

vol. 2008-1

Mech D & A News

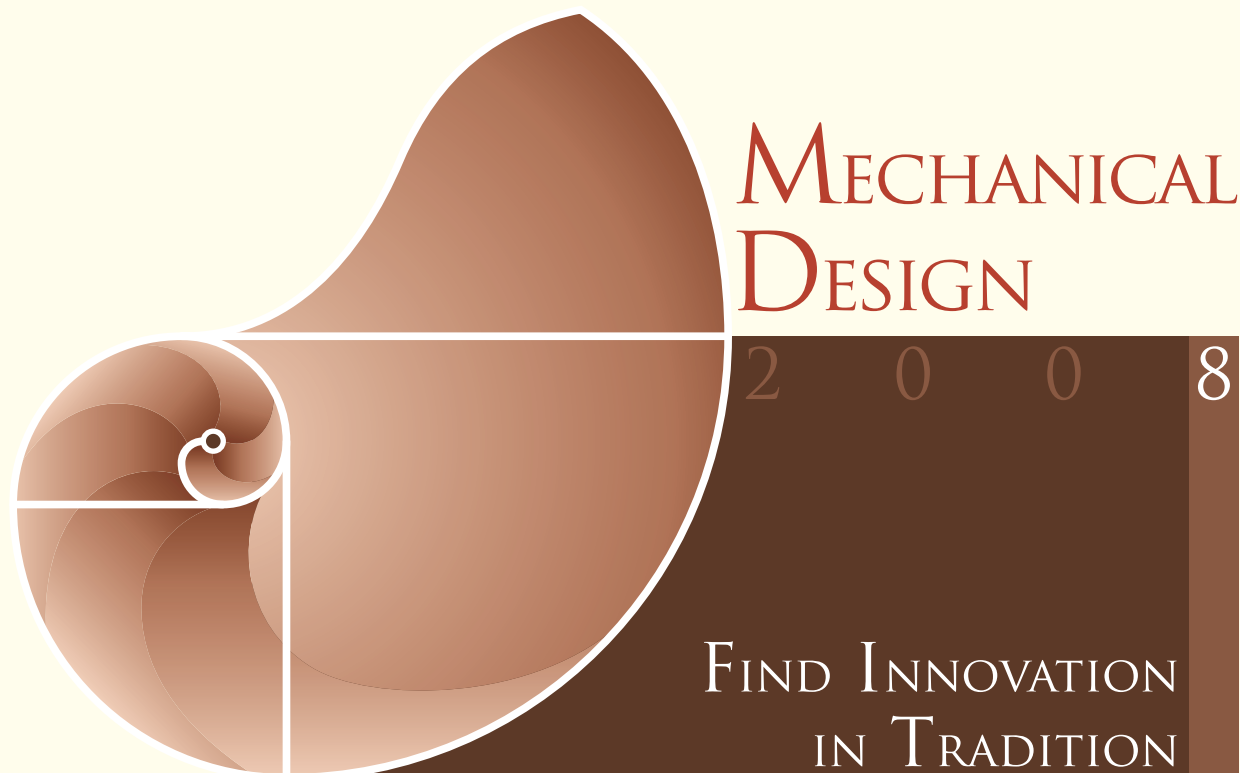
Mechanical Design & Analysis Co.

July 2008

July 10, 2008 Tokyo Conference Center

Mechanical Design 2008

First Mech D&A User's Conference



【特集】 最近の非線形解析とその動向

-汎用プログラムのカスタマイズ-

最近の非線形解析とその動向

-汎用プログラムのカスタマイズ-

慶應義塾大学 野口裕久

【1】 はじめに

筆者が現在の勤め先に異動して 15 年になる。この間、汎用プログラムをとりまく環境はソフトウェア、ハードウェアともに大きく変化した。もちろん汎用プログラム自身の高機能化も著しく、この恵まれた計算環境に助けられ、今までとは異なる新しい展望を見通すことができるようになってきた。本稿では、汎用プログラムのカスタマイズという概念を取り上げ、非線形解析の動向をふまえながら筆者なりの考えを述べる。

【2】 非線形解析とその動向

2.1 15 年の環境の変化

計算機環境はわずか 15 年の間に著しい変化を遂げた。振り返ると、当時はネットワークもなく中央集約型の大型計算機を使用し、専用のオペレータを介して一秒あたり幾らの単価を支払って、汎用プログラムを流していた。今日では完備されたネットワーク環境の下、計算機はワークステーションから PC へと分散小型化の一途をたどっている。また計算機の性能も、15 年前のスーパーコンピュータの能力がノートブック PC に宿っている。

今日、PC の保有が十分に行き渡った結果、汎用プログラムの導入形態も変化をとげた。かつてはロードモジュールが貸与され、プログラムの使用量に応じ課金するといった結果的にユーザを極めて限定する形態が一般的であったが、同じ性能のソフトウェアをより安価に、より多くのユーザに提供するようなマーケット志向の形態が現在では強まってきている。同時に汎用プログラムの機能も一部の専門家を対象とするのではなく、一般のエンジニアが容易に使えるようにバージョンアップが重ねられてきた。その結果、ますます汎用プログラムの"ブラックボックス化"が進むという問題を生じているが、エンジニアが高性能なソフトウェアを容易に使うことができるメリットは計り知れないものがある。

2.2 デザインとシンセシス

CAD と CAE ソフトウェアとの親和性が増し、また最適化などのデザインツールとの組み合わせが進化した結果、特に設計の初期段階における自動化は急激に進歩してきている。しかし CAD と CAE ソフトウェアの間には、いまだにメッシュ分割という有限要素法特有の作業が介在している。もちろん CAD データからメッシュを生成する作業そのものは大幅に省力化されてきたが、生成されたメッシュの品質に悩むユーザは最近でも少なくないはずである。またこれとは逆の工程、すなわちメッシュから CAD データへのフィードバックは、できそうに見えて行われていないのが実情ではないだろうか。

世界的な研究動向としては、この FEM メッシュを作成する作業を回避するために、CAD で使用された形状の近似曲線を、そのまま解析ソフトウェアの変位の近似曲線として用いる Iso-Geometric 解析手法が提案されている (Hughes 他 [1],[2])。この結果、CAD で作成された幾何情報の精度が保存され、通常の有限要素法よりも高精度な構造解析が可能となる。また解析結果から CAD 情報へのフィードバックもシームレスに行うことができる。この方法はまだ研究段階であり、汎用の CAD あるいは CAE ソフトウェアへの実装はされていないが、CAD 会社が CAE の会社を吸収する時代であるから、汎用プログラムとして利用できる日も近いかも知れない。

2.3 アナリシス (マルチフィジックス, マルチスケール, マルチフィールド)

2006 年、アメリカの National Science Foundation に、Simulation based Engineering Science というレポートが提出された[3]。21 世紀の新しい学問体系として、「シミュレーションに基づく工学・科学」の確立が必要であるとし、その背景として、

- 先端科学分野である宇宙、ナノ、バイオの世界ではもはや実験そのものが不可能であること
- 自然災害、テロなどの事態に対して、人類の安全を確保し早急な対策を講じる必要があること
- 製品の開発サイクルの短縮、またコスト低減のために、できる限り実験を排除すること

などが指摘されている。このうち c の内容は上記 2.2 に示したような旧来の手法の延長上に位置しているが、a, b の指摘

は在来の解析手法の概念を超え、将来のプログラムが、マルチフィジックス、マルチスケール、マルチフィールドの問題を取り扱えなければならないことを示唆している。

構造解析の分野においては、汎用プログラムは現状でも十分に高度化し、単体の機能としては飽和に近い状態に達したと思われる。この結果、構造分野における複雑な非線形現象は相当な水準まで解析できるようになったが、残念ながらこの **Simulation based Engineering Science** が目指すものにはまだ到達していない。例えば宇宙工学や生体工学では、電磁・熱・流体・構造・材料の複合物理・場を考慮することが不可欠であり、新しい材料をナノのレベルから開発するには、階層的にスケール毎の相互作用を考慮せざるを得ない。このような要請に対して、汎用プログラムは更に進化するものと思われる。

【3】 汎用プログラムのカスタマイズ

3.1 外側からのカスタマイズ

(1) Application Platform によるカスタマイズ

2.3 に関連して、汎用プログラムが「マルチフィジックス」機能を実装するにあたり、2通りの方法が考えられる。一つはプログラム内にその機能を持たせることであるが、これは現実的には効率的でないことが多い。例えば流体/構造連成問題においてすら、流体と構造ソルバーで解く未知数、解法、時間積分法が異なり、特に、特性時間や長さが二つの場で大きく異なるときは、同時に解く意味があまりない（もちろんメリットも多く存在するが、ここでは割愛する）。

これに対するもう一つの方法は、異なる物理現象を解析するプログラムを、プログラムの外で連成させることである。例えば、Abaqus（構造）と STAR-CD（流体）がそれぞれの出力情報を互いの入力情報として交換して連成解析を行う。このような解析を行うには、両方のプログラムを更に上位でコントロールする環境が必要であり、これをここでは **Application Platform** と呼ぶことにする。

Application Platform は一種のミドルウェアであり、国内でも"戦略的革新シミュレーションソフトウェアの開発^[4]"や"21世紀 COE プロジェクト^[5]"において開発が進められた。この連成手法をシームレスに実現するためには、**Application Platform** はプログラム間の通信制御だけでなく、入出力データを互いに利用できる形に変換しなければならない。現時点では、それぞれのシミュレーションソフトウェア毎のデータの非互換性が大きく、**Application Platform** はその都度対応する必要がある。したがって今後は、この非互換性について何らかの標準化が行われるであろう。実際に web 等を閲覧していると、いくつかのソフトウェア会社の間で、**Multi-physics platform** と呼ばれる環境の構築が始まっているようである^[6]。

(2) Script 言語によるカスタマイズ

汎用プログラムの外側からのカスタマイズのうち、現時点で最も身近と思われるのが **Script** 言語の利用である。例えば、解析において総ての諸元が決定しておらず、一つ前の解析結果によって次の解析の入力データを定めるようなことがある。その場合、解析結果を加工して入力データを作成する必要があるが、これを手作業で行うことは、大規模で複雑な解析に対しては極めて効率が悪い。（実際に筆者も 15 年前は、座屈モードを抽出して、初期不整として入力するといった目的のために、ひたすら端末の前で **Editor** を駆使してデータを作成していた。学生らは **Unix** 上ですでに **awk** などの **Script** 言語を使っていたが。）

この作業を自動化するのが、**Script** 言語によるカスタマイズである。例えば Abaqus では **Python** と呼ばれる **Script** 言語を利用することができる^[7]。Abaqus の解析結果は **.odb** と拡張子のついたファイルに書き出されるが、このデータベースから必要な情報を取り出し、更には次の入力データとして書き出すところまでを、**Python** を使って制御することができる。これらは Abaqus/CAE のシステム内で行うことができるが、**Python** 自体は汎用的な言語であるから、システム外部からの情報交換、制御も可能であろう。

この **Script** 言語によるカスタマイズは、特に単純なアルゴリズムで複数回繰り返し解析を行う必要があるときに威力を発揮する。例えば遺伝的アルゴリズム (**Genetic Algorithm**) に基づく構造最適化や材料定数の同定を行う場合など、サンプル数が数百から数千にも及ぶ場合に極めて有効である^[8]。その他にも、モンテカルロ法を用いて、統計的、確率的に解析の精度を検証したい場合、あるいは構造、材料の破壊、破損確率を求めたい場合にも効果的であろう。またこれらの繰り返し解析は (**floating license** 等の問題はあがあるが)、複数の計算機を使用することができる **grid** 環境において更に威力を発揮すると考えられる。

3.2 内側からのカスタマイズ

(1) DMAP によるカスタマイズ

Direct Matrix Abstraction Program すなわち DMAP は NASTRAN が提供する言語であり、文字通り、NASTRAN に直接マトリクスの入出力や、新たなマトリクス計算などの解析機能を追加することを可能にしている。NASTRAN 自身は、今から 40 年以上も前に開発された FEM のデファクトスタンダードであり、おそらく FORTRAN やアセンブラ言語で書かれていたのではないかと想像されるが、その上で DMAP のような object oriented な機能を当時から有していること自体驚異的なことである。筆者は直接 DMAP を使用したことはないが、プログラマーとして、NASTRAN 自身が有していた MPC を含む効率的なマトリクス処理技術は、常に高く大きな目標（壁）であった。

もちろん現在でも DMAP は利用できる技術であり、これを駆使して音場・構造連成解析等を実施している例を見出すことができる⁹⁾。筆者が関わったプロジェクトでは、DMAP を利用して NASTRAN に感度解析機能を追加した。剛性マトリクスの摂動量に変位ベクトルを乗じ、更にすでに三角分解した剛性マトリクスを後退代入することで変位感度ベクトルを得る、といったマトリクス演算を DMAP で実現した。線形範囲にその機能は限定されるであろうが、DMAP はマトリクス演算を通じて FEM の内部を知ることのできる他に類をみない機能であることに、今も異論はない。

(2) User Subroutine によるカスタマイズ

最後に、ユーザによるカスタマイズ的手段として最も有用と見られる User Subroutine について述べる。User Subroutine 自体は、汎用非線形プログラムの利用が一般的になった 20 年以上も前から、上位のプログラムには実装されていた。しかしながらその使用形態は、入力データとして与えにくい（例えば場所や時間に依存する）分布荷重や分布熱流束、あるいは材料定数などの指定に用いられることが大半であったと思われる。すなわち、あくまでも入力の補助的な手段としての役割を果たしていたに過ぎない。一方、有限要素法の構造を考えれば、これは基本的に 2 階偏微分方程式の解法であり、次の a~e の手順から成り立っている。

- | | |
|--------------|-------------|
| a. 物理モデルの選択 | b. 数学モデルの選択 |
| c. 幾何学データの付与 | d. 境界条件の付与 |
| | e. 材料定数の付与 |

先に述べた User Subroutine の旧来の使用法は、主に後半の c~e の部分に相当している。これに加えて、前段の a および b のステップに User Subroutine を適用することができれば、汎用プログラムのカスタマイズの可能性は大きく広が



Mechanical Design 2008, 東京コンファレンスセンター, 2008 年 7 月 10 日

本稿は、株式会社メカニカルデザイン第一回ユーザ会・Mechanical Design 2008 の招待講演として慶應義塾大学・野口裕久教授に用意いただいた原稿のうち、その予稿を取りまとめたものである。闘病中の先生に代わり、当日の講演は株式会社くいんと・石井恵三前社長の代読によった。参加の皆様の御理解とあわせ、改めて感謝の意を申し上げる。

る。例えば a の物理モデルについて、構造解析におけるその具体的な構成は、平衡方程式 (equilibrium), 運動学的条件 (kinematics), 構成方程式 (constitutive equation) の 3 つから成る。このうち、平衡方程式と運動学的条件はすでに連続体力学の枠組みによってその定義ががっちり固められており、ユーザがあえて変更を試みる必要性はほとんどない。これに対して、材料モデルを定義する構成方程式は材料ごとに固有のものであって良い。すなわち材料定数だけでなく、構成方程式自体をユーザが定義することができれば、今後開発される新たな材料に対してもフレキシブルに対応できるであろう。

Abaqus を例にとると UMAT と呼ばれる User Subroutine があり、ここで材料の構成方程式を線形、非線形を問わず定義できる (無論、有限要素法における構成則に関する約束事を理解しておく必要はある)。実際、アカデミックの世界でも、材料の構成則そのものを研究している研究者には、UMAT を利用している人々が少なからずいる^{[10],[11],[12]}。先進的な使い方としては、UMAT の中に更に micro な視点から複合材料の有限要素モデルを作り、UMAT 内で解析して得られた均質化材料定数を上位の (汎用プログラムにおける) macro モデルに戻す、いわゆる均質化法によるマルチスケール解析システムを構築することも可能である^[13]。

また b の数学モデルについては、連立一次方程式の解法 (ソルバー) と要素の選択が相当する。汎用プログラムの場合、連立一方程式の解法については高速でロバストなものがすでに提供されているので、これをあえてユーザが変更する必要はなく、実際にそのような User Subroutine も提供されていない。また要素に関しても汎用プログラムはすでに 100 種類を超える要素ライブラリを有しており、研究者を除けばよほど特殊な目的を持たない限り、新たな要素を開発することは稀であろう。しかしながら材料の構成方程式だけでなく、要素の定式化までユーザによるカスタマイズが許されていることは、汎用プログラムがほぼオープンアーキテクチャになっていることを意味している。

Abaqus では UEL と呼ばれる User Subroutine があり、これを用いてユーザは独自の要素を追加できる。筆者の知る限りでは、UEL を用いて XFEM (eXtended FEM) を実装した例がある^{[14],[15]}。XFEM は構造格子 (ボクセル) の中に Level Set Function を埋めこんでき裂を表現し、き裂における不連続性と特異性を表現するための自由度が通常の変位自由度に追加される。このような追加自由度を汎用プログラムで扱うには、現在のところ UEL のような User Subroutine を利用する他はないと思われる。なお余談であるが、このような User Subroutine のユーザへの開放は、研究者にとっては非常に有り難い。それはすなわち、それ以外の汎用プログラムのもつ機能 (例えば、高速ソルバー、MPC、接触など) を自由に使えるからであり、それによって基礎研究を応用研究へと展開させることが可能となる。

【4】 おわりに

最近の非線形解析とその動向について、特に汎用プログラムのカスタマイズについて私見を述べた。ソフトウェアのオープンソース化が進む中、汎用プログラムもソースこそは公開されないが、現実的にユーザがカスタマイズ可能な時代になってきている。与えられた機能を受動的に利用させられる時代から、ユーザが能動的に汎用プログラムを利用できる時代に移り変わってきている。汎用プログラムを積極的にカスタマイズし、個々の目的に応じた最適な解析環境を構築することが、より効率的かつ先進的な解析を行うための鍵となるであろう。

参考文献

- [1] T. J. R. Hughes, J. A. Cottrell, Y. Bazilevs, Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement, *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Engng.*, Vol.194, p.4135, 2005
- [2] T. J. R. Hughes, *Isogeometric Analysis: Progress and Challenges*, Proc. JSCES, Vol.13, No.1, p.1, 2008
- [3] *Simulation-based Engineering Science - Revolutionizing Engineering Science through Simulation*, Report of the National Science Foundation, Blue Ribbon Panel on Simulation-Based Engineering Science, May 2006
- [4] <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/rss21/theme/base/optimization/index.html>
- [5] サステナブル生命建築, 慶應義塾大学大学院理工学研究科 21 世紀 COE プログラム, "知能化から生命化へのシステムデザイン", サステナブル生命建築グループ, 共立出版, 2006
- [6] http://www.simulia.com/products/multiphysics_platform.html
- [7] http://www.abaquscentral.com/downloads/ACUC_2005/Swapan_Sanjanwala/ACUC%202005%20Process%20Automation-short.pdf
- [8] 小林卓哉, 汎用 FEM を用いた最近の非線形構造解析, 成形加工学会誌, 12 月号, p.853, 2006
- [9] <http://www.estech.co.jp/list.pdf/est135-1.pdf>
- [10] *Introduction to Computational Plasticity*, F. Dunne, N. Petrinic, Oxford University Press, USA, 2005
- [11] M. Kobayashi, M. Mukai, H. Takahashi, N. Ohno, T. Kawakami, T. Ishikawa, Implicit integration and consistent tangent modulus of a time-dependent non-unified constitutive model, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol.58, p. 1523, 2003

メカニカルデザイン社の第一回ユーザ会における招待講演のために、慶應義塾大学・野口裕久教授が用意された資料を代読することになりました。野口先生が用意された資料のサマリーは、「出来ることは汎用プログラムで、出来ないことはカスタマイズで！」というものです。これは以下の背景と照らし合わせると理解できます。

FEM が出てきた 1950 年代半ばから 1980 年代中盤までは、世界中で様々なプログラムが開発され実務に適用されてきました。ところが 80 年代中頃からは、CAE の市場において汎用プログラムの占める割合が急速に増え、90 年代になると、インフラとしてのインターネット、ハードウェアとしての PC の普及と歩調を合わせるように汎用プログラムの寡占化が顕著になりました。構造解析分野であれば、MSC.Nastran, ANSYS, Abaqus です。最近ではこれに LS-DYNA を加えてもよいと思います。

世界中で使われる汎用プログラムは様々な機能を実装していますが、それでも適用できない問題は枚挙にいとまなく、ベンダーはこれらの要望に対処するために、スクリプト言語や、ユーザサブルーチン作成の機能を提供しています。これらを利用すれば、ユーザは世界中で使われ良く検証された機能を利用できる恩恵を享受しつつ、手の届かない部分を自分で作成することで、目的を達成することが可能になります。欧米では、早くからこのような機能を備えていた Nastran を利用したカスタマイズを専門にする人達 (Nastran Consultant と呼ばれるようです。) がいて、新しい機能をベンダーの開発陣と競争する者まで現れました。

近年、解析の対象は非線形現象はもとより多物理領域に広がり、かつ今まで我々がこの目で確認できた大きさからは遥かにスケールの小さな世界にまで広がりつつあります。いずれ汎用プログラムもこれらに追従せざるを得ない状況になると思いますが、全ての要求を単一のソフトウェアで処理することは不可能であり、様々な分野を代表するソフトウェアをシームレスに往来できる「アプリケーションプラットフォーム」の重要性が益々増すと思われまます。卑近な例では、2008 年 6 月に iSIGHT を保有する Engineous 社が、Abaqus の開発元である Dassault Systems 社の傘下に入りました。iSIGHT はともすれば最適化の側面が強調されてきたきらいがありますが、別の顔として「アプリケーションプラットフォーム」の性格を有しており、今後の進路に注目したいと思います。

これからの CAE エンジニアは、本人が好むと好まざるとにかかわらず、このような時代の流れに逆らうことはできません。解析に付加価値を生み出すためにも、まずユーザサブルーチンのカスタマイズにチャレンジする気持ちが大事であると感じました。しかしこれを自分だけで行うことは、よほど時間に余裕のある人か、天賦の才に恵まれた人以外は難しいと思われまます。そのような時は、メカニカルデザイン社のような組織に頼ることが近道であり効率的です。でも 2 回目は、是非自分でチャレンジしてみてください！そこにはあなたの知らない新しい世界が待っているかも知れません。Indiana Jones になって CAE の奥深い世界を楽しみましょう！

野口先生の復帰を、皆様と一緒にお待ちしたいと思います。

参考文献つづき

- [12] M. Tanaka , H. Noguchi , K. Furuichi , S. Ishimaru , C. Nonomura , S. Oi , T. Kobayashi, Anisotropic hyper-elastic shells using polyconvex strain energy function with application to mechanical cloth behavior, Proc. XXII ICTAM, 2008
- [13] 犬飼壯典, 寺田賢二郎, 平山紀夫, 異方性超弾性体に対するマルチスケール CAE システムの構築, 計算工学講演会論文集, Vol.13, No.1, p.379, 2008
- [14] N. Moes, J. Dolbow, T. Belytschko, A finite element method for crack growth without remeshing, Int. J. Numer. Meth. Engng., 46, 131-150, 1999
- [15] <http://www.gem-consultant.com/Demo.aspx>

株式会社 メカニカルデザイン

〒182-0024 東京都調布市布田 1-40-2 アクシス調布 2 階

TEL 042-482-1539 FAX 042-482-5106

E-mail:comm@mech-da.co.jp <http://www.mech-da.co.jp/>