

1. 計算力学部門

1.1 はじめに

計算力学に関する主な分野である、「計算固体力学」、「計算熱流体力学」、「粒子法・メッシュフリー法」、「計算材料科学」、「最適化」、「産業界での計算力学」、「HPC（ハイパフォーマンスコンピューティング）」の最近 10 年の動向については、各分野を代表する執筆者の方々に述べていただく。それらは、後述する計算講演会で頻繁にオーガナイズドセッションのテーマになってきたものである。例えば、「HPC」は計算力学全般の基盤分野として位置付けることができ、また、「産業界での計算力学」は計算力学の産業応用として、計算力学に関する研究・開発の目的の一つである。さらに、「計算固体力学」、「計算熱流体力学」、「計算材料科学」は計算力学の適用対象から見た基盤分野であり、「粒子法・メッシュフリー法」は計算力学手法の基盤分野と言える。また、「最適化」は他の様々な分野と連携し、特に産業応用へ寄与するものと言える。計算力学部門の活動だけでも横串、縦串、斜め串、基盤分野、目的、全てが絡み合うものである。さらに、計算力学部門の活動は分野横断型部門として「材料力学」、「流体工学」、「熱工学」、「バイオエンジニアリング」、「設計工学・システム」などと深く関連しながら発展している。以下に、計算力学部門の 10 年のあゆみを報告したい。

「計算力学部門」としての活動の中で最も大きなイベントは毎年開催されている計算力学講演会である。計算力学講演会は地区の持ち回りで開催され、慣例としておおよそ関東、東海・北陸信越、関西、中国四国、九州、東北・北海道のような地区持ち回り開催をしてきた。現在、部門総務委員会で関東、関東以外の地区、関西、関西以外の地区、……のように会員数が多くまた全国から参加者の集まりやすい関東地区の開催頻度を増やすことを検討中である。最近約 10 年間では、名古屋（第 19 回、2016 年度）、京都（第 20 回）、沖縄（第 21 回）、金沢（第 22 回）、北見（第 23 回）、岡山（第 24 回）、神戸（第 25 回）、佐賀（第 26 回）、盛岡（第 27 回）、横浜（第 28 回）、名古屋（第 29 回、2016 年度）で開催された。講演発表数はコンスタントに 300 件以上であり、400 件を超える年もあった。参加者数は 450～550 名である。

第 25 回講演会が開催された 2012 年度は、計算力学講演会に加えて計算力学部門設立 25 周年記念の国際会議（ICMS 2012, International Computational Mechanics Symposium, 2012）を神戸で開催した。なお、2012 年度の計算力学講演会も 25 周年記念講演会として神戸での開催された。両者ともスーパーコンピュータ「京」が設置されている理化学研究所計算科学研究機構（RIKEN AICS）と隣接施設が会場であった。国際会議は、当初 100 件の講演発表の予定であったが、最終的には約 140 件となり大変盛況であった。

その他国際的なイベントとしては、KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE が 2010 年から継続的に行われてきた。韓国機械学会 Division of CAE and Applied Mechanics と計算力学部門とで企画され、2010 年に韓国ソウル、2012 年は金沢、2014 年チェジュ、2015 年東京と継続的に開催され、研究交流を深めてきた。今後も継続の予定である。

日本機械学会の各部門が運営する英文学術誌を発刊するという日本機械学会の方針のもと、2007 年に Journal of Computational Science and Technology (JCST) が発刊した。2013 年まで継続し、2014 年から日本機械学会の英文学術誌 Mechanical Engineering Journal (MEJ) に統合され、現在に至っている。MEJ は「Computational Mechanics」、「……」、「……」のようにカテゴライズされており、計算力学部門ではカテゴリ「Computational Mechanics」の編修を担当している。JCST の編修委員会が MEJ のカテゴリ「Computational Mechanics」に引き継がれている。和文学術誌のカテゴリ「計算力学」、2015 年発刊の英文レター誌「Mechanical Engineering Letters」についても同様である。なお、2016 年において、計算力学分野から MEJ 4 件、MER2 件(Advance Publication)、MEL 5 件、和文誌 15 件の掲載があった。

計算力学技術者認定試験では、「固体力学分野の有限要素法解析技術者」2級の「対策講習会」を計算力学部門の「FEM(固体)認定試験対策講習会担当委員会」が中心となり実施してきた。例年、10月末～11月にかけて、関東（東京）、東海（名古屋）、関西（大阪）の三地区で実施している。

部門として大きな活動は以上に述べた通りだが、詳細については部門ホームページ⁽¹⁾からリンクされているニュースレターNo.38（2007年4月発行）⁽²⁾あたりからご覧いただきたい。部門活動の足跡を追うことができる。計算力学関連の大きな流れとしては、主な分野のあゆみにも書かれているように、計算力学手法の広がりと共にその質保証が重要になり、いわゆる「V&V」（Validation & Verification）が重要視されるようになってきたことを挙げるができる。関連して計算力学に関わる人材育成の重要度が増している。さらに、スーパーコンピュータ「京」に代表される HPC（ハイパフォーマンスコンピューティング）の深化と普及、さらに「オープンソース」化があるかと思われる。

[岡田 裕 東京理科大学]

参考文献

- (1) 計算力学部門 HP, <https://www.jsme.or.jp/cmd/index-j.html>
- (2) 計算力学部門ニュースレター,
<https://www.jsme.or.jp/cmd/japanese/newsletter/38.html>

1.2 計算固体力学

1.2.1 XFEM

1999年に Belytschko, Moës らにより提案された XFEM（eXtended FEM：拡張有限要素法）は、変位の不連続性や漸近特性を表すことができる基底関数をエンリッチ（enrichment：拡充）した内挿関数を用いて、き裂を有限要素と独立に表すことができる。この10年間、XFEMはさまざまなき裂進展問題の解析に応用されるに伴い、手法の改善・改良が一層進んだ。当初は等方性線形弾性体中の二次元き裂先端近傍の変位場の漸近解を再構成できる基底関数が用いられたが、その後、異種材界面き裂など漸近解が既知の問題についての基底関数が提案された。Elguedj ら⁽¹⁾は、HRR（Hutchinson, Rice, Rosengren）解を近似的に再構成できる基底関数を用いて、弾塑性 XFEM 解析を実施した。XFEMにおいて、要素の内挿関数が漸近解基底を再構成するためには、その要素のすべての節点に基底関数を拡充する必要がある。実際にはそのような条件を満足しないブレディング要素が生じ、解の収束率が低下することが指摘されていた。このような問題を解決するために、Fries ら⁽²⁾や Shibamura ら⁽³⁾は補正された XFEM の内挿関数を提案した。XFEM のプログラム実装に商用コードのユーザサブルーチンを利用する方法が Giner ら⁽⁴⁾により報告された。通常の XFEM では拡充関数に対する自由度を通常の方法に加えて節点に割り付けるので、節点によって自由度数が変化する。一方、ヘビサイド関数を拡充した XFEM と等価な方法として、二つの要素を重ね合わせることによって不連続的な変位場を表現するファントムノード法が Song ら⁽⁵⁾により示された。この方法では、重ね合わせた要素を活性化（Activate）することによって、変位場の不連続的な表現可能となるので、プログラム実装が一層単純化する。実際、商用コードを用いてファントムノード法を用いたき裂進展解析が実施可能である。XFEMに関する教科書も出版された⁽⁶⁾⁽⁷⁾。

1.2.2 マルチスケール解析

マルチスケール解析は、材料レベルの微視的構造とそれを均質化したものを扱うマクロ・ミクロ解析と、構造レベルの全体構造と詳細構造を組み合わせたグローバル・ローカル解析に分類される。マクロ・ミクロの材料レベルでは均質化法が、グローバル・ローカルの構造レベルでは Fish らにより提案された重合メッシュ法（s-version FEM：SFEM）が代表的な方法である。この10年間、均質化法や SFEM を用いた応用事例が多数報告されている。たとえば、均質化法は、繊維強化プラスチック（FRP）に代表される複合材料の異方性材料物性値の取得などに用いることができる。そのような手順を実行できる商用システムも開発され、利用可能となっている。一方、SFEMに関しては、菊池ら⁽⁸⁾は自動要素生成技術と組み合わせて疲労き裂進展

解析を実施している。また、Nakasumi ら⁽⁹⁾は、グローバルメッシュを用いた FEM 解析と、ローカルメッシュを用いた XFEM 解析を組み合わせるき裂進展解析を実施した。

1.2.3 損傷進展解析

設計現場においては、構造物の強度解析を高精度化するためには、単なる応力、ひずみ評価だけではなく、構造材料の損傷進展を考慮した数値シミュレーションが求められている。損傷を単純なき裂としてモデル化できる問題に対しては、適切なき裂進展則を与えて、き裂形状を更新させることにより、損傷進展解析が可能となる。さらにき裂面にインターフェース要素を設定し、相対変位と表面力の関係を与えた結合力モデル (Cohesive Zone Model : CZM) も用いられる。しかしながら、延性破壊問題のように破面が複雑で、き裂進展方向を決定するのが困難な場合には、材料の損傷状態を損傷変数によって表現し、損傷進展を連続体力学の観点から解析する連続体損傷力学 (Continuum Damage Mechanics : CDM)⁽¹⁰⁾が有効である。例えば、金属材料の延性破壊にはボイドを考慮した Gurson (ガルソン) の降伏関数を用いた構成則が適用される。また、CFRP 材料には Hashin 則に基づく損傷発生則と進展則を採用した損傷進展解析が実施されている。このような解析は、商用 FEM コードで実施可能となり、この 10 年間 CZM や CDM を用いた損傷進展シミュレーションが広く行われるようになってきている。一方、連続体損傷力学の枠組みの中でレベルセット法を用いて損傷領域と非損傷領域の境界を表現し、損傷進展をレベルセット値の更新で表す Thick Level Set (TLS) 法が Moës ら⁽¹¹⁾により提案された。Song ら⁽¹²⁾による Cracking Node 法は、レベルセット法を用いずに複雑な損傷進展経路を模擬する方法である。Silling が 2001 年に提示したペリダイナミクス (Peridynamics : PD)⁽¹³⁾は、古典的分子動力学手法を用いて、非局所的な (Non-Local) 破壊モデルを用いて損傷の進展をシミュレーションする方法であり、複雑な損傷進展を模擬できるものと期待されている。PD を用いた応用研究事例も増えてきている。

1.2.4 四面体二次要素による破壊力学解析

これまで FEM で応力拡大係数や J 積分などの破壊力学パラメータを評価するために、六面体要素と領域積分法を組み合わせた方法が用いられてきた。一方、三次元 CAD など定義される実機形状には、デラウニ法などにより自動生成された四面体二次要素を用いた有限要素法解析 (Finite Element Analysis : FEA) が汎用されている。岡田ら⁽¹⁴⁾は、四面体二次要素による FEM と領域積分法を組み合わせた方法で任意形状の三次元き裂の応力拡大係数や J 積分を評価する方法を用いて、その妥当性を実証している。この方法と自動メッシュ生成技術を組み合わせれば、任意形状を有する構造物のき裂進展解析が可能となる。

1.2.5 アイソジオメトリック解析⁽¹⁵⁾

2005年にHughesにより提案されたアイソジオメトリック解析は、三次元CADに利用されるNURBS関数をFEMでの内挿関数として利用するものである。このような方法によって固体の応力解析と三次元CADとの連携が一層進むものと期待されている。

1.2.6 V & V

有限要素法に代表される工学シミュレーションが製品設計に日常的に活用されるにつれ、数値シミュレーションプログラムのブラックボックス化が顕著になり、解析の検証 (Verification) と妥当性の確認 (Validation) が一層重要となった。この 10 年間において、ASME (米国機械学会) より固体力学を対象とした ASME V&V2006 が発行され、国内でも JSCES (日本計算工学会) の二つのガイドライン (工学シミュレーションの品質マネジメント JSCES S-HQC001) と工学シミュレーションの標準手順 (JSCES S-HQC002) が出版された。計算固体力学分野において、V&V という用語も普及し、学会講演会でも話題にあがることが多くなり、関連した教科書も出版された⁽¹⁶⁾。

[長嶋 利夫 上智大学]

参考文献

- (1) Elguedj T., Gravouil, A., Combescure, A., Appropriate extended functions for X-FEM simulation of plastic fracture mechanics, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195 (2006), pp. 501-515.

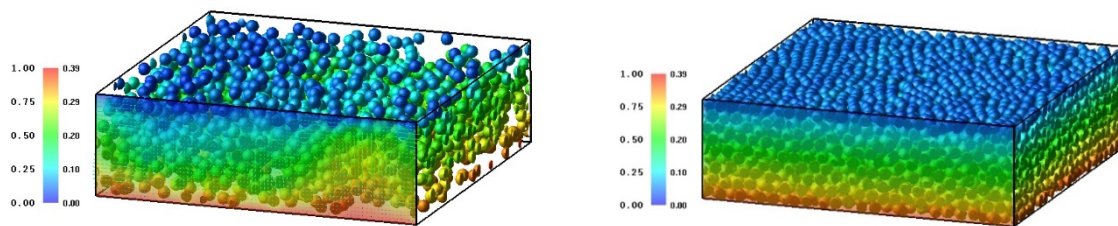
- (2) Fries T.P., A corrected XFEM approximation without problems in blending elements, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 75(2008), pp. 503-532.
- (3) Shibamura, K., Utsunomiya, T., Aihara, S., An explicit application of partition of unity approach to XFEM approximation for precise reproduction of a priori knowledge of solution, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 97(2014), pp. 551-581.
- (4) Song, J.-H., Areias, P M A, Belytschko, T., A method for dynamic crack and shear band propagation with phantom nodes, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 67 (2006), pp. 868-893.
- (5) Giner, E., Sukumar, N., Tarancón, J.E., Fuenmayor, F. J., An Abaqus implementation of the extended finite element method, *Engineering Fracture Mechanics*, 76 (2009) , pp. 347-368.
- (6) Mohammadi, S., *Extended Finite Element Method for Fracture Analysis of Structures*(2008), Blackwell.
- (7) Zhuang, Z., Liu, Z., Cheng, B., Liao, J., *Extended Finite Element Method*(2014), Elsevier.
- (8) 菊池, 和田, 宇都宮, 須山, 重合メッシュ法を用いた疲労き裂進展シミュレーション (第3報, 三次元表面き裂進展シミュレーション), *日本機械学会論文集 (A編)*, Vol. 75, No. 755 (2009-7), pp. 918-924.
- (9) Nakasumi, S., Suzuki, K., Otsubo, H., Crack growth analysis using mesh super position technique and XFEM, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 75(2008), pp.291-304.
- (10) 村上, 連続体損傷力学 (2008) 森北出版.
- (11) Moës, M., Stolz, C., Bernard P.-E., Chevaugeon, N., A level set based model for damage growth: The thick level set approach, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 86 (2011), pp. 358-380.
- (12) Song, J.-H., Belytschko, T., Cracking node method for dynamic fracture with finite elements, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 77(2009), pp. 360-385.
- (13) Madenci, E., Oterkus, E., *Peridynamic Theory and Its Applications*(2014), Springer.
- (14) Okada, H., Ohata, S., Three-dimensional J-integral evaluation for cracks with arbitrary curvatures and kinks based on domain integral method for quadratic tetrahedral finite element, *Engineering Fracture Mechanics*, 109 (2013) ,pp.58-77.
- (15) Cottrell, J. A., Hughes, T. J. R., Bazilevs, Y., *Isogeometric Analysis*(2009), Wiley.
- (16) 白鳥, 越塚, 吉田, 中村, 堀田, 高野, 工学シミュレーションの品質保証とV&V(2012), 丸善.

1.3 計算熱流体力学

この分野においても最近10年間の話題の中心は、初めて10 Pflopsの壁を破った理化学研究所計算科学研究機構の京コンピューターが2012年から本格稼働し、さらに「京」を中核として全国の主要な高性能計算機を高速ネットワークでつないだHPCI⁽¹⁾の整備が進んだことであろう。「京」は2011年のTOP500⁽²⁾では首位にあった。最新の序列(2016年11月)では最先端共同HPC基盤施設のOakforest-PACSに続く第7位(国内第2位)まで後退しているが、すでにポスト「京」プロジェクトが始まっている⁽³⁾。

計算機の大容量化・高速化により、領域分割数が兆に迫る大規模計算が実現されつつある。例えば、平行平板間乱流に対する1200億分割のDNS⁽⁴⁾では、主流速度と流路幅に基づくレイノルズ数は約25万である。さらなる大規模化により、解析できるスケール幅が拡大し、乱流現象に対する理解の質的な向上が期待される。しかし、工業装置や自然界の流れのレイノルズ数は非常に高く、これらに対するDNSの適用は非現実的である。また、取り扱うデータの巨大化も大きな問題である。

多相系や反応系の熱流動については、従来は平均化方程式や総括反応式に基づく計算が主流であったが、最近では相界面や素反応を厳密に扱う直接数値シミュレーション(DNS)も指向されている。その背景として、作成に時間を要する境界適合格子や解適合格子に対して固定直交等間隔格子が見直され、複雑な形状の境界を埋め込んだり、界面や反応面を追跡または捕獲したりする手法が発達したことが挙げられる⁽⁵⁾。埋め込み境界法で各粒子の周りの流れ、各相の内部および界面での熱伝達を考慮した固液二相熱流動の計算例⁽⁶⁾を図1に示す。粒子の体積率は血液の血球体積率(ヘマトクリット値)相当である。



(a) 粒子数 1944 (体積率19%)

(b) 粒子数 5487 (体積率54%)

図1 平行平板間の固液二相熱流動 (粒子表面温度分布と前側断面熱流動を色表示している)

流れと構造の連成問題の解析も、最近の進展が著しい分野である。流体と固体に対してそれぞれ確立した解法を適用できる場合には、時間ステップ毎に接続させる弱連成法が有効である。一方、異なる手法を強く連成させることは容易ではなく、問題ごとに適したアルゴリズムを考えなければならないであろう。これに対して、流体も固体も構成式が異なる連続体として、固定格子でユーシーの運動方程式を一括して計算する完全オイラー法の試み⁽⁷⁾もあり、汎用性の高さから発展が期待される。

いずれにしても、計算領域よりも大きなスケール、計算格子よりも小さなスケールに対する物理モデルが不可欠な状況は続く。乱流に関しては、個別の実験データに良く合うと評価されるモデルはある程度知られているが、非設計状態での性能の高精度な予測や新しい概念の設計支援に適用できる普遍的なモデルは得られていない⁽⁸⁾。多相流については、粒子の衝突、凝縮や蒸発、キャビテーション、気泡や液滴の分裂や合一、動的な濡れ性には多かれ少なかれ近似が含まれている。計算熱流体力学が実用問題に対してより大きな役割を担うためには、これらを考慮した粗視化モデルの確立は避けて通ることのできない課題である。同時に、有効な解析スケール幅を確保するため、計算領域の外側との相互作用を表す境界条件についてもさらに高度な手法の開発が必要である。

計算機の進展は、産業応用においては、単一の大規模計算よりも、何千、何万ものテストケースの扱いが可能となることに大きな意義がある。これは、事故の予測、最適化設計のいずれにも有力な手段となるであろう。予測や設計に際しては低頻度の事象や微妙な質的差異を効率的かつ漏れなく把握することが要求されるが、それらはしばしば数値計算の不確かさと同程度になりやすい。また、ソフトウェアに関しては、市販ソフトの高性能化とともにOpenFOAMに代表されるオープンソースの利用も急速に拡大し⁽⁹⁾、いまやCAEの重要な構成要素になっている。この場合、ソフトウェアの維持・管理における技術者自身の役割が高まる。これらの環境下で次世代のCAE技術の構築を目標とすると、人材の育成と知識の共有が不可欠である。熱流体分野では、2005年度から計算力学技術者の資格認定事業を行っている。また、保証の観点からは検証と妥当性確認を意味するV&Vの標準化が重要性を増しており⁽¹⁰⁾、機械工学年鑑でも2012年以来しばしば話題になっている。

[梶島 岳夫 大阪大学]

参考文献

- (1) High Performance Computing Infrastructure (HPCI), <http://www.hpci-office.jp/>
- (2) TOP500, <https://www.top500.org/>
- (3) フラグシップ 2200 プロジェクト, <http://www.aics.riken.jp/fs2020p/>
- (4) Lee, M. and Moser, R. D., Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re. \sim 5200$, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 774 (2015), pp. 395-415.
- (5) 梶島岳夫・竹内伸太郎・大森健史, 粒子流・気泡流の数値計算, *ながれ*, Vol. 32, No. 3, (2013) pp. 227-232.
- (6) Gu, J. C., Kondo, K., Takeuchi, S., Kajishima, T., Direct numerical simulation of heat transfer in dense particle-liquid two-phase media, *Proc. 9th International Conference on Multiphase Flow*, (2016) Paper No. 235.

- (7) Sugiyama, K. et al., A full Eulerian finite difference approach for solving fluid-structure coupling problems, *Journal of Computational Physics*, Vol. 230, No. 3 (2011) pp. 596-627.
- (8) 梶島岳夫, 計算力学が拓く航空宇宙技術, 学術の動向, Vol. 19, No. 10 (2014) pp. 54-57.
- (9) 特集—オープンソース CAE, 日本機械学会計算力学部門ニューズレター, No. 46 (2011).
- (10) 白鳥正樹ほか, 工学シミュレーションの品質保証と V&V, (2013) 丸善.

1.4 粒子法・メッシュフリー法

粒子法・メッシュフリー法は、これまでにさまざまな手法が提案されている。従来の差分法や有限要素法 (Finite Element Method (FEM)) とは異なる手法としての分類で解説されることも多く、1990年代から現在まで継続して盛んに研究が行われてきている。この10年では、PC クラスタ、GPGPU などのコンピュータの計算処理性能の高速化、メモリ、ストレージの大容量化に伴って、これらを利用した研究、応用もさらに加速している。

メッシュフリー法の先駆けの Element Free Galerkin (EFG) 法⁽¹⁾、Partition of Unity (PU) 法⁽²⁾ や一般化有限要素法 (Generalized Finite Element Method (GFEM))⁽³⁾ により、形状関数にさまざまな関数の適用が試みられて、研究は最近でも継続して進められている。き裂先端の応力特異性をエンリッチ関数で組み入れる拡張有限要素法 (eXtended Finite Element Method (XFEM))⁽⁴⁾ は、2000年代からこの10年間においても、基礎と応用、そしてアプリケーション研究が前述の手法と同様に進んでいる。ローカルガラーキン近似を用いた Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG)⁽⁵⁾、有限要素の異なる解像度のメッシュと重ね合わせた重合メッシュ法 (s-version Finite Element Method (sFEM))⁽⁶⁾ なども研究が進められてきた。また、Reproducing Kernel Particle Method (RKPM)⁽⁷⁾ は精度の高いメッシュフリー法であり研究が進んでいる。

また、Isogeometric Analysis⁽⁸⁾ のように、CAD 設計による形状データをそのまま変形の近似に用いる手法も提案され、10年で大きく進んでいる。また、有限要素法ではあるが、有限要素の間で物理量を平滑化する平滑化有限要素法 (Smoothed FEM (S-FEM))⁽⁹⁾ に関する研究もこの10年で行われてきた。最近では、Peridynamics を用いたき裂進展解析も行われている。

SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法⁽¹⁰⁾ や MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法⁽¹¹⁾ などに代表される粒子法は、この10年で大きく研究が進められてきた。これまでに流体解析の分野で主に用いられてきた傾向があったが、構造問題においても、従来の FEM で扱うことが困難である大変形、破壊現象を伴うような問題などに適用されてきている。また、その応用分野も弾塑性体、流体構造連成、生体内での血液流動解析などに適用が広がっている。さらに、東日本大震災以降に津波の浸水領域の予測や、建設物、構造物の被害の予測をおこなう流体構造連成解析も行われてきている。また個別要素法 (Discrete Element Method (DEM)) は古くから提案された手法であるが、その粒子的な挙動を表すことができるとして粉体や土質などへの応用研究が盛んに行われてきた。

また、モデリングシミュレーション手法として、分子レベルで計算を行う分子動力学法 (Molecular Dynamics (MD))、第一原理計算法 (First Principles (FP)) なども一種の粒子的な手法として見ることができ、大規模計算が可能となるにつれ応用研究が進められてきた。

最近ではこれらのメッシュフリー法・粒子法で解析を行うことができるソフトウェア開発が多数行われ、従来からの汎用ソフトウェアにもその解析機能が備わっているものが多数存在している。これらを用いることにより、よりメッシュフリー法や粒子法による解析が多くの現象の解析に用いることができるようになってきている。

日本機械学会計算力学部門では、毎年行われる計算力学講演会において、「メッシュフリー法・粒子法とその関連技術」のオーガナイズドセッションを企画して、これらの日本における技術の発展をサポートしてきた。発表件数も毎年30件程度の発表があり、この分野の関心と注目の高さを表している。メッシュフリー法・粒子法の分野はこれから先の10年も、さらに発展を続けていくだろうと予測している。

[萩原 世也 佐賀大学]

参考文献

- (1) T. Belytschko, Y. Y. Lu, L. Gu, Element-free Galerkin methods, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 37 (1994), pp. 229-256.
- (2) I. Babuska, J. M. Melenk, The Partition of Unity Method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 40 (1997), 727-758.
- (3) T. Strouboulis, I. Babuska, K. Copps, The design and analysis of the generalized finite element method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 181 (2000), pp. 43-69.
- (4) Nicolas Moes, John Dolbow, Ted Belytschko, A Finite element method for crack growth without remeshing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 46 (1999), pp. 131-150.
- (5) S. N. Atluri, T. A. Zhu, A new Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics, *Computational Mechanics* Vol. 22 (1998), pp. 117-127.
- (6) J. Fish, The s-Version Finite Element Method, *Computers & Structures* Vol. 43, No. 3 (1992), pp. 539-547.
- (7) W. K. Liu, S. Jun, S. Li, J. Adee and T. Belytschko Reproducing kernel particle methods for structural dynamics, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 38, pp. 1655-1679, (1995)
- (8) T. J. R. Hughes, J. A. Cottrell, Y. Bazilevs, isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* Vol. 194 (2005), pp. 4135-4195.
- (9) G.R.Liu, K.Y.Dai, T.T.Nguyen, A smoothed finite element method for mechanics problems, *Computational Mechanics*, Vol. 39, pp. 859-877, (2007)
- (10) L. B. Lucy, A numerical approach to the testing of the fission hypothesis, *Astron. J.* Vol. 82, pp. 1013-1024, (1977)
- (11) S. Koshizuka, Y. Oka, Moving particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nuclear Science and Engineering*, Vol 123 (1996), pp. 421-434.

1.5 計算材料科学

結晶性・非晶性材料を問わず、その内部構造の理解からマクロな特性を予測するためのマルチスケールモデリングの研究は、最近の10年間に研究者自身のオープンコードからオープンソースソフトウェア(OSS)の利用へと変化してきた。時空間格差を埋めるための手法は、従来からの数理的・物理的モデリングの試みに加えて、新たに材料特性や欠陥力学の変形機構の情報伝達によるマルチスケール化も積極的に進められている。マルチスケールモデリングをキーワードとする機械学会誌の特集号もこれまで数回あり⁽¹⁾⁽²⁾、京コンピュータの民間利用枠の拡大に伴い産業応用が活発に進められている。

1.5.1 第一原理計算と古典分子動力学

密度汎関数法(DFT)に基づく第一原理計算は著しく進展し、材料の基本格子構造から界面・表面といった不均質構造に至るまで、幅広くそれらの電子状態を解析することが可能となった。添加元素の影響を電子状態から理解することで、ユビキタスな元素の活用といった元素戦略(マテリアルズインフォマティクス)に大きく貢献している。良く使われているソフトウェアとして、VASP⁽³⁾やOSSのQuantum Espresso⁽⁴⁾等が挙げられる。

古典分子動力学法も、現在ではLAMMPS⁽⁵⁾のOSSが多くの研究者で用いられており、そのポテンシャルも日々豊富になっている。ただ、用いられるポテンシャルは“empirical”と言われるように経験的な考えに基づき作成されているが、最近ではニューラルネットワークのような情報科学の方法論を活用し、第一原理計算結果を用いたデータ同化・強化学習によるポテンシャルの構築が試みられている。

1.5.2 メゾスコピックモデリング

ミクロな挙動がマクロ場へと発展するときは、空間的に局在する欠陥や材料特性値の不均質な領域の存在に端を発する。そして、極めて短い時間における不安定挙動から、広範囲な空間に事象が連続的に発展する

挙動として捉えることができる（最近では、概念的にこれらを総称してマイクロストラクチャーインフォマティクス⁽⁶⁾とも呼ばれている）。統計熱力学的観点からの方法論として、自由エネルギーの汎関数を用いるフェーズフィールド法があり、OSSとしてOpenPhase⁽⁷⁾がある。一方、時間軸方向には、原子集団を極めて短い時間に“kinetic trapping”させることにより時間軸を大きく進展させる。そして、例えば拡散のような挙動に対して、時間スケールを導入した動的モンテカルロ法がよく用いられる。また、転位をセグメント化して、欠陥の発展挙動を捉える離散転位動力学法は現象論的な結晶塑性論との対比に用いられ、OSSとしてParaDiS⁽⁸⁾がある。

1.5.3 均質化される場へのモデリング

結晶方位がランダムあるいは意図的に制御された多結晶体の均質化された力学場を求める方法論では、最近電子線後方散乱回折法（EBSD）と3Dトモグラフィを組み合わせる多結晶体の結晶方位データを正確に取得し、それを結晶塑性有限要素法に組み入れた解析がなされている。結晶塑性は、市販の汎用有限要素解析コードAbaqus⁽⁹⁾にユーザーサブルーチンUMATを介してインプリメントすることも可能である。また、炭素繊維強化プラスチック（CFRP）のような階層的な複合材料の均質化された力学場を求める手法として、有限要素法に組み入れた二尺度漸近展開の均質化法がよく用いられている。このような均質化させる手法は、市販の汎用有限要素法LS-DYNA⁽¹⁰⁾やOSSのMOOSE⁽¹¹⁾にも取り入れられている。

[渋谷 陽二 大阪大学]

参考文献

- (1) 高木周主査, 社会に貢献するシミュレーション, 日本機械学会誌, Vol. 116, No. 1131 (2013), pp. 1-43; 渋谷陽二, 材料・構造創製のためのマルチスケールシミュレーション, pp. 20-22.
- (2) 山崎美稀主査, 小特集 マルチスケールにおける製品設計の展望, 日本機械学会誌, Vol. 119, No. 1176 (2016), pp. 1-35.
- (3) <http://www.vasp.at/>
- (4) <http://www.quantum-espresso.org/>
- (5) <http://lammps.sandia.gov/>
- (6) McDowell, D. L., LeSar, R. A., The need for microstructure informatics in process-structure-property relations, MRS Bulletin, Vol. 41, No. 8 (2016), pp. 587-622.
- (7) <http://www.openphase.de/>
- (8) http://micro.stanford.edu/wiki/Overview_of_ParaDiS_2.2
- (9) <https://www.3ds.com/ja/products-services/simulia/products/abaqus/latest-release/>
- (10) <http://www.ls-dyna.com/>
- (11) <http://www.mooseframework.org/>

1.6 最適化

最適化に関わる研究は計算力学部門のほかにも設計工学・システム部門など多岐にわたる。本項では、計算力学の側面から最適化に関わる10年間の研究動向を概観することにする。

この10年間、最適化に関わる研究の主な研究発表の場は、本会においては、毎年開催された「計算力学部門講演会」のOS「計算力学と最適化」および隔年で開催された「最適化シンポジウム」であった。国際会議は、隔年で開催されたWCCM（計算力学世界会議）における最適化関連のセッション、WCSMO（構造と複合領域最適化世界会議）、CJK-OSM（日中韓構造と機械システムの最適化ジョイントシンポジウム）およびそれを拡張したACSMO 2016（構造と複合領域最適化アジア国際会議）などが挙げられる。特に、本会の講演会では、企業からの発表が10年前よりも増加していることから、基礎研究の成果が実機的设计に応用されてきている様子がうかがえる。

研究内容の動向と主な成果については次のように概観される。一つの象徴的な成果は、MRJの設計において、大規模な数値解析の結果を活用して、自己組織化マップと多目的遺伝的アルゴリズム（MOGA）により最

適化が行われたことである⁽¹⁾。このほかにも、数値解析を行う汎用プログラムの進歩により、複合領域（マルチフィジックス）の数値解析が可能となり、それらの結果に基づいて、応答曲面法による最適解の探索が行われた事例が多数報告された。応答曲面法の改良も続けられ、多項式や放射基底関数を用いた方法に加えて、最近では、観測点間を確率分布で近似した Kriging モデルも使われるようになった。設計変数や評価関数が多数の場合には、遺伝的アルゴリズム（GA）に加えて、粒子群最適化(PSO)が使われるようになった。また、最適化法とは異なるが、設計変数と評価関数の関係性を可視化する散布図行列可視化ツール（iSPM）が開発された⁽²⁾。このツールは、今後、複雑化するシステムの設計において、膨大な数値解析の結果を使って、最良な解を見つけるのに使われていくものと予想させる。

計算力学部門の特色が発揮された最適化に関する研究は、連続体の位相を含めた形状を最適化する理論と応用に関する研究である。それらの研究は 1980 年代の終りから 2000 年代の初めにかけて解法の基本的なアイデアが提案された。この 10 年間はそれらの問題点と解決策が整理され、方法論が確立された時期であったとみることができる。解決策のいくつかを紹介する。連続体の形状最適化問題に共通する本質的な問題は、設計変数に密度、レベルセット関数あるいは領域変動を表す連続関数を設計変数に選びながら、設計変数の変動に対する評価関数の勾配を求めるとそれらは不連続関数になってしまうことにある。領域変動型形状最適化問題では手法が平滑化機能をもつことが知られてきたが、レベルセット関数を用いた位相最適化問題に対しては、Tikhonov の正則化を取り入れた方法が提案された⁽³⁾。また、密度型位相最適化問題と領域変動型形状最適化問題においては、収束性を改善するために、設計変数の変動に対する評価関数の 2 階微分を用いた Newton 法が開発された⁽⁴⁾。さらに、この 10 年で注目されたことは、線形弾性体だけでなく、流れ場や電磁場およびそれらの連成問題も解かれるようになったことが挙げられる。電磁場に対しては、電磁波の透過特性を最適化する問題や、光学迷彩構造を求める問題などが解かれた。3次元流れ場の位相最適化問題に対しては、格子 Boltzmann 法を用いることで計算コストを大幅に低減する試みが注目された。

〔畔上 秀幸 名古屋大学〕

参考文献

- (1) MRJ 事例に見る航空機設計でのシミュレーション活用:MRJ はいかにして設計されたのか』, MONOist <http://monoist.atmarkit.co.jp/mn/articles/1407/07/news018.html> (参照日 2017 年 2 月 14 日)
- (2) 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発, 散布図行列可視化ツール「iSPM」, 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 http://flab.eng.isas.jaxa.jp/monozukuri/mode/soft_ispm.html (参照日 2017 年 2 月 14 日)
- (3) 西脇眞二, 泉井一浩, 菊池 昇, トポロジー最適化, 丸善出版, 2013, pp. 141-170.
- (4) 畔上秀幸, 形状最適化問題, 森北出版, 2016, pp. 354-521.

1.7 産業界での計算力学

産業界における計算力学という視点で、最近10年の計算力学講演会、機械工学年鑑、さらに、ソフトウェアとハードウェア（スーパーコンピュータ）関連の動きを振り返ってみると二つの注目すべきキーワードが浮かび上がる。そのキーワードは多目的設計探査とHPCI（High Performance Computing Infrastructure）である。ここで、多目的設計探査とは数値シミュレーションと、遺伝的アルゴリズムなどの進化計算やパラメトリックスタディを組合せることで得られる大量のデータ（ビッグデータ）をデータマイニングすることで設計開発に役立つ情報を発見する方法論⁽¹⁾であり、HPCIとは「京」を中核とした全国主要なスーパーコンピュータを高速ネットワークで繋いだ革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ⁽²⁾である。

産業界では計算力学というよりもCAE（computer aided engineering）という名称の方が馴染み深い、この10年間においても、産業界では設計者支援ツールとして各種CAEソフトウェアを活用し、製品開発に要する期間やコストを最小化し、製品性能や品質を最大化する取り組みがなされてきた。しかしながら、この10年間でCAEの使い方にも変化が現れてきた。単なる設計者支援のツールとしてではなく、製品やプロセスのイノベーションを進めるためのツールとしてCAE、すなわち多目的設計探査が利用されるようになってきた。

例えば、空気清浄機用のファン設計⁽³⁾、低燃費タイヤや空力タイヤの設計^{(4) (5)}、複数の車体構造の同時設計⁽⁶⁾などへの適用例が報告されている。さらに、後述するHPCIシステムを利用した課題の中にも、空力騒音を考慮した高速鉄道車両開発⁽⁷⁾やタイヤ用ゴム材料開発⁽⁸⁾への適用例がみられる。このように、産業界における計算力学(CAE)が、設計段階での特性予測のツールから、企画や概念設計、すなわち設計上流における意思決定のツールへと変化し始めた10年といえる。

一方、この10年の間に、国家プロジェクトとしてスーパーコンピュータ「京」が開発され、「京」を中核とするHPCIが運用されるに至った。HPCIのホームページ⁽²⁾上で公開された資料に基づきHPCIシステムの産業利用の状況をまとめたグラフを図2と図3に示す。なお、図3に示す分野分けは公開資料に基づき筆者が選別した。図2より産業利用の課題件数が年々増加していることが分かる。その理由として、産業利用枠の拡大だけではなく、HPCIの有用性が産業界に浸透してきたことが挙げられる。さらに、分野別の推移を示す図3より、材料関連の研究課題が増えてきていることが確認できる。素材・材料開発は日本が得意とする分野の一つである。現在、数値シミュレーションやデータサイエンスを活用したマテリアルズ・インフォマティクス⁽⁹⁾による材料開発の高速化と高度化に期待が寄せられ、マテリアルズ・インフォマティクスを推進する国家プロジェクト^{(10) (11)}も進行している。そのことがHPCIの産業利用に占める材料関連の件数が伸びている原因の一つと考えられる。

産業界における計算力学の最近10年のあゆみを俯瞰して浮かび上がった二つのキーワード、多目的設計探索とHPCIは、産業界においても研究利用の域をでていないかもしれないが、今後は広く普及しものづくりを革新するものと期待される。

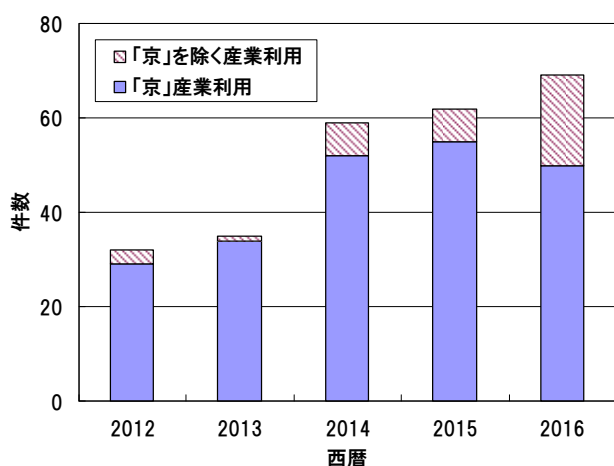


図2 HPCI利用の産業利用課題の件数

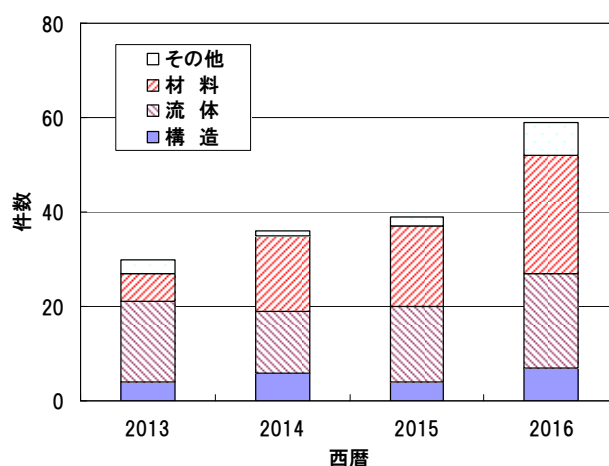


図3 産業利用課題の分野別件数
(個別利用課題を除く)

[小石 正隆 横浜ゴム (株)]

参考文献

- (1) Obayashi, S., Jeong, S. and Chiba, K., Multi-Objective Design Exploration for Aerodynamic Configurations, 35th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, Toronto, (2005) AIAA Paper 2005-4666.
- (2) High Performance Computing Infrastructure, 一般財団法人高度情報科学技術研究機構, <http://www.hpci-office.jp> (参照日 2016年1月12日).
- (3) Sugimura, K., Iwase, Y., Shimoyama, K., Jeong, S. and Obayashi, S., Multi-Objective Optimization of an Air Cleaner Fan Using Kriging Models, Proc. Intern. Workshop on Multidisciplinary Design Exploration in Okinawa, (2006-12), pp.105-112
- (4) Koishi, M., Miyajima, N. and Kowatari, N., Conceptual Design of Tires using Multi-Objective Design Exploration, The 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI), Barcelona, (2014).

- (5) 小石正隆, 車両空力性能向上のためのタイヤ設計, 文部科学省 HPCI 戦略プログラム第 6 回「分野 4 次世代ものづくり」シンポジウム (最終報告会) 講演集, pp. 117-121.
- (6) 小平剛央, スパコン「京」による複数の車体構造の同時多目的設計最適化, 文部科学省 HPCI 戦略プログラム第 6 回「分野 4 次世代ものづくり」シンポジウム (最終報告会) 講演集, pp. 123-127.
- (7) 平成 26 年度 HPCI システム利用研究課題募集選定課題一覧・「京」産業利用 (実証利用), 一般財団法人高度情報科学技術研究機構, http://www.hpci-office.jp/pages/adoption?parent_folder=13_adoptionlist2014_13.pdf (参照日 2016 年 1 月 12 日)
- (8) 平成 28 年度 HPCI システム利用研究課題募集選定課題一覧・「京」を除く HPCI システム産業利用 (実証利用), 一般財団法人高度情報科学技術研究機構, http://www.hpci-office.jp/pages/adoption?parent_folder=13_adoptionlist2016_16.pdf (参照日 2016 年 1 月 12 日)
- (9) 田中功, マテリアルズ・インフォマティクスの現状と将来展望, 第 18 回情報論理学習ワークショップ (IBIS2015), つくば, (2015).
- (10) 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ, 国立研究開発法人 物質・材料研究機構, <http://www.nims.go.jp/MII-I/> (参照日 2016 年 2 月 21 日).
- (11) 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト, 国立研究開発法人 産業技術総合研究所, http://www.aist.go.jp/aist_j/news/pr20160909.html (参照日 2016 年 2 月 21 日).

1.8 HPC

計算機を使って成果を得る計算力学部門の研究は, 計算機の性能やプロセッサのアーキテクチャに大きく影響される. 計算力学における HPC (High Performance Computing) は, 主にスパコンを利用した大規模な解析分野と言える. 構造解析, 流体解析, 材料分野の分子動力学計算, フェーズフィールド法, 粒子法など計算機性能に応じて計算規模が拡大し, 多くの研究成果が創出されている.

スパコンはこの 10 年でそれまでのベクトル型とスカラ型スパコンだけの時代から, かなり多様化した. 周波数を上げることによるプロセッサ単体の性能向上が期待できなくなり, チップ内には複数の演算コアが入り, ノードの台数を増やして演算性能を稼ぐ方式となった. 研究室レベルで購入できる Intel x86 系プロセッサを搭載したワークステーションを高速な Myinet や InfiniBand でネットワーク接続したスパコンが次々と登場し, 秋葉原で購入可能なパーツを組み立てた手作りマシンもスパコン Top500⁽¹⁾ にランキングされた. 2008 年の頃からパソコンの画像表示に使われる GPU (Graphics Processing Unit) をノードに装着し, 演算性能を飛躍的に向上させるスパコンが現れた. NVIDIA の最新 GPU は, チップ上に 3,500 を超える演算コアがある. また, MIC (Many Integrated Core) の Intel Xeon Phi は小型の x86 プロセッサをチップ上に数十個搭載するプロセッサであり, 特に最近スパコンに使われ始めた. 日本では「京」コンピュータが 2012 年に完成し, 富士通の SPARC64 VIII f x66 万コアによりピーク性能 10.62 ペタフロップスを持つ. Top500 の世界一も獲得し, 計算力学分野でも多くの成果が得られている.

スパコンは 10 年で 1000 倍速くなると言われてきたが, 最近になって高速化の伸びは明らかに鈍化している. 米国ではエクサスケール・スパコンのプロジェクトが複数立ち上がっているが, 現状のプロセッサを使ってエクサスケール・スパコンを組み上げると発電所一基が必要になるとも言われ, 消費電力が一番大きな問題となっている. GPU や MIC は高い電力比性能を持っているため, その点からもスパコンへの搭載がさらに進んでいる. ポスト「京」コンピュータも高い電力比性能を目指し, 当初の計画から遅れて 2020 年頃の完成を目指している. ハードウェアとアプリケーションの協調設計: Co-design (コデザイン) を目指している点がこれまでと少し異なる.

スパコンは非常に多数の演算コアから構成され, 計算力学分野においてもスパコン性能を十分に活用するためのプログラム開発が難しくなっている. 以前のベクトル型スパコンと異なり, BF 値 (メモリ帯域 ÷ 演算性能) が下がり, 計算力学分野のアプリケーションはメモリアクセスが多いため, ピーク性能に対して実行性能が数%以下になることもしばしば起こる. それを補うには, 容量の小さなキャッシュなどの階層的な高速メモリをいかに使いこなすかが重要となる. 特に GPU は C/C++/FORTRAN 言語を拡張した CUDA でプログ

ラムすることにより高い実行性能を引き出すことができるが、それを障壁と感じる研究者も多い。大規模計算には依然としてMPIライブラリによるノード間通信を利用しなければならず、DSL (Domain Specific Language) やライブラリ・フレームワーク開発も進んでいるが、まだ実際のアプリケーションとの距離がある。図4はスパコンTSUBAMEの4,000GPUを利用し、 $4,096 \times 6,500 \times 10,400$ 格子を使って計算したフェーズフィールド法による二元合金の樹枝状凝固成長のシミュレーションであり、2011年にゴードンベル賞を受賞している⁽²⁾。

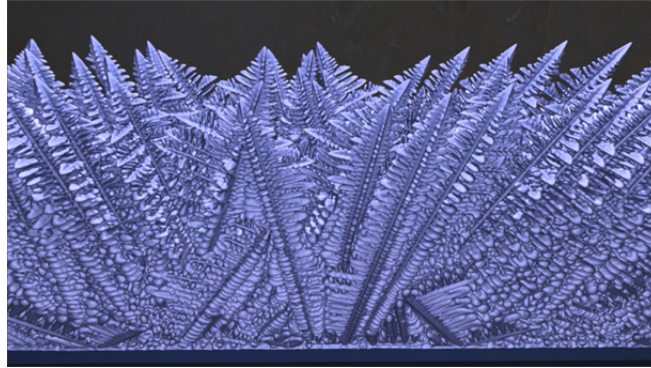


図4 3,300億格子を用いたフェーズフィールド法による二元合金の樹枝状凝固成長のシミュレーション

[青木 尊之 東京工業大学]

参考文献

- (1) Top500リスト <https://www.top500.org/> (参照日2017年10月1日)
- (2) T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, A. Yamanaka, A. Nukada, T. Endo, N., Maruyama, S. Matsuoka, Peta-scale Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification on the TSUBAME 2.0 Supercomputer, in Proceedings of the 2010 ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC11, Seattle, USA, Nov (2011).