

東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻

修士論文

分離反復連成解法による
大規模破壊力学シミュレーション

Large-scale Fracture Mechanics Simulation
Using Partitioned Iterative
Coupling Algorithm

2012 年 3 月 1 日提出

指導教員 吉村忍 教授

学生証番号 37-106368

遊佐泰紀

目次

図目次	ii
表目次	iii
第 1 章 序論	1
1.1 研究の背景	2
1.2 本研究の目的	3
1.3 本論文の構成	3
第 2 章 計算破壊力学の概要	5
2.1 緒言	6
2.2 破壊力学の概要	6
2.2.1 破壊力学の導入	6
2.2.2 応力拡大係数	6
2.3 有限要素法による破壊力学解析	8
2.3.1 計算破壊力学の導入	8
2.3.2 き裂を含むメッシュ	8
2.3.3 直接変位外挿法による応力拡大係数の評価	9
2.3.4 Paris 則によるき裂進展速度の評価	10
2.4 大規模な破壊力学解析の既存手法	11
2.5 結言	13
第 3 章 マルチフィジックス連成解析と分離反復解法	15
3.1 緒言	16

3.2	連成解析の概要	16
3.3	連成解析手法の分類	16
3.4	大規模破壊力学解析手法の連成解析手法としての分類	18
3.5	分離反復解法の特徴	21
3.6	分離反復解法の反復スキーム	23
3.7	結言	26
第 4 章	分離反復連成解法のアルゴリズムと実装	27
4.1	緒言	28
4.2	大規模破壊力学問題の特徴	28
4.3	分離反復解法のアルゴリズムと実装	28
4.3.1	ブロック Gauss–Seidel 法	28
4.3.2	Aitken 補外による動的緩和	30
4.4	グローバル領域の線形弾性解析ソルバーの実装	31
4.4.1	二次元線形弾性解析ソルバーの実装	31
4.4.2	三次元線形弾性解析ソルバーの実装	33
4.5	ローカル領域のき裂進展解析ソルバーの実装	35
4.6	結言	37
第 5 章	数値実験と考察	38
5.1	緒言	39
5.2	静弾性解析	39
5.2.1	緩和係数による反復回数の変化	39
5.2.2	問題自由度による反復回数の変化	40
5.3	二次元の疲労き裂進展解析	42
5.4	三次元の疲労き裂進展解析	45
5.5	結言	54
第 6 章	結論	62
	謝辞	65

目次

2.1	一様引張荷重を受ける無限平板の中央に存在するだ円形状の貫通き裂 とそのき裂先端近傍の応力特異場	7
2.2	直接変位外挿法による応力拡大係数の評価	10
2.3	ブーミング法のグローバルモデルとローカルモデル	14
3.1	分離型片方向連成解法の模式図	19
3.2	分離型双方向時差解法の模式図	19
3.3	分離型双方向反復解法の模式図	19
3.4	一体型解法の模式図	20
3.5	Overlapping 型の分割 (左) と Non-overlapping 型の分割 (右)	22
3.6	領域分割法の領域分割	23
4.1	分離反復解法のモデル分割と境界上の物理量の受け渡し	29
4.2	スカイライン法による係数行列のデータ構造	34
4.3	スカイライン法の LDL 分解	34
4.4	上三角部分のみの CSR フォーマットの係数行列のデータ構造	35
5.1	静弾性解析ベンチマークのための二つの正方形のモデル	40
5.2	緩和係数を変化させたときの収束残差履歴	41
5.3	Aitken 補外の初期緩和係数を変化させたときの収束残差履歴	41
5.4	片側にき裂のある帯板の一様引張	45
5.5	分離反復解法による二次元き裂進展解析の最初の 10 ステップの残差 履歴	46

5.6	分離反復解法による二次元き裂進展解析の残差履歴	46
5.7	分離反復解法による二次元き裂進展解析の反復回数	47
5.8	二次元き裂進展解析の応力拡大係数	48
5.9	二次元き裂進展解析の疲労サイクル数	48
5.10	分離反復解法による三次元き裂進展解析の最初の 10 ステップの残差 履歴	50
5.11	分離反復解法による三次元き裂進展解析の残差履歴	51
5.12	分離反復解法による三次元き裂進展解析の反復回数	51
5.13	片側にき裂のある帯板のき裂先端の応力拡大係数	52
5.14	三次元き裂進展解析の応力拡大係数	53
5.15	三次元き裂進展解析の疲労サイクル数	53
5.16	二つの正方形のモデルの 16 万自由度のメッシュ	55
5.17	二つの正方形のモデルの応力コンター付き変形図	56
5.18	片側にき裂のある帯板の 12 万自由度の二次元メッシュ	57
5.19	片側にき裂のある帯板の二次元解析結果の応力コンター付き変形図 . .	58
5.20	片側にき裂のある帯板のズームング法による二次元解析結果の応力コ ンター付き変形図	59
5.21	片側にき裂のある帯板の 196 万自由度の三次元メッシュ	60
5.22	片側にき裂のある帯板の三次元解析結果の応力コンター付き変形図 . .	61

表目次

3.1	大規模破壊力学解析手法を連成解析手法として見たときの分類	22
5.1	問題総自由度に対する反復回数	42
5.2	二次元解析のベンチマークに使用した計算機環境	43
5.3	分離反復解法による二次元き裂進展解析の計算時間とその処理毎の内訳	47
5.4	通常有限要素法による二次元き裂進展解析の計算時間とその処理毎の内訳	47
5.5	三次元解析のベンチマークに使用した計算機環境	50
5.6	分離反復解法による三次元き裂進展解析の計算時間とその各処理毎の内訳	52
5.7	通常有限要素法による三次元き裂進展解析の計算時間とその各処理毎の内訳	52

第 1 章

序論

1.1	研究の背景	2
1.2	本研究の目的	3
1.3	本論文の構成	3

1.1 研究の背景

人工構造物の破壊現象は一般に予測が難しいが、一度起これば人々の命や生活に対して多大なダメージを与える。構造物の破壊現象による有名な事故として、1939 年から 1945 年の米国において多発したリバティ船沈没事故のぜい性破壊、1954 年の英国航空のコミット機連続墜落事故の疲労破壊、1928 年の米国において発生したシルバー橋落下事故の応力腐食割れが挙げられる [33,38]。リバティ船沈没事故は、造船分野が鋼板の継手に溶接を用いはじめた時期に多発した事故であり、冬の冷たい海水が低温ぜい性を誘起したと言われている。コミット機墜落事故は、設計段階での疲労試験が塑性誘起き裂閉口を起こしていたため、供用中に設計寿命よりも遥かに短い寿命で疲労破壊を起こした事故である。シルバー橋落下事故は、重化学工業地帯に位置していたシルバー橋が硫化水素や塩化ナトリウムの環境に晒されていたために応力腐食割れを起こした事故である。

このような事故に対処するために破壊力学の理論が整備され、現在は主に人工物の保守・保全に役立てられている。たとえば、日本機械学会の発電用原子力設備規格維持規格 [37] は、破壊力学によるき裂進展評価を行うことで原子力プラントの効率的な保全を可能としている。維持規格では、まず非破壊検査によりき裂を検出し、検出された複雑な形状のき裂を半楕円表面き裂や貫通き裂などとしてモデル化する。そして、モデル化されたき裂の寸法から疲労または応力腐食割れのき裂進展評価を行い、その機器の補修・取替を行うか否かを決定する。原子力以外の分野でも破壊力学が活用されている。航空分野ではアルミニウム合金の破壊力学が早くから確立され、原子力分野と同様に航空機の定期検査時に用いられている。航空分野では複合材料の破壊力学が近年盛んに研究されており、実用段階として、2011 年 11 月に就航した Boeing 787 Dreamliner [2] は機体重量の約 50 % が CFRP (Carbon Fiber Reinforced Plastic) 複合材料である。

以上のように、破壊力学は人工構造物の設計時の試験や供用期間中検査に役立てられている。さて、破壊力学の理論は単純形状構造物および単軸荷重を仮定しているが、最近では事故調査などでより現実に近い詳細なき裂進展挙動の把握が求められている。このような背景から、計算破壊力学という名称でき裂進展のシミュレーションが行われている。特に、本研究のターゲットである大規模な計算破壊力学の分野では、現実

の大規模三次元構造物の破壊力学解析を目標としており、複雑形状構造物と複雑形状に由来する多軸荷重の両方を解決するような学問領域である。

1.2 本研究の目的

大規模破壊力学問題において、き裂先端から十分に離れた領域は線形弾性、もしくは非線形性があったとしても比較的マイルドである。一方、き裂先端近傍にはき裂進展という境界非線形性が存在し、さらに、より現実に近い詳細なモデル化を行うと弾塑性やクリープなどの材料非線形性や大ひずみなどの幾何学非線形性を伴うことがある。このような非線形性だけではなく、き裂先端の破壊力学パラメータの評価やき裂進展に伴うメッシュの自動再分割など、き裂先端近傍では煩雑な処理を要することが多い。

このような特徴を持つ大規模破壊力学問題では、き裂先端近傍の領域を全体の解析領域から分離するアプローチが有効である。このようなアプローチは、非線形性などのある種の複雑さが局所的に発現するような問題一般に有効であると考えられる。本研究では、分離された二つの領域の連続性を満足させるためにマルチフィジックス連成解析分野の解析手法を応用し、大規模破壊力学問題の効率的な解析手法を提案することを目的とする。

1.3 本論文の構成

本論文は以下のような6章構成である。

第1章では、本研究の背景および目的について述べた。

第2章では、破壊力学の理論および解析の概要について述べる。そして、本研究の研究対象である大規模な破壊力学問題に対する既存の解析手法に触れる。

第3章では、マルチフィジックス連成解析に触れる。本研究では連成解析の手法を用いて大規模破壊力学問題を解析する。この章では、本研究で用いる分離反復解法を中心に既存の連成解析手法について述べる。

第4章では、大規模破壊力学解析に適した分離反復連成解法のアルゴリズムと実装について触れる。

第5章では、分離反復連成解法を用いた数値実験とそれに対する考察を行う。数値

実験は静弾性解析、二次元の疲労き裂進展解析、および三次元のき裂進展解析の三つの例を示す。また、比較のために同条件で通常の有限要素解析およびズームング法による解析も行う。

第 6 章では、本論文を総括する結論を述べる。

第 2 章

計算破壊力学の概要

2.1	緒言	6
2.2	破壊力学の概要	6
2.2.1	破壊力学の導入	6
2.2.2	応力拡大係数	6
2.3	有限要素法による破壊力学解析	8
2.3.1	計算破壊力学の導入	8
2.3.2	き裂を含むメッシュ	8
2.3.3	直接変位外挿法による応力拡大係数の評価	9
2.3.4	Paris 則によるき裂進展速度の評価	10
2.4	大規模な破壊力学解析の既存手法	11
2.5	結言	13

2.1 緒言

本章ではまず、本研究の背景にある破壊力学の理論、および、有限要素法による破壊力学解析の方法について簡単に説明する。そして、破壊力学解析の中でも大規模解析に対する既存手法について本研究の比較対象として説明する。

2.2 破壊力学の概要

2.2.1 破壊力学の導入

破壊力学とは、構造物や材料の中に存在するき裂を評価する学問である。一般に構造力学では弾性論に基づいた応力による評価を行うが、き裂先端近傍では応力場が特異場になるため応力を用いた評価が困難となる。図 2.1 のように一様引張荷重を受ける無限に大きい板の中央に存在する貫通き裂を、長径と短径の比が無限に大きいだ円としてモデル化すると、き裂先端近傍の応力場は $\sigma \propto r^{-\frac{1}{2}}$ の特異場となることが知られている。ただし、 σ はき裂面に垂直な方向 (荷重方向) の応力、 r はき裂先端からの距離である。このとき、 $r \rightarrow 0$ とすると $\sigma \rightarrow \infty$ となってしまう。このようにき裂を弾性論の枠組みで評価することは困難であり、以降で述べる応力拡大係数などの破壊力学独自のパラメータを導入してき裂を定量的に評価する。

2.2.2 応力拡大係数

き裂を評価するための破壊力学パラメータの中で最も有名である応力拡大係数について説明する。本研究においても応力拡大係数を用いる。図 2.1 のような貫通き裂を有する無限平板において、平面ひずみ状態の応力テンソル σ と応力拡大係数 K_I との関係は

$$\sigma_{xx} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 - \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right), \quad (2.1)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 + \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right), \quad (2.2)$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}), \quad (2.3)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{3\theta}{2}, \quad (2.4)$$

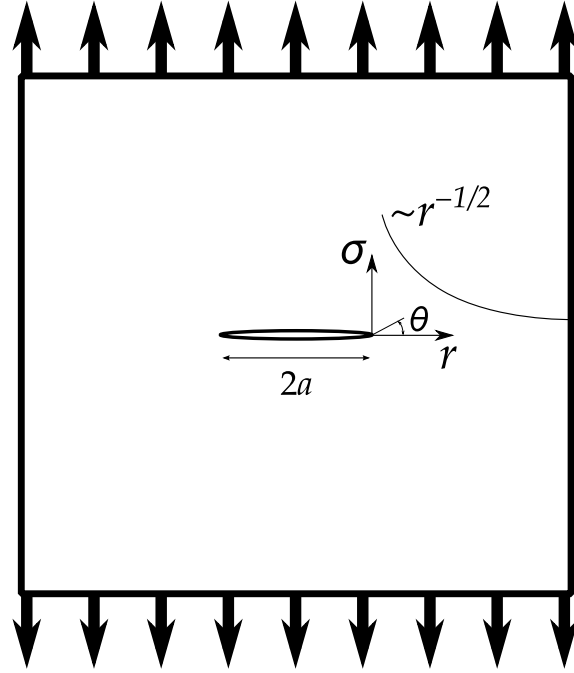


図 2.1 一様引張荷重を受ける無限平板の中央に存在するだ円形状の貫通き裂とそのき裂先端近傍の応力特異場

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy} = \sigma_{zx} = \sigma_{xz} = 0 \quad (2.5)$$

のように表され、変位ベクトル \mathbf{u} との関係は

$$u_x = \frac{K_I}{G} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 - 2\nu + \sin^2 \frac{\theta}{2} \right), \quad (2.6)$$

$$u_y = \frac{K_I}{G} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \sin \frac{\theta}{2} \left(2 - 2\nu - \cos^2 \frac{\theta}{2} \right), \quad (2.7)$$

$$u_z = 0 \quad (2.8)$$

のように表される [34, 38]。ただし、 r はき裂先端からの距離、 θ はき裂面との角度、 ν はポアソン比、 G はせん断弾性係数である。また、 K_I の添字 I は、荷重方向がき裂面の方向と垂直であるモード I 型の単軸荷重条件であることを示す。荷重方向の応力 σ_{yy} が $r^{-1/2}$ に比例する形で書き表されていることに注意する。

破壊力学では、応力拡大係数を用いることで二つの評価が可能になる。一つ目の評価はぜい性破壊の評価である。まず、三点曲げ試験、四点曲げ試験、引張疲労試験などの材料実験で材料定数である破壊じん性値 K_c を求める。破壊じん性値はハンドブック

クから求めても良い。これを応力拡大係数と比較し、 $K > K_c$ となったらぜい性破壊を起こす。二つ目の評価は疲労き裂などにおけるき裂の進展速度の評価である。き裂進展速度と応力拡大係数の関係式は後に述べる Paris 則が有名である。

2.3 有限要素法による破壊力学解析

2.3.1 計算破壊力学の導入

破壊力学の理論では、単純な形状および単純な荷重条件の問題しか扱うことができない。そのような背景で、複雑形状および複合荷重の問題を扱うために破壊力学のシミュレーションが行われている。破壊力学のシミュレーションでは、一般的な構造解析と同じく有限要素法を用いるのが一般的である。破壊力学シミュレーションの工程は、次の三つの段階を繰り返すことで行われる。

1. き裂を含むメッシュを用いて有限要素解析を行う。
2. 解析結果の変位や応力から破壊力学パラメータ (応力拡大係数) を求める。
3. き裂進展速度を評価し、き裂を進展させ、新しいメッシュを生成する。

それぞれの段階について重要な点を以降の小節で説明する。

2.3.2 き裂を含むメッシュ

き裂を含むメッシュを用いて行う有限要素解析における重要な点は、き裂の形状を表現するメッシュを生成することである。第一に、破壊力学解析ではき裂先端近傍の $O(r^{-\frac{1}{2}})$ の応力特異場を多項式次数の有限要素で表現するのは困難である。第二に、き裂先端近傍の要素サイズは、解析ステップあたりのき裂進展量を十分に表現する程小さくしなければならない。そこで、き裂先端近傍では非常に細かい要素分割を行い、き裂先端近傍から離れるに従って要素分割を粗くするようなメッシングを行う必要がある。

破壊力学解析でのメッシュは、強烈的な粗密が付けられているだけでなく、き裂進展を表現できなければならない。き裂進展を表現する方法は二種類ある。一つ目は要素を消滅させる方法である。これは要素の剛性をゼロにすることで実現される場合が多い。二つ目は、一つの節点を二つに分裂させる方法である。前者はコーディングが容

易である利点があるが、き裂先端が有限要素の辺となり四角くなってしまう欠点がある。本研究では、き裂先端を鋭利にモデル化できる点でモデル化精度の高い後者を採用する。

2.3.3 直接変位外挿法による応力拡大係数の評価

有限要素解析の結果から応力拡大係数を求める方法は二種類に分類される。一つ目は変位や応力から直接的に応力拡大係数を求める方法で、直接法と呼ばれる。二つ目はひずみエネルギーの変化量から応力拡大係数を求める方法で、エネルギー法と呼ばれる。前者には直感的で簡便なことに利点があり、後者には一般に直接法より高精度であるという利点がある。エネルギー法では節点や要素積分点の積分経路を用意する必要があるため、本研究では簡便な直接法を用いる。直接法には、式 (2.1) から式 (2.5) までから応力拡大係数を求める直接応力法と、式 (2.6) から式 (2.8) までから求める直接変位法に分かれる。一般に、有限要素構造解析は変位法で行うため、応力よりも変位の方が精度が良いことが知られている。また、応力が要素積分点上で求められるのに対して、変位は節点上で求められるため扱いやすい利点がある。本研究では直接変位法の一つである直接変位外挿法を用いる。

直接変位外挿法について説明する。荷重方向とき裂面の方向が垂直な場合、式 (2.7) を解いて節点変位 u_y から応力拡大係数 K_I を求める。このとき、き裂先端の節点では変位 u_y がゼロになってしまう。そこで、き裂面上の複数の節点で式 (2.7) から応力拡大係数を求め、それらから外挿することでき裂先端の節点上の応力拡大係数を求める。き裂面上の節点では $\theta = \pi$ であることに注意する。この外挿は図 2.2 のように直線で行う。なぜなら、き裂先端近傍の特異性は式 (2.7) で吸収されているためである。き裂先端近傍の応力場は $\sigma \propto r^{-\frac{1}{2}}$ であったが、変位場は $u \propto r^{\frac{1}{2}}$ であることに注意する。また、図 2.2 のように、き裂先端の節点に一番近い節点での応力拡大係数は小さめに評価されることが知られている。

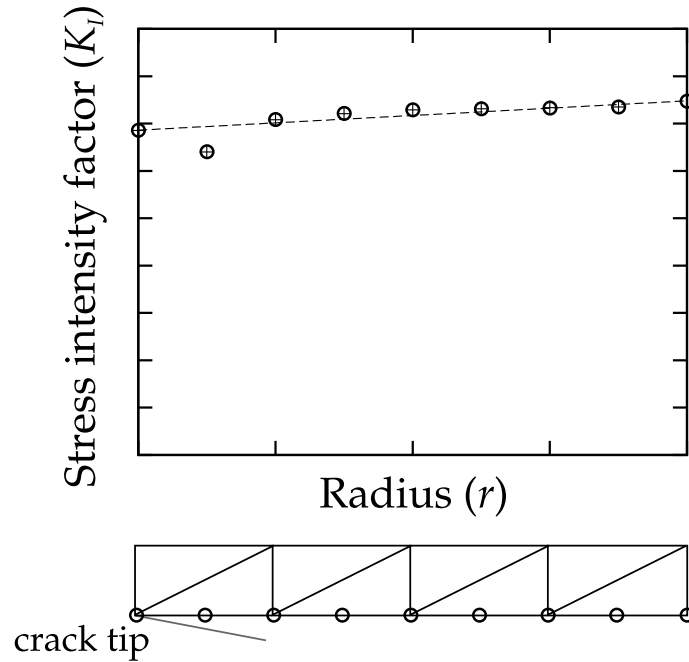


図 2.2 直接変位外挿法による応力拡大係数の評価

2.3.4 Paris 則によるき裂進展速度の評価

応力拡大係数からき裂進展速度を求める方法として、よく用いられる Paris 則について説明する。Paris 則は疲労破壊向けの方法であり、

$$\frac{da}{dN} = C\Delta K^n \quad (2.9)$$

のように表される。ここで、 a はき裂長、 N は疲労サイクル数、 da/dN はき裂進展速度、 ΔK は最大応力拡大係数と最小応力拡大係数の差、 C 、 n は Paris 則の材料定数である。応力腐食割れやクリープき裂などの疲労破壊以外のき裂進展現象では、時間 t に対して da/dt をき裂進展速度とすることが多い。また、 ΔK は $\Delta K = K_{\max} - K_{\min} = K - 0 = K$ とすることが多い。

Paris 則を用いて疲労き裂進展解析を行うとき、二つの方法がある。一つ目の方法は、解析ステップあたりのき裂進展量 Δa を固定して、

$$\Delta N \simeq \frac{1}{da/dN} \Delta a = \frac{\Delta a}{C\Delta K^n} \quad (2.10)$$

としてき裂進展量に対する疲労サイクル数 ΔN を求め、

$$N = \int dN \simeq \sum \Delta N \quad (2.11)$$

のように疲労サイクル数 N を求める方法である。二つ目の方法は、解析ステップあたりの疲労サイクル数 ΔN を固定して、

$$\Delta a \simeq \frac{da}{dN} \Delta N = C \Delta K^n \Delta N \quad (2.12)$$

のようにき裂進展量 Δa を求める方法である。このとき、解析ステップ数と疲労サイクル数を等しくすることは計算機性能の制限から行わないのが一般的である。一般に、疲労き裂では疲労サイクル数が多くなるほど進展速度が大きくなるため、き裂進展量を固定するよりも疲労サイクル数を固定する方が高精度になる。しかしながら、メッシュ再生成の点に注目すると、前者はメッシュ再生成を行いやすいメッシュを予め生成することが可能である。それに対して、後者はデローニー三角分割法などを用いた本格的なメッシュ再生成を解析ステップ毎に行う必要がある。また、後者の方法では、各解析ステップでき裂の進展方向を求めることで曲がったき裂を表現することも可能である。本研究では、分離反復連成解法の手法をオリジナリティとするため簡便な前者を用いたベンチマークを行う。ただし、本手法は原理的には後者にも適用可能であると考えられる。

2.4 大規模な破壊力学解析の既存手法

破壊力学解析を大規模化するときにかかる問題とそれに対する既存手法を説明する。破壊力学解析を大規模化するとき、実際に自由度が大きくなるのはき裂先端近傍ではなくき裂先端から十分に離れた弾性領域である。そこで、き裂先端近傍という局所的な小規模領域では破壊力学解析を行い、き裂から十分に離れた大部分の領域では線形弾性解析を行うような戦略が有効である。本研究の対象である分離反復連成解法もこの考え方に基づいている。このようなアプローチから、大規模破壊力学解析向けの手法として、大きい計算量を許容して通常の有限要素解析を行う方法 [18,19] の他にいくつかの手法が提案されている。ズーミング法および重合メッシュ法 [5,9] が該当する。これら三手法について順に説明する。

通常の有限要素法による大規模破壊力学解析では、巨大なき裂付きメッシュを生成し、それを小規模解析と同様にして解析する。このとき、き裂が進展する度に巨大なき裂付きメッシュの再生成を行う。また、破壊力学解析を含む構造解析では六面体要素が一般的であるが、大規模解析の場合はデローニー三角分割法による四面体要素が好まれる。Okada et al. は四面体一次要素および四面体二次要素向けのエネルギー法ベースの応力拡大係数の評価方法を提案している [18,19]。

ブーミング法は破壊力学問題などの固体力学問題一般で広く使われている手法である。図 2.3 のように、解析領域全体を粗くモデル化したグローバルモデル Ω^G に対して線形弾性解析を行い、その後、き裂先端近傍を切り出したローカルモデル Ω_L に対して破壊力学解析を行う。このとき、グローバルモデルのメッシュは粗く、ローカルモデルのメッシュは細かくするのが一般的である。ローカルモデルの境界条件にはグローバルモデルの解析結果を用いるが、グローバルモデルとローカルモデルのメッシュは一般に境界上で節点が不一致であるため、境界条件の受け渡し時には補間を行う必要がある。また、受け渡す境界条件は強制変位境界条件よりも荷重境界条件の方が精度が良くなると言われているが、荷重境界条件だけでは剛体モードを拘束できないので二つの境界条件を境界節点毎に振り分ける必要がある。さらに、強制変位境界条件を用いる場合は有限要素の形状関数で比較的容易に補間ができるが、荷重境界条件の場合は節点荷重を求めなければならず精度の担保が困難である。節点荷重には、積分点上から節点上に補間された応力 σ と単位法線ベクトル n から

$$t = \sigma n \quad (2.13)$$

のように求めたトラクション t が用いられる。この流れを連立一次方程式で表現すると、

$$K_G u_G = f_G \quad (2.14)$$

を解き、 u_G から何らかの方法で f_L を生成し、

$$K_L u_L = f_L \quad (2.15)$$

を解くという流れになる。 K_G はグローバルの剛性行列、 K_L はローカルの剛性行列、 u_G はグローバルの節点変位ベクトル、 u_L はローカルの節点変位ベクトル、 f_G はグローバルの節点荷重ベクトル、 f_L はローカルの節点荷重ベクトルである。この流れは

き裂進展の度に行われるが、グローバルモデルにき裂をモデル化しない場合、式 (2.14) は解析の一番はじめに一回だけ解かれる。以上のように、ローカル領域の応答がグローバル領域に反映されないズーミング法では、グローバルモデルの解析結果の精度、および、境界条件の補間の精度について疑問が残る。また、ローカルモデルの大きさの選択やローカルモデルへの境界条件の付与の仕方に恣意性があるため、得られる精度が経験に左右される側面がある。

重合メッシュ法はズーミング法の精度を改善した手法である。重合メッシュ法ではズーミング法と同様にグローバルモデルおよびローカルモデルを用意し、それらを同時に解析する。このとき、ズーミング法と同様にグローバルモデルとローカルモデルのメッシュは一般に節点が一致しない。また、き裂はローカルモデルにのみモデル化される。重合メッシュ法によって得られる連立一次方程式は

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_G & \mathbf{K}_{GL} \\ \mathbf{K}_{GL}^T & \mathbf{K}_L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_G \\ \mathbf{u}_L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_G \\ \mathbf{f}_L \end{Bmatrix} \quad (2.16)$$

のように 2×2 のブロック行列を含む形式になる。 \mathbf{K}_{GL} は、グローバルモデルとローカルモデルをラグランジュの未定乗数法によって結びつける剛性行列である。この式の中で、 \mathbf{K}_L はき裂が進展する度に再生成されることに注意する。式 (2.16) の行列は、ラグランジュ乗数の影響で条件数が大きくなることが知られている。また、 \mathbf{K}_{GL} の影響で行列のバンド幅も大きくなる。なので、重合メッシュ法の連立一次方程式を求解するためには直接法、もしくは強力な前処理の付いた反復法を用いる必要がある。つまり、重合メッシュ法で解析可能な問題の自由度数は線形代数ソルバーの性能の制約を受ける。

本研究では、通常の有限要素解析、ズーミング法、重合メッシュ法の三手法を鑑みて、通常の有限要素解析より高速で、ズーミング法よりも高精度で、重合メッシュ法のように線形代数ソルバーの制約を受けない手法として後に述べる分離反復連成解法を提案する。

2.5 結言

本章では、破壊力学の理論、および計算破壊力学の方法について説明した。また、計算破壊力学の大規模解析のための既存手法として、通常の有限要素法、ズーミング

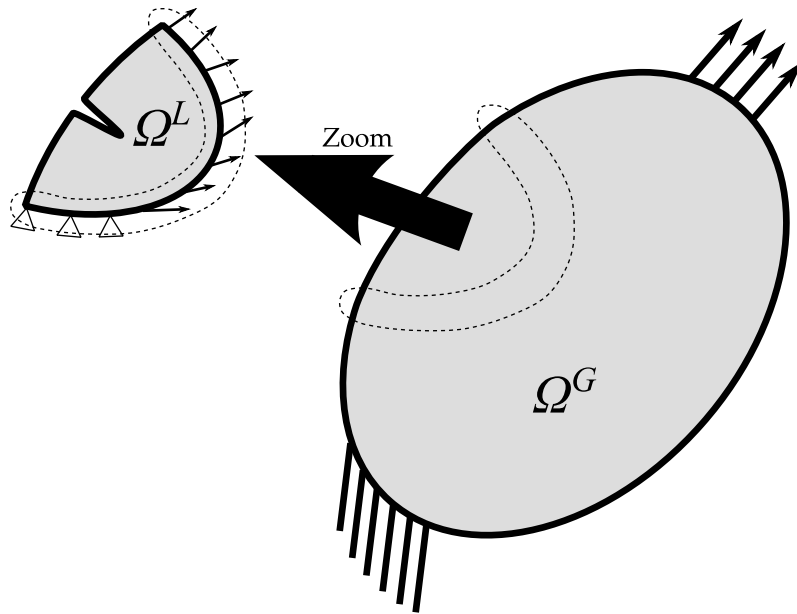


図 2.3 ズーミング法のグローバルモデルとローカルモデル

法、重合メッシュ法の三手法を説明した。

第 3 章

マルチフィジックス連成解析と 分離反復解法

3.1	緒言	16
3.2	連成解析の概要	16
3.3	連成解析手法の分類	16
3.4	大規模破壊力学解析手法の連成解析手法としての分類	18
3.5	分離反復解法の特徴	21
3.6	分離反復解法の反復スキーム	23
3.7	結言	26

3.1 緒言

本章では、マルチフィジックス連成解析および連成解析の各手法について説明し、前章で触れた大規模破壊力学問題向けの既存手法を連成解析手法として分類する。続いて、本研究で用いる分離反復解法と他の連成解析手法との違いを述べ、分離反復解法で用いられる反復スキームについて述べる。

3.2 連成解析の概要

連成解析とは、異なる支配方程式で表される複数の問題の相互作用を扱うシミュレーションのことである。連成解析はマルチフィジックス解析とも呼ばれ、特に、流体・構造連成解析 [12,13,24,31]、磁場・構造連成解析 [22]、地盤・構造連成解析の三つが有名である。本研究では、これらの連成解析の手法を取り入れて、構造・構造連成解析もしくは固体・固体連成解析というような解析を行う。一つ目の固体力学解析として大規模な弾性解析、二つ目の固体力学解析としてき裂先端近傍の破壊力学解析を行う。これらの連続性を連成解析手法によって担保する。

3.3 連成解析手法の分類

連成解析手法は一般に、分離型片方向連成解法、分離型双方向時差解法 [22]、分離型双方向反復解法 [12,13,24]、一体型解法 [31] の四種類に分類される。以降、連成する二つの現象を便宜上モデル 1、モデル 2 と呼ぶ。二つの独立した支配方程式を離散化すると連立一次方程式

$$K_1 u_1 = f_1, \quad (3.1)$$

$$K_2 u_2 = f_2 \quad (3.2)$$

が得られる。これらの相互作用は

$$\begin{bmatrix} K_1 & K_{12} \\ K_{12}^T & K_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{Bmatrix} \quad (3.3)$$

のように連立一次方程式で表せる。ただし、 K_{12} はモデル 2 からモデル 1 への境界条件の受け渡しを表現する行列であり、 K_{12}^T はモデル 1 からモデル 2 への境界条件の受け渡しを表現する行列である。この式を用いてこの四種類の手法について説明する。

以降、連成する現象の数は基本的に二つと仮定し、動解析、増分解析、き裂進展解析などの何らかの時間軸を持つような解析を対象とする。

分離型解法では問題を支配方程式毎に分離し、それぞれを独立に解く。片方向連成解法では、モデル 1 を解いた後、その解析結果から適当な物理量を取得し、その物理量を境界条件としてモデル 2 を解く。このとき、モデル 2 の解析結果はモデル 1 の解析結果には反映されない。分離型片方向連成解法のアルゴリズムは

```

 $t \leftarrow 0$ 

while  $t < t_{\max}$  do
   $\mathbf{u}_1^{(t)} \leftarrow \mathbf{K}_1^{(t)^{-1}} \mathbf{f}_1^{(t)}$ 
   $\mathbf{u}_2^{(t)} \leftarrow \mathbf{K}_2^{(t)^{-1}} (\mathbf{f}_2^{(t)} - \mathbf{K}_{12}^{(t)\top} \mathbf{u}_1^{(t)})$ 
   $t \leftarrow t + 1$ 

end while

```

のようになる。ここで、 t は時間ステップであり、 t_{\max} は終了時間である。このアルゴリズムを模式図にすると図 3.1 のようになる。

分離型双方向解法は、片方向とは違いモデル 2 の解析結果がモデル 1 の解析結果に反映される手法である。時差解法と反復解法に分類される。時差解法は一つ前の時間ステップの $\mathbf{u}_2^{(t-1)}$ を参照し、

```

 $t \leftarrow 0$ 

while  $t < t_{\max}$  do
   $\mathbf{u}_1^{(t)} \leftarrow \mathbf{K}_1^{(t)^{-1}} (\mathbf{f}_1^{(t)} - \mathbf{K}_{12}^{(t)} \mathbf{u}_2^{(t-1)})$ 
   $\mathbf{u}_2^{(t)} \leftarrow \mathbf{K}_2^{(t)^{-1}} (\mathbf{f}_2^{(t)} - \mathbf{K}_{12}^{(t)\top} \mathbf{u}_1^{(t)})$ 
   $t \leftarrow t + 1$ 

end while

```

のように表現できる。このアルゴリズムを模式図にすると図 3.2 のようになる。たとえば、モデル 1 からモデル 2 にノイマン境界条件を渡したとしたら、モデル 2 からモデル 1 に戻す境界条件はディリクレ境界条件でなければならない。時差解法に対して、時間ステップ毎にモデル 1 とモデル 2 の相互作用を厳密に解析するのが反復解法である。本研究ではこれを用いる。分離型双方向反復解法のアルゴリズムは


```

 $t \leftarrow 0$ 
while  $t < t_{\max}$  do
   $k \leftarrow 0$ 
  while not converged do
     $u_1^{(t,k)} \leftarrow K_1^{(t,k)^{-1}} (f_1^{(t,k)} - K_{12}^{(t,k)} u_2^{(t,k-1)})$ 
     $u_2^{(t,k)} \leftarrow K_2^{(t,k)^{-1}} (f_2^{(t,k)} - K_{12}^{(t,k)^T} u_1^{(t,k)})$ 
     $k \leftarrow k + 1$ 
  end while
   $t \leftarrow t + 1$ 
end while

```

のようになる。ここで、 k は反復ステップである。このアルゴリズムを模式図にすると図 3.3 のようになる。このとき、モデル 1 が線形問題であれば $K_1^{(t,k)} = K_1^{(t)}$ となり、モデル 2 が線形問題であれば $K_2^{(t,k)} = K_2^{(t)}$ となる。また、分離型双方向反復解法は分離反復解法とも呼ばれる。

一体型解法は

```

 $t \leftarrow 0$ 
while  $t < t_{\max}$  do
   $\begin{Bmatrix} u_1^{(t)} \\ u_2^{(t)} \end{Bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} K_1^{(t)} & K_{12}^{(t)} \\ K_{12}^{(t)^T} & K_2^{(t)} \end{bmatrix}^{-1} \begin{Bmatrix} f_1^{(t)} \\ f_2^{(t)} \end{Bmatrix}$ 
   $t \leftarrow t + 1$ 
end while

```

のように、 K_{12} を導入して二つのモデルを同時に解く手法である。このアルゴリズムを模式図にすると図 3.4 のようになる。 K_{12} はラグランジュの未定乗数法によって求める。

3.4 大規模破壊力学解析手法の連成解析手法としての分類

前章で述べた大規模破壊力学解析の既存手法を連成解析の視点で分類すると表 3.1 のようになる。Overlapping および Non-overlapping は本研究で導入した視点であり、図 3.5 のように、ローカルモデルをグローバルモデルに重ねあわせるか否かを表

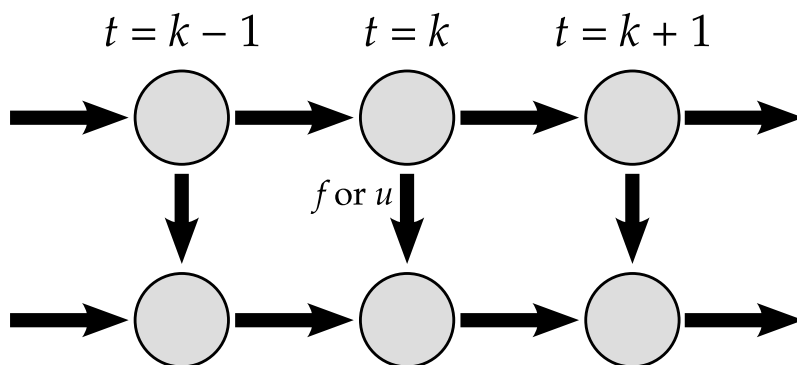


図 3.1 分離型片方向連成解法の模式図

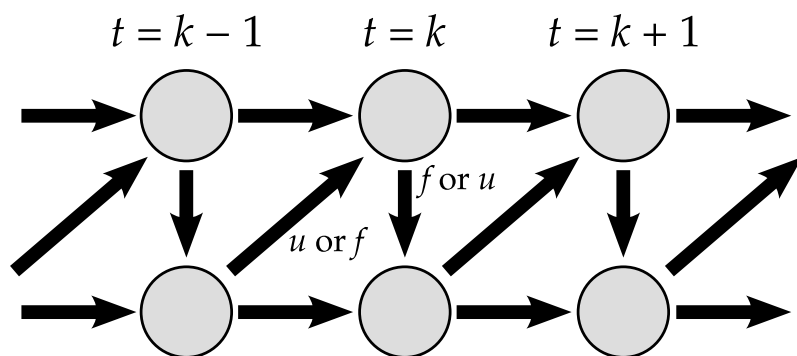


図 3.2 分離型双方向時差解法の模式図

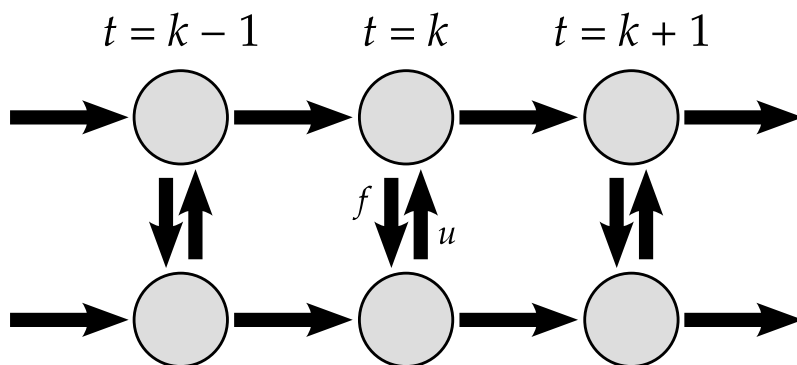


図 3.3 分離型双方向反復解法の模式図

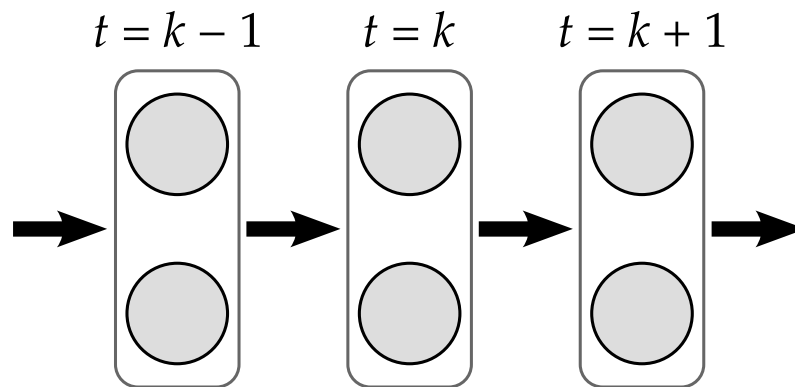


図 3.4 一体型解法の模式図

す。多くの流体・構造連成解析や地盤・構造連成解析は、解析領域が重なり合わないため本質的に Non-overlapping である [12,13,24]。一方、磁場・構造連成解析は電磁力が物体力として作用するため本質的に Overlapping である [22]。これらに対して、本研究の対象である構造・構造連成解析では Overlapping、Non-overlapping のどちらかを選択することが可能である。さて、前章で述べた大規模破壊力学解析手法を順に見ていく。ズームング法は Overlapping 型の分離型片方向連成である。なお、Non-overlapping 型の分離型片方向連成は、図 3.5 の右図のようにグローバルモデルに巨大な切り欠きが存在することになってしまうため現実的でないと考えられる。重合メッシュ法は Overlapping 型の一体型解法である。鈴木らは重合メッシュ法で生成した行列を用いて反復的な解析を行っている [35,36]。通常の有限要素法による破壊力学解析は、複数の要素剛性行列を全体剛性行列に足し合わせるという性質から Non-overlapping 型の一体型解法と解釈することができる。

ここで、き裂進展解析向けではないが大規模固体解析の手法を四つ紹介する。一つ目は領域分割法 [25–27] である。領域分割法はスーパーコンピュータや PC クラスタの上での大規模線形弾性体解析で実績がある [1,17,30]。領域分割法では、図 3.6 のように分割された領域を並列に解析し、それを反復することで全体の解を求める。この点から領域分割法は Non-overlapping 型の分離型双方向反復解法と言える。本研究では、き裂先端近傍のように局所的な複雑さに注目するため領域分割法のアプローチは有効ではない。二つ目は均質化法 [23] である。均質化法は周期的な構造を持つ問題を対象とした Overlapping 型の一体型解法である。均質化法も領域分割法と同様に局所的な複雑さに対しては有効ではない。三つ目は Nishikawa et al. が提案した反復

サブストラクチャ法 [15] である。反復サブストラクチャ法は大規模溶接問題向けに提案された手法であり、反復的な重合メッシュ法と似たアルゴリズムで **Overlapping** 型の分離型双方向反復解法である。四つ目は Yamada et al. が提案し、現在も研究を行っている領域分割型重合メッシュ法である [28]。これは **Non-overlapping** 型の一体型解法であり、領域間境界で節点が一致しない場合にエネルギーを保存するような補間方法が重点的に研究されている。

以上の四つの手法の他に、グローバル領域の解析は有限要素法で行うがローカル領域の解析は有限要素法以外の方法で行うような破壊力学解析手法を二つ紹介する。一つ目は有限要素交代繰り返し法 [16] である。有限要素交代繰り返し法のローカル領域は破壊力学の理論解で求めるような **Overlapping** 型の分離型双方向反復解法である。応力拡大係数の計算に理論解を用いるので、三次元き裂の場合は表面き裂や埋没き裂などの比較的単純な形状のき裂しか扱えないという弱点がある。二つ目は拡張有限要素法 [14] である。拡張有限要素法では、有限要素の内挿関数にき裂形状を表現する関数を重ねあわせる。この重ね合わせる関数をローカル領域と捉えると、拡張有限要素法は **Overlapping** 型の一体型解法である。拡張有限要素法は複雑な形状のき裂を扱うことができるが、重合メッシュ法と同様に剛性行列の条件数が大きくなるため、大規模化時には線形代数ソルバーの制約を受ける。本研究では、複雑形状の三次元き裂を扱うことを視野に入れているのでローカル領域の解析には有限要素法を用いる。

以上のような既存の各手法に対して、本研究では **Non-overlapping** 型の分離型双方向反復解法を用いる。これを用いるメリットについては次節で述べる。

3.5 分離反復解法の特徴

分離反復解法は Matthies and Steindorf により流体・構造連成解析向けに提案された手法である [12]。分離反復解法では、複数の現象のそれぞれを独立に解き、それらを反復することである時間ステップでの最終的な解を得る。反復計算で誤差を小さくしているため、片方向解法および双方向時差解法よりも高精度な解を得ることができる。また、収束判定の閾値を十分に小さくすれば一体型解法と同程度に高い精度の解を得ることができる。しかしながら、分離反復解法では反復回数の分だけ多くの解析を行わなければならないため、計算速度の点からは一体型解法の方が好まれる傾向に

表 3.1 大規模破壊力学解析手法を連成解析手法として見たときの分類

	Overlapping	Non-overlapping
分離型片方向	ズーミング法	N/A
分離型双方向時差	N/A	N/A
分離型双方向反復	鈴木らの重合メッシュ法 [35,36] 反復サブストラクチャ法 [15] 有限要素交代繰り返し法	領域分割法 本研究
一体型	重合メッシュ法 均質化法 拡張有限要素法	(通常の有限要素法) 領域分割型重合メッシュ法 [28]

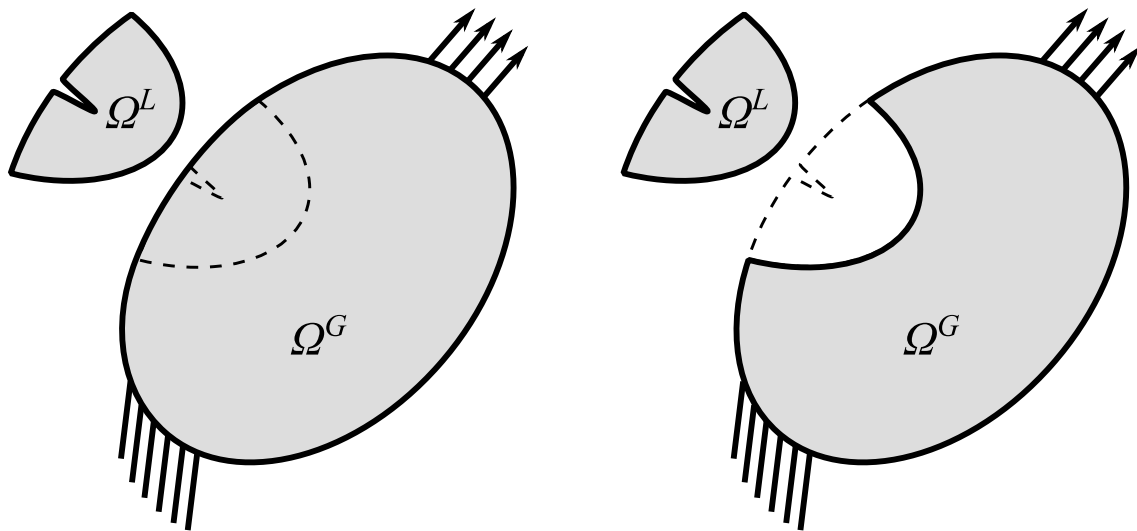


図 3.5 Overlapping 型の分割 (左) と Non-overlapping 型の分割 (右)

ある。一方、分離反復解法では各現象を独立に解析するため、既存の知見を役立てやすいという利点がある。たとえば、流体・構造連成解析において、乱流モデルを用いる有限差分法の非圧縮性粘性流体解析ソルバーと高性能要素を用いる有限要素法の大変形解析ソルバーを連成させるような解析を試みるとき、分離反復解法を用いて実績のあるそれぞれのコードを組み合わせる方法が好まれる。

本研究も分離反復解法を用いているため以上のような利点がある。本手法を用いることで将来的には、スーパーコンピュータ上で動作する大規模並列解析ソルバーと材料実験から導かれた複雑な構成式の組み込まれた材料非線形解析ソルバーを組み合わせ

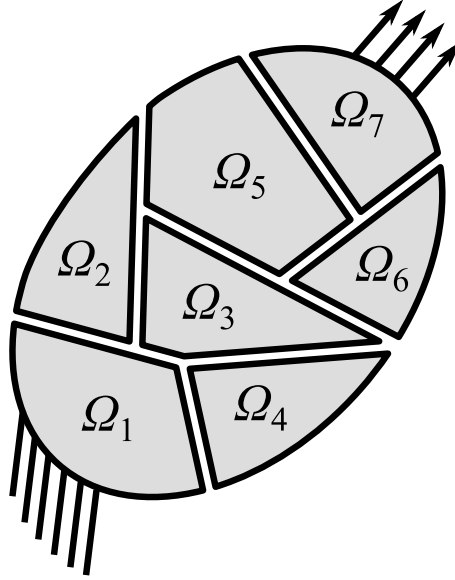


図 3.6 領域分割法の領域分割

せることが可能となることが考えられる。これに加えて、本研究ではき裂進展解析という文脈から、線形代数ソルバーの特性を活かして一体型解法よりも高速な分離反復解法の実装を行っている。これについては次章で詳細に述べる。

3.6 分離反復解法の反復スキーム

連成解析分野の分離反復解法の反復スキームとして、ブロック Jacobi 法、ブロック Gauss–Seidel 法 [24]、Broyden 法 [8]、Newton–Krylov 法 [8] がよく用いられる [13]。ブロック Jacobi 法は一次収束の定点反復法の一つであり、二つのモデルを同時に解けるという特徴がある。2×2 のブロック行列を含む連立方程式

$$\begin{bmatrix} K_1 & K_{12} \\ K_{12}^T & K_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{Bmatrix} \quad (3.4)$$

を線形代数ソルバーの Jacobi 法のように

$k \leftarrow 0$

while not converged **do**

$u_1^{(k)} \leftarrow K_1^{-1}(f_1 - K_{12}u_2^{(k-1)})$

$u_2^{(k)} \leftarrow K_2^{-1}(f_2 - K_{12}^T u_1^{(k-1)})$

$k \leftarrow k + 1$

end while

と行うためブロック Jacobi 法と呼ばれる。擬似コード中で 3 行目と 4 行目は同時に実行できる。また、分離反復解法による連成解析では K_{12} を陽に生成することは少なく、 K_{12} は境界上のディリクレ境界条件 (もしくはノイマン境界条件) の受け渡し、 K_{12}^T はノイマン境界条件 (もしくはディリクレ境界条件) の受け渡しを表す。ブロック Gauss–Seidel 法もブロック Jacobi 法と同様に定点反復法的一种である。ブロック Jacobi 法と同様に連立方程式を線形代数ソルバーの Gauss–Seidel 法のように

$k \leftarrow 0$

while not converged do

$$\mathbf{u}_1^{(k)} \leftarrow K_1^{-1}(\mathbf{f}_1 - K_{12}\mathbf{u}_2^{(k-1)})$$

$$\mathbf{u}_2^{(k)} \leftarrow K_2^{-1}(\mathbf{f}_2 - K_{12}^T\mathbf{u}_1^{(k)})$$

$k \leftarrow k + 1$

end while

と行うためブロック Gauss–Seidel 法と呼ばれる。擬似コード中の 3 行目と 4 行目に依存関係があり、これらを同時に実行することはできない。その代わり、同じ一次収束の手法でもブロック Gauss–Seidel 法はブロック Jacobi 法よりも一般に反復回数が小さくなると言われている。Yamada and Yoshimura はブロック Gauss–Seidel 法を改良した直線探索法を流体・構造連成解析向けに提案している [29]。Broyden 法は超一次収束の準 Newton 法に基づく連成解析手法である。Newton–Krylov 法は Krylov 部分空間で二次収束の Newton 法を行うような連成解析手法である。Newton 法なのでヤコビ行列が必要であるが、ヤコビ行列を陽に生成しない Newton–Krylov 法は Jacobian-free Newton–Krylov 法と呼ばれる。

また、構造・構造連成解析手法と解釈できる既存手法の反復スキームについても紹介する。特に、ブロック Gauss–Seidel 法以外のものを紹介する。鈴木らの反復的な重合メッシュ法 [35,36] はブロック Gauss–Seidel 法や前処理付き共役勾配法を用いている。前処理付き共役勾配法のアルゴリズムは、前処理行列 M 、ベクトル r 、 z 、 p 、 q 、および変数 α 、 β 、 k を用いて

$k \leftarrow 0$

```

 $\mathbf{r}^{(0)} \leftarrow \mathbf{f} - \mathbf{K}\mathbf{u}^{(0)}$ 
 $\mathbf{z}^{(0)} \leftarrow \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}^{(0)}$ 
 $\mathbf{p}^{(0)} \leftarrow \mathbf{z}^{(0)}$ 
while  $\|\mathbf{r}^{(k)}\|/\|\mathbf{b}^{(k)}\|$  is not small enough do
   $\mathbf{q}^{(k)} \leftarrow \mathbf{K}\mathbf{p}^{(k)}$ 
   $\alpha^{(k)} \leftarrow (\mathbf{r}^{(k)}, \mathbf{z}^{(k)})/(\mathbf{p}^{(k)}, \mathbf{q}^{(k)})$ 
   $\mathbf{u}^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{u}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{p}^{(k)}$ 
   $\mathbf{r}^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{r}^{(k)} - \alpha^{(k)}\mathbf{q}^{(k)}$ 
   $\mathbf{z}^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}^{(k+1)}$ 
   $\beta^{(k)} \leftarrow (\mathbf{r}^{(k+1)}, \mathbf{z}^{(k+1)})/(\mathbf{r}^{(k)}, \mathbf{z}^{(k)})$ 
   $\mathbf{p}^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{z}^{(k+1)} + \beta^{(k)}\mathbf{p}^{(k)}$ 
   $k \leftarrow k + 1$ 
end while

```

のように表せるが、行列・ベクトル積 $\mathbf{q}^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{K}\mathbf{p}^{(k)}$ は重合メッシュ法で陽に生成した全体剛性行列

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_G & \mathbf{K}_{GL} \\ \mathbf{K}_{GL}^T & \mathbf{K}_L \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

を用いて行い、前処理 $\mathbf{z}^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}^{(k+1)}$ にはブロック Jacobi 前処理に基づく前処理行列

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_G & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_L \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

を用いている。領域分割法 [25–27] は静的縮約により領域境界上の自由度のみで前処理付き共役勾配法を行う。前処理には Neumann–Neumann 前処理とコースグリッド修正を組み合わせた BDD (Balancing Domain Decomposition) [10] や FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting) [4] が用いられる。

本研究では、き裂先端近傍の塑性や大ひずみを考慮しない線形弾性解析を行う。また、二つの解析の並列性よりも反復回数の方が計算時間への影響が大きいため、本研究ではブロック Jacobi 法ではなくブロック Gauss–Seidel 法を用いる。今後、応力集中部が局所的に塑性するような材料非線形問題などの別の問題に本手法を適用する場合、解析領域のほとんどが線形であればブロック Gauss–Seidel 法が十分に有効であることが予想される。

3.7 結言

本章では、マルチフィジックス連成解析および連成解析の各手法について述べ、前章で触れた大規模破壊力学問題向けの既存手法を連成解析手法として分類した。続いて、本研究で用いる分離反復解法と他の連成解析手法との違いを述べ、分離反復解法で用いられる反復スキームについて述べた。

第 4 章

分離反復連成解法の アルゴリズムと実装

4.1	緒言	28
4.2	大規模破壊力学問題の特徴	28
4.3	分離反復解法のアルゴリズムと実装	28
4.3.1	ブロック Gauss–Seidel 法	28
4.3.2	Aitken 補外による動的緩和	30
4.4	グローバル領域の線形弾性解析ソルバーの実装	31
4.4.1	二次元線形弾性解析ソルバーの実装	31
4.4.2	三次元線形弾性解析ソルバーの実装	33
4.5	ローカル領域のき裂進展解析ソルバーの実装	35
4.6	結言	37

4.1 緒言

本章では、本研究の対象である大規模破壊力学問題の特徴について触れ、それに対するアプローチとして分離反復解法のアルゴリズムと実装について説明する。本研究では、分離反復解法のアルゴリズムとして Aitken 補外による動的緩和の付いたブロック Gauss–Seidel 法を用いる。続いて、グローバル領域およびローカル領域の各ソルバーの実装について、ホットスポットである線形代数ソルバーの話題を中心に述べる。

4.2 大規模破壊力学問題の特徴

破壊力学問題においてき裂先端から十分に離れた領域は線形弾性体、もしくは非線形性が比較的マイルドである。本研究ではグローバル領域を線形弾性体として扱う。これに対して、き裂先端近傍ではき裂進展に伴うメッシュ再分割を伴うことや、弾塑性などの非線形現象を伴うことがある。比較的小規模な解析ではこれらを区別せずに扱うが、問題規模が大きくなるとき裂先端近傍の煩雑な処理を行うことが徐々に困難になる傾向がある。このような大規模問題を見ると、き裂先端近傍は比較小規模なままであり、実際に自由度数が大きくなるのはき裂から十分に離れた弾性体領域である。そこで、本研究では小規模なき裂先端近傍領域と大規模な弾性体領域の解析をそれぞれ独立に行い、それらの間の整合性をとるような解析を行う。このようなアプローチに関して、前々章ではズーミング法や重合メッシュ法を紹介した。また、このようなアプローチをとらない通常の有限要素法によるアプローチも紹介した。そして、前章ではズーミング法、重合メッシュ法、および通常の有限要素法を連成解析手法の枠組みで分類した。本研究では、連成解析手法の一つである分離型双方向反復解法を大規模破壊力学問題に応用する。次節以降でその具体的なアルゴリズムと実装について述べる。

4.3 分離反復解法のアルゴリズムと実装

4.3.1 ブロック Gauss–Seidel 法

本研究では分離反復解法のアルゴリズムとしてブロック Gauss–Seidel 法を用いる。ブロック Gauss–Seidel 法とは、片方の問題を解析し、続いてもう片方の問題を解析

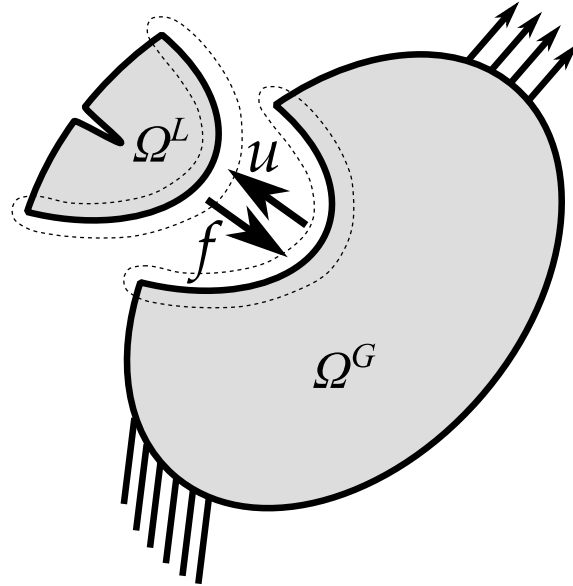


図 4.1 分離反復解法のモデル分割と境界上の物理量の受け渡し

し、それを繰り返すという手法である。

本研究では、連成する二つの領域をグローバル領域、およびローカル領域と呼ぶ。図 4.1 のように、グローバル領域からローカル領域へ受け渡す物理量は節点変位 u 、ローカル領域からグローバル領域へ受け渡す物理量は節点反力 f とした。なぜなら、多くの場合、小規模なき裂先端近傍には解析条件としての強制変位境界条件が付与されていないからである。一般に固体力学解析では、自由度を拘束する強制変位境界条件が付いていないと剛体モードで解が不定になってしまう。また、ローカル領域からグローバル領域に渡す節点反力 f は、渡すときに符号を逆転するようにした。これはブロック Gauss–Seidel 法のアルゴリズム

$k \leftarrow 0$

while not converged **do**

$$u_1^{(k)} \leftarrow K_1^{-1}(f_1 - K_{12}u_2^{(k-1)})$$

$$u_2^{(k)} \leftarrow K_2^{-1}(f_2 - K_{12}^T u_1^{(k)})$$

$k \leftarrow k + 1$

end while

の中の 4 行目の $K_{12}^T u_1^{(k)}$ にマイナスの符号が付いていることに対応する。また、節点反力が表面以外では常にゼロとなるという点とも矛盾しない。

4.3.2 Aitken 補外による動的緩和

ブロック Gauss-Seidel 法では、線形代数ソルバーの SOR (Successive Over-relaxation) 法のように緩和を行うことで収束を加速させることが可能である。本研究では、グローバル領域からローカル領域へ強制変位を受け渡すときに緩和を行う。このとき、緩和係数 ω を一定にして与えてもある程度の加速が得られるが、更なる収束の加速のために本研究では直線探索 [13] を用いて緩和係数を動的に求める。直線探索の手法としては Aitken 補外

$$\omega^{(k)} = -\omega^{(k-1)} \frac{\mathbf{r}^{(k-1)\top} (\mathbf{r}^{(k)} - \mathbf{r}^{(k-1)})}{\|\mathbf{r}^{(k)} - \mathbf{r}^{(k-1)}\|^2} \quad (4.1)$$

を用いる。ここで、 \mathbf{r} は残差ベクトルである。また、緩和係数 $\omega^{(k)}$ の初期値 $\omega^{(0)}$ は [35] に倣って 0.1 とした。

以上をまとめて、Aitken 補外付きのブロック Gauss-Seidel 法の実装は

```

k ← 0
ω(0) ← 0.1
u(0) ← 0
f(0) ← 0
u(0) ← KG(f(0))
r(0) ← -u(0)
while ||r(k)||/||r(0)|| > τ do
    f(k+1) ← KL(u(k))
    u(k+1) ← KG(f(k+1))
    r(k+1) ← u(k) - u(k+1)
    ω(k+1) ← -ω(k)  $\frac{\mathbf{r}^{(k)\top} (\mathbf{r}^{(k+1)} - \mathbf{r}^{(k)})}{\|\mathbf{r}^{(k+1)} - \mathbf{r}^{(k)}\|^2}$ 
    u(k+1) ← u(k) - ω(k+1) r(k+1)
    k ← k + 1
end while

```

のようにした。これをき裂進展の解析ステップ毎に行う。ここで、 f は領域境界上の

荷重ベクトル、 $\tilde{\mathbf{u}}$ 、 \mathbf{u} はそれぞれ緩和前、緩和後の領域境界上の変位ベクトルである。 K_G は領域境界上の荷重 \mathbf{f} を境界条件として解析を行い、領域境界上の変位 \mathbf{u} を出力する関数である。 K_L は K_G と同様に、強制変位 \mathbf{u} を入力として反力 \mathbf{f} を出力する関数である。 \mathbf{r} は領域境界上の残差ベクトル、 τ は許容誤差、 ω は緩和係数である。許容誤差 τ は 10^{-3} とする。

4.4 グローバル領域の線形弾性解析ソルバーの実装

4.4.1 二次元線形弾性解析ソルバーの実装

本研究では、分離反復解法による破壊力学シミュレーションの例として比較的小規模な二次元解析と三次元解析を行い、本手法の利点がスケールすることを示す。二次元解析では大規模解析の必須事項である並列計算を行っていないが、本手法のホットスポットを明確にするために二次元解析の実装についても説明する。

グローバル領域では有限要素法による標準的な線形弾性解析を行う。有限要素は三点積分に基づく平面応力アイソパラメトリック三角形二次要素とし、材料定数は鉄鋼を想定してヤング率 210 GPa、ポアソン比 0.3 とする。さて、Non-overlapping 型の分離反復解法に基づくき裂進展では、グローバル領域はき裂を含まないため、グローバル領域の剛性行列はき裂進展解析全体を通じて一定である。直接法や前処理付き反復法などの多くの線形代数ソルバーでは、係数行列に対して下準備を行う段階と右辺ベクトルを与えたときに未知ベクトルを求める段階の二つに分かれる [3,20,32]。本研究では、直接法の一つである LDL 分解法を用いる。LDL 分解法において、二つの段階の一つ目に当たるのが LDL 分解 (数値分解) であり、二つ目に当たるのが前進・後退代入 (三角求解) である。これらについては解析のホットスポットであるため、後に詳細に述べる。本研究では、き裂進展解析のはじめにグローバル領域の剛性行列の生成および LDL 分解を行い、グローバル領域の解析中では前進・後退代入のみを繰り返すような実装とする。連成解析手法の中で分離型反復解法は、一体型解法と比較して、反復回数分だけ連立一次方程式を余分に解かなければならないため計算時間において一般に不利である。しかしながら、問題が線形であり反復中で行列が一定であれば、二回目の反復以降の連立一次方程式の求解は前進・後退代入のみとなる。つまり、計算時間が単純に反復回数倍になるわけではなく、一体型解法と分離型反復解法

の計算時間の差はそこまで大きくならない。さらに、き裂進展解析の文脈では分離型反復解法の方が高速になりうる。というのも、一般の解析方法ではき裂が進展するたびにメッシュ変化するため、その度に剛性行列の再生成および LDL 分解を行う必要がある。一方、分離型反復解法ではグローバル領域はき裂を含まないため、グローバル領域の剛性行列の生成および LDL 分解は解析のはじめに一回行うだけである。分離型反復解法を用いると連立一次方程式を解く回数が増えるが、一体型解法よりも分離型反復解法の方が高速なソルバーとなることがありうる。

本研究では以上のような線形代数ソルバーと分離型反復解法の相性の良さを活用して、一体型解法よりも高速にき裂進展解析を行う。そこで、計算時間の観点で重要となる線形代数ソルバーの実装について述べる。本研究では、線形代数ソルバーに LDL 分解法を求める。行列のフォーマットは図 4.2 のようなスカイライン法を用いる。浮動小数点数配列 val が行列成分の値、自由度数長の整数配列 ind が各列の最小の行番号、自由度数長の整数配列 ptr が val 中の行列対角成分の配列インデックスである。スカイライン法での LDL 分解は一般的な内積型や外積型のアルゴリズムとは異なり、メモリ連続アクセスの担保と無駄な条件分岐の排除のため

```

for  $k = 0, N - 1$  do
  for  $i = \text{ind}_k, k - 1$  do
    for  $j = \max(\text{ind}_k, \text{ind}_i), i - 1$  do
       $\text{val}_{\text{ptr}_k - k + i} \leftarrow \text{val}_{\text{ptr}_k - k + i} - \text{val}_{\text{ptr}_i - i + j} \text{val}_{\text{ptr}_k - k + j} \text{val}_{\text{ptr}_j}$ 
    end for
     $\text{val}_{\text{ptr}_k - k + i} \leftarrow \text{val}_{\text{ptr}_k - k + i} / \text{val}_{\text{ptr}_i}$ 
     $\text{val}_{\text{ptr}_k} \leftarrow \text{val}_{\text{ptr}_k} - \text{val}_{\text{ptr}_k - k + i}^2 \text{val}_{\text{ptr}_i}$ 
  end for
end for

```

のような縁取り型の実装とする [32]。ここで、 N は自由度数、浮動小数点数配列 val 、整数配列 ind 、および整数配列 ptr はスカイライン法の配列である。LDL 分解の過程を図示すると図 4.3 のようになる。スカイライン法は図 4.2 の上三角部分が都市の高層ビル群に似ているための命名だが、スカイライン法での LDL 分解は図 4.3 のように下三角部分で考える。

スカイライン法での前進・後退代入は、メモリの連続アクセスを担保するように実

装すると

```

 $y \leftarrow f$ 
for  $i = 0, N - 1$  do
  for  $j = \text{ind}_i, i - 1$  do
     $y_i \leftarrow y_i - \text{val}_{\text{ptr}_i - i + j} y_j$ 
  end for
end for
for  $i = 0, N - 1$  do
   $y_i \leftarrow y_i / \text{val}_{\text{ptr}_i}$ 
end for
 $u \leftarrow y$ 
for  $j = N - 1, 0, -1$  do
  for  $i = j - 1, \text{ind}_j, -1$  do
     $u_i \leftarrow u_i - \text{val}_{\text{ptr}_j - j + i} u_j$ 
  end for
end for

```

のようになる。ここで、 f は右辺ベクトル、 u は未知ベクトル、 y は自由度数長の作業用ベクトルである。前進代入が一番内側のループでメモリの同じ場所 y_i に書き込むためメモリ読み込みが多い実装であり、後退代入は逆にメモリ書き込みが多い実装である。二次元解析なので行列のバンド幅が $N^{1/2}$ に比例すると仮定すると、LDL 分解の演算量は $O(N^2)$ 、前進・後退代入の演算量は $O(N^{3/2})$ となり、LDL 分解の方が計算時間が大きくなることが多い。

4.4.2 三次元線形弾性解析ソルバーの実装

三次元解析では四点積分に基づくアイソパラメトリック四面体二次要素を用い、それ以外は二次元解析と同様とする。線形代数ソルバーには共有メモリ並列の疎行列直接法ソルバーである Intel MKL 10.2 [11] の PARDISO [21] を用いる。PARDISO における疎行列のデータ構造は図 4.4 のような上三角部分のみの CSR (Compressed Sparse Row) フォーマットである。浮動小数点数配列 `val` が行列の非ゼロ成分の値、

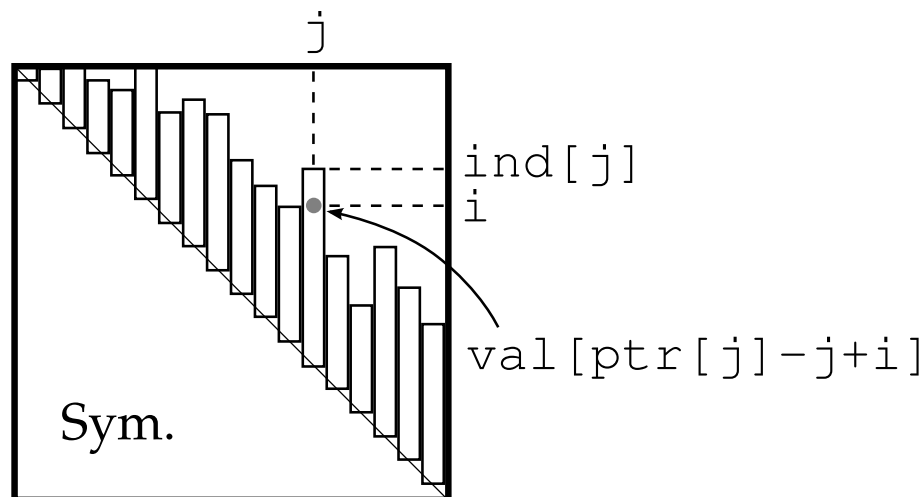


図 4.2 スカイライン法による係数行列のデータ構造

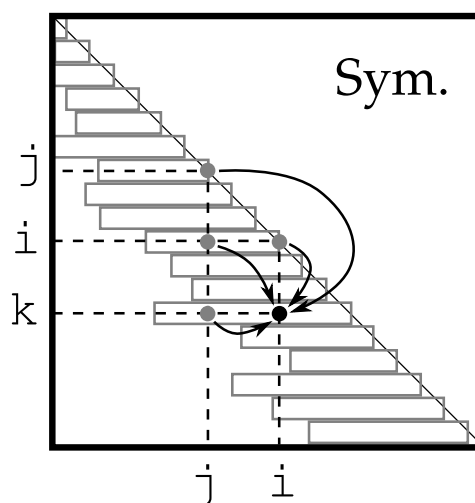


図 4.3 スカイライン法の LDL 分解

整数配列 ind が対応する val の列番号、整数配列 ptr が val および ind 中の行列対角成分の配列インデックスである。また、疎行列直接法ソルバーにおいて、係数行列に対して下準備を行う段階はシンボリック分解および数値分解、右辺ベクトルを与えたときに未知ベクトルを求める段階は三角求解である。PARDISO のシンボリック分解では、フィルインの数を最小化する最小次数順序法 [3] によるオーダリングを用いている。フィルインとは行列の成分のうち、数値分解後に非ゼロになるゼロ成分のことである。数値分解は LDL 分解である。三次元解析なので行列のバンド幅が $N^{2/3}$ に比例すると仮定すると、LDL 分解の演算量は $O(N^{7/3})$ 、前進・後退代入の演算量は

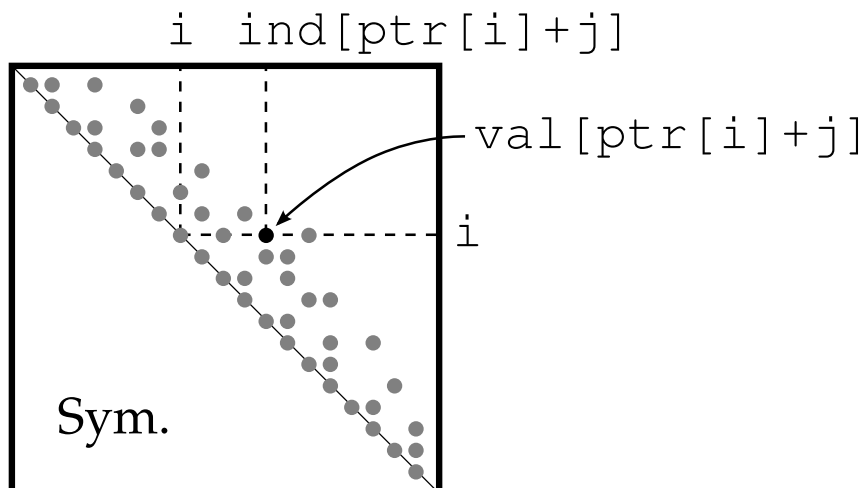


図 4.4 上三角部分のみの CSR フォーマットの係数行列のデータ構造

$O(N^{5/3})$ となる。

4.5 ローカル領域のき裂進展解析ソルバーの実装

ローカル領域のき裂進展解析ソルバーの実装について述べる。ローカル領域では基本的にグローバル領域と同じ線形代数ソルバーを用いている。さて、分離反復解法において、ローカル領域のソルバーの実装で重要となるのは剛性行列を再生成するタイミングである。分離反復解法では、き裂進展の解析ステップと解析ステップ毎の分離反復の二重のループ構造になっている。この中でき裂を進展させるのは解析ステップが進んだときであり、解析ステップが進んだら剛性行列を再生成し、すかさず剛性行列の数値分解を行う。き裂進展は問題の自由度数やディリクレ境界条件の変化を伴うため、剛性行列の再生成時にはメモリの再確保も行う必要がある。

分離反復中ではローカル領域の剛性行列は不変であるが、ローカル領域に付与される強制変位境界条件 (ディリクレ境界条件) は反復ステップ毎に変化する。分離反復解法では領域毎に異なる線形代数ソルバーを用いることが可能であるが、本研究では簡単のためにグローバル領域と同じ線形代数ソルバーを用いている。そこで、ここではスカイラインフォーマットおよび CSR フォーマットのディリクレ境界条件の処理について述べる。ディリクレ境界条件の処理には、置換行列を用いたディリクレ境界条件の自由度を分離を行なっている。スカイラインフォーマットは行列の上三角部分に

において列優先なので、剛性行列 \mathbf{K} (\mathbf{K}_L)、荷重ベクトル \mathbf{f} (\mathbf{f}_L)、および変位ベクトル \mathbf{u} (\mathbf{u}_L) は置換行列 \mathbf{P} によってディリクレ自由度が後側に分離されて

$$\mathbf{PKP}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \mathbf{K}_{ND} \\ \mathbf{K}_{ND}^T & \mathbf{K}_D \end{bmatrix}, \quad (4.2)$$

$$\mathbf{Pf} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_N \\ \mathbf{f}_D \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_N \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}, \quad (4.3)$$

$$\mathbf{Pu} = \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_N \\ \mathbf{u}_D \end{Bmatrix} \quad (4.4)$$

のようになる。ここで、 \mathbf{K}_N はノイマン自由度に関する剛性行列、 \mathbf{K}_D はディリクレ自由度に関する剛性行列、 \mathbf{K}_{ND} はノイマン自由度とディリクレ自由度の節点自由度を結びつける剛性行列、 \mathbf{u}_N はノイマン自由度に関する未知の変位ベクトル、 \mathbf{u}_D はディリクレ自由度に関する既知の変位ベクトル、 \mathbf{f}_N はノイマン自由度に関する荷重ベクトル、 \mathbf{f}_D はディリクレ自由度に関する荷重ベクトルである。 \mathbf{f}_D はゼロである。また、置換行列 \mathbf{P} は自由度数長の整数配列で実装される。したがって、連立一次方程式

$$\mathbf{PKP}^T \mathbf{Pu} = \mathbf{Pf} \quad (4.5)$$

は

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \mathbf{K}_{ND} \\ \mathbf{K}_{ND}^T & \mathbf{K}_D \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_N \\ \mathbf{u}_D \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_N \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} \quad (4.6)$$

のようになる。これに対してディリクレ境界条件の処理を行うと

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \mathbf{K}_{ND} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_N \\ \mathbf{u}_D \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_N \\ \mathbf{u}_D \end{Bmatrix} \quad (4.7)$$

となり、ディリクレ自由度を消去すると

$$\mathbf{K}_N \mathbf{u}_N = \mathbf{f}_N - \mathbf{K}_{ND} \mathbf{u}_D \quad (4.8)$$

のようになる。ここで、 \mathbf{I} は単位行列である。結果的にノイマン自由度のみの連立一次方程式を解けば良いことになる。一方、CSR フォーマットについてもスカイラインフォーマットとまったく同じ式が導かれるが、CSR フォーマットは行列の上三角部分において行優先なので

$$\mathbf{PKP}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_D & \mathbf{K}_{ND}^T \\ \mathbf{K}_{ND} & \mathbf{K}_N \end{bmatrix}, \quad (4.9)$$

$$\mathbf{P}\mathbf{f} = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{f}_N \end{Bmatrix}, \quad (4.10)$$

$$\mathbf{P}\mathbf{u} = \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_D \\ \mathbf{u}_N \end{Bmatrix} \quad (4.11)$$

のようにディリクレ自由度は前側に分離される。

4.6 結言

本章では、本研究の対象である大規模破壊力学問題の特徴を述べ、それに対する解析手法として分離反復解法のアルゴリズムと実装について説明した。また、グローバル領域およびローカル領域の各ソルバーの実装について説明した。

第 5 章

数値実験と考察

5.1	緒言	39
5.2	静弾性解析	39
5.2.1	緩和係数による反復回数の変化	39
5.2.2	問題自由度による反復回数の変化	40
5.3	二次元の疲労き裂進展解析	42
5.4	三次元の疲労き裂進展解析	45
5.5	結言	54

5.1 緒言

本章では、分離反復解法を用いて数値実験を行う。まず、単純な形状のモデルを用いた静弾性解析を通じて、分離反復解法の反復特性について調べる。続いて、分離反復解法を用いて二次元および三次元の疲労き裂進展解析を行う。このとき、比較のために通常の有限要素法およびズームイング法を用いた解析も行う。通常の有限要素法とは計算時間および精度、ズームイング法とは精度の比較を行う。二次元および三次元の解析を通じて、本手法を用いることが大規模三次元解析に対して効率的であることを示す。

5.2 静弾性解析

本節では図 5.1 のような単純な二つの正方形のモデルを静解析することで分離反復解法の特性を数値的に考察する。強制変位境界条件が付与されている下の正方形をグローバルモデル、付与されていない上の正方形をローカルモデルとする。ヤング率は 210 GPa、ポアソン比は 0.3 である。また、有限要素はアイソパラメトリック平面ひずみ三角形二次要素とする。このモデルを解析するとき、はじめにグローバルモデルを解析して初期残差を求めるが、グローバルモデルに荷重境界条件が付与されていないので初期残差がゼロとなってしまう。そこで、一度目のグローバル解析、ローカル解析の後、二度目のグローバル解析の結果から初期残差を求める。

まず、緩和付きブロック Gauss–Seidel 法の緩和係数を変化させて反復回数の変化を見る。続いて、問題の自由度数を変化させて反復回数の変化を観察する。

5.2.1 緩和係数による反復回数の変化

本小節では緩和付きブロック Gauss–Seidel 法の緩和係数を変化させて、緩和係数を Aitken 補外により動的に求める方法が有効であることを示す。ベンチマーク問題の自由度はグローバルモデル、ローカルモデルともに 882 自由度とした。問題の総自由度は 1,764 である。緩和係数 ω を 0.1、0.2、0.3、0.4 と変化させたときと、Aitken 補外で動的緩和したときの数値実験結果を図 5.2 に示す。横軸が反復回数、縦軸が残差ノルムである。収束閾値は 10^{-3} とした。また、Aitken 補外の初期値は [35] に倣っ

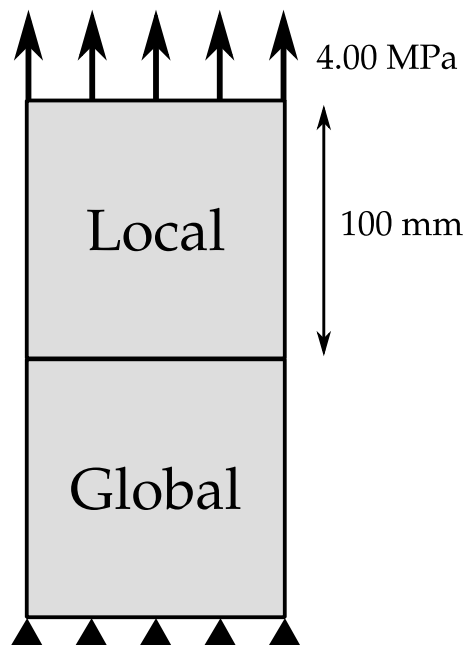


図 5.1 静弾性解析ベンチマークのための二つの正方形のモデル

て 0.1 とした。緩和係数 ω を一定にすると概ね残差が直線的に小さくなることがグラフからわかる。また、グラフにはプロットしていないが ω を 0.5 より大きくすると反復が発散し、 $\omega = 0.4$ のときも一次的に収束せずに若干不安定に収束することがわかった。グラフから、 ω 一定のときは $\omega = 0.3$ 付近に最適点があると推測できるが、これは問題依存であり、モデル形状が変化すると最適な ω も変化する。一方、Aitken 補外を用いて動的な緩和を行うと、 ω 一定のときよりも小さい反復回数で収束を得られる。

上と同じ条件で Aitken 補外の初期緩和係数 ω_0 を 0.0001 から 0.8 まで適当に変化させたときの反復回数の測定結果を図 5.3 に示す。横軸が反復回数、縦軸が残差ノルムである。 ω_0 が 0 から 1 の間であればほぼ同じ反復回数で収束することがわかった。

5.2.2 問題自由度による反復回数の変化

本小節では図 5.1 のモデルの要素分割数を変化させ、問題規模に対する反復回数の変化を調べる。表 5.1 に問題総自由度に対する反復回数を示す。問題総自由度に関わらず概ね同じ反復回数で収束することがわかった。この中で一番大きい自由度である 161,604 自由度のメッシュを図 5.16 に、解析結果を図 5.17 に示す。可視化には、数値シミュレーション用可視化フレームワーク AutoGL [7] を用いた。グローバル領域

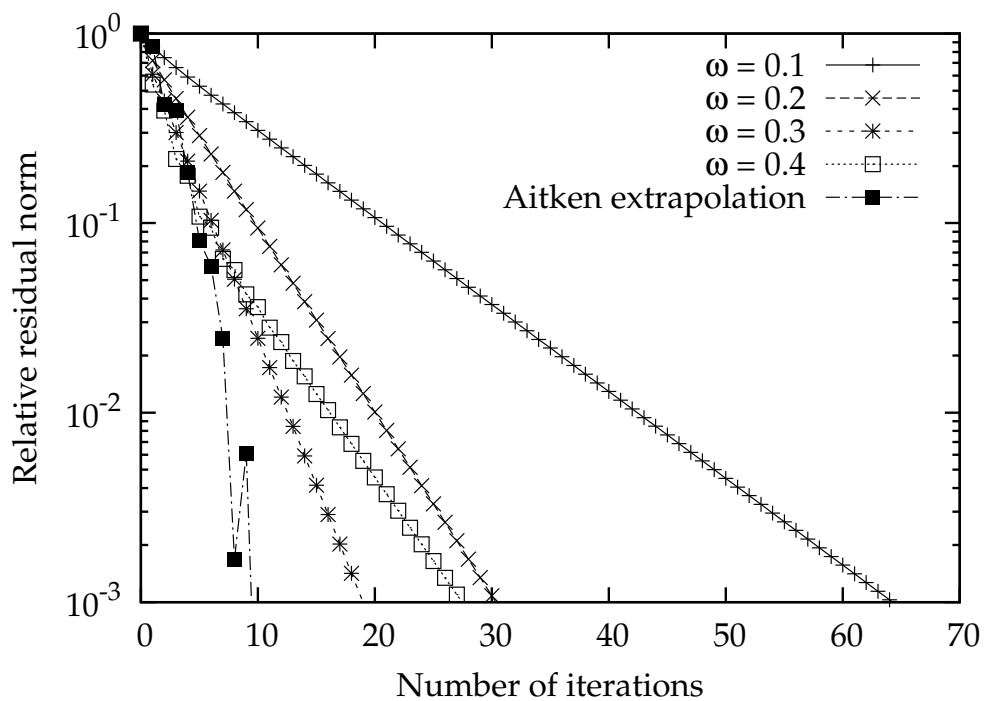


図 5.2 緩和係数を変化させたときの収束残差履歴

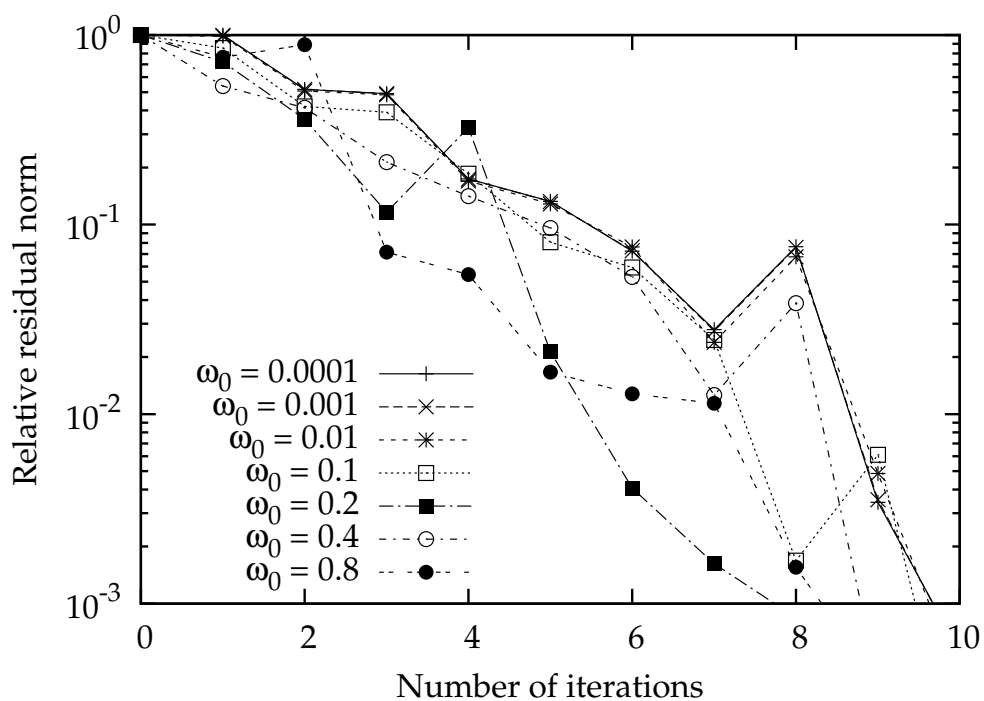


図 5.3 Aitken 補外の初期緩和係数を変化させたときの収束残差履歴

表 5.1 問題総自由度に対する反復回数

一辺の要素分割数	総自由度	反復回数
1	36	6
2	100	10
4	324	10
8	1,156	10
10	1,764	10
20	6,724	8
40	26,244	10
80	103,684	10
100	161,604	10

とローカル領域を離して可視化しているが実際には連続であることに注意する。コンターは Mises の相当応力であり、変位は 100 倍拡大してある。また、解析に要した時間は表 5.2 の計算機で 143 s であった。

5.3 二次元の疲労き裂進展解析

本節では図 5.4 のような片側にき裂のある帯板の二次元き裂進展解析を行う。解析スキームとして、分離反復解法の他に、比較対象として通常の有限要素法およびズームリング法を用いる。通常の有限要素法とは計算時間および精度を比較し、ズームリング法とは精度の比較を行う。

まず、分離反復解法を用いて解析を行う。帯板モデルの上下の対称性から 2 分の 1 モデルを作成し、アイソパラメトリック平面応力三角形二次要素を用いて分割を行う。グローバルモデルの自由度数が 105,382、ローカルモデルの自由度数がその約 8 分の 1 で 13,702、総自由度数が 119,084 である。ヤング率は 210 GPa、ポアソン比は 0.3 である。き裂進展解析の解析ステップ数は、き裂長 a を 10.0 mm から 14.0 mm まで一要素ずつ進展させ、計 41 ステップである。き裂長 a が 10.0 mm のときのメッシュを図 5.18 に、応力コンターおよび変形図を図 5.19 に示す。応力コンターは Mises の相当応力であり、変位は 100 倍に拡大してある。グローバルモデルとローカルモデルを

表 5.2 二次元解析のベンチマークに使用した計算機環境

CPU	Intel Core i7-920 (Nehalem) 42.7 Gflops 2.67 GHz 4 cores SSE4 L2 cache 256 KB × 4 L3 cache 8 MB QPI 4.8 GT/s
DRAM	DDR3-1066 12 GB (2 GB × 6) 25.6 GB/s
OS	Ubuntu 11.04 (Natty Narwhal)
Compiler	Intel C/C++ Compiler 12.1 [6]

分離して可視化していることに注意する。図 5.5 に解析の最初の 10 ステップ分の残差履歴を示す。横軸が総反復回数、縦軸が残差ノルムである。図 5.6 に全解析ステップそれぞれの残差履歴を重ねあわせたグラフを示す。横軸が反復回数、縦軸が残差ノルムである。図 5.7 に各解析ステップの反復回数を示す。横軸が解析ステップ、縦軸が反復回数である。解析ステップはき裂長に対応するが、反復回数はき裂長に関わらずあまり変化しないことがわかった。表 5.2 の計算機を用いたときの計算時間およびその処理毎の内訳を表 5.3 に示す。累計計算時間は複数回行われる処理の計算時間の累計、平均計算時間は累計計算時間を処理回数で割ったものである。また、「その他」の処理はメモリ確保、ファイル入出力、剛性行列の生成などを含む。続いて、同様の解析を通常の有限要素法にて行った。計算時間を表 5.4 に示す。表 5.3 と表 5.4 を比較すると、通常の有限要素法を用いるよりも分離反復解法を用いた方が 12.9 倍速くなった。処理別の計算時間を見ると、双方共に全体の処理の 8 割強が LDL 分解および前進・後退代入で占められていることがわかる。通常の有限要素法では LDL 分解および前進・後退代入を解析ステップ数だけ行うが、分離反復解法ではグローバル解析の

LDL 分解を 1 回しか行わない。これは分離反復解法の場合、グローバルモデルがき裂を含まないためにメッシュおよび剛性行列が解析全体を通じて不変であるからである。また、分離反復解法では通常の有限要素法よりも前進・後退代入の回数が多くなっている。これは各解析ステップ中の反復計算であり、今回の解析例では図 5.7 の通り平均 15.6 倍の回数だけ前進・後退代入を行っている。しかし、自由度数の大きい連立一次方程式の場合、前進・後退代入の計算時間は一般に LDL 分解の計算時間と比較すると非常に小さいため、結果的に分離反復解法の方が通常の有限要素法よりも小さい計算時間となっている。このような分離反復解法の優位性は、ローカルモデルのみでメッシュまたは要素剛性が変化するような場合に常に得られる。本手法は、多くの材料非線形現象など、非線形性が局所的に発現するような問題一般に応用することが可能であると考えられる。

分離反復解法、通常の有限要素法、およびズーミング法の精度を比較する。ズーミング法のグローバルモデルでは本来ならば粗いメッシュ分割を行うべきだが、今回は比較の簡単のために図 5.18 と同様の細かさのメッシュ分割を行う。このモデル化方法では、粗いメッシュが特異場を表現できないことによる精度劣化、および補間による精度劣化の二つを排除している。一般にズーミング法では、き裂をモデル化しないか、もしくは粗いメッシュでモデル化する。今回はき裂長 a を初期長さ 10.0 mm から進展させず、ローカルモデルでのみき裂を進展させるようなモデル化を行う。また、グローバルモデルからローカルモデルへ渡す境界条件はすべての節点で強制変位境界条件とする。図 5.20 にき裂長 a が 14.0 mm (グローバルモデルでは 10.0 mm) のときの解析結果を示す。図 5.8 に解析結果から直接変位外挿法により求めた応力拡大係数を示す。実線は片側にき裂のある帯板の一樣引張の理論解

$$K_I = F(a/W)\sigma \sqrt{\pi a}, \quad (5.1)$$

$$F(a/W) = 1.12 - 0.231(a/W) + 10.55(a/W)^2 - 21.72(a/W)^3 + 30.39(a/W)^4 \quad (5.2)$$

である [34]。図 5.4 から a は 10.0 mm から 14.0 mm、 $W = 48.0$ mm、 $\sigma = 100$ MPa である。図 5.9 に応力拡大係数から求めた疲労サイクル数を示す。き裂進展則には式 (2.9) の Paris 則を用いた。式中の材料定数は日本機械学会発電用原子力設備規格維持規格 [37] から $C = 3.78 \times 10^{-12}$ 、 $n = 3.07$ とし、 $\Delta K = K_I$ 、 $\Delta a = 0.1$ mm (一定) とした。分離反復解法の解は通常の有限要素解析により求めた解とほぼ一致しており、理

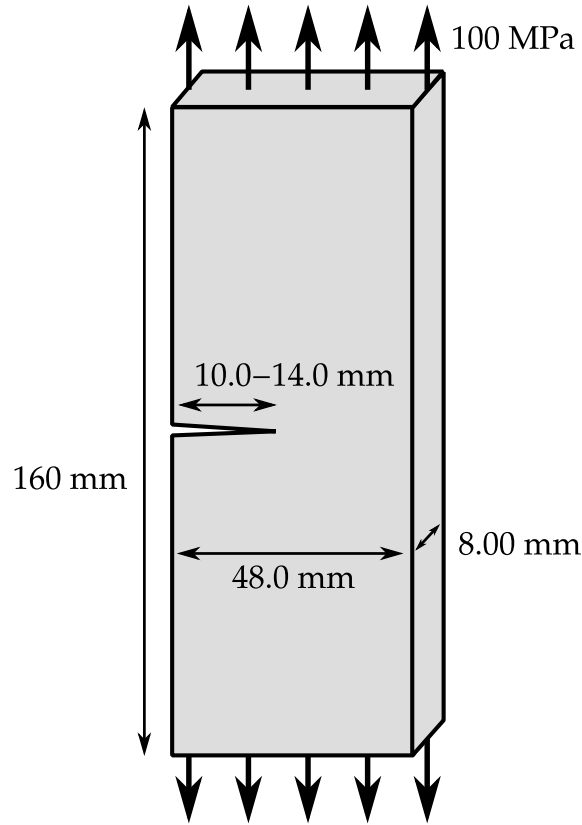


図 5.4 片側にき裂のある帯板の一様引張

論解ともある程度一致していることがわかる。しかしながら、ズームング法の解はこれらと大きく離れている。ズームング法の精度はローカル領域の大きさや受け渡す境界条件に敏感である。今回の解析例の精度が著しく低かった理由は、き裂長がローカル領域の半分以上と非常に長かったからである。また、受け渡す境界条件がすべて強制変位境界条件であったのも精度劣化に寄与している。ズームング法では、今回の解析例のように安直な設定を行うと十分な精度の解が得られず、十分な精度の解が得られるようなローカル領域の大きさや境界条件の設定には経験が必要である。

5.4 三次元の疲労き裂進展解析

図 5.4 のモデルの三次元の疲労き裂進展解析を行った。対称性から図 5.21 のような 4 分の 1 モデルのメッシュを作成した。有限要素はアイソパラメトリック四面体二次要素であり、材料定数は二次元解析と同様にヤング率 210 GPa、ポアソン比 0.3 とした。グローバルモデルの自由度数は 1,738,803、ローカルモデルの自由度数は 226,083、

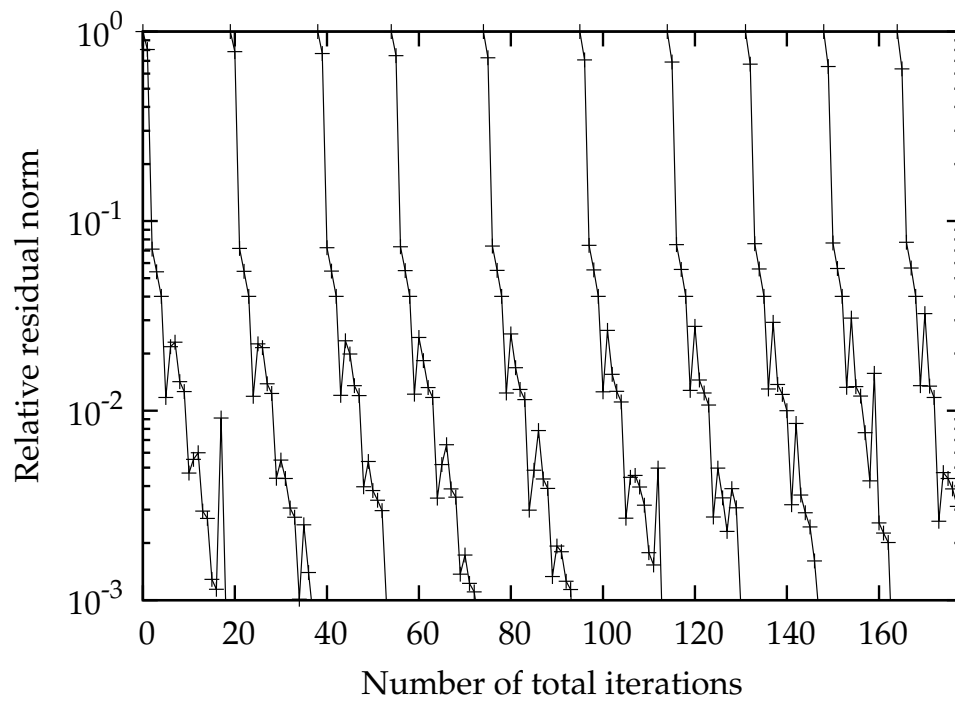


図 5.5 分離反復解法による二次元き裂進展解析の最初の 10 ステップの残差履歴

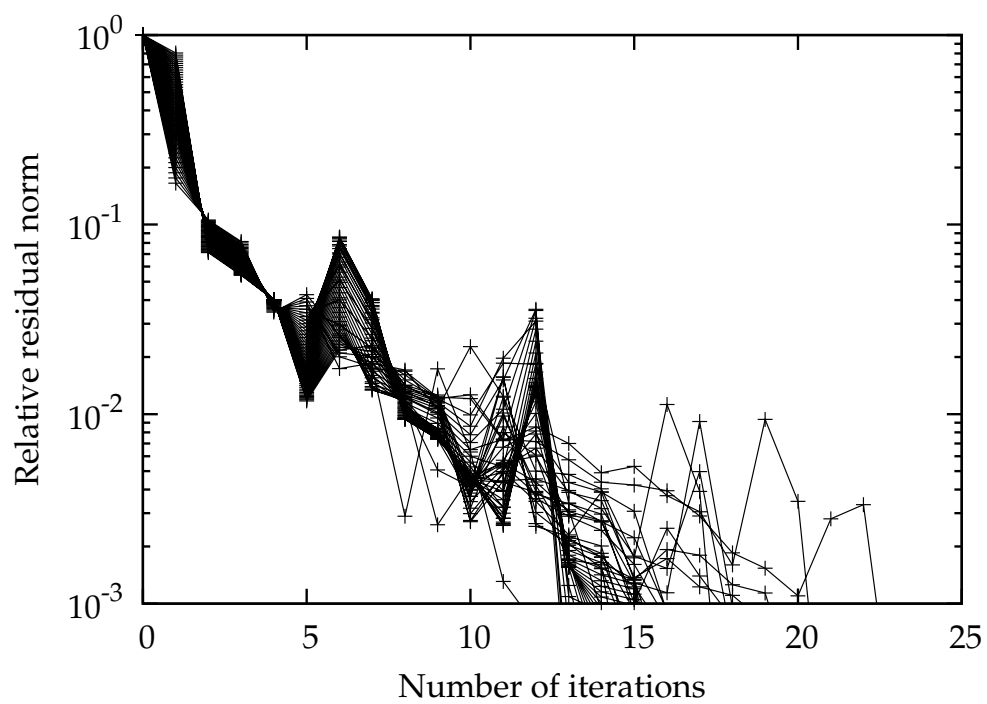


図 5.6 分離反復解法による二次元き裂進展解析の残差履歴

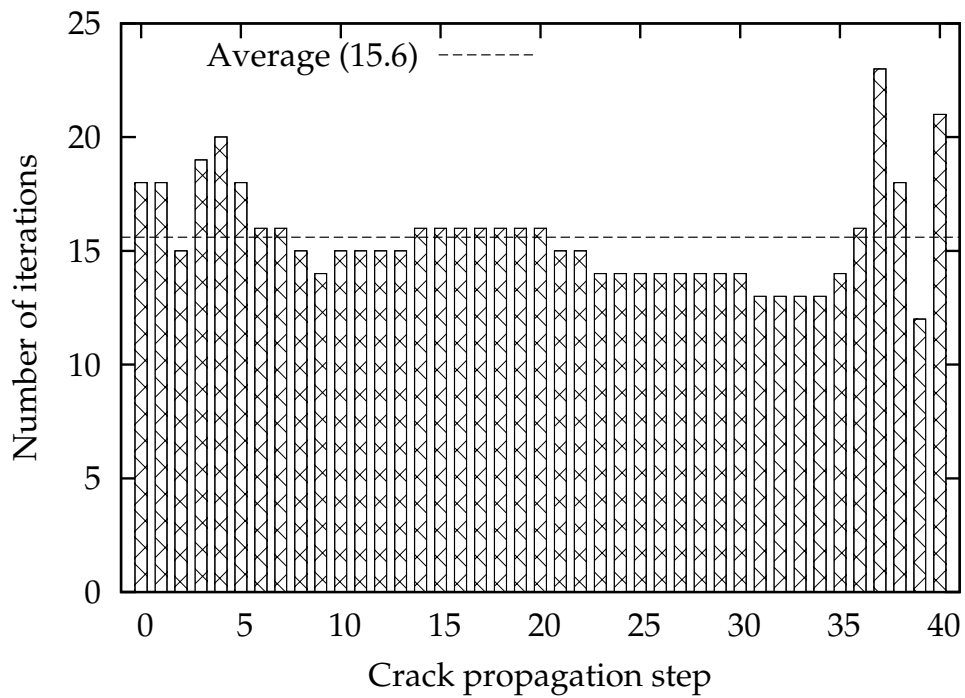


図 5.7 分離反復解法による二次元き裂進展解析の反復回数

表 5.3 分離反復解法による二次元き裂進展解析の計算時間とその処理毎の内訳

処理内容	累計計算時間	平均計算時間	処理回数
全体	878 s	-	-
グローバル解析の LDL 分解	198 s (23 %)	198 s	1
ローカル解析の LDL 分解	411 s (47 %)	10.0 s	41
グローバル解析の前進・後退代入	118 s (13 %)	0.174 s	680
ローカル解析の前進・後退代入	10.7 s (1 %)	0.0167 s	639
その他	140 s (16 %)	-	-

表 5.4 通常の有限要素法による二次元き裂進展解析の計算時間とその処理毎の内訳

処理内容	累計計算時間	平均計算時間	処理回数
全体	11,300	-	-
LDL 分解	9,180 s (81 %)	224 s	41
前進・後退代入	7.41 s (0 %)	0.181 s	41
その他	2,110 s (19 %)	-	-

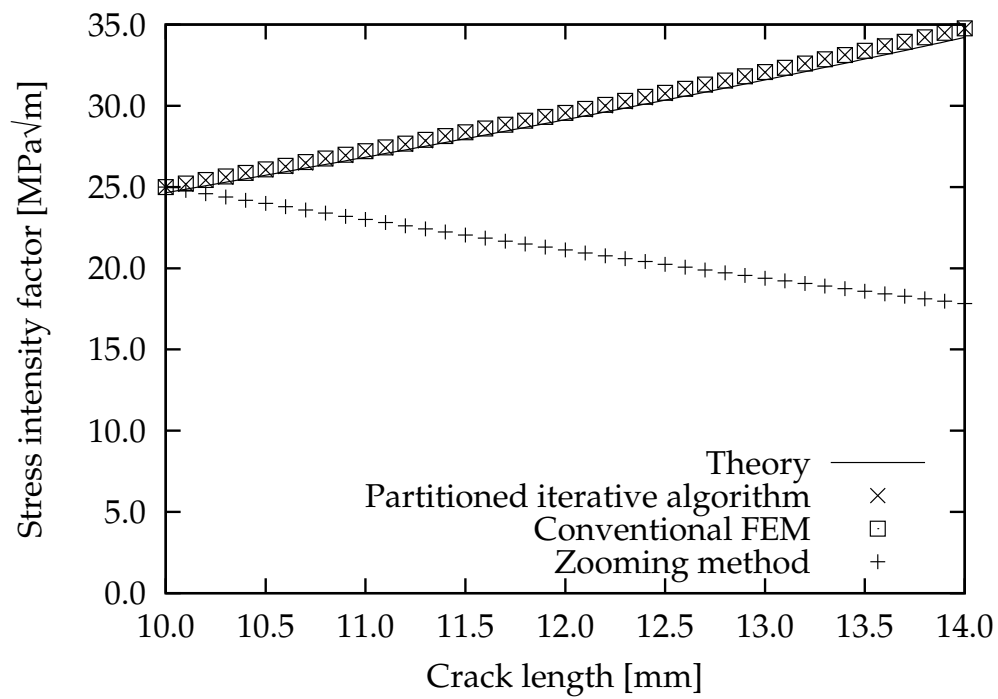


図 5.8 二次元き裂進展解析の応力拡大係数

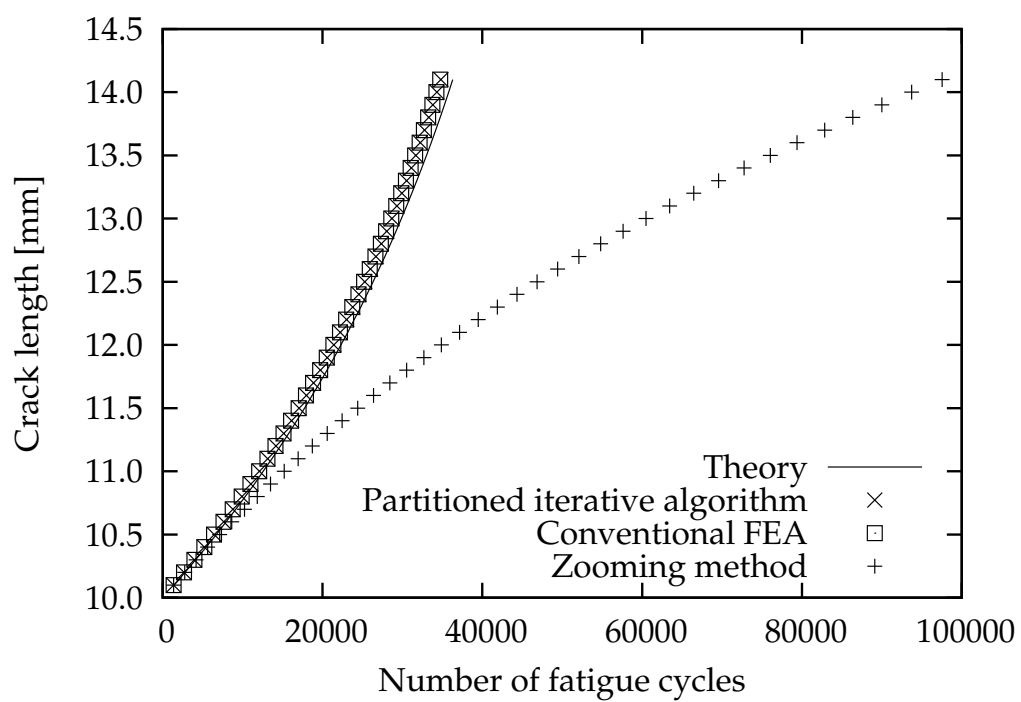


図 5.9 二次元き裂進展解析の疲労サイクル数

総自由度数は 1,964,886 である。計算機環境は表 5.5 のような一台の計算機である。き裂長 a が 10.0 mm のときの解析結果を図 5.22 に示す。変位は 200 倍に拡大してある。線形代数ソルバーには Intel MKL 10.2 [11] の PARDISO [21] を用い、並列スレッド数は 4 とした。メモリ使用量は自由度数に概ね比例し今回の解析例では 19.4 GB であった。一方、通常の有限要素法のメモリ使用量は 20.9 GB であった。分離反復解法の計算時間を表 5.6、通常の有限要素解析の計算時間を表 5.7 に示す。また、分離反復解法の解析ステップ毎の残差履歴を図 5.10 および図 5.11 に、反復回数を図 5.12 に示す。図 5.10 および図 5.11 の横軸は反復回数、縦軸は残差ノルムである。図 5.12 の横軸は解析ステップ、縦軸は反復回数である。反復回数の平均は二次元解析とほぼ変わらず、15.8 回であった。両者の計算時間を比較する。スピードアップは 4.52 であった。まず、分離反復解法の計算時間の 50 %、通常の有限要素法の計算時間の 11 % である「その他」の 6 千秒強はメモリ確保、ファイル入出力、剛性行列の生成などを含む。特に、このうち約 3 分の 1 の 2,100 s は解析ステップ毎のファイル出力であった。このように、分離反復解法の場合は計算時間の 50 % を「その他」が占めるが、前節の二次元解析と同様にホットスポットは線形代数ソルバーである。前節の二次元解析と同様に、グローバル解析のシンボリック分解および数値分解を解析のはじめに一回行うだけになる。そして、三角求解の回数が反復回数だけ多くなるが、全体としては分離反復解法の方が計算時間が小さくなる。

き裂長 $a = 10.0$ mm のときのき裂先端の応力拡大係数を図 5.13 に示す。横軸が板厚方向の節点座標、縦軸が応力拡大係数である。なお、板厚方向の座標が負のものは対称性から正のものと同じ値を折り返して表示している。今回の解析例のような二次元的なき裂では、板厚が有限であることから応力拡大係数がこの図のように山型になることが知られており、今回の解析でもこれを再現できている。また、分離反復解法および通常の有限要素解析の結果は二次元解析と同様に理論解とほぼ一致している。

き裂を進展させたときの各進展ステップの応力拡大係数を図 5.14 に示す。各解析ステップの応力拡大係数には図 5.13 の中央の座標の値を用いている。この応力拡大係数から Paris 則により求めた疲労サイクル数を図 5.15 に示す。二次元解析と同様に、分離反復解法と通常の有限要素解析の結果がよく一致していることがわかる。

表 5.5 三次元解析のベンチマークに使用した計算機環境

CPU	Intel Core i7-930 (Nehalem)
	44.8 Gflops
	2.80 GHz
	4 cores
	SSE4
	L2 cache 256 KB \times 4
	L3 cache 8 MB
	QPI 4.8 GT/s
DRAM	DDR3-1333
	24 GB (4 GB \times 6)
	25.6 GB/s
OS	Linux Mint 12 (Lisa)
Compiler	Intel C/C++ Compiler 12.1 [6]

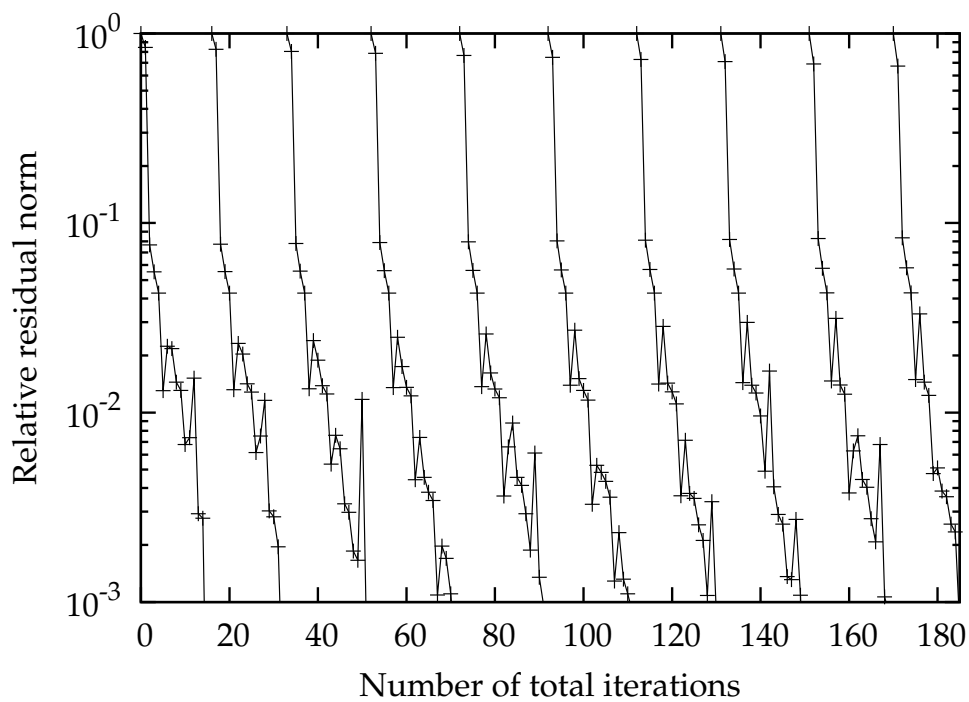


図 5.10 分離反復解法による三次元き裂進展解析の最初の 10 ステップの残差履歴

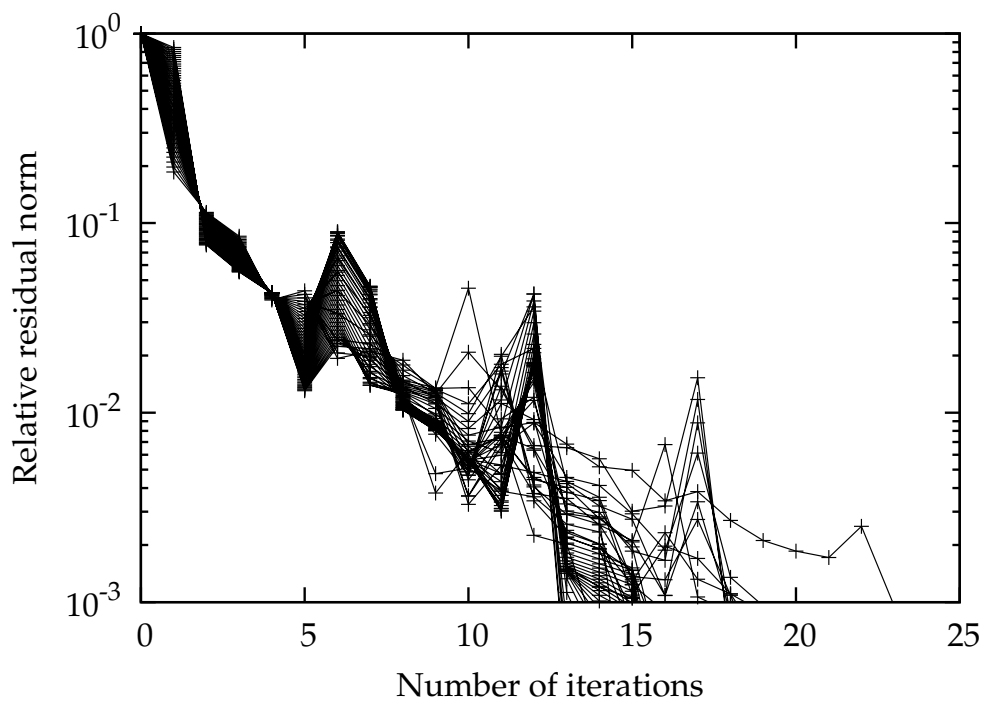


図 5.11 分離反復解法による三次元き裂進展解析の残差履歴

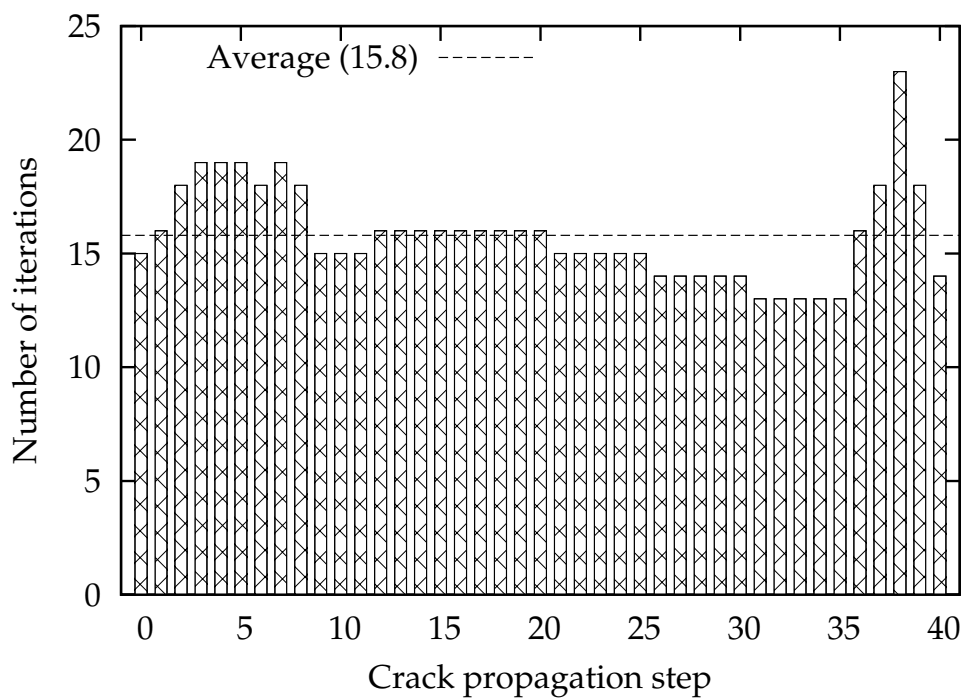


図 5.12 分離反復解法による三次元き裂進展解析の反復回数

表 5.6 分離反復解法による三次元き裂進展解析の計算時間とその各処理毎の内訳

処理内容	累計計算時間	平均計算時間	処理回数
全体	12,600 s	-	-
グローバル解析の分解処理	960 s (8 %)	960 s	1
ローカル解析の分解処理	1,190 s (9 %)	29.0 s	41
グローバル解析の三角求解処理	3,730 s (30 %)	5.41 s	690
ローカル解析の三角求解処理	407 s (3 %)	0.627 s	649
その他	6,310 s (50 %)	-	-

表 5.7 通常の有限要素法による三次元き裂進展解析の計算時間とその各処理毎の内訳

処理内容	累計計算時間	平均計算時間	処理回数
全体	57,000 s	-	-
分解処理	50,300 s (88 %)	1,230 s	41
三角求解処理	257 s (1 %)	6.27 s	41
その他	6,440 s (11 %)	-	-

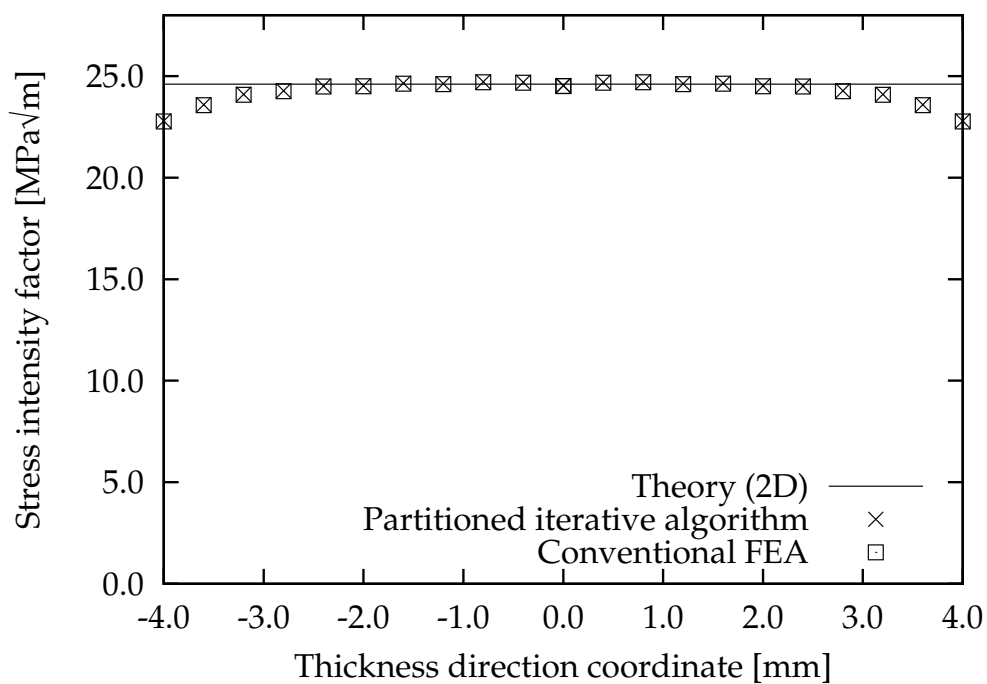


図 5.13 片側にき裂のある帯板のき裂先端の応力拡大係数

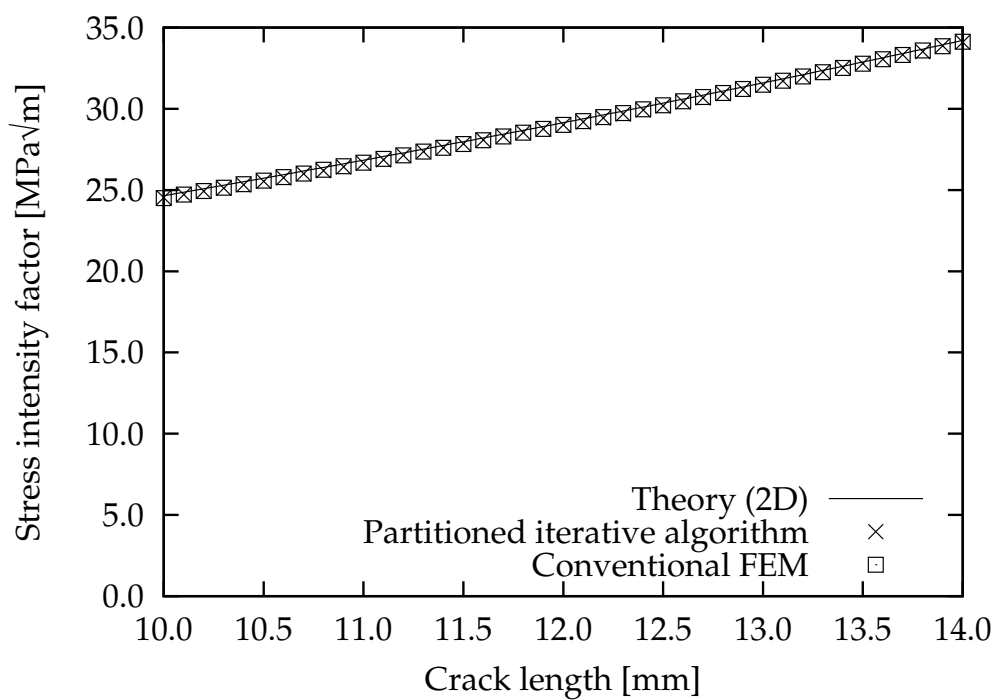


図 5.14 三次元き裂進展解析の応力拡大係数

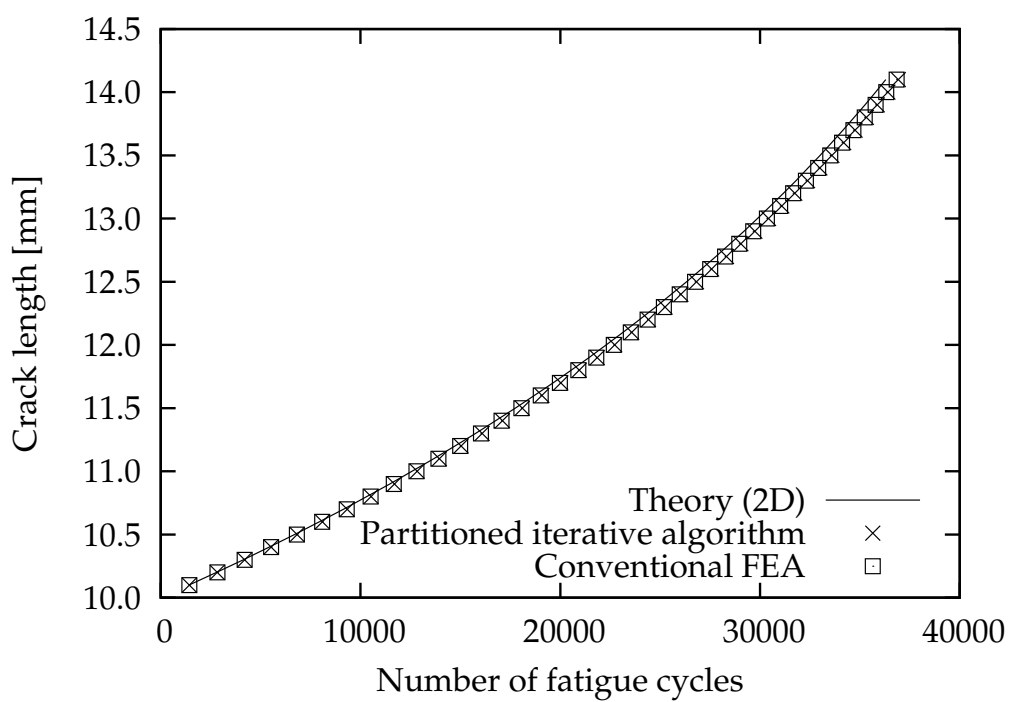


図 5.15 三次元き裂進展解析の疲労サイクル数

5.5 結言

本章では、分離反復解法を用いて数値実験を行った。まず、単純な形状のモデルを用いた静弾性解析を通じて、分離反復解法の反復特性について調べた。Aitken 補外による動的緩和付きのブロック Gauss–Seidel 法を用いれば、初期緩和係数や問題の自由度数に関わらずほぼ一定の反復回数で収束することがわかった。続いて、分離反復解法を用いて二次元および三次元の疲労き裂進展解析を行った。二次元の 12 万自由度の解析例では通常の有限要素法よりも 12.9 倍、三次元の 196 万自由度の解析例では 4.52 倍高速化した。また、精度は通常の有限要素法とほぼ同等であり、ズームング法と違って精度がローカル領域の大きさにほとんど依存しないことがわかった。

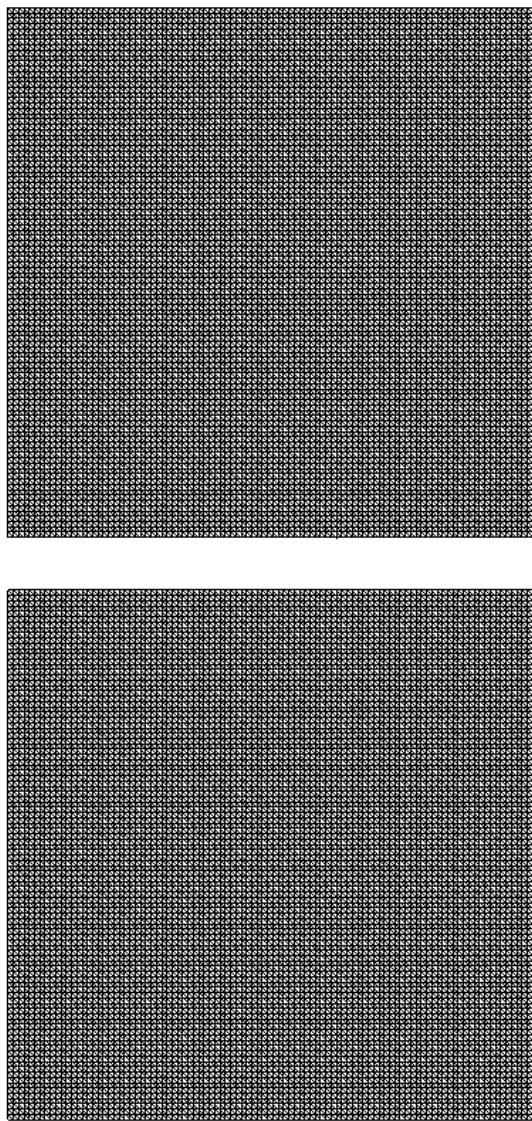


図 5.16 二つの正方形のモデルの 16 万自由度のメッシュ

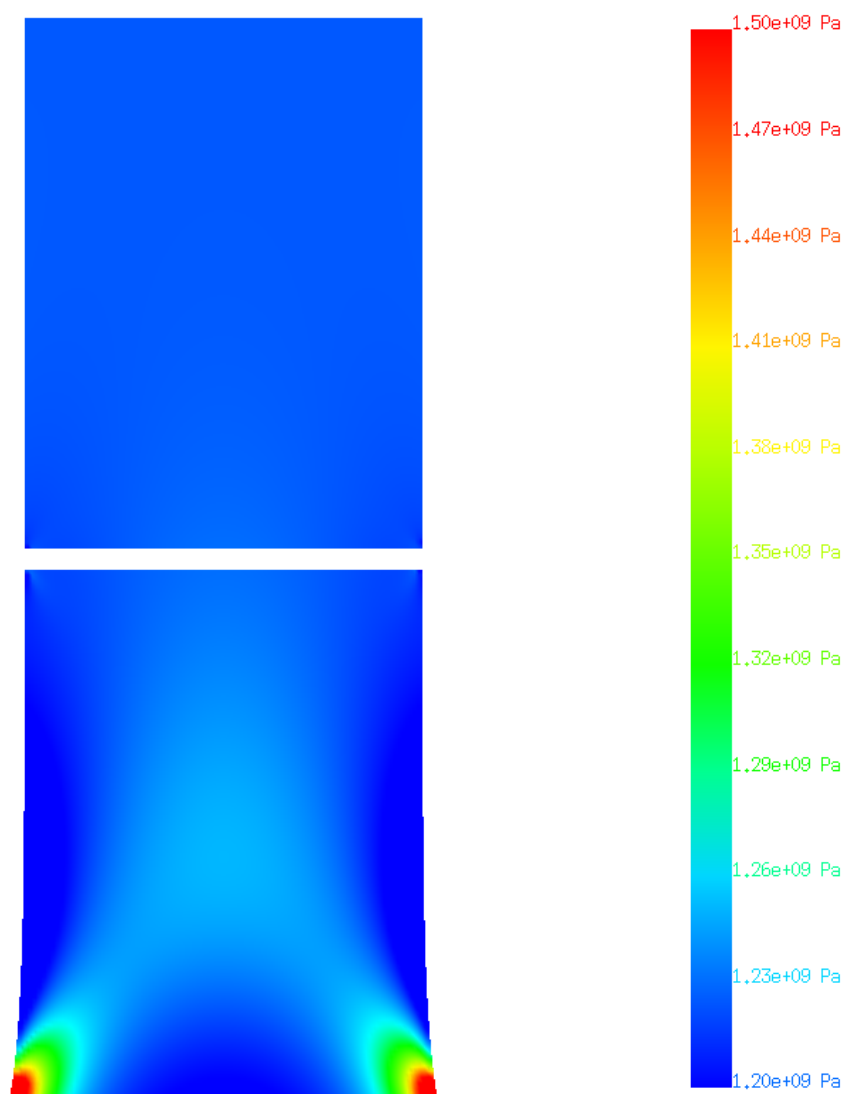


図 5.17 二つの正方形のモデルの応力コンター付き変形図

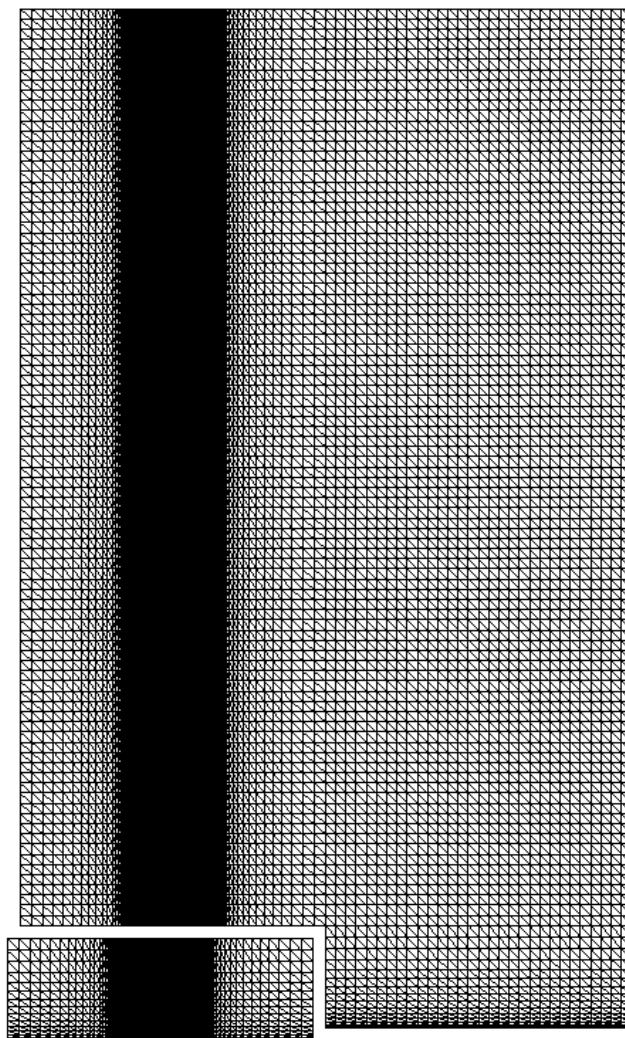


図 5.18 片側にき裂のある帯板の 12 万自由度の二次元メッシュ

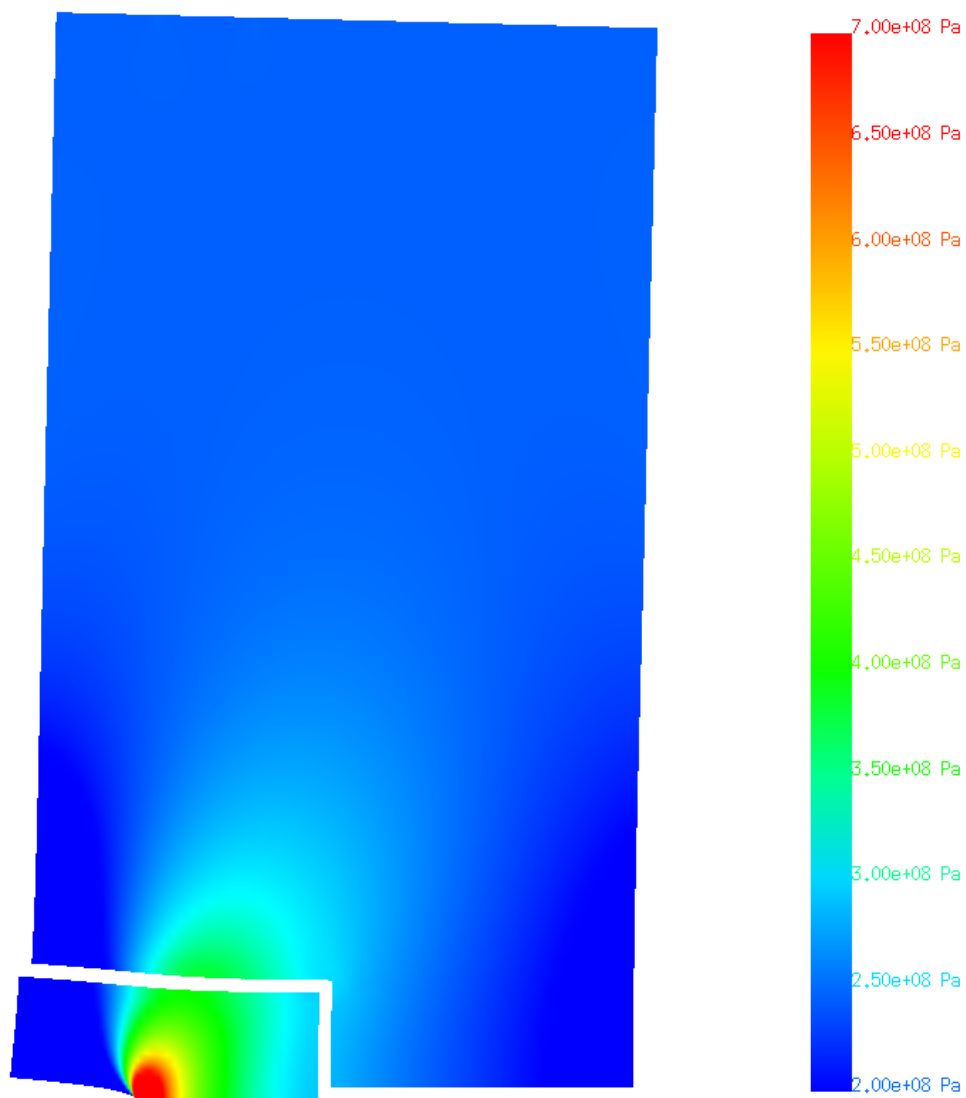


図 5.19 片側にき裂のある帯板の二次元解析結果の応力コンター付き変形図

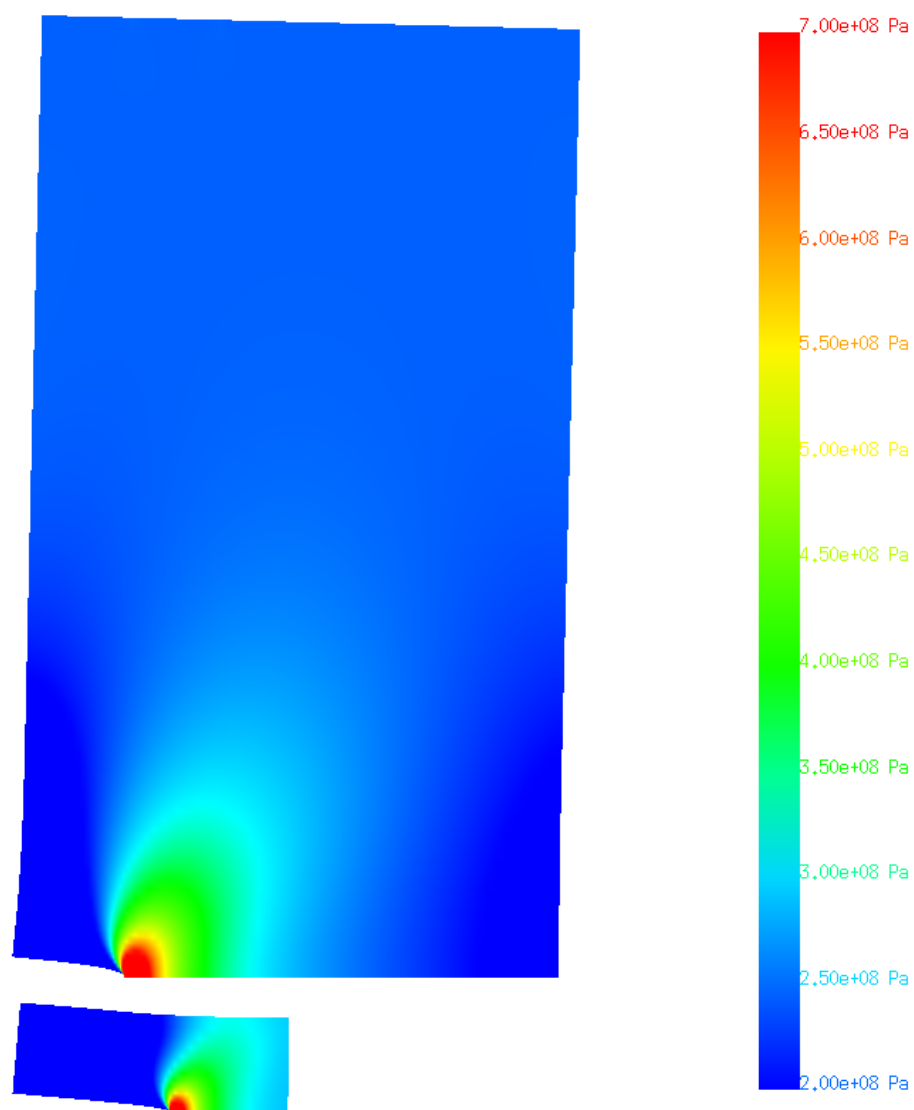


図 5.20 片側にき裂のある帯板のズームング法による二次元解析結果の応力コン
ター付き変形図

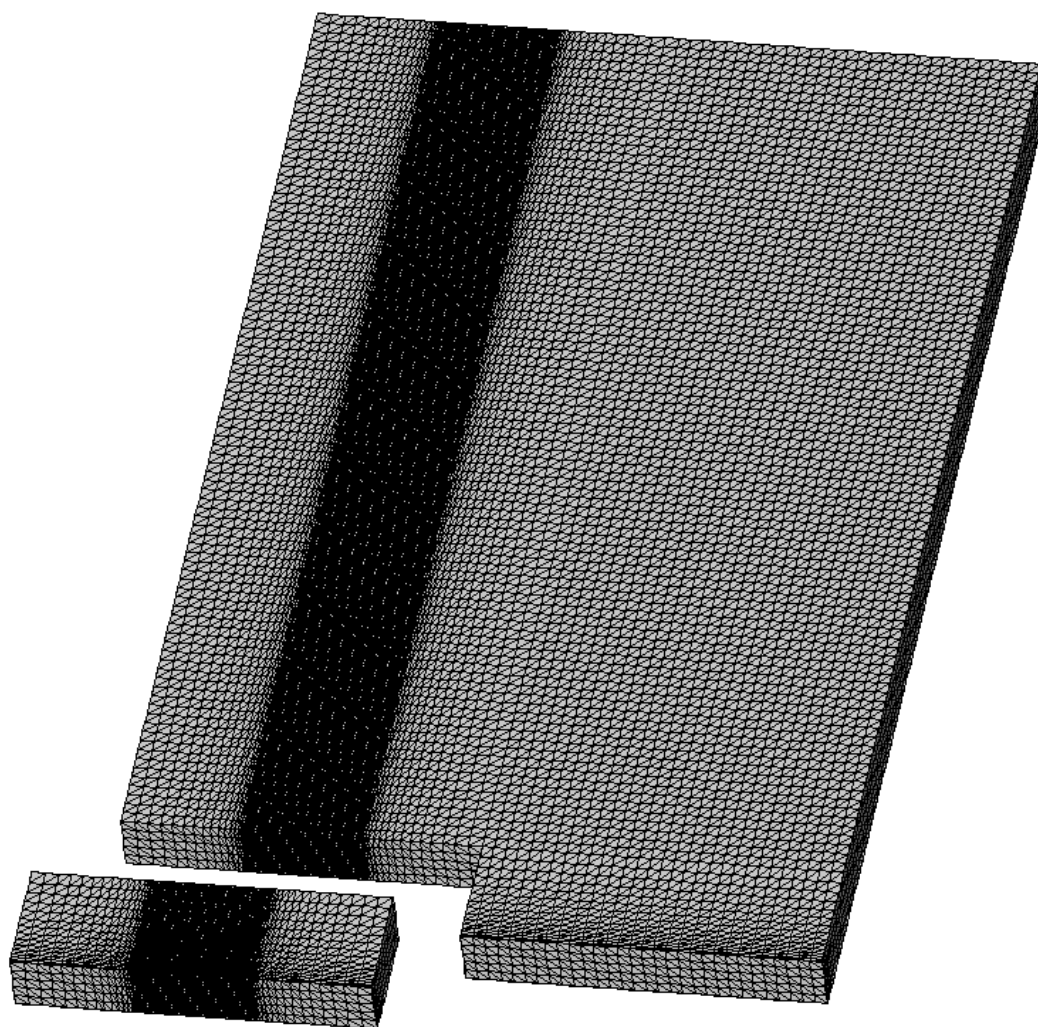


図 5.21 片側にき裂のある帯板の 196 万自由度の三次元メッシュ

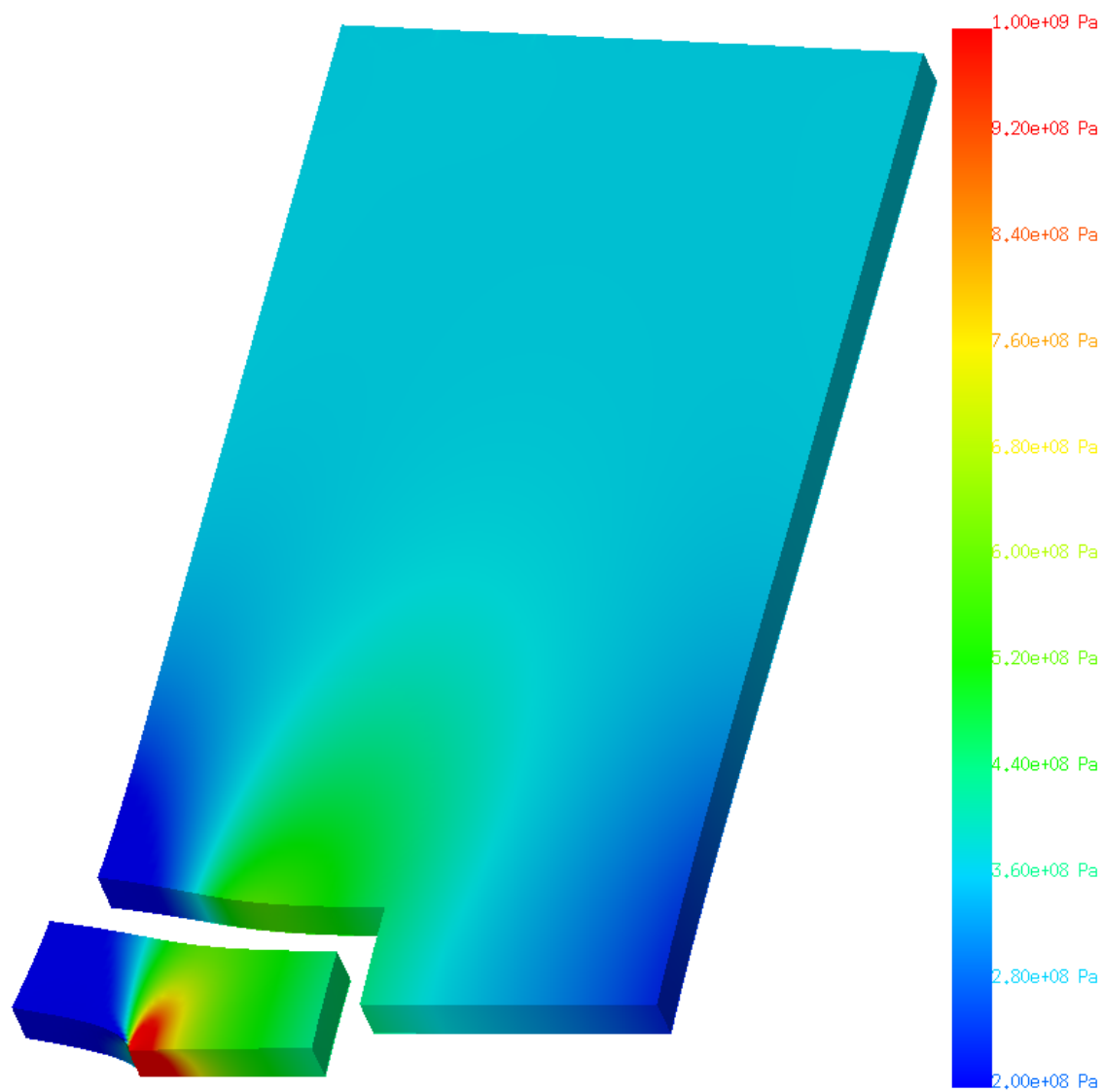


図 5.22 片側にき裂のある帯板の三次元解析結果の応力コンター付き変形図

第 6 章

結論

第1章では、本研究の背景および目的について述べた。

第2章では、本研究の背景である破壊力学の理論および解析の概要について説明した。この章では、本研究のターゲットである大規模破壊力学問題に対する三つの既存の既存手法として、通常の有限要素解析を行う方法、ズームング法、重合メッシュ法の三つを示した。

第3章では、マルチフィジックス連成解析および連成解析手法の概要について述べた。特に分離反復解法について重点的に述べた。そして、大規模破壊力学問題に対する既存手法を連成解析の枠組みで分類した。

第4章では、大規模破壊力学問題に分離反復連成解法を応用するときのアルゴリズムと実装について述べた。本研究では分離反復連成解法として Aitken 補外による動的緩和付きのブロック Gauss-Seidel 法を用いた。また、この章ではグローバル領域およびローカル領域の領域ソルバーの実装についても説明した。本研究では領域ソルバーの線形代数ソルバーに LDL 分解法を用いた。

第5章では、分離反復連成解法を用いて数値実験を行った。まず、単純な形状のモデルを用いた静弾性解析を通じて、分離反復連成解法の反復特性について調べ、初期緩和係数や自由度数に関わらずほぼ一定の反復回数で収束することがわかった。続いて、二次元および三次元の疲労き裂進展解析を行った。二次元の12万自由度の解析例では通常の有限要素法よりも12.9倍、三次元の196万自由度の解析例では4.52倍高速化した。また、精度は通常の有限要素法とほぼ同等であり、ズームング法と違って精度がローカル領域の大きさにほとんど依存しないことがわかった。

本論文では、疲労き裂進展問題の解析例を通じて、大規模破壊力学問題に分離反復連成解法を適用することの利点を示した。分離反復連成解法は破壊力学問題だけではなく、非線形性などのある種の複雑さが局所的に発現するような問題一般に有効であると考えられる。以上を鑑みて、今後の展望が二つが挙げられる。一つ目は局所的に非線形性が発現する別の問題に本手法を応用することである。弾塑性やクリープなどの材料非線形現象や接触などの境界非線形現象など、固体力学には非線形性が局所的に発現する問題が多い。本論文では線形破壊力学問題に分離反復連成解法を適用した解析例を示したが、ローカル領域が増分解析や Newton-Raphson 反復を伴うような非線形問題の場合、分離反復連成解法のアルゴリズムのループ構造が変化する。このような問題では、分離反復連成解法を用いることで線形破壊力学問題よりもさらに効

率的な実装が存在すると考えられる。二つ目の展望はグローバル領域のさらなる大規模化である。本論文では共有メモリ環境において 196 万自由度の三次元き裂進展解析を示した。しかし、このときのグローバルモデルの自由度数とローカルモデルの自由度数の比は約 8:1 程度であった。本手法はこの比が大きいほど効率的になることが推測される。今回の解析例よりもグローバル領域の自由度数が大きい問題を解析するためには、メモリ容量の制約からスーパーコンピュータや PC クラスタを用いることが有効である。

謝辞

本論文は東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻の修士論文として同専攻の吉村・和泉研究室において作成されたものです。

指導教員 (主査) である同専攻教授の吉村忍先生に大変お世話になりました。大学院入学時に固体力学の知識が皆無だった私が計算破壊力学に関する修士論文を仕上げる事ができたのは吉村先生のおかげです。副査をお引き受けいただいた東京大学生産技術研究所教授の都井裕先生からは貴重なアドバイスをいただきました。同専攻准教授の和泉潔先生からは、研究室のゼミにて、独立行政法人研究所への長い勤務経験に基づく視点からの目が覚めるような意見を沢山いただきました。

同専攻助教の藤井秀樹さんとは GNU/Linux サーバインフラや PC クラスタの設計・構築に関する議論を行いました。藤井さんには研究室の現場マネージャーとしても日常的にお世話になりました。同専攻技術専門職員の川手秀樹さんは、材料実験経験が乏しい私に材料強度学について教えてくださいました。秘書の井上知子さんは事務手続き関係で頻繁に面倒を見てくださいました。

主任研究員の河合浩志さん、研究員の南さつきさん、研究員の片岡俊二さんには学会講演論文の共著者としてお世話になり、同時に直接的な指導も多くいただきました。河合さんからは有限要素法および計算機ハードウェア、南さんからは数値線形代数および非線形方程式解法、片岡さんからは流体・構造連成解析で用いられる解法について主に教わりました。主任研究員の杉本振一郎さんは、NIS・NFS も知らなかった私にサーバ管理関連の知識を授けてくださいました。杉本さんからは磁場・構造連成解析の空気も教えていただきました。研究員の室谷浩平さんからは応用数理の視点からの鋭い指摘を多くいただきました。株式会社インサイト技術開発部の淀薫さんからは CAE (Computer-aided Engineering) の空気を教わりました。

研究室の同期の内田英明君には日常的にとってもお世話になりました。内田君は優秀で手際が良いので研究室の種々のイベントでは助かりました。研究室の後輩の Chi Wang さん、迫村光秋君、柴田一樹君、皆川浩人君、宮崎保明君、友部篤志君、池田竜一君、藏本貴久君、三目直登君、渡邊峻君とは色々な話をしました。迫村君とは SSH (Secure Shell) について語りました。柴田君とは Git について語りました。宮崎君とは Python について語りました。友部君とはシェルスクリプトについて語りました。三目君とは L^AT_EX について語りました。渡邊君とは Emacs Lisp について語りました。

参考文献

- [1] ADVENTURE Project.
<http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/>
- [2] Boeing 787 Dreamliner.
<http://www.boeing.com/commercial/787family/>
- [3] DAVIS, T. A. *Direct Methods for Sparse Linear Systems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2006.
- [4] FARHAT, C. AND ROUX, F.-X. A method of finite element tearing and inter-connecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 32, issue 6, pp. 1205–1227, 1991.
- [5] FISH, J. The s-version of the finite element method. *Computers and Structures*, vol. 43, issue 3, pp. 539–547, 1992.
- [6] Intel Compilers from Intel.
<http://software.intel.com/en-us/articles/intel-compilers/>
- [7] KAWAI, H. ADVENTURE AutoGL: a handy graphics and GUI library for researchers and developers of numerical simulations. *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, vol. 11, issue 3, pp. 111–120, 2006.
- [8] KELLEY, C. T. *Solving Nonlinear Equations with Newton's Method*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- [9] KIKUCHI, M., WADA, Y., TAKAHASHI, M. AND LI, Y. Fatigue crack growth simulation using s-version FEM. *Advanced Materials Research*, vols. 33–37, pp. 133–138, 2008.

-
- [10] MANDEL, J. Balancing domain decomposition. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, vol. 9, issue 3, pp. 233–241, 1993.
- [11] Math Kernel Library from Intel.
<http://software.intel.com/en-us/articles/intel-mkl/>
- [12] MATTHIES, H. AND STEINDORF, J. Partitioned strong coupling algorithms for fluid–structure interaction. *Computers and Structures*, vol. 81, pp. 805–812, 2003.
- [13] MINAMI, S. AND YOSHIMURA, S. Performance evaluation of nonlinear algorithms with line-search for partitioned coupling techniques for fluid–structure interactions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 64, issues 10–12, pp. 1129–1147, 2010.
- [14] NAGASHIMA, T., OMOTO, Y. AND TANI, S. Stress intensity factor analysis of interface cracks using X-FEM. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 56, issue 8, pp. 1151–1173, 2003.
- [15] NISHIKAWA, H., SERIZAWA, H. AND MURAKAWA, H. Actual application of FEM to analysis of large scale mechanical problems in welding. *Science and Technology of Welding and Joining*, vol. 12, issue 2, pp. 147–152, 2007.
- [16] NISHIOKA, T. AND ATLURI, S. N. Analytical solution for embedded elliptical cracks, and finite element alternating method for elliptical surface cracks, subjected to arbitrary loadings. *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 17, issue 3, pp. 247–268, 1983.
- [17] OGINO, M., SHIOYA, R., KAWAI, H. AND YOSHIMURA, S. Seismic response analysis of nuclear pressure vessel model with ADVENTURE system on the Earth Simulator. *Journal of the Earth Simulator*, vol. 2, pp. 41–54, 2005.
- [18] OKADA, H. AND KAMIBEPPU, T. A virtual crack closure-integral method (VCCM) for three-dimensional crack problems using linear tetrahedral finite elements. *International Journal for Computational Methods in Engineering Science and Mechanics*, vol. 10, issue 3, pp. 229–238, 2005.
- [19] OKADA, H., KAWAI, H. AND ARAKI, K. A virtual crack closure-integral method (VCCM) to compute the energy release rates and stress intensity

- factors based on quadratic tetrahedral finite elements. *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 75, issue 15, pp. 4466–4485, 2008.
- [20] SAAD, Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems, Second Edition*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- [21] SCHENKA, O., GÄRTNERB, K., FICHTNERA, W. AND STRICKERA, A. PAR-DISO: a high-performance serial and parallel sparse linear solver in semiconductor device simulation. *Future Generation Computer Systems*, vol. 18, issue 1, pp. 69–78, 2001.
- [22] SUGIMOTO, S., MARGRON, V. AND YOSHIMURA, S. Parallel vibration analysis of magnetic–structural coupled phenomena of MRI model. In *Proceedings of the 9th World Congress on Computational Mechanics and the 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics*, Sydney, Australia, July 2010.
- [23] TERADA, K. AND KIKUCHI, N. A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, issues 40–41, pp. 5427–5464, 2001.
- [24] TEZDUYAR, T. E. AND SATHE, S. Modelling of fluid–structure interactions with the space–time finite elements: solution techniques. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 54, issues 6–8, pp. 855–900, 2007.
- [25] YAGAWA, G., SONEDA, N. AND YOSHIMURA, S. A large scale finite element analysis using domain decomposition method on a parallel computer. *Computers and Structures*, vol. 38, issues 5–6, pp. 615–625, 1991.
- [26] YAGAWA, G., YOSHIOKA, A., YOSHIMURA, S. AND SONEDA, N. A parallel finite element method with a supercomputer network. *Computers and Structures*, vol. 47, issue 3, pp. 407–418, 1993.
- [27] YAGAWA, G. AND SHIOYA, R. Parallel finite elements on a massively parallel computer with domain decomposition. *Computing Systems in Engineering*, vol. 4, issues 4–6, pp. 495–503, 1993.
- [28] YAMADA, TAKAHIRO. Finite element procedure for overlapping meshes based on domain decomposition approach using background voxel mesh. In *Proceedings of the 11th US National Congress on Computational Mechanics*,

213901, Minneapolis, MN, USA, July 2011.

- [29] YAMADA, TOMONORI AND YOSHIMURA, S. Line search partitioned approach for fluid–structure interaction analysis of flapping wing. *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, vol. 24, issue 1, pp. 51–60, 2008.
- [30] YOSHIMURA, S., SHIOYA, R., NOGUCHI, H. AND MIYAMURA, T. Advanced general-purpose computational mechanics system for large-scale analysis and design. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 149, issue 1, pp. 279–296, 2002.
- [31] ZHANG, Q. AND HISADA, T. Analysis of fluid–structure interaction problems with structural buckling and large domain changes by ALE finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, issue 48, pp. 6341–6357, 2001.
- [32] 小国力 編著, 村田健郎, 三好俊郎, DONGARRA, J. J., 長谷川秀彦 著. 行列計算ソフトウェア—WS、スーパーコン、並列計算機. 丸善, 1991.
- [33] 失敗知識データベース.
<http://www.sozogaku.com/fkd/>
- [34] 白鳥正樹, 三好俊郎, 松下久雄 共著. 数値破壊力学. 実教出版, 1980.
- [35] 鈴木克幸, 大坪英臣, 関勝載, 白石卓士郎. 重合メッシュ法による船体構造のマルチスケール解析. *Transactions of the Japan Society for Computational Engineering and Science*, vol. 1999, 19990020, 1999.
- [36] 鈴木克幸, 大坪英臣, 中住昭吾, 榛村太亮. 重合メッシュ法におけるグローバル・ローカル反復解析. 日本造船学会論文集, vol. 192, pp. 691–696, 2002.
- [37] 日本機械学会. 発電用原子力設備規格維持規格 (JSME S NA1-2004), 2004.
- [38] 矢川元基 編. 破壊力学—理論・解析から工学的応用まで. 培風館, 1998.