

[特集] 計算力学の最前線

編集担当：機動編集C班（50音順）

牛島 省*・内山裕三・奥谷 丈・河村直明・
栗山善昭・坂井伸一**・水田哲生・宮井真一郎・
向山公人

8月号特集記事：特別委員（50音順）

樫山和男・寺田賢二郎・西村直志

[*8月号特集主査, **特集副主査]

企画趣旨

計算機を利用して力学理論に従う支配方程式の数値解を求めることを基礎とする「計算力学」は、最近のコンピュータハードウェアの飛躍的な進歩に加えて、数学モデルや解法に関する多くの研究成果により、工学における問題解決のための強力な手法として近年注目されている。土木工学においても、混相流や粒状体などの複雑系の現象や、従来分科の枠内で発展してきた理論および実験的な手法のみでは扱うことの難しい複合的な問題などに対して、「計算力学」に寄せられる期待は大きい。

この「計算力学」は日々進歩を続けており、新たな展開を見せている。また、土木工学の「計算力学」は、他学会でも研究が進められている基盤技術を共有することが多い。以上を考慮して、本特集では、「計算力学」の最前線とこれからの展開に重点を置いて、土木工学を中心に、他学会の活動も視野に入れた研究の取り組みと関連するトピックを紹介し、問題解決法の将来展望を考える場を提供する。

計算力学の生い立ちとこれから



菊池 昇

KIKUCHI Noboru

Ph.D.

ミシガン大学工学部機械工学科

1970年代初頭、米国テキサス大学オースティン校に The Texas Institute for Computational Mechanics と名づけられた研究所がエリック・ベッカー (Eric Becker) 教授らによって設立され、ティンズリー・オーデン (J. Tinsley Oden) 教授がアラバマ大学ハンツビル校から所長として招聘され、非線形力学や応用数学を前提にした画期的な活動を全世界に向けて始めたとき、計算力学 (Computational Mechanics) という言葉と世界が生みだされた。それによって構造工学分野での発展に限定されていた有限要素法などの数値解析手法に新しい生命が与えられ、1980年、ジェイスン・レモン (Jason Lemon) 博士によって計算工学 (CAE: Computer Aided Engineering) が提唱されるに至った。ティモシェンコ等によって形成された応用力学 (Applied/Engineering Mechanics) が1950年代と1960年代の隆盛期を経て次第にその活動の勢いを失いかけてきたとき、新しい活力をもたらすものとして有限要素法などの解析手法に基盤を置いた新しい形の応用力学として計算力学が生み出され、その後大きく発展し、従来の応用力学のもっていた範囲に留まらず、工学全体の進展を支える重要な分野として認められるに至っている。

土木工学を専攻し有限要素法の初歩を学んだだけの筆者が、計算力学を提唱していたテキサス大学に留学したとき、計算力学を学ぶために、固体・流体力学など基本的な教科のほか、偏微分方程式論を中心とした関数解析、連立一次方程式や固有値問題の解法に関する数値解析、有理力学とよばれていた連続体力学理論、モーダル解析法を中心とした縮小設計・解析モデルを作るためのモード拘束法、大規模プログラムを開発するためのプログラミング言語などの授業を取るようにオーデン教授から指示されたときの途方に暮れた思いを忘れることができない。しかし、あのとき履修することを要求された教科内容こそ、彼らが目指した計算力学という新しい世界を理解するための鍵であるし、そうした科目の履修を世界各地から集まってきた学生たちに要求し、実行したところに新分野を形成しようとする勢いがあったことも確かである。学んだこと、研究したことを現実の工学問題を解くために応用する。理論に従って計算を進め、正確な数値やグラフ、図で現象や設計の仕組みや妥当性をわかりやすく説明する。客観的であるために、また普遍性や一般性をもたせるために、数学や物理化学の言葉で記述し理論を展開する。できる限りコンピュータ・ソフトに研究などの成果を焼き直し、

多くの人々が利益を享受することができるようにする。計算力学という新しい分野をプロモートするために企画運営された集中講義やセミナーシリーズ、国際会議、ワークショップ。ソフト開発のためのベンチャー的な会社の興し方。州政府や連邦政府への働きかけなど、計算力学に関連するさまざまなことを学んだに足らず、未だに計算力学のもつ世界や可能性の全体を見渡すことができない。それでも計算力学の面白さだけは、計算力学という言葉で最初に発し、それを形作ろうとした多くの研究者たちから学んだように思う。

実務に応用できる計算力学を、数学的な力学理論に基盤を置きつつコンピュータ・ソフトとして具現化し、多くの人たちに使ってもらえることを目指す。そのように教えた人々は、テキサス大学だけではなく、世界各地で同時代的に発生し、大きな時代のうねりを作り上げ、計算力学という言葉を使わないまでも、同じような考えで、同じような目的に向かって走り、今の世界的な広がりをもつ計算力学を形成している。このような活動から MSC.NASTRAN, ABAQUS, ANSYS, LS-DYNA, FLUENT, STAR-CD, MOLDFLOWなどの世界的なソフトが生まれ育ち、そして新しい産業が作り上げられている。数百要素の非線形モデルが解けたらといって興奮していた初期の時代から、大学院の授業の計算力学演習で、数十万、数百万要素のモデルを当たり前のように取り扱う時代。塑性変形がどのように進展していくのかを、構造物の崩壊過程を、運動による熱の発生で粘性が変化し流れ場が大きく変わる様子を、電磁場が微小な薄板構造に与える力学的な影響をなど、大学のクラスルームでもシミュレーション・解析しながら、具体的に現象の「見える化」を行うことで学生たちとともに学べるまでになっている。

このような発展した計算力学やそのソフトを日常的な道具として使える若い人たちが作る構造物や機械、デバイス、材料などはどのようなものだろう、と想像するだけでも楽しい。間違いなく、これからの土木構造物やさまざまな施設は、計算力学の成果を取り込み、素晴らしい機能と安全性を発揮するだろうし、さらに、そうしたものの設計や施工に大きく寄与できる新たな計算力学を作り上げていく研究者や開発者、設計者も数多く輩出するに違いないと思うだけで、明日への大きな希望が湧いてくる。計算力学とは、そうしたものである。

第1章 計算力学への招待

1-1

計算力学とは

竹内則雄

TAKEUCHI Norio
正会員 工博
法政大学教授 工学部 土木工学科

コンピュータと計算力学

算盤を考慮に入れなければ計算を行わせる機械の最初は1642年、B. Pascal が19才のときに開発したダイヤル式の加算機であり、現在のコンピュータ理論の基礎となる原理はイギリスのC. Babbage が1822年に作ったといわれている。1949年、ケンブリッジ大学において現在の主流であるノイマン型計算機EDSACが開発され、1950年代になると商用のコンピュータが出回るようになった。

20世紀の半ばに出現した計算機は、その後、高速化ならびに大容量化が進んだが、それに伴って理論的あるいは実験的研究だけでは十分究明することができなかった力学、物理現象をコンピュータの力をかりて研究する新しい分野が台頭してきた。これが、

- ・差分法 (FDM : Finite Difference Method)
- ・有限要素法 (FEM : Finite Element Method)
- ・境界要素法 (BEM : Boundary Element Method)

といった離散化手法を中心とする「計算力学 (Computational Mechanics)」である。

A. Samuelsson¹⁾ は、G. Kron が1944年に発表した変位法による3次元骨組み構造の弾性解析に関する研究は現在の有限要素法の手順そのものであると述べている。今日では橋梁などの土木構造物の設計において、日常的に変位法による骨組み構造解析が使われている。このほかに先駆的な論文としては、1954年のJ. Argyrisによるエネルギー法と構造解析の論文や1956年のM.J. Turnerらの直接剛性法 (direct stiffness method) の研究などがあり、計算機が出現した時期と一致している。近年では、大規模並列計算技術やグリッドコンピューティング技術など、ハードウェアの性能を最大限に引き出すための解析法なども研究されており、道具として計算機を使う計算力学は、正にコンピュータとともに歩んできたといえる。

理論・実験力学と計算力学

20世紀半ばに生まれた計算力学は、数学を駆使する伝統的な理論力学を基礎とする応用力学から派生した学問分野であるといわれることがある。実際、計算力学という分野が認知されるようになったのは、IACM (International Association for Computational Mechanics) が設立された1980年前後からではないかと思われる。IACMは1984年にはIUTAM (the International Union of Theoretical and Applied Mechanics) に加盟している。一方、実験力学というとらえ方もそれほど古い話ではないと思うが、いつ頃からそのような呼び方をするようになったかは定かではない。

実験力学が現象を解明するための実験方法のみの学問ではないのと同様に、計算力学も決して計算方法のみを対象とした学問ではない。もちろん、理論力学も同じである。川井忠彦先生²⁾ は、「計算力学はコンピュータ・シミュレーションを有力な武器として、一つ一つの課題の本質を見極め、課題の解決を図る学問」であると述べておられ、計算力学の本質が問題解決にあることは理論力学や実験力学と同じである。

実験的事実から理論が展開され真理が解き明かされる場合、理論が展開され実験で事実が確認される場合など、理論力学と実験力学は互いに影響を与えながら発展してきたが、これに、より複雑な条件等を考慮した計算力学的アプローチを加えることで解の普遍性が高まる。近年では、計算力学的アプローチから新しいタイプの材料が開発され、実際にものを作って確認されるというケースも生まれてきている。

主に使う道具が計算なのか、実験あるいは理論なのかといった違いは若干あるが、近年のようにコンピュータが普及してくると、多かれ少なかれ計算して確認することが前提となり、これら三つの力学的アプローチの境はますます曖昧なものとなっていくにちがいない。

現象のモデル化と計算力学

問題が複雑化するにつれ、学際的な分野での課題が数多く残されてきたが、このような課題を解決するためには従来の専門ごとに縦割りされた研究体制ではなく、異なった分野の専門家が協力しあう横断型の研究体制が必要である。計算力学の威力が発揮されようとする分野はこの学際的問題が多く、下記のようにさまざまな分野においてその応用が活発に研究されている。

- ・固体力学 (材料力学, 構造力学, 地盤力学等)

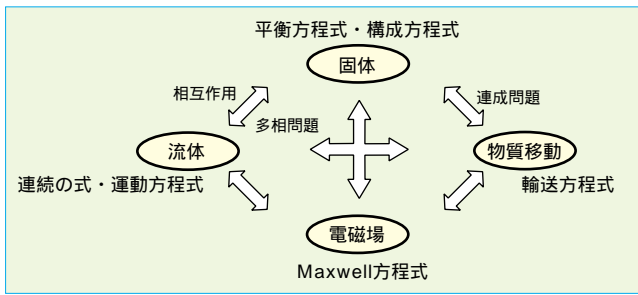


図-1 多重複合物理現象の関係

- ・流体力学（流体機械学，空気力学，気象学等）
- ・移動現象論（熱伝達，物質移動，反応工学等）
- ・電磁気学，音響学，...

図-1 は，固体，流体，物質移動，電磁場に関して，それぞれの現象を支配する代表的な方程式を示したもので，実際の物理現象はこれらが複雑に関連しあっている。

数値シミュレーションに基づく計算力学は，さまざまな利点を有する一方で，いくつかの問題点も指摘されている。最も重要な問題点の一つとして現象のモデル化をあげることができる。計算機の性能が向上したとはいえ，シミュレーションによって自然現象そのものを再現することはほとんど不可能である。

そこで，問題となっている現象の中から支配的な要因を抽出し，シミュレーションに適するようにモデル化する必要がある。自然界における多重複合物理現象（multi-physics phenomena）をいかに単純化して数理モデル（微分方程式）により表現するかが解析結果の善し悪しを左右するといっても過言ではない。このモデル化のことを数理モデル化（mathematical modeling）とよぶ。

当然，計算された結果には数理モデル化を行った時点での仮定が含まれているため，実際の現象を忠実に再現したことにはならないが，モデル化時に抽出した現象に対する挙動は計算結果に反映されているはずである。

一方，計算機の性能向上に伴って，個別要素法や粒子法などの離散的なモデルを用いた計算力学的アプローチも固体，流体を問わず，さまざまな分野で利用されるようになってきた。こういった手法によるモデル化を数理モデル化に対して物理モデル化とよぶこともある。

計算力学と信頼性

計算力学におけるもう一つの重要な問題点は解の信頼性であろう。信頼性の問題，すなわち得られた解の評価であるが，現状では経験によるところが大である。

最近ではこれを助ける道具であるコンピュータ・グラフィックスの技術も進歩してきており，人間が理解しやすい状態で解析結果を表示できるようになってきた。こういった情報

処理技術に加えて誤差評価（error estimation）などの数学的手法を用いて提供された材料から最終的に人間が判断するというのが現状である。

また，物理モデル化においては連続体を粒子などの離散要素の集合体で表わしているが，コンピュータの計算能力にも限界があるため，ある程度の要素数（サイズ）で連続体を近似せざるを得ず，そのような意味での解の信頼性の問題も発生する。さらに，物理モデルを用いた解析ではマイクロレベルとマクロレベルを分けて考え，マイクロレベルの結果をマクロレベルの解析に反映する研究も進められている。材料開発には欠かせない研究につながると思うが，やはり，数学的な証明が難しい場合が多く，マルチスケール解析の信頼性向上に向けて盛んに研究が進められている。

上記以外にも計算力学の最先端では信頼性向上に向けてさらなる研究が進められており，こういった解析法に関わる研究も重要な計算力学分野の柱となっている。

計算力学の役割

計算力学は物理学，特に力学理論に裏づけられた数値シミュレーションに基づいており，主な利点として，

- ・コスト的問題の軽減化
- ・品質的問題の向上
- ・時間的問題の短縮化

をあげることができる。例えば，同じ実験を行うにしても，シミュレーションで検討を行いながら実験を行えば，実験回数を減らすことができ，コストの低減や時間の短縮につながるし，製造過程において条件設定をさまざま変えて検討することにより品質の向上を図ることもできよう。このように製造業における計算力学の役割は比較的明確で，認知されている。

一方，単に製品からみた効率化ばかりでなく，使用材料の削減や環境負荷の少ない材料の選択などといったエコデザインにおいても計算力学は密接な関係を有しており，また，地球環境問題や防災技術などにも貢献している³⁾。さらに，1～10 万年後の放射性廃棄物の影響に対する予測や，人体の手術シミュレーションなど，安全性に対する貢献も大いに期待される。

なお，計算力学がこういった役割を担い，社会的に評価されているのも，地味な研究ではあるが，解の品質保証につながる基礎的な研究が進められているからである。

参考文献

- 1 - Alf Samuelsson : Computational Mechanics 50 Years, Bulletin for The IACM, No.12, pp.6-7, 2002
- 2 - 川井忠彦ほか：計算力学入門，森北出版，1993
- 3 - 矢川元基編著：計算力学と社会，養賢堂，2002

西村直志

NISHIMURA Naoshi

正会員 工博

京都大学教授 学術情報メディアセンター

応用力学と計算力学

計算機以前の応用力学の研究は解析学と表裏一体の関係にあった。実際、応用力学の問題の多くは実は偏微分方程式の問題でもあった。しかし、仮にも現実の問題を解くことを目指す応用力学において、具体的な解を得ることは非常に大切である。その結果、固体力学における線形弾性論や、流体力学におけるポテンシャル流理論などの線形理論が発展した。しかし、所詮解析的に扱える問題には限界がある。こうして応用力学に手詰り感が出てきた 20 世紀中ごろに現われた潮流の一つが計算機の利用であった。当初は理論的な応用力学の補助的手段にすぎなかった計算機利用も、単純な線形問題から次第に対象を広げ、非線形連続体力学の分野にも進出するようになった。こうして計算力学とよばれる分野が成立した。このような発展の経緯からわかるように、計算力学の手法の多くは、実は偏微分方程式の数値解法である。そのような手法の代表的なものが差分法、有限要素法、および境界要素法である。以下ではこれらの手法について概観することとする。

差分法

差分法は微分学の成立以来使われてきた歴史のある方法であり、解析対象に規則的な格子を発生して微分商を格子点での未知関数値の差分におき換え、偏微分方程式を近似しようとするものである。この結果、格子点での未知数に関する代数方程式が得られ、これを解くことによってもとの偏微分方程式の近似解が得られる。差分法では、もとの方程式の性質や離散化の方法によって得られる代数方程式の性質が異なり、特に時間依存の問題では、得られる代数方程式が対角行列となって連立方程式を解かなくてよい陽解法と、そうでない陰解法に大きく分類される。時間によらない問題は連立方程式の解を要するのが普通である。いずれにせよ、差分方程式は局所的に成り立つ微分方程式の近似であるから、いかなる大規模問題においても一本の方程式に現われる

未知数はごく少数であるという特色をもっている。このため、陰解法の場合でも解くべき方程式は疎行列となり、陽解法の場合も、時間発展を計算するための演算は一般に非常に軽いものとなる。また、使用する格子の規則性に対応して、得られる行列も規則的な構造をとるのが普通である。

差分法は適用範囲が広いことが特徴で、原理的にはどのような偏微分方程式にも適用可能である。ただし、何らかの意味で元の微分方程式を近似している（適合であるという）差分方程式が意味のある数値解を与えるとは限らず、分割が十分細かくなった時に正解に近づくこと（収束性）や、時間依存の問題では長時間計算を行っても解が発散しないこと（安定性）が示されない差分スキームは解の品質保証もできないことになる。この結果、しばしば空間的な離散化と時間的な離散化の細かさに関する制約条件が課せられ、例えば、波動方程式系統の差分法では、大略、差分スキームの波速が真の波速より遅くならないことが要求される（Courant-Friedrichs-Lewy 条件）。

差分法は原理的にはどんな方程式にも適用可能と述べたが、特に流体の問題の解法としてよく使われている。そこでは流体の流れる方向を考慮することにより解の安定性を改善する風上差分に始まって、精度と効率を追求したありとあらゆる解法が提案されている。近年の日本発の手法としては、波形の崩れの少ない CIP 法がある。

このようにいまだに偏微分方程式の数値解法の王者としての地位を保っている差分法であるが、欠点がないわけではない。特に、ある程度改善されてはいるものの、領域形状に関する自由度が有限要素法ほど高くないこと、境界条件の導入に工夫がいること、また、これらの理由のために汎用コードが書きにくいことなどが欠点といえよう。このため、少なくとも構造工学においては、純粋な差分コードが使われることは少なくなり、CAE といえば普通有限要素法を指すようになって久しい。

有限要素法

計算力学におけるもう一方の雄は有限要素法である。有限要素法は工学では Clough らにより、数学では Courant により始められたといわれ、比較的新しい数値解法である。その方法は、ある基底関数の線形結合によって解を近似し、変分法によって係数を決めるというものであり、数学的には古典的な Ritz 法にすぎない。有限要素法を有限要素法たらしめているのはその基底関数のとり方である。有限要素法においては解析対象領域を要素とよばれる小領域に分け、その中で多項式等の簡単な形を有する「形状関数」を導入したうえで、これらを組み合わせて基底関数を作る。このように選

んだ基底が非ゼロであるのはごく少数の要素内のみであり、その結果、有限要素法の係数行列は差分と同様に疎になる。また、このような基底のとり方のもう一つの大きなメリットは、係数行列を作成するためのアルゴリズムが非常に簡潔に書けることであり、実際、要素のループを回して、その中で形状関数同士の係数行列への寄与を計算し全体的な係数行列へ足し込んでおけば良い。また、形状関数の特性上、本質的な境界条件（Dirichlet 条件）を満たすことが容易であり、変分法との親和性が非常に高い。このような基底のとり方の巧妙さが Ritz 法の一つに有限要素法という特別の名前を与えることを正当化するのである。

有限要素法は変分法に基づくとして述べたが、これには少々注釈が必要である。本誌の読者に馴染みの深い変分法といえば、構造力学におけるエネルギー原理であろう。すなわち、変位法（応力法）での（補）ポテンシャルエネルギー停留原理である。最小仕事とか、ひずみエネルギー最小とかの名前で習われたかもしれない。有限要素法の世界でも、最初はポテンシャルエネルギーを最小にするように基底の係数を決めるという考え方がとられていた。しかし、構造力学においてエネルギー原理より仮想仕事の方が上位の原理であることを想起すれば、仮想仕事の原理に基づいて有限要素法を構成する方が一般性が高いことが理解されよう。実際、今ではそのような方法が標準的となり、重みつき残差法とよばれている。この結果、Navier-Stokes 方程式のように汎関数の停留条件では書き難い問題への有限要素法の適用の道が開けた。世の中には仮想仕事の原理が書き下せない偏微分方程式もあるので、この意味で、有限要素法は差分法より適用範囲がやや狭いことにはなる。幸い、計算力学に関する限り有限要素法が適用できない問題はないと考えて良い。なお、数学の世界においても偏微分方程式の研究において変分法といえば実は仮想仕事の原理を指すことが普通になっている。

古典的な意味での変分法的考え方が有限要素法において役に立つこともある。例えば、線形弾性体の変形を変位法で解いた場合、ポテンシャルエネルギーは上から正解に近づくことがわかる。これは数値解は正解より堅めの挙動をとることを意味する。これを改善する目的で剛性を小さめに評価するための低減積分や、その結果発生する物理的でない変形をとるためのアワーグラスコントロールなどによって精度の改善が図られている。

有限要素法の精度を決める大きな因子は基底関数の選び方であり、種々の提案がなされている。その際、もっとも基本的な要件は、例えば力学の問題では選ばれた変形に関する基底関数が一定ひずみ状態を正確に表わし得るということである。実際、要素ごとに一定ひずみ・応力状態を表現で

きれば、メッシュを細かくすることによってどんな応力状態でも近似できることが直観的に理解されよう。さらに、圧密などの連成問題や、流速と圧力を未知数とする流体の解析などにおいて、未知量ごとにどのような基底関数を選ぶべきかといった研究が多数なされている。

このようにして有限要素法の研究は進み、形状や、境界条件の設定の自由度が高いことと相まって、今では多くの商用ソフトウェアが開発・市販されている。これらは線形解析や材料非線形解析に留まらず、ひと昔前は一部の理論家のみ知られていた非線形力学の概念までがコード化されている。一方で CAD を用いて設計を行うことが一般的になり、CAD データを与えれば有限要素メッシュが切れ、これを解析してその結果を可視化するという流れが CAE として定着している。

ここまでくると、有限要素法の利用における最大の問題点は、解析よりもむしろプリポストに移ってきているとさえいえる。例えば、3次元問題のメッシュは4面体に切るのは難しくないが、精度の面から要請の高い6面体メッシュを生成するのはいまだに困難とされている。Belytschko らはそれならメッシュを切らない有限要素法はできないのかと考えた。このようにしてメッシュレスとかエレメントフリーとかよばれる種々の手法が提案されている。これらは突き詰めていけばこれまでとは異なった基底のとり方を提案するものである。理論上のポイントは、さきほど述べた一定ひずみ状態を表わし得ることの保証と、局所性（疎行列を生成することといっても良い）を確保することにある。確かにこれらの基底関数は、高次の連続性を有する一方、不連続性が表わしやすいなどの従来の有限要素補間がない利点をもっている。しかし、これらの基底はアルゴリズムを複雑にし、本質的な境界条件の導入も困難にしている。これらの方法は果たして究極の有限要素法となるのか、それとも要素という概念を捨てたことによって元の Ritz 法に戻っただけなのか。著者はじっくり見極めようと考えている。

従来の有限要素法の枠組みからメッシュ作成の困難さを克服しようとする動きもある。例えば、CAD データから得られる画素の一つ一つを有限要素メッシュにしてしまおうというボクセル有限要素法や、基底関数の補間性を犠牲にするかわりに変形の自由度をあげようとする X-FEM などである。この他にも周期構造の理論である均質化法をはじめ、有限要素法に関わる新しい動きは数え切れないように思われる。

境界要素法

有限要素法の活況に比べて最近元気がないのが境界要素法である。古い歴史をもっている手法であるが、工学的に取

り上げられるようになったのは比較的新しく、1950年代の終ごろからである。その原理は集中荷重を重ね合わせて解を構成するというものであり、線形問題においてもっとも有効である。研究の世界にもバブルやらその崩壊やらがあり、境界要素法バブルが起きていた当時は、領域内部の問題を境界上の問題に置き換えることができるので、有限要素法や差分法などの領域型の解法に比べて未知数が少なくなる、波動の散乱問題などの無限領域を含む問題に有効である、精度も概して高く、特に応力集中や破壊の問題に強い、境界のみをメッシュに切れれば良いので、有限要素法のようにメッシュ分割がボトルネックになることもない、等々、喧伝されたものである。確かにこれらは事実ではあるが、境界要素法はそれをうち消してあまりある多くの欠点をもった手法でもある。特に問題になるのは、適用できる問題が限定されること、理論や数値的取り扱いが難しいこと、そして最大の問題点は行列が密であることである。例えば、立方体の一辺当たり n 個の要素に分割して問題を解く時、有限要素法や差分法では未知数の数 N は $O(n^3)$ となるが、係数行列の計算に必要な計算量も $O(N) = O(n^3)$ で収まる。一方、境界要素法は、未知数の数 N は $O(n^2)$ と少ないが、係数行列の計算量は $O(N^2) = O(n^4)$ になってしまう。すなわち、境界要素法は「未知数が少ない」という事実は、皮肉にも「大規模

問題に向かない」ことをも意味している。こうして、境界要素法バブル期にこの方法があたかも万能の手法であるかのような言い方がされたことが、かえって使ってみた人たちに失望感を与える結果となったのは大変不幸なことであった。最近では境界要素法の演算を $O(N)$ 程度の計算量で実行する高速多重極法という画期的な方法が考えられたが、境界要素法バブルがはるか昔に崩壊した今となつては、この手法の素晴らしさが理解されるまでにはまだまだ時間がかかりそうである。筆者は、境界要素法といういくつかの特定の用途には非常に有効な手法が、無理解のためにあまり使われていない現状を非常に残念に思う。この方法は、有限要素法や差分法と戦わせるのではなく、領域型の解法の欠点を補う形で使うのが正しいのである。

以上、偏微分方程式の数値解法である、いわば由緒正しい計算力学の手法について概観してきた。計算力学の手法には、これら以外にも、各種の不連続体の計算力学手法（決して由緒正しくないという意味ではない）や、並列計算、グリッドコンピューティングなど、もはや力学とよぶのは難しいものも含まれる。筆者の実力ではこれら全てをカバーすることは到底できないが、本特集には専門家中の専門家による多数の記事が組まれているので、これらを参照していただくこととしたい。



第2章 計算力学の挑戦

2-1 複雑流体を予測する

2-1-1

変わりゆく流体シミュレーション技術

藤井孝藏

FUJII Kozo

工博

文部科学省 宇宙科学研究所 宇宙輸送研究系教授

(要約) コンピュータの進歩とともに歩んできたCFD (数値流体力学) 技術は今一つの過渡期にさしかかっている。あらゆる技術においてそうであるように、黎明期にはこの技術が如何に使えるものかを誇示することに研究の方向が向かっていた。実用化が進み、市販のソフトウェアなども普及してきた結果、概念としてCFD 研究の方向を考え直す時期にきていると思う。ここではこれまでのCFD 研究を振り返って、考えるべきことまた遠い将来の姿を示してみたい。記述が筆者の専門である航空・宇宙分野中心となることをお許しいただきたい。

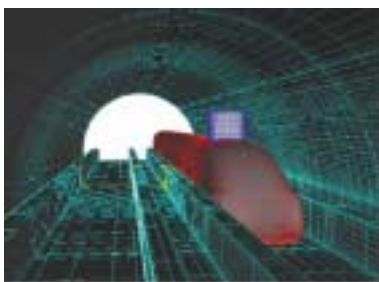
航空宇宙におけるCFD

航空宇宙を中心にCFD 研究の過去を振り返ると、1970年代から1980年代中盤にかけて「計算手法」の構築が、続いて実用問題に移行するのに伴い1990年頃にかけて「計算技術」の研究が盛んになった。開発された「計算手法」を利用して複雑な形状を対象としたシミュレーションを実施する

ための道具としての工夫である。「計算技術」として、図-1 (a) の重合格子法、同 (b) の非構格子法、そして (c) の直交格子法などが次第に登場してくる。これらによって複雑形状や移動、変形する物体周りの流れのシミュレーションは身近なものになってきた。広く一般の形状を扱うことが要求される市販ソフトウェアのほとんどが現在は非構格子法を利用している。1990年代に入ってから、市販のシミュレーションソフトウェアも充実してきており、企業の中でも市販ソフトウェア利用に切り替えたところも出てきた¹⁾。

そのスピノフ

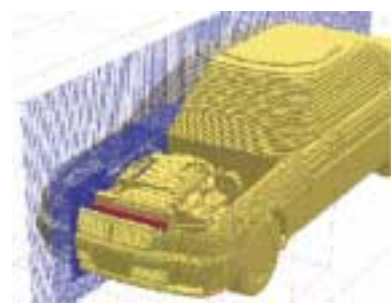
手前味噌になるが、米国を中心に研究が進んだこともあって、CFD の手法や技術に関する研究は航空宇宙分野を中心に進んできた。そこで開発された手法は、他分野へスピノフ的に波及効果となって利用されている。筆者自身の経験でいえば、1990年頃から新幹線列車やリニアモーターカーの車両先頭形状やトンネル緩衝口などの研究開発に関わらせていただいた (図-2)。使った技術は、万一のロケット燃料事故の際に起こる爆風伝播を考えるために開発した手法である。新幹線列車の速度は時速約300 km であり、航空宇宙分野でいうマッハ数は0.3程度である。これはスペースシャトルの着陸速度とほぼ同じであり、一般にこの程度の速度域では航空宇宙分野特有の空気の圧縮性は重要ではない。では何故航空宇宙分野でのソフトウェアが必要であったかというと、トンネル微気圧波とよばれる現象が課題であったせいである。列車が高速でトンネルに突入すると、トンネル内の空気が圧縮され、列車前方に強い圧力波が生じる。この圧力波はほぼ音の速さで出口へと進行し、外部環境にパルス状の波となって伝播する。これがトンネル微気圧波である。微気圧波はトンネル内の圧力変動に比べて一桁小さいがそれでも近



(a) 重合格子法 (藤井 (宇宙研) らによる) 協力: JR東海



(b) 非構格子法 (中橋 (東北大) らによる)



(c) 等間隔直交格子 (小野, 姫野ら (当時日産) による)

図-1 各種計算技術

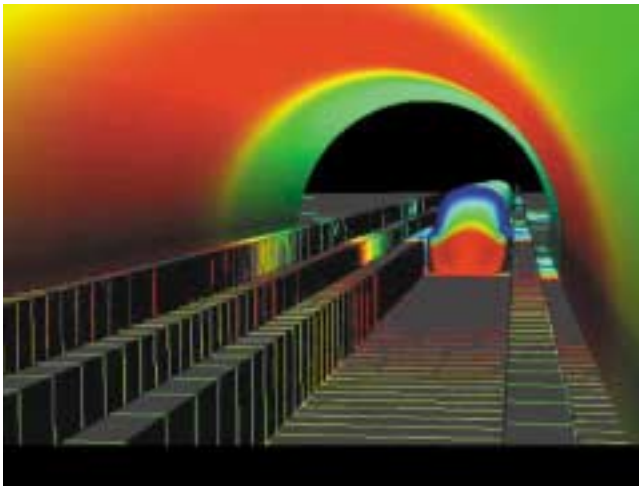


図-2 リニアモーターのトンネル突入（圧力分布） 協力：JR東海

隣への配慮から JR 各社では微気圧波に細心の注意を払っている。最近では、加えて列車突入や退出自体によって生ずるさらに微弱な圧力変動をも減衰させようとトンネル入口に設置される緩衝口の形状を最適化する工夫がなされている。

CFD 研究を再考する

リニアの例からもわかるように、技術としての CFD 研究の焦点は、より複雑な形状や状況をシミュレーションすることに注がれてきた。航空機でいえば、翼からはじまり、翼胴、尾翼付き、エンジン付き、さらにフラップなどを含んだシミュレーションへといった具合である。それにより CFD 技術の底辺も広がり、市販品を含め多数のソフトウェアが世に出回るようになった。PC の性能向上も著しく、いまや誰でも手軽にシミュレーションができる。混相流、燃焼流、他分野との連性問題などについては別の意見があるが、基本となる CFD 技術はある成熟度を迎えている。

しかし、CFD 研究とは技術としてその能力を誇示することだけではない。CFD を道具として流れ解析を行うことも CFD 研究である。風洞試験自体が目的ではなく、その結果を利用して現象を理解し設計に供するように、CFD を道具とした流れ解析は十分とは言えない。個々の研究者が思いつきで行う応用事例としての「CFD を道具とした流体解析」研究はあっても共通基盤を与えてくれるような系統的な CFD 研究は見あたらない。翼を例にとろう。一部の翼に対して実験データとのよい一致が得られたことで、CFD 研究者の興味はより複雑な形状へと移行してしまった。多数の翼を比べ、翼の特性について議論した論文などほとんど見あたらない。別の例をあげよう。図-3 のような再使用宇宙機形状を設計するとき必要となるのは形状、流れパラメータを広範囲に変化させたときの空力特性評価である。数百ケースに及ぶシミュレーション結果をデータベース化しておくことで今



図-3 単型再使用宇宙機研究用の機体（稲谷（宇宙研）らによる）

後の機体開発を効率的に行うことが可能となる。また、空間内の流れ場が得られるという CFD 独自の利点を活かせば背後にある流れメカニズムを知ることができる。ここでは基本形状を決めることが大切でボディフラップとか脚とか細かな部品を扱うのはこの次である。一つ一つの流れ計算には CFD にとって技術としての目新しさはないが、航空宇宙工学にとってはとても大切な研究である。

複雑物体にせよ、高度な乱流モデルにせよ、CFD 屋はこれまで CFD の力を誇示することに終始してきたため「CFD 屋のための CFD 研究」から抜け出せなかった。しかし、広い視野に立って見るとやるべきことはたくさん残されている。ちなみに、データベース構築に関して注意すべきは信頼性である。データベースには基礎となるシミュレーション技術の信頼性を確認しその情報を付与しておくことが大切である。

私自身は、今 CFD 研究者に期待されているのは

- (1) さらなる高度な計算技術の追求
- (2) 問題のモデル化の工夫 - 問題を抽象化、簡単化する
- (3) もの開発に関わる CFD 技術へ - 本当のニーズを意識した研究へと移行

の三つと考えている。(3) については、設計プロセスの理解と適材適所としての計算力学技術の利用というさらなる議論があるが紙面の都合で省略する。また(2)についてはふれないが、問題を簡単化する能力こそが CFD 研究者に問われていると思う。今後も(1)の方向の研究を続けることの必要性は言うまでもないが、述べてきたように(2)や(3)を意識した研究の大切さを忘れてはいけない。なお、この技術的な方向での話題に関しては、別の文献を参照されたい¹²⁾。

CFD が社会に入り込む日

新聞紙上などでもときどき話題に出るので GRID 技術をご

存じの方も多であろう。原子力研究所，理化学研究所，産業技術総合研究所，応用面では大阪大学や国立天文台などで研究が進められている。元々電力供給のネットワークのPOWER GRID に語源をもつGRID技術は計算資源の多様化，計算機資源の距離感の減少など，少しずつではあるがシミュレーション技術の仕組みにも影響を与えている。単に計算機資源の分散化といった考え方ではあまり楽しい未来は開けてこないが，いいアイデアが出れば飛躍的な変化が期待できる。

CFD の発展と社会との関わりを考えたときに筆者がイメージする GRID を利用した将来の CFD の姿を日記風に記してみよう。

20××年 月 日 ゴルフ場にて

今日は風が強い。第8ホールはちょっと距離が長いがやや追い風でクラブの選択に迷う。早速携帯電話端末を取り出して「クラブ選択サイト」にアクセスする。すると即座に3番アイアンで，ピンに対して10m左をねらって打てばいいと教えてくれる。私は計算力学を専門とする大学教授だから裏で何が起きているか知っている。すでに××サイトに登録してあった私の筋力データやゴルフ技術レベル，使っているボールやクラブメーカーなどは読み込み済みである。ゴルフ場，ホール名などを入力してやると，シミュレータによって予測された高解像度気象予測データにアクセス，その気象条件を基にボール飛翔のシミュレーションが動き始める。GRID システムは，世界中で遊んでいるコンピュータを利用して，リアルタイムにボ

ールの飛翔距離を計算する。20世紀のTVゲームと違いナビエ・ストークス方程式を直接的に解く高度なシミュレーションである。さらに，遺伝的アルゴリズムによる最適化によって私が使うべきクラブが選ばれたわけだ。一般の人はきっとこの携帯電話端末によるシステムがどんな仕組みかなんてわからないだろう。本当にすごい時代になったものだ。

流れの数値シミュレーションが裏で行われていることなど誰も気づかず単に端末に示される結果だけが生活に影響を与えるような時代，それこそが本当の意味でCFD，いや計算力学が成熟期を迎えGRID技術に取り込まれた時代ではないかと思う。さて，みなさんはいつこれが実現すると思いですか？

終わりに

字数の制限から十分言い尽くせなかったことも多いので，最後に技術論も含めCFDに関する筆者の解説記事をいくつか参考文献3~5に記す。

参考文献

- 1 - 特集「自動車」，計算工学（計算工学会学会誌），Vol. 8，No. 1，2003
- 2 - 藤井孝蔵：CFD研究を再考する - 航空宇宙として，日本航空宇宙学会誌，掲載予定，2003
- 3 - 藤井孝蔵：CFDは万能だ！-？，航空宇宙技術研究所SP-44，1999
- 4 - 藤井孝蔵：曲がり角にきたCFD技術とその利用．日本流体力学会「ながれ」，Vol. 21，No.1，2001
- 5 - 藤井孝蔵：数値シミュレーションが開く世界 - 数値実験は物理実験を越えられるか？，日本電子情報通信学会，Vol.84，No.6，2001



2-1-2

混相流を予測する

二相系格子ボルツマン法による数値解析

稲室隆二

INAMURO Takaji

工博

京都大学助教授 工学研究科 化学工学専攻

(要約) 最近注目されている二相系格子ボルツマン法を用いた気液および液液混相流の数値解析について解説する。二相系格子ボルツマン法は、ミクロとマクロとを橋渡しするメソスケールの新しい混相流解析法であり、シャープな界面を陽に追跡することなく自律的に求めることができ、また、各相の質量保存性にも優れている特徴をもっている。現在、MEMS (Micro Electro Mechanical Systems) のようなメソスケールにおける混相流解析法としてだけでなく、海洋の風波のようなマクロスケールの混相流解析法としての発展が期待されている。

拡散界面モデル

気液や液液混相流に見られるような界面が複雑に変形する混相流問題は、土木工学だけでなく機械工学、化学工学、原子力工学などのさまざまな理工学分野で重要な研究課題であり、近年、この分野における数値シミュレーションに基づく計算力学が急速に発展している。

これまで混相流の数値解析法としては、VOF 法、Front Tracking 法、Level Set 法がよく用いられており、これらの方法についての解説は多くある。これらの方法では、界面を流れとともに自由に変形する（一般に厚みのない不連続な）数学モデルとして取り扱っている。

一方、界面を非平衡熱力学に基づく厚みのある連続面として取り扱う物理モデルである拡散界面モデル (Diffuse Interface Model)^{1),2)} が最近注目されている。拡散界面モデルは、本来、二相の分子間ポテンシャルによって決まるミクロスコピックな界面現象をマクロスコピックな現象に適用することを目指したものであり、いわゆるメソスコピックな物理モデルと考えることができる。本モデルでは、界面を秩序パラメータの値によって識別し、界面の複雑な挙動は自由エネルギーが最小になるように自律的に求まるため、界面のつなぎ換えのようなトポロジの問題に困ることはない。現在、拡散界面モデルは、メソスケールの界面現象だけでな

く、界面の分裂や合一、大変形の波などのマクロスケールの現象にも適用されている。

格子ボルツマン法

格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, 以下 LBM とよぶ)^{3)~5)} とは、流体を有限個の速度 (2 次元では 9 速度モデル, 3 次元では 15 速度がよく用いられる) をもつ多数の仮想粒子の集合体 (格子気体モデル) で近似し、各粒子の衝突と並進とを粒子の速度分布関数に対する格子 Boltzmann 方程式を逐次計算し、その速度分布関数のモーメントからマクロスコピックな流れ場 (流速, 圧力など) を求める非圧縮性粘性流体の数値計算法である。すなわち、流体をミクロスコピックな立場からとらえる気体分子運動論をアナロジーとする数値計算法であり、新しいメソスケールの流体解析法として注目されている。

LBM の特徴は、アルゴリズムが簡単であり、また、並列計算に適している、質量および運動量の保存性に優れている、衝突項の形を変えるだけで単相流から混相流まで統一的に取り扱うことができる、ことである。

流体の運動は、流体をマクロスコピックな立場から連続体で近似すると、Navier-Stokes 方程式で記述することができる。Navier-Stokes 方程式の数値解析法には、従来から種々の方法が提案されているが、圧力場の計算方法などに工夫が必要である。一方、LBM は、従来法のような特別の工夫を必要としない。なお、LBM と Navier-Stokes 方程式との関係については、文献 3)~5) を参照されたい。

二相系格子ボルツマン法

二相系 LBM は、メソスコピックな視点から考案された混相流の数値解析法である。すなわち、上で説明した拡散界面モデルを LBM に組み入れた方法である。二相系 LBM の特徴は、界面形状の時間変化を陽に追跡する必要がなく、また、各相の質量保存性に優れていることである。

二相系 LBM では、二つの速度分布関数の時間発展を計算する。一方の速度分布関数を用いて界面を表現する秩序パラメータを計算し、他方の速度分布関数を用いて二相流体の速度場および圧力場を計算する。本方法を用いて、密度比が約 15 程度までの計算が可能である。しかし、従来の二相系 LBM では、それ以上密度比が大きくなると、界面近傍での圧力場の計算が不安定になり、非物理的な結果が生じる問題点がある。

最近、著者らは、圧力場を安定に計算するために、新たに三つ目の速度分布関数を導入し、密度比が 1000 までの計

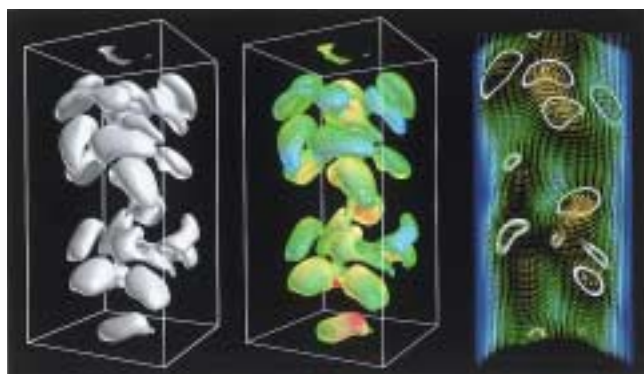


図-1 気泡流の数値計算例

算が可能な二相系 LBM を開発した⁶⁾。まだ、多少の課題が残っているが、今後の発展が期待される。

数値計算例

ここでは、二相系 LBM を用いて計算した気泡流および液滴衝突の数値計算例を示す^{3),7)}。

図-1 は、矩形ダクト内の液中を上昇する気泡流の計算結果を示す。気液の密度比は 1 000、無次元数であるモートン数（液体の物性値の影響を表わす指標）は 1.7×10^{-11} 、エトベス数（浮力と表面張力の比）は 5、分割メッシュ数は $80 \times 80 \times 160$ である。図中の左図は気泡形状、中央図は気泡表面の速度分布、右図は中央断面内の流速ベクトルをそれぞれ表わしている。複雑に変化する気泡形状ならびに流速分布が計算されていることがわかる。従来の VOF 法などでは気泡の体積保存やシャープな界面の保持に苦勞するが、二相系 LBM では界面形状が自律的に求まるため单相流の場合と同じように計算できる。ただし、欠点は界面の厚さが実際問題（1 ~ 10 nm）よりかなり大きくなることである。通常、二相系 LBM で界面を表現するためには最低 2 ~ 3 メッシュが必要である。したがって、大きなスケールの問題への適用に際しては、界面厚さが計算結果に与える影響を吟味しておく必要がある。

図-2 は、二相系 LBM を気体中の 2 液滴の衝突時における混合現象に適用した計算結果を示す。気液の密度比は 50、無次元数であるウェーバー数は 78.8、レイノルズ数は 2 000、分割メッシュ数は $96 \times 96 \times 128$ である。それぞれの液滴に青および赤のトレーサー粒子を配置し、二相系 LBM を用いて求めた流速をもとにトレーサー粒子の時間発展を追いかけて衝突時の混合状態を計算している。図は、液滴の中心を通る断面で切断した半分の液滴内のトレーサー粒子の時間変化を示している。なお、それぞれの図の右肩に示しているのが二相系 LBM による液滴の合一および分裂の計算結果である。この条件では、液滴は衝突した後、引き伸ばされながら

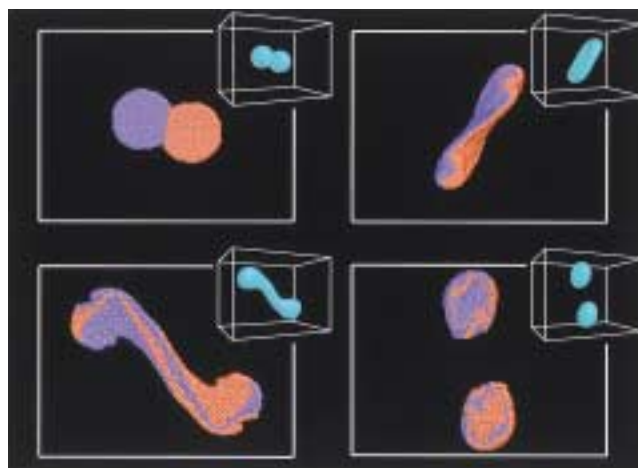


図-2 液滴衝突時の混合現象の数値計算例

分裂している。

計算時間は、図-2 に示す計算でパソコン 1 台（CPU : AMD AthlonXP 1800+）を使って約 60 時間である。また、上述のように、二相系 LBM は並列計算にも適している。著者らは、6 CPU を用いた並列計算により、鉛直方向に長い矩形ダクト内（分割メッシュ数： $80 \times 80 \times 780$ ）の上昇気泡流の計算を行っている。

現状と今後の展望

LBM は、1990 年代に開発された非常に新しい数値解析法である。現在、单相流の LBM はほぼ確立しているが、二相系 LBM はまだ発展途上である。また、圧縮性流体を取り扱う Thermal LBM、乱流解析への適用、不等間隔格子や多重スケール格子の LBM などの研究も進展している^{3),4)}。

二相系 LBM の適用分野としては、MEMS のようなメソスケールにおける混相流解析だけでなく、今後、海洋の風波のようなマクロスケールの混相流解析への展開が期待されている。また、地層内のような多孔質構造内を流れる混相流も興味のある適用分野である。

今後、土木工学の研究者・技術者が多くの適用分野を開拓されることを期待している。

参考文献

- 1 - Rowlinson, J.S. and Widom, B. : Molecular Theory of Capillarity, Clarendon Press, Oxford, 1982
- 2 - Anderson, D.M., McFadden, G.B. and Wheeler, A.A. : Diffuse-Interface Methods in Fluid Mechanics, Annu. Rev. Fluid Mech. 30, pp.139-165, 1998
- 3 - Chen, S. and Doolen, G.D. : Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows, Annu. Rev. Fluid Mech. 30, pp.329-364, 1998
- 4 - Succi, S. : The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond, Oxford University Press, 2001
- 5 - 稲室：格子ボルツマン法 - 新しい流体シミュレーション法 - , 物性研究 77, pp.197-232, 2001
- 6 - Inamuro, T., Ogata, T., Tajima, S. and Konishi, N. : A Lattice Boltzmann Method for Incompressible Two-Phase Flows with Large Density Differences, J. Comput. Phys., 投稿中
- 7 - Inamuro, T., Tajima, S. and Ogino, F. : Lattice Boltzmann Simulation of Droplet Collision Dynamics, Int. J. Heat Mass Transfer, 投稿中

2-2 大変形問題を扱う

2-2-1

Euler型解法による大変形固体解析

岡澤重信

OKAZAWA Shigenobu

正会員 博(工学)

広島大学助教授 大学院工学研究科社会環境システム専攻

(要約) 固体解析において有限要素法は最も重要な柱となるツールである。しかし、大変形解析においては、実現象との整合性等において多くの課題がまだ残されているのが実状である。ここで述べる Euler 型解法を用いることによって、これまでの一般的な固体解析コードでは解けなかった複雑な現象を安定に解くことが可能となる。よって Euler 型解法は今後の固体解析における強力なツールとして期待できる。

固体解析手法の現状

近年のコンピュータを取り巻く環境の飛躍的な進歩により、数値シミュレーションを用いてあらゆる物質の力学現象を解明する学問が、理論・実験と並んで注目されている。その中でも、固体解析における手法としては有限要素法が常套手段となっている。そして、線形問題としての微小変形解析だけでなく非線形問題としての大変形解析においても多数の優れた書籍¹⁾の出版、さらには商用の汎用コードの普及の後押しもあり、有限要素法の適用は着実に産業界に浸透している。

しかしながら、大変形解析のための非線形有限要素法に関しては、まだ多くの課題が残されている。以下ではその課題をあげるとともに、それを解決できると期待される Euler 型解法について概説し、さらに Euler 型解法による適用例をいくつか紹介する。

Lagrange型解法の課題

固体解析においては、図-1 に示すように物質の変形とともに有限要素が移動する Lagrange 型解法が採用されるのが一般的である。しかし、この Lagrange 型解法による固体解析では以下のような課題が残されている。

まず、きわめて変形の大きな挙動の解析においては、有限

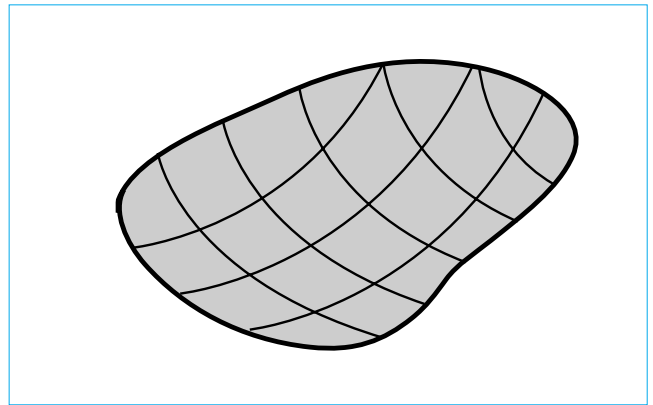


図-1 Lagrange型解法におけるメッシュ制御

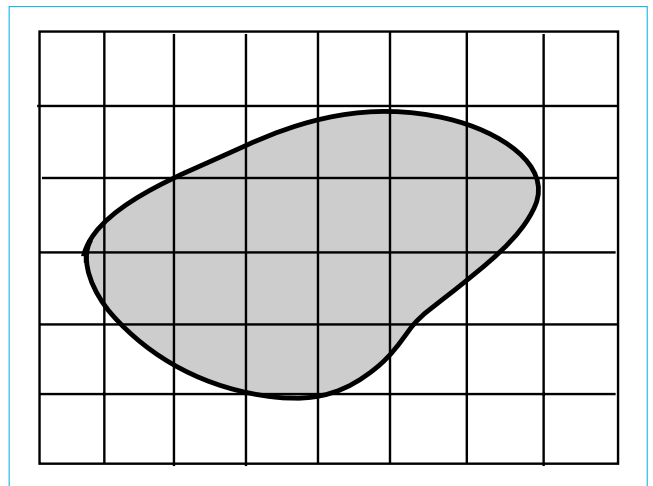


図-2 Euler型解法におけるメッシュ制御

要素のゆがみが大きくなりその健全性が失われる。その結果、解析がブレークダウンする恐れがある。さらに2重節点などの特殊な方法を用いない限り、自由境界面が発生する破断や亀裂進展等の解析は困難である。

Euler型解法による解決

Euler 型解法では、図-2 のように計算メッシュが空間に固定され、そのメッシュを越えて物質が移動する。固体解析で一般的な Lagrange 型解法と違って、計算メッシュがひずむことがないので任意の大変形を扱えるとともに、特別な方法を導入することなく自由境界面の生成が実現でき破断等の解析が可能となる。

Lagrange型解法とEuler型解法の比較

Lagrange 型解法と Euler 型解法における解析結果を比較する。Lagrange 型解法については通常の固体解析コードである。また Euler 型解法においては移流方程式を解くことになるが、流体解析コードをそのまま用いることはできず、応力や構成式パラメータなど経路依存性のあるものをすべてを

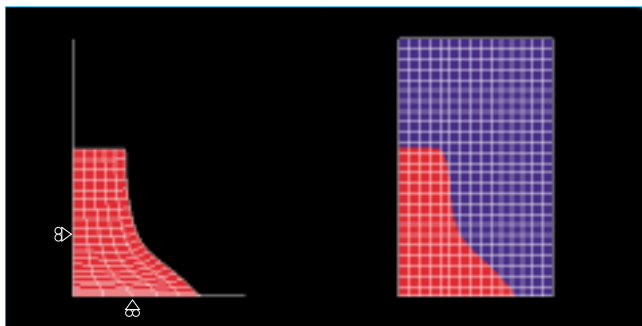


図-3 Lagrange型（左）およびEuler型（右）解法での衝撃解析



図-4 押し出し加工解析

移流させる必要がある²⁾。

図-3はLagrange型およびEuler型解法における衝突解析結果である。それぞれ赤色の部分が固体材料である。Lagrange型解法においては有限要素が物質変形とともに移動する様子が、Euler型解法においては固定された有限要素を超えて物質が変形する様子が確認できる。このように、Lagrange型およびEuler型のそれぞれの解法で整合性のある解析結果を得ることができる。

大変形固体解析へのEuler型解法の適用例

一般的なLagrange型解法では困難もしくは不可能であった固体解析にEuler型解法を適用する。

図-4は金属材料の押し出し加工解析の結果である。緑色部分の金属がきわめて大きい変形を有しているが、Lagrange型解法ではこのような大変形解析においては有限要素の健全性が喪失して解析がブレイクダウンする。しかしながら、Euler型解法においては計算メッシュがひずむことがないので任意の大変形を扱うことができ、結果的に図-4のような押し出し加工解析が可能となる。

図-5は高速切削加工の解析結果である。高速切削加工においては完全分離した無数の切りくずが発生することが報告されている。これらの切りくずが刃物、場合によっては切削加工機器全体を破損させる原因ともなり得る。ゆえに、高速切削加工での無数の切りくずの生成過程を詳細に把握することは、より先進的な切削加工機器を開発するために必要不可欠である。Euler型解法を用いることによって、大変形の取り扱いや切りくずの切り離しなどの数値的な困難を解決



図-5 高速切削加工解析



図-6 貫通解析

することができる。

図-6は弾丸の金属への貫通解析である。Euler型解法によって、弾丸が衝突した後の金属の破片が飛び散る様子を忠実に再現できる。

Euler型解法の今後の展開

Euler型解法を用いることによって、Lagrange型解法では困難であったより現実的な固体解析が可能となる。つまり、固体解析は図-1のようなLagrange型解法、流体解析は図-2のようなEuler型解法といった常識を打ち破ることで、これまで不可能と思われてきた固体解析が可能となる。

また、以前は差分法が主流であった数値流体力学(CFD)においても有限要素法³⁾がその勢力を広げている。よって一般的にEuler型解法が採用されることの多い流体解析との連成への発展もより容易となり、将来的には液体・気体・固体などの相変態の絡んだ複雑な力学現象や、海底掘削などの大規模で社会性のある数値シミュレーションへの展開も期待できる。

参考文献

- 1 - <http://ohio.ikp.liu.se/fe/index.html>
- 2 - Benson, D.J.: Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 99, pp.235-394, 1992
- 3 - 日本数値流体力学会有限要素法研究委員会：有限要素法による流れのシミュレーション, Springer-Verlag, 1998



山田貴博

YAMADA Takahiro

正会員 学術博士

横浜国立大学助教授 大学院環境情報研究院

(要約) ケーブルや膜、シェルなど軽量な構造物の応力解析においては、大きな変位が発生することから非線形の大変形問題として取り扱わなければならない。本稿で述べる筆者らが開発した ALE 有限要素法¹⁾では、従来は既知量として取り扱うしかなかった変形前の初期形状を、計算途中で変更することが可能となり、より柔軟に大変形解析を行うことができる。また、変形後形状をあらかじめ与え、対応する初期形状を求める初期形状決定²⁾を行うことができ、大変形状態を積極的に利用した構造物の設計に応用できる。

大変形問題を記述する数理モデル

微小変形仮定に基づく固体の応力解析においては、注目する点の移動量である変位ベクトルが変形の記述に用いられる。一方、大変形問題においては、変形後形状において釣り合いを考えるため、初期形状とともに変形後形状を直接記述することが必要となる。そこで、変形の記述には変位ベクトルではなく、初期形状における注目点が大変形後形状においてどこに位置するかを写像として表わした変形写像が用いられる。したがって、外力に対して釣り合う大変形状態を求める問題は、変形写像を未知数とする問題として定式化される。

大変形問題に対する非線形解析手法

大変形問題の定式化によって得られる方程式は非線形であるので、数値計算においては大きな変形状態を 1 回で求めることは困難である。したがって、準静的な大変形応力解析では、荷重を少しずつ増やした解(変形後形状)を順次求めて行き、所定の状態にたどり着く方法が用いられる。このように、荷重を漸増させた時に釣り合っている解が描く経路は釣り合い経路と呼ばれている。

問題が座屈などの不安定現象を含む場合、釣り合い経路の追跡においては、解が枝分かれを起こす分岐点が現われ

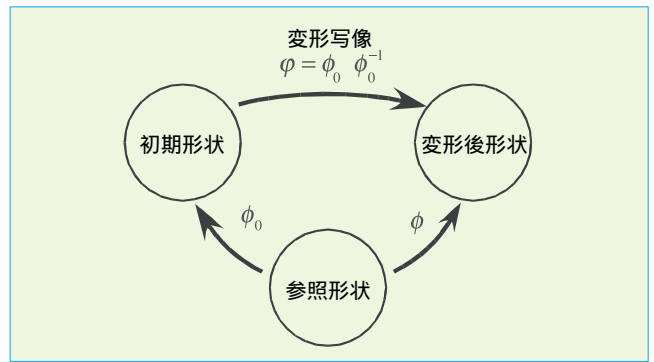


図-1 ALE型変形記述

る。これは、力学的には座屈した釣り合い状態とともに、座屈しない釣り合い状態も存在しうるなどの解の多価性に起因するものである。分岐点が釣り合い経路上に現われる場合に計算を進めるためには、分岐点の位置の特定し、分岐点から枝分かれする釣り合い経路を選択する煩雑な計算が必要となる。

弾性体に対するALE有限要素法

以上のような大変形解析の手続きは、材料の応答が応力履歴に依存する場合には、避けることができない。しかしながら、材料が応力履歴に依存しない弾性体である場合には、問題に対する数理モデルをより柔軟に解釈し、物理的なプロセスとは異なる数値計算を行うことが可能となる。

まず、変形写像の定義において、図-1のように、初期形状と変形後形状の両方に独立な仮想的な参照形状を導入する。変形写像は、参照形状から初期形状への写像と参照形状から変形後形状への写像の合成写像として表わされる。このとき、変形写像を求める大変形問題は、参照形状から初期形状への写像と変形後形状への写像の組を求める問題に書き換えることができる。このように書き換えられた問題においては、初期形状と変形後形状は同等なものとして扱うことが可能であり、初期形状を必ずしも既知量として扱う必要がなくなる。すなわち、初期形状は、計算途中で変更しうるものであり、未知数と置くことも可能となる。このような変形記述の考え方は、注目点を初期形状における物質点とし、変形後形状を求める Lagrange 型記述と、注目点を変形後の空間上に固定された点として変形を考える Euler 型記述の両方を含むものであり、ALE (arbitrary Lagrangian Eulerian) 型変形記述とよばれている。

大変形問題に対する有限要素法においては、親要素を基にして、初期形状と変形後形状を同じ近似によって表わすアイソパラメトリック仮定が通常用いられている。ALE 型変形記述は、親要素を参照形状と考え、初期形状を表わす節点座標と変形後形状を表わす節点座標の両方を同等なも

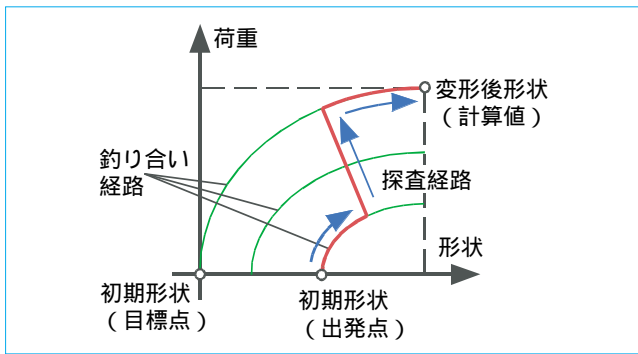


図-2 ALEによる大変形解析

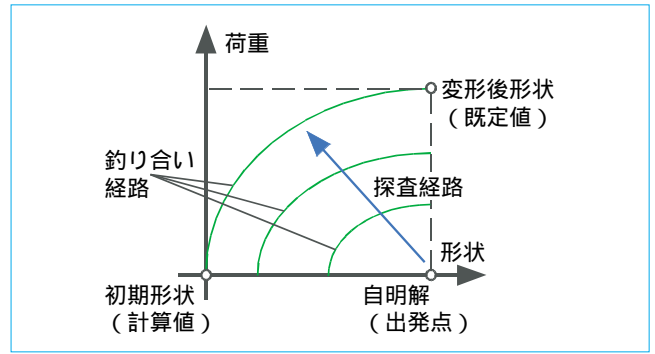


図-4 ALEによる初期形状決定

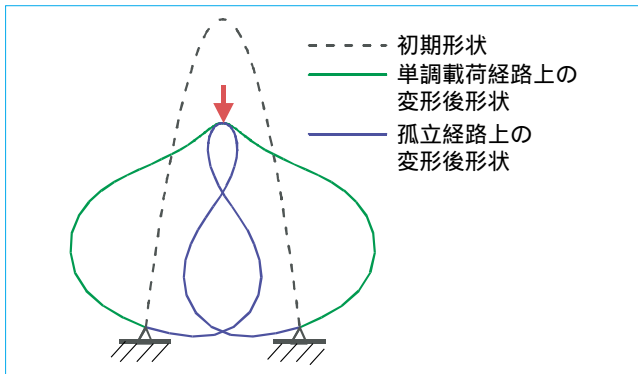


図-3 アーチの大変形解析

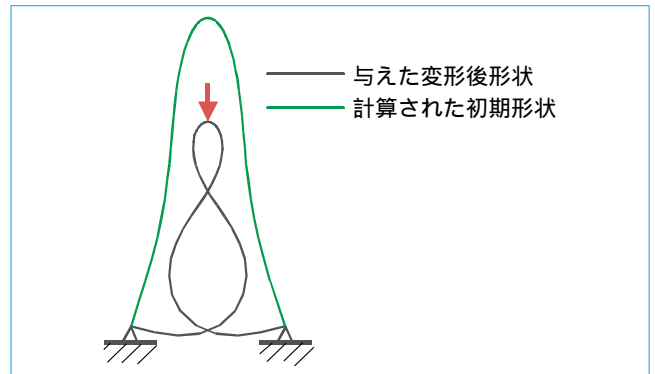


図-5 アーチの初期形状決定

のとして扱うことにより通常の有限要素法の枠組みの中で実現される。つまり、従来は既知データとして扱われるだけであった初期形状の節点座標を計算途中で変更したり、未知数として計算を行うことがALE型変形記述に基づくALE有限要素法¹⁾となる。

ALE有限要素法による大変形解析と初期形状決定

ALE有限要素法による大変形解析において計算途中で初期形状を変更する計算は、図-2に示すようにある初期形状から出発した釣り合い経路上の点から、異なる初期形状から出発した経路上の点へ移動しながら、所定の初期形状に対応する変形後形状を求めるととらえることができる。このとき、適当な探索経路を設定することにより、釣り合い経路上の分岐点を回避することも可能である。

アーチの大変形問題において、初期形状から通常の大変形解析によって求めた変形後形状と、摂動を与えた初期形状から出発し、ある程度変形した状態を求めた後、ALE有限要素法により摂動を除去することで、異なる釣り合い経路上の変形後形状を求めた結果³⁾を図-3に示す。ALE有限要素法により求められた変形後形状は、与えた荷重を漸増させた釣り合い経路上には実際には存在しえないものであり、孤立経路上の解であると考えられる。

一方、ALE有限要素法では、変形後形状を既知とし、与えた境界条件の下での初期形状を未知数として求める初期形

状決定問題を考えることができる。図-4は、初期形状決定のプロセスを模式的に表わしたものである。

前述のアーチの問題において、図-3の孤立経路上の変形後形状を与え、初期形状決定を行った結果を図-5に示す。

計算力学の可能性

数値シミュレーションは、現実には実現困難な理想的な条件下における状態を計算できるものとして用いられることがある。ここで示したALE有限要素法によれば、弾性体という制約内ではあるが、出発点である初期形状によって変形後形状が決定されるという因果律を越えて、初期形状と変形後形状の変化を同時に考えたさまざまな状況の計算が可能となる。このように計算力学では、物理的な意味づけによってモデル化を行うことに加え、数学的記述において可能な操作を考えることで問題の数理モデルをより広い解釈でとらえることができる。このような拡張された問題において数値シミュレーションを実行すれば、新たな現象の発見や新しい構造形態の創生の可能性が生まれると考える。

参考文献

- 1 - Yamada, T. and Kikuchi, F. : An arbitrary Lagrangian-Eulerian finite element method for incompressible hyperelasticity, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 102, pp.149-178, 1993
- 2 - Yamada, T. : Finite element procedure of initial shape determination for hyperelasticity, Structural Engineering & Mechanics, 6, pp.173-183, 1998
- 3 - 山田貴博・佐藤武知：棒の大変形問題に対するALE有限要素法，計算工学講演会論文集，6，pp.75-78，2001

2-3 メッシュフリー法

野口裕久

NOGUCHI Hirohisa

博(工学)

慶應義塾大学教授 システムデザイン工学科

(要約)メッシュフリー法は、これまで有限要素法や差分法の解析の際に用いていた要素(メッシュ)や格子が不要(フリー)となる新しい解析手法である。このとき、入力データ作成の労力が削減されるだけでなく、解析精度の向上も望むことができる。メッシュフリー法は、文字どおり要素や格子分割を用いずに、節点情報だけで解析を実施する手法の総称であり、他にメッシュレス法やグリッドレス法、等とよばれることもある。図-1 にシェル解析の有限要素分割図とメッシュフリー法の節点分布図を示す。

現在有限要素法が、一般工学分野で、最も実用的な設計・解析ツールであることは、誰にも異論がないであろう。また計算機の発展とともに、有限要素解析モデルの規模や複雑さは飛躍的に増し、現在では、例えば自動車一台をフルモデルの解析が可能となっている。しかしながら、規模や複雑さが増せば増すほど、解析そのものよりもメッシュ分割にコストを要し、しかもメッシュの質が解析精度を左右するため、解析者に対するメッシュ分割の負担は増加する一方である。このような背景の下で「メッシュフリー法」の開発が始まったことは、ごく自然なことだと思われる。

さて、メッシュフリー法の一つに、解析対象を粒子や分子の集合と見なし個々の粒子の運動方程式を解く「粒子(particle)法」とよばれる手法も古くから存在するが、ここではメッシュフリー法を、有限要素法と同様、Galerkin法に基づく偏微分方程式の一つの解法として解説する。

メッシュフリー法は、モデリングのためのメッシュフリー法とアナリシスのためのメッシュフリー法に大別できる。解

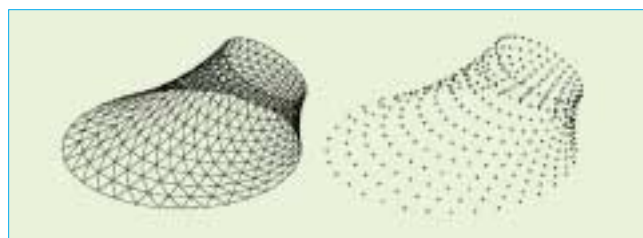


図-1 有限要素法とメッシュフリー法

析者からすれば、モデリングとは「要素分割」に他ならない。このとき、「要素分割」自体から解析者が開放されていれば、例えばCADデータからシームレスに自動メッシュ分割され、ユーザがメッシュに触れることなく解析結果が得られるならば、これもメッシュフリーシステムとよぶことができる。このようなモデリングの立場から見たメッシュフリー法の代表的なものに、ボクセル法とフリーメッシュ法がある¹⁾。これらは、いずれも有限要素法である。

一方、メッシュフリーアナリシスでは、文字どおり要素を作成することなく解析される。ここで領域内の任意の点の変位は、有限要素法では「その点が含まれる要素の節点変位から内挿」して求められる。一方メッシュフリー法では、このような要素が存在しないため、例えば図-2 に示すように「その点を中心とするある半径内の円(3次元の場合は球)の内部の節点から(重み付き)最小自乗法により近似」して求められる。これは移動最小自乗法²⁾とよばれる多くのメッシュフリー法が採用している近似手法である。

すなわちメッシュフリー法では、要素の代わりに評価点の近傍領域を定義し、その内部にある節点変位から変位の近似関数が作成される。このときこの近似関数は、評価点の変位を u 、その近傍(円の内部)の節点値 u_i とすれば、形状関数 N_i を用いて、有限要素法と同様に、

$$u(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x) u_i \quad (1)$$

と表すことができる²⁾。こうして変位の近似関数が定めれば、後は強形式であれ弱形式であれ、基礎となる偏微分方程式に代入すれば離散化は完成する。これらを整理すると、現在まで多くのメッシュフリー法が提案されているが、その基本的な考え方は、1) 変位の近似関数の作成方法、2) 偏微分方程式の解法で分類することができる。1) の変位の近似手法に関しては、代表的なものとして a) 移動最小自乗法(Moving Least Squares Approximation)、b) Reproducing Kernel Function、c) Shepard Function、d) Hp Cloud、e) Finite Cover Function、f) Radial Basis Function等があげられる。

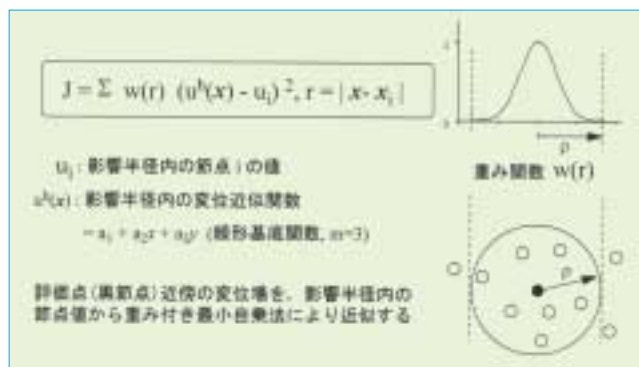


図-2 移動最小自乗法による変位の近似

表-1 メッシュフリー法の分類³⁾⁻¹²⁾

Type	Method
Collocation Method	Finite Point Method (MLS), N-Gridless Method (MLS), Fixed Kernel Method (RKF)
Galerkin Method	Diffused Element Method (LS), Element Free Galerkin Method (MLS), Reproducing Kernel Particle Method (RKF), HP-Cloud Method (PU), Finite Cover Method (PU), RPIM (RBF)
Local Galerkin Method	Meshless Local Petrov Galerkin Method (MLS), Method of Finite Sphere (PU), LPIM (PIM)

2) の偏微分方程式の解法としては、I) Collocation Method (強形式), II) Global Galerkin Method (弱形式), III) Local Galerkin Method (弱形式) に分類される。I) に属する手法は差分法の性質が強くなり、II) に属するほど有限要素法の性質が強くなる。III) は、II) での積分が領域全体にわたるのに対し、評価点の近傍(影響半径内)だけで局所的に積分を行うものであり、差分法と有限要素法の間接的な性質を有する。表-1 に、これまで提案された手法について示す¹⁾。ここで、() 内は変位の近似手法を表わしている。

さて、これらのメッシュフリー法に共通な特長について述べる。冒頭に述べたように、解析者にとってメッシュ作成の労力が軽減されることは重要なことであるが、一方で結果として同節点数で有限要素法よりも精度が悪ければ、実用に供されることはない。その点では、表-1 に示す各メッシュフリー法(が用いる変位の近似関数)は、有限要素法と同等以上の解の収束性(節点を増加につれ解が正解に収束)を有している。その他、有限要素法と比較して利点、不利な点と考えられることを表-2 に示す。利点の一つとして、変位だけではなく、ひずみが空間で連続(有限要素法は要素間では不連続)、高精度となるが、これは移動最小自乗法による。また図-3 の概念図にも示すように、クラックを節点位置に関係なく配置することができ、影響領域が不連続面を超えぬように調整することで、容易に不連続面のモデル化が可能となる。また、不規則な節点配置(有限要素法では要素のゆがみ)に対して解の精度がさほど損なわれないことも知られている。この時、適切な誤差指標の下、節点密度を増やすだけで容易に解の精度を向上させられる。

一方で、有限要素法と比べてデメリットの一つは、領域積分である。有限要素法では全体領域積分を要素単位で行えるため任意形状に容易に対応できるが、メッシュフリー法では、要素のような積分の単位が存在しないために、積分のためのバックグラウンドセルが必要となる²⁾。これを避けるためにローカルな Galerkin 法も提案されているが、いずれにしても、複雑な境界での汎用的な処理技術が不可欠である。その他、最小自乗法に基づくため、関数の値と節点値が必ずしも一致せず、特別な境界条件処理が必要となる²⁾。また、解析時間の観点からは、近傍節点の探索、積分点ごとの形状関数の作成、領域積分等に関する計算量が増え、有限要素法の約 5 ~

表-2 メッシュフリー法の長所と短所

利点	<ul style="list-style-type: none"> 変位およびその空間微分(ひずみ)も連続 き裂、衝撃波等の不連続場の扱いが容易 大変形、ゆがみに対して解の精度を保持 h-アダプティブ法の適用が容易 寸法効果の導入が容易 メッシュ分割が不要
不利な点	<ul style="list-style-type: none"> 領域積分のための積分セルが必要 複雑な境界近傍での特別な積分処理 Dirichlet 型境界条件の扱いが特殊 計算時間が多大

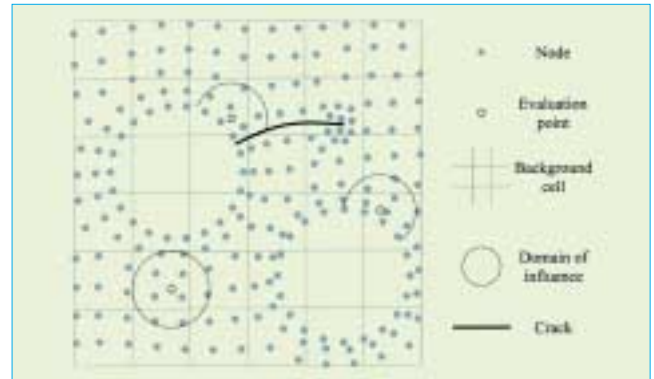


図-3 Global Galerkin 型メッシュフリー法の概念図

10 倍の計算時間を要する。

このため現時点では、メッシュフリー法は有限要素法よりも優れた特性を有しているものの、未だ複雑な形状の3次元解析への応用は見当たらず、まだまだ発展途上にある。先の欠点が克服され、CAD などの技術とシームレスに結合することによって初めて、汎用的なメッシュフリー法が生まれるであろう。したがって当面は、単純形状に対する材料解析であるき裂進展解析、せん断帯等の塑性不安定解析および大ひずみ塑性加工解析への適用が進むものと思われる。

参考文献

- 野口裕久：メッシュフリー法のクラス分けと実用化に向けて，計算工学，Vol.7，No.1，pp.411-414，2002
- 野口裕久：エレメントフリー法の理論と応用，機械の研究，Vol.53，pp.442-449，2001
- Belytschko, T., Lu, Y. Y. and Gu, L. : Element free Galerkin methods, Int. J. Num. Meth. Eng., Vol.37, pp.229-256, 1994
- Liu, W. K., Jun, S. and Zhang, Y. F. : Reproducing kernel particle methods, Int. J. Num. Meth. Fluids, Vol.20, pp.1081-1106, 1995
- Duarte, C. A. and Oden, J. T. : An h-p adaptive method using clouds, Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., Vol.139, pp.237-262, 1996
- 鈴木克幸・大坪英臣・寺田賢二郎・関勝戦・金伝栄・中西克嘉：ボクセル被覆による3次元ソリッドのメッシュレス解析，土木学会応用力学論文集，Vol.1，pp.215-222，1998
- Onate, E., Idelsohn, S., Zienkiewicz, O. C. and Taylor, R. L. : A finite point method in computational mechanics. Applications to convective transport and fluid flow, Int. J. Num. Meth. Eng., Vol.39, pp.3839-3866, 1996
- Aluru, N. R. : A reproducing kernel particle method for meshless analysis of microelectromechanical systems, Comput. Mech., Vol.23, pp.324-338, 1999
- Nayroles, B., Touzot, G. and Villion, P. : Generalizing the finite element method: Diffuse approximation and diffuse elements, Comput. Mech., Vol.10, pp.307-318, 1992
- Atluri, S. N. and Zhu, T. : A new meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics, Comput. Mech., Vol.22, pp.117-127, 1998
- De, S. and Bathe, K. J. : The method of finite spheres, Comput. Mech., Vol.25, pp.329-345, 2000
- Gu, Y. T. and Liu, G. R. : A local point interpolation method (LPIM) for static and dynamic analysis of thin beams, Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., Vol.190, pp.5515-5528, 2001

寺田賢二郎

TERADA Kenjiro

正会員 Ph. D.

東北大学大学院助教授 工学研究科土木工学専攻

(要約) われわれの生産活動において「材料」と称されるものの多くは、微細なミクロ組織を持つ非均質体であり、その構造体としての力学挙動がマクロな材料挙動を支配していることが多い。したがって、材料の「ミクロ」構造体を規定して「マクロ」な挙動予測ができれば、質の高い材料の数値モデル(構成則)の構築に寄与するだけでなく、ミクロ組織形態の制御によるマクロな材料設計技術の確立に結びつくものと期待される。この際、計算力学を基調として、マルチスケール法とよばれる数値解析手法による評価プロセスを導入すれば、それはミクロな材料組織とマクロな構造物の両方を見据えたCAE(Computer-Aided Engineering)の構築に他ならない。本稿では、その試みの一端を紹介し、CAEにおける計算力学の役割と利用についての私見を述べたい。

マルチスケール計算力学 - 焦点を定めた適用

代表的な建設材料であるコンクリートは、微視的に見ればモルタル・骨材等からなる典型的な複合材料であるが、供用される際は均質体としての特性を必要とされる。また、近代以降の中心的な工業材料の一つである鉄鋼(スチール)は、

固有の方位で特徴づけられる金属結晶の集合体であるし、さらに微細なレベルを観察すると地鉄(フェライト)と炭化物(セメントイト)の複合構造までもが見えてくる。図-1(a),(b)に示す構造をミクロ組織として持つ供試体から得られるマクロな応力-ひずみ曲線を同図(c)に示す。材料のミクロな組織には「構造」があること、そしてその構造特性こそが材料のマクロな挙動を支配していることを如実に示す例である¹⁾。

ミクロ組織を構造解析の対象とし、何らかの方法論によりその挙動とマクロな物理変数との対応を取ることができたとしたら、それは「ミクロからマクロを予測する」とことと等価である。先の鋼のミクロ組織を地鉄と炭化物から構成される2相複合材料と見なして、有限要素メッシュを作成したものがそれぞれ同図(f),(g)であり、文献や計測から得られた材料特性をデータとして均質化法に基づくマルチスケール有限要素法を適用することで得られたマクロな応答が同図の(h)である¹⁾。この計算力学技術を用いて「ミクロからマクロを予測」した結果、定性的にはあるがパウジンガー効果の発現が再現され、その程度がミクロ構造の幾何学的な特性に依存することもとらえられている。さらに、ある荷重レベルでのミクロ領域における転位分布を同図(d)と(e)に、計算で得られた塑性ひずみ分布を(i)と(j)に示しておく。実験結果は計算の正当性を支持しているが、ミクロな挙動を再現できているからこそマクロもそれなりに実現象にすり寄ってくることを強調したい。

ところで、ここで示した計算は「正しい」のだろうか? 定量的にはまったく一致しないので、声高に「正しい」と言うてはならない。実際、この計算には平面近似、地鉄の異方性の無視など、モデルやデータにたくさんの「ウソ」が含まれる。それでも、マクロな製品の性能・強度を評価する現場

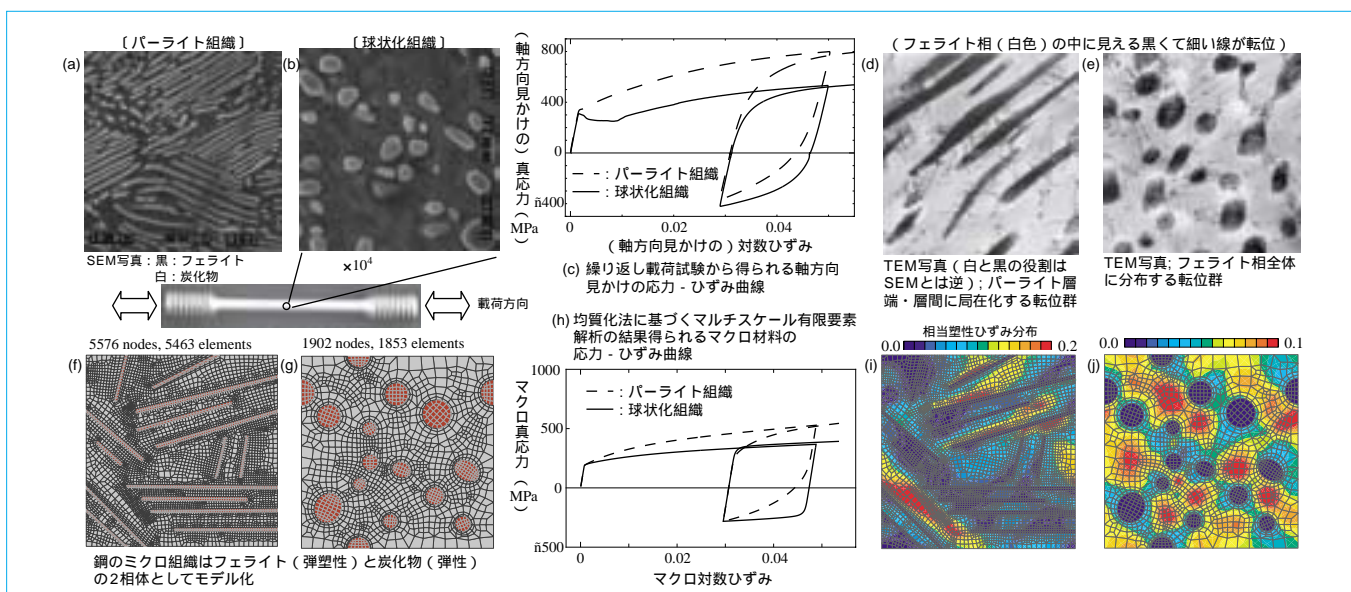


図-1 炭素鋼の繰り返し荷重試験：実験とマルチスケール解析結果

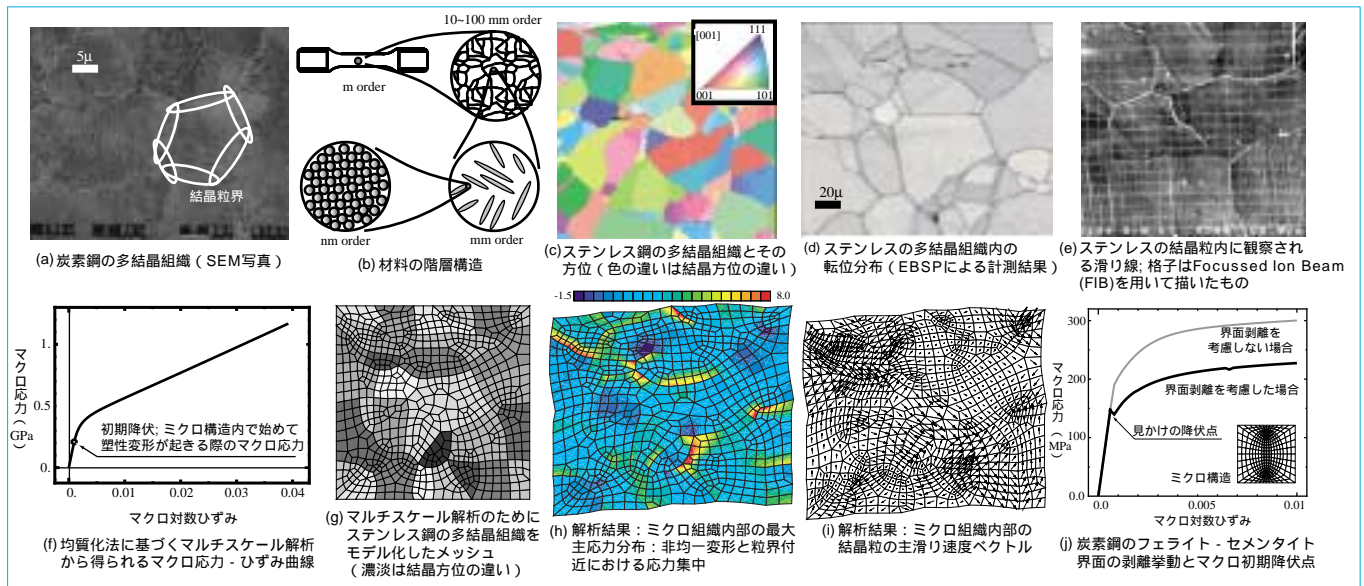


図-2 多結晶体のマイクロ組織と結晶粒を最小構成単位としたモデルによるマルチスケール解析

の目からは、材料について冶金学的見方と切り離して議論できるという意味で、少なくとも「使える」道具ではあるらしい。ものづくりにおいて本質を抽出する視座に立てば「ウソ」を含む結果も「正しさ」に変わりうる。計算力学がこの種の「正しさ」を提供するものであるとすれば、計算の「検証」の程度もこれに準ずることになる。

ミクロの尺度を少し大きめに取ってみると、図-2 (a) のような結晶構造も見えてきて、この多結晶体としての挙動はマクロに反映されていない。このことは、炭素鋼が結晶粒の集合体であることよりは、炭化物の形の方がパウジンガー効果の発現には支配的であることを意味している。では、結晶粒をミクロ組織の形態の代表長さにとってみたらどんなマクロな特性をとらえられるのだろうか。図-2 の (b) ~ (i) をご覧いただきたい^{1),2),3),4)}。仮定やデータなど非常に荒っぽい計算ではあるが、今度は単結晶内の原子の滑り変形を考慮できる構成則を用いている (図-2 (b))。結果、実験で観察される結晶粒ごとに異なる滑り変形や粒界における応力集中の様子が計算で再現されているほか、粒によっては負の主応力が発生するなど、変形の強い非均一性が認められる。このことは、特にマクロ的な初期降伏点およびその後の加工硬化特性と密接に関わっており、多結晶体レベルでの非均質性をミクロ組織の計算モデルに反映させる意味を推し量ることは比較的やすい。

一方、図-2 (f) は、先の炭素鋼のミクロ組織を理想化し、フェライトとセメンタイトの界面において剥離を計算モデルに入れた際のマルチスケール解析結果である⁵⁾。図-1 (c) におけるマクロ降伏点付近に顕著な塑性棚が、ミクロスケールでの不連続変形を反映したものと見ることも可能である。連続体力学の枠組みにおける単純な仮定の上に立つため、金属学的に見れば異論があるうが、少なくとも力学的直感とは整

合するミクロ・マクロ連成挙動である。

CAEに資する計算力学

さて、「数値計算は正直」であることを主張したい。確かに、数値シミュレーションでは材料や条件のパラメータを少し変えればいくらでも合わせ込むことは可能であるのだが、現象をモデル化した際の考え方、計算に持ち込もうとしたときに導入した仮定、解析手法の特性などを認知していれば、直感と大きくずれるような結果を得るはずがない。すなわち、条件や仮定に入れていないことは計算結果に反映されようがないし、期待してはいけない。逆に、いたずらに合わせ込むとする行為は、理論家や実験家の誤解を招きかねないばかりか、実験・計測結果を用いた「検証」も意味を失ってしまう。本質にのみ目を向けていれば間違いは少ないはずである。

また、計算に持ち込む際の数理モデルの質は、計算結果を大きく左右する。より実際の現象に迫るためのモデル化はおそらく可能であろうが、果たして必要かどうかは作る人、使う人に耳を傾けねばならない。モデルを複雑化しても、ものづくりに必要な新たな発見をもたらす、普遍的な事実が導かれないのであれば、現場では使われないのでその挑戦は虚しい。CAEにまで視野を広げるのであれば、計算力学にこの種の虚しさがあってはならない。著者が「ミクロからマクロを予測する」計算技術の開発に挑みながら最も気を遣う点である。

参考文献

- 1 - Akiyama, M., Kuboki, T., Oikawa, K., Matsui, K., and Terada, K., : Mater. Sci. Tech., Vol. 18, pp.1272-1278, 2002
- 2 - Neishi, Y., and Akiyama, M., : Mater. Sci. Tech., Vol. 18, pp.799-803, 2002
- 3 - Akiyama, M., Neishi, Y., Taniyama, A., and Terada, K., : Complas2003: <http://congress.cimne.upc.es/complas/frontal/default.asp>.
- 4 - 渡邊・寺田・松井・秋山・根石：応用力学論文集，Vol.6，2003
- 5 - 松井・寺田：応用力学論文集，Vol.5，pp.227-234，2002

2-5 生体現象へ挑む

2-5-1

海綿骨の

三次元骨梁パターン形成シミュレーション

安達泰治

ADACHI Taiji

博(工学)

神戸大学助教授 工学部機械工学科

(要約) 海綿骨の骨梁構造は、作用する力学状態に応じて、あたかも主応力線に一致するような直交曲線網様の形態を有しており¹⁾、その構造が、リモデリングとよばれる改変メカニズムにより、適応的に変化していくことが古くから知られている²⁾。このような、骨の機能的な適応能力を理解し、それを構造物の最適形状設計やスマート材料・構造物創成の考え方に応用することは、工学的にも大変興味深い。

骨梁再生過程におけるパターン形成

骨梁構造のリモデリングについて、さまざまな数理モデルの提案や計算力学シミュレーションによる検討がなされてきた³⁾⁴⁾。しかしながら、リモデリングと同様に工学的、医学的にも関心の高い、欠損部における骨梁構造の修復・再生、あるいは新たな骨の形成過程については、力学的にこれらを扱った研究例は数少ない。そこで、生物におけるパターン形成モデルとして用いられる反応拡散系モデル⁵⁾に対して、力

学因子による骨形成の活性効果を考慮する⁶⁾ことで、海綿骨の骨梁パターン形成モデルを提案し、計算力学シミュレーションにより、そのメカニズムについて力学的側面から検討する。

海綿骨欠損内部の骨梁パターン形成の観察と数理モデル化

ラット大腿骨遠位部の骨幹端部に図-1(a)に示す直径2.0 mmの貫通孔を左右軸方向に作成し、その欠損内部に形成される骨梁パターンの形成過程をX線 μ CTにより観察した⁷⁾。まず、欠損内部には骨髓等が侵入し、その4、5日後には、ランダムな島状組織が形成され始める。さらに術後10日程度経つと、その島状組織が互いに、あるいは周囲の既存の骨梁と連結することで、図-1(b)、(c)に示すような三次元的に複雑な骨梁パターンが形成されていく。さらにその後のリモデリングにより、力学状態に対応した骨梁構造、すなわち荷重方向に配向した構造へとパターンが変化していくものと考えられる。

骨梁パターン形成モデルに力学刺激の影響を考慮するため、応力のスカラ値関数を力学刺激感知項として、骨形成因子および骨吸収因子の反応拡散系モデルに付与した。つまり、骨組織レベルの応力に応じて、その値が大きい場合は骨形成が活性化され、小さい場合は骨吸収が活性化されると考えたモデルである。また、骨が形成・石灰化するにつれ、その組織のヤング率が増加し、応力分担がさらに増し、結果として、外力支持構造のパターンが形成されていく。

計算機シミュレーションでは、差分解析により各因子を求め、得られた密度分布をVoxel要素で表現した骨組織のヤング率に反映させた。さらに、有限要素解析により力学刺

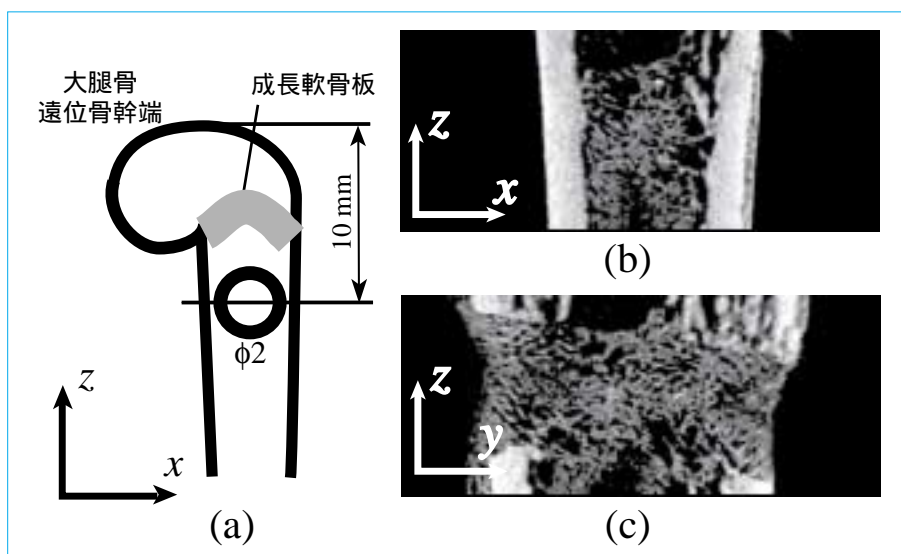


図-1 ラット大腿骨の遠位端部に作成された骨欠損内部における骨梁パターン形成実験のX線 μ CT観察例

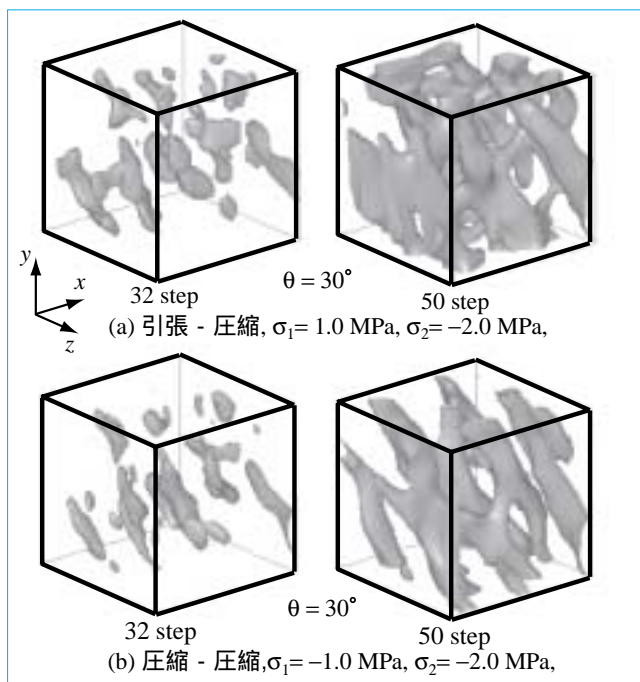


図-2 三次元骨梁パターン形成シミュレーションの結果

激量を求め、これを力学刺激感知項に代入することで再び反応拡散系方程式を解き、これらを繰り返すことにより、骨梁パターンの形成過程を表現した。

シミュレーションモデルと結果

対象領域は、1辺 2.0 mm の立方体とし、x-y 面内の巨視的主応力場が、引張 - 圧縮、および圧縮 - 圧縮の場合を想定した。骨梁パターンの形成過程を図-2 に示す。

引張 - 圧縮の主応力場においては、圧縮主応力が最大となる方向の骨梁が成長し、その断面積の増加に伴い、それ

に垂直方向の骨梁にも成長が見られた。その結果、骨梁に作用する主応力の比がほぼ断面積比に対応する格子状の形態となった。一方、圧縮 - 圧縮の主応力場においては、主応力が最大となる方向の骨梁が成長するが、それに垂直方向の骨梁断面積は減少し、その結果、枝分かれ状の形態となった⁸⁾。いずれの場合も、主応力方向に連結性の良い骨梁が相対的に太くなっているのは、この骨梁が有効に荷重を支持することで応力値が増加し、骨形成が促進されたためであると考えられる。

以上のように、反応拡散系モデルに力学因子を導入することで骨梁パターン形成モデルを表現し、差分法と Voxel 有限要素法を同じ格子構造内に適用することにより、三次元的に複雑な骨梁パターン形成の様子を表現することができた。今後、本モデルと細胞レベルあるいは遺伝子レベルの現象との関連を対応づけることで、より実際の骨梁パターン形成現象を表現するモデルへの拡張を目指す。

参考文献

- 1 - Wolff, J. : The Law of Bone Remodeling, (Translated by Maquet, P., and Furlong, R.), Springer, 1986
- 2 - 林紘三郎・安達泰治・宮崎 浩：生体細胞・組織のリモデリングのバイオメカニクス, 日本エム・イー学会編, コロナ社, 2003
- 3 - Cowin, S. C. : Bone stress adaptation models, J. Biomech. Eng. , 115-4B, pp.528-533, 1993
- 4 - Adachi, T., Tsubota, K., Tomita, Y. and Hollister, S. J. : Trabecular surface remodeling simulation for cancellous bone using microstructural voxel finite element models, J Biomech Eng, 123-5, pp.403-409, 2001
- 5 - Kondo, S. and Asai, R. : A reaction-diffusion wave on the skin of the marine angelfish Pomacanthus, Nature, 376, pp.765-768, 1995
- 6 - 手塚達一・和田義孝・高橋昭如・吉田隆弘・菊池正紀：反応拡散系による負荷適応骨リモデリングモデル, 日本機械学会第15回バイオエンジニアリング講演会, 02-35, pp.73-74, 2003
- 7 - 西海征志・宮本真光・安達泰治・富田佳宏：ラット海綿骨の欠損モデルにおける骨形成過程の観察, 日本機械学会第15回バイオエンジニアリング講演会, 02-35, pp.67-68, 2003
- 8 - 安達泰治・富田佳宏・坂上 拓・田中正夫：応力の局所不均一性による骨梁表面再構築モデルと形態変化シミュレーション, 日本機械学会論文集, 63C-607, pp.777-784, 1997



大島まり

OSHIMA Marie

工博

東京大学助教授 生産技術研究所

(要約) 人間の体は体重に対して約 92% の体液などの流体で占められている。生体における流体現象は、血液、リンパの流れ、髄液、尿などの液体の流れから、気道や肺の呼吸系内空気の流れ、消化器系における食べ物などの固体と液体の流れとさまざまな流体現象があげられる¹⁾。このような流体現象のなかでも特に血液の流れは、体内に占める割合が大きいだけでなく、日本の三大死因である心疾患や脳血管障害を引き起こす要因の一つでもあることから長年研究が進んでいる。

生体系における流体現象

血液は心臓の伸収縮運動により左心室から押し出される。そして、大動脈、動脈から細静脈と分岐を繰り返しながら細くなる血管を通り、最終的には $5\ \mu\text{m}$ ほどの太さをもつ毛細血管により体の隅々に運ばれる。毛細血管でガス交換を終えた血液は細静脈、静脈そして大静脈を通り、右心房・右心室より肺動脈を径由して肺に流れ込む。血液は肺で浄化され、酸素を含む血液となって肺静脈を通過して再び左心房・左心室に流れ込む。このように、血液は心臓から出発し、心臓に戻る閉ループであることから、循環器系といわれる。ちなみに、先ほど前述した心疾患および脳血管障害を合わせて通常、循環器系疾患といい、ガンを上回る一番の死亡原因となっている²⁾。

循環器系における流体現象の特徴

循環器系の流体力学的な特性としては、主に以下のことがあげられる。

- 1) 広範囲な流れの物理特性
- 2) 複雑な形状を持つ血管ネットワーク
- 3) 非定常性
- 4) 血管の伸縮性
- 5) レオロジー

血液は最も径の太い約 $25.0\ \text{mm}$ の大動脈から、最も径の細い約 $5.0\ \mu\text{m}$ の毛細血管とさまざまなスケールの血管内を流れる。血管のスケールの違いにより、一般に比較的太い血管から構成される大循環器系と細動脈や毛細血管などの血管から構成される微小循環器系に分類することができる。また、スケールの違いが流れに及ぼす影響はレイノルズ数で分類することができ、大動脈内では $10^3\sim 4$ 、毛細血管では 10^{-3} となり、流れの物理として乱流から層流と広範囲にわたる。

血管は分岐や曲がり、狭さくなどの複雑な形状をもち、それらが分岐しながら複雑なネットワークシステムを構成する。特に動脈などの比較的太い血管は、拍動する非定常な流れが弾性管内を流れることとなる。一方、静脈は拍動の影響はあまりなく、血管は血圧によってはつぶれやすい管となっている。

レオロジーとは、流動あるいは物質の変形の構造的な特徴を考慮に入れて物体の力学的挙動を研究する分野をさす。したがって、微小循環器系では赤血球が変形したりして流れに及ぼす影響が顕著になってくるため、血液のレオロジーを考慮する必要がある。

このように血液の流れは対象とする部位によって異なった物理特性を示すため、それらを考慮に入れて血行動態、いわゆる血行力学に取り組む必要がある。一般に循環器系疾患が多いのは、心臓や脳の大循環器系動脈である。

血行力学と計算力学

数値シミュレーションを基礎とした計算工学的アプローチは「第3の科学」として確固とした地位を築いてきている。特に流体については、数値流体力学としてさまざまな工学的な問題や設計に適用されており、安全性や効率の面で必要不可欠である。

医療・医学の分野において計算力学的なアプローチを取り入れた研究は比較的新しい研究分野であるが、心臓血管系流れ解析を中心に国際的に広がりつつある。従来の血流の数値シミュレーションは、血管の分岐部を模擬した簡単なモデルによる計算が主であった。しかし、最近では CT (Computed Tomography) scan や MRI (Magnetic Resonance Image) などの医用画像技術の著しい発展により、3次元の生体情報を非侵襲に精度を良くデジタルデータとして得られることが可能となってきた。このため、医用画像を用いて現実に近い血管形状内での血流解析、イメージベースド・シミュレーション (Image-Based Simulation) の研究が盛んに行われるようになってきている³⁾⁴⁾。

図-1 にイメージベースド・シミュレーションの概要をまとめている。この手法は3次元血管モデルの構築、数値シミュ

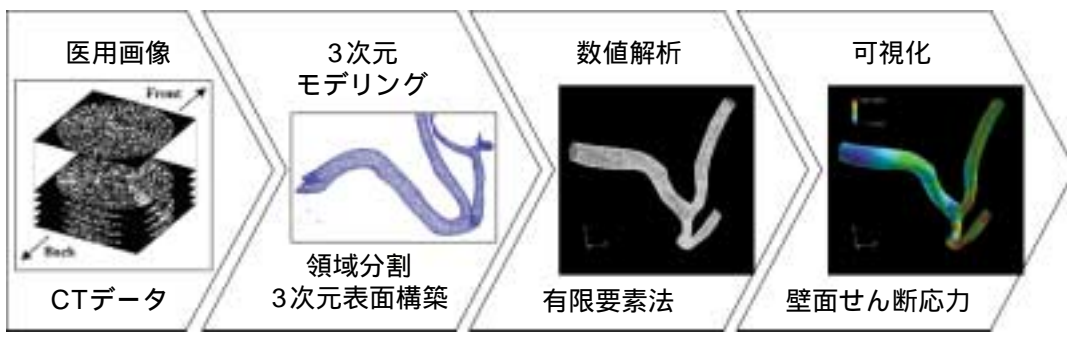


図-1 イメージベースド・シミュレーションの概要

レーション，結果の可視化と三つのプロセスから成る。まず，3次元モデリングでは医用画像より対象としている血管形状を抽出（領域分割）する。この際に，水平方向のスライス断面を用いる場合と，3次元のVoxel Dataより直接3次元モデル化を行う場合がある。前者については，閾値あるいはDeformable Model⁶⁾を用いて領域分割を行い，各断面の等値面を3次元方向に積み上げて3次元の表面構築を行う。

次に，このようにして得られた3次元モデル化された血管形状内を流れる血流シミュレーションを行う。一般に循環器系疾患を起こす血管は比較的太い動脈であることから，血液のレオロジーを考慮する必要はなく，ニュートン流体とみなすことができる。また，流れは心臓，大動脈あるいは大動脈弓では一般に乱流領域であるが，それ以外はレイノルズ数2000以下の層流領域とみなすことができる。

大循環器系内の流れを解く際，境界条件の取り扱いが重要である。流入境界条件では，血流の脈動の状態を組み入れる必要があり，超音波ドップラ流速計などで得られた結果を用いたり，あるいは適切な流入境界条件をモデル化する。一方，流出境界条件では，分岐していく血管が抹消抵抗として働くため，これらの影響を考慮に入れて境界条件をモデル化する必要がある。また，血管壁は弾性壁であり，場所によっては径の約10%血管が伸縮すると言われている。したがって，血流と血管壁の相互作用を考慮に入れる必要があるが，モデリングおよび効率的な数値シミュレーションのアルゴリズムの開発など解決すべき課題は多く，実際に取り入れている例はほとんど見られない。

最後に，解析結果をCGやアニメーションにより可視化し，血管内の血行動態を検証する。図-1の解析結果は壁面せん断応力分布を示している。壁面せん断応力は内皮細胞に影響を与えることから⁶⁾，血行力学において大変重要な因子である。このように結果を可視化し，静止画あるいはアニメーションなどの動画でみることにより，血管内で起こっている血流の状況を容易に把握することができる。臨床の現場では，インフォームド・コンセントが必要不可欠となってき

ているため，患者に対する診断方法の提示の際して有用と思われる。

まとめと今後の展望

体内の流体现象の中で，特に循環器系疾患で問題となる大動脈内の血液の流れに着目し，計算力学的な新しいアプローチとして医用画像に基づく，イメージベースド・シミュレーションについて取り上げた。動物実験あるいは倫理上の制約から，医療・医学分野における数値シミュレーションの果たす役割は今後，ますます重要になると考えられる。

最近では，数値シミュレーションをバイパス手術の際のプランニングに用いるなど，治療方法の選択や決定に用いる新たな試みがなされている。このような動きはさらに活発化していくと考えられ，患者のデータに基づき有効な治療・診断のため，計算工学的なアプローチはさらに発展していくであろう。

また，このようなシミュレーション手法は生体・医療工学の分野にとどまらず，多様な分野で用いることができる。例えば，コンクリートなどの強度設計ではコンクリートをスキャンして内部構造を画像解析する，ある意味イメージベーストに基づいた解析手法が取り入れ始められている。また，流体構造連成問題に関連して，例えば河川によってどのように河川敷が年月とともに変化していくか，風による建築物のゆれなどに応用することができる，などがあげられる。このように要素技術として土木工学のさまざまな分野に適用できるであろう。

参考文献

- 1 - Berger, S.A., Goldsmith, W. and Lewis, E. R. : Introduction to Bioengineering, Oxford University Press, 2000
- 2 - 厚生労働省ホームページ, <http://www.mhlw.go.jp>
- 3 - Taylor, C., Draney, M. T. and Ku, J. P., et al : Predictive Medicine: Computational Techniques in Therapeutic Decision-Making, Computer Aided Surgery, Vol. 4, pp. 231-247, 1999
- 4 - 大島まり: 脳血管障害における計算バイオメカニクス, 血管医学, 3, pp.519-527, 2002
- 5 - Sonka, M. and Fitzpatrick, J. M. : Handbook of Medical Imaging, Volume 2. Medical Image Processing and Analysis, SPIE Press, 2000
- 6 - Malek, A. M., Alper, S. L. and Izumo, S. : Hemodynamic shear stress and its role in atherosclerosis, JAMM, 21, pp.2035-2042, 1999

2-6 イメージベース計算力学

鈴木克幸

SUZUKI Katsuyuki
正会員 Ph.D.
東京大学助教授 新領域創成科学研究科

(要約) イメージベースの解析手法は、複雑な3次元体、多媒質体の解析に適した手法であり、機械部品やアセンブリ、岩盤、地盤、生体等の複雑な3次元体の解析に広く使われている。また、このイメージベースの解析、設計手法をベースとして、これまでのCADをベースとしたデジタルエンジニアリングに対して現物に基づくデジタルエンジニアリングの構築が行われており、日本の得意とする製造現場と設計をうまく結びつけることが期待されている。

イメージベース計算力学とは

現在、機械の分野では3次元CADの普及とともに、設計、製造、運用等のライフサイクルにおける製品データを3次元の電子情報として活用しようというデジタルエンジニアリングの流れが製造業の現場で進められている。同時に、計算機能力の大幅な向上により、CAEも急速に3次元解析へと移行している。しかし、これらの連携は必ずしもうまくいっていない。依然として、解析者はそのモデル生成に膨大な手間をかけている。特に、非常に複雑な形状の3次元体や多媒質体、構造流体連成解析や製造プロセスのシミュレーション等で現われる大変形の解析で、3次元のモデル生成は困難な作業である。

イメージベース計算力学とは、3次元のソリッドをボクセルとよばれる立方体で表現し、それを解析モデルとして用いるという考え方であり、Kikuchiら¹⁾により提案された。3次元体のある方向にスライスし、各スライスの画像(イメージ)を重ねてモデルを作成するということから、イメージベース解析とよばれる。この考え方は、医療の分野ではCT、MRIなどで広く使われてきた。

ボクセルのデータ構造は、通常CADで使われているスプライン曲面に比べ非常に頑健である。同じ形状に対してボクセルデータは一意的に決定され、また集合演算や変形などに対して不具合が起こりにくい。これを設計や解析に適用することにより、複雑な形状の表現を容易かつ確実に行うことが

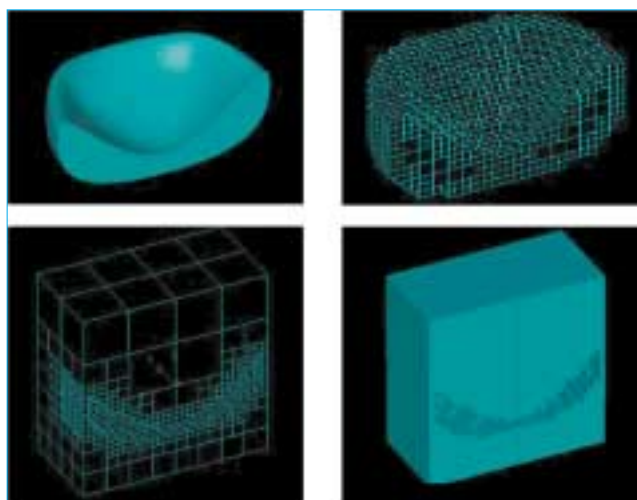


図-1 イメージベースのCAD (V-CAD) 左上の形状に対してボクセルでの形状表現(右上)、外側の定義(左右下図)を行っている



図-2 イメージベースの解析(有限被覆法) 左が一般的なボクセル分割による解析モデル、右が多重ボクセル分割による解析モデル

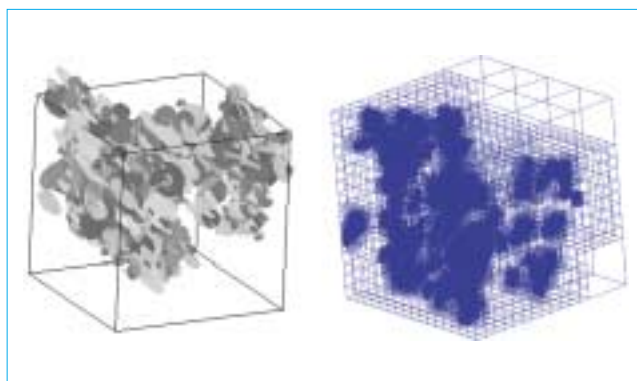


図-3 有限被覆法による1 000枚の亀裂面をもった岩盤の浸透流解析

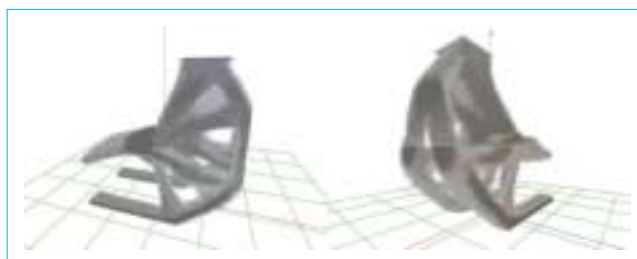


図-4 位相最適設計を用いたイメージベースの設計。3次元空間において設計領域と境界条件を定義すれば、最適な部材の配置を得ることができる

でき、形状モデリングから解析までを一貫した流れで行うことができるため、近年さまざまな研究開発が行われている。

イメージベース解析とイメージベース設計

イメージベースの解析手法・設計手法の例をいくつか示す。図-1 は理化学研究所で開発が進められている V-CAD²⁾ である。CAD から読み込んだ 3 次元形状をボクセルと各ボクセルごとの表面三角形で表現し、さまざまな解析への応用を行っている。図-2 は筆者らの有限被覆法の解析モデルの例³⁾ である。部分的に細かいボクセルを配置し、よりフレキシブルなモデリングを行っている。図-3 は同手法により、亀裂性岩盤の浸透流解析を行った例⁴⁾ である。3 次元空間内に 1 000 枚の亀裂をもった岩盤は、通常の有限要素モデルの生成は不可能であるが、このようなイメージベースのモデルであれば容易に作成することができる。また、図-4 は有限被覆法を用いた 3 次元位相最適設計により最適な部材配置を求めた例⁵⁾ である。これもイメージベースの設計手法と考えることができる。



図-5 ターボチャージャーとイメージベースモデル



図-6 鉄筋コンクリートとイメージベースモデル

現物ベースのデジタルエンジニアリング

これまでの話はコンピュータ内の仮想空間上でのイメージベースに関する技術であったが、これに 3 次元計測技術を加えると、これまでの CAD をベースとしたデジタルエンジニアリングに対して、現物をベースとしたデジタルエンジニアリングが構築できる。

例えば、日立とトヨタが開発した工業用の X 線 CT 装置⁶⁾ は、12 MeV の電子線線形加速器を用いることにより鉄換算で 350 mm の厚さの工業製品に対しての撮像ができる。例えば 0.2 mm の分解能で、従来機種で 1 断面数分かっていたのに対し、1 断面 10 秒、全体で数時間で断面撮像が可能である。図-5 はターボチャージャーをこの装置でイメージデータに落とした例である。鉄とアルミの密度による色の違いも表現されており、現物をベースとした多媒質体の解析に有効である。また、図-6 はコンクリートの中の鉄筋の様子を再現した様子である。これにより、鉄筋の腐食や断線等を詳細に調べることができ、解析モデルの生成にも用いることができる。

このように、前述のボクセルに対する設計、解析技術、さらに X 線 CT などを用いた 3 次元計測技術と、形状データから簡易的に現物のプロトタイプを製造するラピッドプロトタイプ装置を組み合わせると、図-7 のようにボクセルデータを中心とし、デジタル世界と現実世界を容易に行き来できる、新しいデジタルエンジニアリングが構築できる。

CAD をベースとしたデジタルエンジニアリングには、製造現場の熟練者の技能を活用することができない、過去の製品や実際物を活用することが難しい、設計者の責任が重く

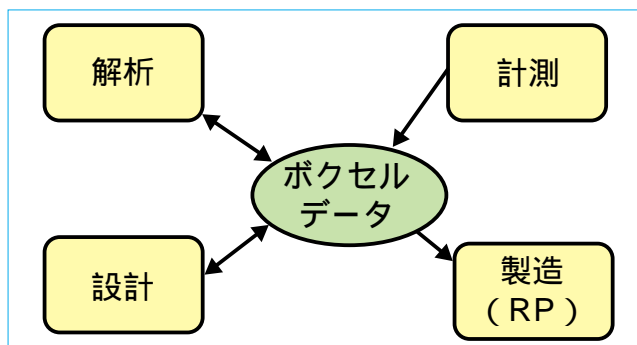


図-7 ボクセルを中心としたデジタルエンジニアリングの展開

なりすぎるという弊害も指摘されている。現物を中心としたデジタルエンジニアリングは日本の得意とする製造現場と設計をうまく結びつけ、日本固有のモノづくりの強みをデジタルエンジニアリングに織り込むことができると思われる。今後、日本のものづくりの復活のため、さらなる研究開発が望まれている。

参考文献

- 1 - Kikuchi, N. & Diaz, A. : イメージベース法が拡げるCAD/CAEの世界, 第14回Quintセミナーテキスト, 1998
- 2 - 理研シンポジウム ものづくり情報技術統合化研究プログラム, 第2回, 2002
- 3 - 金, 他: 被覆最小自乗近似を用いた線形構造解析, 応用力学論文集, Vol.3, pp.167-176, 2000
- 4 - 鈴木, 他: マルチレベル有限被覆法によるアダプティブ浸透流解析, 応用力学論文集, Vol.5, pp.263-269, 2002
- 5 - 坂, 他: マルチレベルボクセル解析を用いた3次元位相設計ツールの開発, 第5回最適化シンポジウム講演論文集, pp.241-246, 日本機械学会, 2002
- 6 - 高木, 他: X線とCTを活用するビットマップベースエンジニアリング, 日本非破壊検査協会平成13年度秋期講演大会講演概要集, 2002



コラム 非線形連続体力学から見た計算力学

矢富盟祥

YATOMI Chikayoshi

正会員 Ph.D.

金沢大学教授 自然科学研究科 地球環境科学専攻

非線形連続体力学に関する歴史的背景やその基礎的事項は著者が文献¹⁾で紹介している。ここでは、紙面の都合上、固体の場合に限った話をする。

理論解の研究時代

20世紀中頃までには変位やひずみが非常に小さいと仮定された微小変形理論が確立され、線形境界値問題の理論解が得られる問題はほとんど解き明かされた。その後、非線形連続体力学、すなわち変位やひずみが大きい有限変形理論における物質特性を表わす構成式の研究が精力的に行われるようになった。

工学的に非常に重要な「弾塑性体」の有限変形を考慮した理論的研究は、1950年代後半から1970年代にかけて、ケンブリッジ大学のR.Hillによって活発に研究されていた。有限変形を考慮する場合、構成式は何であれ、変位や変位増分などの支配方程式は非線形となり、その境界値問題の理論解を得るのは特殊な場合を除き不可能であった。

「計算力学」の誕生

この1970年代よりコンピュータの計算速度、メモリ容量が飛躍的に発展し、「有限要素法」を代表とする数値解析手法により、精度の良い近似解を得ることが可能となり、20世紀末には、「計算力学」という名で呼ばれる新分野が誕生した。特に、1970年代より、有限変形理論による弾塑性体のひずみの局所化からせん断帯の生成現象に対する研究、さらにそれらの要素依存性をなくす種々の研究が盛んに行われた。せん断帯近傍では変位は小さいがせん断ひずみが非常に大きくなるなどの理由により本質的には有限変形解析が不可欠だった。弾塑性体の構成式は、応力が、ひずみ経路によって異なることから、弾塑性係数を比例係数とした応力増分とひずみ増分が線形関係にある増分型となる。したがって、有限要素法では、力の釣り合い式も増分形で考え、節点変位増分を未知数とした線形連立方程式を解く陽解法増分法が汎用された。しかしながら、この陽解法増分法では、構成式の硬化の程度が小さくなると、応力が降伏曲面上に存在する保証がなくなり、解の誤差が蓄積するため増分幅を

非常に小さく取る必要が生じ計算時間が大幅に増加する。特に、軟化現象が生じる場合には解を得るのが不可能となる。

そこで、1980年代になって、流れ則 (Flow Rule) を陰解法2点差分近似とし、与えられたひずみに対し、まず弾性体と仮定した応力を求め、次にその応力を降伏曲面上に引き返すリタ - ソンマップ手法を用いた硬化・軟化にかかわらず非常に収束が早く、かつ精度の高い解が得られる陰解法による増分・反復結合法が提案された。この反復中、ニュートン法と整合させるには、理論的な弾塑性係数ではなく、整合 (Consistent) 弾塑性係数を使用する必要があることを J.C.Simo²⁾ が指摘した。

最近の研究動向

最近では、せん断帯の生成から、滑り面や亀裂の生成・進展までの一連の破壊過程を追跡する目的で、それまで破壊力学で汎用されていた変位の不連続面を有限要素の要素辺上に考えるのではなく、図-1のように要素内に組み込むことにより、面倒なりメッシュが不要となり、任意方向の進展を可能とする新たな有限要素法の研究が行われている。

その一つが、1993年頃より多々提案された不連続な形状関数を用いる「強不連続解析法」である。しかし、その手法ではいずれも変位不連続面両側の全ひずみ成分が同一になる欠点を有している。一方、1999年以降、T.Belytschkoらは、線形弾性体の場合に限られてはいるが、この欠点をもたない、変位不連続量やフリ - エレメント法と同様な応力の特異性をもつ変位項を、要素接点に付加する「X-FEM (eXtended FEM)」を提案している。

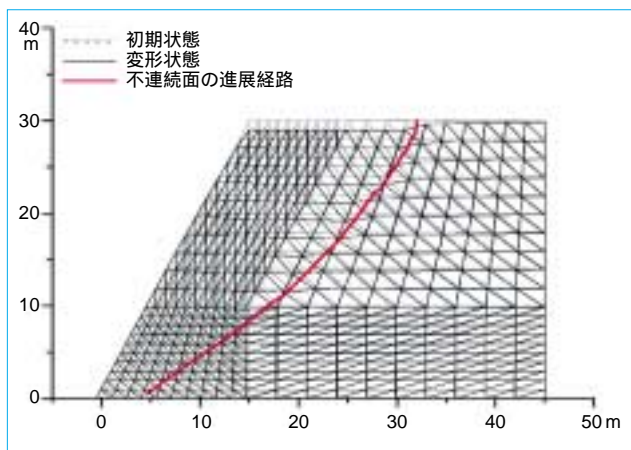


図-1 不連続面が要素内に組み込まれた滑り面形状

参考文献

- 1 - 矢富盟祥：連続体力学のエッセンス - その芽えから非線形連続体力学の確立まで - , 土木学会誌, 8月号, pp.21-26, 2000
- 2 - Simo, J. and Hughes, T. J. R. : Computational Inelasticity, Springer-Verlag, New York, 1998

コラム

計算機実験と数学

変わり者の独り言

岡本 久

OKAMOTO Hisashi

理博

京都大学教授 数理解析研究所

どんな分野でも他人と違うこと新しいことをやろうとすると必ずといってよいほど反対にあう。筆者の尊敬する M 氏は数学的な能力にもきわめて秀でた工学博士であるが、いつだったか『自分にとって自信のある論文に限ってよく掲載拒否にあう』とこぼしていたことがある。筆者は数学者であるが、証明する代わりにコンピュータ実験を多用してきた人間である。かつては数学の世界の中でコンピュータを使うと一段低く見られる(証明がない主張は数学ではないというわけである)ことが圧倒的であったが、ふてぶてしく主張を続けていたら、証明のない命題であっても賛同してくれる人々が少しは出てきた。しかし、まだまだ変人扱いされている。

最近、ヘビサイドの伝記¹⁾を読んでみて彼がとんでもない天才であることを思い知らされた。われわれが現在学んでいる電磁気学は、わかりにくいマクスウェルの理論をヘビサイド(あるいはヘルツ)が整備したものであることはあまり知られていない。彼は1912年のノーベル物理学賞の最終選考に残るほどの評価を得た科学者であるにもかかわらず生貧乏で、悲惨な死を迎えたということである。そのひとつの理由に当時の英国の郵政省の技師長をしていたプリースという人物が彼の理論を認めなかったことがある。プリースは経験こそすべての源泉であると主張し、「純粋な理論から恩恵を被ったことなど一度もない」と言っただけでなかった。また、数学などは経験の奴隷であると言っただけでなく、後にはこうした考え方はばかげていると見なされるようになったが、彼のような考えはすぐには消えなかった。理論と実践がバランスをとることができるためにずいぶん多くの年月が必要であったのである。

現在の日本も、難しい理論などいらぬ、といひ出す人間がぞろぞろ出始めているような気がする。100年前の英国に先祖帰りしないようにと祈るばかりである。翻って私の周辺を見ると、「数学は独自の世界だけで成り立つものであり、他の学問分野から恩恵を被ることはない」と主張する人はだいたい少なくなったものの、いまでも存在はしている。どちらの意見もさみしい限りである。ひとつの学問分野の繁栄は(そう意識されるかどうかは別として)他分野からの刺激に強く依存するはずである。したがって、こうした極論はいずれは消えるものと信じている。

今ではそのようなことはないが、20年くらい前には計算力学を酷評する人がずいぶんいたように思う。しかし、本当に役立つものはいつか正しい評価を得るものである。これはどの学問でもそうであると思う。問題は、それを推進した人々が年をとって研究者としてのエネルギーを失う前に正しい評価が出るかどうかである。

役に立つということの意味

今後日本が中国や韓国に追い越されないようにするために行うべきことは多いが、優れたアルゴリズムを見いだすことと、使い

やすいコンピュータプログラムを作成することは是非必要なことであろう。『3000万円くらいなら米国製プログラムを購入した方が安上がりだ』という意見が幅を利かすようになってはならないと思う。ところで、優れたアルゴリズムを見いだすにはコンピュータの知識さえあればよいかというとそうではない。数学的な素養も応用上の要請も理解できる人間がいて初めてできることであろう。そうした人間を育成してゆくことは不可欠の仕事である。しかし、これが意外にやっかいなのである。

前節でも述べたように、政治的な議論は細かく絞った方が賛成を得やすい。『これさえあればあとは何も要りません』とか、『これがすべてを説明するのであってあとはごみみたいなものです』といった議論である。こうした一刀両断の議論は記憶に残りやすいので非常に危険である。ひとつの理論が完成するまでにはさまざま異なるアイデアや方法が絡み合い、助け合いながら成長するのが普通である。ただ、間接的に貢献したものは表面に出ないので、貢献しているとみなされないことが多い。

例をあげよう。数学など役に立たない、と声明する人がいる。前述したように100年前の英国ではこうした人がでかい顔をしていた。数学など知らなくても新しい発見はできるとうそぶく人もいる。しかし、そういう数学無用論を説く人々も何らかの分野で業績をあげている人ならば相当優秀な頭脳をもっているはずである。そして、そうした優秀な頭脳がどうしてできたかという、それは(本人は気づいていないであろうが)若い頃に数学で苦労したために頭脳が鍛えられたせいではないのか。10年もたてば苦労したことだけを覚えているので、自分の頭脳がどれだけ数学から恩恵を受けているのかはまったく気づいていない。しかし、数学はそうした数学無用論者さえも影で助けているものであると私は信ずる。その一方で、数学も他の分野から恩恵をうけている。ヘビサイドのエンジニア的なアイデアはその後の数学に多大の影響を与えた。また、優秀な数学者になるには数学だけでできればよいというものではない。俳句を聞いてその美を感じるような能力がなければ数学の美を感じることもできまい。直接関係がなさそうだが、という理由で切り捨てるのは大変危険なことである。

現在流行していることだけを追っているとこうした危険に陥りやすい。日本には1億2000万もの人がいるのである。一見非主流と思えるようなところでふらふらしている変わり者がある程度養っておかないと将来に禍根を残すのではないかと思う。

あとがき

(1) 優れたコンピュータプログラムを書くことができる人物はたいていの場合数学的な能力にも優れていた。筆者の周辺では大浦拓哉氏がその例である。大浦拓哉氏の作った高速フーリエ変換(FFT)のプログラムはきわめて高速で、しかもサブルーティーンとして使いやすい。さらに、参考文献2から簡単にダウンロードできる。数学的な考察が具現化したひとつの好例であると思うのでここに紹介させていただきたい。

(2) 筆者は十数年ほど前に榊大林組のスーパーコンピュータを使わせていただき、研究が大いにはかどったことがある。差し障りがあるといけないので実名は書かないけれども、当時お世話になった大林組の方々に深く感謝の意を表します。

参考文献

1 - Nahin, P.J.: Oliver Heaviside, The Johns Hopkins University Press, 2002
2 - 大浦拓哉: <http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~ooura>

3-1 地球シミュレータ

3-1-1 取材記事

地球シミュレータの概要

2002年3月に運用が開始された地球シミュレータは、総プロセッサ数5120個、ピーク性能40 Tflops（1秒間に40兆回の演算を実行可能）、主記憶容量10TBの世界一の性能を誇る国産超並列型多目的スーパーコンピュータである。地球シミュレータは、平成9年度に当時の科学技術庁（現文部科学省）が地球温暖化やエル・ニーニョ現象等の地球環境変動の解明と予測を目指して開始したプロジェクトで、宇宙開発事業団、日本原子力研究所、海洋科学技術センターによる共同チームである地球シミュレータ研究開発センターが開発を実施し、現在は地球シミュレータセンター（<http://www.es.jamstec.go.jp/esc/jp/>）が運用管理を行っている。

上述したプロセッサ一つが、演算速度8 G flops、記憶容量16 GBの性能を持ち、8プロセッサで一つのノードを形成している。この1ノードが、従来のスーパーコンピュータに相当し、地球シミュレータにおいては640ノードが高速ネットワーク（データ転送速度12.3 G bps）で並列接続されている。この地球シミュレータの真の実力を世界に知らしめたのは、Linpack とよばれる浮動小数点演算のベンチマークテストにおいて、638ノード（5104プロセッサ）を使用してピーク性能の87.2%に相当する35.61 Tflopsを達成したときである。この結果は、これまでの世界最速コンピュータである米国ローレンスリヴァモア国立研究所のASCI Whiteシステムの7.226 Tflopsを大幅に凌ぐ性能で、2002年4月発行のニューヨークタイムズ誌では、1957年に旧ソ連のスプートニクによって人工衛星の打ち上げ一番乗りが先を越されたショックになぞらえて、コンピュータニクとその衝撃を表現したほどである。

このような人類がこれまでに手にしたことのない高速コンピュータを用いて、どのような研究が行われているのか、地球シミュレータが目指すものは何かということを知るため、地球シミュレータセンターを訪問し、取材を行った。

地球シミュレータ取材

2003年2月10日。横浜市金沢区のJR新杉田駅から徒歩10分程の距離にある海洋科学技術センター横浜研究所内の



写真-1 見学室から見た地球シミュレータ

地球シミュレータセンターを訪れた。地球シミュレータは、長さ65m×幅50m×高さ17mのシミュレータ棟に設置されており、居室等がある建屋と渡り廊下でつながっている。比較的簡単な経路で見学室に入ることができ、窓越しに装置の全容を展望できる。「この地球シミュレータ棟は免震構造でできていますが、ただ今通ってきた廊下と本館は免震構造ではありません。そのため、大きな地震時には、渡り廊下の部分から切断され、地球シミュレータの安全性を確保するように設計されています。」と、地球シミュレータ運用推進課の菊池一成さんが説明してくれた。結合ネットワーク部分を中心に各計算ノードを納めた筐体が整然と並んでおり、その全景は壮観である。各筐体には、アクセス中に点灯するランプが取り付けられており、膨大な数のランプがめまぐるしく点滅を繰り返す様子は、いかにも巨大コンピュータといった印象を受ける（写真-1）。

次に、ご自身、京都大学電子工学出身で、核融合分野のシミュレーションが専門であるという佐藤哲也センター長に、話を伺った（写真-2）。

まず、当センターの運用が開始されるまでの経緯を簡単に教えてください。

佐藤：もともと航空宇宙技術研究所にいらっしゃった三好甫さんが中心となって、世界最速のコンピュータを作ろうとする計画があったのです。一方、1990年代に入り、地球温暖化をはじめとする地球環境問題がクローズアップされ、地球環境変動を解明し、その将来を予測するためには、高速の計算機が必要とされていました。両者の目的が一致して、結果として「地球シミュレータ」の開発が始まったのです。しかし、残念ながら、最大の功労者である三好さんは、地球シミュレータの完成を見る前に他界されました。

これだけの国家プロジェクトですから、さまざまな人間模様が背景にあるんですね。では、地球シミュレータを開発するうえで、最も重要だった技術面を教えてくださいませんか？

佐藤：それは、多数のノードを効率よく動作させるための、高



写真-2 佐藤地球シミュ
レータセンター長

速データ転送システムであるスイッチング・ネットワークの開発です。そのためには、非常に小さい超高速集積回路を開発し、各ノード間の距離を短縮して、ネットワーク効率を上げる必要がありました。しかし、小型で超高速の回路を開発する場合、発生する熱の問題が非常に大きくなり、技術的には困難をきわめました。結果的には、これらの問題を解決し、このような超高速のコンピュータが誕生したのです。

現在、世界最速という面ばかりが騒がれていますが、その他にもセールスポイントがあれば教えてください。

佐藤：まず、5か年で作る計画を立て、実際に5年で開発できたこと。これは、わが国の技術力として誇れる点だと思います。また、運用開始直後のテスト時には初期不良が見られましたが、それを修理した2002年の夏以降、640ノードが安定して動作している点も特筆できる点です。組織の体制面に関して、当センターが海洋科学技術センター内の組織として位置づけられていることで、じっくりと研究に打ち込める環境にある点も重要です。しかしながら、もっとも大きなセールスポイントは、やはり高速演算の面です。当設備は、単純な線形代数の連立方程式を解く Linpack のベンチマークテストにおいて世界最速を樹立しましたが、その後非線形・非平衡を対象とした大気大循環モデルを用いた計算においても、ピーク性能の65%に相当する27 Tflops を記録しました。これは、多目的に活用できる超高速コンピュータの実用性という点で、非常に大きな意味をもちます。

では次に、現在実施されている研究内容等について教えてくださいませんか？

佐藤：現在は、大気・海洋分野の研究が30~35%、次いで固体地球が15~20%、計算科学が10%、その他先端技術分野が15%程度です。残りは、センター長権限で研究を選定できるのですが、現在は国際協力などで利用する予定です。

研究テーマの選定はどうやって決められたのですか？また、計算機の利用料や、今お話のあった国際協力についてもう少しお聞かせください。

佐藤：実施中の研究は、すべて公募研究で採択されたものです。公募は昨年6月と11月に実施しました。採択の基準は、研究レベルが高い点はもちろんですが、研究目的が人類に貢献するものでなければなりません。したがって、レベルが高くても個人的なものは対象から外しています。また、現在計算機

の利用料は取っていません。ただし、資源を有効に使うことが重要なので、1課題につき10ノード程度を割り当て、その段階でプログラムの最適化(ベクトル並列化)を十分行っていたら、最適化の審査をパスすれば、より多くのノードを使えるような運用システムにしています。なお、現在、米、英、伊の3か国から共同研究の申し出がきており、すでに覚え書きをかわしています。また、他にも数件進行中です。

セキュリティ対策はどう対応されていますか？

佐藤：まず、研究者は、当センターでしか計算できないようなシステムにしています。これは、セキュリティ対策の一面もあるのですが、私としては別の効果を狙っています。すなわち、リモートアクセスを可能にすると、無駄な計算を実行しがちになります。当センターでしか作業をできないという制約により、研究者は無駄な計算を控え、結果的に資源を有効利用することができるかと期待しています。なお、他にもセキュリティ対策は万全を期していますが、根本的にハッカー対策は不可能だと思いますので、非常事態になった場合、計算中の貴重なデータをいかにして保存するかといった対策を講じています。

これまでの運用を通じて問題点はございますか？

佐藤：巨大なコンピュータシステムを利用するプログラムでは、計算によって生成されるデータも膨大なものとなるため、そのデータを保存する媒体、保存方法などが非常に重要になります。この点については、現状の記録装置だけでは不十分と考えられ、効率的な保存方式に改造しているところです。なお、研究成果として得られた非常に膨大なデータとそれに付随する成果は、インターネットを介して公開していく予定です。

当センターおよび地球シミュレータの今後の展望をお聞かせください。

佐藤：まず、コンピュータの面では、2010年までにペタフロップス演算が可能なマシンが開発されるでしょう。ただし、半導体方式では、発熱の問題で、これが限界だと思われます。一方で、コンピュータを動かすのは、あくまで人間ですから、人類の知恵の集積も、このような科学計算分野では不可欠です。これは当センター設立の理念にもあてはまるとは思いますが、現在実施中の研究を通じて、人類に貢献できるような知の集積を行うことが求められていると思います。

最後に、土木学会員に対してメッセージをいただけないでしょうか？

佐藤：土木分野でも、科学技術計算は非常に重要なものだと思います。例えばですが、土木の分野でも、専用のシミュレータを作られてはいかでしょうか？技術の進展に大きく貢献すると思います。このような設備の建設(開発)も、公共投資の一つのあり方ではないでしょうか。

本日は、大変貴重なお話を聞かせていただき、どうも有り難うございました。 【坂井】

仲敷憲和

NAKASHIKI Norikazu

正会員 工博

(財)電力中央研究所 環境科学部 上席研究員

文部科学省では、地球温暖化や異常気象等の地球環境問題を科学的に解明し適切な対応を図るため、「人・自然・地球共生プロジェクト」を実施している。このプロジェクトでは、気候変動に関する政府間パネル（IPCC）における第4次評価報告書に寄与できる精度の高い温暖化予測を目指して、東京大学気候システム研究センター、気象庁、気象研究所、海洋科学技術センター、電力中央研究所等が地球シミュレータを活用して研究を行っている。

このうち、電力中央研究所は、米国大気研究センター（NCAR）、ロスアラモス国立研究所（LANL）、九州大学応用力学研究所と共同で、「大気海洋結合モデルの高解像度化」に取り組んでいる。この研究では、NCARの第2世代大気海洋結合モデル（CCSM2）をベースとして、地球シミュレータに適した高解像度モデルを開発するとともに、温暖化予測では、IPCC/SRES排出シナリオに加え、京都議定書以降の温暖化防止シナリオについても検討する。このため、地球シミュレータを用いて、最適ソフトウェアの開発、大気モデルの高解像度化、海洋モデルの高解像度化、結合モデルによる温暖化の予測等を行っている。また、地球シミュレータで計算した温暖化予測結果は、世界の研究者に向け公開する予定である。

今回は、そのうち高解像度全球海洋モデルについて紹介する。LANLが開発した全球海洋モデルPOP（Parallel Ocean Program）は、スカラ超並列計算機上で実行することを想定して開発された並列計算プログラムである。このため、ベクトル計算機である地球シミュレータで使用するために、まずプログラムのベクトル化を行った。また、並列計算に関しては、地球シミュレータ上で使

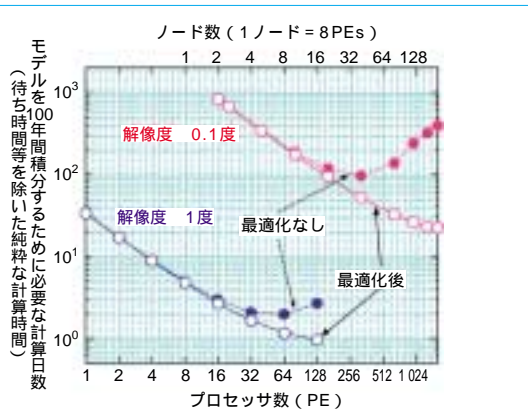


図-1 地球シミュレータ上での海洋モデルPOPの計算効率

用ノード数を増加させると、計算時間が減少せずに逆に増加するという非常に深刻な問題があった。このため、通信粒度（1回の通信量）を増やして通信回数を減少させるなどのプログラム改良を行った。このような最適化を行ったPOPを水平解像度約1度（約100 km：格子分割320×384×40）、および約0.1度（約10 km：格子分割3600×2400×40）まで高解像度化し、地球シミュレータ上で測定した計算性能を、図-1に示す。解像度0.1度の場合、使用ノード数が多くなると最適化による性能改善の効果が顕著である。解像度1度の場合には、4ノード使用時に100モデル年積分に約40時間を要し、解像度0.1度の場合には120ノード以上を使用して、100モデル年積分には約22日を要する。従来の計算機では不可能であった高解像度全球海洋モデルの計算も、地球シミュレータを用いることにより現実的なものになってきた。

図-2は、高解像度全球海洋モデル（0.1度モデル）を用いた計算結果のうち、特に日本周辺を示したものである。気候予測に用いられている大気・海洋結合モデルでは、計算資源の制約などから、中程度の解像度（約1度程度）のモデルが用いられており、中規模渦や黒潮などの再現が困難であった。高解像度モデルでは、水平解像度を10 km程度にした結果、大気中の高気圧や低気圧に相当する海洋の中規模渦を直接計算することができるようになった。計算結果では、四国の沖合海域にやや不自然な蛇行域が形成されているものの、沖縄や南西諸島の西側を北上した黒潮が、犬吠崎付近で離岸して黒潮続流となる様子が良く再現されている。黒潮と親潮のフロント部分の暖水塊や冷水塊の形成も定性的によく現われており、高解像度化によるメリットがよくわかる。また、日本海では、対馬海峡、津軽海峡、宗谷海峡の通過流量について検討を行った結果、既存の観測値とよく一致していることがわかった。

温暖化による日本周辺の海洋環境の変化は、水産資源の変化や降雨、降雪などの気象の変化をもたらすものと考えられる。地球シミュレータを用いると、大気・海洋結合モデルで得られた温暖化予測結果を、このような高解像度モデルの境界条件に使用することができ、日本周辺など局所的な温暖化の影響について、検討ができるようになるものと期待される。

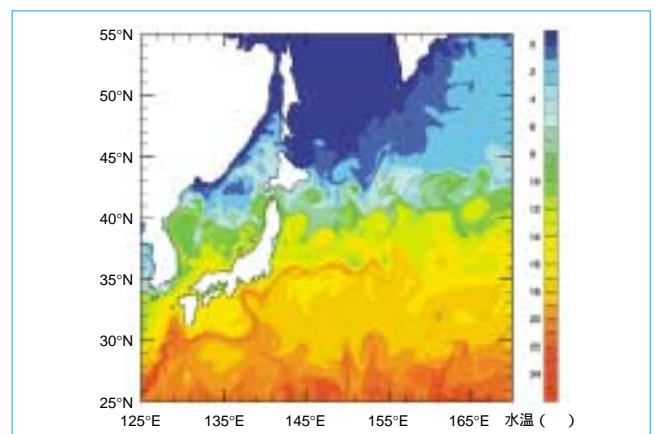


図-2 高解像度全球海洋モデル（水平解像度約10km）で計算された日本周辺の海表面水温（SST）の分布

3-2 グリッドと グリッドコンピューティング

計算力学の新たな計算プラットフォームとして

長嶋雲兵

NAGASHIMA Umpei

理博

産業技術総合研究所 グリッド研究センター 総括研究員

はじめに - グリッドとグリッドコンピューティング -

グリッドとは、インターネットに接続された多様な情報資源を有機的かつ動的に統合することで、単一のシステムではとうてい実現できないような大規模で高速な計算環境を構築したり、ひとつの計算センターではとうてい装備できない大容量データを総合的に取り扱うシステムの構築を容易にし、さらにそれを高い信頼性と安定性をもつシステムとして利用するための情報資源の統合技術を意味する。グリッドは、科学技術計算ばかりでなく通常の共同作業やコミュニケーションに格段の進歩をもたらす画期的な基盤技術であるばかりでなく、次世代インターネットや携帯電話網やケーブルテレビ網、衛星通信網などあらゆる情報通信網とそれにつながる情報資源のシームレスで統合的な利用を可能とすることを意図している(図-1)。

グリッドの語源はアメリカの送電網がグリッドとよばれていたことから、オフィスや家庭にある電気コンセントに電気機器を接続すれば電力というサービスを利用できるのと同様、情報コンセントに情報機器を接続すれば、いつでも誰でもどこからでも均質な情報サービスを提供することを目指している。グリッドは、従来の計算機システムに対し、より高性能・大容量システムの構築を可能とするだけでなく、そのハードウェア構成を動的に変化させることも可能にする。Web では、取り扱うことのできる情報資源は基本的にはコンテンツ文書であったが、グリッドではソフトウェアや人的資源をも含めた、多種多様なネットワークにつながる装置を統合することで、人の多種多様な情報処理を可能とする柔軟なシステムの構成を短期間で安価に行うことができるようになる。

グリッドコンピューティングはこのグリッド技術の一つの側面であり、グリッド上の計算機群を用いて計算を行うための技術である。「グリッド」=「グリッドコンピューティング」ではないことに注意してほしい。グリッドコンピューティングのユーザは、物理的に分散された計算機群を個々の計算機の設置場所や利用方法を意識することなく、いつでもどこからでも安全に利用することができる。そのため、グリッド上の大規模な計算機資源を利用すれば、一つの計算機センターに置かれたスーパーコンピュータシ

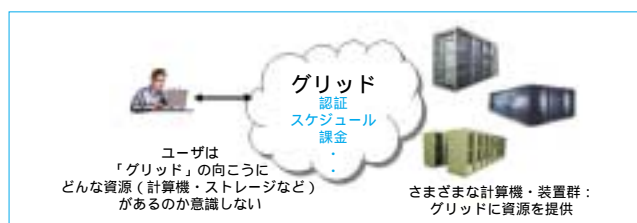


図-1 グリッドのイメージ

ステムの性能をはるかに凌ぐ計算能力を得ることが可能となり、これまでその規模の巨大さから解くことを諦められていた大規模問題の計算を可能にすることが期待されている。もちろん、グリッド技術により、計算規模にあわせた計算機資源を利用することによる会社規模から地域・地球規模の計算機利用効率化や、グリッドに接続されたアプリケーションサーバを利用することにより、ユーザが煩雑なソフトウェアのインストールや設定作業を行うことなしに手軽に計算を実行できるという利便性を向上させることも期待されている。

グリッドの実用化にはまだ解決すべき問題が多いとはいえ、グリッドの普及については Global Grid Forum¹⁾ が組織化され、国際的なグリッド技術の標準化や情報交換が行われている。国内でもグリッド技術の発展と普及を目的としたグリッド協議会²⁾ が発足している。グリッドの技術的動向は、これらのホームページなどを見ていただくことにして、本稿ではグリッドの作り出す情報処理システムやグリッドに適したアプリケーションに焦点を当ててみたい。

グリッドが作り出す情報処理システムとグリッドに適したアプリケーション - 計算力学への可能性 -

まず、グリッドで作られられる典型的なシステムとして複数の計算資源上で分散・並列計算を行うシステム、つまり大規模なスーパーコンピュータ等を結合し、計算資源や計算規模の拡大を目的とするシステムをあげることができる。いわゆるグリッドコンピューティングシステムである。また手元にある計算機でユーザインターフェースを提供し、遠隔の計算機群を効率よく利用するシステムもある。このインターフェースを portal とよび、手元にある PC や WS からネットワークで結合された大規模な計算機システムに連続的に接続し利用することを目的とするシステムである。われわれも、分子軌道計算プログラムのデファクトスタンダードである Gaussian シリーズの効率の利用を目指した Gaussian portal³⁾ を開発している。大きく注目されているのは、遠隔の機器を制御したり、機器から出力されるデータを迅速に処理するシステムである。これは例えば、衛星から送られてくるデータを処理したり、天体望遠鏡や電子顕微鏡のような大型装置を遠隔地から使うシステムである。大量データや分散配置された巨大データを処理するシステムも注目を集めている。これは、いろいろな所にあるデータを一斉に検索したりするシステムで、data-intensive

computing ともよばれている。グリッドであることを感じさせるシステムとして、共同作業を支援するシステムすなわちグリッドをベースに映像や音声などを送る会議システム Access Grid⁴⁾の開発が進められている。他にも遊んでいるPCの計算機資源を活用するシステムとして、seti@home⁵⁾やAD-POWERS⁶⁾のようにスクリーンセバに計算を組み込んで遊休のPCの計算機資源を利用するシステムがある。PCのインターネット常時接続が常識になっている米国では、Entropia⁷⁾などすでに実際にビジネスとして実用化されているし、日本でもNTTのCell Computing⁸⁾として商業ベースでの利用が開始された。

グリッドでネットワークに接続された計算機を用いた並列処理ができるとはいえ、どのような並列プログラムも速く実行できるわけではない。グリッドが活躍する場である広域のネットワークでは、バンド幅が限られているので、なるべく計算機システム間のデータ転送が少なく、データ転送間に実行される計算時間のある程度かかるタスクである必要がある。これを「粒度の大きな計算」と業界ではいうが、科学技術計算のかなり多くの計算が粒度の大きな計算であることが最近になって広く認知されるようになってきた。

グリッドコンピューティングで最も典型的なアプリケーションはいわゆるパラメータ検索実行タイプアプリケーションである。グリッドでは、莫大な数の計算機の利用が可能となるので、入力のパラメータを網羅的に変えて、同じプログラムを莫大な数の計算機上で同時に大量に実行させて、最適なパラメータを見つけるというものである。これを網羅的計算とかコンビナトリアルコンピューティングといい、いろいろな工学分野の最適化に応用できる。また、グリッドコンピューティングではデータベースや並列計算システム、ベクトル型スーパーコンピュータなど、異なる計算機を有機的に結合して計算を効率的に実行するという統合的計算が可能になる。現在でも、専用計算システムと汎用システム、データベースと並列計算システムとの統合化を行って大規模な情報処理を行うシステムの構築の試みが始まっている。

創薬や化学工業の分野ではすでにデータベースと実験装置を有機的に結合し、有効な物質を短期間に見いだす方法としてコンビナトリアルケミストリの技法が実際に製品開発に用いられている。グリッドはデータベースと網羅的計算を行う計算機を結合して(統合計算)、このコンビナトリアルケミストリにインシリコの高速スクリーニング技法を提供する。

計算力学のための並列処理プラットフォームとしてのグリッドコンピューティング - その課題 -

グリッドの大きな課題は、セキュリティと分散されたリソースの管理であることは言うまでもないが、ここでは計算力学における並列処理技術のプラットフォームとしてグリッドの課題を考えてみる。

グリッドを並列処理技術として見たとき、グリッドは新しい挑戦的な計算機システムである。これまでの並列処理では、主に同じプロセッサを用いた性能の乱れの少ないネットワークで構成されたシステムを対象としてきた。グリッドでの並列処理環境では、計算資源として用いられるプロセッサが異なる不均質なシステムであり、また、高速のネットワークが利用できるとしても、そのバンド幅や通信遅延は時間とともに変動する。また、使うことのできる計算機の数も動的に変化する。グリッドでは基本的にヘテロで動的な並列処理環境を対象としなくてはならない。そのため、グリッドでは、従来のいろいろな並列処理技術もこのようなヘテロで動的な環境に対して、見直される必要がある。

科学技術計算システムが大規模かつ複雑化し、高性能計算機の形態が多様化する中で、そのソフトウェアはモジュール化、コンポーネント化する必要に迫られている。例えば、PCクラスタなど並列計算機は高性能化するための有効な手段である。が、ユーザー側にとっては、並列化されたルーチンを利用するために、新たにそのルーチンを用いているプリ・ポスト処理等のプログラムの書き換えなどの作業が必要になる。統一化されたインターフェースをもつ計算コンポーネントとすることで、計算資源が逐次計算機でも並列計算機でも、クライアントは同様なインターフェースで利用できるようにすることはこれからの科学技術計算ソフトウェア開発では重要である。さらに広域のネットワーク環境ではローカルな環境に比べて、さらにさまざまな種類があり、いろいろな環境の違いがある。このような環境でソフトウェアを開発する場合、統一的なインターフェースで計算資源を提供することにより、高性能な計算資源を広域ネットワーク環境で手軽に利用できるようになる。

Webが新しいITの世界を開いたように、グリッドでも着実にシステム開発、応用の開拓を進めることによって、これまでとは違う新しい計算分野、基礎、応用、そして研究開発の世界が開けることが期待される。そもそも計算機システムに期待されている役割はユーザの問題を素早く解決してくれることであろう。プログラムを書くか書かないかにかかわらず、また、どこで計算されるかにかかわらず、なるべく早く、わかりやすく答えを出してくれることである。計算機アーキテクチャやネットワークについて特に意識する必要はないのが望ましいことは言うまでもない。これが、グリッドに与えられた使命ではないかと考えている。そのため、計算力学の研究に従事される多くの研究者がグリッドに興味をもち、グリッドのミドルウェアを開発する情報工学の研究者と協力できる環境が構築できるようになることを期待している。

参考文献

- 1 - <http://www.gridforum.org/>
- 2 - <http://www.jpgrid.org/>
- 3 - <http://unit.aist.go.jp/grid/QCgrid/>
- 4 - <http://www.accessgrid.org/>
- 5 - <http://www.planetary.or.jp/setiathome/learnmore.html>
- 6 - <http://www.dnp.co.jp/jis/news/2002/20020604.html>
- 7 - <http://www.entropia.com/>
- 8 - <http://www.cellcomputing.jp/>

3-3 未来へ向けた計算力学教育

3-3-1

アメリカの計算力学教育

関口美奈子

SEKIGUCHI Minako

工博

ミシガン大学工学部機械工学科 研究員

アメリカの大学で行われている計算力学教育について、自分が卒業したミシガン大学の機械工学科のカリキュラムを紹介したいと思う。4年間の学部授業のうち計算力学がどれくらい含まれているか、また学部と大学院での計算力学教育の違いなどについても言及する。

ミシガン大学のカリキュラムについて工学部の便覧に従い簡単に説明すると、工学部に入学した生徒は、1年目の終わりのころ(2学期制なので、1年目の2学期目)にAerospace, Biomedical, Civil, Electrical, Industrial, Materials Science, Mechanical, Naval Architecture, Nuclear等の15の学科から一つ専攻を選択する。これらのすべての学科に共通する必修科目は、数学(微積分学, 線形代数, 微分方程式, 幾何学など), 化学, 物理, プログラミングの基礎や, 国語(英語)と経済学を含む工学部以外の単位などの合計52単位である。また, 機械工学科からは材料力学, 動力学, 振動工学, 熱・流体力学, 設計・製造など44単位分が必修科目となっている。さらには工学系選択科目が12単位, その他工学部以外からの選択で卒業に必要な128単位が構成される。

機械工学科の学部の授業で, 具体的に「計算力学」キーワードが科目名についているのは, Introduction to Finite Elements in Mechanical Engineering, Computer Aided Mechanical Design, Computational Heat Transferの三つある。これらはすべて工学系選択科目であり, 必修ではないが, 材料力学や振動工学など機械工学科の必修科目を修得していることが前提である。例えばFEM基礎のクラスでは, 一般的に使われている市販のFEMソフトウェアの種類やそれぞれの特徴の紹介, 解析モデルの作り方, 拘束条件の入れ方, (応力・振動・圧縮など)解析の種類, そして解析結果の検証方法などを習う。

また, 必修である3レベルある設計の授業では, デザイン・プロジェクトを遂行するにあたり, 基礎理論に従って設計したモデルを, 市販のCAE(Computer Aided Engineering)ソ



図-1 CAEソフトウェアの利用例

フトウェアを駆使して, 検討したり必要な設計変更を提案したりすることが要求される。つまり学部では, 実際に数値解析プログラムを書けるようになるのではなく, CAEソフトウェアを使って解析し, その結果を学部で教わる構造力学や振動工学, 熱力学などの知識を基にどのように検証し, 設計に反映させるかを学ぶ。図-1は, 大学4年生がTerm ProjectでSAE Bajaのアルミ・ブレーキ・ディスクをFEM解析し, 減速時のブレーキの変形量や最大応力値から安全性の検証をした例を示している。

学部の授業で, 10年前くらいから市販のCAEソフトウェアを使っている授業や宿題が前提となっている理由は, ミシガン大学の工学部の卒業生は, 特に製造関係の企業や研究所などに就職すると, CAEソフトウェアが使えることを要求されるためである。また, このような学部の授業を可能にする環境として, 1983年に全米初に構築されたミシガン大学工学部のネットワーク・システム(CAEN: Computer Aided Engineering Network)には, ABAQUS, ANSYS, MSC.Nastran/Patran, HyperMesh, ADAMS, DADS, LS-DYNA, FLUENT, Moldflow, C-MOLD, I-DEAS, Pro-E, Unigraphicsなどの, 構造や流体に関するCAEおよびCADソフトウェアが十分に整っていて, 工学部の学生であればいつでもどこからでも24時間アクセスして使うことができるようになっている。これらのソフトウェアは, 学部の授業でより多く使われるほど, 卒業生たちの就職先でも普及するため, ベンダー側の要請で大学のシステムに組み込まれたものがほとんどである。

一般CAEソフトウェアの基礎となる詳細な理論は, 大学院の授業でカバーされる。大学院生向けの中・上級FEMコースになると, 工業数学や応用数学, また固体力学や構造力学が必修で, 市販ソフトを使いこなすほかに, 実際のプログラミングも行う。いずれにしても, アメリカでのいわゆる計算力学教育では, 学部や大学院を問わず, 計算手法そのものよりも, それを使って工学問題を解く手法, また, 機械部品の設計に視点を置いて, CAEの教育に力を注いでいる。

3-3-2

ヨーロッパにおける計算力学教育

榎山和男

KASHIYAMA Kazuo
正会員 工博
中央大学教授 理工学部土木工学科

ヨーロッパにおいて特色ある計算力学教育を行っている事例は世界の他の地域に比べて多い¹⁾。ここでは、土木情報科学という学問を確立してその中で統一的に計算力学・工学教育を行っているドイツの事例と、計算力学を前面に出したカリキュラムをもつイギリスのウェールズ大学スウォンジー校土木工学専攻の事例を紹介する。

ドイツの計算力学・工学教育

ヨーロッパの国の中で最もユニークでかつ統一的な計算力学教育を行っている国はドイツである。ドイツの大学の土木工学科には、基幹講座の一つとして土木情報科学 (Information Science in Civil Engineering: ドイツ語では Bau-Infomatics) という講座 (教授が2~3人) があり、その講座が主に計算力学教育を担当している。ドイツでは、コンピュータの性能とIT技術の急速な進歩を受けて、それと土木工学を融合させた土木情報科学という学問を世界に先駆けて確立し、1980年代後半から土木情報科学を名乗る講座が各大学で次々と誕生した。学問の確立と講座の設立にあたったのは、力学系講座で計算力学を専門としていた教員がほとんどであった。

ドイツの土木工学科では、計算力学を計算技術・手法ととらえて力学系科目ではなく、この土木情報科学系科目に位置づけて、プログラム言語教育や、オブジェクト指向モデリング、CAD、CAE、GISなどの科目と連携をとりながら教育を行っている。土木工学科における土木情報科学関連のカリキュラムの一例として、ダルムシュタット工科大学の例を表-1に示す (なお、科目名は大学案内に掲載されている英語訳名で示す²⁾)。ドイツの大学は Semester制を採用しており、履修年限は最短で5年 (10学期: 1学期間は半年) で、卒業時に与えられる学位 Diploma of Engineering は日本や米国での工学修士に相当する。表中の科目は、すべて学期 (半年) 単位の科目である。表から、日本の大学に比べてはるかに情報科学・計算力学関係の開講科目が多

くかつ充実していることがわかる。Informatics in Civil Engineering の科目は情報リテラシー教育を含むものであるが、ここでは、Operating Systems, Excel,VBA, Internet, C++, CAD の基礎等の教育を行っている。日本との比較で興味深いのは、プログラム言語として Fortran を教育している土木工学科はドイツでは皆無であり、C++ もしくは Java 言語を用いたオブジェクト指向プログラミングを教育している。これは、プログラム作りを超えてアプリケーションシステム作りまでをできることを視野に入れてのことである。また、CAD や GIS についても独立した科目を設けており力を入れている。なお、ドイツでは調査した全ての土木工学科で、Auto CAD を用いた CAD 教育を行っている。このようなドイツの統一的な情報科学教育は、建設業界や情報産業界に対して、土木情報科学の教育を受けた卒業生は計算力学のみならず、オブジェクト指向プログラミングや CAD 等に精通しているというメッセージを発信しているといえ、産学の連携が取りやすい環境を作っている。計算力学関連科目も、数値解析法/有限要素法があり、日本の大学院修士課程に相当する後半の学期 (7 学期以上) では、数値流体力学、CAE、並列計算などの科目が配当されている。

日本では、ほとんどの大学で計算力学を情報科学系科目ではなく力学系科目と位置づけており、カリキュラム改正を行う際には、本来の力学系科目を圧縮してそこに何とか計算力学の科目を押し込めるようなことをしている例がみられ、お互いが消化不良になっている感がある。ドイツの考え方は、今後の教育カリキュラムを考えるうえで参考になる。

また、ドイツでは最近国際標準に合わせるとともに海外から留学生を多く集めるために、各大学において大学院修士コースが設立されている。この修士コースは、従来の10学期制の学部の高学年に平行して設けられているものであり、ドイツの学生も学部在籍しながらこの修士コースに編入できる制度をとっている。なお、講義は原則英語で行われている。その修士コースに計算力学または計算工学を名乗る専攻を設ける大学が増えている。一例として、3年前からスタートしたミュンヘン工科大学の計算力学専攻のカリキュラム

表-1 ダルムシュタット工科大学土木工学科の情報科学関連のカリキュラム

1~2学期	Informatics in Civil Engineering I, II
4学期	Informatics in Civil Engineering III
5~8学期	Numerical Methods /FEM I, II Object Oriented Modeling I, II CAD in Civil Engineering Management Methods in Civil Engineering Computational Fluid Mechanics I, II
9~10学期	Network-Based CAE Java and Parallel Computing I, II WWW and Multimedia Geographic Information System

表-2 ミュンヘン工科大学大学院計算力学専攻（修士コース）のカリキュラム（*印は必修科目）

1学期
Introduction to Finite Element Methods* Advanced Computational Methods* Computer Aided Modelling and Visualization* Continuum Mechanics*, Hydromechanics*, Stability of Structure*, Theory of Plates*, Functional Analysis*, Tensor Analysis, Fourier Transform with Application to Dynamics
2学期
Advanced Finite Element Methods* Finite Element Lab., Structural Dynamics* Communications in Networks and Distributed Computing*, Theory of Shell*, Materials Mechanics*, Nonlinear Finite Element Methods, Boundary Element Methods, Structural Reliability Elastic-Plastic Analysis of Framed Structure Structural Optimization/Form Finding of Membranes Measurements on Structures, Software Lab.

を表-2 に示す³⁾。この修士コースは、履修期間は1年半の3学期制であり、1, 2 学期に科目の履修（60 単位以上うち必修48 単位）を行い、3 学期目に修士論文研修（30 単位）を行う。学生は、土木工学、機械工学、自動車工学、航空工学科などで学部教育を終えた者（ドイツの大学の高学年に在籍している者）を対象としている。表の配当科目から計算力学専攻を名乗るにふさわしい充実したカリキュラムであることがわかる。また、ドイツでは、一般に修士論文研修を国内外の企業や大学で行うことが可能となっており、受け入れ先さえあれば大学（国）の資金援助のもと、海外留学を経験することができる制度を導入している。さらに、ドイツは授業料が無料というのも魅力である。

ウェールズ大学スウォンジー校

イギリスにあるウェールズ大学スウォンジー校の土木工学専攻の修士コースは、計算力学をかなり前面に出したカリキュラムをもっている。長年この学科をリードしてきたのは、計算力学のパイオニアである O.C.Zienkiewicz 教授（現在名誉教授）である。計算力学における著名な教員が数多く所属しており、現在でも計算力学の“メッカ”の一つである。履修の年限は通常1年であり、前期（前期はさらに2学期

表-3 ウェールズ大学スウォンジー校土木工学専攻（修士コース）のカリキュラム

1学期（必修科目）
The Finite Element Method, Numerical Methods Solid Mechanics A, Solid Mechanics B Fluid Mechanics, Parallel Computing
2学期（4科目以上を選択）
Geomechanics, Fluid Flow, Plate and Shell Transient and Dynamic Analysis Computational Fluid Dynamics Computational Plasticity and Fracture Mechanics Nonlinear Continuum Mechanics, Optimization

に分かれている）に講義と演習を集中講義（1科目のみを2週間単位で履修する）形式で行い、後期に修士論文研修を行う。表-3 に前期の教育カリキュラムを示す⁴⁾。表より、計算力学専攻と言っても過言でないほどのカリキュラムであることがわかる。

以上、ヨーロッパの大学で特色ある計算力学・工学教育を行っている事例を紹介した。ヨーロッパは全般的に研究先進国の米国に比べて計算力学・工学教育に力を入れている。最近、ヨーロッパ発の質の高い計算力学関連のアプリケーションソフトが数多く出てきており、その効果は着実に現われていると言える。

日本においては、残念ながらここで紹介したような特色ある計算力学・工学教育を行っている大学はこれまでなかった。しかし、各大学の新カリキュラムには徐々に計算力学・工学に重きを置く兆しは現われつつある。一例として、京都大学大学院社会基盤工学専攻の修士コースは、計算力学・工学に関する科目を6科目（計算力学およびシミュレーション、数値構造工学、数値流体工学、地盤数値解析法、計算地盤工学、数値動力学）設けたカリキュラム⁵⁾を今春からスタートさせており、注目に値する動きである。

参考文献

- 1 - 樫山和男：欧米の計算力学事情，日本計算工学会誌，Vol.5，No.3，pp.30-33，2000
- 2 - <http://www.iib.bauing.tu-darmstadt.de/>
- 3 - <http://www.come.tum.de/>
- 4 - <http://www.swan.ac.uk/civeng/>
- 5 - <http://mie.kuciv.kyoto-u.ac.jp/CE/>

「特集」を終えて

本特集では、土木工学のみならず、機械や航空・宇宙、化学工学など多くの専門分野で「計算力学」に携わる方々にご執筆いただいた。各記事で扱われる問題は多様であるが、いずれも「力学理論に基づく基礎（微分）方程式」から「計算機を利用して近似解を求める」という点で共通している。今日、専門分野の分化は多くの面で一層進んでいるが、「計算力学」の登場により、扱う対

象による専門分野間の「相違」ではなく、基礎となる力学理論や数学モデル、また数値解を得るための離散化手法などのように、複数の専門分野にわたる「共通性」が強く意識されるようになった。多くの専門分野に共通する「計算力学」が土木工学に新しい夢をもたらし、また土木工学で発展した「計算力学」が広い分野へ展開してゆくことを願う。（編集委員 特集主査 牛島 省）