした 11 点を使用する.もっとも周上の点は重みが 0 であるから内部点 8 が評価に寄与することになる.さらに x 方向空間 微分のみを考えた場合,点 P における微分値に寄与するのは p1,p2,p3,p5,p6,p7 (p4,p8 は x が同値である)の 6 点となる.これは中心差分の 2 点 (p1,p3)よりも大きい評価点数である.

物理量の勾配が急な部分では補間の2次元的な情報量が多い SPH 法が若干 であるが精度を高く評価している.(1次元問題では,情報量はまったく同一で あるから同一の精度であった).一方,勾配が極めてゆるい,平坦な部分では, 中央点におけるx(あるいはy)方向の微分,あるいは2次微分は,x軸上(ま たは y 軸上)の直線的な補間式を用いたほうが数学的な定義に一致するため, 差分解のほうが精度は高くなると考えられる.

このように2次元場では SPH 解と差分解には、全体的には2次精度の解が得られるものの補間手法の違い

差分法は線的な関係から補間・・・・線補間

SPH 法は面(立体)領域から補間・・・面補間(あるいは立体補間) が現われてくる.

# (4-3)3次元熱伝導解析

#### 理論解

はじめの温度が $\Theta$ で、境界温度が0であるときには、3次元物体の内部温度は以下の式で表される.

$$\theta = \frac{2\Theta}{ar} \sum_{s=1}^{\infty} e^{-\frac{\kappa s^2 \pi^2 t}{a^2}} \sin \frac{s \pi r}{a} \int_0^a \lambda \sin \frac{s \pi \lambda}{a} d\lambda$$
$$= \frac{2\Theta}{ar} \sum_{s=1}^{\infty} e^{-\frac{\kappa s^2 \pi^2 t}{a^2}} \sin \frac{s \pi r}{a} \left( -\frac{a^2}{s \pi} \cos s \pi \right)$$
$$= \frac{2\Theta}{\pi r} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(-)^{s+1}}{s} e^{-\frac{\kappa s^2 \pi^2 t}{a^2}} \sin \frac{s \pi r}{a}$$



図6 3次元解析モデル



図7 3次元熱伝導解析結果(0.1秒後)図8 3次元熱伝導解析結果(2秒後)



図 9 3 次元熱伝導解析結果(10 秒後)図 10 3 次元熱伝導解析結果(20 秒後)



図 11 3 次元熱伝導解析結果(30 秒後)図 12 3 次元熱伝導解析結果(40 秒後)



図 13 3 次元熱伝導解析結果(50 秒後)図 14 3 次元熱伝導解析結果(60 秒後)



図15 3次元熱伝導解析結果の比較

x	理論値	SPH	誤差(%)		
0.00	99.99693	99.99964	0.00271		
5.00	99.99100	99.99371	0.00271		
10.00	99.95628	99.95898	0.00271		
15.00	99.78944	99.79214	0.00271		
20.00	99.11152	99.11420	0.00271		
25.00	96.84710	96.84972	0.00271		
30.00	90.73659	90.73905	0.00271		
35.00	77.56760	77.56970	0.00271		
40.00	55.10728	55.10877	0.00271		
45.00	25.09167	25.09235	0.00271		

表3 誤差

表3に sph3次元解析の誤差を示した.表で明らかなようにすべての位置において理論解との誤差は0.003%以下であり、十分精度は高いといえる.

#### 結論

SPH 法を用いた 3 次元熱伝導解析のアルゴリズムを構築し,精度の検証をおこなった.1 次元問題から 3 次元問題まで,SPH法の解析精度は十分にたかく,工学的な現象に適用できることがしめされた.クラック進展解析と組み合わせて,プラント配管の温度場における破壊進展解析などへの応用が可能となった.

#### 参考文献

- T. Kondoh, Y. Nagano and T. Tuji, Computational study of laminar heat transfer downstream of a backward-facing step, Int. J. Heat Mass Transfer, 36, 577-591, (1993)
- 酒井,楊,丁, "SPH 法による非圧縮粘性流体解析手法の研究",機械学会論 文集(B編) 70,696, p47, (2004)
- 3) R.-J. Yang and L.-M. Fu, Thermal and flow analysis of a heated electronic component, Int. J. Heat Mass Transfer, 44, 2261-2275, (2001)
- 4) 後藤, 鈴木"様々なプラントル数の流体による対流熱伝達の数値解析", 計算 数理工学会論文集, Vol.1, No.01-070608, (2001)

# (4) 平成 20 年度進捗状況

平成20年度の研究

- (1)3 次元構造解析......クラック進展解析
- (2) 精度検証......3 次元解析の基本的精度の検証

上記2テーマを研究している.このうちの精度検証研究は十分な成果を挙 げて終了した.またのクラック進展解析は、クラック解析はほぼ完成したが、 クラック進展のためのクライテリアをどのように選択すべきかという破壊力 学の要点がやや不明であり現在,解明を進めているところである.

次年度の研究では、3次元クラック進展を十分な精度でおこなうことができ るレベルまでを研究の視野にいれている.

# 3.2. 逆問題

## **3.2.1.** 逆問題に関する研究の概要

本年度は、(1) 流れ場における腐食同定逆問題、(2) 複合材料における材料同、 (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)では、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いる.本年度は、昨年度得られた成果を基に、流れのある配管内において、管壁近傍の流体の速度勾配を考慮したカソード防食の最適 化を行った.同一配管で平均流速が同じ流れでも、流れの方向によって、最適な電極の位置および電流密度が異なるという結果を得た.

(2)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.ひずみ測定誤差を考慮したカルマンフィルタに基づく確率的手法による複合材料の材料同定を可能にした.確定的手法を比較した結果、測定ノイズが多い問題においては確率的手法を用いた方が有用であることが分かった.また実験による検証を始め、アルミニウム試験片による引っ張り実験を行い、実験結果から材料定数を同定する試みを続けている.

(3)では、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. 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 を行うことを目的とし研究を進めた.本年度は、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.シリカ表面 における酸素原子再結合反応についてマルチスケール解析の概念に基づいた解 析を行い、いくつかの知見を得ることができた.

(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る.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る.本年度は、シミュレーションを実現する方法について検討を行った.

# 3.2.2. 流れ場における腐食同定逆問題

本研究は、最適化グループとの共同研究である.最適化グループでは、「3.3.5. カソード防食の最適化」で紹介されている.

# (1) 目標·計画

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. 平成20年度は,逆問題の観測方程式のモデル化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(例えば,水溶液中の炭素鋼)の腐食は,溶存酸 素によるカソード反応が支配的である.したがって,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 るか考察を行った.

本年度は,配管壁近傍における速度勾配をもとに分極曲線を整理し腐食解析 を行う.平均流速を用いた従来の腐食解析結果との比較を行う.また,管壁近 傍の速度勾配を考慮したカソード防食の最適化を行う.

# (2) 意義・国際社会との比較

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 広く利用されている.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は重要である.

流れの影響を無視できる場合の管内の腐食速度を予測する手法として,境界 要素法を用いた手法の有効性が示されている.また,流れの影響が無視できな い場合には,平均流速によって整理された分極曲線を利用して腐食速度の予測 が行われてきた.

しかしながら、実際に腐食が起こる管壁の腐食速度を予測するためには、管 壁近傍の流速分布が重要な要因となることが考えられる.たとえば、管壁の流 速分布が変われば、管壁に供給される反応物質の量が変わる.しがたって、平 均流速のみに注目して分極曲線を決める従来法では、腐食速度を正確に予測す ることが困難な場合があると考えられる.

この研究が完成すると、流れのある配管内の腐食シミュレーションが精度良 く行えるようになる.また、流れのある配管内の腐食を精度良く同定すること ができるようになるので研究の意義は大きい.

# (3) 研究内容

#### (3-1) 速度勾配の影響を考慮した腐食解析

管壁近傍の流体の速度勾配が腐食に与える影響を考察した.まず,図1に示 すような配管内に,左右両側から水を流すことを考える.左から流すときは 0.06[m/s]で流入させ,右から流すときは 0.02[m/s]で流入させた.このような流 し方をすると,管内の流体の左右どちらから流しても平均流速は同じになる. したがって,従来の腐食シミュレーション法では,左右どちらから流しても同 じように腐食するという結果になる.



次に、管壁の流体の速度勾配を求めた。管径が変化する x=48~62[mm]の速度 勾配を図2に示す。流す方向によって速度勾配が異なることが分かる。



解析の結果,得られた電流密度分布を図3に示す.また、比較のために、平均

速度に基づいた従来法の結果を図 4 に示す.従来法と本手法とで最大電流密度 の位置と大きさが異なっていることが分かる.また,本手法においても左右の 流れ方向によって結果が異なることがわかる.



☑ 3 Current density calculated with polarization curves that are decided by flow velocity gradient near tube wall



図 4Current density calculated with polarization curves that are decided by<br/>average velocity

## (3-2) カソード防食の最適化

金属表面が防食状態にあるためには,金属上の電流密度が負の値に保たれる 必要がある.すなわち,制約条件として

$$(\Gamma_m 上で)$$
 (1)

が成立する必要がある.

 $i \leq 0$ 

電極の位置 e (寸法は既知) を与えたとしても,電極の境界 $\Gamma_e \perp o \phi e^i$  が未知のため,このポテンシャル問題の解は不定となる.  $\Gamma_e \perp o$  位置 e  $e \Gamma_e \perp o i$ を与えることにより,解が一意に決まる.本最適化問題では,もっとも電流密度が高くなる位置に電極を配置し後,(1)式を満足する最小の電流密度を決定する.

図5に示すような配管に二つの電極 $E_1$ ,  $E_2$ でカソード防食する場合を考える. ここで、二つの電極の位置 $E_1$ ,  $E_2$ は図1に示すように金属表面上で、かつ上下対象に配置した.また、電極の大きさ*l*は*l*=2mm とした.

本手法に基づいて決定した最適な電極の位置および電流密度を図 5 に示す. ここで,図 5 における■および□は,それぞれ右方向流,左方向流における最 適電極位置を表す.右方向流では X=54~56mm,左方向流では X=58~60mm が最適 な電極位置であった.電極を配置した以外の場所では,防食条件(i≤0)が満たさ れていることがわかる.



☑ 5 Optimization for catholic protection of current density and position that are decided by velocity gradient

管壁での速度勾配を考慮することで、平均速度だけでは予測できない腐食状況を予測できる可能性があることを示唆する結果が得られた.配管全域で過不足なく防食を達成するために、最適な電極の位置および電流密度を決定した. 平均速度が同じでも速度勾配の違いにより、左右方向流れで最適な電極の位置 および電流密度がそれぞれ異なる結果が得られた.

# (4) 平成 20 年度進捗状況

平成 20 年度は,配管内を流れる流体の管壁近傍の速度勾配を考慮したカソー ド防食に着手した.平均速度が同じでも速度勾配の違いにより,右方向流れで最 適な電極の位置および電流密度がそれぞれ異なる結果が得られた.本年度は電 流密度のみの最適化であるが,今後は電極の位置や形状などの最適化を行う.ま た,効率的な最適化手法の開発についても検討を行う予定である.

# 3.2.3. 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 カ・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 なき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.

しかし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.そこで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まず第一に行い、さらに実験にて有効性を検証することとする.

# (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にも第一線で活躍してきており, またその研究成果を基に海外にて職務についており,国際的にも一定の評価を 既に得ている.

### (3) 研究内容

#### (3-1) エネルギー法

複合材料を構成する異方性材料の板の一枚が

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & 0 \\ Q_{12} & Q_{22} & 0 \\ 0 & 0 & Q_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_{12} \end{bmatrix} \text{ or } {}^{\{M\}} \mathbf{\sigma} = {}^{\{M\}} \mathbf{Q}^{\{M\}} \mathbf{\varepsilon}$$
(1)

で表される場合を考える.ここで $\sigma$ , **Q**,  $\epsilon$ は応力,線形係数及びひずみを,  $\{M\}$ は材料座標系を表す.さらに非ゼロの材料定数を $\{M\}$ **q** =  $[Q_{11}, Q_{22}, Q_{66}, Q_{12}]^T$ とすると、大域的座標系における応力--ひずみ関係は

$$\begin{bmatrix} \sigma_{x} \\ \sigma_{y} \\ \sigma_{s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{xx}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) & Q_{xy}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) & Q_{xs}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) \\ Q_{xy}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) & Q_{yy}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) & Q_{ys}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) \\ Q_{xs}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) & Q_{ys}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) & Q_{ss}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{x} \\ \varepsilon_{y} \\ \varepsilon_{s} \end{bmatrix} \text{ or } {}^{\{G\}}\mathbf{\sigma} = {}^{\{G\}}\mathbf{Q}\left(\theta; {}^{\{M\}}\mathbf{q}\right) {}^{\{G\}}\mathbf{\varepsilon} \qquad (2)$$

すなわち,マトリクスの成分^{G} $q_{ij}(\theta; {}^{M}\mathbf{q})$ が ${}^{M}\mathbf{q}$ に対して線形に次のように表される.

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

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

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

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

$$\delta\Delta U = \frac{1}{2} \int_{V} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{T} \mathbf{Q} \left( \boldsymbol{\theta}, \mathbf{q}_{M} \right) \Delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \left\{ \frac{1}{2} t \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \int_{A} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{i} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{j} dA \mathbf{h}_{ij} \left( \boldsymbol{\theta} \right) \right\} \mathbf{q}_{M}$$
(5a)

$$\delta \Delta W = \frac{1}{2} \sum_{l} \Delta \mathbf{u}_{l}^{T} \Delta \mathbf{P}_{l}$$
(5b)

となる.ここで*t*, *A*は試験片の厚みと断面積である.従って,変形が*K*回かけて行われた場合,エネルギー保存則により外部仕事が全て内部ひずみエネルギーとして蓄えられたと仮定すると,次の線形方程式が構築される.

$$\mathbf{g}(\Delta \varepsilon^{k}; \theta)^{\prime} \mathbf{q}_{M} = \delta \Delta W^{k}, \forall k \in \{1, ..., K\}$$

(6)

エネルギー法はこの式から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  $\mathbf{z}_{\epsilon}^{k} \cong \Delta \mathbf{\epsilon}^{k}$ ,  $\mathbf{z}_{W}^{k} \cong \delta \Delta W^{k}$  と仮定する. *K* 個の線形方程式を並べた場合

$$\mathbf{G}\left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{1:K};\boldsymbol{\theta}\right)\mathbf{q}_{M}=\mathbf{z}_{W}^{1:K}$$
(7)

 $\mathbf{q}_M$ は

$$\mathbf{q}_{M} = \mathbf{G} \left( \mathbf{z}_{\varepsilon}^{1:K}; \boldsymbol{\theta} \right)^{+} \mathbf{z}_{W}^{1:K}$$
(8)

によって同定される.ここで $\mathbf{G}(\mathbf{z}_{\boldsymbol{\epsilon}}^{\scriptscriptstyle \mathrm{LK};K}; \boldsymbol{\theta})^{\scriptscriptstyle +}$ は $\mathbf{G}(\mathbf{z}_{\boldsymbol{\epsilon}}^{\scriptscriptstyle \mathrm{LK}}; \boldsymbol{\theta})$ の擬似逆行列である.

確率的材料同定として、20年度に新たに開発されたカルマンフィルタによる 手法を説明する.カルマンフィルタによる同定では最初に状態遷移モデルと測 定モデルが構築されなければならない.状態遷移モデルについては材料定数が 不変の値であることから、

$$\mathbf{q}_{M}^{k} = \mathbf{I}\mathbf{q}_{M}^{k-1} \tag{8}$$

と表される.測定値は測定誤差をモデル化することから,

$$\mathbf{z}_{\boldsymbol{\varepsilon}}^{k} = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{k} + \mathbf{v}_{\boldsymbol{\varepsilon}}^{k} \tag{9a}$$

$$z_W^k = \delta \Delta W^k + v_W^k \tag{9b}$$

となる.式(9b)に式(6)を代入すると

$$z_W^k = \mathbf{g} \left( \Delta \mathbf{\epsilon}^k; \boldsymbol{\theta} \right)^T \mathbf{q}_M + v_W^k \tag{10}$$

と表されるが、 $g(\Delta \varepsilon^k; \theta)$ は未知のため、

$$\mathbf{g}(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k};\theta) \cong \mathbf{g}(\Delta \varepsilon^{k};\theta) + \mathbf{g}(\mathbf{v}_{\varepsilon}^{k};\theta)$$
(11)

と仮定して、式(10)に代入し、測定モデルを次のように得る.

$$z_{W}^{k} = \left\{ \mathbf{g} \left( \mathbf{z}_{\varepsilon}^{k}; \theta \right) - \mathbf{g} \left( \mathbf{v}_{\varepsilon}^{k}; \theta \right) \right\}^{T} \mathbf{q}_{M} + v_{W}^{k}$$
(12)

本定式化で問題になるのが、測定モデルの係数 $\{g(\mathbf{z}_{\epsilon}^{k}; \theta) - g(\mathbf{v}_{\epsilon}^{k}; \theta)\}$ である.こ れが定数でないため、線形問題でのカルマンフィルタの推定式が応用できない. そのため、カルマンフィルタが定式化された同様、分散の最小化によるカルマ ンゲインの導出を行う必要性がある.

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

$$\mathbf{q}_M^{k|k-1} = \mathbf{q}_M^{k-1|k-1} \tag{13a}$$

$$\mathbf{P}^{k|k-1} = \mathbf{P}^{k-1|k-1} \tag{13b}$$

測定更新における推定値は, 期待値が

$$E\left\langle \mathbf{q}_{M}^{k}\right\rangle \coloneqq E\left\langle \mathbf{q}_{M}^{k}\right\rangle + E\left\langle \mathbf{K}^{k}\left[z_{W}^{k} - \left\{\mathbf{g}\left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k};\theta\right) - \mathbf{g}\left(\mathbf{v}_{\varepsilon}^{k};\theta\right)\right\}^{T}\mathbf{q}_{M}^{k} - v_{W}^{k}\right]\right\rangle$$
(14)

であることから

$$\mathbf{q}_{M}^{k|k} = \mathbf{q}_{M}^{k|k-1} + \mathbf{K}^{k} \left\{ z_{W}^{k} - \mathbf{g} \left( \mathbf{z}_{\varepsilon}^{k}; \boldsymbol{\theta} \right)^{T} \mathbf{q}_{M}^{k} - \boldsymbol{v}_{W}^{k} \right\}$$
(15)

となる. 共分散の測定更新は推定値の残差の導出から始める.

$$\mathbf{e}^{k|k} = \mathbf{q}_{M} - \mathbf{q}_{M}^{k}$$
$$= \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{K}^{k} \mathbf{g} \left( \mathbf{z}_{\varepsilon}^{k}; \theta \right)^{T} \right\} \mathbf{e}^{k|k-1} - \mathbf{K}^{k} \left\{ v_{W}^{k} - \mathbf{g} \left( \mathbf{v}_{\varepsilon}^{k}; \theta \right)^{T} \mathbf{q}_{M}^{k} \right\}$$
(16)

そこで残差の期待値は

$$E\left\langle \mathbf{e}^{k|k} \left(\mathbf{e}^{k|k}\right)^{T} \right\rangle = \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{K}^{k} \mathbf{g} \left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k}; \theta\right)^{T} \right\} E\left\langle \mathbf{e}^{k|k-1} \left(\mathbf{e}^{k|k-1}\right)^{T} \right\rangle \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{K}^{k} \mathbf{g} \left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k}; \theta\right)^{T} \right\}^{T} + \mathbf{K}^{k} E\left\langle \left(v_{W}^{k}\right)^{2} \right\rangle \left(\mathbf{K}^{k}\right)^{T} + \mathbf{K}^{k} \sum_{i=1}^{4} \left(q_{M}^{k|k-1}\right)_{i}^{2} E\left\langle g_{i} \left(v_{\varepsilon}^{k}; \theta\right)^{2} \right\rangle \left(\mathbf{K}^{k}\right)^{T} \right\}$$
(17)

となり, 共分散行列は

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

$$(18)$$

と導出される.カルマンゲインによる共分散の微分値

$$\frac{\partial Tr(\mathbf{P}^{k|k})}{\partial \mathbf{K}^{k}} = -2\left\{\mathbf{g}\left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k};\theta\right)^{T}\mathbf{P}^{k|k-1}\right\}^{T} + 2\mathbf{K}^{k}\left\{\mathbf{g}\left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k};\theta\right)^{T}\mathbf{P}^{k|k-1}\mathbf{g}\left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k};\theta\right) + P_{W}^{k} + \sum_{i=1}^{4}\left(q_{M}^{k|k-1}\right)_{i}^{2}\left(P_{g}^{k}\right)_{i}\right\}$$
(19)

をゼロするカルマンゲインは

$$\mathbf{K}^{k} = \left(\mathbf{P}^{k|k-1}\right)^{T} \mathbf{g}\left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k};\theta\right) \left\{ \mathbf{g}\left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k};\theta\right)^{T} \mathbf{P}^{k|k-1} \mathbf{g}\left(\mathbf{z}_{\varepsilon}^{k};\theta\right) + P_{W}^{k} + \sum_{i=1}^{4} \left(q_{M}^{k|k-1}\right)_{i}^{2} \left(P_{g}^{k}\right)_{i} \right\}^{-1}$$
(20)

となる.式(20)を式(18)に代入すると共分散行列は

$$\mathbf{P}^{k|k} = \mathbf{P}^{k|k-1} - \mathbf{K}^{k} \mathbf{g} \left( \mathbf{z}_{\varepsilon}^{k}; \boldsymbol{\theta} \right)^{T} \mathbf{P}^{k|k-1}$$
(21)

と簡易化される.式(13)による時間更新と測定値が得られるたびの式(20),(15),(21)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.

#### (3-3) 確定的手法と確率的手法による数値比較

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.本問題では同定すべき定数の数を2とし、式(6)にノイズを加えて測定値を作成した.確率的手法はKF,確定的手法はPI,測定値を作成した真の定数はExact Solutionとして図に表されている.まずいずれの定数においても確率的手法が真の定数を同定しているのが分かる.一方でノイズの影響により確定的手法は真の定数を同定できていないことが分かる.これは、確定的手法が過去に蓄積されたノイズを除去しないため、一旦測定値を支配したノイズがそのまま同定結果を支配することに起因する.



図1 定数同定

さらなる確率的手法の有効性を確かめるために図 2 に分散およびカルマンゲ インの推移を示す.確率的手法の有効性は,確定的手法と異なり,推定値の確 かさを分散で表すことからも確かめられる.また分散が小さくなっていること から,測定数が増えるごとに確かさが高くなっていることがわかる.ゼロに収 束するカルマンゲインの推移も見ることにより,どのように確率的手法が定数 を正確に同定できるのかを理解することができる.まず,カルマンゲインは分 散を最小化させるように選んでいるため,分散が減少する.式(20)にて分散をゼ ロとするカルマンゲインの極限値はゼロとなる.ゼロに近いカルマンゲインに よる推定値は式(15)から,収束することが分かる.



確率的手法による有効性をより詳しく検証するために、今度は測定値のノイズレベルを変更して同定を行い、確率的手法による結果を図3に、確率的手法による結果を図4に示す.ノイズレベルは分散値を変えることにより操作され、結果は真の定数からの誤差で示されている.まず最大誤差において、図3から確率的手法が670であるのに対し、図4から確定的手法がその60倍の43000に 到達するのが分かる.また確定的手法において43000の範囲で値が変化しているのに対し、確率的手法では630の差しか見られない.これは、確率的手法がノイズを除去していることに他ならない.





#### (3-4) 実験結果

確率的手法の有効性を実験によって検証するために,円孔付き試験片を用い て材料定数同定を行った.試験片はアルミニウムで,単軸試験機により引っ張 り試験を行い,ひずみは試験片に書かれた模様から導出した.実験前後の試験 片を図5に示す.



図5 円孔付きアルミニウム試験片引っ張り試験

本試験を,有限要素法により解析した結果を図 6 に示す.実際の材料においても定数同定を確率的手法が行えるには,カメラによるひずみ測定が,有限要素法の解析結果に近いことが前提となる.



図6 有限要素法解析結果

図 7 にカメラによるひずみ測定結果を示す.図 6 との比較により,ある程度 ひずみ分布のパターンが似ているのが分かる.



# (4) 平成 20 年度進捗状況

平成 20 年度の研究では、ひずみ測定誤差を考慮したカルマンフィルタに基づ く確率的手法による複合材料の材料同定を可能にした.確定的手法を比較した 結果、測定ノイズが多い問題においては確率的手法を用いた方が有用であるこ とが分かった.また実験による検証を始め、アルミニウム試験片による引っ張 り実験を行い、ひずみ分布を測定した.現在、この実験結果から材料定数を同 定する試みを続けている.実験での同定結果を元に今後、どの方向で研究を続 けるかを模索する.理論的には、今後非線形挙動のモデリングおよび非均質材 料のモデリングに挑戦していくつもりである.

# 3.2.4. 表面反応のマルチスケール解析

# (1) 目標·計画

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,適当 な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.そこで本研究 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 ための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.

$$20 \to 0_2 \tag{1}$$

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.ここでは,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. 次に求めた素過程モデルを用いたモンテカルロ計算を行い,触媒効率を求めた.

本研究で扱う現象は、原子分子の電子状態(~1Å, ~1 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(~1 nm, ~1 ns)、触媒反応全体(~1 µm, ~1 µs) 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.



☑ 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) 表面素過程のモデル化

(a) シリカ表面

密度汎関数理論に基づく第一原理計算により、シリカ表面の原子構造の最適 化を行い、解析に用いるシリカ表面を作成した.なお第一原理計算は VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)を用いて行った.実際の往還機断熱材コーテ ィング表面のシリカ結晶はアモルファス状になっていると考えられるが、ここ では研究の第一段階として、α-quartz (0001) 面の dense surface と呼ばれる 1×1 の再構成表面(図 2)を採用した.まず、α-quartz のバルクの構造緩和を行い、格 子定数を決定した.単位格子中には Si 原子が 3 個, O 原子が 6 個含まれている. 原子の位置は共役勾配法を用いて最適化した.得られた格子定数は 5.03 であり、 この値は実験で求められた値 4.91 とよく一致している.表面を作成する際には スラブモデルを用い、表面法線方向に原子層と真空層を交互に配置することに よって表面を再現した.単位格子には Si 原子 2 個, O 原子 5 個, H 原子 2 個が 含まれており、最下層の H 原子は O 原子のダングリングボンドを終端し、電荷 の安定を図った.最表面の O 原子及び表面から 2 層目の Si 原子の位置を最適化 し、3 層目の O 原子及び最下層の H 原子の位置は固定した.



# (b) 脱離

O 原子が表面に吸着する際の吸着エネルギーを求めた. ここでは吸着サイト として図 2 に示すように, T, B, H, H1 の 4 種類を想定した. 吸着エネルギー $E_{ad}$ は以下の式で定義した.

$$E_{ad} = E_{slab} + E_{atom} - E_{total} \tag{2}$$

ここで *E*_{slab}, *E*_{atom}, *E*_{total} はそれぞれスラブ,入射気体原子,原子が吸着した状態での原子とスラブのエネルギーである.各吸着サイトについて O 原子吸着のポテンシャルエネルギー曲線を図 3 に示す.吸着エネルギーはサイト T で最大となり,その値は 2.19 eV であった.図 3 から dense surface への O 原子の吸着・脱離現象は大きなエネルギー障壁を伴わない現象であることが分かる.このような現象を統計力学的に取り扱うには変分型遷移状態理論を適用する必要がある.しかしながら第一原理計算から遷移状態の分配関数を反応座標の関数として計算することは困難である.そこで,ここでは脱離の遷移率を以下の式から求めた.

$$r_i^{des} = \left(\frac{k_B T}{h}\right) \exp\left(-\frac{E_{ad}}{k_B T}\right)$$
(3)

吸着原子の表面脱離の頻度因子は通常 10¹²~10¹⁵のオーダーであるが, k_BT/h は常 温で 6×10¹²程度であり,脱離の頻度因子としてよく用いられる.サイト T へ吸 着した原子の脱離の遷移率を図 4 に示す.従来の現象論的アプローチによるモ デル化では,パラメータの多さから各素過程が適切に評価されているとは言え ず,本研究で得られた遷移率は他の研究結果に比べ大きな値となっている.図4 から脱離現象は高温領域でのみ起こる現象であることが分かる.



⊠ 3 Potential energy curve of oxygen adsorption.



☑ 4 Transition rates of thermal desorption of oxygen atom.

#### (c) 表面移動

吸着原子の表面移動の遷移率  $r_i^{mig}$  については遷移状態理論を用いて以下のように表現できる.

$$r_i^{mig} = \frac{q_i^{TS}}{q_i} \left(\frac{k_B T}{h}\right) \exp\left(-\frac{E_{mig}}{k_B T}\right)$$
(4)

ここで *E_{mig}* は表面移動のエネルギー障壁であり, *q_i*, *q_i^{TS}* はそれぞれ吸着原子と 遷移状態における振動の分配関数である.まず,吸着原子のサイト T から最近 接のサイト T への表面移動の反応経路を 8 イメージを用いた CI-NEB 法 (Climbing Image Nudged Elastic Band method)を用いて求めた.その結果,吸着原 子の表面移動のエネルギー障壁,1.46 eV が得られた.次に遷移状態理論による 式(4)によって表面移動の遷移率を求めるために,frozen-phonon 法を用いて初期 状態及び遷移状態における表面の格子振動の解析を行った.振動の自由度を 18 とした場合の表面移動の遷移率及び,文献値との比較を図5に示す.図5から, 温度が低い領域では表面移動は非常に起こりにくいことが分かる.また,その 温度領域では熱励起による吸着原子の脱離もほとんど起こらないため,吸着し た原子はほぼ E-R 反応によって再結合・脱離することになると考えられる.



 $\boxtimes$  5 Transition rates of surface migration.

#### (3-2) モンテカルロ法による表面反応の解析

サイト T のみからなるシリカ表面モデルを構築し、動的モンテカルロ法による解析を行った.吸着原子は最近接の4つのサイト T へそれぞれ 1/4 の確率で移動できるとした.単一サイトが占める面積は表面の構造から $A_i = 7.3 \times 10^{-20} \text{ m}^2$ とし、100×100の吸着サイトを考え、周期境界条件を適用した. E-R 及び L-H 反応の反応確率  $R_{ER}$ ,  $R_{LH}$  は立体因子 P, エネルギー障壁 E を用いてそれぞれ以下の式で与えた.

$$R_{ER} = P_{ER} \exp\left(-\frac{E_{ER}}{k_BT}\right), \ R_{LH} = P_{LH} \exp\left(-\frac{E_{LH}}{k_BT}\right)$$
(5)

必要なパラメータは Greaves らの実験結果にフィットするように決定し,L-H 反応の立体因子 *P*_{LH}をパラメータとして解析を行った.図6に示す通り300~900K の温度範囲で実験とよく一致する触媒効率を得ることができた.図7 に触媒反応へのL-H 反応の寄与の割合を示す.このグラフから700K 以上の温度領域では 吸着原子の表面移動が活発に起こるため,L-H 反応が支配的になっていることが分かる.



☑ 6 Catalytic efficiency for various steric factors of L-H mechanism



☑ 7 Contribution of L-H mechanism to catalytic efficiency

# (4) 平成 20 年度進捗状況

シリカ表面における酸素原子再結合反応についてマルチスケール解析の概念 に基づいた解析を行い,以下の知見を得た.

・α-quartz (0001) 再構成表面を作成し,表面に吸着エネルギーが最大で 2.19 eV の吸着サイトが存在することを示した.

•NEB 法を用いて吸着サイト間の原子の表面移動のエネルギー障壁が 1.46 eV で あることを示した.

・動的モンテカルロ法による解析結果から,700K以上でL-H反応が支配的なることが分かった.

# 3.2.5. 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、ソフトウェア面からも最大限の 方策を講じることとしたい.

# (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. (3) 研究内容

#### ①格子ガス法による数値シミュレーションの確認

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次元問題に研究を進め、計算モデルとしては、"FCHCモデル"を 用いることにした.本モデルは、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、4 成分のうち、 2 つが 0,残りが+1 または-1 のベクトルで表される移動しかできないものと仮定 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、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. さらに、ひとつの格子点上では、全く同じ移動をする仮想粒子は 2 個以上存在 できないもの(1 個 or 0 個)と仮定する.(排他律)



図1 FCHC モデルにおいて仮想粒子が移動可能な 24 個の向き

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(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,かつ,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)で反転する(=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.

いずれにせよ,格子ガス法の計算モデルは,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.したがって,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(例:FPGA←その都度プログラムで変更可能なゲート回路配 列)を利用する場合においては,超低消費電力化に大きく貢献できる可能性が ある.

#### ②遺伝的アルゴリズムによる逆解析手法の検討

19 年度は、2 次元の格子ガス法 FHP-I モデルを対象にして、その時間発展計算を「フィードフォワード型多層ニューラルネットワークの計算」とみなし、 ニューラルネットワークの学習アルゴリズムを逆解析手法として利用する研究 を行った.

20 年度は、3 次元の格子ガス法 FCHC モデルを対象にして、その各格子点における仮想粒子の衝突による向きの変更規則について、遺伝的アルゴリズムを利用した逆解析手法の研究を推進した.

# (4) 平成 20 年度進捗状況

まず,格子ガス法 FCHC モデルによる時間発展計算をビット演算のみで行う プログラムを完成させ,パソコン上で動作させた.

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.仮想粒子は, 例えば,(1,0,-1,0)の速度をもっている.これは,「+Xの向きに進みたい性 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みなすことができる.す なわち,この染色体は,(1,0,-1,0)という遺伝子型をもち,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.

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"交叉"が生じる."交叉"は、X 成分、Y 成分、Z 成分、R 成分のそ れぞれの交換であるから、その格子点全体としては、合計量が保存される、こ れは、仮想粒子の"運動量保存則"に対応している、"交叉"の結果、例えば、 (1,0,-1,0)のような遺伝子型をもつ染色体が生じるかもしれない.これは, 1 成分の値しかゼロになっていない.「+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, 0)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成分がゼロの遺伝 子型をもつ染色体がうまく生じたとしても、前述した「同じ向きに移動できる 仮想粒子は2個以上存在できない」という FCHC モデルの条件があるので、こ の条件を満たせない場合も、隣接格子点に移動して次の世代のために新しい染 色体を残すことはできなくなる.他方,仮想粒子の"粒子数保存則(質量保存 則)"を考えると、"交叉"の結果、どこにも移動できずに、隣接格子点に対し て新しい染色体を残せない"交叉"が生じては困る.この場合、粒子数が減っ てしまうからである.そこで、必ず、隣接格子点に移動可能で生き残れる "交 叉"のみを実現させるようにする.どんな"交叉"の組み合わせも考えても, これが不可能な場合は、"交叉"をひとつも生じさせずに、すべての仮想粒子を そのままの向きで通過させればよい.この場合、"運動量保存則"も"粒子数保 存則(質量保存則)"も破れてはいないので問題はなさそうである.

また、"突然変異"についても、いくつかの方法が考えられる.「-1」を「1」 に変えたり、「1」を「-1」に変えたりする"突然変異"は、ゼロの成分の数を変 えないので、上記の生き残れる制約条件のひとつを自動的にクリアできる.た だし、「同じ向きに移動できる仮想粒子は2個以上存在できない」という制約条
件は別途チェックする必要がある.

また、この場合、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.

また、任意に選ばれた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.この場合、「1と-1」を「0と0」に、「0と0」を「1と-1」 または「-1と1」に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、各成分の運動量和もそれぞれ保存されるから である.ただし、「同じ向きに移動できる仮想粒子は2個以上存在できない」と いう制約条件は別途チェックする必要がある.これは、遺伝的アルゴリズムに おける"逆位"の特別な場合である.

以上のように、現在、様々な遺伝演算子の考案とその確率変更の組み合わせ により、計測融合シミュレーションを実現する方法について研究中であり、少 しずつ知見を得つつある.

# 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、防食を含む構造の最適化、 およびその基盤技術としての CAE に向いた有限要素の研究を行っている.

# 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 H¹ 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 H¹ 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 20 年度進捗状況

平成20年度は次のような成果が得られた.

- (a) 音場構造連成系における放射音圧を最大化する構造の形状最適化 管弦打楽器のような構造の振動によって音場が形成される音場構造連成系 (図 1)において,放射音圧を最大化する問題について,構造の境界形状 を設計対象にしたノンパラメトリック形状最適化問題の解法を明らかにし て,実際の楽器の設計に応用する研究を,昨年度に続き,行った.今年度 は,実問題の形状最適化解析が実現できるようなプログラムの開発に焦点 を当てた.実際の楽器モデルでは,100万自由度以上の規模となることか ら,情報基盤センターの大型計算機で解析できるようにプログラムを更新 した.計算の高速化は,周波数応答解析を並列化することで達成した.
- (b) 大変形を考慮した接触する弾性体の形状同定 接触する弾性体(図 2)の接触圧力を指定した圧力分布になるように弾性 体の形を決定する問題の解法を明らかにし、実際の装具などの設計に応用 する研究を、一昨年度に続き、行った、今年度は、実問題の形状最適化解 析が実現できるようなプログラムの開発に焦点を当てた、その結果、接触 圧力を一定にするような接合面の3次元形状を求めることができた。
- (c) 非定常 Navier-Stokes 問題における形状最適化問題の数値解法

非圧縮性流体の Navier-Stokes 流れ場(図3)の境界形状を設計対象にした ノンパラメトリック形状最適化問題の解法を明らかにし,解析例を示す研 究を行った.この研究は、一昨年度まで、構造・音場連成系の形状最適化 問題の数値解法に関する研究として行ってきた研究の一部である.一昨年 度までは、定常 Navier-Stokes 流れ場と弾性体の連成系における形状最適 化問題の解法を明らかにした.その結果、低 Reynolds 数では解が得られ たが、弾性体の変形はわずかで、連成の影響がみられなかった. Reynolds 数を上げていくと、定常問題では解が得られなくなった.そこで、非定常 問題の流れ場に立ち返って、形状最適化問題の解法を明らかにすることを 目標とした.本研究では、体積制約付圧力損失最小化問題を扱った.流れ 場の中に障害物がある場合を想定し、すべての境界における形状勾配の評 価方法を示した.2 次元問題の形状最適化解析が実現できるようなプログ ラムを開発し、数値解を得ることができた.

- (d) リンク機構における形状最適化問題の定式化 リンク結合された線形弾性体(図 4)が外力を受けて運動するマルチボディダイナミクス系を取り上げ,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.本研究では,弾性変形は微小であり,剛体運動には影響を及ぼさないと仮定した.運動制約付の Hamilton の原理により,外力による剛体運動を微分代数方程式の初期値問題として定式化した.その外力と慣性力により,線形弾性問題を定式化した.それらの下で,ひずみエネルギを評価関数にしたときの形状勾配を理論的に導いた.
- (e) 連続体の形状および位相最適化問題に対する H¹ 勾配法の妥当性 昨年度まで,連続体の形状および位相最適化問題に対する H¹ 勾配法と称 した解法を示し,いろいろな問題への応用を示し,プログラムの開発を行 ってきた.今年度は,数学として妥当性について更なる検討を行った.そ の結果,抽象的勾配法を定義し,その解の一意存在にして定理を示した. 連続体の形状および位相最適化問題は,連続関数の集合で問題を構成でき るが,本質的に不正則な問題であることが示せる.H¹ 勾配法を Galerkin 法と組み合わせることで正則な数値解法となっているとの結論に至った.



図1 楽器を想定した音場構造連成系

図2 大変形を考慮した接触する弾性体





図3 障害物を囲む Navier-Stokes 流れ場

図4 リンク結合された線形弾性体

# 3.3.3. 自動分割に適した高精度可変節点数要素の研究

# (1) 目標·計画

現在,あらゆる分野で,より高精度なシミュレーションが求められている. その結果,解析規模が非常に大きくなっている.特に有限要素法では大規模な 要素分割が問題になっている.そこで,考えられたのが,自動要素分割技術で ある.自動分割技術には,デローニ分割やアドバンシングフロント法などある. しかし,自動分割技術を用いても,要素分割にとても時間が掛かってしまう. そこで,本研究の目的として,自動分割に適した要素を開発することにより, 要素分割時間を大幅に短縮することを目的としている.これにより,高精度で 高速な解析が実現できると考えている.

#### (2) 意義・国際社会との比較

有限要素分割の煩雑さを回避する技術としては、各種のメッシュレス解法の 研究が盛んに行われている.また、有限要素分割を規則的な構造格子をベース に修正する方式としては、バックグラウンドメッシュ方式があり、流体解析で 適用されている事例がある.バックグランウンドメッシュ方式では、境界部近 傍の節点を境界に移動させる方式であるが、境界近傍のメッシュが粗くなると いう欠点がある.また、境界近傍のみ詳細に分割する方式をとっているシステ ムもあるが、手続き的に煩雑になる.本研究は、その煩雑さを回避しながら解 析精度を保持することを目的として行っている点に意義がある.

# (3) 研究内容

平成19年度は、予備検討として従来行われてきた方式の比較検討を行った. その結果、境界近傍のメッシュ分割の影響が明らかになった.そこで、規則的 な構造格子のメッシュをベースにして、境界部に挿入可能な可変節点数要素の 開発を始めた.

本研究で提案する要素分割の高速化は、まず大部分を有限要素法(FEM)で解き、 有限要素法で解けない不整合部分だけを一定要素の境界要素法(BEM)で解く. そ して、境界要素領域を有限要素法として扱い有限要素法と結合させる. その時、 使用する手法は、等価有限要素法を用いる.

有限要素法による有限要素と境界要素法による境界要素を結合する手法として、境界要素を等価な有限要素に変換する等価有限要素法がある.等価有限要素法には、非対称マトリックスを使う方法と対称マトリックスに変換する方法があり、使用するメモリー量が少ない対称化有限要素を使う.

$$[H]\{u\} = [G]\{p\}$$
(1)

で表される. {u}は節点変位ベクトル, {p}は表面ベクトルである.ただし, {p} は境界要素上に働く単位面積当たりの力であり,集中荷重ではない.[H], [G] は{u}と{p}を結びつける定数マトリックスである.等価節点加重{f}は等価節点 の仮想仕事と表面力のなす仮想仕事を等価した次式から算出される.

$$\left\lfloor \delta \, u \,\right| \{f\} = \int_{s} \delta \, u \, \cdot \, p \, ds \tag{2}$$

ここで、 $\delta u$ は仮想変位であり、S は物体表面を表す. S トで変位及び表面力を内插関数 N を用いて

Lで変位及び衣面刀を内押険数 N を用いて,  
$$p = |N| \{p\}$$

$$p = \lfloor N \rfloor \{p\}$$
(3)  
$$u = \lfloor N \rfloor \{u\}$$
(4)

$$\{\mathbf{f}\} = \int_{s} \{N\} \lfloor N \rfloor ds\{p\} \equiv [M]\{p\}$$

$$\tag{5}$$

式(1)と式(5)から

$$\{f\} = [M][G]^{-1}[H]\{u\} \equiv [K']\{u\}$$
(6)

が得られる.

[K']は一般的に離散化誤差から対称にならない.そこで,次式により[K']を対称化する.

$$[K] = ([K']^T + [K'])/2$$
(7)

# (4) 平成 20 年度進捗状況

平成 20 年度は、平成 19 年度に行った予備検討をもとに、自動分割に適した要素と プログラムを開発し、数値実験を行った. 解析モデルは、図 1 に示すように、板に丸い 穴を開け、上下にひっぱり荷重をかけた板の 4 分の 1 サイズである. 縦が 50mm、横 が 50mm、穴の半径が 30mm のモデルを使用した.



開発する要素は、図2の示すように境界近傍付近の不整合な要素を可変節点数要素 として開発した.



☑ 2 High-accurate variable node elements

従来要素を使う方法として,図3に示すように不整合部分を三角形要素に分割方式 (CASE1),不整合部の節点を移動させる方式(CASE2),不整合部分の内部に節点 を追加し,三角要素に分割する方式(CASE3)の3つのケースを考えた.



⊠ 3 Conventional elements

解析精度の比較方法は、主応力と解析モデルの下部の面圧を調べた. (図 4)また、 厳密解は、解析モデルを詳細にメッシュを切り、ANSYS で解いたもの(Detailed Analysis)とした.



図 4 Surface pressure

それぞれの場合で解析を行った結果,ほぼ同じ傾向になった.(図 5) また,どの程度の誤差がでるか調べるために面圧を測った.(図 6)



従来の要素を用いた場合と可変節点数要素を用いた場合を比較した結果,若干では あるが高精度に解析できる可能性がある結果が得られた.

# 3.3.4. めっき,防食の最適化(めっき厚さの均一化)

# (1) 目標·計画

めっきの厚さはその領域の電流密度に比例するが、めっき対象の形状等によ りめっき対象表面の電流密度にムラが生じる.そこで水槽内へ邪魔板を設置す ることにより電位分布を変化させて均一な厚さを実現することを試みた.邪魔 板の位置・幅・角度を最適化する.

# (2) 意義・国際社会との比較

めっきについては、従来から非常に多くの研究がある.本研究は、境界要素 法と最適化手法を組み合わせてシミュレーションからめっきの均一分布を実現 するものである.

### (3) 研究内容

めっきとは対象となる素材に様々な機能を付与する表面技術であり、素材単 独ではなしえない多くの性能を実現することができる。電気めっきとは、金属 イオンが含まれる水溶液の水槽中に電流を流すことでめっき対象へ電子を供給 し、表面に金属イオンを析出させるめっき手法である。めっきの膜厚は対象表 面の電流密度に比例するが、一般に対象の端や、円柱の角などの凸部は電流密 度が大きくなり、反対に凹部は小さくなる。そのため膜厚が不均一となる。

そこで水槽内に板を設置し水槽内の電位分布を変化させることでこれに対処 する。本研究では膜厚の均一さを目的関数として、この板を設置する位置・幅・ 角度のパラメーターを遺伝的アルゴリズム(GA)によって最適化する。また、局 所的収束が遅いGAの欠点の解決策として、個体が大域的に収束した時点でク ラスタリングによって多峰性の目的関数を単峰に分割し、それぞれにポリトー プ法(滑降シンプレックス法)を適用することで局所探索を試みる。

解析モデルは下記のようなものである.円錐の表面をめっきする.



図1 解析モデル

Nelder-Mead 法(滑降シンプレックス法,ポリトープ法)を用いて最適化を行った.解析は境界要素法を用いて行った. 最適化するパラメータは形状と角度である.



邪魔板の初期の位置と形状は以下の通り



邪魔板の最適化後の位置と形状は以下のようになった



# (4) 平成 20 年度進捗状況

平成 20 年度は、Nelder-Mead 法を中心に使ったが、それに加えて遺伝的アルゴリズムを使った研究も開始した.今後は、邪魔板が1枚だけでなく複数配置した場合や、アノードの配置なども最適化すればどうなるかなどを研究する予定でいる.

# 3.3.5. カソード防食の最適化

本研究は、逆問題グループとの共同研究である. 逆問題グループでは、「3.2.2. 流れ場における腐食同定逆問題」で紹介されている.

# (1) 目標·計画

海洋構造物,化学プラントなどにおいては,しばしばカソード防食⁽¹⁾が適用される.この際,配管全域で過不足なく防食を達成するために,カソード電流および電極の位置を適切に定める必要がある.そのため,精度良く腐食速度を予測することが重要である.

流れの影響を無視できる場合の配管の腐食速度を予測する手法として,境界要素法⁽¹⁾を用いた手法の有効性が示されている.また,流れの影響を無視できない場合には,平均速度によって整理された分極曲線⁽¹⁾を利用して腐食速度の予測が行われてきた.

実際に腐食が起こる管壁の腐食速度を予測するためには,管壁近傍の流速分布が 重要な要因となることが考えられる.本研究では,管壁近傍の流体の速度と分極曲線 の関係に注目し,カソード防食におけるカソード電流および電極の位置を最適化する 手法を提案する.

# (2) 意義・国際社会との比較

カソード防食そのものは従来からある技術であるが、それを数値的に最適化する 研究はこれまであまり行われてこなかった.本研究は腐食速度と官壁近傍流速との関係に着目し、よりよい防食の実現を目指したところに特徴がある.

#### (3) 研究内容

#### カソード防食の最適化における基礎支配方程式

図 1 に示すように電解溶液の占める領域を $\Omega$ とする. 領域は 4 種類の境界 $\Gamma_d$ ,  $\Gamma_n$ ,  $\Gamma_m$ および $\Gamma_e$ に囲まれているとする. ただし,  $\Gamma_d$ は電位の指定された境界,  $\Gamma_n$ は電流密度の指定された境界,  $\Gamma_m$ は金属との境界,  $\Gamma_e$ は電極の表面を表す. ここで, 溶液の閉める領域 $\Omega$ 内の電位 $\phi$ は, 次のラプラス方程式を満足する.

$$\kappa \nabla^2 \phi = 0 \qquad (\Omega \perp \tilde{\mathcal{C}}) \tag{1}$$



☑ 1 Governing equations and boundary conditions

ただし、κは溶液の電気伝導度を表す.また境界条件は次式で与えられる.

$$\phi = \phi_0 \qquad (\Gamma_d \perp \tilde{C}) \tag{2}$$

$$i\left(\equiv\kappa\frac{\partial\varphi}{\partial n}\right)=i_{0}\qquad(\Gamma_{n}\pm\vec{C})$$
(3)

$$-\phi = f_m(i) \qquad (\Gamma_m \perp \tilde{C}) \tag{4}$$

$$\phi, i: 未知 \qquad (\Gamma_e 上で) \tag{5}$$

ここで、腐食速度は $\Gamma_m$ 上の i に比例する. ただし、 $f_m(i)$ は電極の分極曲線、 $\partial/\partial n$  は 外向き法線方向の微分、 $\phi$ および $i_0$ はそれぞれ指定された電位と電流密度を表す. 金属表面が防食状態にあるためには、金属上の電流密度が負の値に保たれる必要 がある. すなわち、制約条件とし

$$i \le 0 \qquad (\Gamma_m \perp \tilde{C}) \tag{6}$$

が成立する必要がある.

電極の位置 e(寸法は既知)を与えたとしても,式(5)に示したように $\Gamma_e$ 上の $\phi$ とiが未知のため,このポテンシャル問題の解は不定となる.  $\Gamma_e$ 上の位置 e と $\Gamma_e$ 上のiを与えることにより,解が一意に決まる.電力 P は次のように計算される.

$$P = \int_{\Gamma_e} \left\{ \phi + f_e(i) \right\} i \quad d\Gamma$$
⁽⁷⁾

ただし、f_e(i)は、電極の分極曲線を表す.本最適化問題では、電力最小の条件を最

適条件と考え、これを目的関数とする.以上より、式(1)~(6)を満足し、かつ式(7)を最小にする $\Gamma_e$ の位置  $e \ge \Gamma_e \ge 0$  iの最適な組み合わせを考える.

#### 速度勾配(壁面近傍流れ)の影響

まず,図2に示すような2次元の鋳鉄製の配管内に,右または左側から水を流すことを考える.

左から流すときは  $U_R$ =0.06[m/s]で流入させ、右から流すときは  $U_L$ =0.02[m/s]で流入 させた.このような流し方をすると、管内の左右どちらから流しても平均速度は同じにな る.したがって、従来の腐食シミュレーション法では、左右どちらから流しても同じように 腐食するという結果になる.すなわち、最適な電極位置およびカソード電流も同じにな る.



⊠ 2 Analysis model

この流れに対して、流体速度の管壁垂直方向勾配 ( $\partial u/\partial n$ )を求めた. ただし、u=|u|、 $u=(u_X, u_Y)$ を表す. 以後、単に速度勾配⁽²⁾と呼ぶ. 管径が変化する付近 X=45~65[mm] の速度勾配の計算結果を図 3 に示す. 流す方向によって速度勾配が異なることが分かる.



☑ 3 Velocity gradient distribution



☑ 4 Current density calculated with polarization curves that are decided by flow velocity gradient near tube wall



☑ 5 Current density calculated with polarization curves that are decided by average velocity

実験で得られた分極曲線⁽¹⁾を速度勾配に基づいて内挿し,境界要素法による腐食 解析を行った.以後,この解析手法を本手法と呼ぶ.なお,境界要素法による離散化 には一定要素を用い,要素数はそれぞれ 102 で分割した.

解析の結果,得られた電流密度分布を図 4 に示す.また,比較のために,平均速度 に基づいた従来法の結果を図 5 に示す.従来法と本手法とで最大電流密度の位置と 大きさが異なっていることが分かる.また,本手法においても左右の流れ方向によって 結果が異なることがわかる.

#### カソード防食の最適化

図 2 に示すような配管に二つの電極  $E_1$ ,  $E_2$ でカソード防食する場合を考える. ここで,二つの電極の位置  $E_1$ ,  $E_2$ は図 2 に示すように金属表面上で,かつ上下対象に配置した. また,電極の大きさ*i* は *l*=2mm とした. なお式(7)では,簡単のため  $f_e(i)=0$  とした. Pの最小化に際しては滑降シンプレックス法を用い計算を行った.

本手法(速度勾配)に基づいてカソード電流および電極位置の最適化をし,得られた最適電流密度分布を図6に示す.ここで,図6における■および□は,それぞれ右方向流,左方向流における最適電極位置を表す.右方向流では*X*=54~56mm,左方向流では*X*=58~60mmが最適な電極位置であった.電極を配置した以外の場所では,防食条件(*i*≤0)が満たされていることがわかる.



Image: G Optimization for catholic protection of current density and position that are decided by velocity gradient

#### 結言

管壁での速度勾配を考慮することで、平均速度だけでは予想できない腐食状況を 予想できる可能性があることを示唆する結果が得られた.

配管全域で過不足なく防食を達成するために,カソード電流および電極位置を最適 化する手法を提案した.

平均速度が同じでも速度勾配の違いにより,左右方向流れで最適なカソード電流および電極位置がそれぞれ異なる結果が得られた.

# (4) 平成 20 年度進捗状況

管壁の腐食速度と,管壁近傍の流速分布の関係に着目し,カソード防食におけるカ ソード電流および電極の位置を最適化できることを示した.

# 3.4. 大規模可視化

#### 3.4.1. 大規模可視化に関する研究の概要

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

平成 20 年度は,各サブプロジェクトが必要とする可視化について行った前年度の 調査を受け,主に4面体要素をベースとする非構造格子の構造解析データに対する 可視化システムの構築を行った.その詳細を次項に述べる.

### 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.

前年度に、各サブプロジェクトがどのような解析・設計を行い、どのようなデータを有 しているかの調査を複数回行った.その結果、例外はあるが、4面体要素をベースとす るものが多いと分かったので、ここでは、解析規模を問わず、4面体データを可視化す ることのできるシステムの開発を目的とする.対象とする物理は、構造解析、腐食解析、 流体解析などが考えられるが、まず構造解析に焦点を当てて解析システムを設計・開 発する.

# (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.具体的には,以下の点を特徴とする.

- ・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.
- ・データ構造は4面体で頂点にデータを持つとする.
- ・ データの内容は変位と応力とする.
- ・ 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,前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 を利用するが,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 データをサーバー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.

# (4) 平成 20 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。これを踏まえて、ここではまず、サーバー上で動作する 簡単なプログラムを作った。それは、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 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はき裂により応力集中する管の解析結果を可視化したものである. 左の図はそのすべてを表示しているが, 右はサーバー側である範囲にデータを制限した上で転送している. その結果, 要素数が約11万から6万に減少(領域の大きさの割に要素数が減っていないのは, き裂の周辺に要素が集中しているためである)し, これによって転送時間の短縮や対話的な視点変更が可能となっている.



図3 き裂のある管の応力分布. 左:全要素表示, 右:き裂周辺のみ表示

このように領域を制限するほか,表面要素のみを取り出すなども行っている. 図4はパンテオンドームの可視化(要素数約32万)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.





(b) 下部のみ表示



(a) 全体表示

(c) 屋根をはずして表示

(d) 屋根のみ表示

図4 パンテオンドームの可視化

来年度は、これらの使い勝手を向上させると共に、各サブプロジェクトとより緊密な連携をとってシステムの完成を目指す.

# 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. このことからもハードウェアとしてコンピュ ータの性能が向上するスピードがいかに速いかが分かる.

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

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

- (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目指す.

#### (2) 意義・国際社会との比較

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

#### (3) 研究内容

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

# (4) 平成 20 年度年度進捗状況

本年度に本システムを用いて行った大規模解析例として,図1と図2にフリーキック サポートシステム概略図とLESモデルによる流れ解析結果を示す.

まず,フリーキックサポートシステムについては、これまで長い期間に渡って開発を進

めてきたものであるが,流体解析だけではなく接触解析や運動解析,逆問題などを結び付けて,実際のサッカーにおけるフリーキックの成功率を高めようとするものである.

また,高レイノルズ数での高精度な流れ解析を実現するために,乱流モデルの導入 を検討した.有限要素法による大規模流体解析に適した乱流モデルとして LES モデ ルを採用し,低いレイノルズ数において理論的な解とほぼ一致することを確認したが, 本来 LES モデルが本当に必要となる高レイノルズ数問題に対しては必要な格子数を 満たす解析をすることが極めて困難であることが分かり,来年度には RANS モデルと LES モデルをハイブリッドにした DES について導入を検討している.





Estimating Material Parameter

Impact Analysis between Soccer Ball and Leg (Prof. Asaì, Tsukuba Univ.)



図1 フリーキックサポートシステム概略図



# 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 立し,実験および解析不可能であった問題規模での現象解明,産業界への貢献を目 的としている.

#### (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.

# (4) 平成 20 年度進捗状況

本年度は、実際の設計に用いるために、線形ソルバ IBDD-DIAG 法の改良を行い、 動弾性解析の時間ステップ1回を67.5 秒から34.7 秒に短縮することに成功した.これ を用いることで、地震応答解析(継続時間10秒、時間ステップ数1,000回)を10時間 程度で終えることが可能となった.この成果を基に、地震の被害を受けた原子炉圧力 容器を新たにモデリングし、実際に受けた地震動による地震応答解析を行うことで、地 震被害の状況を検証する研究を開始することができた. また, 炭素繊維強化高圧水素タンク(CFPV)モデルの耐圧解析について, 斜交積層 板複合材料を考慮した 3 次元異方性材料解析システムを開発し, 実際の高圧水素貯 蔵タンクから計測した FRP 層の炭素繊維交差角度を用いた解析を行った. 1 千万自由 度規模モデルを用いた弾塑性解析に成功し, FRP 補強による金属ライナの耐圧性能 や自緊処理の影響を検証した.

さらに、地球シミュレータ上における ADVENTURE の利用を補助するシステムの構築 として、ベクトル化された並列オフライン可視化システムを用いて、2 億自由度規模有 限要素モデル解析結果の可視化(変形や応力の地震応答アニメーション)に成功した. また、ADVENTURE が稼動する並列計算機を遠隔 CAE システムとして利用するサー バ・クライアントシステムの構築を行った. ES のリモートアクセス方法に適用するために ssh 接続に基づくシステムとし、大学所有の並列計算機システムを用いた実証試験に 成功した.



図1 CFRP タンクモデル (左上:全体図,右上:断面メッシュ図,下:相当応力)

# 3.6. 統合化

#### **3.6.1.** 統合化に関する研究の概要

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

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

#### 3.6.2. システム統合のイメージ作成

平成19年度におこなっ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、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.今後はさらに他のサブプロジェクト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.



# 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

近年, 製造業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.3 次元 CAD を中心とした CAD-CAE 一貫システムの開発もその一環である. さらに最近は, 製品の3 次元 CAD データが作成される前の構想設計段階から CAE 解析を適用したいというニーズも高まっており, 過去に CAE 解析のために作成した類似形状の解析メッシュデータや X 線 CT 装置で撮像した形状データを CAE 解析で活用するためのメッシュ生成技術の開発が求められている.

本研究では従来の3次元 CAD(ソリッドモデル)を対象としたメッシュ生成では無く, 3次元形状撮像から得られるSTL データや CAE 解析で使用した解析メッシュデータ 等のメッシュモデルとして表現された形状データを主体としたメッシュベースの CAE シ ステムの開発を目的としている.図1は従来の CAD 連携 CAE システムとメッシュベー ス CAE システムの概要を示している.

メッシュベース CAE システムを実現するためには、利用者の要求に応じて自由にメ ッシュモデルの形状を変更する技術(メッシュモーフィング技術)と、CAE 解析で利用 可能なレベルにメッシュの品質や粗密を制御する技術(メッシュ粗密品質制御技術)の 開発が不可欠である. 今年度は過去に作成した類似形状の解析メッシュデータを CAE 解析に利用することを目標として、前者のメッシュモーフィング技術の開発を行っ た.

今後は本研究のメッシュモーフィング技術と昨年度までに開発したメッシュ粗密品質 制御技術を組み合わせることにより、メッシュモデルとして表現された様々な形状デー タを入力としたメッシュ生成システム(図 2)を開発することで、設計上流段階での CAE 解析を実現していく計画である.



図1 解析主導設計のためのCAEシステム



図2 メッシュベースのメッシュ生成システム

# (2) 意義・国際社会との比較

これまでにメッシュモーフィング技術として, Freeform morphing や Control based approach 等の技術が提案されており,これらの技術は自由な変形が必要とされる CG アニメーションの作成で主に活用されている.しかし,工業製品の設計等のエンジニア リングに適用するためには,解決すべき課題が存在する.工業製品の形状は一般的 に平面や円筒面などの機械加工に適した面が多く,それらは平面間の距離や円筒面 の径などの寸法拘束と平行/垂直や接線連続などの幾何拘束の拘束条件で定義さ れる.このため,形状変形には曲面の種類やパラメータおよび拘束条件を満たす必要 がある.例えば,ボルト穴等の円筒形であけた穴は円筒形とその径を保持したまま変 形を行う必要がある.しかし,従来技術はこれらの制約を厳密に満たすような正確な位 置決めを行うことが困難であることが知られている.

本研究では従来技術の課題を解決するために,平面や円筒面などの面(以下,幾 何特徴と呼ぶ)と拘束条件に基づいてメッシュをパラメトリックに変形するパラメトリックメ ッシュモーフィング技術を開発した.

#### (3) 研究内容

本研究では、メッシュに対して曲面の種類やパラメータおよび寸法拘束や幾何拘束 を付与し、寸法変更を指示することでメッシュを変形できるパラメトリックメッシュモーフ ィング技術を開発した.具体的には、メッシュの外表面の要素面に対して幾何特徴とし て曲面の種類やパラメータ、および幾何拘束として幾何特徴間の関係(平行/垂直や 接線連続)を認識し、この幾何特徴または幾何特徴間に対して変形後形状の寸法値 (寸法拘束)を指示し、この幾何特徴とと幾何拘束、寸法拘束を制約としてメッシュを変形 させる.これにより、本技術は、従来技術では実現が困難であった幾何特徴を保持し つつ、指示された寸法拘束を満たすようにメッシュを変形できる.例えば、図 3(a)のメッ シュに対して全長を変更した場合、従来のFreeform morphing や Control based approach では図 3(b)のように真円の穴が楕円形になってしまうが、本技術では穴は円 筒面として認識し、変形後もこれを保持するので、図 3(c)のメッシュを得ることができ る.

本研究によるメッシュモーフィングのシステム構成を図4を用いて説明する.

- 幾何特徴認識処理部:指定されたメッシュモデルに対して,幾何特徴認識処理 を実行する.この処理で,メッシュモデルから平面や円筒面等の幾何特徴およびこの幾何パラメータを自動的に認識する.
- ② 幾何特徴パラメータ計算処理部:設定された寸法拘束に合うように幾何特徴の パラメータを計算する.
- ③ 幾何特徴への節点フィッティング処理部:メッシュの各節点を②で計算した幾何 特徴上に移動する.







図4 システム構成図

# (4) 平成 20 年度進捗状況

本年度はエンジンブロックとコネクティングロッドのメッシュモデルに本研究成果を適 用することで効果を検証した.

図 5(a)は変形前の解析メッシュであり、3 箇所に対して寸法拘束を設定したものである. これに対して、寸法拘束をそれぞれ 22.5mm→30mm、  $\phi$ 90mm → $\phi$ 60mm、

150mm→155mm に変更した結果が図 5(b)である. 150mm から 155mm に変更した部 分は円筒形状の穴が含まれているが, この円筒形状は保持したまま変形できているこ とを確認できる. また 22.5mm から 30mm に変更した部分はフィレットに隣接しており, 寸法変更に伴いフィレットの位置も変更されていることを確認できる. 尚, メッシュ変形 の処理時間は約 30 秒(Pentium4TM 3.2GHz)である.

図 6(a)は変形前の解析メッシュであり、3 箇所に対して寸法拘束を設定したものである. これに対して、寸法拘束をそれぞれ 44mm→60mm、R5mm→R10mm、Ø 30mm → Ø 20mm に変更した結果が図 6(b)である. R5mm から R10mm に変更した部分はフィレットであり、隣接している平面と接線連続の関係になっているがこれも保持できている事が確認できる. 従来技術では、接線連続の関係を保持した変形を行うことは非常に困難である. 尚、メッシュ変形の処理時間は約 30 秒である.

これらの検証例のように、従来技術では実現が困難であった幾何特徴を保持しつ つ、指示された寸法拘束を満たすようにメッシュを変形できることを検証し、本技術の 優位性を確認した.



図5 エンジンブロックモデルでの検証例


図6 コネクティングロッドモデルでの検証例

## 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.詳細は 3.2.2 節及び 3.3.5 節を参照して頂きたい.

### 4.4. イノベーション・ジャパン 2008 への出展

今回で 5 回目を迎える「イノベーション・ジャパン 2008-大学見本市」は、大学の技術シーズと産業界のニーズの出会いを目的とした国内最大のマッチングイベントである.このイベントによって、産学の多くの出会いの場として活用され、技術移転が進み、新産業が創出され、日本経済がますます発展していくことを期待されている.当センターでは、産学協同活動を促進する目的があるため、本年度も出展した.

会期: 2008 年 9 月 16 日(火)~18 日(木) 10:00~18:00 会場: 東京国際フォーラム[東京・有楽町]

主催:科学技術振興機構(JST),新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO) 来場者:企業の研究開発担当者,経営者,マーケティング担当者,大学関係者, 研究者など 45.345 人が来場

東洋大学計算力学研究センターでは、「計算力学による破壊現象の解明」というタ イトルで新技術成果を出展した.本新技術は、アダプティブ解析を高速に行い、様々 な場面で利用して貰うのが狙いである.そもそも、アティブ解析でのメッシュコントロー ルは困難な場合が多いため、実際にはアダプティブ解析は敬遠されがちであったが、 簡単にアダプティブ解析ができるように、階層的な構造をもつメッシュという新しい技術 を用いて、高速かつ自動的にアダプティブ解析できるようになった.当日、会場では、 アダプティブな亀裂進展解析や流体解析を、その場で行い、アダプティブ解析が進む 様子をデモアニメーションを通じて紹介した.また、解析結果や精度、アダプティブ解 析をしない場合の結果との比較を、目で見て分かるよう表示した.そうすることによって、 本手法によるアダプティブ解析の手軽さと重要さを実感してもらった.

3.1.5 節の「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」に 出展技術の詳細が記されている.

# 5. 国際協力

## 5.1. 第7回計算力学フォーラム(韓国成均館大学)

第7回計算力学フォーラムを20年8月29日に成均館大学(SKKU, Sungkyunkwan University, http://www.skku.edu/eng/)で開催した. CCMR メン バー5名,成均館大学の研究者4名,及びNorthwestern UniversityのProf. Wing Kam Liuにより計算力学に関する講演が行われた. 電子・原子から構造物まで,様々 なスケールについての講演が行われ,活発な討論がなされた. 下記にプログラ ムと会場の様子を示す.

2008 SKKU-Toyo Univ. Joint Forum on Computational Mechanics

#### Plenary Lecture

1. Prof. Wing Kam Liu

Complexity Science of Multiscale Materials via Stochastic Computations

2. Prof. Genki YAGAWA

On the enriched free mesh method: an accurate meshless technique

#### Session 1

- 1. Prof. Moon K. Kim Hybrid Elastic Network Models for Large Macromolecular Structures and Nanocomposites
- 2. Prof. Yasushi NAKABAYASHI Evaluation of Aerodynamics Properties of Soccer Ball using LES model
- 3. Prof. Taesung Kim Numerical Modeling of Si Nanoparticle Formation during Silane Pyrolysis

#### 4. Dr. Seiji SHIOZAKI

Mulutiscale analysis of heterogeneous catalysis: a combined ad initio and statistical approach

#### Session 2

5. Prof. Ryuji SHIOYA

Large scale structural parallel analysis using the Earth Simulator

6. Prof. Yoon-suk Chang

Immersed Finite Element Method and Its Application

#### 7. Dr. Kohei MUROTANI

High-speed adaptive analysis using hierarchical mesh for crack propagation

#### 8. Prof. Joe-Boong Choi

Application of Simulation Technologies understanding Ecological Behavior



図1 講演風景

図2 会場の様子

## 6. 対外報告

## 6.1. 第3回計算科学フロンティアフォーラム(湯島)

9月9日に東京ガーデンパレスにおいて第3回計算科学フロンティアフォーラムを名 古屋大学,東京理科大学と共催し,下記の様なプログラムで行われた.

第1部テーマ別フォーラム10:30~13:00第2部学生ポスターセッション14:00~16:00第3部パネルディスカッション16:15~17:30第4部交流会17:45~19:45

## 第1部 テーマ別フォーラム

ミクロ・ゲノム系, マクロ・流体系, マクロ・固体系, アルゴリズム・ソフトコンピューティン グ系と4つのテーマに分けて, 講演時間30分を確保してじっくりと議論が行われた. 講演数の内訳は, 東洋大学6件, 東京理科大学4件, 名古屋大学7件であった.

A 室(ミクロ・ゲノム系) 1.「極低温量子気体における超流動現象の動的シミュレーション」 二国徹郎(東京理科大学 理学部物理学科) 2.「生物進化に対する新しいゲノム計算科学」 美宅成樹(名古屋大学大学院 工学研究科) 3.「計算システム生物学」 笹井理生(名古屋大学大学院 工学研究科) 4.「粗視化モデルによるタンパク質の動力学的構造予測法の開発」 佐々木尚(名古屋大学大学院 工学研究科) 5.「不均一触媒反応のマルチスケール解析」 塩崎聖治(東洋大学 計算力学研究センター) B 室(マクロ・流体系) 1.「乱流の大規模 DNS データ解析-2 点統計量のレイノルズ数依存性について-」 石原卓(名古屋大学大学院 工学研究科) 2.「高密度天体の形成とニュートリノ放出の数値シミュレーション」 鈴木英之(東京理科大学 理工学部物理学科)

3.「着氷現象のホリスティック・モデリング」

山本誠(東京理科大学 工学部機械工学科)

4.「サッカーボールの空力係数の評価とフリーキックサポートシステムの開発」 中林靖(東洋大学 工学部)

C 室(マクロ・固体系)

1.「計算力学の精度向上に向けて」

- 矢川元基(東洋大学 計算力学研究センター)
- 2.「均質化理論によるセルラーソリッドの分岐座屈解析」
  - 奥村大(名古屋大学大学院 工学研究科)
- 3.「構造解析における諸問題」
  - 江澤良孝(東洋大学 工学部)

4.「地球シミュレータによる大規模並列シミュレーション」 塩谷隆二(東洋大学 工学部)

D 室(アルゴリズム・ソフトコンピューティング系)

1.「VR 技術を利用した高臨場感カヌーシステム」

原田哲也(東京理科大学 基礎工学部電子応用工学科)

2.「計算科学の基盤技術になる線形方程式の高速解法とその応用」

曽我部知広·張紹良(名古屋大学大学院 工学研究科計算理工学専攻)

3.「機械学習のための幾何的な特徴抽出」

橘完太(名古屋大学大学院 工学研究科)

4.「高速なアダプティブメッシングを実現するための階層的なメッシュデータ構造とその応用」 室谷浩平(東洋大学 計算力学研究センター)

### 第2部 学生ポスターセッション

午後からの学生ポスターセッションでは、3テーマに分けて展示が行われた. テーマは、

Aグループ(「マイクロ」:量子,原子,分子,タンパク等)

Bグループ(「連続体」:流体,固体,材料等)

Cグループ(「アルゴリズム・CAE・一般」:数値解法, VR, 一般)

である. 学生同士が, お互いのポスターを見ることができるように, ポスターセッション は2部制にして行われた. ポスターの展示数の内訳は, 東洋大学 15件, 東京理科大 学 33件, 名古屋大学 13件であった.

本ポスターセッションでは、教員による採点が行われ、

分野別最優秀賞(B·連続体) 鈴木隼人(D1)

大学別最優秀賞(東洋大学) 島村真介(D2)

の2件受賞することになった.

### 第3部 パネルディスカッション

テーマを「計算科学と教育」として、パネラーに、 矢川元基(東洋大学 計算力学研究センター長) 渡辺一之(東京理科大学 ホリスティック計算科学研究センター長) 美宅成樹(名古屋大学大学院 工学研究科教授)

を向かえ,教育の理想や実情,最近の傾向など,お互いの大学での教育現場の話が 行われ,会場のからの活発な質問や議論繰り広げられた.学生からの,意見が出る場 面もあった.

### 第4部 交流会

3大学の交流を深めるために,懇親会が行われた.この場で,第2部の学生ポスター セッションの受賞式が行われた.



図1 テーマ別フォーラムの様子



図2 学生ポスターセッションの様子



図3 パネルディスカッションの様子

## 6.2. 第8回計算力学フォーラム (琉球大学)

11月3日に琉球大学において開催された日本機械学会 第21回計算力学講演会の中で第8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,他大学の研究成果が議論された.プログラムは以下の通りである.

日本機械学会 第 21 回計算力学講演会 CMD2008 URL:http://www.jsme.or.jp/conference/cmdconf08/

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 矢川元基(東洋大) 日時 11月3日(月)9:30-12:00

- 1. 大規模複雑構造物の健全性と流体構造連成現象 吉村忍(東大)
- スーパーコンピュータによる大規模原子炉圧力容器解析 塩谷隆二(東洋大), 荻野正雄(九大)
- 3. 「構造健全性評価用 次世代自動き裂進展解析システムの構築」プロジェクトの研究成果 岡田裕(鹿児島大), 矢川元基(東洋大)
- 4. SPH 法による頭部衝突解析とGPU を用いた実時間可視化 呂学竜(横国大), 酒井譲
- 5. CAE に適した要素分割技術
  - 江澤良孝(東洋大), 鈴木隼人, 新川幸洋
- 6. 階層メッシュを用いた高速なアダプティブ PH 解析とその応用 室谷浩平(東洋大), 矢川元基, 黒川哲郎



図1 第8回計算力学フォーラムの会場の様子

## 6.3. 第4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: 2009年3月17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 20 年度の成果発表を中心に講演を行う予定である. プログラムは、下記の通りである.

13:00-13:10 開会挨拶 矢川元基(東洋大学)

13:10-14:00 構造健全性

矢川元基(東洋大学)「大規模な破壊力学解析」
岡田裕(鹿児島大学)「三次元破壊力学解析の高度化に関する研究」
A. Kamal Ariffin (UKM)「Simulation of Crack Propagation Using Adaptive Mesh」
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手法に関する研究開発」
関東康祐(茨城大学)「Hermite 型要素への XFEM の適用」

14:00-15:00 逆問題·最適化

畔上秀幸(名古屋大学)「時間発展型境界値問題における形状最適化問題の解法」
 江澤良孝(東洋大学) 「CAE 向き要素の開発と各種最適化」
 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多目的最適設計システムの開発」
 古川知成(バージニア工科大学)「全ひずみ計測による複合材料同定」
 須賀一博(東京理科大学)「壁面近傍流れに注目した配管のカソード防食」

塩崎聖治(東洋大学) 「不均一触媒反応のマルチスケール解析」

15:00-15:20 休憩

15:20-16:00 大規模シミュレーション

入部綱清(プロメテック) 「粒子法によるマルチフィジックスシミュレーション」 和田義孝(諏訪東京理科大学)「Web ベース CAE の高度化」 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」 中林靖(東洋大学) 「大規模流体解析の最適化問題への応用」

16:00-16:30 プレ・ポストプロセッシング

小野寺誠(日立製作所)「メッシュモーフィング技術の開発と自動車部品への適用」 室谷浩平(東洋大学) 「大規模高速な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) 「大規模可視化のためのデータ処理」

16:30-17:20 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.



### 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回の輪読で学術論文紹介を行っている.

図5はセミナーの様子である.



図5 セミナーの様子

### 塩谷研究室

塩谷研究室では、学部学生11名の卒業研究を行っている.毎週1回開催されるセミナーでは学生が研究進捗状況についての発表を行う.これにはオブザー

バーとして仮配属されている3年生も参加している.また,週1回の輪講では 専門書を読み、学術論文紹介などを行っている.図6は研究室の様子であり、 図7はゼミ合宿での研究発表会の様子である.



図6 研究室の様子



図7 ゼミ合宿研究発表会

#### 中林研究室

中林研究室では、学部学生10名が卒業研究を行い、大学院生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.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 裂進展を阻止方法はき裂が円孔に貫入して停止する方法とした.解析では,3点 曲げ試験解析で検証し,節点処理型の有限要素法であるフリーメッシュ法を適用 し,き裂進展を阻止できる最適な円孔位置の予測において,ニューラルネットワー クを用いている.

#### (3) クローン的な階層メッシュを用いた大規模なアダプティブ解析

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

### (4) EFMMの導入による動的解析の高精度化

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

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

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

#### (6) EFMM の剛性行列を用いた大規模固有振動解析

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

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) 高解像度流体解析手法の開発

(1)とも関連するが、複雑な形状、複雑な流れ場では解析に必要な精度を確保するのに十分な格子・要素をあらかじめ用意することは難しい.また、計算規模が

大きくなっているといっても,計算機資源には限りがある.そこで,必要な領域で格子を自動的に細かくする解適合格子と同じ格子で高い解像度が得られるスキームを組み合わせて,現実的な計算機資源で実用上十分な精度を得ることのできる手法の開発を行っている.

#### 塩谷研究室

#### (1)3次元構造解析ソフトウェアの開発

本研究では、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 機能として、境界条件の扱い関する機能を追加することにより、従来境界条 件変換ツールが必要であった解析に対し、ソルバの機能として組み込むこと により、外部ツールを用いないで解析可能とした.解析例として、ガレージ のモデルへ適用した.

#### (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)3次元アダプティブ解析

本研究では、3次元き裂解析のためのアダプティブ解析機能を、局所メッシュ生成手法であるフリーメッシュ法と大規模並列有限要素解析プログラムと組み合わせることにより実現を目指す.破壊力学パラメータ計算手法等の要素技術をベースとして、大規模構造物中の複雑形状き裂の3次元進展現象のシミュレーションを行った.

### (5) 反復解法における収束性の検討

本研究では、有限要素解析において反復型ソルバを用いる際に、モデルの 形状が収束性に与える影響についての検討を行った.大規模問題ではその影響が相対的に小さくなるものの、要素形状が極端に悪くなるケースなどについて、問題規模と収束性の関連性について検証を行った.

#### 中林研究室

### (1) 数値流体解析の最適化問題への応用

非圧縮性粘性流体の解析システムを用いて、各種設計問題・最適化問題に取り 組んでいる.具体的には、ある制約条件の中で解析モデルを自動生成し、遺伝的 アルゴリズムによる反復計算をすることにより流体力学的効果を考慮した最適化問 題を解くことができる.

### (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に加えて, 本年度からはサッカーシミュレーションリーグ3Dのエージェント 開発も開始した.

#### (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.

#### (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. T. AOYAMA, H. AZEGAMI and N. KAWAKAMI, "Nonlinear Buckling Analysis for Etiological Study of Idiopathic Scoliosis", Journal of Biomechanical Science and Engineering, 3(3), 2008, pp. 399-410, Sep. 30, 2008.
- 2. Chern Ferng Chung and Tomonari Furukawa, "A Reachability Based Strategy for the Time-Optimal and Coordinated Control of Autonomous Pursuers", Engineering Optimisation, Vol. 40, No. 1, pp. 67-93, 2008.
- 3. Tomonari Furukawa and John G. Michopoulos, "Online Planning of Multiaxial Loading Paths for Elastic Material Identification", Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 197, pp. 885-901, 2008.
- 4. Tomonari Furukawa and John G. Michopoulos, "An Information-Theoretic Approach for Computational Material Modeling", Advanced Materials Research (AMR) Journal Advances in Fracture and Materials Behavior, pp. 857-862, 2008.
- 5. Tomonari Furukawa and John G. Michopoulos, "Elastic Characterization of Laminated Composites Based on Multiaxial Tests", Journal of Composite Structures, Vol. 86, pp. 269-278, 2008.
- 6. Tomonari Furukawa and John G. Michopoulos, "Computational Design of Multiaxial Tests for Characterizing Anisotropic Materials", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 74, pp. 1872-1895, 2008.
- 7. H. KANAYAMA, T. SHINGOH, S. NDONG-MEFANE, M. OGINO, R. SHIOYA and H. KAWAI, "Numerical Analysis of Hydrogen Diffusion Problems Using the Finite Element Method", Theoretical and Applied Mechanics, Vol.56, pp.389-400, Feb. 2008.
- 8. Yasuyuki KANDA, Hiroshi OKADA, Shigeo IRAHA, Jun TOMIYAMA, Kohei MUROTANI and Genki YAGAWA, "Fracture mechanics parameter computation using tetrahedron finite element with drilling degrees of freedoms (Virtual crack closure-integral method for generalized tetrahedron finite element)", Trans JSME Series A, 74-742, pp. 837-844, 2008.
- 9. Y. Kanto, "General post processing program for J-integral calculation around arbitrary shaped cracks", Advanced Materials Research, Vols 33-37, pp.827-832, 2008.
- E. KATAMINE, Y. KAWASE and H. AZEGAMI, "Shape Optimization of Thermal Forced Convection Fields", Heat Transfer Asian Research, 37(5), pp. 313-328, Jul. 1, 2008.
- H. KAWAI, M. OGINO, R. SHIOYA and S. YOSHIMURA, "Vectorization of Polygon Rendering for Off-line Visualization of a Large Scale Structural Analysis with ADVENTURE System on the Earth Simulator", Journal of the Earth Simulator, Vol. 9, pp.51-63, Mar. 2008.
- 12. David Kellermann, Tomonari Furukawa and Don Kelly, "Strongly Orthotropic Continuum Mechanics and Finite Element Treatment", International Journal for Numerical Methods in Engineering, in print.

- 13. M. KOGANEMARU, T. IKEDA and N. MIYAZAKI, "Residual Stress Evaluation in Resin-Molded IC Chips Using Finite Element Analysis and Piezoresistive Gauges", Microelectronic Reliability, Vol.48, No.6, pp.923-932, 2008.
- H. KOTAKE, R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI and N. MIYAZAKI, "Transient Hydrogen Diffusion Analyses Coupled with Crack-tip Plasticity under Cyclic Loading", International Journal of Pressure Vessels and Piping, Vol.85, No.8, pp.540-549, 2008.
- 15. Benjamin Lavis, Tomonari Furukawa and Hugh F. Durrant-Whyte, "Dynamic Space Reconfiguration for Bayesian Search and Tracking with Moving Targets", Autonomous Robots, Vol. 24, No. 4, pp. 387-399, 2008.
- Shen Hin Lim and Tomonari Furukawa, "Calibration-free Image Sensor Modelling Using Mechanistic Deconvolution", Sensors and Transducers, Vol. 90, pp. 195-208, 2008.
- 17. Shen Hin Lim and Tomonari Furukawa, "Calibration-free Probabilistic Image Sensor Model for Bayesian Search and Tracking", International Journal of Automation and Control (IJAAC), in print.
- Lin Chi Mak, Mark Whitty and Tomonari Furukawa, "A localisation system for an indoor rotary-wing MAV using blade mounted LEDs", Sensor Review, Vol. 28, Issue 2, pp. 125-131, 2008.
- 19. Lin-Chi Mak and Tomonari Furukawa, "A ToA-based Positioning Technique with NLOS Mitigation Using Low-frequency Sound", Advanced Robotics, Vol. 22, No. 5, pp. 507-526, 2008.
- 20. Hou Michael Man, Tomonari Furukawa, Mark Hoffman and S. Imlao, "An Indirect Implicit Technique for Piezoelectric Material Characterisation", Computational Materials Science, 9 pages, in print.
- 21. R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, "The Critical Length of Shear Bands in Metallic Glass", Scripta Materiallia, Vol.59, No.1, pp.107-110, 2008.
- 22. John G. Michopoulos, John Harmanson and Tomonari Furukawa, "On the Robotic Identification of the Constitutive Response of Composite Materials", Journal of Composite Structures, Vol. 86, pp. 154-164, 2008.
- 23. K. MUROTANI and G. YAGAWA, "Hierarchical meshing for the adaptive finite elements", Computational Methods in Applied Sciences, Springer, 2008.
- 24. M. OGINO, R. SHIOYA and H. KANAYAMA, "An Inexact Balancing Preconditioner for Large-Scale Structural Analysis", Journal of Computational Science and Technology, Vol. 2, No. 1, pp.150-161, May. 2008.
- 25. H. OKADA, H. KAWAI and K. ARAKI, "A virtual Crack Closure-Integral Method (VCCM) to Compute the Energy Release Rates and Stress Intensity Factors based on Quadratic Tetrahedral Finite Elements", Engineering Fracture Mechanics, Vol. 75, pp. 4466–4485, Nov. 2008.
- H. OKADA, H. KAWAI, K. ARAKI and T. MIYAZAKI, "Three-Dimensional Crack Propagation Analysis based on VCCM (Virtual Crack Closure-Integral Method) for Tetrahedral Finite Element", Advanced Materials Research, Vols. 33-37, pp. 901-906, Apr. 2008.
- H. OKADA and S. KONDO, "Toward Structural Integrity Analyses based on a Temporal Multisclae Scheme", Proceedings of ICCES'08 (International Conference on Computational & Expeerimental Engineering and Scences), ICCES'08 online, Techscience press, Mar. 2008.
- 28. Takanori Ooya, Satoyuki Tanaka and Hiroshi Okada, "On the Linear Dependencies

of Interpolation Functions in s-Version Finite Element Method", JCST: Journal of Computational Science and Technology, Vol. 3, No. 1 (in Press), 2009.

- 29. T. SAEGUSA, G. YAGAWA and M. ARITOMI, "Topics of research and development on concrete cask storage of spent nuclear fuel", Nuclear Engineering and Design, Vol.238, pp.1168-1174, May. 2008.
- S. SHIMAMURA, K. SUGA, Y. EZAWA and S. AOKI, "Effects of Material Properties of Cue on Impact Behaviour in Follow and Draw Shots in Billiards", Journal of International Sports Engineering Association, Vol. 10, pp. 221-228, Jun. 2008.
- R. SHIOYA, M. OGINO, K. FUJINO, H. KANAYAMA and H. KAWAI, "Development of Parallel CAE System for Large Scale Problems Based on Computer Network", Journal of Advanced Materials Research, Vols. 33-37, pp.907-912, Feb. 2008.
- N. SHISHIDO, T. IKEDA and N. MIYAZAKI, "Strain measurement in a microstructure using digital image correlation for a laser-scanning microscopic image", Computer Modeling in Engineering and Sciences, Vol. 35, No. 1, pp.1-19, 2008.
- 33. S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, "Atomistic study of hydrogen distribution and diffusion around a {1 1 2}<1 1 1> edge dislocation in alpha iron", Acta Materialia, Vol.56, No.15, pp. 3761-3769, 2008.
- 34. S. TANAKA, H. OKADA, S. OKAZAWA and M. FUJIKUBO, "On fracture mecahnesis analysis using B-Spline wavelet finite element method", ICCES'08 (International Conference on Computational & Experimental Engineering and Scences), Proceedings of ICCES'08 (CD-ROM) & ICCES'08 online, Techscience press, Mar. 2008.
- 35. J. TSUCHIDA, T. FUJISAWA and G. YAGAWA, "Computational fluid dynamics on sounding mechanism in air-reed instruments", Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, vol.2, No.3, pp.375-381, 2008.
- Daniel Watman and Tomonari Furukawa, "A Visualization System for Analysis of Micro Aerial Vehicle Scaled Flapping Wings", Journal of Intelligent and Robotic Systems, Vol. 51, pp. 369-381, 2008.
- 37. Stephen Webb and Tomonari Furukawa, "Belief Driven Manipulator Visual Servoing in Less Controlled Environments", Advanced Robotics, Vol. 22, No. 5, pp. 547-572, 2008.
- 38. 青山大樹, 畔上秀幸, 村地俊二, 鬼頭純三, 石田義人, 川上紀明, 牧野光倫, "放熱量最大化を目的とした非定常熱伝導場の形状最適化(熱工学,内燃機関, 動力など)", 日本機械学会論文集 B 編, 74(743), pp. 1609-1616, 2008 年 7 月 25 日.
- 39. 入部綱清,藤澤智光,越塚誠一, "粒子法による大規模解析におけるノード 間通信の低減",日本計算工学会論文集,論文番号 20080020, 2008 年.
- 40. 小野寺誠, 西垣一朗, 廣喜充, 金剛力, "パラメトリックメッシュモーフィン グ技術の開発", 日本機械学会論文集 C 編, 74(742), pp.1594-1601, 2008 年 6 月.
- 41. 河合浩志,岡田裕,荒木宏介, "四面体有限要素向け仮想き裂閉口積分法 (VCCM)を用いた三次元き裂進展解析のためのメッシュ生成技術",日本 機械学会論文集 A 編, 74 巻, 742 号, pp. 819-826, 2008 年 6 月.

- 42. 神田康行, 岡田裕, 伊良波繁雄, 富山潤, 室谷浩平, 矢川元基, "回転自由度 を有する四面体要素の破壊力学パラメータ算出法(一般化四面体要素用の仮 想き裂閉口積分法)", 日本機械学会論文集 A 編, 第 74 巻, 742 号, pp.837-844, 2008 年 6 月.
- 43. 神田康行,岡田裕,伊良波繁雄,富山潤,矢川元基,"回転とひずみ自由度を 有する一般化有限要素用の仮想き裂閉口積分法",日本機械学会論文集 A 編, 第 74 巻,740 号, pp.550-557,2008 年.
- 44. 北村優太, 宮崎則幸, 真淵俊朗, 縄田輝彦, "MgF2 単結晶アニール後の複屈 折シミュレーション", 日本結晶成長学会誌, 第35巻第3号, pp.189-197, 2008 年.
- 45. 小金丸正明, 池田徹, 宮崎則幸, 友景肇, "樹脂封止実装時の応力に起因した nMOSFET の DC 特性値変動評価と電子移動度も出るに関する検討", 電子 情報通信学会論文誌 C, 第 J91-C 巻第4号, pp. 257-272, 2008 年.
- 46. 小竹広和, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, "鈍化き裂まわりの非定常な水素 拡散-弾塑性連成解析", 日本機械学会論文集 (A 編), Vol.74, No.737, pp.28-36, 2008 年.
- 47. 宍戸信之, 池田徹, 宮崎則幸, 中村健太郎, 宮崎政志, 猿渡達郎, "デジタル 画像相関法を用いた電子実装部の熱ひずみ分布計測", 材料, Vol.57, No.1, pp.83-89, 2008 年.
- 48. 島村真介, 須賀一博, 江澤良孝, 青木 繁, "ビリヤードにおけるキューの衝 突特性評価 (球にスピンを与える場合)", 材料, Vol.57, No.10, pp.1043-1048, 2008 年 10 月.
- 49. 島村真介,須賀一博,江澤良孝,青木繁,"ビリヤードにおけるキューの衝突 特性評価(球の軌道をカーブさせる場合)",日本機械学会論文集(C編)74 巻748号,2008年12月.
- 50. 武富紳也, 松本龍介, 宮崎則幸, " a 鉄における(112)[111]刃状転位芯近傍の 水素占有位置に関する原子モデルを用いた研究", 材料, 第 57 巻第 8 号, pp.768-773, 2008 年.
- 51. 田中智行, 岡田裕, "ウェーブレットガラーキン法による応力集中問題の解析(第四報, 基底関数の一次独立性を判定するための前処理)", 日本機械 学会論文集 A 編, 74 巻, 742 号, pp. 850-857, 2008 年 6 月.
- 52. 永井政貴, 池田徹, 宮崎則幸, "熱応力下の三次元異方性異種材界面き裂の 応力拡大係数解析", 日本機械学会論文集 (A 編), Vol.74, No.738, pp.240-247, 2008 年.
- 53. 長岡慎介, 矢川元基, "フリーメッシュ法による境界処理について", 日本 機械学会論文集 A 編, 第 74 巻, 742 号, pp.827-836, 2008 年.
- 54. 野村吉昭, 池田徹, 宮崎則幸, "熱応力下の異方性異種材界面接合端部の特 異応力場解析", 日本機械学会論文集 (A 編), Vol.74, No.737, pp.37-44, 2008 年.
- 55. 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およびエロージョン発生領域の予測",日本機械学会論文集 B 編,第74巻,746号,pp.2116-2123,2008年10月.

56. 皆川浩一, 早房敬祐, 須賀一博, M.リダ, 天谷賢治, 青木繁, "遺伝的アルゴ リズムと境界要素法を用いた多段階腐食逆解析", 材料と環境, 57, pp.282-287, 2008 年.

### 8.2. 総説・解説・エッセイ

- 1. 須賀一博, "逆解析を利用した鉄筋腐食の検出", 検査技術, Vol.13, No.10, 2008 年.
- 2. 宮崎則幸, 松本龍介, 松本壮平, 小竹広和, 井上義規, "計算力学解析手法の 水素脆化への適用", ENEOS Technical Review, 第50巻, 第2号, pp.48-55, 2008 年.
- 3. 宮崎則幸,池田徹, "電子デバイス信頼性評価問題への計算力学の適用",機 械の研究,第60巻第7号, pp.717-728, 2008年.
- 4. 矢川元基, "エネルギー問題:科学技術面からの視点", 学術の動向, 第148 号, pp.68-69, 2008 年7月.
- 5. 矢川元基, "巻頭言: 点と線", 日本機械学会論文集 A 編, Vol.74, No.742, p.3, 2008 年.
- 6. 矢川元基, "初めての海外経験", 原安協だより, Vol.223, pp.11-15, 2008 年.

## 8.3. 招待講演

- 1. H. AZEGAMI, "Consciousness of regularity for sensitivities in shape and topology optimization problems", 日本機械学会設計工学・システム部門 No. 08-67 特別 講演会『最適設計-TOPOLOGY AND SHAPE OPTIMIZATIONS II』資料, pp. 7-13, Nov. 25, 2008.
- 2. 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 (UPDATED)", the 7th International Workshop on the Integrity of Nuclear Components, Muju, Korea, Jul. 2-4, 2008.
- 3. 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", Workshop on Probabilistic Fracture Mechanics, Lunghwa University of Science and Technology, Taipei, Taiwan, Nov. 26, 2008.
- 4. H. MATSUBARA and G.YAGAWA, "ENRICHED FREE MESH METHOD WITH SUPERCONVERGENT PATCH RECOVERY SCHEME", (Invited Lecture), 8th World Congress on Computational Mechanics, Venice, Italy, Jul. 3, 2008.
- 5. N. MIYAZAKI, "Applications of Computational Solid Mechanics to Material Strengths of Single Crystals for Electronic/Optical Use", Lecture at Institute of Aeronautics and Astronautics, National Cheng Kung University, Tainan, Taiwan, Dec. 12, 2008.
- 6. N. MIYAZAKI, "Atomistic Simulations of Hydrogen Embrittlement", (Keynote lecture), The Third International Symposium on Advanced Fluid Solid Science and Technology in Experimental Mechanics (ISEM 2008), Tainan, Taiwan, Dec. 8, 2008.
- N. MIYAZAKI, "Transient Hydrogen Diffusion Analyses with Crack-tip Plasticity", International Hydrogen Energy Development Workshop 2008, Fukuoka, Feb. 7, 2008.
- 8. K. MUROTANI and G.YAGAWA, "Hierarchical Meshing and Its Applications to Adaptive Large-Scale FEM", (Invited Lecture), 8th World Congress on Computational Mechanics, Venice, Italy, Jul. 1, 2008.
- 9. Y. SAKAI, "Large deformation analysis using SPH method", COSEIC International conference, 2008, Seoul University, Apr. 6-7, 2008.
- 10. G. YAGAWA, "Hierarchical Adaptive meshing for large-scale moving boundary problems", (Invited Lecture), ECCOMAS JUBILEE SYMPOSIUM, Wien, Austria, Feb. 20, 2008.
- G. YAGAWA, "ON THE ENRICHED FREE MESH METHOD: AN ACCURATE MESHLESS TECHNIQUE", (Plenary Lecture), 2008 SKKU-Toyo University Joint Forum on Computational Mechanics, Aug. 29, 2008.
- 12. 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", 第 228 回九州大学数値解析セミナー (Q-NA) セミナー, 2008 年 12 月 9 日.
- 13. 酒井譲, "SPH 法による構造解析の最前線", 土木学会, 第 6 回衝撃シンポジウム論文集, pp.201-225, 東京, Dec. 12, 2008.
- 14. 宮崎則幸, "水素脆化現象評価に関わるナノからマクロレベルシミュレーション",

(基調講演), 第52回材料強度と破壊総合シンポジウム, 東京, 2008年4月3日.

- 15. 矢川元基, "安全と安心", (特別講演), 井上円了生誕 150 周年記念講演会, 2008年10月18日.
- 16. 矢川元基, "安全と安心について", (特別講演), 東洋大学学術講演会, 東京, 2008 年 5 月 28 日.
- 17. 矢川元基, "安全と安心について", (特別講演), 災害救助技術情報協会講演会, 2008 年 11 月 17 日.
- 18. 矢川元基, "階層型アダプティブメッシュとその応用", (基調講演), PUCA'08, 2008 年 10 月 31 日.
- 19. 矢川元基, "亀裂進展のための大規模・高精度な計算力学手法について", (基調講演), 第52回材料強度と破壊総合シンポジウム, 東京, 2008年4月3日.
- 20. 矢川元基, "計算力学について", (特別講演), ESI アカデミックセミナー, 2008 年 7月 9-10 日.
- 21. 矢川元基, "シミュレーション科学の将来展望", (特別講演), 名古屋工業大学大学院創成シミュレーション工学専攻創設記念シンポジウム, 2008 年 7 月 25 日.
- 22. 矢川元基, "リスク情報をどのように使えばよいか", (招待講演), 第 39 回原子力 発電に関する安全特別セミナー, 2008 年 3 月 4 日.

## 8.4. 講演論文·口頭発表

- 1. T. ABE, S. SATO, K. TAGUCHI and Y. TAMURA, "Acoustic Wave Analysis for a DBD Plasma Actuator", AIAA 39th Plasmadynamics and Lasers Conference, Seattle, U. S. A.,Jun. 23-26, 2008.
- 2. H. AZEGAMI, Y. IWATA, S. KAIZU and E. KATAMINE, "Error Estimate of the Shape Gradient for the Stokes Problem by Finite Element Method", Proceedings of the Fifth China-Japan-Korea Joint Symposium on Optimization of Structural and Mechanical Systems (Web site), pp. 1-6, Jun. 16, 2008.
- Y. EZAWA, H. Suzuki and Y. Shinkawa, "Three-Dimensional Mesh Generation using the Crossed Circles Method", The joint VIII World Conference on Computational Mechanics (WCCM VIII) and V European Congress on Computational Methods in Applied Science and Engineering (ECCOMAS V), Jun. 2008.
- 4. T. IKEDA, Y. NOMURA and N. MIYAZAKI, "Stress Intensity Factor of an Interfacial Corner between Anisotropic Bimaterials under Thermal Stress", International Conference on Computational and Experimental Engineering and Science (ICCES'08), Honolulu, USA, Mar. 2008.
- 5. T. IKEDA, Y, NOMURA and N. MIYAZAKI, "Stress Intensity Factors Analyses of a Three-Dimensional Interface Corner between Dissimilar Anisotropic Materials under Thermal Stress", 8th World Congress on Computational Mechanics (WCCM8) in Conjunction with 5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008), Venice, Italy, Jul. 2008.
- 6. T. IKEDA, N. SHISHIDO and N. MIYAZAKI, "Full-field Displacement Measurement Using Digital Image Correlation Method for a Laser Scanning Microscopic Image", The Third International Symposium on Advanced Fluid Solid Science and Technology in Experimental Mechanics (ISEM 2008), Dec. 2008.
- 7. EIJI KATAMINE, YOSHIYUKI KAWASE and HIDEYUKI AZEGAMI, "Shape Identification of Forced Heat-Convection Fields", Proceedings of the 8th World Congress on Computational Mechanics (CD-ROM), pp. 1-2, May. 30, 2008.
- 8. David Kellermann and Tomonari Furukawa, "Intrinsic Field Tensors for Strongly Orthotropic Continua", 22nd International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2008), 2 pages, Adelaide, Aug. 25-29, 2008.
- 9. Y. KITAMURA, N. MIYAZAKI, T, MABUCHI and T. NAWATA, "Birefringence Simulation of Annealed Ingot of Magnesium Flioride Single Crystal ", The 3rd IMPACT and The 10th EMAP Joint Conference, Taipei, Taiwan, Oct. 2008.
- M. KOGANEMARU, T. IKEDA, M. KOMORI, N. MIYAZAKI, Y. YAMAGUCHI and H. TOMOKAGE, "Evaluation of Stress-induced effect on Electronic Characteristics of nMOSFETs Using Mechanical Stress Simulation and Drift-Diffusion Device Simulation", 2nd Electronics Systm-Integration Technology Conference (ESTC 2008), London, UK, Sep. 2008.
- Benjamin Lavis, Yasuyoshi Yokokohji and Tomonari Furukawa, "Estimation and Control for Cooperative Autonomous Searching in Crowded Urban Emergencies", IEEE International Conference on Robotics and Automation, 7 pages, Pasadena, California, May. 19-23, 2008.
- 12. Hitoshi Matsubara and Genki Yagawa, "Enriched Free Mesh Method with Superconvergent Patch recovery Scheme", 8th. World Congress on Computational Mechanics, Jun. 2008.

- R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI, Y. INOUE and N. MIYAZAKI, "Estimation of Hydrogen Distribution Around Dislocations Based on First Principle Calculations", 2008 International Hydrogen Conference Effects of Hydrogen on Materials, Wyoming, USA, Sep. 2008.
- 14. R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI, S. MATSUMOTO, Y. INOUE and N. MIYAZAKI, "Atomistic Study of Interaction between Hydrogen Atoms and Dislocations around Mode I Crack Tip", 8th World Congress on Computational Mechanics (WCCM8) in Conjunction with 5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008), Venice, Italy, Jul. 2008.
- R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI, S. MATSUMOTO, Y. INOUE and N. MIYAZAKI, "Molecular Dynamics Study of Hydrogen Effects on Mode I Crack Growth Behavior in bcc-Fe", International Hydrogen Energy Development Workshop 2008, Fukuoka, Feb. 2008.
- 16. R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI and N. MIYAZAKI, "Molecular Statics Study of Hydrogen Occupation Sites around a (112)[111] Edge Dislocation in Bcc-Fe", International Hydrogen Energy Development Workshop 2008, Fukuoka, Feb. 2008.
- R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI, S. MATSUMOTO, Y. INOUE and N. MIYAZAKI, "Molecular Dynamics Study of Hydrogen Effects on the Fracture Behavior of bcc-Fe Single Crystals", ICCES'08: International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences, Hawaii, USA, Mar. 2008.
- Hou Michael Man and Tomonari Furukawa, "Implicit Constitutive Modeling based on the Energy Principle", 22nd International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2008), 2 pages, Adelaide, Aug. 25-29, 2008.
- 19. K. MUROTANI and G. YAGAWA, "Noise Filtering of Images Using Generalized Singular Spectrum Analysis", The 16-th International Conference in Central Europe on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision 2008, pp.47-54, University of West Bohemia, Plzen, Czech Republic, Feb. 4-7, 2008.
- K. MUROTANI and G. YAGAWA, "Hierarchical Meshing and Its Applications to Adaptive Large-Scale FEM", 8th. World Congress on Computational Mechanics (WCCM8), MS055C (2pages in CD-ROM, a2103.pdf), Venice, Italy, Jun. 30 - Jul. 5, 2008.
- 21. K. MUROTANI, "High-speed adaptive analysis using hierarchical mesh for crack propagation", SKKU-Toyo Univ, Joint Forum on Computational Mechanics, Sungkyunkwan University, Seoul, Aug. 28, 2008.
- 22. M. NAGAI, T. IKEDA and N. MIYAZAKI, "Stress Intensity Factors Analyses of Three-Dimensional Interface Cracks Using the Tetrahedral Finite Elements", International Conference on Computational and Experimental Engineering and Science (ICCES'08), Honolulu, USA, Mar. 2008.
- 23. K. NISHIMURA, R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI and N. MIYAZAKI, "Molecular Dynamics Study on Dislocation Activities in Iron Specimens Including Hydrogen", 8th World Congress on Computational Mechanics (WCCM8) in Conjunction with 5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008), Venice, Italy, Jul. 2008.
- 24. H. OKADA, H. KAWAI, Y. KANDA, T. FUJISAWA and G. YAGAWA, "FULLY AUTOMATED 3D-CRACK PROPAGATION ANALYSES BASED ON TETRAHEDRAL FINITE ELEMENTS", 8th. World Congress on Computational

Mechanics (WCCM8), CD-ROM, Jul. 2008.

- 25. H. OKADA, H. KAWAI, T. FUJISAWA, T. IRIBE and Y. KANDA, "On the Development of Fully Automated 3-D Fracture Mechanics Analysis System", The 8th International Symposium of the Japan Welding Engineering Society, Nov. 2008.
- H. OKADA, "Three-dimensional crack propagation analysis based on VCCM (virtual crack closure-integral method) for tetrahedral finite element", International Conerence on Computational Engineering, Seoul Korea (Seoul National University), Apr. 2008.
- H. OKADA and S. KONDO, "Toward Structural Integrity Analyses based on a Temporal Multisclae Scheme", ICCES'08 (International Conference on Computational & Expeerimental Engineering and Scences), Proceedings of ICCES'08 (CD-ROM), ICCES'08 online, Techscience press, Mar. 2008.
- 28. K. Sasaki, N. Iwasa, T. Kurosu, K. Saito, Y. Koike, Y. Kamita and Y. Toyoda, "Thermal and Structural Simulation Techniques for Estimating Fatigue Life of an IGBT Module", Proceedings of the 20th International Symposium on Power Semiconductor Devices & IC's, pp. 181-184, May. 2008.
- 29. M. SHIMODA, S. MOTORA and H. AZEGAMI, "Practical Shape Optimization Method for Design of Three Dimensional Structure", Proceedings of the 8th World Congress on Computational Mechanics (CD-ROM), pp. 1-2, May. 30, 2008.
- 30. N. SHISHIDO, T. IKEDA and N. MIYAZAKI, "Full Field Displacement Measurement Using Digital Image Correlation mathod for Laser Scanning Confocal Microscopic Image", International Conference on Computational and Experimental Engineering and Science (ICCES'08), Honolulu, USA, Mar. 2008.
- 31. Kazuhiro Suga, Koichi Minagawa and Shigeru Aoki, "Multi Resolution Inverse Analysis for Corrosion Detection with Net Element and Genetic Algorithm", WCCM8, Italy, Jun. 30, - Jul. 4, 2008.
- 32. Kazuhiro Suga, "How to Use Inverse Analysis on Engineering", Xinjiang University, China, Jan. 7, 2008.
- 33. Kazuhiro Suga, "Inverse Problems on Engineering", Northwestern Polytechnical University, China, Jan. 13, 2008.
- S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, "Atomistic Study of Hydrogen Diffusion Around a Dislocation in Alpha Iron", 2008 International Hydrogen Conference Effects of Hydrogen on Materials, Wyoming, USA, Sep. 2008.
- 35. S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, "Effect of Hydrogen on (110)[111] Edge Dislocation Mobility in Alpha Iron", 8th World Congress on Computational Mechanics (WCCM8) in Conjunction with 5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008), Venice, Italy, Jul. 2008.
- 36. S. TAKETOMI, R. MATSUMOTO and N. MIYAZAKI, "Molecular Dynamics Study of Hydrogen Diffusion around a (112)[111] Edge Dislocation in Alpha Iron", International Conference on Computational and Experimental Engineering and Science (ICCES'08), Honolulu, USA, Mar. 2008.
- 37. Y. TAMURA, Y. NAKAJIMA, J. UEBAYASHI and Y. MATSUMOTO, "Evaluation and Application of Large-Scale Ultrasound Propagation Simulation in Heterogeneous Media", WCCM8-ECCOMAS2008, Venice, Italy, Jun. 30 - Jul. 4, 2008.
- 38. Y. TAMURA and Y. MATSUMOTO, "Improvement of Bubble Model for

Cavitating Flow Simulations", Cavitation Forum 2008, Coventry, UK, Jul. 7-9, 2008.

- S. TANAKA, H. OKADA, S. OKAZAWA and M. FUJIKUBO, "On fracture mecahncis analysis using B-Spline wavelet finite element method", ICCES'08 (International Conference on Computational & Experimental Engineering and Scences), Proceedings of ICCES'08 (CD-ROM), ICCES'08 online, Techscience press, Mar. 2008.
- 40. S. TANAKA, H. OKADA, S. OKAZAWA and M. FUJIKUBO, "On fracture mecahncis analysis using B-Spline wavelet finite element method", 8th. World Congress on Computational Mechanics (WCCM8), CD-ROM, Jul. 2008.
- 41. Yoshitaka Wada, Takuji Hayashi and Masanori Kikuchi, "Mesh quality improvement for unstructured quadrilateral multigrid analysis", Proceedings of ICCES'08(CD-ROM), 6 pages, Paper No. : ICCES0820071228488, ICCES'08 USA, Honolulu, Hawaii, USA, Mar. 16-22, 2008.
- 42. Daniel Watman and Tomonari Furukawa, "A System for Motion Control and Analysis of High-Speed Passively Twisting Flapping Wings", IEEE International Conference on Robotics and Automation, 6 pages, Pasadena, California, May. 19-23, 2008.
- 43. 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", RIMS Workshop 数値解析における理論・手法・応用 講演論文集, pp. 11-13, 2008 年 11 月 12 日.
- 44. 畔上秀幸,海津聰,"連続体の位相最適化問題に対する H1 勾配法",日本 応用数理学会 2008 年度年会講演予稿集, pp. 301-302, 2008 年 9 月 19 日.
- 45. 安達元,須賀一博,早瀬正則,青木繁, "流れ場における腐食のシミュレーション",日本材料学会東海支部,2008年3月14日.
- 46. 安達元, 須賀一博, 江澤良孝, "配管内の壁面近傍流れを考慮したカソード 防食の最適化", 第21回計算力学講演会, CD-ROM, 2008 年 11 月.
- 47. 池田 徹, 野村吉昭, 宮崎則幸, "熱応力下の三次元接合構造物中に存在す る異方性異種材接合角部の応力拡大係数解析",日本機械学会第 21 回計算 力学講演会, 那覇市, 2008 年 11 月.
- 48. 井上義規, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, "第一原理計算と原子間ポテンシャルを用いた応力特異点まわりの水素トラップエネルギー分布の評価", 日本機械学会第21回計算力学講演会, 那覇市, 2008 年 11 月.
- 49. 井上義規, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, "第一原理計算による弾性ひずみ が水素の溶解熱に及ぼす影響の評価", 第13回分子動力学シンポジウム, 鹿 児島市, 2008 年 5 月.
- 50. 岩井孝広, 畔上秀幸, "大変形を考慮した接触する弾性体の形状同定", 日本機械学会第21回計算力学講演会講演論文集 (CD-ROM), pp. 724-725, 2008 年11月3日.
- 51. 岩田侑太朗, 畔上秀幸, 海津聰, "ストークス問題における形状勾配の誤差 評価に関する数値例", 日本応用数理学会 2008 年研究部会連合発表会, 首都 大学東京 南大沢キャンパス, 2008 年 3 月 8.
- 52. 岩田侑太朗, 畔上秀幸, 片峯英次, "Navier-Stokes 問題における形状最適化 問題の数値解法", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会講演論文集 (CD-ROM), pp. 514-515, 2008 年 11 月 2 日.

- 53. 上田真広, 宍戸信之, 池田 徹, 宮崎則幸, "デジタル画像相関法を用いた接 着剤層中のき裂先端ひずみ場測定", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 那覇市, 2008 年 11 月.
- 54. 梅村公博, 畔上秀幸, "リンク機構における形状最適化問題の定式化", 日本機械学会第21回計算力学講演会講演論文集 (CD-ROM), pp. 540-541, 2008 年11月2日.
- 55. 江澤良孝, "CAEに適した要素分割技術", 第21回計算力学講演会, CD-ROM, 2008 年 11 月.
- 56. 江澤良孝, "構造解析における諸問題", 計算科学フロンティアフォーラム, 2008 年 9 月.
- 57. 大野信忠, 岡田裕, 萩原一郎, 金山寛, "JCST-計算力学部門英文ジャーナルについて", 日本機械学会, 第21回計算力学講演会講演論文集, CD-ROM, 2008 年 11 月.
- 58. 大嶺快仁, 富山潤, 伊良波繁雄, 松原仁, 神田康行, "MPS 法によるビンガム 塑性流体の流動解析", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 沖縄, 2008 年 11 月.
- 59. 陸茉莉花, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, "原子モデルを用いた粒界特性と 水素トラップ量の関係の検討", 日本機械学会第21回計算力学講演会, 那覇 市, 2008 年 11 月.
- 60. 陸茉莉花, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, "粒界特性が水素拡散挙動に与える影響の分子動力学解析", 第 13 回分子動力学シンポジウム, 鹿児島市, 2008 年 5 月.
- 61. 岡田裕, 河合浩志, "き裂のパラメトリックスタディや進展解析のための三次元き裂の自動解析システム",日本機械学会,第21回計算力学講演会講演論文集, CD-ROM, 2008 年 11 月.
- 62. 岡田裕, 矢川元基, "「構造健全性評価用 次世代自動き裂進展解析システムの構築」プロジェクトの研究成果",日本機械学会第21回計算力学講演会, 沖縄,2008年11月.
- 63. 岡田裕, 近藤俊平, "時系列マルチスケール手法による繰返し負荷を受ける 弾塑性材料の解析(疲労と疲労き裂進展解析を目指して)", 日本機械学会, M&M 材料力学カンファレンス(CD-ROM), 2008 年 9 月.
- 64. 岡田裕,河合浩志,"大規模三次元(疲労)き裂進展解析システムの開発", 計算工学講演会論文集, Vol. 13, No. 1, pp. 269-272, 2008 年 5 月.
- 65. 岡田裕,河合浩志,"大規模三次元(疲労)き裂進展自動シミュレーションシステムの開発",日本機械学会 2008 年度年次大会講演論文集, Vol.1,日本機械学会 No.08-1, pp. 7-8, 2008 年 8 月.
- 66. 荻野正雄, 塩谷隆二, 河合浩志, 吉村忍, "IBDD-DIAG 法を用いた 2 億自由 度規模原子炉圧力容器フルモデルの地震応答解析", 第 13 回計算工学講演 会論文集, Vol.13, No.2, pp.649-652, 2008 年 5 月.
- 67. 荻野正雄, 塩谷隆二, 河合浩志, 宗清尚平, "2億自由度の原子炉容器地震応 答シミュレーションの並列サーバサイド可視化", 第 13回計算工学講演会 論文集, Vol.13, No.2, pp.653-654, 2008 年 5 月.
- 68. 荻野正雄, 塩谷隆二, 金山寛, 宗清尚平, "MPC を考慮した大規模構造解析

向けの並列バランシング前処理法",第 21 回計算力学講演会, 08-33, pp.900-901, 2008 年 11 月.

- 69. 尾崎弘明, 中林靖, 矢川元基, "円孔付き 2 次元問題におけるき裂進展のニ ューラルネットワークによる評価", 日本機械学会 M&M2008 材料力学カン ファレンス, 2008 年 9 月.
- 70. 尾崎弘明, 中林靖, 矢川元基, "ニューラルネットワークによるき裂進展方向の予測", 日本機械学会 関東支部第14期総会講演会, 2008 年 3 月 15 日.
- 71. 尾崎弘明, 中林靖, 矢川元基, "ニューラルネットワークを用いた3点曲げ 試験解析におけるき裂進展方向の評価", 第57回理論応用力学講演会, 2008 年6月11日.
- 72. 尾崎弘明, 中林靖, 矢川元基, "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 21 回計算力学講演会, 沖縄, 2008 年 11 月.
- 73. 落合和明, 中林靖, "CUDA を用いた行列ベクトル積の高速化手法に関する 検討", 日本機械学会第21回計算力学講演会, 沖縄, 2008 年 11 月.
- 74. 小野寺誠, 西垣一朗, 廣喜充, 金剛力, "パラメトリックメッシュモーフィン グ技術の開発", 日本機械学会第18回設計工学・システム部門講演会, pp.156, 2008年11月.
- 75. 河合浩志,岡田裕, "三次元破壊力学解析のための四面体メッシュ自動生成 (任意複雑全体形状モデルへの拡張)",計算工学講演会論文集, Vol. 13, No. 1, pp. 253-256, 2008 年 5 月.
- 76. 河合浩志,岡田裕, "大規模三次元(疲労)き裂進展有限要素法解析システムの開発",日本材料学会,第57期学術講演会講演論文集 pp.63-64,2008 年5月.
- 77. 河合浩志, 荻野正雄, 塩谷隆二, 吉村忍, "領域分割法における反復法を用いた領域 FEM 計算", 第21回計算力学講演会, 08-33, pp.904-905, 2008 年 11 月.
- 78. 神田康行,岡田裕,伊良波繁雄,富山潤,室谷浩平,矢川元基,"回転自由度 を有する四面体要素用の仮想き裂閉口積分法による混合モード破壊力学解 析",日本機械学会第21回計算力学講演会,沖縄,2008年11月.
- 79. 関東康祐, "任意要素分割/任意積分径路形状に対応したJ積分評価手法", 計算力学講演会,琉球大学,沖縄,2008年11月1-3日.
- 80. 関東康祐, 鬼沢邦雄, 吉村忍, "非破壊検査の精度による破壊確率への影響", 第17回電磁現象および電磁力に関するコンファレンス, 日立, 2008年11月 20-21日.
- 81. 貫野敏史, 宍戸信之, 池田 徹, 宮崎則幸, 田中宏之, 畑尾卓也, "デジタル 画像相関法を用いた熱サイクルをうける多層基板中のはんだバンプの非線 形ひずみ計測", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 那覇市, 2008 年 11 月.
- 82. 貫野敏史, 宍戸信之, 池田 徹, 宮崎則幸, 田中宏之, 畑尾卓也, "デジタル 画像相関法と有限要素法を用いた多層基板中のはんだ接合部の熱サイクル "疲労強度評価", Mate 2009: 第15回エレクトロニクスにおけるマイクロ接 合・実装技術シンポジウム, 横浜市, 2009年1月.
- 83. 北川政宏, 酒井譲, "粒子法解析におけるボリュームデータの応用手法と人

体頭部損傷解析",計算工学講演会論文集,第13卷,第2号,pp.291-294,2008.

- 84. 北村優太, 宮崎則幸, 真淵俊朗, 縄田輝彦, "フッ化マグネシウム単結晶アニ ール後の複屈折解析", 日本機械学会第21回計算力学講演会, 那覇市, 2008 年11月.
- 85. 木村隆, 松原仁, 山城建樹, 富山潤, 伊良波繁雄, "3 次元 Enriched Free Mesh Method の開発および性能評価", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 沖 縄, 2008 年 11 月.
- 86. 黒川哲郎, 室谷浩平, 矢川元基, "クーロン的に生成された階層メッシュに よるアダプティブ亀裂進展解析", 日本機械学会第21回計算力学講演会, 沖 縄, 2008 年 11 月.
- 87. 黒川哲郎, 室谷浩平, 矢川元基, "大規模高速な階層メッシュを用いたき裂 進展解析のためのアダプティブ解析", 第 57 回理論応用力学講演会, pp.379-380, 2008 年 6 月 10-12 日.
- 88. 黒川哲郎, 矢川元基, "Level of detail を用いた亀裂進展のアダプティブ解析", 関東支部第 14 期総会講演会, 2008 年 3 月 15 日.
- 89. 桑原達彦, 松本龍介, 宍戸信之, 池田 徹, 宮崎則幸, "AFM 画像へのデジタ ル画像相関法の適用・面外変形を考慮した変位分布計測法の検討", 第 25 回センサ・マイクロマシンと応用システムシンポジウム, 那覇市, 2008 年 10 月.
- 90. 桑原達彦, 松本龍介, 宍戸信之, 池田 徹, 宮崎則幸, "AFM 画像へのデジタ ル画像相関法の適用における計測誤差の分析", 第 13 回分子動力学シンポ ジウム, 鹿児島市, 2008 年 5 月.
- 91. 桑原達彦, 宍戸信之, 松本龍介, 池田 徹, 宮崎則幸, "AFM 画像へのデジタ ル画像相関法の適用-面外変形の考慮と精度向上に関する検討", 日本機械 学会 M&M2008 材料力学カンファレンス, 草津市, 2008 年 9 月.
- 92. 小金丸正明, 池田 徹, 小森正輝, 宮崎則幸, 友景 肇, "デバイス内部の応 力分布を考慮した nMOSFET の DC 特性変動でバイスシミュレーション", 日 本機械学会第 21 回計算力学講演会, 那覇市, 2008 年 11 月.
- 93. 小金丸正明,池田 徹,小森正輝,宮崎則幸,友景 肇,"有限要素法応力解 析とデバイスシミュレーションによる実装応力に起因した nMOSFET の DC 特性変動評価",第18回マイクロエレクトロニクスシンポジウム, MES2008, 京都市,2008年9月.
- 94. 小竹広和,高木知弘,松本龍介,武富紳也,宮崎則幸, "Phase-field 法を用いたステンレス鋼のマルテンサイト変態下での水素拡散解析",日本機械学会第21回計算力学講演会,那覇市,2008年11月.
- 95. 小林陽介, 矢川元基, "Enriched Free Mesh Method と超大規模並列構造解析 の親和性の検証", 日本学術会議 第 57 回理論応用力学講演会, 2008 年 6 月 11 日.
- 96. 小林陽介, 矢川元基, "Enriched Free Mesh Method による超大規模並列構造 解析",日本機械学会 関東支部第14 期総会講演会, 2008 年 3 月 15 日.
- 97. 小林陽介, 矢川元基, "並列 Enriched Free Mesh Method による 3 次元構造解 析",日本機械学会 関東支部ブロック合同講演会 2008 おやま,小山,2008 年9月19日.

- 98. 小林陽介, 矢川元基, "並列 Enriched Free Mesh Method による超大規模 3 次 元構造解析",日本機械学会 第 21 回計算力学講演会,沖縄, 2008 年 11 月 3 日.
- 小林陽介, 矢川元基, "領域分割法による並列 Enriched Free Mesh Method", 日本シミュレーション学会 第27回日本シミュレーション学会大会,2008年 6月19日.
- 100.近藤俊平, 岡田裕, "時系列マルチスケール法による弾塑性材料の繰返し負荷問題の有限要素法解析",中国四国支部 第46期総会・講演会,2008年3月.
- 101.酒井譲, 岸野祐介, "粒子法を用いた災害シミュレーションにおける自然地 形・都市構造モデル生成方法",計算工学講演会論文集,第13巻,第2号, pp.873-874,2008.
- 102.酒井譲, "SPH 法による電磁場解析", 第 21 回計算力学講演会論文集, pp.174-175, 2008.
- 103.酒井譲, "SPH 法を用いたき裂進展解析", 第 21 回計算力学講演会論文集, pp.181-182, 2008.
- 104.佐藤允俊,田村善昭,"直角直交解適合格子法によるロケットノズル周りの 流れ解析",第 22 回数値流体力学シンポジウム,東京,2008 年 12 月 17-19 日.
- 105.塩崎聖治, 崎山幸紀, 高木周, 松本洋一郎, "不均一触媒反応のマルチスケー ル解析", 日本機械学会第21回計算力学講演会 CD-ROM 論文集, pp. 159-160, 沖縄, 2008 年 11 月.
- 106.塩谷隆二, 荻野正雄, 金山寛, 藤野圭, "大規模可視化を考慮したネットワー ク型 CAE システムの構築", 第 13 回計算工学講演会論文集, Vol.13, No.2, pp.927-928, 2008 年 5 月.
- 107.塩谷隆二, 荻野正雄, "スーパーコンピュータによる大規模原子炉圧力容器 解析", 第21回計算力学講演会, 08-33, pp.49-50, 2008 年 11 月.
- 108. 宍戸信之,池田 徹,宮崎則幸, "デジタル画像相関法を用いたレーザ顕微 鏡観察による回路基板内部のひずみ分布計測",第18回マイクロエレクト ロニクスシンポジウム, MES2008,京都市,2008年9月.
- 109. 宍戸信之,池田徹,宮崎則幸,"レーザ走査共焦点顕微鏡を用いたデジタル 画像相関法によるひずみ分布計測",第 14 回エレクトロニクスにおけるマ イクロ接合・実装技術シンポジウム (Mate 2008),横浜, 2008 年 2 月.
- 110.島村真介,須賀一博,江澤良孝,青木 繁, "ビリヤードにおけるキューと球 の衝突特性評価 -球にスピンを与える場合-",日本機械学会関東支部ブ ロック合同講演会 2008 おやま,小山,2008 年9月.
- 111.下田昌利, 元良新太郎, 畔上秀幸, "圧力荷重下のソリッド体の形状最適化", 日本機械学会 2008 年度年次大会講演論文集, pp. 191-192, 2008 年 8 月 3 日.
- 112.下田昌利, 岩佐恭平, 畔上秀幸, "シェル構造の形状設計のための最適化手法", 日本機械学会第18回設計工学・システム部門講演会講演論文集, pp. 1-4, 2008 年 9 月 25 日.
- 113.下田昌利, 元良新太郎, 畔上秀幸, "ソリッド体の境界面問題に対する形状 最適化(応力分布のコントロール)", 日本機械学会第21回計算力学講演会

講演論文集 (CD-ROM), pp. 532-533, 2008 年 11 月 2 日.

- 114.新川幸洋, 江澤良孝, "自動分割に適した高精度可変節点数要素の研究", 第 21回計算力学講演会, CD-ROM, 2008 年 11 月.
- 115.新谷浩平, 畔上秀幸, "楽器の形状最適化に関する試み", 日本応用数理学会 2008 年研究部会連合発表会, 首都大学東京 南大沢キャンパス, 2008 年 3 月 8 日.
- 116.須賀一博,皆川浩一,早房敬祐, M.リダ,天谷賢治,青木繁, "遺伝的アルゴ リズムと網目要素を用いた多段階逆解析による鉄筋腐食検出",日本機械学 会 第 21 回計算力学講演会,琉球大学,沖縄,2008 年 11 月 1-3 日.
- 117.鈴木隼人, 江澤良孝, 矢川元基, "接触解析によるロータリキルンの強度検 討", 日本機械学会 関東支部第14期総会講演会, 2008 年 3 月 14-15 日.
- 118.鈴木隼人, 江澤良孝, 矢川元基, "接点処理型有限要素法によるき裂解析の 精度向上に関する基礎検討", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 沖縄, 2008 年 11 月.
- 119.鈴木隼人, 江澤良孝, 矢川元基, "節点処理型有限要素法の熱応力下におけ るき裂問題への適用", 日本材料学会 第 57 期学術講演会, 2008 年 5 月 23-25 日.
- 120.鈴木隼人, 江澤良孝, 矢川元基, "フリーメッシュ法による熱応力下におけ るき裂解析", 第 57 回理論応用力学講演会, 2008 年 6 月 10-12 日.
- 121.鈴木隼人, 江澤良孝, 矢川元基, "フリーメッシュ法による熱応力場におけ る応力拡大係数解析", 日本計算工学会 第13回計算工学講演会, 2008 年5 月19-21 日.
- 122.鈴木隼人, 江澤良孝, 矢川元基, "フリーメッシュ法を用いた熱応力場にお けるき裂進展シミュレーション", 第 27 回 日本シミュレーション学会大会, 2008 年 6 月 19-20 日.
- 123.鈴木隼人, 江澤良孝, 矢川元基, "節点処理型有限要素法によるき裂解析の 精度向上に関する基礎検討", 第21回計算力学講演会, CD-ROM, 2008 年11 月.
- 124.高宮広樹, 岡田裕, 酒井譲, 福井泰良, "SPH 法を用いた傾斜機能材料の半溶 融加工の解析", 日本機械学会, 第 21 回計算力学講演会講演論文集, CD-ROM, 2008 年 11 月.
- 125.高宮広樹, 岡田裕, 酒井譲, "SPH 法を用いた金属基複合材料の半溶融加工の解析", 中国四国支部 第46 期総会講演会, 2008 年 3 月.
- 126.武富紳也, 松本龍介, 宮崎則幸, "α鉄における {112} <111> 刃状転位射出応 力拡大係数に及ぼす水素の影響の考察", 日本機械学会第 21 回計算力学講 演会, 那覇市, 2008 年 11 月.
- 127.武富紳也,松本龍介,松本壮平,宮崎則幸,"き裂先端まわりの水素分布と転 位射出応力拡大係数に関する原子モデルによる検討",第13回分子動力学 シンポジウム,鹿児島市,2008年5月.
- 128.武富紳也, 松本龍介, 宮崎則幸, "原子モデルにもとづく刃状転位芯近傍水 素トラップエネルギー解析", 第 13 回分子動力学シンポジウム, 鹿児島市 2008 年 5 月.
- 129.田中智行, 岡田裕, "B スプラインウェーブレットガラーキン法における基

底関数の一次独立性を判定するための前処理",計算工学講演会論文集, Vol. 13, No. 1, pp. 305-308, 2008 年 5 月.

- 130.田中智行, 岡田裕, 岡澤重信, 藤久保昌彦, "B スプラインウェーブレットガ ラーキン法を用いた破壊力学解析に関する研究",計算工学講演会論文集, Vol. 13, No. 1, pp. 257-260, 2008 年 5 月.
- 131.タンコポ, 酒井譲, "SPH 法の補間精度に関する基礎的検討", 計算工学講 演会論文集, 第13巻, 第2号, pp.297-298, 2008.
- 132.中尾賢二, 岡澤重信, 西口浩司, 野田重穂, 高木周, 岡田裕, 松澤照男, 熊畑 清, 北脇知己, 川島康弘, "オイラー型統一解法による個体-流体連成解析 手法", 日本機械学会 2008 年度年次大会講演論文集, Vol.6, 日本機械学会 No.08-6, pp. 99-100, 2008 年 8 月.
- 133.中尾賢二, 岡澤重信, 野田重穂, 高木周, 岡田裕, 松澤照男, 熊畑清, 北脇知 己, 川島康弘, "ボクセルデータと親和性のある固体-流体連成解析手法", 計算工学講演会論文集, Vol. 13, No.2, pp. 613-616, 2008 年 5 月.
- 134.長岡慎介, 矢川元基, "高精度フリーメッシュ法の破壊力学への適用", 日本機械学会 関東支部第14 期総会講演会, 2008 年 3 月 14 日.
- 135.長岡慎介, 矢川元基, "リメッシング機能を導入した EFMM による破壊解 析", 第 57 回理論応用力学講演会, 2008 年 6 月 11 日.
- 136.中林靖, 増田正人, 吉村忍, "LES モデルによるサッカーボールの空力係数の評価",日本機械学会第21回計算力学講演会,沖縄,2008年11月.
- 137.中村有里,青山大樹,畔上秀幸, "音場構造連成系における放射音圧を最大 化する構造の形状最適化",日本機械学会第 21 回計算力学講演会講演論文 集 (CD-ROM), pp. 516-517, 2008 年 11 月 2 日.
- 138.中村有里,新谷浩平,青山大樹,畔上秀幸,"楽器のための形状最適化問題", 日本応用数理学会 2008 年度年会講演予稿集, pp. 297-298, 2008 年 9 月 19 日.
- 139.長谷高明, 畔上秀幸, "サスペンション部品の疲労強度に関する形状最適化の検討", 自動車技術会 2008 年秋季大会講演論文集, pp. 15-18, 2008 年 10 月 22 日.
- 140.八反田大介,岡田裕, "重合メッシュ法プログラムの並列化に関する研究", 中国四国支部 第46期総会・講演会,2008年3月.
- 141.古館裕樹, 島村真介, 須賀一博, 江澤良孝, "カルマンフィルターを用いた配 管内の腐食同定", 第 21 回計算力学講演会, CD-ROM, 2008 年 11 月.
- 142.古館裕樹, 島村真介, 須賀一博, 江澤良孝, 青木繁, "弾性波による配管内の 腐食同定逆解析", M&M2008 材料力学カンファレンス(材料力学部門企画), CD-ROM, 2008 年9月.
- 143.古舘裕樹, 島村真介, 須賀一博, 江澤良孝, "カルマンフィルタを用いた配管 内の腐食同定", 日本機械学会 第 21 回計算力学講演会, 琉球大学, 沖縄, 2008 年 11 月 1-3 日.
- 144. 堀池弘一,池田 徹,松本龍介,宮崎則幸,"混合モード荷重下も異種結晶材 料接合端部の特異応力場と分子静力学を用いた転位発生限界に関する研究", 日本機械学会第21回計算力学講演会,那覇市,2008年11月.
- 145. 増田正人, 中林靖, "自己組織化マップを用いたフリーキックサポートシス テムの高精度化", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 沖縄, 2008 年 11

月.

- 146.松田和敏,池田 徹,宮崎則幸, "多層基板の熱変形挙動の予測およびそのパッケージの反り解析への適用", Mate 2009:第15回エレクトロニクスにおけるマイクロ接合・実装技術シンポジウム、横浜市,2009年1月.
- 147.松原仁, 富山潤, 伊良波繁雄, "高精度有限要素法のための Patch by Patch 型静的縮合手法の開発", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 沖縄, 2008 年 11 月.
- 148.松原仁,山城建樹,富山潤,伊良波繁雄, "Patch by Patch 型混合法とスムージング効果",日本機械学会第21回計算力学講演会,沖縄,2008年11月.
- 149.松本龍介,宮崎則幸,"金属ガラス中の臨界せん断帯長さに関する検討",第 13回分子動力学シンポジウム,鹿児島市,2008年5月.
- 150.松本龍介,武富紳也,宮崎則幸, "原子モデルを用いた格子欠陥への水素と ラップ状態に関する検討",日本機械学会第21回計算力学講演会,那覇市, 2008年11月.
- 151.松本龍介,井上義規,武富紳也,松本壮平,宮崎則幸,"弾性ひずみによる水素トラップに関する検討(転位芯まわりとき裂先端での水素濃度分布)",第 13回分子動力学シンポジウム,鹿児島市,2008年5月.
- 152.室谷浩平, 矢川元基, "階層メッシュを用いた高速なアダプティブ PH 解析 とその応用", 日本機械学会第21回計算力学講演会, 沖縄, 2008 年 11 月.
- 153.室谷浩平, 矢川元基, "大規模高速な階層メッシュを用いた非圧縮性流体の アダプティブ解析", 第 57 回理論応用力学講演会, pp.143-144, 2008 年 6 月 10-12 日.
- 154.室谷浩平, "大規模高速な階層メッシュを用いたアダプティブ解析とその応用", 第3回計算力学シンポジウム, 東洋大学白山キャンパス, 2008 年3月 18日.
- 155.室谷浩平, "階層メッシュを用いたアダプティブ PH 法による亀裂進展解析", 東京理科大学, 2008 年 6 月 20 日.
- 156.室谷浩平, "高速なアダプティブメッシングを実現するための階層的なメッシュデータ構造とその応用", 第3回 計算科学フロンティアフォーラム, 東京ガーデンパレス(お茶の水),2008年9月9日.
- 157.山城建樹, 伊良波繁雄, 富山潤, 松原仁, "コンクリート弾性係数のバラつき に関する数値解析的検討", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 沖縄, 2008 年 11 月.
- 158.和田義孝, 折田陽平, 菊池正紀, "6 面体要素による 3 次元表面き裂メッシュ 生成手法", 日本機械学会第 21 回計算力学講演会講演論文集(CD-ROM), No.08-33, 2008-11, 2 pages, 沖縄, 2008 年 11 月 1-3 日.
## 8.5. 受賞

- G. YAGAWA, "IACM Award", Jul. 3, 2008.
  矢川元基, "井上円了賞", 2008 年 6 月 6 日.
  矢川元基, "日本計算工学会功績賞", 2008 年 5 月 21 日.

## 9. 結び

本報は、2008年度の活動をとりまとめたものである.なお、2009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20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