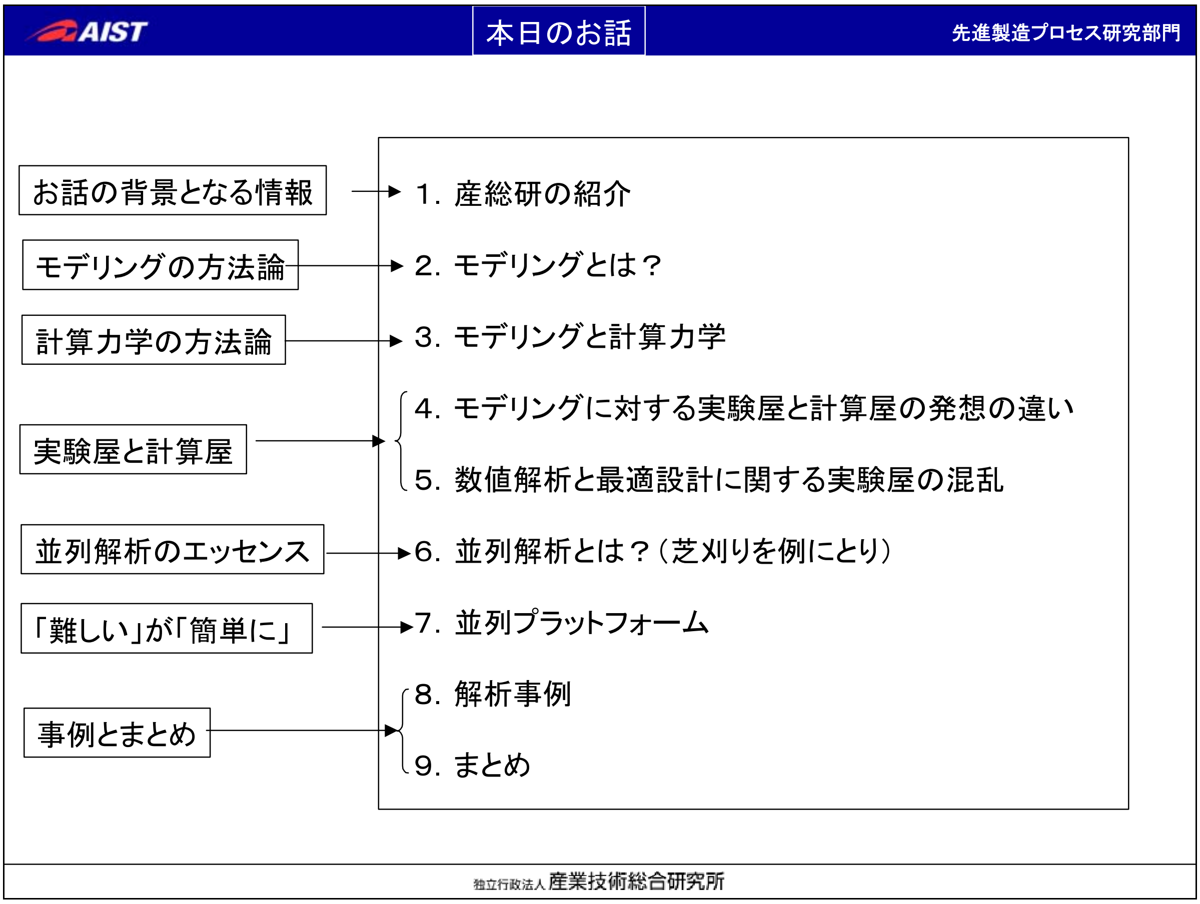
茨城大学イブニングセミナー　第 4 回
（前期第 4 回）
平成 19 年 5 月 10 日

実験屋と計算屋の溝は埋まるのか？

―モデリングと最適設計，並列解析を中心として―

手塚　明
(独)産業技術総合研究所
先進製造プロセス研究部門　副研究部門長
製造プロセス数理解析研究グループ長(兼務)



II　講演概要

計算力学（科学）が理論，実験に次ぐ第三の方法と言われて久しい．実験屋と計算屋が共同して研究や開発を進めて行くケースもあるが，一方でシミュレーション嫌いの実験屋，シミュレーションに過度の期待を持ちすぎる実験屋も多い．ここでは，実験屋と計算屋の双方を対象として，モデリングに対する実験屋と計算屋の発想の違い，計算力学の汎用性の意味，数値解析と最適設計に関する実験屋の混乱，並列解析の可能性及び我々が開発した並列書き換えが簡単に出来る並列プラットフォームの紹介について，具体的な問題設定及び有限要素解析事例も適宜添えて，講演する．

実験屋と計算屋の溝は埋まるのか？

―モデリングと最適設計，並列解析を中心として―

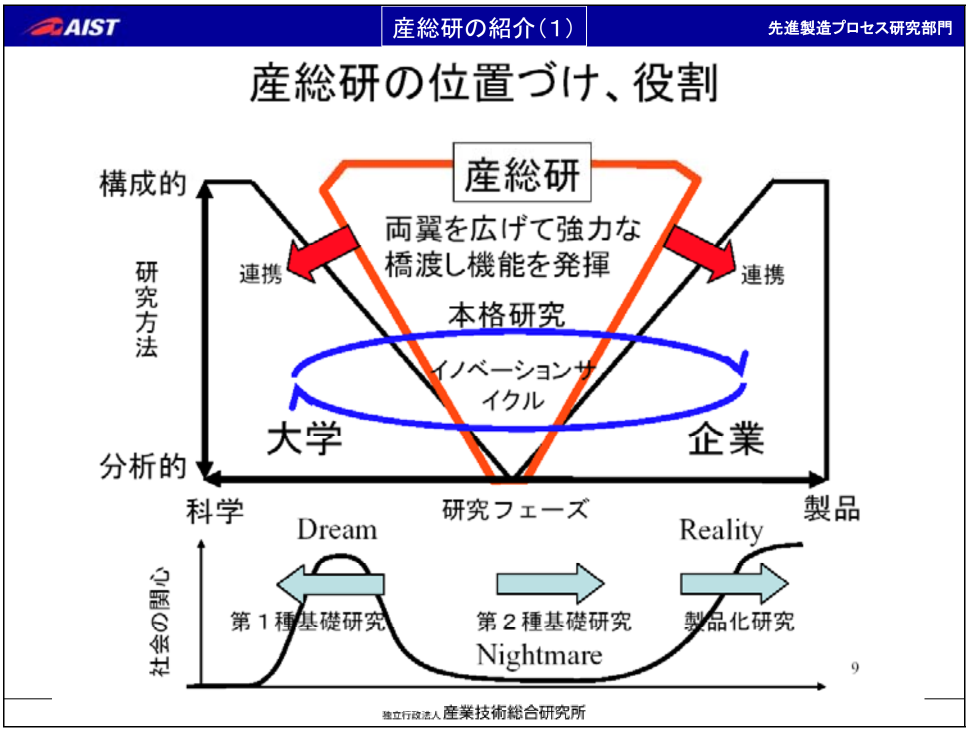
（独）産業技術総合研究所　先進製造プロセス研究部門　手塚　明

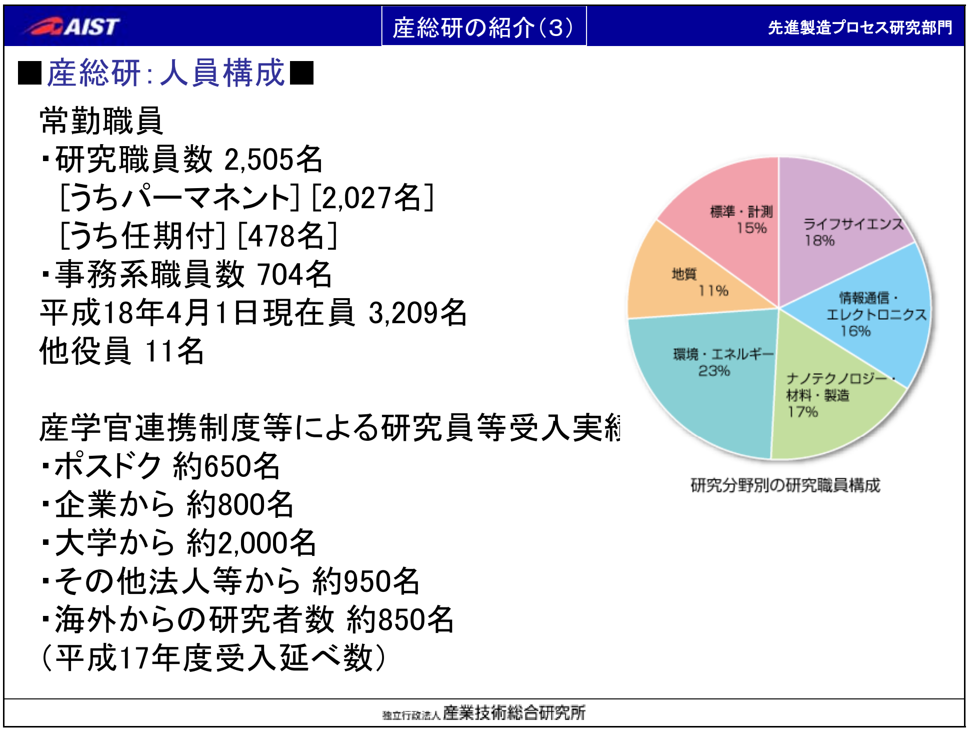
１．はじめに

計算力学（科学）が理論，実験に次ぐ第三の方法と言われて久しい．実験屋と計算屋が共同して研究や開発を進めて行くケースもあるが，一方でシミュレーション嫌いの実験屋，シミュレーションに過度の期待を持ちすぎる実験屋も多い．ここでは，実験屋と計算屋の双方を対象として，モデリングに対する実験屋と計算屋の発想の違い，計算力学の汎用性の意味，数値解析と最適設計に関する実験屋の混乱，並列解析の可能性及び我々が開発した並列書き換えが簡単に出来る並列プラットフォームの紹介について，具体的な問題設定及び有限要素解析事例も適宜添えて，講演する．

２．産総研の紹介

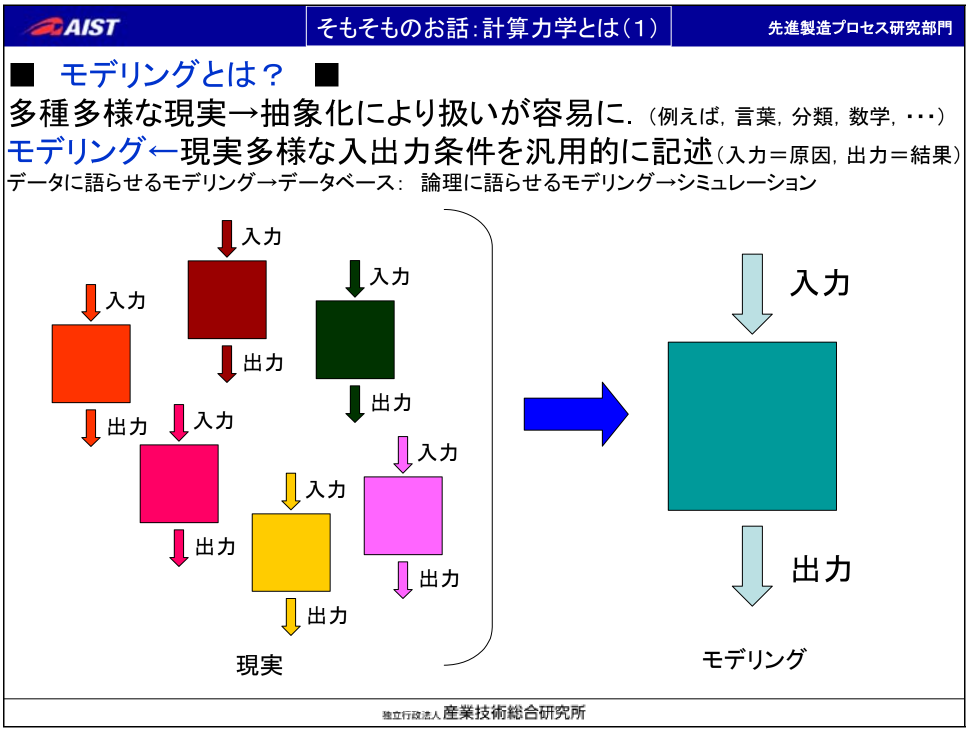
産総研は常勤研究職員 2500 名余り，ライフサイエンス，情報通信・エレクトロニクス，ナノテクノロジー・材料・製造，環境・エネルギー，地質，標準・計測の 6 分野を守備範囲とし，第一種基礎研究と第二種基礎研究の双方を視野に入れた本格研究を推進している日本有数の研究所である．我々の研究ユニットが属するナノテクノロジー･材料･製造分野では第 1 期(2001 年～2004 年）の反省から「材料科学の優位性を活かす融合」が第二期（2005 年～2009 年）のキャッチフレーズの一つとなっている．我々の研究ユニットである先進製造プロセス研究部門は旧機技研の機械工学部隊と旧・名工研のセラミックス部隊との融合からなっている．本講演での実験屋は機械工学及び材料の実験研究者を想定している事を付記する．



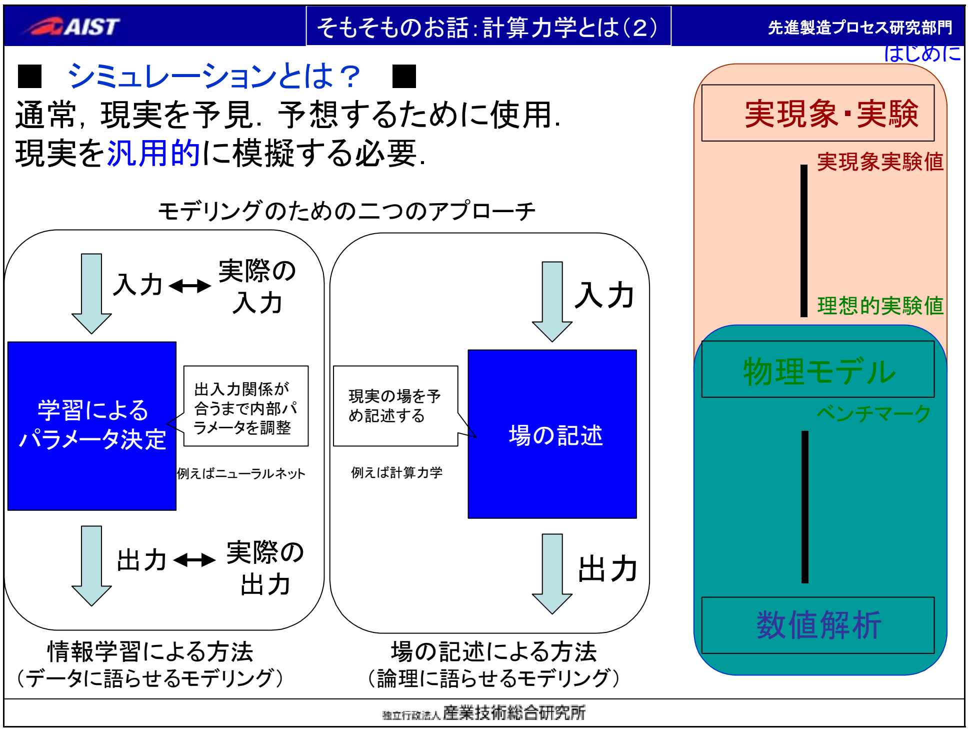


3．モデリングとは？

多種多様な現実に対し，一種の抽象化作業を施す事で，より扱いを一般化し，容易にする事が出来る．例えば，言葉，分類，数学等がそれである．モデリングとは，現実多様な入出力条件を汎用的に記述する方法と定義出来る．入力は例えば原因であり，出力は結果である．



モデリングにはデータベースのようにデータに「語らせる」ものとシミュレーションのように「論理」に語らせるものの二種類に大別出来る．シミュレーションとは通常，現実を予見．予想するために有効であり，そのためには現実を汎用的に模擬する必要がある．



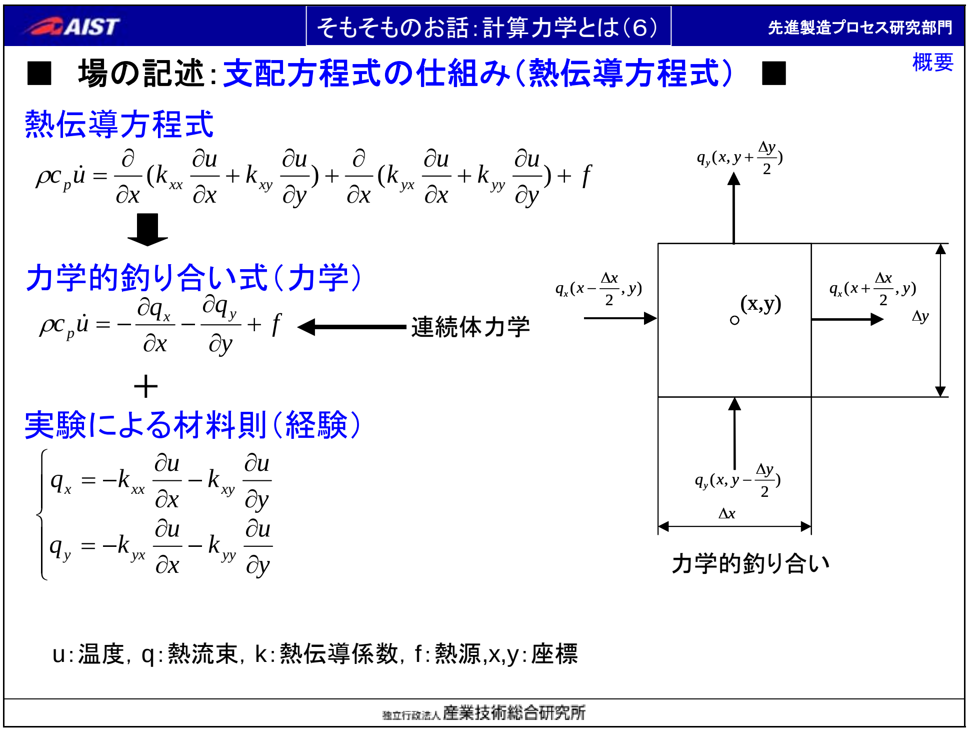
４．モデリングと計算力学

数値計算による力学を計算力学という．計算力学シミュレーションとアニメーションの違いは物理的なモデリングがあるかなしかの違いである．有効な物理的なモデリングのお陰で，携帯電話の落下試験や自動車の衝突試験の替わりに計算力学シミュレーションによる数値実験を用いる事が可能になっている．

物理的なモデリングは通常，偏微分方程式による境界値問題あるいは初期値問題として記述される．力学挙動を表す偏微分方程式は通常，微小部分を対象にした，力学的釣り合い式と実験式から成り立っている[1]．また，二階の偏微分方程式はその係数の条件から楕円型，放物型，双曲型に分類する事が出来，それぞれ特有の性質を持っている．

物理的なモデリングに基づく計算力学シミュレーションを用いる事により，従来の勘と経験では想いも及ばなかったような，縦を押すと横も縮むメゾ構造の設計が可能になる．

さて，今まで述べてきたのは，Navier の線形弾性論に端を発する連続体力学に基づくモデリング及び計算力学シミュレーションだった． 18 世紀には，それに対して，Cauchy の分子モデルが提案されていたが，現実の多様性をモデル化するには至らず，Navier の線形弾性論の前に挫折をしたが，近年，計算機の発達により，分子動力学というシミュレーション手法の形で発展しようとしている事を付記する[2]．ここでは，連続体力学に基づくモデリング及び計算力学シミュレーションについて扱う事にする．



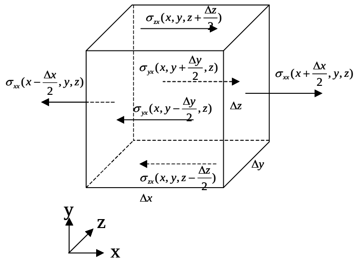
■ 場の記述：支配方程式の仕組み（弾性方程式） ■

力学的釣り合い式（力学）

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z}+\rho f_x=0$$

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x}+\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z}+\rho f_y=0$$

$$\frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y}+\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}+\rho f_z=0$$



＋変位ー歪み関係式（定義）

$$\begin{cases}\varepsilon_{xx}=\dfrac{\partial u}{\partial x}\\ \varepsilon_{yy}=\dfrac{\partial v}{\partial y}\\ \varepsilon_{zz}=\dfrac{\partial w}{\partial z}\\ \varepsilon_{xy}=\varepsilon_{yx}=\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u}{\partial y}+\dfrac{\partial v}{\partial x}\right)\\ \varepsilon_{yz}=\varepsilon_{zy}=\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial v}{\partial z}+\dfrac{\partial w}{\partial y}\right)\\ \varepsilon_{zx}=\varepsilon_{xz}=\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial w}{\partial x}+\dfrac{\partial u}{\partial z}\right)\end{cases}$$

＋実験による応力ー歪み関係式（経験）

$$\begin{cases}\varepsilon_{xx}=\dfrac{1}{E}\left(\sigma_{xx}-\nu\left(\sigma_{yy}+\sigma_{zz}\right)\right)\\ \varepsilon_{yy}=\dfrac{1}{E}\left(\sigma_{yy}-\nu\left(\sigma_{zz}+\sigma_{xx}\right)\right)\\ \varepsilon_{zz}=\dfrac{1}{E}\left(\sigma_{yy}-\nu\left(\sigma_{xx}+\sigma_{yy}\right)\right)\\ \varepsilon_{xy}=\dfrac{1}{G}\sigma_{xy}\\ \varepsilon_{yz}=\dfrac{1}{G}\sigma_{yz}\\ \varepsilon_{zx}=\dfrac{1}{G}\sigma_{zx}\end{cases}$$

等方性材料の場合

■ 偏微分方程式で表される場の性質 ■

二階の偏微分方程式

$$A\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}+B\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial t}+C\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}+D\frac{\partial \phi}{\partial x}+E\frac{\partial \phi}{\partial t}+F\phi+G=0$$

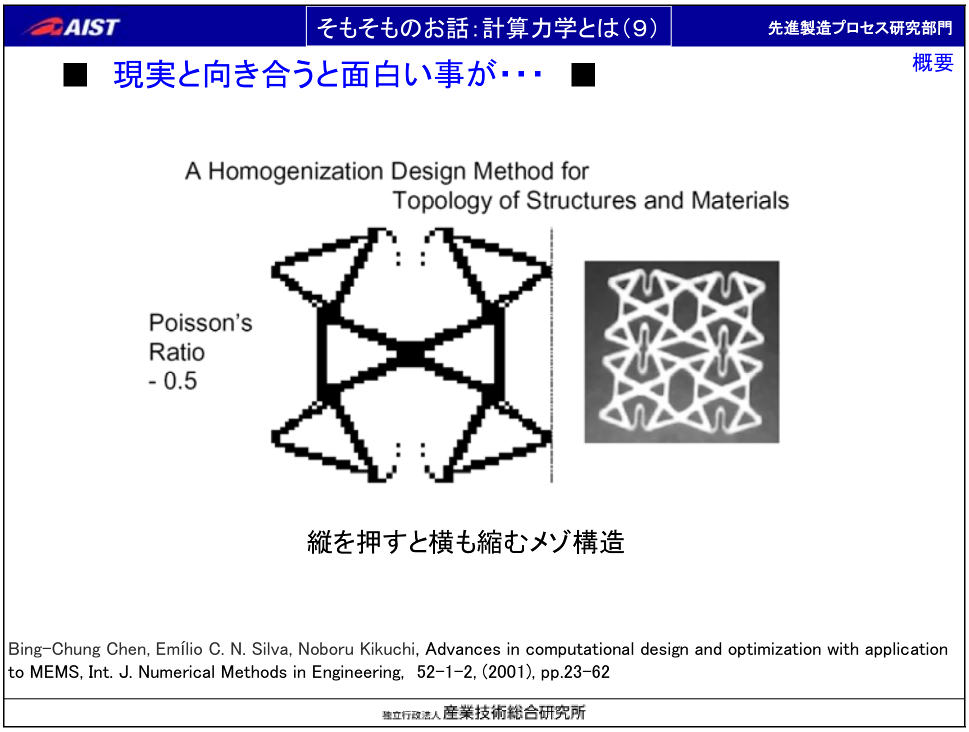
・楕円型（Elliptic） $B^2-4AC<0$
ある点の値は周囲の平均値になる性質．解の空間的広がりに方向性なし．
定常場の基礎方程式． 定常熱伝導，静的弾性

・放物型（Parabolic） $B^2-4AC=0$
解の空間的広がりに方向性なし．時間的変化は領域全体，瞬時に拡散．
非定常熱伝導，非定常拡散．

・双曲型（Hyperbolic） $B^2-4AC>0$
解の空間的広がりに方向性あり．形を保って伝播．時間的変化は局所的．
波動問題，非定常移流問題

流体問題は放物型と双曲型の混合ゆえ，難しい問題．

竹内 則雄，寺田 賢二郎，樫山 和男，計算力学―有限要素法の基礎（日本計算工学会（編集）），森北出版



さて，計算力学の汎用性とは何かをもう少し見てみよう．計算力学は以下の２つの意味での汎用性を持つ[3]．

①偏微分方程式記述による汎用性

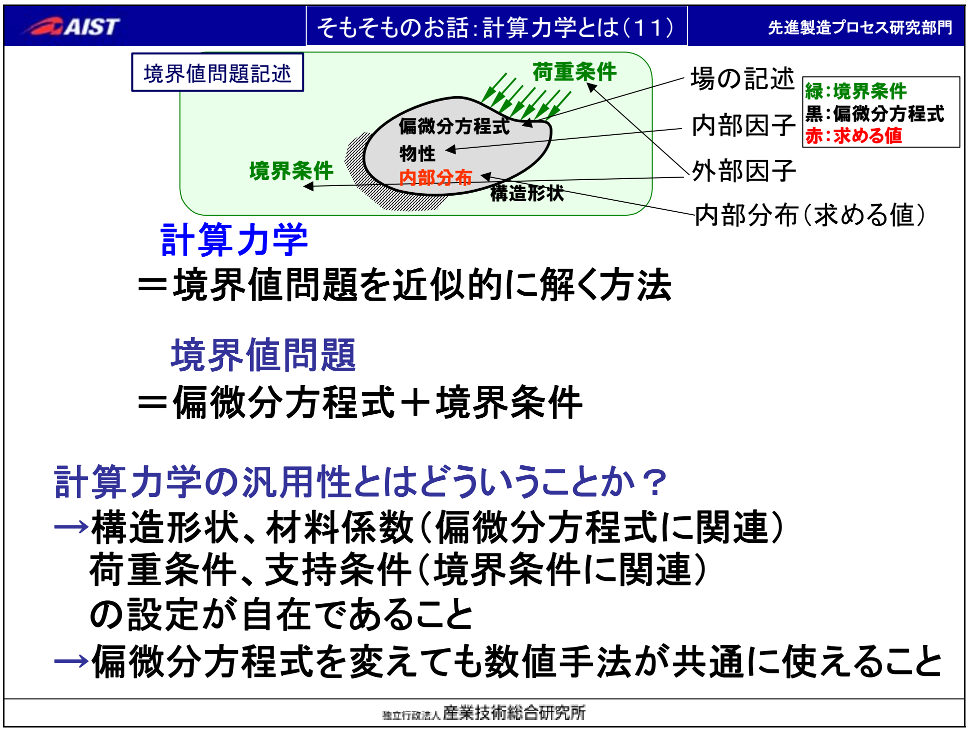
CAE では，現象は基本的に偏微分方程式で表された現象記述方程式と境界・荷重条件及び初期条件からなる境界値問題あるいは初期値問題として記述される．偏微分方程式記述は，任意の

形状，任意の境界・荷重条件，任意の初期条件に有効であるので，その記述を基とする CAE 手法も任意形状・任意境界・荷重条件，任意初期条件に有効である．（当たり前の事だが，現象記述方程式（及びその係数），境界・荷重条件及び初期条件のいずれかが未知の問題にはこの汎用性は担保されない．また，支配方程式が汎用性の肝であり，境界・荷重条件及び初期条件はそれぞれの問題に対する個別条件となる.）

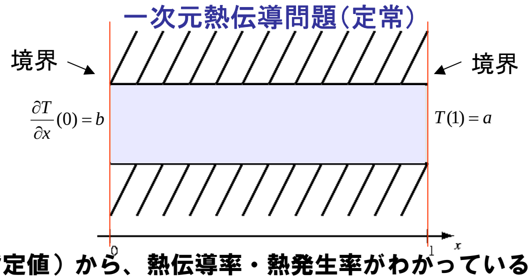
②数値解析手法自体の汎用性

有限要素法，差分法，有限体積法，境界要素法，等，CAE 手法の主たるものは，偏微分方程式が異なっていても，同一の数値解析アルゴリズムが有効である．

図に CAE の汎用性に関する以上の議論の要約を示す．それぞれ，定常現象に関する境界値問題記述，非定常現象に関する初期値問題記述の例を示した．境界値問題記述では諸条件・諸係数が空間の変数，初期問題記述では空間と時間の関数になることに注意されたい．



一次元熱伝導問題(定常)



境界の温度値（指定値）から、熱伝導率・熱発生率がわかっている内部の温度分布を解く

境界値問題記述（定常問題）

・支配方程式（偏微分方程式）

物性係数（熱伝導率）（ｘの関数or定数）

解くべき変数（温度(ｘの関数)）

$$k(x)\frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2}=-f(x)$$

荷重項（熱発生率）（ｘの関数or定数）

・解析領域

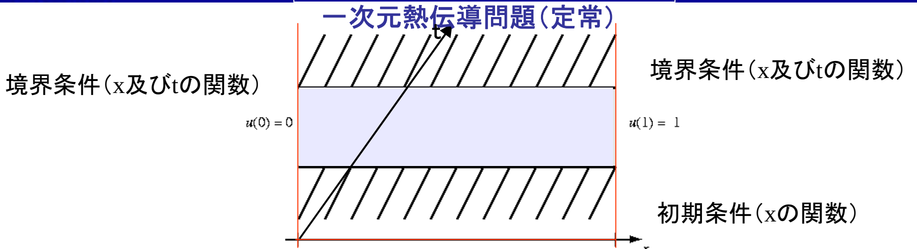
$$x\in[0.,1.]$$

・境界条件

$$\partial T/\partial x(0)=b \quad (\partial T/\partial x=b \quad at \quad x=0)$$

$$T(1)=a \quad (u=a \quad at \quad x=1)$$

一次元熱伝導問題(定常)



初期と境界の温度から熱伝導率・熱発生率が与えられた領域内の非定常温度分布を解く

初期値問題記述（非定常問題）

・支配方程式（偏微分方程式）

物性係数（熱伝導率）

荷重項（熱発生率）

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t}+k(x,t)\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}=-f(x,t)$$

解くべき変数（温度分布）

・解析領域

$$(x,t)\in([0.,1.],[0.,t_{final}])$$

・初期条件

$$T(x,0)=T_0(x)$$

・境界条件

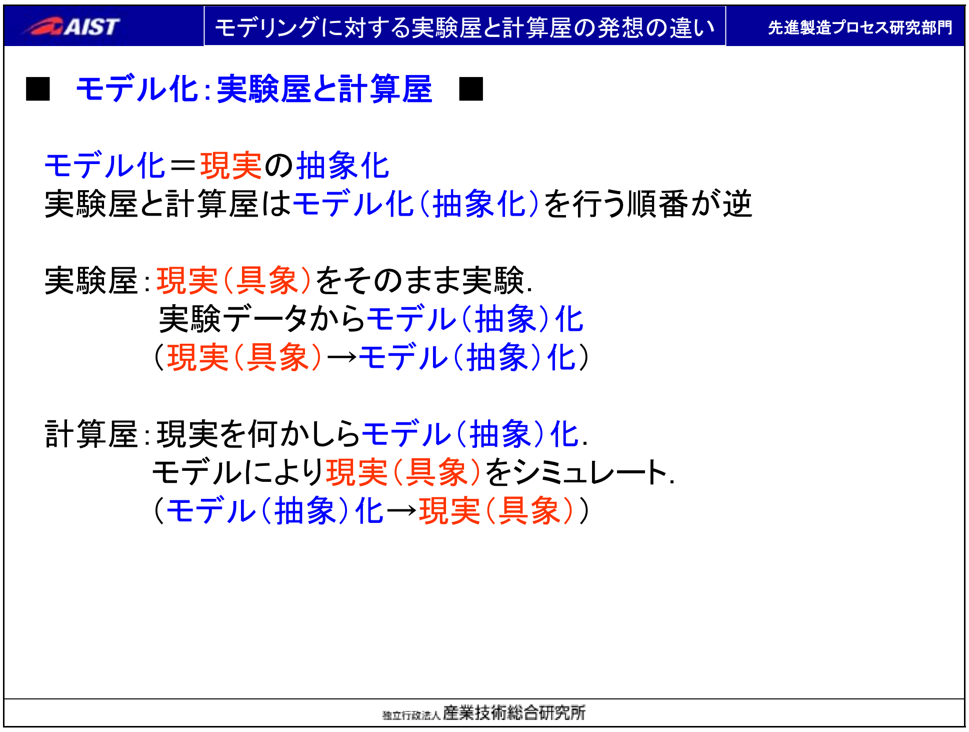
$$\partial T/\partial x(0,t)=b(t),\ T(1,t)=a(t)$$

５．モデリングに対する実験屋と計算屋の発想の違い

モデリングが現実の抽象化である事を先ほど述べた．実験研究者との融合研究で時に話が通じにくい理由を考えた時に，実験屋と計算屋はモデル化（抽象化）を行う順番が逆なのではないかという疑問を持つように至った．

実験屋は現実（具象）をそのまま実験し，実験データをプロットして考察する事により，現象のモデル化（抽象化）を行う．計算屋と実験屋が完全に分業されていなかった昔であれば，そのまま，実験屋のモデル化（抽象化）に基づき，現実をシミュレートするという事であったかも知れないが，現在では，計算屋と実験屋が完全に専門化されているため，計算屋の独立した作業としては，現実を何かしらモデル化（抽象化）した後，そのモデルに基づき，現実（具象）をシミュレートする，という順番になる．

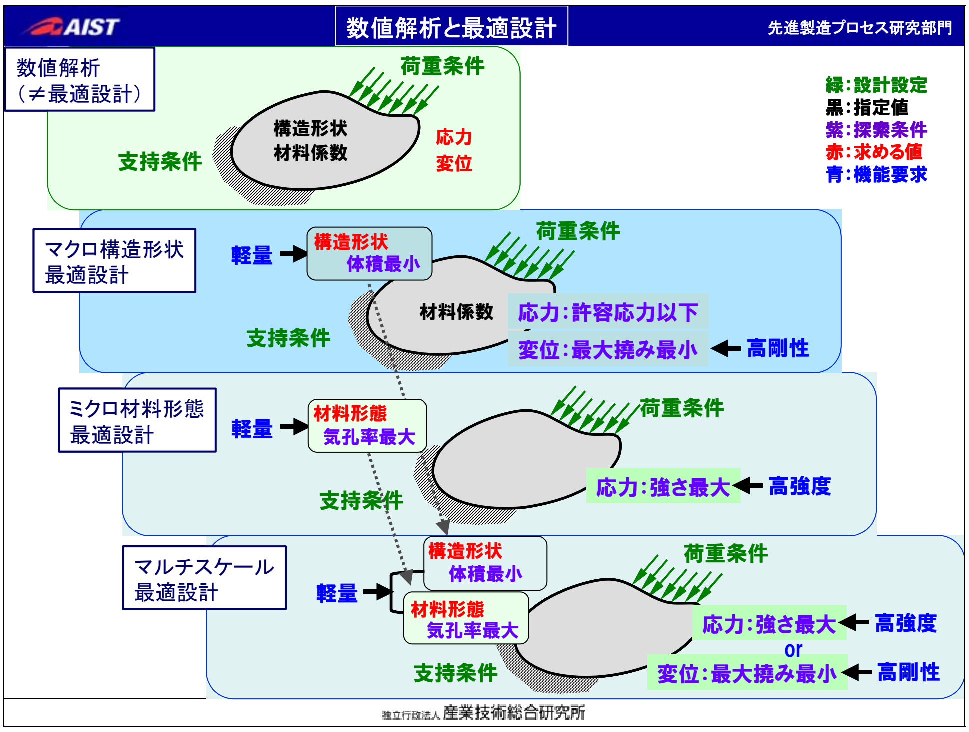
この順序の違いのため，実験屋は往々にして計算屋に対して，「とにかくやってみてから考えよう」と言ってみたり，「いろいろな条件を出して言い訳がましい事を言うのも良いが，出来るのか出来ないのかはっきりしろ」と単純二元論で激怒したりする．計算屋は実験屋に対して，「そんな大雑把な情報や条件ではシミュレーション出来ない」と迫り，実験屋は「何だか面倒臭い奴と話しちゃったなぁ」というやりとりになる．これも，実験屋と計算屋はモデル化（抽象化）を行う順番が逆であるという認識を双方が持つことにより，無駄な軋轢や誤解を減らす事が出来るようになった．もし，計算屋と実験屋がうまく融合して仕事が出来ないようであれば，モデリングの発想の違いを共有しては如何だろうか？



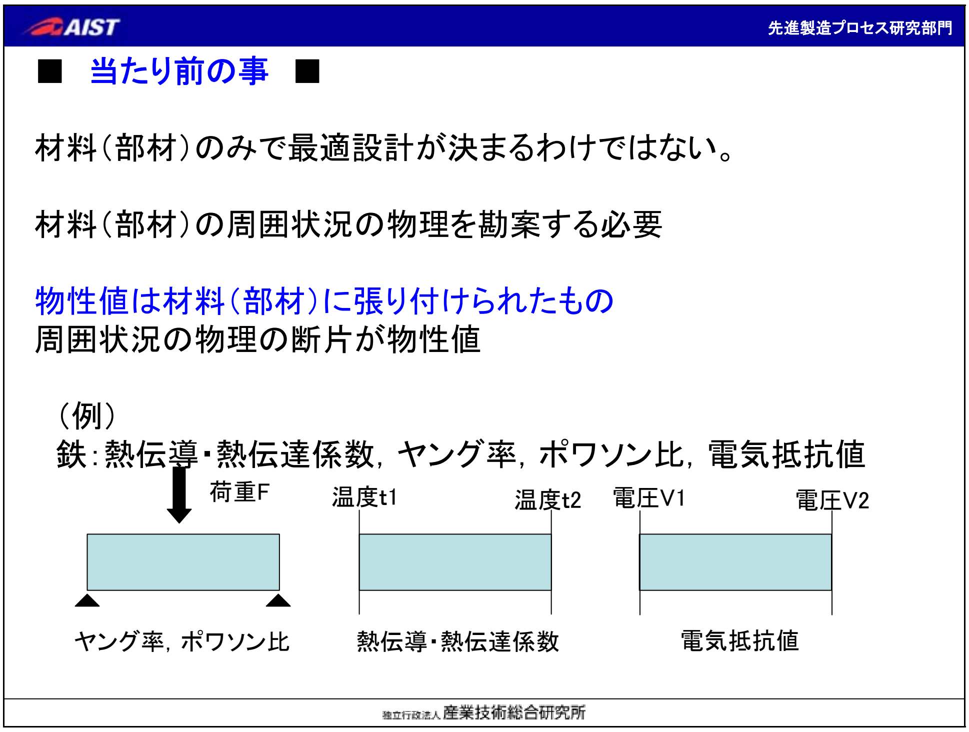
６．数値解析と最適設計に関する実験屋の混乱

数値解析は現象の把握をするためのものだが，現象把握（理解）を踏まえて，ではどのように設計を変更すれば性能が向上するか（現象の制御）というのは数値解析そのものではなく，数値解析をベースにした最適設計問題（逆問題）である．構造設計における，数値解析と最適設計の既知変数，未知変数の違いを図示した．最適設計問題（逆問題）では数値解析で事前に指定されたものが変数となり，数値解析結果の変数が探索条件となる．最適設計問題（逆問題）は数値解析に基づく解の探索を基本にしており，難易度は数値解析と比較して格段に高い．しかし，日常会話では，数値解析も最適設計問題解析もシミュレーションと言ってしまうために，実験屋と計算屋のコミュニケーション不全の原因となる事も多い．固定された条件で現象がどうなるかを計算するのは数値解析，性能を向上させるためにはどのように条件を変えたら良いかを計算するのは最適設計であり，別物である．

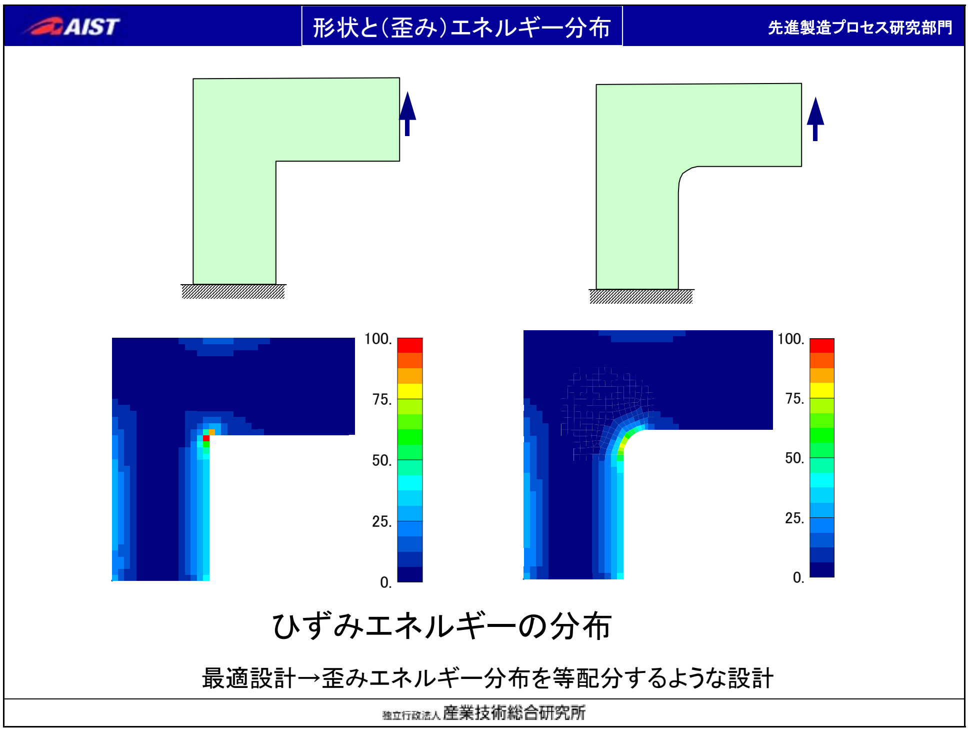
また，日本語は曖昧な言語であり，何の最小化するために，何の変数を制御して， どのような拘束条件の下で最適化するのかを明示しなくても，「最適化を行う」と言っただけでわかったような気になってしまう．上で述べたように，計算屋は始めの段階でモデリングを行う必要があるので，目的語や主語がない「最適化」という単語のみでは仕事が開始出来ない．モデリングの順序の違いと共に，実験屋が認識して欲しい事項の一つである．

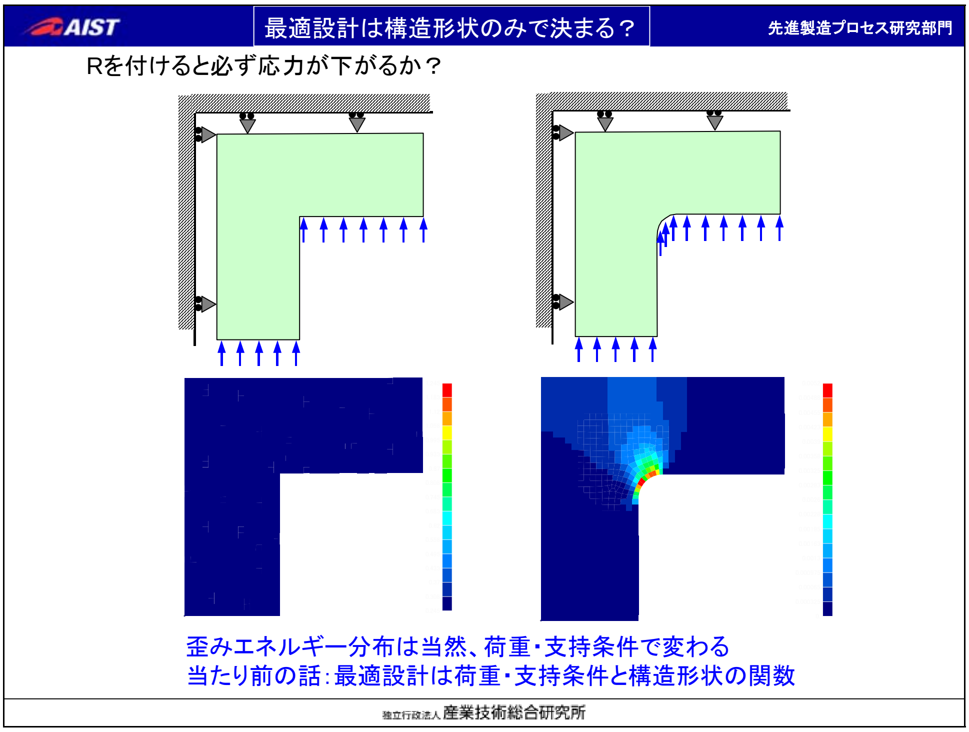


さて，ここで，材料屋（部材屋）が陥りやすい誤解について述べたいと思う．材料屋（部材屋）が最適設計と言っている時によく聞いてみると，部材そのもので最適設計が決まるような事を言う人が多い．部材の最適設計を考えるには部材周囲及び部材内部の現象を考慮する必要があり，逆に言うと，部材周囲の条件が異なれば，最適設計案は異なる．



例えば，通常，角部に R を付けると応力が下がり，歪みエネルギー分布がより当配分される事が知られている．では，R を付ければいつもそうであるかと言うと，境界条件（荷重条件・支持条件）によっては悪化する事もある．材料屋（部材屋）との融合研究で注意すべき点の一つである．

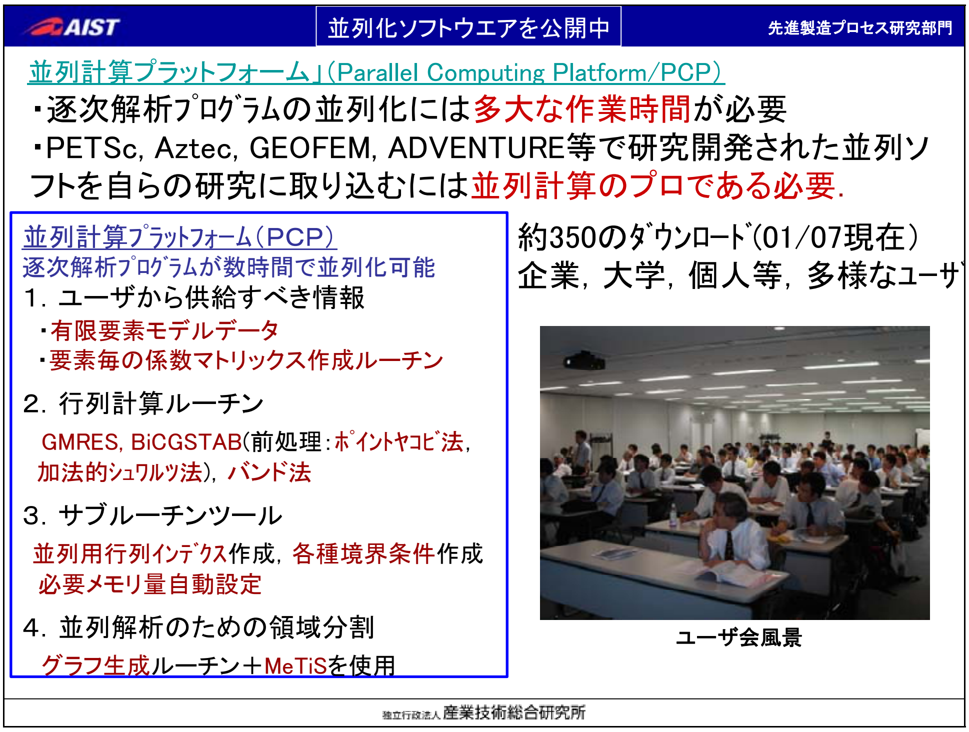




７．並列解析と並列プラットフォーム

並列解析のエッセンスを芝刈りを例に取り，アニメーション付きのパワーポイントで説明する．また，産総研とみずほ情報総研㈱が共同開発した並列処理用共通ソフトウェアプラットフォーム「Parallel Computing Platform/PCP」について紹介する[4]．

産総研とみずほ情報総研㈱は，並列解析を専門としない計算力学研究者・実務者でも既存の非並列離散化数値解析プログラムを容易に並列化出来るような並列処理用共通ソフトウェアプラットフォーム「Parallel Computing Platform/PCP」 を開発し，2002 年 3 月からネット上でソースコード・マニュアルの無償提供を開始している．各種並列マトリックスソルバ及び並列ライブラリ，PETSc[5]，Aztec[6]， GEOFEM[7]，ADVENTURE[8]等との違いは，これらは基本的に並列計算の経験を前提としており，並列書き替え用途に開発されていないのに対して，PCP は付属のデモプログラム・マニュアルを参考に，自作プログラムに，コピー&ペーストで数行のサブルーチンプログラム（subroutine call 文）を書き込むだけで並列化が可能という点にある．GMRES 法（一般化残差最小化法)，Bi-CGSTAB 法（安定化双共勾配法)，バンドマトリックス法の非対称マトリックスソルバの他，拘束条件付加のための Lagrange Multiplier 法のオプション，行列インデックス作成ルーチンも利用可能である．



８．むすび

計算力学（科学）が理論，実験に次ぐ第三の方法と言われて久しい．実験屋と計算屋が共同して研究や開発を進めて行くケースもあるが，一方でシミュレーション嫌いの実験屋，シミュレーションに過度の期待を持ちすぎる実験屋も多い．

実験屋と計算屋の双方を対象として，

・モデリングに対する実験屋と計算屋の発想の違い

・計算力学の汎用性の意味

・数値解析と最適設計に関する実験屋の混乱

・並列解析の可能性及び

・我々が開発した並列書き換えが簡単に出来る並列プラットフォーム

について，具体的な問題設定及び有限要素解析事例も適宜添えて，紹介した．

文献

[1] Akira Tezuka, "Finite Element and Finite Difference Methods (Chap. 19)", Springer Handbook of Materials Measurement Methods, Czichos, Horst; Saito, Tetsuya; Smith, Leslie (Eds.), Springer, ISBN: 3-540-20785-6, 2006, pp.973-1000

[2. 第一原理分子動力学の入門書は種々あるが，内容がコンパクトに要約されているものとして，例えば，手塚　明，土田　英二，「6.2　量子物理学への応用」，アダプティブ有限要素法，丸善，2003

[3] 価値創造型ものづくり力強化に資する協調型フロントローディング設計支援技術開発に関する調査研究，機械システム振興協会(2004)

[4] http://www.aist.go.jp/infobase/pcp/index-en.html

[5] http://www-fp.mcs.anl.gov/petsc/index.html

[6] http://www.cs.sandia.gov/CRF/aztec1.html

[7] http://geofem.tokyo.rist.or.jp/index_jp.html

[8] http://adventure.q.t.u-tokyo.ac.jp/jp/