ISSN 1348-5245

計算数理工学論文集

第21巻
2021年12月

Transactions of the Japan Society for Computational Methods in Engineering

Volume 21, December 2021

JASCOME

日本計算数理工学会
2021年12月18日発行

計算数理工学論文集 第 21 巻
編集委員会（2021 年 12 月）

委員長	松　本　敏　郎	（名古屋大学大学院 工学研究科）
委　員	阿　部　和　久	（新潟大学 工学部）
〃	天　谷　賢　治	（東京工業大学 工学院 システム制御系）
〃	荒　井　政　大	（名古屋大学大学院 工学研究科）
〃	五十嵐　　一	（北海道大学大学院 情報科学研究科）
〃	飯　盛　浩　司	（慶應義塾大学 理工学部）
〃	磯　　祐　介	（京都大学大学院 情報学研究科）
〃	井　上　裕　嗣	（東京工業大学 工学院 機械系）
〃	植　田　　毅	（東京慈恵会医科大学 医学部）
〃	遠　藤　龍　司	（職業能力開発総合大学校）
〃	奥　村　　大	（名古屋大学大学院 工学研究科）
〃	神　谷　恵　輔	（愛知工業大学 工学部）
〃	岸　本　喜久雄	（東京工業大学）
〃	北　　栄　輔	（名古屋大学大学院 情報学研究科）
〃	紅　露　一　寛	（新潟大学大学院 自然科学研究科）
〃	斉　藤　隆　泰	（群馬大学大学院 理工学府）
〃	杉　野　隆三郎	（阿南工業高等専門学校）
〃	瀬　田　　剛	（富山大学 学術研究部工学系）
〃	高　橋　　徹	（名古屋大学大学院 工学研究科）
〃	登　坂　宣　好	（Material speaks iT-lab.）
〃	新　納　和　樹	（京都大学大学院 情報学研究科）
〃	西　村　直　志	（京都大学）
〃	長谷川　弘　治	（室蘭工業大学大学院 工学研究科）
〃	廣　瀬　壮　一	（東京工業大学 環境・社会理工学院）
〃	藤　原　宏　志	（京都大学大学院 情報学研究科）
〃	堀　　宗　朗	（海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門）
〃	丸　山　泰　蔵	（愛媛大学 理工学研究科）
〃	山　本　昌　宏	（東京大学大学院 数理科学研究科）
〃	吉　川　　仁	（京都大学大学院 情報学研究科）
〃	吉　田　秀　典	（香川大学 工学部）
〃	吉　野　正　人	（信州大学 学術研究院 工学系）

本論文集は、計算数理工学シンポジウム 2021（JASCOME Symposium 2021）で論文講演を行うために投稿された論文原稿（4〜12 ページ）を、論文集編集委員会委員を中心とする複数の校閲者により査読して掲載可と判定されたものを収録したものである。

日本計算数理工学会

〒464-8603 名古屋市千種区不老町
名古屋大学大学院工学研究科 機械システム工学専攻 計算力学研究グループ 内
日本計算数理工学会・事務局
TEL: 052-789-2780
FAX: 052-789-3123
（学会ホームページ）http://www.matsumoto.nuem.nagoya-u.ac.jp/jascome/

計算数理工学論文集 第 21 巻

目　　次

論文番号	論文題目	著者	頁
01-211218	Development of elastodynamic finite integration technique for two-dimensional micropolar elastodynamics	Takahiro SAITOH, Yusuke SUZUKI, Taizo MARUYAMA, Akira FURUKAWA, Sohichi HIROSE, Davinder KUMAR, Dilbag SINGH, S.K. TOMAR	1
02-211218	2 次元純面外異方性・粘弾性波動問題における演算子積分時間領域境界要素法	竹田 晴彦，斎藤 隆泰, 古川 陽，廣瀬 壮一	9
03-211218	密度型トポロジー最適化における密度更新パラメータに関する考察	岸田 真幸，倉橋 貴彦	17
04-211218	機械学習や画像処理技術を援用した衛星画像からの被災箇所抽出に関する研究	妹尾 大輝，久保 栞，磯打 千雅子, 吉田 秀典	27
05-211218	部分観測による X 線計算機断層撮影法の数値的実現	藤原 宏志, 大石 直也, Kamran SADIQ, Alexandru TAMASAN	37
08-211218	軌道通り変位補正が座屈確率に及ぼす影響	阿部 和久，新井 優介，紅露 一寛	45
09-211218	ヘリンボン及びトリプルジャンクションパターンの発達に対する影響因子解析	田中 大地，菊池 正太郎，松原 成志朗，永島 壮，奥村 大	51

10-211218　Web-based visualization framework on FreeFEM
……Yu-Hsun LEE, 藤原 宏志　57
11-211218　経頭蓋点状散乱体配列レンズの頭蓋内音場最適化
……植田 毅　63

13-211218　二次元電磁波動散乱問題の複素固有値を対象とする Nyström 境界積分方程式法を用いたパラメトリック形状最適化
……三澤 亮太，髙橋 勇二朗，馬 哲旺，大平 昌敬　71

14-211218　演算子積分時間領域境界要素法を用いた様々な異方性弾性体中の空洞による 3 次元弾性波動散乱解析
……斎藤 隆泰，古川 陽，廣瀬 壮一　81

15-211218　等方弾性体・粘弾性体中の空洞に対する線形化 Born 逆散乱解析の適用性の検討
……竹田 晴彦, 斎藤 隆泰, 廣瀬 壮一　89

16-211218　エポキシ樹脂モデルの架橋構造と変形挙動に関する分子動力学的研究
……西村 正臣，中田 政宗　99

17-211218　トーラスと同相な完全導体による電磁波動散乱問題に対する選点法を用いた isogeometric 境界要素法における Calderón の前処理について
……田原 寛太, 新納 和樹　111

18-211218　熱伝導問題を対象とした拡張レベルセット法に基づく複数材料トポロジー最適化
……野田 雅貴，野口 悠暉，山田 崇恭　117

19-211218　遠方近似を用いた 3 次元時間域境界要素法による仮想空間における移動点のリアルタイム可聴化
……吉川 仁，西上 駿祐　125

20-211218　サンプル点における曲面の勾配を考慮した B スプライン近似に基づくレベルセットトポロジー最適化
……飯盛 浩司　131

21-211218 A robust topology optimisation in 2D acoustics for impedance materials using the boundary element method
····· Jincheng QIN, Hiroshi ISAKARI, Toru TAKAHASHI, Toshiro MATSUMOTO 137

Development of elastodynamic finite integration technique for two-dimensional micropolar elastodynamics

Takahiro SAITOH[1)], Yusuke SUZUKI[2)], Taizo MARUYAMA[3)], Akira FURUKAWA[4)], Sohichi HIROSE[5)], Davinder KUMAR[6)], Dilbag SINGH[7)] and S. K. TOMAR[8)]

1)Gunma University (1-5-1, Kiryu, Tenjin, Gunma, 376-8515, Japan, E-mail:t-saitoh@gunma-u.ac.jp)
2)Gunma University (1-5-1, Kiryu, Tenjin, Gunma, 376-8515, Japan, E-mail:t160c050@gunma-u.ac.jp)
3)Ehime University (3, Bunkyo, Matsuyama, Ehime, 790-8577, Japan, E-mail:maruyama@cee.ehime-u.ac.jp)
4)Hokkaido University (Kita 13, Nishsi 8, Kita-ku, Sapporo, Hokkaido, 060-8628, Japan, E-mail:afurukawa@eng.hokudai.ac.jp)
5)Tokyo Institute of Technology (2-12-1, O-okayama, Meguro, Tokyo, 152-8552, Japan, E-mail:shirose@cv.titech.ac.jp)
6)Panjab University (Chandigarh - 160 014, India, E-mail:davinderkgoriwal@gmail.com)
7)Panjab University (Chandigarh - 160 014, India, E-mail:kahlondilbag80@gmail.com)
8)Panjab University (Chandigarh - 160 014, India, E-mail:sktomar@pu.ac.in)

This study presents a micropolar elastodynamic finite integration technique (M-EFIT) formulation for two-dimensional (2-D) micropolar elastodynamics. In general, the classical theory of elasticity deals with homogeneous elastic solids and does not take microscopic inhomogeneity into account. Therefore, numerical methods based on the classical theory of elasticity cannot be used to accurately simulate wave propagation behaviors in micropolar materials, owing to their microscopic inhomogeneity. In this research, we focus on the micropolar elastodynamic theory. According to the micropolar theory, three kinds of waves with different wave velocities exist in micropolar elastic solids, of which two have dispersibility in a 2-D formulation. In this study, an EFIT is proposed for 2-D micropolar elastodynamics. Numerical examples of wave propagation, reflection, and transmission in 2-D micropolar elastodynamics are demonstrated to validate the proposed M-EFIT formulation.

Key Words: Elastodynamic Finite Integration Technique (EFIT), Micropolar elastodynamics, Wave propagation, Reflection and Transmission

1. Introduction

This study presents a micropolar elastodynamic finite integration technique (M-EFIT) formulation for two-dimensional (2-D) micropolar elastodynamics. Understanding elastic wave propagation is important in the fields of ultrasonic nondestructive testing (UT) and seismic engineering. Therefore, many types of numerical techniques[(1)(2)] for wave analysis have been developed and used in several engineering fields. In general, the classical theory of elasticity deals with homogeneous elastic solids and does not take microscopic inhomogeneity into account[(3)]. However, it has been established that an unexplained wave propagation phenomenon occurs under the assumption of such a linear elastic theory. For example, the famous one of such problems has been advocated by Biot[(4)]. In general, only one kind of P-wave exists in homogeneous isotropic solids. Nevertheless, Biot proved the existence of two types of P-waves in fluid-saturated porous solids. In addition, Eringen[(5)] integrated the effect of microscopic inhomogeneity into the linear elasticity theory, extending the linear elasticity theory[(6)]. This extended linear elastodynamic theory, which considers the effect of microscopie inhomogenity, is called the micropolar elastodynamic theory. Concretes, bedrocks, and human bones are examples of typical micropolar materials. According to the micropolar elastodynamic theory, three kinds of waves (P-, S-, and M-waves) with different wave velocities exist in micropolar elastic solids, of which two (S- and M-waves) have dispersibility in 2-D in-plane problems. However, many simulations for elastic wave propagation in such micropolar materials use the conventional linear elastodynamic theory rather than the micropolar elastodynamic theory because the micropolar elastodynamic theory and its application to numerical methods are very complex. Therefore, it is significant to develop a wave propagation simulation tool based on the micropolar elastodynamic the-

Received Sep. 2, 2021, accepted Nov. 6. 2021

ory.

The finite difference time-domain method (FDTD)[7][8] is probably the easiest way to develop such a simulation tool. However, the drawback of the FDTD method is obscure boundary conditions. To improve the drawback of the FDTD method, an EFIT[9] was developed. Schubert[10] solved linear and nonlinear elastodynamic problems using the EFIT. Nakahata et al.[11] analyzed wave propagation in austenitic steel with anisotropy using EFIT. Their simulations are valuable, but all the formulations are based on the classical elastodynamic theory, and no numerical examples obtained by EFIT for wave problems considering the micropolar elastodynamic theory are known to our knowledge.

Therefore, in this research, a micropolar EFIT (which is called M-EFIT) is developed for wave propagation in micropolar elastodynamics. In the following sections, a brief description of the micropolar elastodynamic theory and the EFIT formulation are described. Time and space discretization and how to handle boundary conditions are discussed. Following the demonstration of some numerical examples obtained using 2-D M-EFIT, our future research plan is presented.

2. Micropolar elastodynamic theory

A brief description of the micropolar elastodynamic theory is presented in this section. Unless otherwise stated, subscripts are used throughout this paper, such as $(\ )_i$, where i equals 1 or 3. In addition, summation over repeated subscripts is implied throughout this paper. The equations of motion, the strain-displacement relations, and the constitutive relations for 2-D linear isotropic micropolar elastic solids can be written, respectively, as follows:

$$\sigma_{ji,j} + \rho b_i = \rho \ddot{u}_i \tag{1}$$

$$\epsilon_{ij} = u_{j,i} - e_{2ij}\phi_2 \tag{2}$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \epsilon_{kk}\delta_{ij} + (\mu + \kappa)\epsilon_{ij} + \mu \epsilon_{ji} \tag{3}$$

where u_i and ϕ_i represent displacement and microrotation, respectively. In addition, b_i is the body force, ϵ_{ij} is the strain, σ_{ij} is the stress, δ_{ij} is the Kronecker delta, e_{ijk} is the alternating tensor, and ρ is the density. $\dot{(\ )}$ and $(\ )_{,i}$ indicate the partial derivative with respect to time t and space x_i, respectively. In the micropolar elastodynamic theory, the microrotation ϕ_i, the couple stress m_{ij}, and the microrotation strain ψ_{ij} must be considered. Their basic equations can be written as follows:

$$m_{i2,i} + e_{2ij}\sigma_{ij} + l_2 = \rho J \ddot{\phi}_2 \tag{4}$$

$$\psi_{i2} = \phi_{2,i} \tag{5}$$

$$m_{i2} = \gamma \psi_{i2} \tag{6}$$

where l_i represents the body couple and J represents the microinertia. Note that unlike in the case of the classical elastodynamic theory, the stress σ_{ij} and strain ϵ_{ij} are not symmetric. In Eqs.(3) and (6), λ, μ, κ, and γ represent micropolar elastic constants and

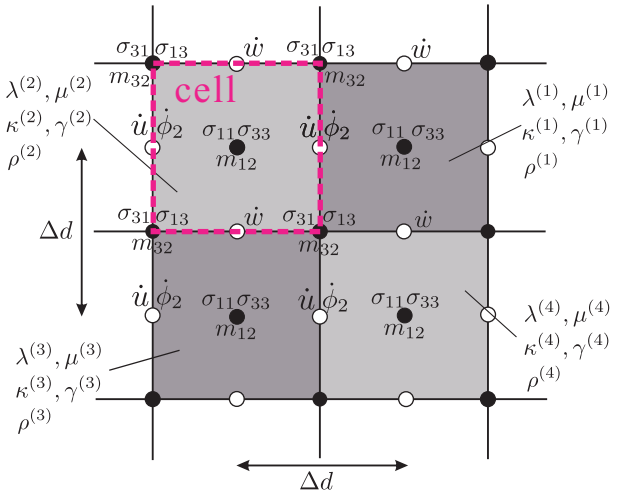


Fig. 1 Definition of a finite volume V with boundary S.

they can be rewritten by the corresponding physically easier interpretation constants[12] as follows:

$$G = \frac{2\mu + \kappa}{2} \tag{7}$$

$$\nu = \frac{\lambda}{2\lambda + 2\mu + \kappa} \tag{8}$$

$$L = \sqrt{\frac{\gamma(\mu + \kappa)}{\kappa(2\mu + \kappa)}} \tag{9}$$

$$N = \sqrt{\frac{\kappa}{2(\mu + \kappa)}} \tag{10}$$

In Eqs.(7) and (8), G and ν represent the shear modulus and Poisson ratio, respectively. The parameter L in Eq.(9) denotes the microstructure length of a material. In addition, the non-dimensionless parameter N in Eq.(10) shows the strength of a micropolar property. The parameter β is introduced using the Poisson ratio in Eq.(8) as follow:

$$\beta = \frac{1 - 2\nu}{2(1 - \nu)} \tag{11}$$

This parameter β is related to $c_L = c_T/\beta$, where c_L represents the P-wave velocity, which does not depend on frequency. In addition, c_T is given by $c_T = \sqrt{G/\rho}$. Eqs.(1) - (6) are discretized for time and space according to the EFIT scheme. More details of the micropolar elastodynamics can be seen in the reference [13].

3. M-EFIT formulation

3.1. Integrations over the cell

In this M-EFIT formulation, Eqs.(1) - (6) are not directly discretized. In the EFIT, an analysis domain is represented with the grid and then, the grid is divided into cells, as shown in Fig. 1. Assuming that the body force b_i and the body couple l_i are equal to

zero and considering Gauss's divergence theorem, equations of motion (1) for the stress and (4) for the couple stress are first integrated with the surface S of a cell for a finite volume V, as follows:

$$\int_V \rho \ddot{u}_i dV = \int_S \sigma_{ji} n_j dS \tag{12}$$

$$\int_V \rho J \ddot{\phi}_2 dV = \int_S m_{i2} n_i dS + \int_V e_{2ij} \sigma_{ij} dV \tag{13}$$

where n_i shows the unit outward normal vector for the boundary S. For the constitutive relations (3) and (6), the same integration approach and time derivative are considered, respectively, as follows:

$$\int_V \dot{\sigma}_{ij} dV = \int_S [\lambda \dot{u}_k n_k \delta_{ij} + (\mu + \kappa) \dot{u}_j n_i + \mu \dot{u}_i n_j] dS$$
$$- \int_V [(\mu + \kappa) e_{2ij} \dot{\phi}_2 + \mu e_{2ji} \dot{\phi}_2] dV \tag{14}$$

$$\int_V \dot{m}_{i2} dV = \gamma \int_S \dot{\phi}_2 n_i dS \tag{15}$$

Substituting the subscripts of Eqs.(12) and (13) into 1 or 3 according to the summation convention, the following three equations are obtained as :

$$\int_V \rho \ddot{u} dV = \int_S (\sigma_{11} n_1 + \sigma_{31} n_3) dS \tag{16}$$

$$\int_V \rho \ddot{w} dV = \int_S (\sigma_{13} n_1 + \sigma_{33} n_3) dS \tag{17}$$

$$\int_V \rho J \ddot{\phi}_2 dV = \int_S (m_{12} n_1 + m_{32} n_3) dS + \int_V (\sigma_{31} - \sigma_{13}) dV \tag{18}$$

where explicit engineering expressions are used, as shown by $u_1 = u$ and $u_3 = w^{(8)(11)}$, for simplicity. In addition, the constitutive relations (14) and (15) can be rewritten in the same manner, as follows:

$$\int_V \dot{\sigma}_{11} dV = \int_S [(2\mu + \kappa + \lambda) \dot{u} n_1 + \lambda \dot{w} n_3] dS \tag{19}$$

$$\int_V \dot{\sigma}_{33} dV = \int_S [\lambda \dot{u} n_1 + (2\mu + \kappa + \lambda) \dot{w} n_3] dS \tag{20}$$

$$\int_V \dot{\sigma}_{31} dV = \int_S [(\mu + \kappa) \dot{u} n_3 + \mu \dot{w} n_1] dS - \int_v \kappa \dot{\phi}_2 dV \tag{21}$$

$$\int_V \dot{\sigma}_{13} dV = \int_S [(\mu + \kappa) \dot{w} n_1 + \mu \dot{u} n_3] dS + \int_v \kappa \dot{\phi}_2 dV \tag{22}$$

$$\int_V \dot{m}_{12} dV = \gamma \int_S \dot{\phi}_2 n_1 dS \tag{23}$$

$$\int_V \dot{m}_{32} dV = \gamma \int_S \dot{\phi}_2 n_3 dS \tag{24}$$

For Eqs.(16) - (24), spatial and time discretization are considered.

3.2. Spatial discretization for M-EFIT

In this M-EFIT formulation, Eqs. (16) - (24) must be discretized for space and time. As previously mentioned, the EFIT requires integration over the square cell V with the surface S, as defined in Fig. 1. For each cell, the normal stresses σ_{11} and σ_{33} and the couple stress m_{12} are represented by the values at the center of the cell, as shown in Fig. 1. At that time, the particle velocities $\dot{u}$ and $\dot{w}$, and the microrotational velocities $\dot{\phi}_2$ are arranged at the midpoints of the edges, as shown in Fig. 1. On the other hand, the shear stresses

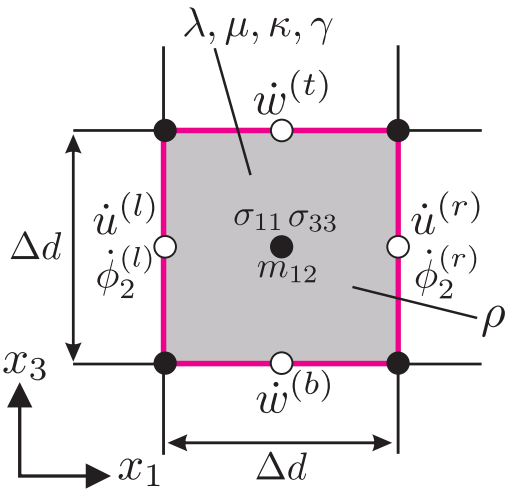


Fig. 2 Spatial discretization of σ_{11}, σ_{33} and m_{12} for M-EFIT.

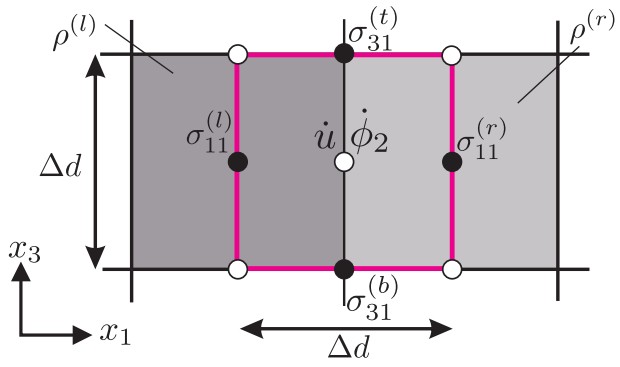


Fig. 3 Spatial discretization of $\dot{u}$ and $\dot{\phi}_2$ for M-EFIT.

σ_{31} and σ_{13} and the couple stress m_{32} are arranged at the corner of the cell. Therefore, considering a cell enclosed by the red solid square of the integral volume V as shown in Fig. 2, Eqs.(19), (20) and (23) can be discretized for space, respectively, as follow:

$$\dot{\sigma}_{11} \simeq \frac{1}{\Delta d} \left[(2\mu + \kappa + \lambda) \left(\dot{u}^{(r)} - \dot{u}^{(l)} \right) + \lambda \left(\dot{w}^{(t)} - \dot{w}^{(b)} \right) \right] \tag{25}$$

$$\dot{\sigma}_{33} \simeq \frac{1}{\Delta d} \left[\lambda \left(\dot{u}^{(r)} - \dot{u}^{(l)} \right) + (2\mu + \kappa + \lambda) \left(\dot{w}^{(t)} - \dot{w}^{(b)} \right) \right] \tag{26}$$

$$\dot{m}_{12} \simeq \frac{\gamma}{\Delta d} \left[\dot{\phi}_2^{(r)} - \dot{\phi}_2^{(l)} \right] \tag{27}$$

where Δd is the length of the integral volume V and the superscripts (r), (l), (t), and (b) express the position of the physical quantity seen from the center of the cell. Similarly, Eqs.(16) and (18) are discretized for space using the integral volume enclosed by the red square in Fig. 3, as follows:

$$\ddot{u} \simeq \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{1}{\Delta d} \left(\sigma_{11}^{(r)} - \sigma_{11}^{(l)} + \sigma_{31}^{(t)} - \sigma_{31}^{(b)} \right) \tag{28}$$

$$\ddot{\phi}_2 \simeq \frac{1}{\bar{\rho} J} \frac{1}{\Delta d} \left(m_{12}^{(r)} - m_{12}^{(l)} + m_{32}^{(t)} - m_{32}^{(b)} \right)$$
$$+ \frac{1}{2} \left(\sigma_{31}^{(t)} + \sigma_{31}^{(b)} \right) - \frac{1}{2} \left(\sigma_{13}^{(t)} + \sigma_{13}^{(b)} \right) \tag{29}$$

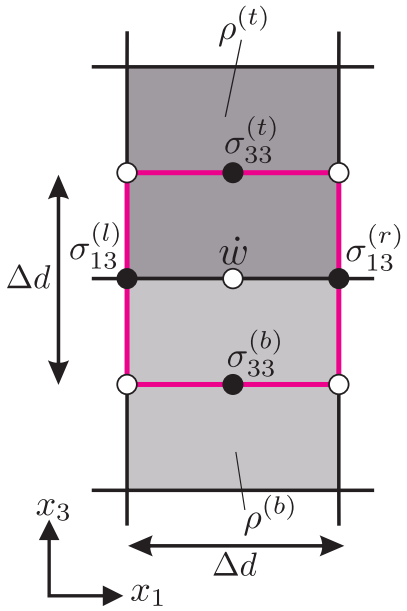


Fig.4 Spatial discretization of w for M-EFIT.

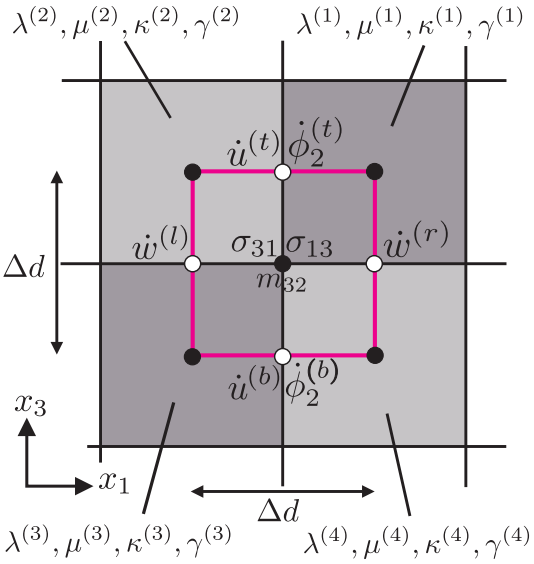


Fig.5 Spatial discretization of σ_{31}, σ_{13} and m_{32} for M-EFIT.

In Eqs.(28) and (29), $\bar{\rho}$ is the average density of right and left cells, as shown in Fig. 3, which is given by

$$\bar{\rho} = \frac{1}{2}(\rho^{(r)} + \rho^{(l)}) \tag{30}$$

where $\rho^{(r)}$ and $\rho^{(l)}$ are the densities of the right and left cells, respectively. Moreover, the spatial discretization for Eq.(17) is calculated by considering the node allocation of Fig. 4 as follows:

$$\ddot{w} \simeq \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{1}{\Delta d} \left(\sigma_{13}^{(r)} - \sigma_{13}^{(l)} + \sigma_{33}^{(t)} - \sigma_{33}^{(b)} \right). \tag{31}$$

Finally, Eqs.(21), (22) and (24) are discretized according to the red square cell in Fig.5, respectively, as follows:

$$\dot{\sigma}_{31} \simeq \frac{1}{\Delta d} \left[(\mu + \kappa) \left(\dot{u}^{(t)} - \dot{u}^{(b)} \right) + \mu \left(\dot{w}^{(r)} - \dot{w}^{(l)} \right) \right] - \frac{\kappa}{2} \left(\dot{\phi}_2^{(t)} + \dot{\phi}_2^{(b)} \right) \tag{32}$$

$$\dot{\sigma}_{13} \simeq \frac{1}{\Delta d} \left[(\mu + \kappa) \left(\dot{w}^{(r)} - \dot{w}^{(l)} \right) + \mu \left(\dot{u}^{(t)} - \dot{u}^{(b)} \right) \right] + \frac{\kappa}{2} \left(\dot{\phi}_2^{(t)} + \dot{\phi}_2^{(b)} \right) \tag{33}$$

$$\dot{m}_{32} \simeq \frac{\gamma}{\Delta d} \left[\dot{\phi}_2^{(t)} - \dot{\phi}_2^{(b)} \right] \tag{34}$$

The left-hand sides of Eqs. (25) - (34) include the time derivative. This time derivative is computed using the standard time integration, as described in the following section.

3.3. Time discretization for M-EFIT

In the time-domain, the stress component $\boldsymbol{\sigma}$ and couple stress component $\boldsymbol{m}$ are allocated at half-time steps, whereas the particle velocities $\dot{\boldsymbol{u}}$ and $\dot{\boldsymbol{w}}$ and the microrotational velocity $\dot{\boldsymbol{\phi}}$ are allocated at full-time steps. Therefore, the following time discretization yields an explicit leap-frog scheme:

$$\{\boldsymbol{\sigma}\}^{n+\frac{1}{2}} \simeq \{\boldsymbol{\sigma}\}^{n-\frac{1}{2}} + \Delta t \{\dot{\boldsymbol{\sigma}}\}^{n} \tag{35}$$

$$\{\boldsymbol{m}\}^{n+\frac{1}{2}} \simeq \{\boldsymbol{m}\}^{n-\frac{1}{2}} + \Delta t \{\dot{\boldsymbol{m}}\}^{n} \tag{36}$$

$$\{\dot{\boldsymbol{u}}\}^{n+1} \simeq \{\dot{\boldsymbol{u}}\}^{n} + \Delta t \{\ddot{\boldsymbol{u}}\}^{n+\frac{1}{2}} \tag{37}$$

$$\{\dot{\boldsymbol{w}}\}^{n+1} \simeq \{\dot{\boldsymbol{w}}\}^{n} + \Delta t \{\ddot{\boldsymbol{w}}\}^{n+\frac{1}{2}} \tag{38}$$

$$\{\dot{\boldsymbol{\phi}}\}^{n+1} \simeq \{\dot{\boldsymbol{\phi}}\}^{n} + \Delta t \{\ddot{\boldsymbol{\phi}}\}^{n+\frac{1}{2}} \tag{39}$$

where Δt represents the time interval and the superscript n denotes multiple integers of a time step of Δt. Nine physical quantities, σ_{11}, σ_{33}, σ_{13}, σ_{31}, $\dot{u}$, $\dot{w}$, $\dot{m}_{12}$, $\dot{m}_{32}$, and $\dot{\phi}_2$ at each node can be obtained by solving Eqs. (35) - (39) with initial and boundary conditions. In general, the treatment of boundary surfaces in the EFIT is unique[9] compared to that in FDTD[8]. The treatment of boundary surfaces in the EFIT is discussed in the next section.

3.4. Treatment of boundary surface

The EFIT is a grid-based numerical method based on the finite differential equation and can easily and explicitly treat the boundary conditions on the interface between different materials. A brief description of how to deal with the free reflection boundaries in the EFIT is discussed in this section. The traction $\boldsymbol{t}$ and the couple $\boldsymbol{m}$ must be zero in the free reflection boundaries, as shown in Fig. 6. Therefore, the following equations are satisfied:

$$t_i = n_j \sigma_{ji} = 0, \quad m_2 = n_i m_{i2} = 0 \tag{40}$$

The traction $\boldsymbol{t}$ and couple $\boldsymbol{m}$ of Eq. (40) can be rewritten on the free reflection boundary in Fig. 6 as follows:

$$t_1 = n_1 \sigma_{11} + n_3 \sigma_{31} = 0 \tag{41}$$

$$t_3 = n_1 \sigma_{13} + n_3 \sigma_{33} = 0 \tag{42}$$

$$m_2 = n_1 m_{12} + n_3 m_{32} = 0 \tag{43}$$

Therefore, as shown in Fig. 6, the shear stress σ_{31} allocated to the free reflection boundary between air and a solid must be zero. For this case, the shear stress σ_{13} and the couple stress m_{32} are also located on the same node for the shear stress σ_{31}, as shown in Fig. 1. In such a situation, however, the normal stresses, σ_{11} and σ_{33}, and the couple stress m_{12} cannot be allocated to the nodes of the free reflection boundaries as well as σ_{31}, σ_{13}, and m_{32}. Therefore, it is necessary to implement a particular handling method for meeting the free reflection boundary conditions for the normal stresses, $\sigma_{11} = 0$ and $\sigma_{33} = 0$, and the couple stress, $m_{12} = 0$.

In Fig. 6, the outward unit normal vector components n_1 and n_3 are given by $n_1 = -1$ and $n_3 = 0$, respectively. Now, the stresses σ_{11} and σ_{13} and the couple stress m_{12} must be zero in order to satisfy Eqs. (41)-(43). Here, a virtual node is considered to satisfy the normal stress $\sigma_{11} = 0$ on the free reflection boundary in Fig. 6. Considering the normal stress $\sigma_{11}^{(l)}$ on the virtual node whose color is red, as shown in Fig. 6, the following equation on the free reflection boundary is derived:

$$\frac{1}{2}(\sigma_{11}^{(r)} + \sigma_{11}^{(l)}) = 0 \tag{44}$$

To satisfy Eq. (44) on the free reflection boundary in Fig. 6, Eq. (44) is substituted into Eq. (28) to yield the following equation:

$$\ddot{u} \simeq \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{1}{\Delta d} \left(2\sigma_{11}^{(r)} \right) \tag{45}$$

The same approach used for the normal stress σ_{11} is considered for the normal stress σ_{33} and the couple m_{12}, which are located on the same node. Therefore, the normal stress σ_{33} and the couple m_{12} satisfy the equations, respectively, as follows:

$$\frac{1}{2}(\sigma_{33}^{(r)} + \sigma_{33}^{(l)}) = 0 \tag{46}$$

$$\frac{1}{2}(m_{12}^{(r)} + m_{12}^{(l)}) = 0 \tag{47}$$

This treatment can be applied to the boundary between the base metal and the cavity with traction free.

In general, only the grid and node are considered in the FDTD method. Therefore, the material parameters must be defined on the grid nodes. However, in the EFIT, the material parameters are defined for each cell. Consequently, the physical quantities on the boundary between multiple cells are calculated by averaging the material constants of each cell, as shown in Figs. 3, 4, and 5 because the EFIT formulation starts with the integral of the governing equations. Since such averaging process cannot be handled by the FDTD method, the EFIT is easier to deal with boundary conditions than the FDTD method, as shown in this section.

4. Numerical examples

Some numerical examples are shown in this section. In the following numerical examples, the density ρ and the micro-inertia J of micropolar elastic solids are set as $\rho = 4.5$ and $J = 0.175$, respectively. In addition, the micropolar elastic constants λ, μ, κ, and γ are equal to $\lambda = 1.5$, $\mu = 1.0$, $\kappa = 1.0$, and $\gamma = 0.375$,

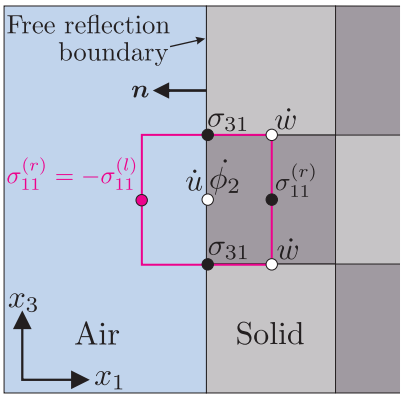


Fig. 6 The treatment on a virtual node in the vicinity of the free reflection boundary.

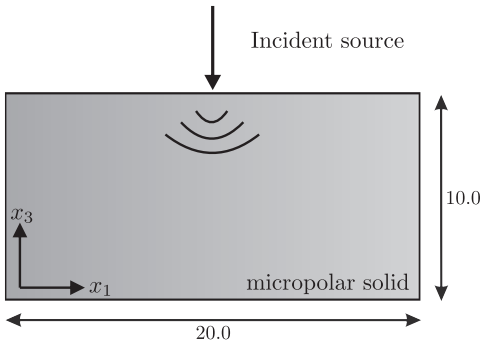


Fig.7 Analysis model for elastic wave propagation in a micropolar elastic solid.

respectively. Therefore, the parameter β is calculated as $\beta = 1/3$ using Eq. (11). These parameters were determined according to the paper by Fukui et al.[12]. In this case, the phase velocity of P-wave is given by $c_L = 1.0$. The grid size Δd and the time step size Δt are equal to $\Delta d = 5.0 \times 10^{-3}$ and $\Delta t = 2.5 \times 10^{-4}$, respectively. The incident source is given as the following boundary condition at the center of the top surface of the micropolar material:

$$\dot{w}^{\text{in}}(t) = \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right) H(T - t) \tag{48}$$

where T represents the period of the incident source, which is given by $T = 1.0$. In addition, the function H denotes the step function. In addition, $\dot{u} = \dot{w} = \dot{\phi}_2 = 0$ in the analysis domain are considered as the initial conditions. The workstation with the Intel(R) Xeon(R) W-2235 CPU @ 3.80GHz and 64 GB memory is used for the following computations.

4.1. Elastic wave propagation in a micropolar elastic solid

As a first numerical example, the elastic wave propagation in a micropolar elastic solid, as shown in Fig. 7, is analyzed using the proposed M-EFIT. The width w_l and height h_l of this model are $w_l = 20$ and $h_l = 10$, respectively. The traction free boundary condition is given at the surfaces, except for the center of the top surface, where the incident source defined in Eq. (48) is considered. The elastic wave propagation behavior in a micropolar elastic

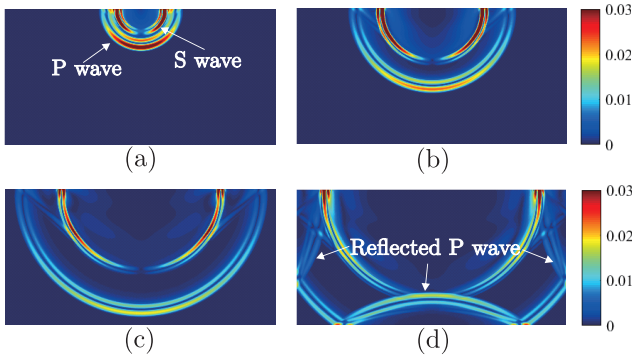


Fig. 8 P- and S-wave propagation in the micropolar elastic solid in Fig. 7 at times (a) $t = 12500\Delta t$ (b) $25000\Delta t$ (c) $37500\Delta t$ and (d) $50000\Delta t$.

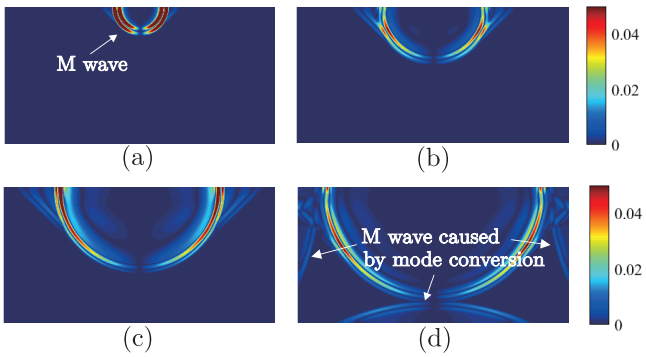


Fig. 9 M-wave propagation in the micropolar elastic solid in Fig. 7 at times (a) $t = 12500\Delta t$ (b) $25000\Delta t$ (c) $37500\Delta t$ and (d) $50000\Delta t$.

solid is confirmed by solving this problem.

Fig. 8 shows the absolute value of the particle velocity, $\sqrt{\dot{u}^2 + \dot{w}^2}$, in the analysis model in Fig. 7 at times $t = 12500\Delta t$, $25000\Delta t$, $37500\Delta t$, and $50000\Delta t$. As shown in Fig. 8(a), P- and S-waves are excited by the incident source given by Eq. (48). The absolute values of particle velocities for S-wave directly below the incident source are small compared with those for P-wave because the incident source is given in the x_3 direction, as shown in Figs. 8(a) and (b). In addition, the reflected P-waves generated by the right, left, and bottom surfaces can be seen in Fig. 8(d).

Fig. 9 demonstrates the absolute value of the particle velocity of the microrotation $\dot{\phi}_2$ in a micropolar elastic solid, as shown in Fig. 7. As shown in Figs. 9(a), (b), and (c), M-wave excitation and propagation can be confirmed. Moreover, in Fig. 9(d), the reflected M-waves from the right, left, and bottom surfaces can be seen before the incident M-wave excited by Eq. (48) arrives at these surfaces. This is because the mode conversion of P-wave reflection, as shown in Fig. 8, at each surface occurs. In general, the explicit M-wave velocity cannot obtain in the time-domain. However, velocities of M-wave are almost the same as those of S-wave at several frequencies in the frequency-domain[12]. Therefore, it is expected that the M-wave speed is approximately equal to S-wave one in the time-domain. Indeed, we can see that the M-wave speed is almost the same as S-wave one from Figs. 8 and 9. The required computational time and memory are about 5 hours and 1133MB, respectively.

4.2. Elastic wave propagation in a bimaterial of micropolar and isotropic solids

Next, the analysis of elastic waves in a bimaterial composed of the micropolar solid and an isotropic solid is performed. In this analysis, the density ρ and the micro-inertia J of an isotropic material are given by $\rho = 4.5$ and $J = 0.0$, respectively. In addition, the isotropic material part in Fig. 10 is modeled by providing λ, μ, κ, and γ as $\lambda = 1.5$, $\mu = 1.0$, $\kappa = 0.0$, and $\gamma = 0.0$, respectively. When $\gamma = 0.0$ and $\kappa = 0.0$, Eqs. (9) for L and (10) for N are

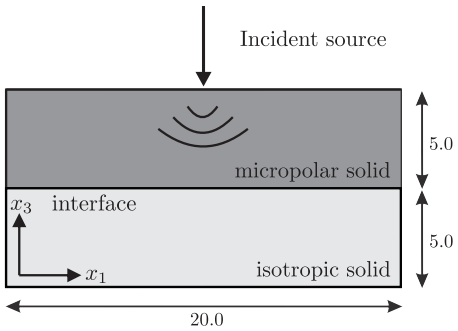


Fig. 10 Analysis model for elastic wave propagation in a bimaterial of a micropolar and an isotropic elastic solid.

zero. As mentioned in Section 2, the parameter L indicates the representative length for microstructure and N shows the micropolar property. Therefore, the isotropic solid can be considered in the M-EFIT formulation by considering the micropolar elastic constants $\gamma = 0.0$ and $\kappa = 0.0$. The width w_l and height h_l of each solid are given by $w = 20.0$ and $h = 5.0$, respectively. The other parameters and the incident source are the same as those used in the previous analysis.

Fig. 11 shows the absolute value of the particle velocity, $\sqrt{\dot{u}^2 + \dot{w}^2}$, in the analysis model in Fig. 10. In each inset figure of Fig. 11, the horizontal solid line drawn in the center indicates the interface between the micropolar and isotropic solid, and the material interface is perfectly connected. As shown in Figs. 11(a) and (b), P- and S-waves are excited by the incident source defined in Eq. (48). The wave fronts of P- and S-waves are distorted by the interface, as shown in Figs. 11(c) and (d). In addition, the head wave by S-wave propagation can be confirmed in Figs. 11(c) and (d). Furthermore, the reflected P-wave by the bottom interface of the isotropic solid and the reflected S-wave by the bimaterial interface are observed.

Fig. 12 shows the absolute value of the particle velocity of the microrotation $\dot{\phi}_2$ in the bimaterial, as shown in Fig. 7. As shown in Figs. 12(a) and (b), M-wave is excited because of the incident source defined in Eq. (48). Then, M-wave is reflected by the bi-

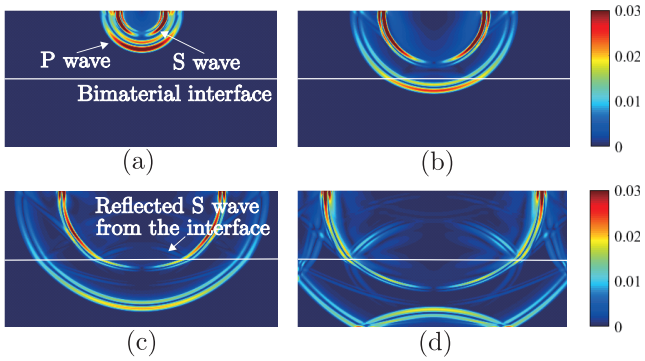


Fig. 11 P- and S-wave propagation in the micropolar elastic solid in Fig. 7 at times (a)$t = 12500\Delta t$ (b)$25000\Delta t$ (c)$37500\Delta t$ and (d)$50000\Delta t$.

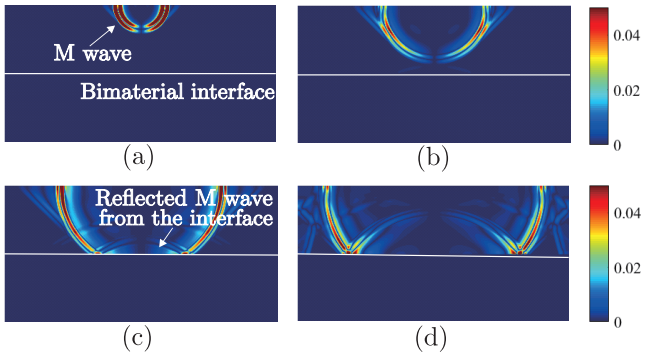


Fig. 12 M-wave propagation in the micropolar elastic solid in Fig. 7 at times (a)$t = 12500\Delta t$ (b)$25000\Delta t$ (c)$37500\Delta t$ and (d)$50000\Delta t$.

material interface, as shown in Fig. 12(c). However, M-wave does not propagate in the isotropic solid. This is because M-wave cannot exist in isotropic materials. The required computational time and memory are about 6 hours and 1133MB, respectively.

These two numerical results confirmed that the P-, S- and M-waves, propagate in micropolar elastic solids correctly, albeit qualitatively.

5. Conclusion

In this paper, M-EFIT for 2-D elastic wave propagation in micropolar elastic solids was proposed. The formulation of the proposed M-EFIT herein is based on the micropolar elastodynamic theory derived by Eringen[5][6]. The validity of the proposed M-EFIT was confirmed by simulating P-, S- and M-wave propagation in 2-D micropolar elastic solids. As seen in the classical elastodynamic theory, it can be confirmed that M-wave cannot exist in the isotropic solid side of the bimaterial. In addition, M-wave can be generated by the mode conversion of P- and S-waves. The proposed M-EFIT is an explicit method and can solve large-scale problems within a relatively shorter time than other numerical methods. However, the proposed M-EFIT cannot handle infinite regions without any modifications. Therefore, in future work, the PML(Perfectly Matched Layer)[14] for the proposed formulation will be developed to handle an infinite micropolar elastodynamic domain. In addition, a convolution quadrature-based time-domain boundary element method (CQBEM)[15][16] that can treat infinite regions will be developed for 2-D micropolar elastodynamics. More complex wave propagation in a micropolar material will be analyzed using the proposed M-EFIT by referencing some mathematical formulas about micropolar elastodynamic problems[17]. Also, this work presented in the paper will be extended to 3-D problems.

Acknowledgment

This work was supported by "Joint Usage/Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures" and "High Performance Computing Infrastructure" in Japan (Project ID:jh200052-NAH and jh210033-NAH), the bilateral exchange research between Japan and India (JPJSBP1 20207707 and DST/INT/JSPS/P-322/2020), and "JSPS KAKENHI (21K0423100)".

References

(1) Kobayashi, S. et al.: *Wave analysis and boundary element method*, (2000), Kyoto University Press (in Japanese).

(2) Seriani, G. and Oliveira, S. P.: Numerical modeling of mechanical wave propagation, *La Rivista del Nuovo Cimento*, **43** (2020), pp. 459-514.

(3) Eringen, A.C. and Suhubi, E.S.: Elastodynamics: Vol.1 and 2, (1975), Academic Press Inc.

(4) Biot, M. A.: Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid, I. Low-frequency range, *J. Acoust. Soc. Am.*, **28** (1956), pp. 168-178.

(5) Eringen, A. C.: Linear theory of micropolar elasticity, *J. Math. Mech.*, **15** (1966), pp. 909-923.

(6) Eringen, A. C.: Microcontinuum Field Theories-I. Foundations and Solids, (1999), Springer, New York.

(7) Yu, W., Yang, X., Liu, Y., Mittra, R. and Muto, A.: Advanced FDTD method: Parallelization, acceleration, and engineering applications, (2011), Artech House.

(8) Satoh, M.: Introduction to analysis of elastic vibration and wave by FDTD method, (2015), Corona Publishing (in Japanese).

(9) Fellinger, P., Marklein, R., Langenberg, K. J. and Klaholz, S.: Numerical modeling of elastic wave propagation and scattering with EFIT -elastodynamic finite integration technique-, *Wave motion*, **21**(1) (1995), pp.47-66.

(10) Schubert, F.: Numerical time-domain modeling of linear and nonlinear ultrasonic wave propagation using finite integration techniques - Theory and applications, Fast verification of solutions of matrix equations, *Ultrasonics*, **42** (2004), pp.221-229.

(11) Nakahata, K., Hirose, S., Schubert, F. and Köhler, B.: Image based EFIT simulation for nondestructive ultrasonic testing of austenitic steel, *J. Solid. Mech. Mat. Eng.*,**3**(12), (2009), 1256-1262.

(12) Fukui, T. and Okui, Y.: Boundary element analysis of scattering problems in two dimensional micropolar elasticity, In; Boundary element methods -Current Research in Japan and China-, M. Tanaka, Q. Du and T. Honma (eds.), (1993), pp. 283-292.

(13) Nowacki, W.: Theory of asymmetric elasticity, (1986), PWN-Polish Scientific Pub.

(14) Givoli, D.: High-order local non-reflecting boundary conditions: a review, *Wave Motion*, Vol.39,(2004), pp.319-326.

(15) Saitoh, T., Hirose, S. and Fukui, T. : Convolution quadrature boundary element method and acceleration by fast multipole method in 2-D viscoelastic wave propagation, *Theor. and Appl. Mech. Japan*, **57**(2009), pp. 385-393.

(16) Furukawa, A., Saitoh, T. and Hirose, S.: Convolution quadrature time-domain boundary element method for 2-D and 3-D elastodynamic analyses in general anisotropic elastic solids, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, **39**(2014), pp.64-74.

(17) Kaliraman, V, Poonia, R. K.: Elastic wave propagation at imperfect boundary of micropolar elastic solid and fluid saturated porous solid half-space, *J. Solid Mech.*, **10**(3) (2018), pp.655-671.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 02-211218 JASCOME

2次元純面外異方性・粘弾性波動問題における演算子積分時間領域境界要素法

Convolution quadrature time-domain boundary element method for 2-D pure antiplane anisotropic viscoelastodynamics

竹田　晴彦 [1)]，斎藤　隆泰 [2)]，古川　陽 [3)]，廣瀬　壮一 [4)]

Haruhiko TAKEDA, Takahiro SAITOH, Akira FURUKAWA and Sohichi HIROSE

1) 群馬大学大学院理工学府環境創生部門　修士課程 (〒 376-8515 群馬県桐生市天神町 1-5-1, E-mail:t160c056@gunma-u.ac.jp)
1) 群馬大学大学院理工学府環境創生部門　准教授 (〒 376-8515 群馬県桐生市天神町 1-5-1, E-mail:t-saitoh@gunma-u.ac.jp)
2) 北海道大学工学研究院土木工学部門　准教授 (〒 060-8628 札幌市北区北 13 条西 8 丁目, E-mail:afurukawa@eng.hokudai.ac.jp)
3) 東京工業大学環境・社会理工学院土木工学系　教授 (〒 152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail:shirose@cv.titech.ac.jp)

This paper presents a convolution quadrature time-domain boundary element method (CQBEM) for 2-D pure antiplane anisotropic viscoelastodynamics. The standard linear viscoelastic model and the fundamental solution obtained by Wang and Achenbach are considered for the expression of viscoelastic and anisotropic properties, respectively. A brief description of the proposed CQBEM formulation is discussed. Elastic wave scattering by a cavity in anisotropic viscoelastic solids is demonstrated using the proposed CQBEM. The anisotropic and viscoelastic effects are confirmed from the numerical results to validate the proposed CQBEM.

Key Words: Time-domain BEM, General anisotropic elastodynamics, viscoelastodynamics, Convolution quadrature method (CQM), 2-D pure antiplane wave.

1. はじめに

境界要素法は，これまで工学の様々な波動問題に適用されてきた [(1)]．しかしながら，境界要素法の時間領域解法は，数値解の安定性にやや問題があることから，周波数領域に比べ比較的その応用がなされずに来たことで知られる [(2)]．そのような中，演算子積分時間領域境界要素法 (CQBEM: Convolution Quadrature Boundary Element Method)[(3)(4)] が提案された．CQBEM は，Lubich の演算子積分法 (CQM: Convolution Quadrature Method)[(5)] を時間領域境界要素法における畳込み積分の離散化に用いた手法であり，従来の時間領域境界要素法に比べ，数値解を安定に求めることができる利点を持つ．また，波動が分散性を有する問題にも有効である．そのため，例えば粘弾性波動問題や，飽和多孔質弾性波動問題等のような分散性波動問題 [(6)(7)(8)] に適用されてきた．分散性波動問題では，波速は周波数に依存する．そのため，時間領域では，波速を閉じた形で表現できない．波速と同様に，時間領域基本解も閉じた形で求めることができないが，CQBEM では，時間領域基本解を必要とせず，ラプラス変換領域基本解を用いる．ラプラス変換領域では，周波数領域と同様に，分散性波動問題に対して閉じた基本解を求めることができるため，CQBEM の使用がそのような波動問題に有効となる．また，時間領域基本解が複雑で，ラプラス変換領域基本解の方が扱いやすい問題に対しても CQBEM は適用されている．例えば，異方性弾性波動問題がそれに当たる．異方性の性質に依存しない，すなわち特定の弾性定数に対してではなく，等方性を含めて様々な弾性定数に対して適用可能な一般の異方性弾性波動問題では，周波数領域，時間領域いずれにおいても閉じた形の基本解を求めることはできない．しかしながら，CQBEM を用いれば，解の安定性を向上させるだけでなく，数値解の導出も比較的容易となる．そのため，異方性弾性波動問題に対する CQBEM も，2 次元純面外波動問題 [(9)] や純面内，3 次元問題に対して適用例 [(10)(11)] がある．しかしながら，異方性かつ粘弾性体の性質を示す波動問題に対する CQBEM の適用例は，著者らの知る限り例はない．近年では，オステナイト系鋼材や炭素繊維強化プラスチック (CFRP: Carbon Fiber Reinforced Plastic) のように，異方性かつ粘弾性の性質を有する材料の産業界への応用も進んでいる．よって，異方性・粘弾性波動問題に対する CQBEM を開発することは，意義があると考えられる．

そこで，本論文では，異方性・粘弾性波動問題に対する

2021 年 9 月 23 日受付，2021 年 11 月 15 日受理

CQBEM を開発する．ただし，本論文では，異方性・粘弾性を考慮する最初の試みであることを考え，異方性の性質を一般の純面外波動問題に限定する．以下では，解くべき問題や異方性・粘弾性波動問題に対する CQBEM の定式化を説明した後，簡単な数値解析例を示すことで，本手法の有効性等について検討する．

2. 解くべき問題

以下では，x_1–x_2 面内を伝搬する純面外波動について考える．特に断りのない限り，ローマ字で表示される添え字は 1 および 2 をとり，総和規約を適用する．この時, 解くべき問題は，Fig. 1 に示すような観測点 $\boldsymbol{x}$，時間 t に対する異方性・粘弾性体中の空洞 D による入射波 $u_3^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t)$ の散乱問題である．

さて, 物体力を無視し, 面外方向の変位を $u_3(\boldsymbol{x},t)$ と表記し，簡単のため, 異方性と粘弾性を独立に考慮する. すなわち, 粘弾性における粘性の性質は, 等方に与えると仮定すれば，解くべき問題は, それぞれ次の運動方程式および構成式で与えられる．

$$\sigma_{3j,j}(\boldsymbol{x},t) = \rho \ddot{u}_3(\boldsymbol{x},t) \qquad \text{(運動方程式)} \tag{1}$$

$$\sigma_{3j}(\boldsymbol{x},t) = C_{3j3l}(t) * \dot{u}_{3,l}(\boldsymbol{x},t) \qquad \text{(構成式)} \tag{2}$$

ここで $\sigma_{3j}(\boldsymbol{x},t)$ は応力, $\dot{(\ )}, (\ )_{,i}$ は, それぞれ時間および空間に関する微分 $\partial/\partial t_i, \partial/\partial x_i$ を表す. $C_{3j3l}(t)$ は異方性・粘弾性波動問題における時間領域の緩和弾性定数であり, $*$ は時間に関する畳込み積分を表す. この畳込み積分が，粘性の性質を表わすことに対応することとなる．また, 以降の定式化においては, 面外方向変位 $u_3(\boldsymbol{x},t)$ を, 単に $u(\boldsymbol{x},t)$ と表記することに注意されたい.

論文冒頭でも述べたように，本問題は分散性を考慮しなければならない問題である. そのため，対象とする問題の時間領域基本解を閉じた形で求めることはできない．しかしながら，もし当該の 2 次元時間領域純面外問題における異方性・粘弾性波動問題の基本解を求めることができるならば，この問題の時間領域境界積分方程式は次のように与えられる．

$$\alpha u(\boldsymbol{x},t) = u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t) - \int_S W(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t) * u(\boldsymbol{y},t) dS(\boldsymbol{y}) \tag{3}$$

ここで，α は境界に依存する自由項 [1]，$W(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t)$ は二重層核である．なお，境界条件として，空洞の境界 S において表面力フリーを仮定していることに注意する．以下では，CQBEM を用いて式 (3) を解くことについて考える．

3. 純面外波動問題における異方性・粘弾性 CQBEM

3.1. CQM

まず，CQM について後の説明で必要となる程度に簡単にまとめておく．CQM の詳細や CQBEM の定式化の詳細については，文献 [5][10] 等を参照されたい．

一般的に，畳込み積分は次のように表される．

$$f(t) * g(t) = \int_0^t f(t-\tau) g(\tau) d\tau, \quad t \geq 0 \tag{4}$$

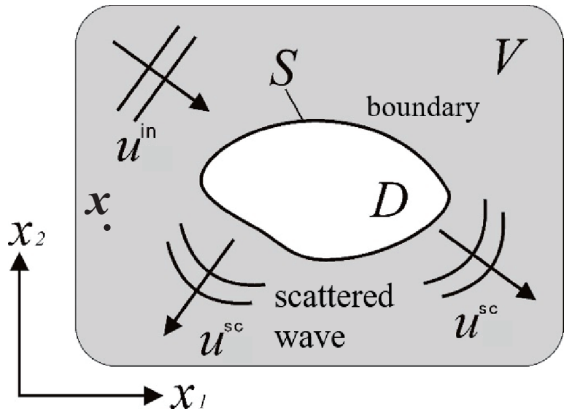


Fig. 1　Elastic wave scattering by a traction free cavity in an anisotropic viscoelastic solid.

CQM を用いれば，式 (4) は，時間増分 Δt を用いて N_t ステップに分割することで，次のように近似できる．

$$f(n\Delta t) * g(n\Delta t) \simeq \sum_{j=0}^{n} \omega_{n-j}(\Delta t) g(j\Delta t), \ (n = 0, 1, \ldots, N_t) \tag{5}$$

ただし, $\omega_j(\Delta t)$ は CQM における重み関数であり，積分核 $f(t)$ のラプラス変換 $\hat{f}(s)$ により次のように表される．

$$\omega_n(\triangle t) \simeq \frac{\mathcal{R}^{-n}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \hat{f}\left(\frac{\delta(\zeta_l)}{\Delta t}\right) \mathrm{e}^{\frac{-2\pi \mathrm{i} n l}{L}} \tag{6}$$

ここで i は虚数単位，s はラプラスパラメータ，$\delta(\zeta_l)$ は線形マルチステップ法（差分法）における生成多項式の商 [5]，引数 ζ_l や $\mathcal{R}$，L は CQM のパラメータである．なお $\mathcal{R}$ は目標とする精度 ϵ によって決定されるパラメータであり，

$$\mathcal{R} = \epsilon^{1/(2L)} \tag{7}$$

により決定する．以下では式 (4)-(6) を式 (3) に用いた CQBEM により，数値解を構成する方法について述べる．

3.2. CQM を用いた離散化

式 (3) において $\boldsymbol{x} \in S$ とし，時間に関しては CQM を，空間に関しては選点法を用いた離散化を施す．空間に関する形状関数を区分一定の関数で与えると，第 n ステップにおける離散化された時間領域境界積分方程式は，次式で表現できる．

$$\frac{1}{2} u_M^{(n)} = u_M^{\mathrm{in}(n)} - \sum_{k=1}^{n} \sum_{N=1}^{N_e} \left[B_{MN}^{(n-k)} u_N^{(k)} \right], \quad (M = 1, 2, \cdots, N_e,\ n = 1, 2, \cdots, N_t) \tag{8}$$

ただし，N_e は境界要素数，$u_M^{(n)}$，$u_M^{\mathrm{in}(n)}$ は，それぞれ M 番目の選点における第 n ステップでの面外方向変位および入射波変位を表わす．また，$B_{MN}^{(m)}$ は影響関数を表し，次式で与えられる．

$$B_{MN}^{(m)} = \frac{\mathcal{R}^{-m}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \left[\int_{S^N} \hat{W}(\boldsymbol{x}^M, \boldsymbol{y}, s_l) dS(\boldsymbol{y}) \right] \mathrm{e}^{\frac{-2\pi \mathrm{i} m l}{L}} \tag{9}$$

ただし，$s_l = \delta(z_l)/\Delta t$，$z_l$ は $z_l = \mathcal{R}\mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} l/L}$ である．なお，式 (9) の右辺はフーリエ変換の形をしていることに注意する．そ

のため，この計算は高速フーリエ変換を用いて計算を高速化することもできる．その場合，式 (9) において，同一の M, N に対し，様々な m に対する影響関数 $B_{MN}^{(m)}$ を一度に得ることができる [12]．また，$\hat{W}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s)$ は，2 次元純面外異方性・粘弾性波動問題のラプラス変換領域における二重層核であり，次式で与えられる．

$$\hat{W}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s) = -C^*_{3j3l}(s) n_j(\boldsymbol{y}) \hat{U}_{,l}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s) \tag{10}$$

ここで，$n_j(\boldsymbol{y})$ は点 $\boldsymbol{y}$ における外向き単位法線方向ベクトル，$C^*_{3j3l}(s)$ はラプラス変換域における緩和弾性定数を表す．また，$\hat{U}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s)$ は，2 次元純面外異方性・粘弾性波動問題のラプラス変換領域における基本解であり，Wang と Achenbach[13] により提案された 2 次元異方性弾性波動問題に対する基本解を拡張することで得られる．具体的には，純面外波の伝搬に関係する箇所のみを考慮し，緩和弾性定数を導入して粘性を考慮できるように書き下せば，本問題における基本解 $\hat{U}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s)$ は次のように与えられる．

$$\hat{U}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s) = \frac{1}{8\pi^2} \int_{|\boldsymbol{p}|=1} \frac{\Phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, s)}{\Gamma_{33}(\boldsymbol{p})} dL(\boldsymbol{p}) \tag{11}$$

ただし，$\Phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, s)$ は，次式で与えられる．

$$\begin{aligned} \Phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, s) =& \mathrm{e}^{s \frac{|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}|}{c^*(\boldsymbol{p})}} E_1\left(s \tfrac{|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}|}{c^*(\boldsymbol{p})}\right) \\ &+ \mathrm{e}^{-s \frac{|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}|}{c^*(\boldsymbol{p})}} \left\{ E_1\left(-s \tfrac{|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}|}{c^*(\boldsymbol{p})}\right) + \mathrm{i}\pi \right\} \end{aligned} \tag{12}$$

ここに，$\boldsymbol{r} = |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|$ であり，$E_1(z)$ は指数積分 [14] を表す．また，$c^*(\boldsymbol{p})$ は単位円周を示すベクトル $\boldsymbol{p}$ の方向に対する複素位相速度である．一方，$\Gamma_{33}(\boldsymbol{p})$ は，通常の異方性弾性波動問題に対する Christoffel テンソルの一部に相当し，次式で与えられる．

$$\Gamma_{33}(\boldsymbol{p}) = C^*_{3j3l}(s) p_j p_l \tag{13}$$

式 (11) で示すように，一般的な異方性を考慮する場合，2 次元問題の基本解は単位円周を示すベクトル $\boldsymbol{p}$ における平面波の重ね合わせの形式で求めることができる．この基本解は，一部の横等方性材料の場合等を除き，閉じた形で求めることはできない．そのため，影響関数 (9) の計算は，単位円周と境界要素，すなわち空間に対する 2 重積分となり，全体の計算に対してボトルネックとなる．この点は，OpenMP を用いた並列化で対応する．

以上より，2 次元純面外異方性・粘弾性波動問題に対するラプラス変換領域基本解を用いて，式 (8) を解くことができる．式 (8) の第 n ステップにおいて，境界未知量を左辺に，境界既知量を右辺に適宜移行し，得られた代数方程式を解くことで，$n = 1$ から始めて逐次的に，面外変位 $u(\boldsymbol{x}, n\Delta t)$ を求めることができる．この点は，本論文に限らず，全ての CQBEM について共通であるため，その詳細は省略する．

4. 異方性および粘弾性の考慮と数値解の妥当性の検証に必要な事項

さて，一般に異方性および粘弾性の両者を考慮した波動問題における解析解を求めることは困難である．そのため，ここでは本研究における具体的な異方性および粘弾性の考慮方法とともに，後に示す数値解析結果の妥当性を検証するために必要な事項について簡単にまとめておく．

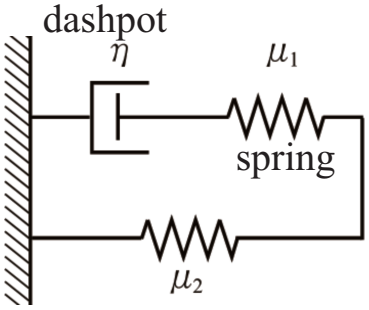


Fig. 2　Standard linear solid model for viscoelasticity.

4.1. 群速度曲線

2 節で述べたように，粘性の影響は簡単のため等方としている．以下では，ラプラス変換域における緩和弾性定数 $C^*_{3j3l}(s)$ に対して，粘弾性力学における初期弾性定数 [15] に相当する弾性定数を C^0_{3j3l} と表すこととする．このとき，本研究では，粘性の性質は等方であると仮定しているため，異方性の影響は，式 (13) の Christoffel テンソルを参考にすれば，初期弾性定数 C^0_{3j3l} を用いた次の方程式を解くことで確認できる [16]．

$$\Gamma^0_{33}(\boldsymbol{p}) - \rho c_0^2(\boldsymbol{p}) = 0,\ \Gamma^0_{33}(\boldsymbol{p}) = C^0_{3j3l} p_j p_l \tag{14}$$

ただし，$\Gamma^0_{33}(\boldsymbol{p})$ は 2 次元純面外異方性・粘弾性波動問題における初期弾性定数に対する Christoffel テンソル，ρ は異方性・粘弾性体の密度を表す．また，$c_0(\boldsymbol{p})$ は $\boldsymbol{p}$ 方向に伝搬する純面外波 (qS2 波)[17] の初期位相速度を表す．式 (14) より，qS2 波の初期位相速度 $c_0(\boldsymbol{p})$ は，波動の伝搬方向 p_i によって決定されることがわかる．すなわち，位相速度は伝搬方向 $\boldsymbol{p}$ によって異なることがわかる．よって，解くべき問題の密度 ρ や初期弾性定数 C^0_{3j3l} 等が与えられれば，様々な方向における位相速度や群速度が求まるため，後に示す数値解析結果の妥当性の検証に役立つ．

4.2. 標準線形固体モデルの拡張とその適用

Fukui ら [18] によれば，粘弾性波動のモデル化方法として，主に Maxwell 物体, Voigt 物体，標準線形固体の 3 種類を挙げることができる．本論文では，Fig. 2 に示すような標準線形固体を用いて粘弾性波動をモデル化する．一般的に標準線形固体は，Fig. 2 で示すように，瞬間的に力に比例した変形を生じると仮定する 2 つの線形ばね (ばね定数 μ_1, μ_2) と，任意の瞬間において，力に比例した速度を生じるダッシュポット η の組合わせをモデル化したものである．その場合の力-変位関係等の詳細は文献 [15] に譲り，ここでは本解析に必要な要点のみについて述べる．

今，応力緩和時間を τ_σ，ひずみ緩和時間を τ_ϵ，$t \to \infty$ における緩和弾性定数を C^R_{3j3l} とすれば，後の数値解析例で用いる入射波の計算に必要な，周波数領域における複素弾性定

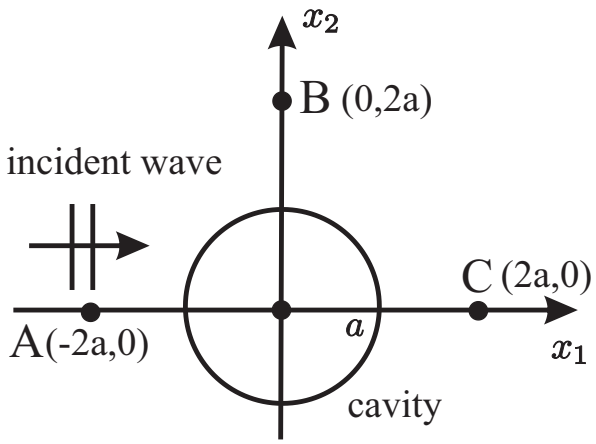


Fig. 3　Elastic wave scattering by a cavity with radius a in an anisotropic viscoelastic solid.

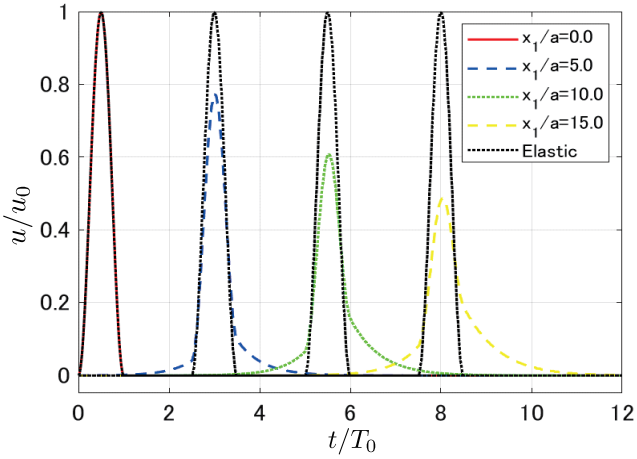


Fig. 4　Time variation of the incident plane wave at $x_1/a = 0.0, 5.0, 10.0, 15.0$.

数 $\tilde{C}^*_{3j3l}(\omega)$ は，Fukui ら [18] の結果を拡張すれば，形式的に次のように与えられる．

$$|\tilde{C}^*_{3j3l}(\omega)| = \frac{\sqrt{1+\omega^2\tau_\sigma^2}}{\sqrt{1+\omega^2\tau_\epsilon^2}} C^R_{3j3l} \tag{15}$$

ここで，ω は角周波数であり，$\boldsymbol{p}$ 方向の対応する複素波数 $k(\omega)$ は次のように計算できる．

$$k(\omega, \boldsymbol{p}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\delta}{2}} \frac{\omega}{\sqrt{|C^*_{3j3l}(\omega) p_j p_l|/\rho}} \tag{16}$$

ただし，δ は次のように与えられる．

$$\tan\delta = \frac{\omega(\tau_\sigma - \tau_\epsilon)}{1+\omega^2\tau_\sigma\tau_\epsilon} \tag{17}$$

また，緩和弾性定数 C^R_{3j3l} と，$t \to 0$ における初期弾性定数 C^0_{3j3l} の比を，全ての弾性定数で一定とすれば，

$$C^0_{3j3l} = C^R_{3j3l} \frac{\tau_\sigma}{\tau_\epsilon} \tag{18}$$

と表せる．一方，CQBEM における式 (9) の影響関数の計算は，式 (10) に対して，ラプラス変換領域での緩和弾性定数 $C^*_{3j3l}(s)$ 用いる. そのため, 次の式

$$C^*_{3j3l}(s) = \frac{1+s\tau_\sigma}{1+s\tau_\epsilon} C^R_{3j3l} \tag{19}$$

を用いてラプラス変換域における緩和弾性定数 $C^*_{3j3l}(s)$ を計算すればよい．なお，本設の定式化は粘性の性質や程度に影響を与えるが，初期弾性定数や緩和弾性定数を変化させることにより，弾性定数の各成分に異なる粘性を考慮することは問題ないと考えられる．以上で時間領域境界積分方程式 (3) を解く準備は整った．

5. 数値解析例

以下，数値解析例を示す．解析モデルとして Fig. 3 のような異方性・粘弾性体中の半径 a の円形空洞による入射波の散乱問題を考える．空洞は要素数 $N_e = 72$ 個の区分一定要素で離散化した．時間増分は $c_0\Delta t/a = 0.08$, 総時間ステップ数 N_t は $N_t = 128$ としている．また，解析には，初期弾性波速度 c_0 の波動が空洞を通過する時間 T_0 を $T_0 = 2a/c_0 = 2.0$ で定義し, 基準時間の 1 つとして用いる．なお，応力緩和時間 τ_σ は $\tau_\sigma = 0.425T_0$, ひずみ緩和時間 τ_ϵ は $\tau_\epsilon = 0.5T_0$ で与え，緩和弾性定数 C^R_{3j3l} と初期弾性定数 C^0_{3j3l} の比 C^R_{3j3l}/C^0_{3j3l} は $C^R_{3j3l}/C^0_{3j3l} = 0.85$ で与えた．ここで与えた応力緩和時間 τ_σ やひずみ緩和時間 τ_ϵ を用いれば，式 (10) における複素弾性定数 C^*_{3j3l} は決定できる．一方，CQM における式 (7) で示した精度パラメータ ϵ は，$\epsilon = 1.0\times10^{-13}$ で与え，式 (9) における影響関数の計算では $L = N_t$ とし，高速フーリエ変換を用いて計算を効率的に行った．解析には，京都大学のスーパーコンピューターのシステム A(Camphor 2) を 1 ノード (ノード当たり 68 cores) 占有し，OpenMP による 68 スレッド並列を施した．具体的には，式 (8) の入射波 $u^{\mathrm{in}(n)}_M (M = 1, \ldots, N_e)$ および影響関数行列 $B^{(n-k)}_{MN} (M = 1, \ldots, N_e)$ の各行の計算に OpenMP を用いている．この場合，1 つのスレッド当たり，$N_e/68$ 行の計算をそれぞれ担当することとなるが，本論文では並列化効率を最大化することが主眼ではないため，スレッド間のロードバランスについては，特に考慮せず並列化した．

5.1. 入射波の計算

CQBEM の計算に先立ち，式 (3) における入射波 $u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x}, t)$ を求めておく．一般的に，粘弾性の性質を持つ波動は分散性を持つため，基本解同様，波動速度を閉じた形で求めることはできない．そこで，前論文 [7] 同様，時間領域における入射波を周波数領域の入射波の逆フーリエ変換で求めることとする．ここでは，入射波として，x_1 方向に伝搬する次の平面波を用いた．

$$u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x}, t) = u_0 \mathcal{F}^{-1}\left[\frac{\omega_0^2(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega T_0})}{2\mathrm{i}\omega(\omega^2-\omega_0^2)} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega}{\tilde{c}^*}x_1}\right] \tag{20}$$

ここで, ω は角周波数, u_0 は入射波の振幅, $\omega_0 = 2\pi/T_0$ である．また，$\mathcal{F}^{-1}$ は逆フーリエ変換を意味している．入射波の計算に用いた初期弾性定数の成分比 C^0_{3131}/C^0_{3232} は $C^0_{3131}/C^0_{3232} \simeq 0.64$ とした．なお，周波数域での x_1 方向に伝搬する入射波の位相速度 $\tilde{c}^*$ は，式 (14) の Christoffel 方程式で伝搬方向ベ

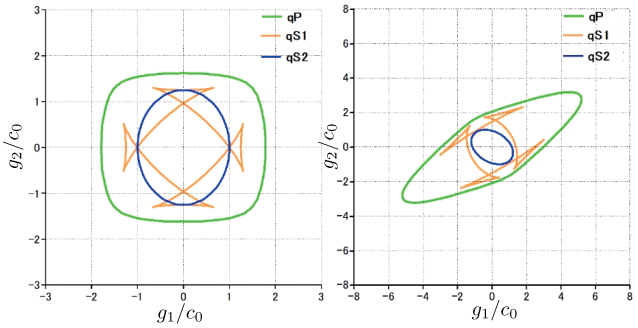


Fig. 5　Group velocity curves for (a) austenite steel (b) graphite-epoxy with 30° inclined anisotropic principle axis.

クトル p_j を与えることで容易に求めることができる．

まず，入射波の計算のおよその妥当性を確認するために，入射波の変位の時刻歴応答解析を実施する．その結果を Fig. 4 に示す．Fig. 4 中の波形は，式 (20) を用いて計算された平面波であり，$x_1/a = 0.0, 5.0, 10.0, 15.0$ における入射波変位 u/u_0 の時刻歴波形を示している．比較のため，粘性効果のない場合の入射波の時刻歴波形を，黒点線で示してある．Fig.4 より，粘性効果がない場合は，入射平面波が伝搬しても，振幅や波形を一定に保ちながら伝搬していることがわかる．一方，粘性効果がある場合は，振幅は入射波が進行するにつれ減衰し，かつその波形も変化していることがわかる．以上より，以後の解析で用いる入射波に正しく粘性効果を与えられていることを確認できた．

5.2. オステナイト系鋼材とグラファイトエポキシに対する群速度曲線

続いて，以下の解析で解析対象とするオステナイト系鋼材と，グラファイトエポキシの群速度曲線を示しておく．なお，オステナイト系鋼材およびグラファイトエポキシのフォークト表記された初期弾性定数 $C^0_{\alpha\beta}(\alpha,\beta = 1,\ldots,6)$ は，それぞれ以下のように与えた．

$$\frac{C^0_{\alpha\beta}}{C^0_{66}} = \begin{bmatrix} 3.16 & 1.19 & 1.76 & 0 & 0 & 0 \\ & 3.16 & 1.76 & 0 & 0 & 0 \\ & & 2.63 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{Sym.} & & 1.57 & 0 & 0 \\ & & & & 1.57 & 0 \\ & & & & & 1.0 \end{bmatrix} \tag{21}$$

$$\frac{C^0_{\alpha\beta}}{C^0_{66}} = \begin{bmatrix} 19.3 & 8.0 & 8.0 & 0 & 0 & 0 \\ & 15.1 & 8.3 & 0 & 0 & 0 \\ & & 15.1 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{Sym.} & & 0.52 & 0 & 0 \\ & & & & 1.0 & 0 \\ & & & & & 1.0 \end{bmatrix} \tag{22}$$

ただし，式 (21), (22) に示したこれら初期弾性定数は，それぞれの材料における C^0_{66} で無次元化されていることに注意されたい．異方性を扱う場合，このようにフォークト表記 [17] された弾性定数を用いると便利な場合が多々ある．なお，フォークト表記された弾性定数 $C^0_{\alpha\beta}$ と，4 階のテンソル表記された弾性定数 C^0_{ijkl} には次の関係がある．

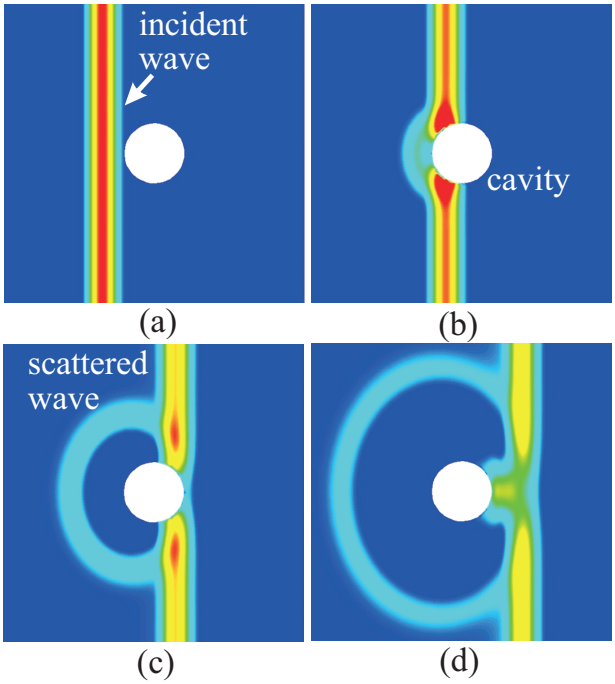


Fig. 6　Total wave fields $|u|/u_0$ around a cavity in the austenite steel with the initial elastic constant $C^0_{\alpha\beta}/C^0_{66}$ given in Eq.(21).

$$\alpha = \begin{cases} i & : (i = j) \\ 9 - (i + j) & : (i \neq j) \end{cases} \tag{23}$$

$$\beta = \begin{cases} k & : (k = l) \\ 9 - (k + l) & : (k \neq l) \end{cases} \tag{24}$$

Fig. 5(a), (b) は，それぞれオステナイト系鋼材およびグラファイトエポキシに対する群速度曲線を示している．ただし，Fig. 5(b) に対するグラファイトエポキシに対する群速度曲線は，後の解析に対応するように，式 (22) に対して異方性主軸を座標変換 [19] により 30° 傾けた結果であることに注意されたい．なお，本論文で示す解析対象は，Fig. 5 中の青色線で示す qS2 波 (純面外波) であり，参考のため，qP 波や qS1 波も示してある．Fig. 5(a), (b) より，いずれの場合も qS2 波は比較的異方性の影響が弱いことがわかる．そのため，数値安定性の観点からも，qS2 波を対象とした解析は，比較的容易である．また Fig. 5(a) より，オステナイト系鋼材の qS2 波に対する群速度曲線は縦長の楕円形状を示していることがわかる．一方，Fig. 5(b) のグラファイトエポキシの qS2 波に対する群速度曲線も楕円形状を示しているが，異方性主軸を座標変換により 30° 傾けているため，群速度曲線も同様に斜めに傾いていることに注意されたい．

5.3. オステナイト系鋼材中の空洞による入射 qS2 波の散乱解析

次に，オステナイト系鋼材中の空洞による入射 qS2 波の散乱解析結果を示す．入射 qS2 波は式 (20) で与えた平面波を時

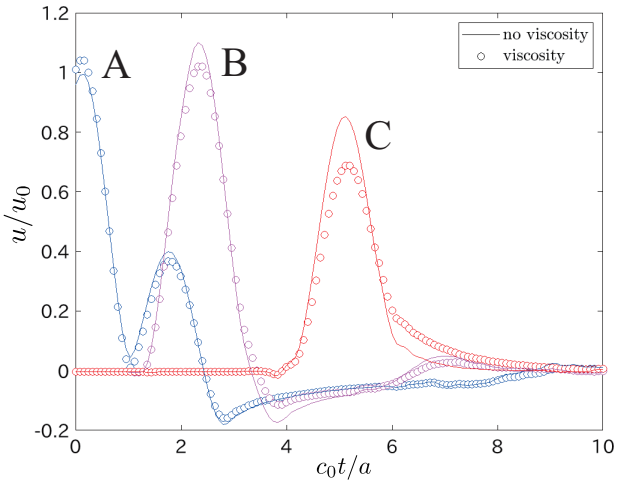


Fig. 7　Total displacement A, B, and C in the austenite steel with the initial elastic constant $C^0_{\alpha\beta}/C^0_{66}$ given in Eq.(21).

刻 $c_0t/a = 0.0$ に，丁度，空洞左端に到達するように与えた．弾性定数は式 (21) における qS2 波の解析に必要な部分のみを用いている．Fig. 6(a)-(d) は，それぞれ時間ステップ数 n が $n = 0, 40, 80, 120$ における，Fig. 3 で示した空洞周辺の正方領域 (ただし $-5.0 \leq x_1 \leq 5.0$) における全変位場 $|u|/u_0$ を示している．一般的に，散乱波の波動伝搬は 4.1 節で説明した群速度曲線に従うため，解析結果の波面の形状を Fig. 5(a) の群速度曲線と比べれば，物理的な妥当性を確認できることとなる．Fig. 6(a) で，入射波は空洞に到達し，Fig.6(b) で散乱波が発生し始める．その後，Fig.6(c), (d) と時間が進む毎に，散乱波は楕円形状の波面を持って伝搬していることがわかる．この楕円形状は縦長であり，Fig. 5(a) で示したオステナイト系鋼材中の qS2 波に対する群速度曲線の形状と一致していることがわかる．すなわち，異方性の影響を正しく計算できていることがわかる．一方，与えた入射平面波に着目すると，Fig. 6 より，入射平面波の振幅は，時間ステップの増加に伴い徐々に減衰していることがわかる．よって，入射平面波に対する粘弾性の影響も正しく考慮されていることがわかる．

ただし，Fig. 6 の結果からだけでは，散乱波における粘弾性の影響の有無は判然としない．そこで，Fig. 7 に，Fig. 3 中の A, B, C 点における変位 u/u_0 をプロットした結果を示す．参考のため，粘性効果がない，通常の異方性弾性体の場合の結果も実線で示してある．Fig. 7 より，A, B, C いずれの点における結果を見ても，粘性効果がある場合は，通常の異方性弾性体の場合に比べ，変位 u/u_0 が減衰していることがわかる．また，C 点に着目すると，粘弾性効果がある場合は，ゆっくりと変位 u/u_0 が減衰していることがわかる．この傾向は，Fig. 4 で示した粘性を考慮した場合の入射波の伝搬傾向と同様である．よって，定性的ではあるが，異方性および粘弾性の両者の影響を同時に考慮した解析を正しく行えていることがわかる．

5.4. 異方性主軸が 30° 傾いた場合のグラファイトエポキシ中の空洞による入射 qS2 波の散乱解析

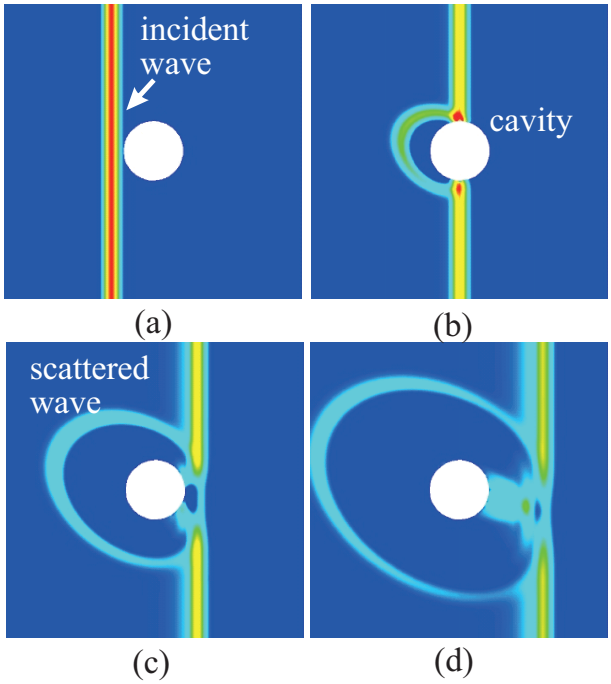


Fig. 8　Total wave fields $|u|/u_0$ around a cavity in the graphite-epoxy with the initial elastic constant $C^0_{\alpha\beta}/C^0_{66}$ given in Eq.(22).

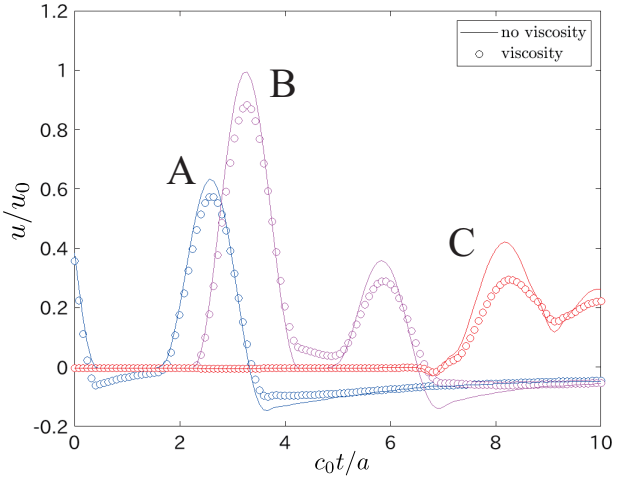


Fig. 9　Total displacement A, B, and C in graphite-epoxy with the initial elastic constant $C^0_{\alpha\beta}/C^0_{66}$ given in Eq.(22).

最後に，異方性主軸が 30° 傾いた場合のグラファイトエポキシ中の空洞による入射 qS2 波の散乱解析結果を示す．5.3 節と同様，入射 qS2 波には式 (20) で示した平面波を用い，時刻 $c_0t/a = 0.0$ で，丁度空洞の左端に到達するように設定した．ただし，先に説明したように，弾性定数は式 (22) に対して異方性主軸に対する 30° の座標変換を施していることに注意されたい．Fig. 8(a)-(d) に，Fig.6 と同様，それぞれ時間ステップ数 n が $n = 0, 40, 80, 120$ における，Fig. 3 で示した空洞周辺の正方領域における全変位場 $|u|/u_0$ を示す．Fig. 8(a) で入射波が空洞に到達する．その後，Fig. 8(b) で散乱波が発生している様子を確認できる．その後，Fig. 8(c), (d) と時間の経過とともに，空洞による散乱波をはっきりと確認するこ

とができる．なお，この散乱波の形状は，等方とならず，左上に 30° 傾いた楕円形状となっている．すなわち，Fig. 5(b) で示した qS2 波の群速度曲線の形状とおよそ一致する．よって，異方性主軸が傾いた場合でも，異方性の影響を正しく評価できていると考えられる．一方，与えた入射平面波に着目すると，入射平面波の振幅は，Fig. 6 のオステナイト系鋼材の場合と同様に，時間ステップの増加に伴い，徐々に減衰していることがわかる．ただし，オステナイト系鋼材とグラファイトエポキシでは，入射波の伝搬方向に対する位相速度が異なるため，x_1 方向の波長自体は同一にならないことに注意する．

最後に，Fig. 7 と同様に，Fig. 3 における A, B, C 点での変位 u/u_0 をプロットした結果を Fig.9 に示す．参考のため，粘性効果がない，通常の異方性弾性体の場合の結果も実線で示してある．Fig. 7 の結果と同様に，粘性効果がある場合は，粘性効果のない異方性弾性波動問題の場合の結果に比べて，各点での変位 u/u_0 は小さくなっていることがわかる．よって，いずれの点においても粘性効果の影響を確認できた．

6. 結論および今後の展望

2 次元純面外異方性・粘弾性波動問題における演算子積分時間領域境界要素法の定式化を行った．一般的に，異方性と粘弾性の両者を考慮した問題に対して，解析解を導出することは難しい．そのため，ここでは，粘性効果を取り入れた入射波自体の伝搬，群速度曲線から予想される散乱波の波動伝搬等に着目し，空洞による入射波の散乱問題を解き，異方性や粘弾性の影響を確認することで，本手法のおよその妥当性を示した．異方性と粘弾性の両者の効果を取り入れた CQBEM は，これまでに例はない．そのため，今後は，2 次元純面内波動問題を対象とした異方性・粘弾性波動問題への拡張や，3 次元問題への拡張等，関連する問題に応用することを予定している．また，本研究では，簡単のため，粘性の影響を等方として考えた．そのため，粘性の影響が方向に依存するような場合についての定式化も検討する予定である．解析結果のより定量的な評価も今後の課題である．

謝辞

本研究は，R2 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (拠点研究機関 : 京都大学，Project ID:jh200052-NAH)，R3 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (拠点研究機関 : 京都大学，北海道大学，Project ID:jh210033-NAH)，科学研究費補助金基盤研究 (C)(21K0423100)，並びに日本学術振興会二国間共同研究 (project number: JPJSBP1 20207707) の支援の下で実施された．

参考文献

(1) 小林昭一編著：波動解析と境界要素法，京都大学学術出版会，(2000).

(2) 福井卓雄：境界要素法の研究-高速・高精度計算法の開発と応用- 京都大学学位論文, (1998).

(3) 福井卓雄，岡山美央，石田貴之 : 2 次元波動伝播問題における演算子積分時間領域境界要素法および高速多重極法の適用, 計算数理工学論文集，**6**(2), (2006), pp.153-158.

(4) Abreu, A. I., Carrer, J. A. M. and Mansur, W. J. : Scalar wave propagation in 2D: a BEM formulation based on the operational quadrature method, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, **27**, (2003), pp. 101-105.

(5) Lubich, C. : Convolution quadrature and discretized operational calculus I *Numer. Math.*, **52**, (1988), pp. 129-145.

(6) Schanz, M. : Wave Propagation in Viscoelastic and Poroelastic Continua: A Boundary Element Approach, Springer, (2001).

(7) 斎藤隆泰，石田貴之，福井卓雄，廣瀬壮一:粘弾性面外波動問題における演算子積分時間領域境界要素法および高速多重極法の適用, 計算工学論文集, 原稿番号 No.20080011, (2008).

(8) 斎藤隆泰，近澤文香，廣瀬壮一 : 演算子積分時間領域境界要素法を用いた飽和多孔質弾性体における大規模波動散乱解析, 土木学会論文集 A2(応用力学), **68**, (2012), pp.I_187-I_197.

(9) Zhang, Ch.: Transient elastodynamic antiplane crack analysis of anisotropic solids, *Int. J. Solids and Structures*, **37**, (2000), pp. 6107-6130.

(10) 斎藤隆泰，田中遊雲，廣瀬壮一 : 3 次元異方性弾性波動問題における Lubich の方法を用いた時間領域境界要素法，計算数理工学論文集, **10**, (2010), pp.111-116.

(11) Furukawa, A., Saitoh, T. and Hirose, S.: Convolution quadrature time-domain boundary element method for 2-D and 3-D elastodynamic analyses in general anisotropic elastic solids, *Eng. Anal. Bound. Elem*, **39**, (2014), pp.64-74.

(12) 斎藤隆泰，瀬川尚揮，石田貴之，廣瀬壮一 : 並列化された演算子積分時間領域高速多重極境界要素法を用いた大規模多重散乱解析, 計算数理工学論文集, **11**, (2011), pp.95-100.

(13) Wang, C.-Y. and Achenbach, J. D. :Elastodynamic fundamental solutions for anisotropic solids, *Geophys, J. Int.*, **118**, (1994), pp.384-392.

(14) Abramowitz, M., and Stegun, I. A.: Handbook of mathematical functions: with formulas, graphs, and mathematical tables, Dover, (1965).

(15) ファン, Y. C. (大橋義夫, 村上澄男, 神谷紀生共訳): 固体の力学/ 理論, 培風館, (1970).

(16) 斎藤隆泰，下田瑞斗，稲垣祐生，廣瀬壮一 : 演算子積分時間領域境界要素法を援用した異方性板内部の欠陥に対する順解析および逆散乱解析，土木学会論文集 A2(応用力学), **72**(2), (2016), pp.I_237-I_246.

(17) Auld, B. A.: Acoustic fields and waves in solids, vol.1, 2, R.E. Krieger, (1990).

(18) Fukui, T. and Funato, K.: Time domain boundary element method in anti-plane viscoelastic wave propagation problems, Proc. 7th Japan-China Symp. Boundary Element Methods, M. Tanaka and Z. Yao(eds.), (1996), Elsevier, pp.47-56.

(19) 前原佑，斎藤隆泰：時間反転法を用いた L 字型 CFRP 中の欠陥形状再構成，計算数理工学論文集, **18**, (2018), pp.47-52.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月)，論文 No. 03-211218 JASCOME

密度型トポロジー最適化における密度更新パラメータに関する考察

CONSIDERATION ON NUMERICAL PARAMETERS IN DENSITY UPDATE EQUATION USED IN THE DENSITY-BASED TOPOLOGY OPTIMIZATION

岸田　真幸 [1)]，倉橋　貴彦 [2)]

Masayuki KISHIDA and Takahiko KURAHAHSHI

1) 長岡技術科学大学大学院工学研究科　(〒 940-2188　長岡市上富岡町 1603-1,　E-mail: s173029@stn.nagaokaut.ac.jp)
2) 長岡技術科学大学大学院工学研究科　(〒 940-2188　長岡市上富岡町 1603-1,　E-mail: kurahashi@mech.nagaokaut.ac.jp)

In this paper, the importance of density update in density-based topology optimization is described. In density-based topology optimization, the optimality criteria method is generally employed. However, this method has arbitrary parameters, which are the weighting factor and the move-limit. These parameters are difficult for engineers to understand because they are parameters employed in numerical calculations. Thus, we performed the topology optimization analysis using a modified optimality criteria method where the weighting factor is not required. The need for update parameters, which are the weighting factor and move-limit, is demonstrated through numerical simulation for several example problems.

Key Words: Topology Optimization, Optimality Criteria Method, Weighting Factor

1. はじめに

近年，3D プリンタにより製造の自由度が増し，複雑な構造でも製造することが可能になってきた．それに伴い，モノづくりの分野においても材料コスト削減や性能向上のために，トポロジー最適化 [(1)] が注目されている．本研究で扱う密度法に基づくトポロジー最適化は，構造最適化の中の 1 つであり，特定の設計空間を分割し，分割された要素内に無次元密度（以降，密度と略す.）を設け，密度の値によりその要素に材料が必要か否かを数値解析により求めることで，構造の形態を得る最適化手法である．一方で，未だにトポロジー最適化の技術は実際のモノづくりに適用することに対して，いくつか課題がある．その中の 1 つに最適化解析を行う際のパラメータ設定がある．このパラメータ設定は，材料定数などの物理的な意味を持つパラメータではなく，数値計算をする上で必要なパラメータのことである．このパラメータを任意設定ではなく，数値計算により導出することで，トポロジー最適化を使用する設計者の負担を減らし最適な結果を提供することが重要であると考える．

本研究で扱う密度法に基づくトポロジー最適化においても，いくつか設定すべきパラメータが存在する．本論文では，その中でも更新に関するパラメータであるダンピングパラメータとムーブリミットに関して注目している．ダンピングパラメータは最適性基準法 [(2, 3)](Optimality Criteria method，以降，OC 法と略す．) における更新の速度に関するパラメータであり，ムーブリミットは反復計算ごとで更新される密度の更新範囲を表すパラメータである．従来法の OC 法ではダンピングパラメータを一定とするが，著者らは近年，ダンピングパラメータを反復計算ごとで算出する修正最適性基準法 [(4)](Modified Optimality Criteria method，以降，修正 OC 法と略す．) における密度更新式を提案した．

本論文では，ダンピングパラメータを反復計算ごとで算出する修正 OC 法と，ダンピングパラメータを定数として与える OC 法についてそれぞれ数値実験を行い，修正 OC 法の性能を評価する．また，数値解析例として，定常問題における構造を対象としたひずみエネルギー最小化を対象とする．本論文では，2 節にトポロジー最適化の理論を，3 節にトポロジー最適化の流れを，4 節に数値解析例を示す．

2. トポロジー最適化の理論

本節では，2 次元定常問題における構造を対象とした密度法に基づくトポロジー最適化に関して説明する．また本論文では，平面ひずみ問題を想定している．

2.1. 最適化問題と定式化

本論文では，設計領域 Ω 内の体積が目標体積を満たすように，ひずみエネルギーが最小となる最適な密度分布を求めることを目的としている [(5)]．式 (1) に評価関数であるひずみエネルギーを，式（2）に線形弾性体における離散化され

2021 年 9 月 28 日受付，2021 年 10 月 30 日受理

た支配方程式をそれぞれ示す．加えて，式 (3) に体積制約を，式 (4) に密度制約を示し，制約式として用いる．本論文では，密度法により最適な材料分布を表している．設計変数である密度 ρ_e が 1 の時は材料あり（材料）を表しており，0 の時は材料なし（空洞）を表している．また，その他の値は，グレースケールと呼ばれる中間材料を表している．以上より，最適化問題は次のように定式化される．

$$\text{minimize} \quad J = \int_\Omega \frac{1}{2} \{u(\rho_e)\}^T [K(\rho_e)] \{u(\rho_e)\} d\Omega \tag{1}$$

$$\text{subject to} \quad [K(\rho_e)] \{u(\rho_e)\} = \{f\} \tag{2}$$

$$V = \int_\Omega \frac{v_e \rho_e}{V_{\text{total}}} d\Omega - \overline{\rho_0} \leq 0 \tag{3}$$

$$0 \leq \rho_e \leq 1 \tag{4}$$

ここで，$[K]$，$\{u\}$，$\{f\}$ は，剛性マトリックス，変位ベクトル，荷重ベクトルをそれぞれ表す．また，v_e，V_{total}，$\overline{\rho_e}$ は，要素 e の面積，設計領域 Ω 内の総面積，設計領域 Ω 内の初期密度の平均をそれぞれ表す．上付き添え字 T は転置である．本論文では，密度法 [6, 7] の中でも一般的な手法である SIMP 法 [8] を用いており，要素に設計変数である密度を与えている．式 (5) に SIMP 法における材料表現の方法を示す．

$$E_e = E_0 {\rho_e}^p \tag{5}$$

ここで，E_0，p はある材料のヤング率，ペナルティパラメータをそれぞれ表す．しかし，式 (5) では数値的不安定性があるため，それを回避するために以下の式を用いる．

$$E_e = (E_0 - E_{\min}) {\rho_e}^p + E_{\min} \tag{6}$$

ここで，$E_{\min}$ は式 (2) に示した支配方程式を解く際に剛性マトリックス $[K]$ のランクが異なることで生じる数値的不安定を回避するためのパラメータであり，E_0 と比べ極めて小さな値である．最小化問題を解くために，ラグランジュ未定乗数法を用いる．評価関数である式 (1) と支配方程式である式 (2) より，ラグランジュ関数 J^* は以下の式で求まる．

$$\begin{aligned} J^* &= J + \frac{1}{2} \int_\Omega \{\lambda\} ([K]\{u\} - \{f\}) d\Omega \\ &= \int_\Omega J_e^* d\Omega \end{aligned} \tag{7}$$

ここで，$\{\lambda\}$ はラグランジュ未定乗数である．また，J_e^* は要素 e におけるラグランジュ関数を表す．式 7 の第一変分を取ることで，$\{\lambda\} = -\{u\}$ という関係が計算により得られる．この関係のことを自己随伴と呼ぶ．この自己随伴を用い，密度 ρ_e に対するラグランジュ関数 J^* の勾配である感度は次のように求まる．

$$\begin{aligned} \frac{\partial J^*}{\partial \rho_e} &= \frac{1}{2} \{\lambda\}^T \frac{\partial [K]}{\partial \rho_e} \{u\} \\ &= -\frac{1}{2} \{u\}^T \frac{\partial [K]}{\partial \rho_e} \{u\} \end{aligned} \tag{8}$$

最適化問題は感度により設計変数を更新するが，密度を要素に与えた場合のトポロジー最適化ではチェッカーボードと呼ばれる市松模様の分布を避ける必要がある．そのため，本研究では Borrval が提案した感度にフィルターを課す方法 [9] を用いる．ここで，式 (3) に示す体積制約を考慮するために，拡張ラグランジュ関数を式 (9) に示す．

$$L = \overline{J^*} + \Lambda V \tag{9}$$

ここで，$\overline{J^*}$，Λ はフィルタリングされたラグランジュ関数 J^*，拡張ラグランジュ未定乗数をそれぞれ表す．また，密度 ρ_e に対する拡張ラグランジュ関数 L を式 (10) に示す．

$$\frac{\partial L}{\partial \rho_e} = \frac{\partial \overline{J^*}}{\partial \rho_e} + \Lambda \frac{\partial V}{\partial \rho_e} \tag{10}$$

式 (10) に示した密度 ρ_e に対する拡張ラグランジュ関数 L の勾配を用いて，設計変数を更新するために，式 (11) に示す OC 法を適用する．

$$\begin{aligned} {\rho_e}^{(k+1)} &= {\rho_e}^{(k)} \left(\frac{\frac{\partial \overline{J_e^*}}{\partial \rho_e}^{(k)}}{-\Lambda^{(k)} \frac{\partial V}{\partial \rho_e}^{(k)}} \right)^\eta \\ &= {\rho_e}^{(k)} \left(A^{(k)} \right)^\eta \end{aligned} \tag{11}$$

ここで，η はダンピングパラメータを表す．拡張ラグランジュ未定乗数 Λ は，更新後の密度 ${\rho_e}^{(k+1)}$ が体積制約を満たすように，二分法を用いて算出される．また，上付き添え字 (k) は反復回数である．式 (11) より，密度 ρ_e に対するフィルタリングされたラグランジュ関数 $\overline{J_e^*}$ の勾配は常に負となり，ラグランジュ未定乗数 Λ および密度 ρ_e に対する体積制約 V の勾配は正になり，括弧内の A は常に正になることが分かる．しかし，式 (11) で示した OC 法により更新を行う場合，評価関数が単調に減少しない可能性がある．それにより，材料分布が最適な分布とはいえない分布結果が得られる可能性がある．そのため，更新に対しても式 (12) に示す制約を設ける．

$${\rho_e}^{(k+1)} = \begin{cases} {\rho_e}^{L(k)} & \left({\rho_e}^{(k)} \left(A^{(k)} \right)^\eta \leq {\rho_e}^{L(k)} \right) \\ {\rho_e}^{U(k)} & \left({\rho_e}^{(k)} \left(A^{(k)} \right)^\eta \geq {\rho_e}^{U(k)} \right) \\ {\rho_e}^{(k)} \left(A^{(k)} \right)^\eta & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{12}$$

${\rho_e}^L$ および ${\rho_e}^U$ は式 (13) および (14) で表される．

$${\rho_e}^{L(k)} = \max \left\{ {\rho_e}^{(k)} - \varsigma, 0 \right\} \tag{13}$$

$${\rho_e}^{U(k)} = \min \left\{ {\rho_e}^{(k)} + \varsigma, 1 \right\} \tag{14}$$

ここで，ς はムーブリミットである．式 (13) および (14) に示す通り，仮にムーブリミット ς を 1 以上に設定した場合でも，式 (4) に示す制約を満たすような式となっている．

2.2. 修正 OC 法における密度更新の誘導

式 (11) に示した密度更新式は，密度法に基づくトポロジー最適化において一般的に用いられるが，ダンピングパラメータ η のような任意パラメータを設定する必要がある．しかし，ダンピングパラメータ η の設定は論文によりパラメータが異なり，OC 法が提案された論文内にも数値実験によって決定されるパラメータといった記載がされている．そこで，本項では，著者らが提案した適切なダンピングパラメータ η

を反復計算ごとで算出する修正 OC 法について説明する．まず，式 (11) に対して両辺に対数を取ると次式のようになる．

$$\ln \rho_e^{(k+1)} = \ln \rho_e^{(k)} + \eta \ln A^{(k)} \tag{15}$$

上式の右辺第 2 項が 0 になった際に密度 ρ_e が収束したことになるが，η は 0 ではないため最終的に $\ln A$ が 0 に収束することになる．このことから，$\ln A$ に対して Taylor 展開を適用する．

$$\ln A^{(k+1)} = \ln A^{(k)} + \Delta\rho_e \frac{\partial}{\partial \rho_e}\left(\ln A^{(k)}\right) + o\left(\Delta {\rho_e}^2\right) \tag{16}$$

ここで，$\Delta\rho_e$ は式 (17) に示すとおりである．

$$\Delta\rho_e = \ln \rho_e^{(k+1)} - \ln \rho_e^{(k)} \tag{17}$$

式 (16) 中の o は高次の項であり無視すると，次式が得られる．

$$\Delta\rho_e = \left(-\frac{\partial}{\partial \rho_e}\left(\ln A^{(k)}\right)\right)^{-1} \ln A^{(k)} \tag{18}$$

式 (17) に示した更新式に対して上式で求めた $\Delta\rho_e$ を代入する．

$$\begin{aligned} \ln \rho_e^{(k+1)} &= \ln \rho_e^{(k)} + \Delta\rho_e \\ &= \ln \rho_e^{(k)} + \left(-\frac{\partial}{\partial \rho_e}\left(\ln A^{(k)}\right)\right)^{-1} \ln A^{(k)} \end{aligned} \tag{19}$$

式 (19) は，Newton 法の式と似ていることが確認できる．加えて，式 (8) に示した感度と，後述する密度 ρ_e に対する感度の勾配の符号によっては解くことが困難な最適化問題もあることに注意しなければならない．次に，式 (19) を真数に戻すと次のようになる．

$$\rho_e^{(k+1)} = \rho_e^{(k)} \left(A^{(k)}\right)^{\left(-\frac{\partial}{\partial \rho_e}\left(\ln A^{(k)}\right)\right)^{-1}} \tag{20}$$

ここで，式 (20) の指数が，式 (11) に示した OC 法のダンピングパラメータ η に相当することが分かる．式 (3) に示した体積制約を用いる場合，式 (20) の指数は次のようになる．

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{\partial}{\partial \rho_e}(\ln A)\right)^{-1} \\ &= \left(\frac{-\frac{\partial^2 J_e^*}{\partial {\rho_e}^2}\Lambda\frac{\partial V}{\partial \rho_e} + \frac{\partial J_e^*}{\partial \rho_e}\frac{\partial}{\partial \rho_e}\left(-\Lambda\frac{\partial V}{\partial \rho_e}\right)}{\left(-\Lambda\frac{\partial V}{\partial \rho_e}\right)^2}\left(\frac{\frac{\partial J_e^*}{\partial \rho_e}}{-\Lambda\frac{\partial V}{\partial \rho_e}}\right)^{-1}\right)^{-1} \\ &= -\left(\frac{\partial^2 \overline{J_e^*}}{\partial {\rho_e}^2}\right)^{-1}\frac{\partial \overline{J_e^*}}{\partial \rho_e} \end{aligned} \tag{21}$$

ただし，式 (21) はすべて k ステップ目を表している．式 (5) に示した SIMP 法より，2 階微分は以下のように簡単に表すことができる．ここに，変位ベクトル $\{u\}$ は密度 ρ_e の関数とし，定式化する．

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \overline{J_e^*}}{\partial {\rho_e}^2} &= \frac{\partial}{\partial \rho_e}\left(-\frac{1}{2}\{\overline{u}\}^T\left[\overline{K}\right]\{\overline{u}\}\right) \\ &= -\frac{\partial \{\overline{u}\}^T}{\partial \rho_e}\frac{\partial \left[\overline{K}\right]}{\partial \rho_e}\{\overline{u}\} - \frac{1}{2}\{u\}^T\frac{\partial^2 \left[\overline{K}\right]}{\partial {\rho_e}^2}\{\overline{u}\} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \rho_e}\left(\{\overline{f}\}^T\left[\overline{K}\right]^{-1}\right)\frac{\partial \left[\overline{K}\right]}{\partial \rho_e}\{\overline{u}\} \\ &\quad -\frac{1}{2}\{\overline{u}\}^T\frac{\partial^2 \left[\overline{K}\right]}{\partial {\rho_e}^2}\{\overline{u}\} \\ &= -\{\overline{f}\}^T\frac{\partial \left[\overline{K}\right]^{-1}}{\partial \rho_e}\frac{\partial \left[\overline{K}\right]}{\partial \rho_e}\{\overline{u}\} \\ &\quad -\frac{1}{2}\{\overline{u}\}^T\frac{\partial^2 \left[\overline{K}\right]}{\partial {\rho_e}^2}\{\overline{u}\} \\ &= -\frac{\partial \overline{E_e}^{-1}}{\partial \rho_e}\frac{\partial \overline{E_e}}{\partial \rho_e}\{\overline{f}\}^T\left[\overline{K_s}\right]^{-1}\left[\overline{K_s}\right]\{\overline{u}\} \\ &\quad -\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \overline{E_e}}{\partial {\rho_e}^2}\{\overline{u}\}^T\left[\overline{K_s}\right]\{\overline{u}\} \\ &= p^2 {\rho_e}^{-2}\{\overline{f}\}^T\{\overline{u}\} \\ &\quad -\frac{1}{2}p(p-1){\rho_e}^{-2}\{\overline{u}\}^T\left[\overline{K}\right]\{\overline{u}\} \\ &= 2p^2 {\rho_e}^{-2}\overline{J_e} - p(p-1){\rho_e}^{-2}\overline{J_e} \\ &= (p+1)p{\rho_e}^{-2}\overline{J_e} \end{aligned} \tag{22}$$

ここで，$\left[\overline{K_s}\right]$ はヤング率を除いた剛性マトリックスである．この考え方を用いることで 1 階微分も同様に簡単に表すことができ，ダンピングパラメータに相当する式 (21) は次式のようになる．

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho_e}\left(\ln A^{(k)}\right)\right)^{-1} &= -\frac{-p{\rho_e^{(k)}}^{-1}\overline{J_e}^{(k)}}{(p+1)p{\rho_e^{(k)}}^{-2}\overline{J_e}^{(k)}} \\ &= \frac{\rho_e^{(k)}}{p+1} \end{aligned} \tag{23}$$

以上より，式 (23) を代入することで，式 (20) で示した修正 OC 法を次式のように表せる．

$$\rho_e^{(k+1)} = \rho_e^{(k)}\left(A^{(k)}\right)^{\frac{\rho_e^{(k)}}{p+1}} \tag{24}$$

3. トポロジー最適化の流れ

本節では，密度法に基づくトポロジー最適化の計算の流れについて説明する．

Step 1: 解析モデルや解析条件の入力を行う．

Step 2: 式 (2) に示した線形弾性体における支配方程式を解き，変位ベクトル $\{u\}$ を算出する．

Step 3: Step 2 で求めた変位ベクトル $\{u\}$ を用いて，式 (1) に示したひずみエネルギーである評価関数を計算する．

Step 4: $k > 0$ の時，収束判定式 $\left|J^{(k+1)} - J^{(k)}\right| / J^{(0)} < \varepsilon$ を満たした場合，計算を終了し，満たさない場合は次のステップへ進む．

Step 5: 式 (8) に示された感度を計算する．

Step 6: Step 5 で求めた感度に対して，フィルタリングを施す．

Step 7: 更新式を用いて密度を更新し，Step 2 に戻る．

本解析では，OC 法と修正 OC 法を比べるため，上記の Step 7 の更新式を変更する．また，解析条件によっては収束しない問題もあることから，最大反復回数 k_{max} を設けており，反復回数を上限を超えた場合には計算を終了する．

4. 数値解析例

本節では，次の 2 つについて数値解析結果を含め述べていく．1 つ目に，従来法である OC 法の結果を基に，前述した修正 OC 法を用いた場合でも正しく解が求まるかの確認を行う．2 つ目に，ムーブリミットを大きく設定し，更新に対して制約がない条件でのダンピングパラメータ η の設定の重要性について述べる．解析例題として，一般的なモデルである片持ちはりモデルと単純支持はりの対称モデルを解析モデルとする．

4.1. 解析条件

本項では，トポロジー最適化解析を行う対象モデルとパラメータ設定について説明する．解析モデルとなる片持ちはりモデルおよび単純支持はりの対称モデルを Figs. 1 および 2 に示す．また，解析条件は Table 1 に示される．一様に与えられる初期密度の平均値は，Fig. 1 に示す片持ちはりモデルでは 0.5 と設定し，Fig. 2 に示す単純支持はりの対象モデルでは 0.3 と設定している．Fig. 1 に示す片持ちはりモデルの荷重は Y 軸座標 18 [mm] から 24 [mm] の範囲に 90 [N] を与えている．一方，Fig. 2 に示す単純支持はりの対象モデルの荷重は座標 (0,40) の位置に 10 [N] を与えている．どちらのモデルもメッシュは 1 辺が 1 [mm] の正方形メッシュとしている．更新手法，ダンピングパラメータ η，ムーブリミット ς に関しては，表 2 に示すように解析によって変更しているため，各項ごとで詳しく説明する．

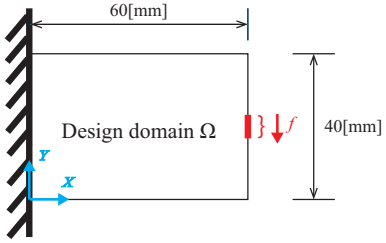


Fig. 1: Cantilever beam model.

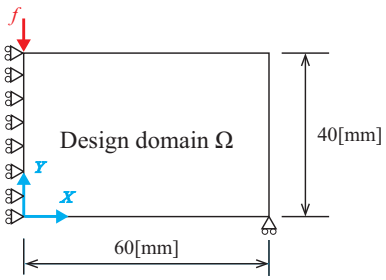


Fig. 2: Symmetrical model of simple supported beam.

Table 1: Calculation conditions for topology optimziation based on the density method.

Number of elements	2400
Number of nodes	2501
Initial density average, $\overline{\rho_0}$	$0.5, 0.3$
Penalization parameter, p	3.0
Filter radius for sensitivity filter	1.5
Convergence criterion, ε	1.0×10^{-4}
Maximum number of iterations, k_{max}	200
Young's modulus, E_0 [Pa]	1.0×10^{6}
Poisson ratio, ν	0.3

Table 2: Conditions for numerical example.

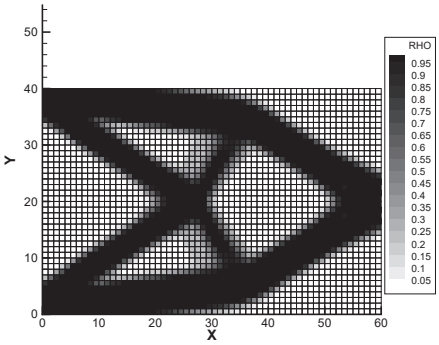
Case No.	Update method	η	ς
Case 1	OC method	0.75	0.005
Case 2	Modified OC method	–	0.005
Case 3	OC method	0.75	1.00
Case 4	Modified OC method	–	1.00
Case 5	OC method	0.25	1.00
Case 6	OC method	0.125	1.00

4.2. OC 法および修正 OC 法の適用

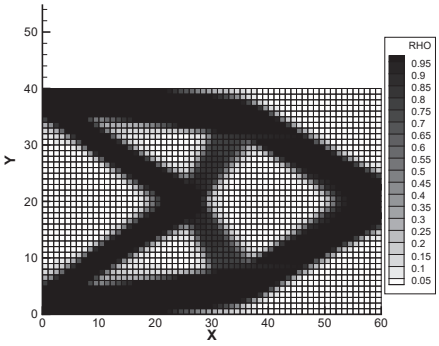
本項では，OC 法と修正 OC 法の結果を比較し，結果に違いがあるかを確認する．すなわち，Table 2 に示す Case 1 と Case 2 の結果を比較する．まず，解析に用いるパラメータ設定について説明する．修正 OC 法にはダンピングパラメータ η の設定は必要ないが，OC 法には設定する必要がある．そのため，文献 [10] を参考にダンピングパラメータ η は 0.75 と設定し，ムーブリミット ς は解の探索が正しく行えるように 0.005 とする．まず，Fig. 1 に示す片持ちはりモデルのトポロジー最適化の結果について述べていく．Fig. 3a に OC 法を用いた場合である Case 1 の収束時の密度分布を，Fig. 3b に修正 OC 法を用いた場合である Case 2 の収束時の密度分布をそれぞれ示す．また，Fig. 4 に Case 1 および Case 2 の評価関数の履歴を示す．Fig. 3a と Fig. 3b を比べても，大きな違いは見られない密度分布となっており，Fig. 4 に示す通り，評価関数のグラフの軌跡も大きな違いが見られない．

次に，Fig. 2 に示す単純支持はりモデルのトポロジー最適化の結果について述べていく．Fig. 5a に OC 法を用いた場合である Case 1 の収束時の密度分布を，Fig. 5b に修正 OC 法を用いた場合である Case 2 の収束時の密度分布をそ

れぞれ示す．また，Fig. 6 に Case 1 および Case 2 の評価関数の履歴を示す．片持ちはりモデルの評価関数の結果と同様に，Fig. 6 に示した単純支持はりモデルの場合の評価関数も軌跡に大きな違いが見られなかった．一方で，Fig. 5a に示した Case 1 での収束時の密度分布と Fig. 5b に示した Case 2 での収束時の密度分布を比べると，異なる材料分布になっている．以上のことから，手法もしくはパラメータ設定により得られる収束時の密度分布が異なることが確認できる．次項では，更新制約を除いた場合の最適化問題について述べていく．



(a) Case 1.



(b) Case 2.

Fig. 3: Density distribution at convergence for cantilever beam model (when movelimit $\varsigma = 0.005$).

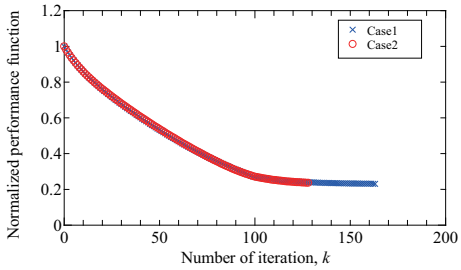
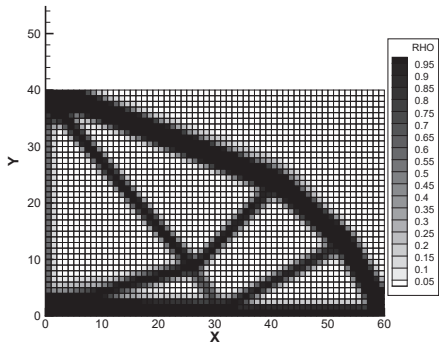
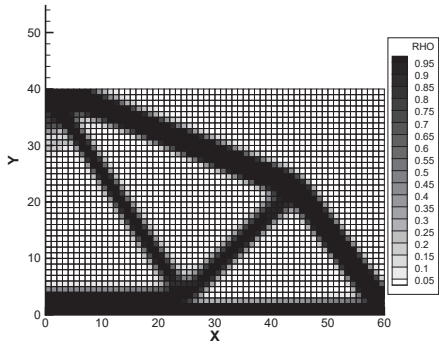


Fig. 4: History of normalized performance functions for cantilever beam model in Cases 1 and 2.



(a) Case 1.



(b) Case 2.

Fig. 5: Density distribution at convergence for symmetrical model of simple supported beam (when movelimit $\varsigma = 0.005$).

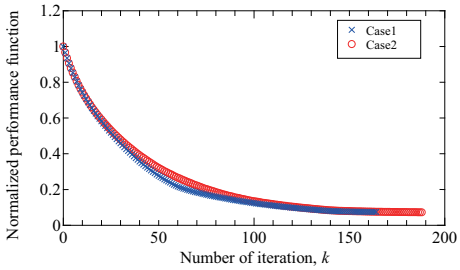


Fig. 6: History of normalized performance functions for symmetrical model of simple supported beam in Cases 1 and 2.

4.3. ムーブリミット ς による更新制約を除いたトポロジー最適化

次に，式 (12) に示したムーブリミット ς による更新制約を除いた場合のトポロジー最適化解析について，Fig. 1 に示した片持ちはりモデルと Fig. 2 に示した単純支持はりモデルの両方を用いて検討を行う．本論文では，ムーブリミット ς を 1 以上に設定することで，式 (12) に示した更新制約を設けない問題と同じになる．そのため，ムーブリミット ς を 1.00 とする．また，OC 法のパラメータであるダンピングパラメータ η は，前項と同様に 0.75（Case 3），式 (23) より

密度 ρ_e が 1.0 の時の値である 0.25（Case 5），式 (23) より密度 ρ_e が 0.5 の時の値である 0.125（Case 6）の 3 つの条件を解析する．加えて，ムーブリミット ς を 1.00 とした際の修正 OC 法を用いた条件（Case 4）も解析する．始めに，Fig. 1 に示した片持ちはりモデルのトポロジー最適化の結果について述べていく．Figs. 9a〜9d に Cases 3〜6 における収束時の密度分布をそれぞれ示し，Fig. 7 に Case3 における評価関数の履歴を，Fig. 8 に Cases 4〜6 における評価関数の履歴をそれぞれ示す．まず，Case 3 の解析結果について述べる．Case 3 は従来のトポロジー最適化において悪い条件設定であることから，Fig. 9a に示す密度分布は荷重点と固定端が明確に繋がっておらず最適な分布でないことが分かる．また，Fig. 7 に示す評価関数の履歴も同様に発散傾向にあることが分かる．一方，修正 OC 法を用いた際の収束時の密度分布である Fig. 9b は，前項で述べた Figs. 3a および 3b と似た密度分布が得られていることが確認できる．修正 OC 法における更新速度を表すパラメータである式 (23) は，ペナルティパラメータ p が 3 と設定していることから，0〜0.25 の範囲となる．そのため，ダンピングパラメータ η が 0.75 と設定している Fig. 9a や Fig. 7 に示すように評価関数が発散するような密度分布は得られなかった．そこで，ダンピングパラメータ η を通常より小さく設定した Case 5 と Case 6 の密度分布を確認する．Fig. 9c に Case 5 における収束時の密度分布を，Fig. 9d に Case 6 における収束時の密度分布をそれぞれ示す．Fig. 9c と Fig. 9d の密度分布は似た分布となっているが，前項で述べた Fig. 3a や Fig. 3b とは若干異なる密度分布となった．Cases 1，2，4 では中央から 4 方向に密度が分布しているが，Cases 5，6 では中央から 6 方向に密度が分布している．評価関数は，Fig. 7 に示した Case 3 を除き，Fig. 4 と Fig. 8 に示したどの条件においても，極小値に収束していることが確認できる．次に，Fig. 2 に示した単純支持はりモデルのトポロジー最適化の結果について述べていく．Figs. 10a〜10d に Cases 3〜6 における収束時の密度分布をそれぞれ示し，Fig. 11 に Case3 における評価関数の履歴を，Fig. 12 に Cases 4〜6 における評価関数の履歴をそれぞれ示す．まず，Case 3 の結果について述べる．Case 3 における収束時の密度分布である Fig. 10a は，前項で述べた Cases 1 および 2 の結果である Figs. 5a および 5b と比べ，トラス構造が少なく，はりの上部に 2 つの空洞が確認できる．また，Fig. 11 より，評価関数は単調な減少傾向ではなく，最初の方の反復回数にて評価関数が振動していることが確認できる．次に Cases 4〜6 の結果について述べていく．Fig. 10b〜10d より，Cases 4〜6 における収束時の密度分布はほぼ同じような結果が得られた．加えて，Fig. 12 に示した評価関数の履歴も極小値に収束していることが確認できる．しかし，Fig. 10b よりも，Figs. 10c および 10d の方がはり上部の空洞が若干大きく見える．また，OC 法を適用した際に得られた Figs. 5a，10a，10c および 10d は，異なる密度分布が得られていることが分かり，パラメータ設定により得られる密度分布が変わってしまうことが今回の数値実験で証明された．一方で，修正 OC 法を適用した際に得られた Figs. 5b および 10b は，OC 法を適用した際の結果と比べ大きな違いは見られなかった．

以上のことから，修正 OC 法はダンピングパラメータ η やムーブリミット ς といった密度更新に関するパラメータを必要とせず，ある程度同じ密度分布が得られることが確認できた．また，密度更新に関する制約を除いた場合において，OC 法を使用したとしても，ある程度適切なパラメータを設定することで得られる密度分布は異なるが，1 つの解となる結果が得られることが確認できた．また，異なる結果でもある程度同じひずみエネルギーになっていることから，ひずみエネルギーを最小化とするトポロジー最適化解析により最適解が得られているのではないかと推測できる．一方で，異なる結果を得られていることから，いくつかの局所的最適解が得られたことを意味する．1 節でも述べたように設計者の立場を考えると，数値計算に必要なパラメータによって結果が異なることはなるべく避けるべきであると考える．結果より，安易にダンピングパラメータ η やムーブリミット ς を小さく設定してよいとは言えないことが本結果から分かる．そのため，本研究で誘導した修正 OC 法による密度更新式は設計者に依存しない適切な更新式であると言える．

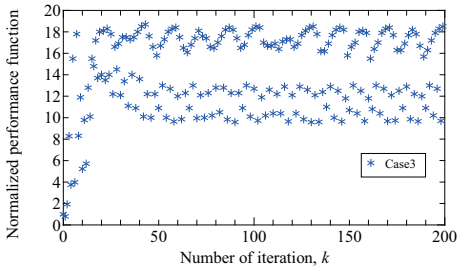


Fig. 7: History of normalized performance function for cantilever beam model in Case 3.

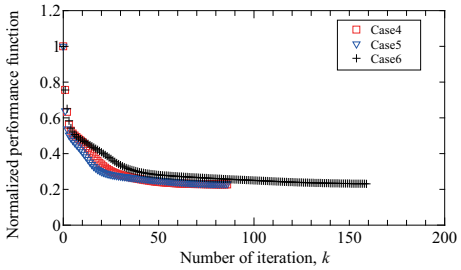
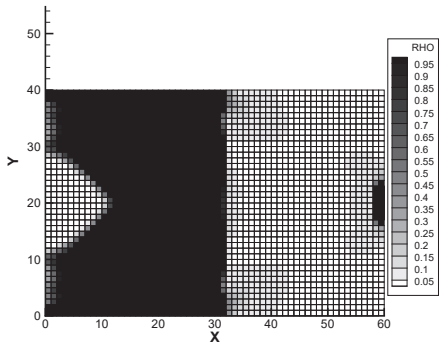
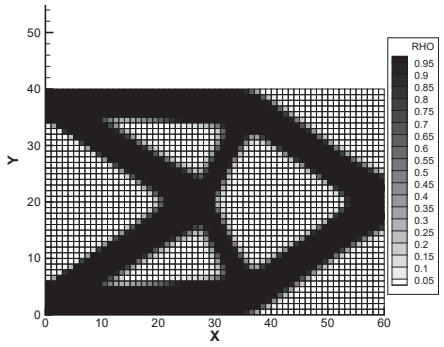


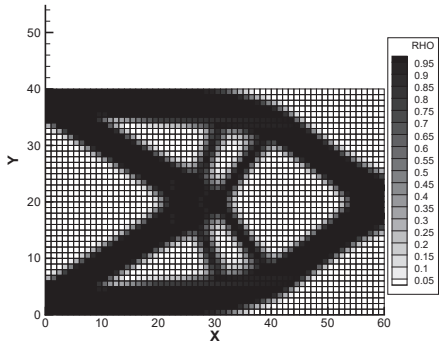
Fig. 8: History of normalized performance functions for cantilever beam model in Cases 4 to 6.



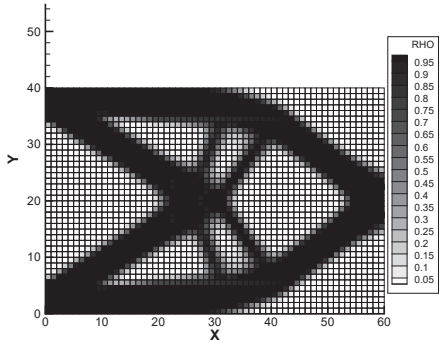
(a) Case 3.



(b) Case 4.

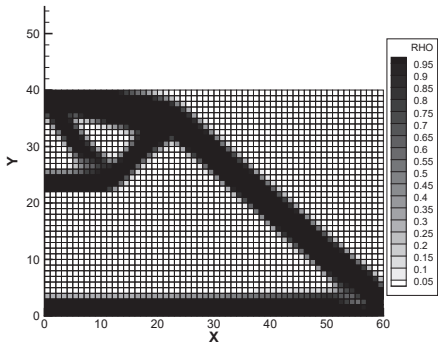


(c) Case 5.

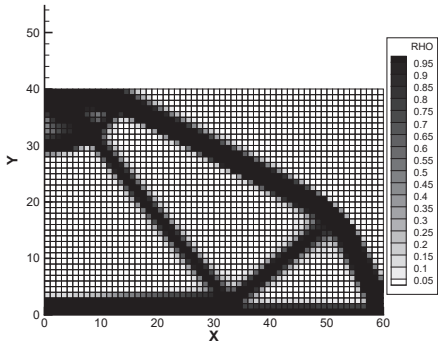


(d) Case 6.

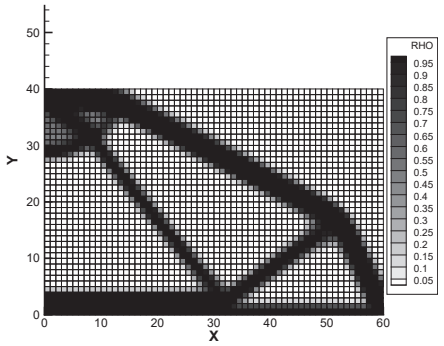
Fig. 9: Density distribution at convergence for cantilever beam model (when movelimit $\varsigma = 1.00$).



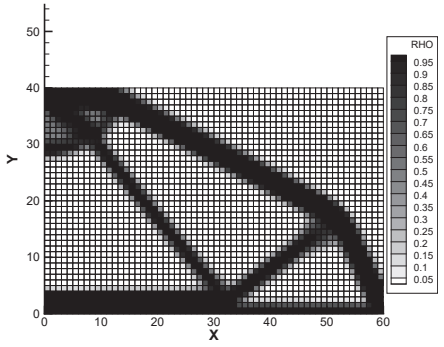
(a) Case 3.



(b) Case 4.



(c) Case 5.



(d) Case 6.

Fig. 10: Density distribution at convergence for symmetrical model of simple supported beam (when movelimit $\varsigma = 1.00$).

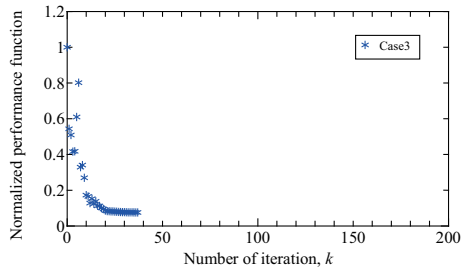


Fig. 11: History of normalized performance function for symmetrical model of simple supported beam in Case 3.

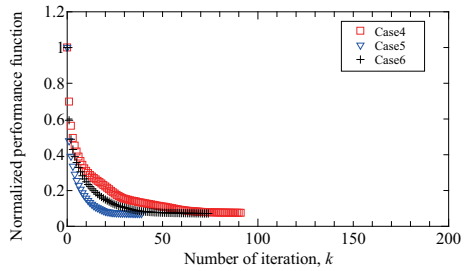


Fig. 12: History of normalized performance functions for symmetrical model of simple supported beam in Cases 4 to 6.

5. まとめ

本論文では，2 次元弾性体を対象に密度法に基づくトポロジー最適化における密度更新式の更新パラメータに関して考察を行った．モデルは一般的な片持ちはりモデルと単純支持はりの対称モデルの 2 つとした．評価関数にはひずみエネルギーを用いており，ひずみエネルギーが最小化となる密度分布を求めた．フィルタリング手法には感度にフィルターを課す方法を用いており，密度の更新式には従来法である OC 法と修正 OC 法をそれぞれ用いた．OC 法では更新パラメータであるダンピングパラメータ η を解析ごとに設定する必要があるが，修正 OC 法ではそれを設定する必要がない．まず始めの例題で，ムーブリミット ς と呼ばれる更新制約に関するパラメータを小さく設定した場合で，どちらの手法も正しく探索できることを確認した．片持ちはりの場合は同じよう暗密度分布が得られたが，単純支持はりの場合は異なる密度分布が得られた．次の例題では，ムーブリミット ς を大きくし，更新に関する制約を無くした場合のトポロジー最適化を行った．前の例題で用いたダンピングパラメータ η（Case 3）に加え，小さくしたダンピングパラメータ η（Cases 5，6）と，修正 OC 法を用いた場合（Case 4）の 4 つを対象とした．結果として，どちらのモデルも Cases 4〜6 は評価関数がほぼ同じ値に収束した．しかし，OC 法ではダンピングパラメータ η やムーブリミット ς の値によって収束時の密度分布が異なることが確認できた．一方で，修正 OC 法では明確な違いが見られず，ダンピングパラメータ η やムーブリミット ς の値の設定が必要ないことが確認できた．設計者の立場を考えると，トポロジー最適化における任意パラメータの設定が不要で，同じ結果が出る修正 OC 法の方がよいと言える．本論文では，定常問題におけるひずみエネルギー最小化を最適化問題を対象としたが，本論文中で用いた修正 OC 法の適用が困難な問題もある．そのため，別問題への検討と修正 OC 法の改良が今後の課題である．

なお，本研究を行うにあたり，科学研究費補助金（基盤（C））18K03897 の援助およびオイレス工業株式会社の助成金を受けた．また，本論文中に示した数値計算を行うにあたり，九州大学情報基盤研究開発センターのスーパーコンピュータシステム ITO を利用させて頂いた．ここに謝意を表す．

付録 A

式 (5) に示した SIMP 法における材料表現の方法の式中に含まれるペナルティパラメータ p は，Hashin-Shtrikman の境界条件 [11] より p の設定範囲が決められる．式 (25) は，2 次元の場合の Hashin-Shtrikman の境界条件より得られる条件式である．

$$p \geq \max\left\{\frac{2}{1-\nu}, \frac{4}{1+\nu}\right\} \tag{25}$$

しかし，式 (25) はペナルティパラメータ p の範囲であり，実在する材料との対応を厳密に評価しているわけではない．また，一般的にペナルティパラメータ p を低く設定した場合にはグレースケールと呼ばれる中間材料を表す分布が存在し，密度分布が不明瞭になる問題が知られている．式 (24) に示すように，本論文中で説明した修正 OC 法の式中にも更新パラメータとして含まれている．ここでは，グレースケールに関して注目するため，ペナルティパラメータ p を低く設定する場合のトポロジー最適化結果について述べていく．

解析条件として，4 節で述べた条件である Case 1，Case 4，Case 5 に加え，Case 7（ダンピングパラメータ $\eta = 0.75$，ムーブリミット $\varsigma = 0.15$）の 4 つを用いる．また，ペナルティパラメータ p は 2.0 とする．Figs. 15 および 16 に，片持ちはりモデルおよび単純支持はりモデルを対象とした 4 つの条件下でのトポロジー最適化解析を行った際の収束時の密度分布をそれぞれ示し，Figs. 13 および 14 に付録で検討したトポロジー最適化解析の評価関数の履歴を示す．ただし，Figs. 15 および 16 はグレースケールが見えやすいようにメッシュの線を非表示にしている．まず，片持ちはりモデルの結果から述べていく．Figs. 15a〜15d に示した収束時の密度分布より，Cases 5 および 7 にグレースケールがあることが確認できる．Cases 5 および 7 の結果である Figs. 15c および 15d は，4 節で述べた Figs. 9c および 9d に似た結果であり，Figs. 9c および 9d よりもグレースケールが見られる．これは，付録の冒頭で述べたグレースケールの増加傾向と同じであることが確認できた．一方で，Fig. 15b に示した修正 OC 法を用いた場合の Case 4 の結果は，ペナルティパラメータ p を変更した場合においても，4 節で述べた Fig. 9b と同じ結果に

なった．評価関数は，Fig. 13 より，すべての条件で極小値に収束していることが確認できる．次に，単純支持はりモデルの結果について述べていく．Figs. 16a および 16d に示した収束時の密度分布より，どの条件でも多少のグレースケールが見られたが，特に Case 1 ではグレースケールが多く見られる．加えて，Case 1 である Fig. 16a は 4 節で述べた収束時の密度分布の結果である Fig. 5a と同じとなった．また，Cases 4，5，7 である Figs. 16b，16c，16d とは異なる密度分布が得られていることが分かる．評価関数は，Fig. 14 より，片持ちはりモデルの結果と同様に，すべての条件で極小値に収束していることが確認できる．以上のことから，従来の OC 法を用いた場合（Cases 1，5，7）では，パラメータ設定によってグレースケールを抑制できる可能性があることを確認できたが，モデルによって傾向が変わってしまうことが結果より言える．一方で，修正 OC 法を用いた場合（Case 4）では，ペナルティパラメータ p を変えた場合でも，OC 法よりグレースケールが抑制できることが確認できた．しかし，完全に抑制できるわけではないので，ある程度適切なペナルティパラメータ p を設定する必要があると言える．

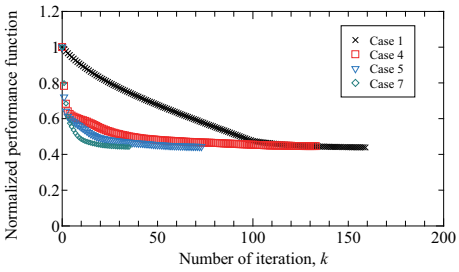


Fig. 13: History of normalized performance functions for cantilever beam model in Cases 1, 4, 5, and 7 (when penalization parameter $p = 2.0$).

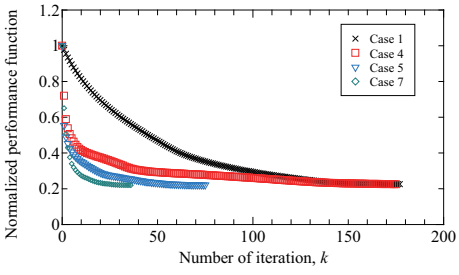
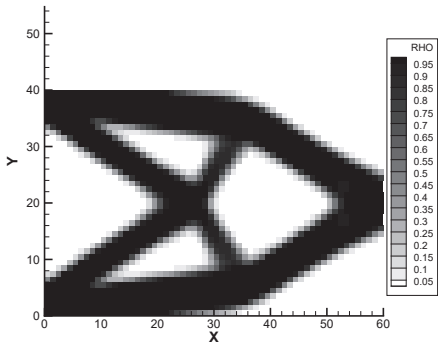
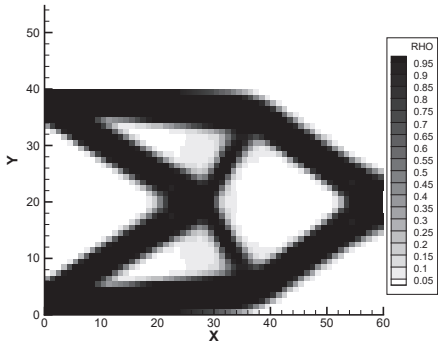


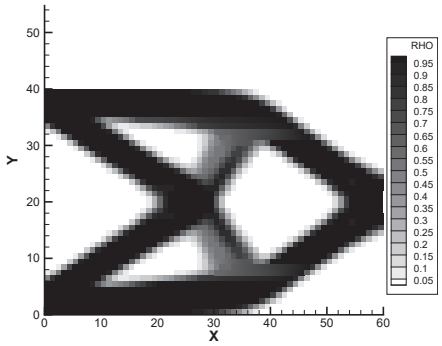
Fig. 14: History of normalized performance functions for symmetrical model of simple supported beam in Cases 1, 4, 5, and 7 (when penalization parameter $p = 2.0$).



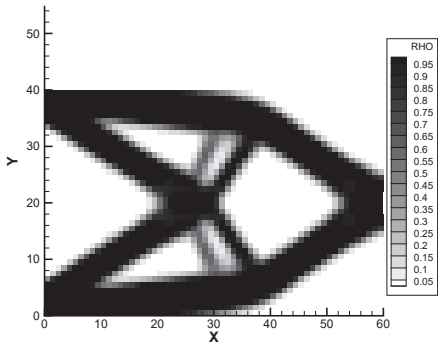
(a) Case 1.



(b) Case 4.

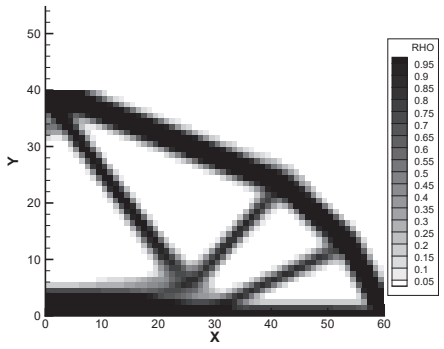


(c) Case 5.

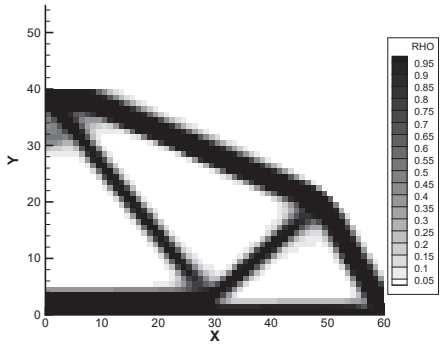


(d) Case 7.

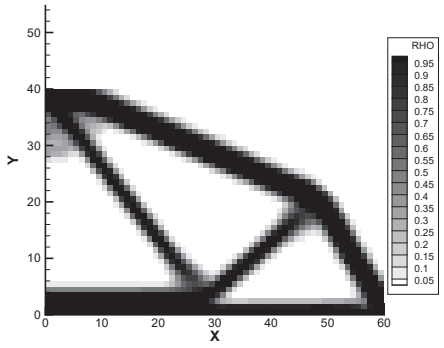
Fig. 15: Density distribution at convergence for cantilever beam model (when penalization parameter $p = 2.0$).



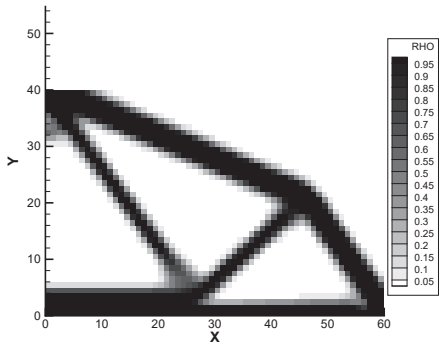
(a) Case 1.



(b) Case 4.



(c) Case 5.



(d) Case 7.

Fig. 16: Density distribution at convergence for symmetrical model of simple supported beam (when penalization parameter $p = 2.0$).

参考文献

(1) M.P.Bendsøe, O.Sigmund：Topology Optimization Theory, Methods and Applications, (2003), Springer.

(2) M.P.Bendsøe, N.Kikuchi：Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **71**(1988), pp. 891–909.

(3) K.Suzuki, N.Kikuchi： A homogenization method for shape and topology optimization, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **93(3)**(1991), pp. 291–318.

(4) M.Kishida, T.Kurahashi：Proposal of Optimality Criteria Method Considering the Newton's Method in Topology Optimization Problems Based on the Density Method, Computational Science and AI in Industry, CT07-Innovations in AI and Computational Sciences, Industrial application cases, June 9th 2021.

(5) O.Sigmund, K.Maute： Topology optimization approaches, Structural and Multidisciplinary Optimization, **48**(2013), pp. 1031–1055.

(6) R.Yang, C.Chuang： Optimal topology design using linear programming, Computers & Structures, **52(2)**(1994), pp. 265–275.

(7) H.Mlejmek, R.Schirrmacher：An engineer's approach to optimal material distribution and shape finding, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **106(1)**(1993), pp. 1–26.

(8) M.P.Bendsøe, O.Sigmund： Material interpolation schemes in topology optimization, Achive of Applied Mechanics, **69(9)**(1999), pp. 635–654.

(9) T.Borrvall： Topology optimization of elastic continua using restriction, Achives of Computational Methods in Engineering, **8(4)**(2001), pp. 351–385.

(10) 西脇眞二，泉井一浩，菊池昇：計算力学レクチャーコース トポロジー最適化，(2013)，丸善出版.

(11) Z.Hashin, S.Shtrikman： A variational approach to the theory of elastic behaviour of multiphase materials, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, **11**(1963), pp. 127–140.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 04-211218 JASCOME

機械学習や画像処理技術を援用した衛星画像からの被災箇所抽出に関する研究

STUDY ON EXTRACTION OF DISASTER AREA FROM SATELLITE IMAGE USING MACHINE LEARNING AND IMAGE PROCESSING TECHNOLOGY

妹尾 大輝 [1)], 久保 栞 [2)], 磯打 千雅子 [3)], 吉田 秀典 [4)]

Daiki SENO, Shiori KUBO, Chikako ISOUCHI and Hidenori YOSHIDA

1) 香川大学大学院工学研究科 (〒761-0396 香川県高松市林町 2217-20, E-mail: s21g404@stu.kagawa-u.ac.jp)
2) 東京大学生産技術研究所 (〒277-8574 千葉県柏市柏の葉 5-1-5, E-mail: shiori_kubo@metall.t.u-tokyo.ac.jp)
3) 香川大学 四国危機管理教育・研究・地域連携推進機構 (〒760-8526 香川県高松市幸町 1-1, E-mail: isouchi.chikako@kagawa-u.ac.jp)
4) 香川大学創造工学部 (〒761-0396 香川県高松市林町 2217-20, E-mail: yoshida.hidenori@kagawa-u.ac.jp)

In recent years, heavy rain disasters which are occurred frequently in various parts of Japan are caused severe damages. It is important to identify the damaged area for recovery and reconstruction. In this study, we focus on optical satellite images that are easy to process and interpret, and estimate the damaged area by combining existing methods such as land cover classification by machine learning and additive color mixing method. As a result, it is possible to visually express the land cover changes before and after the disaster in a specific categories and estimate the damaged area.

Key Words: satellite image, machine learning, land cover classification, additive color mixture

1. 緒言

近年，地球規模の気候変動に起因して，大規模な豪雨災害が日本各地で頻発しており，治水構造物などの能力を上回るものが増加している．日本の平均気温は 100 年あたり 1.19 ℃の割合で上昇し，猛烈な雨（1 時間降水量 80mm 以上の雨）の年間発生回数も増加しているため，今後，さらに大規模な水災害が発生する可能性が高い．こうしたことを受け，風水害について事前の治水対策を行うことも重要であるが，被害が起きた後の治水構造物や企業・施設などの復旧・復興を迅速に進めていくことも重要であると言える．

豪雨災害の中でも広範囲におよぶ被害をもたらした平成 30 年 7 月豪雨では，豪雨の影響によって内水氾濫や土砂・洪水氾濫等の複合的な要因による被害が発生した．これより，災害把握に時間を要し，復旧・復興が難航したという課題が挙げられている [(1)]．したがって，災害後において広域にわたる被災箇所を把握することが重要であると言える．

広域におよぶ被災箇所の把握には，リモートセンシングにより得られた衛星画像が使用されることが多くなっている．特に，豪雨災害に関しては，災害直後，雲が多く発生するという点から，全天候型で昼夜観測が可能である合成開口レーダ（SAR:Synthetic Aperture Radar）を使用した研究が多く行われている．しかし，合成開口レーダは，処理が複雑かつ高価であるという課題があり，専門的な知識を持たないユーザーにとっては敷居が高いものとなっている．一方で，光学衛星画像は，豪雨による雨雲や台風通過後の晴天を狙った日中でしか観測が行えないが，可視光・近赤外など多くのバンド情報の取得が可能であり，合成開口レーダ

2021 年 10 月 7 日受付，2021 年 11 月 10 日受理

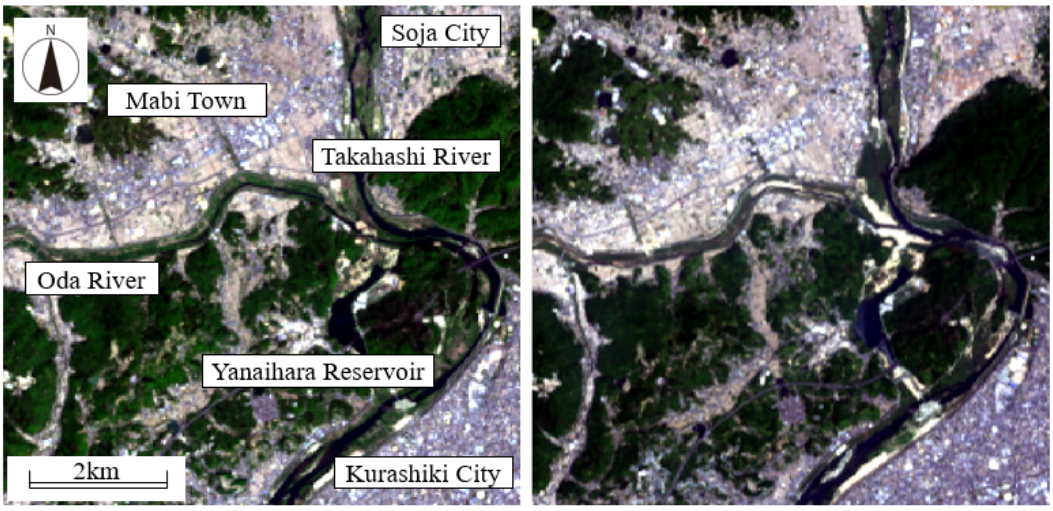


Fig.1　Optical satellite images of before(left) and after(right) disaster

と比較して判読が容易であるという利点がある．

衛星画像からの被災箇所抽出の手法については，金城ら [2] や本田ら [3] のように合成開口レーダを用いて浸水域を評価するなどの手法が多く提案されている．しかし，光学衛星画像に関しては，前述した撮影条件の課題から豪雨災害においての被災箇所抽出手法が少ないのが現状である．作野ら [4] や洲濱ら [5] のように光学衛星画像を使用した豪雨災害の災害観測も行われてはいるが，速報レベルの研究に留まっているものが多い．

本論文では，処理が容易で安価な光学衛星画像に着目し，機械学習と画像処理技術を組み合わせて被災箇所の抽出を行い，災害復旧・復興に有用な情報の取得を目指す．

2. 衛星画像データ

被災箇所の抽出を行うにあたり，産業技術総合研究所が提供する LandBrowser[6] という衛星データプラットフォームより，Landsat8（解像度 30m）の衛星画像を取得した．LandBrowser では，主に Landsat8，ASTER，Sentinel-2 の 3 種類の全球データが利用可能である．人工衛星はそれぞれに観測バンドを持ち，バンドごとに得られる画像を組み合わせて実際に近い色の画像を作成することができる．しかし，ASTER は青色に相当するバンドが存在せず，Sentinel-2 は LandBrowser の仕様でバンドごとの保存が不可能となっている．本研究では，バンドを組み合わせ，航空写真のようなカラー画像を分析に使用するため，可視域の波長を観測するバンドの保存が可能である Landsat8 のデータを採用した．提供されている Landsat8 の画像は，観測バンドごとに観測される波長が異なっているため，バンド単体ごとの画像では分析が行えない．そこで，オープンソースの地理情報システムツールである QGIS を使用し，赤，緑，青の波長を観測する Band 4，Band 3，Band 2 に対して RGB 合成を行った．RGB 合成を行った衛星画像データに関しては，災害前後の土地被覆変化により被災箇所を抽出するため，災害前の画像と災害後の画像を用意した（Fig. 1）．ここで，二時期の画像を分析する際の留意すべき点として，対象地域の季節による土地被覆変化が挙げられる．例えば，水田は河川に隣接した広い平野に存在し，さらに初夏の田植えの時期ならば水田に水が張っている．そのため，本来水域でない箇所が土地被覆分類などの画像分析によって水域として判断されてしまう可能性がある．水田の水位は季節ごとに管理されているため，同時期の画像データを使用することで，土地被覆分類を行う際にも同じカテゴリとして分類することができるようになる．こうしたことから二時期の画像分析を行う際は季節に注意して衛星画像を選定する必要がある．対象とした地域は，平成 30 年 7 月豪雨で甚大な被害を受けた岡山県倉敷市真備町である．真備町は，住居や構造物が少なく，山・ 草地といった植生が豊富な箇所が散見され，市街地周辺には田畑が広く分布している．また，Fig. 1 に示すように，東部を縦断するように流れる高梁川や真備町南部を流れる小田川，高梁川の流域付近にある貯水池など水域も多く存在している．真備町の地形の特徴として，真備町の北部にあたる山側は高くなっており，一方で南部の小田川付近は低い平野になっている．

また，使用する光学衛星画像の撮影日は以下の通りである．災害前の画像として，真備町での浸水被害がピークを迎えた 2018 年 7 月 7 日に最も近い日に撮影された 2018 年 4 月 20 日の画像を，災害後の画像として，災害発生日から約 10 ヶ月経過した 2019 年 5 月 25 日に撮影された画像を使用する．災害後の画像に関しては，人工衛星の周回軌道上の関係から，必ずしも対象地

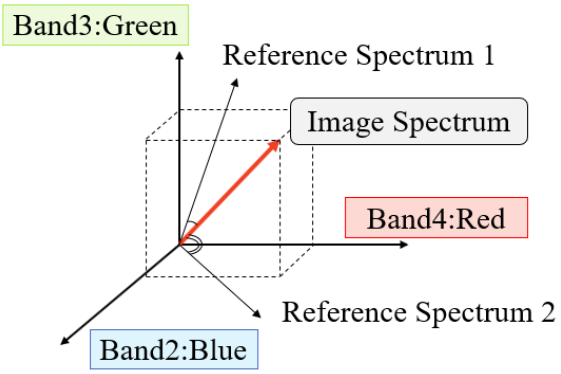


Fig2　Conceptual diagram of SAM

域の画像を撮影しているとは限らないため，災害発生日に直近で撮影されたものは LandBrowser では入手困難である．したがって，前述した留意点を踏まえ，誤分類を防ぐために災害発生日に直近であり，かつ季節の影響が少ない撮影時期のものを選択した．1 章において，発災時には治水構造物や企業・施設の復興・復旧を迅速に進めていくことが必要と記述したが，本来であれば災害直後の画像を使用することで迅速な被災箇所の把握が可能になる．しかし，本研究では以下に示す手法を用いることで，衛星画像から被災箇所が把握できるか否かを確認するため，取得が容易な衛星画像を使用している．その結果，手法の有用性が認められたならば，発災直後の衛星画像を用いたとしても，同様に被災箇所の抽出が可能であると言えよう．

3. 画像分析手法

本研究では，光学衛星画像に対し，機械学習手法を用いた土地被覆の分類を行った後，分類図に加色混合法を適用することで被災箇所を抽出する．

3.1. 機械学習手法

土地被覆分類を行う手段として，機械学習手法の中で教師つき分類という手法がある．教師つき分類とは，教師あり学習を画像処理に応用したもので，画像内に含まれる特定の地物の分類を教師データを用いて行う方法である．一般的に，分類前に特定箇所の地物が既知である場合，地物の特徴データを教師データとして分類する．教師つき分類のアルゴリズムの内，本研究では最尤法と SAM（Spectral Angle Mapping）を使用して土地被覆分類を行った．

最尤法とは，地物の特徴量を各バンドの平均輝度値と分散で表し，それらを教師データとして分類する手法である．分類対象画素の各バンドにおける輝度値と，地物の各バンドの平均輝度値から計算される偏差行列と偏差の転置行列，そして分類対象地物の分散共分散行列式と地物の分散共分散逆行列を使用し，Eq. (1) に示す値（尤度）が最大になる地物に分類する．尤度とは，あるカテゴリにおけるデータの分布を表す関数であり，正規分布に従うと仮定する．すなわち，あるカテゴリに特定のデータが属することが尤もらしい度合いを示す．

最尤法における尤度の計算では，まず，画像ピクセルから得られる特徴を n 次元のベクトル x で表し，$x = [x_1, x_2, \cdots, x_n]$ とする．ここで，n とは衛星画像のバンド数のことを表す．光学衛星画像は，複数のバンドが組み合わさっており，航空写真のようなカラーで表示するためには，赤・緑・青のバンドを使用する．2 章で示したように，使用した衛星画像は赤・緑・青を示す Band 4，Band 3 ならびに Band 2 を合成しているため，バンド数は $n = 3$ となる．また，x の要素の平均ベクトルを $m = [m_1, m_2, \cdots, m_n]$，分散行列を

$$\sum = \begin{pmatrix} \sigma_{11}^2 & \sigma_{12}^2 & \cdots & \sigma_{1n}^2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sigma_{n1}^2 & \sigma_{n2}^2 & \cdots & \sigma_{nn}^2 \end{pmatrix}$$

とすると，ある分類カテゴリ k のベクトルは $x_k = [{}_kx_1, {}_kx_2, \cdots, {}_kx_n]$，その平均ベクトルは $m_k = [{}_km_1, {}_km_2, \cdots, {}_km_n]$，分散行列は

$$\sum_k = \begin{pmatrix} {}_k\sigma_{11}^2 & {}_k\sigma_{12}^2 & \cdots & {}_k\sigma_{1n}^2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ {}_k\sigma_{n1}^2 & {}_k\sigma_{n2}^2 & \cdots & {}_k\sigma_{nn}^2 \end{pmatrix}$$

と表される．分類カテゴリ k に対する未分類の画像ピクセル x の尤度が正規分布で表されるとして，Eq. (1) のように尤度が計算される．

$$L(x,k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} \left|\sum_k\right|^{\frac{1}{2}}} \exp\left\{-\frac{1}{2} d_M^2(x,k)\right\} \tag{1}$$

ここで，$L(x,k)$ はカテゴリ k に対するデータ x の尤度，$|\sum_k|$ はカテゴリ k の分散共分散行列式，n はバンド数（特徴量の数），$d_M^2(x,k)$ はマハラノビス距離である．マハラノビス距離とは，空間上の点と点との距離を表すユークリッド距離（Eq. (2)）を分散・共分散で正規化した値であり，Eq. (3) のように表される．

$$d_E^2(x,k) = (x - m_k)(x - m_k)^t \tag{2}$$

$$d_M^2(x,k) = (x - m_k)\sum_k{}^{-1}(x - m_k)^t \tag{3}$$

ここで，x は n 次元ベクトル，m_k はカテゴリ k の平均ベクトル，$(x - m_k)$ は偏差行列,$(x - m_k)^t$ は偏差の転置行列，$\sum_k{}^{-1}$ はカテゴリ k の分散共分散逆行列である．すなわち，Eq. (1) は Eq. (3) を用いて，Eq. (4) のように書き換えることができる．

$$L(x,k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} \left|\sum_k\right|^{\frac{1}{2}}} \exp\left\{-\frac{(x-m_k)\sum_k{}^{-1}(x-m_k)^t}{2}\right\} \tag{4}$$

しかし，実際の分類処理では，尤度に対して対数を取ることで Eq. (5) のように計算量を削減している．

$$L'(x,k) = \ln\left(\left|\sum_k\right|\right) + \left\{(x-m_k)\sum_k{}^{-1}(x-m_k)^t\right\} \tag{5}$$

すなわち，最尤法は，以上の式から求められる値が最小になる地物に分類されるような手法である [7][8]．

SAM は，画像ピクセルスペクトルと参照ピクセルスペクトル間のスペクトル類似性を計算することにより，ピクセルの分類を行うアルゴリズムである．画像における各ピクセルは，n 個の異なるバンドにおける場所 (x, y) での強度を示す値のベクトルとなっており，このベクトルがピクセルスペクトルと呼ばれる．前述したように，光学衛星画像は赤・緑・青の 3 つのバンドを組み合わせているため $n = 3$ となり，Fig. 2 に示すように三次元のベクトルとして扱う．スペクトルの類似性は，画像ピクセルスペクトルと参照ピクセルスペクトル間の角度を計算することにより判断でき，その角度を類似度として最近傍法により分類を行う．Fig. 2 において，座標系を x 軸（赤（Red)），y 軸（緑（Green)），z 軸（青（Blue)）に設定し，各方向の単位ベクトルをそれぞれ $\vec{e}_R$，$\vec{e}_G$，$\vec{e}_B$ とすると，未知のスペクトル t と参照スペクトル r は以下のように表せる．

$$\vec{t} = t_R\vec{e_R} + t_G\vec{e_G} + t_B\vec{e_B} \tag{6}$$

$$\vec{r} = r_R\vec{e_R} + r_G\vec{e_G} + r_B\vec{e_B} \tag{7}$$

この未知のスペクトル t と参照スペクトル r の類似性を次式によって決定する [9]．

$$\theta(x,y) = \cos^{-1}\left(\frac{\vec{t}\cdot\vec{r}}{\|\vec{t}\|\cdot\|\vec{r}\|}\right) \tag{8}$$

Eq. (8) は，次のように書くこともできる [7][10]．

$$\theta(x,y) = \cos^{-1}\left(\frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\left(\sum_{i=1}^{n} {x_i}^2\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{i=1}^{n} {y_i}^2\right)^{\frac{1}{2}}}\right) \tag{9}$$

ここで，x_i は画像ピクセルスペクトル，y_i は参照ピクセルスペクトル，n は画像のバンド数を表す．すなわち，画像ピクセルスペクトルを n 次元のベクトル $x_i = [x_1, x_2, \cdots, x_n]$，参照ピクセルスペクトルを n 次元のベクトル $y_i = [y_1, y_2, \cdots, y_n]$ として計算を行う．画像ピクセルは，Eq. (9) によって計算された角度が最も小さいカテゴリに分類される．したがって，以下のような式で表すことができる．

$$x \in C_k \Longleftrightarrow \theta(x,y_k) < \theta(x,y_j) \forall k \neq j \tag{10}$$

ここで，C_k は土地被覆カテゴリ k，y_k はカテゴリ k のピクセルスペクトル，y_j はカテゴリ j のピクセルスペクトルである．参照ピクセルのスペクトルは，画像から直接抽出することにより取得することが可能である [11]．

本研究では，以上に示した 2 つの機械学習手法を使用して，光学衛星画像の土地被覆分類を行った．その結果から，本研究において優位な手法となった SAM について論ずる．SAM は，土地被覆分類を行うための計算に使用するパラメータが画像のバンド数を除けば画像のピクセルスペクトルだけであり，必要なパラメータ数が最尤法と比較して少ないため，計算処理速度が速い．また，作成した土地被覆分類の精度は，後述する判別効率表から総合精度として求めることができるが，SAM の分類精度は最尤法の分類精度よりも高くなった．以上の点を考慮し，本研究においては土地被覆分類手法として SAM の方が優位であると判断し，SAM を用いて作成した土地被覆分類図を使用して，加色混合のプロセスへ進んだ．

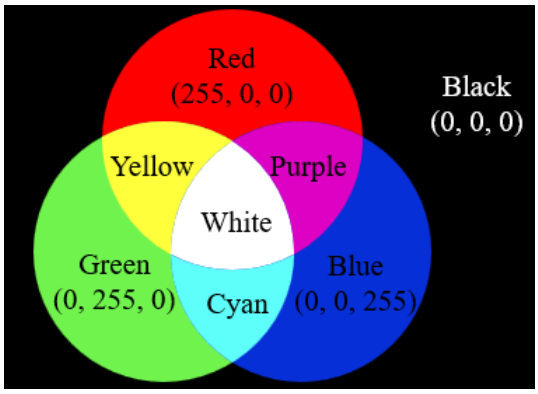


Fig3　Conceptual diagram of additive color mixture

3.2. 加色混合法

画像分析における加色混合法とは，画像の色を表現する RGB 値を使用し，レッドスケール化ならびにシアンスケール化した二時期の画像を加算処理を行うことにより，画像変化を確認する手法である．画像で表現される色は RGB 値と呼ばれ，（R，G，B）のように表記される (Fig. 3)[12]．このとき，R，G，B には各色の明度の 0〜255 の数値が記述される．RGB 値において赤

色は（255，0，0），緑色は（0，255，0），青色は（0，0，255）と表される．また，緑＋青がシアン（0，255，255），赤＋緑が黄色（255，255，0），青＋赤が紫（255，0，255）となっている．画像分析における加色混合では，画像は二値化して分析に用いるが，二時期の画像のうち一方を赤 (255, 0, 0) と黒（0, 0, 0），もう一方をシアン (0, 255, 255) と黒 (0, 0, 0) に設定し，加算処理を行う．二時期の画像のうち前画像が「赤」と「黒」の 2 色で表され，後画像が「シアン」と「黒」で表せている場合，両画像を加算すると，Eq. (11) から Eq. (14) の 4 パターンが考えられる．赤（255, 0, 0）とシアン（0, 255, 255）の和（これを加色という）は，Eq. (13) より（255，255，255），つまり白となる．一方で，（0，0，0）で色が表現されるとき，その色は Eq. (14) に示すように黒で表示される．

前画像が赤，後画像が黒の場合

$$(255,0,0)+(0,0,0)=(255,0,0) \tag{11}$$

前画像が黒，後画像がシアンの場合

$$(0,0,0)+(0,255,255)=(0,255,255) \tag{12}$$

前画像が赤，後画像がシアンの場合

$$(255,0,0)+(0,255,255)=(255,255,255) \tag{13}$$

前画像が黒，後画像が黒の場合

$$(0,0,0)+(0,0,0)=(0,0,0) \tag{14}$$

一般的に，加色混合の原理を用いた画像分析は， SAR 画像を対象としたものが多い．飛田ら [13] は，2004，2005 年のスマトラ沖地震に伴う隆起沈降域を把握するため， SAR 画像の後方散乱強度から地表面粗度の変化抽出手法を開発した．SAR 画像で加色混合を行う際は，SAR 画像の後方散乱強度の彩度を RGB 値で表し，加算処理が行われる．

本研究では，SAR 画像ではなく，光学衛星画像に対して加色混合法の適用を試みる．土地被覆分類図中の特定カテゴリを示すピクセルのみを抽出し，前述した二値化処理を施す．同様の処理を災害前後の画像で実施し，それらに対して加算処理を行うことで加色混合の原理により災害前後での変化を確認することとした．地物に変化がなければ白，前図での赤が後図で黒になっているときは赤，逆に前画像での黒が後画像でシアンになっているときはシアン，それ以外は黒で表現される．

4. 光学衛星画像を用いた被災箇所抽出

4.1. 教師つき分類を用いた土地被覆分類

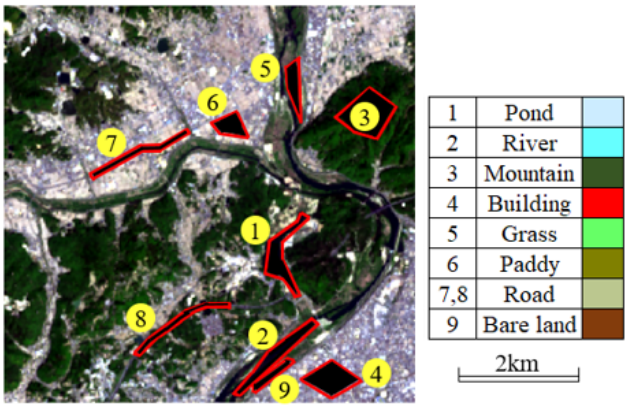


Fig4　Training data of each category

4.1.1. 教師データ

教師付き分類を行うにあたり，災害前と災害後の画像において Fig. 4 内の赤枠で示す箇所・範囲において教師データを設定する．Fig. 4 の右側に示す凡例の番号は，図中の黄色丸印中の番号と対応している．各教師データについては，まず衛星画像に対して目視で特定カテゴリを示す領域を赤枠で選定した．赤枠で囲った箇所は，それぞれ便宜的にナンバリングを行い（Fig. 4 の黄色丸印中の番号），各番号に対応した領域のカテゴリを示す色を設定（Fig. 4 の右側の凡例）することにより，教師データとして作成した．例えば，Fig. 4 の図中で池（Pond）がある箇所を選定し（黄色丸印 1），池を示す色として薄水色を決定する（Fig. 4 の凡例番号 1）．以上の作業を，河川，山（植生），建物（都市），草地，田畑，道路のカテゴリに対しても行い，合計 9 つのカテゴリの教師データを作成した．それぞれのカテゴリについて，河川は水色，山（植生）は深緑色，建物（都市）は赤色，草地は黄緑色，田畑はオリーブ色，道路は薄茶色，裸地は茶色とし，色で土地被覆が判別しやすいよう設定した．教師データの領域に関しては，地物を適切に表現している箇所を選択し，教師データの個数に関しては地物を表す最低限の個数で設定した．土地被覆分類の結果により，特定の地物において誤分類が目立つ場合は，適宜教師データを追加する．ここで，教師データを追加しすぎると，追加したカテゴリへ分類が偏りがちになることに留意する．

4.1.2. 災害前の土地被覆分類結果

災害前の衛星画像 (Fig. 1 左）において，土地被覆分類を行った結果を Fig. 5 に示す．まず，使用した衛星画像（Fig. 1 左）と土地被覆分類結果を目視判読を行った．真備町北部はため池が点在しており，土地被覆分類の結果，ため池の箇所は水色が着色されていることから，教師データとして設定した高梁川や柳井原貯水池以外の河川やため池も水域として分類することが可能となっている．このことから，衛星画像において目視だけでは判断しづ

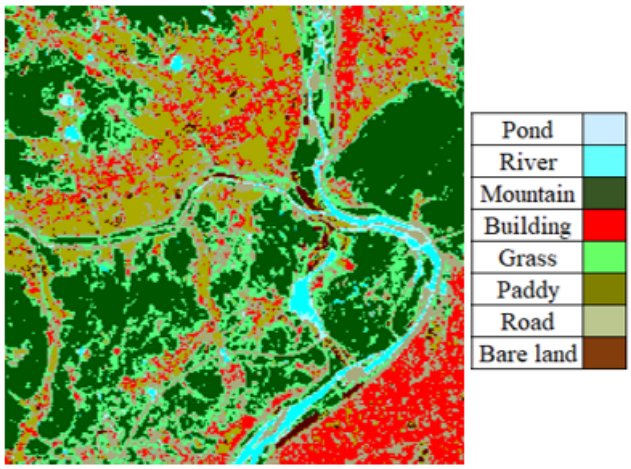


Fig.5　Result of land cover classification(Before the disaster)

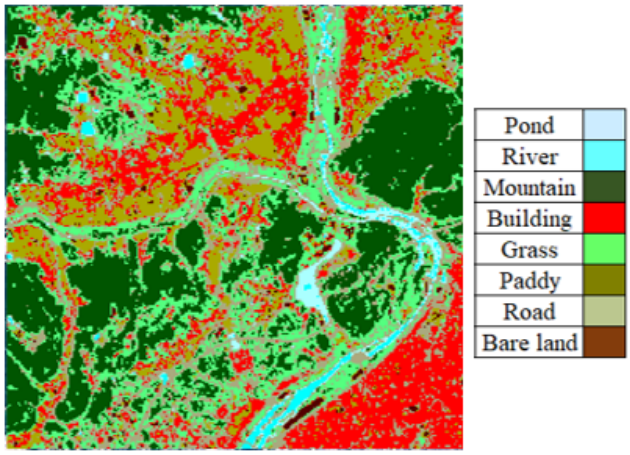


Fig.6　Result of land cover classification(After the disaster)

らい箇所も分類が行われていることが分かる．また，住居などが密集する市街地は屋根の反射によって，衛星画像内ではグレーに近い色で確認することができ，その箇所に関しては建物域を示す赤色が着色されている．加えて，衛星画像内の市街地において肌色で確認することができる田畑に関しても，建物との色分けがなされており，両者の違いによる分類は可能となっている．しかし，市街地中の建物と道路の違いに関しては，解像度の観点から土地被覆を分類するのは困難である．今回，道路の教師データとして，衛星画像中央あたりを東西に向けてのびる幹線道路と真備町市街地を東西に走る国道を採用した．土地被覆分類の結果，四車線ある幹線道路は正しく分類できたものの，二車線しかない国道は建物や田畑に誤分類された．このことから，解像度 30m の衛星画像では二車線の道路の判別までは困難であることが示された．誤分類の原因として，低解像度の衛星画像では 1 ピクセルに

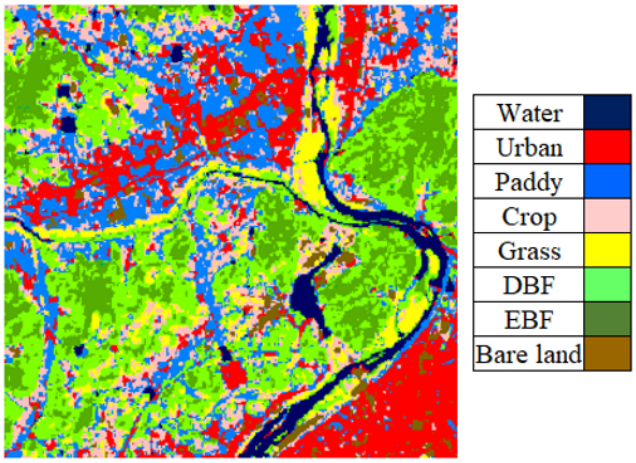


Fig.7　Reference of land cover classification

複数の地物が含まれてしまうということが挙げられる．そのピクセル全体のスペクトルは，含まれる地物の平均を取ることになるため，特定の地物のみを示す値とは言い難い．実用化を図るためには，高解像度の衛星画像を使用し，1 ピクセルに含まれる地物を 1 つに近づけることが望ましい．

4.1.3. 災害後の土地被覆分類結果

前項と同様に，災害後の衛星画像について土地被覆分類を行い，使用した衛星画像 (Fig. 1 右) との目視判読を行った．災害後の衛星画像 (Fig. 1 右) において，土地被覆分類を行った結果を Fig. 6 に示す．市街地における建物と田畑，道路に関しては，建物と田畑の分類は可能であるが，災害前と同様，建物と解像度以下の道路の分類は困難である．水域についても，災害前と同様の理由により，目視では判読が困難な箇所の土地被覆分類も行うことが可能となっている．植生に関しては，植生が存在しない箇所に植生が分類されてはいないことから，Fig. 1 右の土地被覆を概ね適切に分類できている．しかし，高梁川と小田川の合流地点の河川敷に着目し，Fig. 5 と Fig. 6 を比較すると，災害前では草地という土地被覆であった箇所が災害後では，山として分類されている．撮影された季節に大幅な違いがないにも関わらず，このような結果になっている原因として，植生の分布が異なっていた可能性が考えられる．該当箇所を Fig. 1 左で確認すると植生が少なく，裸地に近い状態として確認できるが，Fig. 1 右は植生が生い茂り，青々としているため，このような結果になったと考えられる．以上のことから，災害前・災害後どちらの画像も解像度以下の道路のような地物の分類は困難ではあるが，どのカテゴリにおいても衛星画像の土地被覆を概ね適切に分類できると言える．

4.1.4. 土地被覆分類の精度検証

本研究で作成した土地被覆分類図は，目視判読に加え，参照データを基にピクセルごとに RGB 値の比較を行い，精度検証を

Table1　Confusion matrix for SAM classification result

		Results						
		Water	Urban	Grass	Vegetation	Paddy,Bare Land	Total	PA(%)
Reference	Water	10010	62	508	140	3408	14128	70.9
	Urban	169	38252	409	64	18670	57564	66.5
	Grass	21	953	12753	1488	6597	23812	62.0
	Vegetation	664	330	25709	77419	10797	114919	67.4
	Paddy,Bare Land	0	18479	18597	1505	80088	118669	67.5
	Total	10864	58076	59976	80616	119560	329092	
	UA(%)	92.1	65.9	24.6	96.0	67.0		

行った．精度検証に使用した画像（参照データ）は，国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構 (JAXA) が提供している高解像度土地利用土地被覆図を使用した（Fig. 7）．JAXA の土地被覆図は，本研究でも使用した衛星画像を撮影した人工衛星の Landsat8 によって撮影された衛星画像を基に作成されている．精度検証の際には，参照データと検証データ（本研究の土地被覆分類結果）のカテゴリ数を合わせる必要がある．ここでのカテゴリ数とは，土地被覆分類を行う際に設定した地物の数のことである．特に，参照データについては，植生においては常緑広葉樹・落葉広葉樹に分かれており，水田と畑についても分けて土地被覆分類を行っている．災害での被災状況を把握するには，建物とそれ以外の地物の変化に主に着目するため，植生や水田と畑はそれぞれ一括りとして，精度検証を行う．例えば，参照データにおける常緑広葉樹と落葉広葉樹はまとめて山（植生）として，水田と畑はまとめて田畑として考える．一方で，検証データについても，池と河川，道路と裸地はまとめてそれぞれ水域，裸地というように設定する．この作業を行うことによって，参照データと検証データのカテゴリ数が同一となり，精度検証が容易になる．精度検証には，Table 1 に示す判別効率表を作成し，全画素の何割が正しく分類されたかを表す精度評価指標である総合精度 (Overall accuracy；OA) を算出することにより評価する．総合精度は，判別効率表内の総画素数を N，判別効率表の (i, j) 成分を x_{ij}，カテゴリ数を m としたとき，以下の式で表される [14]．

$$OA = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{m} x_{ii} \tag{15}$$

ここで，x_{ii} は判別効率表対角成分，すなわちカテゴリ i において正しく分類された画素数である．

また，総合精度以外にも参照データの何割が正しく分類されているかを示す精度評価指標の作成者精度（producer' s accuracy；PA），分類結果の何割が正しいかを示す指標の使用者精度（user' s accuracy；UA）を以下の式により計算した．

$$PA_i = \frac{1}{x_{+i}} x_{ii} \tag{16}$$

$$UA_i = \frac{1}{x_{i+}} x_{ii} \tag{17}$$

ここで，x_{+i} は参照データの総ピクセル数，すなわち i 列の要素の合計，x_{i+} は検証データの総ピクセル数，すなわち i 行の要素の合計である．

Thomlinson らは総合精度である OA は最低 85% という基準を設けている [15]．85% という値は，Thomlinson らによる土地被覆分類の実用精度基準を示す数値である．Eq. (15) を用いて総合精度を算出した結果，本研究における土地被覆分類図の OA は 68% であり，基準値を大幅に下回る結果となった．Table 1 の草地（Grass）に着目すると，参照データで山 (植生：Vegetation) となり検証データでは草地となったピクセル数が草地として正しく分類されたピクセル数（参照データ・検証データともに山（植生）よりも多くなっている．すなわち，草地における誤分類が顕著であることを示しており，カテゴリごとの精度を Eq. (16) や Eq. (17) で計算した際にも，PA は 60% を超えているが，草地全体での UA が低くなっている．草地の分類精度が低くなってしまった原因としては，「衛星画像の解像度の低さ」や「使用画像枚数の違い」が挙げられる．解像度の低さによって草地と山（植生）のピクセルスペクトルの違いが不明瞭となり，誤分類が多く発生したと考えられる．そのため，解像度の高い衛星画像を使用することで，ピクセルスペクトルの明瞭な違いが表現でき，誤分類が低減すると考えられる．また，参照データとして使用してい

る画像は，土地被覆分類の精度を向上させる目的で，多時期の衛星画像を使用して土地被覆カテゴリを決定している．そのため，一時期だけでは判別の難しい土地被覆（例えば，水張り時期でない水田と草地）を多時期の解析結果を使用することで最も適切な土地被覆分類を行っている．一方，本研究の土地被覆分類に使用した衛星画像は，特定時期に撮影された 1 枚の画像のみであるため，完全に土地被覆を分類できているとは言い難い．以上のことから，草地の分類精度が低下したと考えられ，草地のピクセルの誤分類は，結果的に OA の低下につながっている．橋本ら [16] は，PA と UA はトレードオフ，すなわち PA は高いが UA が低いケース（そのカテゴリを過剰に分類していて，誤分類が多い状態）や UA は高いが PA が低いケース（そのカテゴリを過少に分類していて，出した結果は正しいが未検出が多い状態）があり，クラス別の精度を評価する場合には PA と UA の両方がバランスよく高くなっていなければならないとしている．精度向上を図るためには，ピクセルスペクトルのより明瞭な違いが表現でき，誤分類が低減すると思われる解像度の高い衛星画像を使用する必要があると言える．しかし，本研究の主眼は「被災箇所の抽出」であることから，低解像度であっても土地被覆の変化を確認可能かが重要である．Fig. 5 と Fig. 6 の内，真備町の市街地を目視で比較すると，二時期で土地被覆が変化している（赤色が増加している）ことを確認できる．以上に示すような土地被覆分類の結果から 2 枚の画像間での変化は概ね抽出可能であると考え，以下に示す加色混合法によって土地被覆の変化を捉えることとした．

4.2. 加色混合による画像分析結果

前述したように，衛星画像に対して加色混合法を用いるにあたり，特定カテゴリを示すピクセルを適宜抽出し，二値化処理を施したのち，加算処理を行った．加算処理を行い，白色に変化した部分は災害前後で変化がなかった箇所であるため，黒色に変換する．本論文では，加色混合により最も特徴的であった以下の 2 つのカテゴリについて示す．

4.2.1. 建物域

まず，建物域について，災害前の画像（Fig. 5）と災害後の画像（Fig. 6）に対して，加色混合法を行った結果を Fig. 8 に示す．Fig. 8 の対象地域全域は，赤のピクセルがシアンのピクセルと比較して，数多く分布していることが分かり，これは何らかの理由で二時期の間に建物の多くが消失していることを表している．この変化は，分析を行う前の衛星画像を目視しただけでは判読が難しく，カテゴリごとに加色混合を行うことで明らかとなった事象であると言える．特に，実際の浸水被害を受けた真備町に着目すると，前述したように赤のピクセルが特に多くなっている．真備町において建物数の減少による変化を表す赤色ピクセルが分布している箇所は，浸水が発生した小田川付近の平野部分に集中しており，国土地理院が提供する浸水推定段採図と比較すると，豪雨による浸水域と合致している．このことから，真備町における建物数の減少による変化は，大部分が災害によるものとして考えることができ，本研究手法によって被災箇所を概ね適切に抽出できていると言える．ここで注意すべきは，建物が存在していた箇所の住人が被災し別の土地へ移り住んだことによって更地になっている，被災した土地に新しい建物を建設中である，建物は残存しているが屋根などに土砂が残ったままである，など建物と判定されない要因が含まれているということである．一方で，豪雨災害の被害を直接受けていない真備町以外の土地（倉敷市や総社市）においても，真備町までとはいかずとも赤やシアンのピクセルが見られる．これらの箇所による建物の増減は，災害と直接関係ないものがほとんどであると考えられるため，こうした災害と直接関係のない箇所の土地被覆変化を見極めることも重要になってくる．

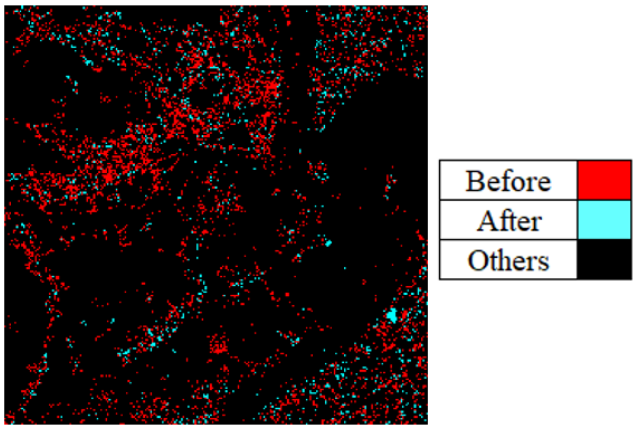


Fig8　Result of additive mixed(Urban area)

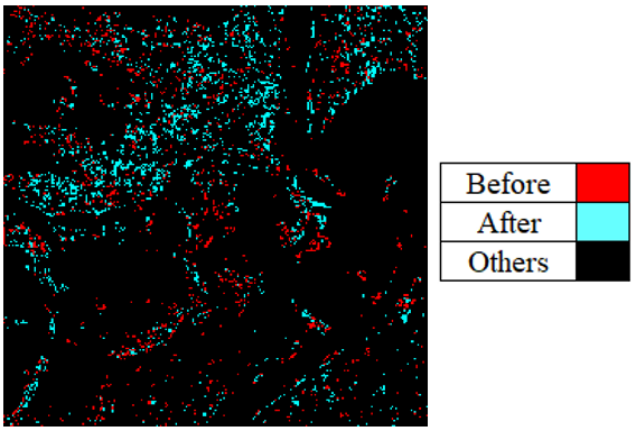


Fig9　Result of additive mixed(Field area)

4.2.2. 田畑域

また，建物域と同様に，田畑域の災害前の画像（Fig. 5）と災害後の画像（Fig. 6）に対して，加色混合法を用いた結果を Fig. 9 に示す．Fig. 9 の画像全体は，前述した建物域と比較するとシアンのピクセルが多いことから，何らかの理由で二時期の間に田畑と分類された地物が多くなっているということを表している．建物域と同様に，真備町の市街地においてはその特徴が顕著であり，豪雨によって浸水した小田川付近の平野にシアンのピクセルが多くなっている．建物域と比較すると，豪雨災害によって被災した建物が取り壊しや修復中などにより土地被覆分類で建物と認識されず，田畑として認識されているため，このような結果になっていると考えられる．このことから，真備町の田畑が増加したことを表すシアンのピクセルが多い理由も災害によるものが大部分を占めると考えることができる．田畑域の加色混合結果により，建物であった箇所が田畑として認識されることが確認された．すなわち，田畑域の加色混合結果は，真備町において災害により建物が減少していることを裏付けることができ，被災箇所抽出の手助けとすることができる．

4.2.3. 分析結果からの考察

以上に示す土地被覆分類からの加色混合の結果は，災害後に建物が被災により減少し，土地被覆が変化したことを視覚的に表現することができている．すなわち，建物域と田畑域の土地被覆変化の関係性から被災箇所を簡易的に抽出することが可能になったと言える．しかし，本研究で使用した光学衛星画像は，前述したように撮影頻度や季節の観点から災害から約 1 年が経過した画像を使用している．そのため，被災箇所において浸水した箇所の水はすでに引いてしまった状態である．発災直後に衛星画像を即座に取得することが可能であるならば，本研究の手法を適用した場合，「水域」のカテゴリに関して加色混合の結果はシアンのピクセルが被災箇所で多く散見されることになると考えられる．その際は，建物域と水域との関係性から被災箇所の抽出を行うことになる．

5. 結言

本研究では，豪雨災害により被災した箇所を抽出するため，機械学習と画像処理技術を組み合わせて被災箇所の抽出を行った．被災箇所を抽出するにあたり，機械学習を用いて土地被覆分類を行い，分類図に対して加色混合法を適用し，加算処理を行った．

土地被覆分類では，教師データとして分類するカテゴリを，河川，建物というように土地用途に合わせて設定した．衛星画像の解像度が 30m であることから，建物や田畑が密集する市街地や河川・植生などの解像度以上の領域を持つ場合は適切なカテゴリに分類されるが，二車線の道路のような解像度を下回る領域を持つ場合は分類が適切に行われていない箇所があった．このことから，機械学習による土地被覆分類では，解像度 30m であっても概ね土地被覆分類は可能であるが，衛星画像の解像度を下回る大きさの地物は適切な分類を行うのは困難であることが分かった．金田らの研究 [17] では，浸水被害把握を行うにあたり，光学画像で解像度 0.5〜1.5m のものを使用している．この程度の解像度であれば二車線の道路だけでなく，建物や水域に関してより正確な判読が可能となるため，土地被覆分類の精度向上に繋がると考えられる．

さらに，加色混合法を用いることで，災害前から災害後にかけて増加したカテゴリ，減少したカテゴリ，変化のないカテゴリを各ピクセルの色によって視覚的に判断することが可能となった．被災地域においては建物域の加色混合結果より，建物は減少していると分かり，一方で，田畑域の加色混合結果より，田畑が増加していると分かる．これらを照らし合わせることで，建物が被災し，田畑という別のカテゴリとして認識されていると判断できる．以上のことから，土地被覆分類と加色混合法を組み合わせることで，カテゴリの二時期における変化から被災箇所の抽出が可能になると示された．

本研究は，発災直後の被災箇所抽出の基礎的研究として位置づけ，実用化のためには前述した課題に留意する必要がある．今後は，その課題への対策の一例として土地被覆分類の精度や加色混合の信頼性を向上させる目的で，解像度の高い衛星画像を用いて本研究手法の実用化に向けた検討を行う．

参考文献

(1) 国土交通省：【本文】大規模広域豪雨を踏まえた水災害対策のあり方について，「大規模広域豪雨を踏まえた水災害のあり方について」答申（平成 30 年 12 月），https://www.mlit.go.jp/river/shinngikai_blog/shaseishin/kasenbunkakai/shouiinkai/daikibokouikigouu/pdf/daikibokouikigouu_toushin_honbun.pdf，(2021 年 9 月 30 日閲覧可)

(2) 金城海輝，白水元，朝位孝二：SAR 画像を用いた岡山県真備町の浸水状況解析，自然災害研究協議会　中国地区都会研究論文集 (2019)，**5**，pp. 31-34.

(3) 本田謙一，泉祐輔，引地慶多，虫明成生，浅田典親，津野浩一：衛星 SAR を用いた豪災害時の迅速な浸水範囲および浸水深抽出の試み 日本リモートセンシング学会誌 (2019)，**40**，**3**，pp. 158-162.

(4) 作野裕司：西日本豪雨災害時における Landsat-8 と

Sentinel-1 を使った新水域の推定，日本リモートセンシング学会誌 (2018)，**3**，**5**，pp. 435-437.

(5) 洲濱智幸, 福島雄也, 石垣昭寿, 古藤智行, 早川智洋：Airbus DS 社および MDA 社による平成 30 年 7 月豪雨災害の観測対応，日本リモートセンシング学会誌 (2018)，**38**，**5**，pp. 431-434.

(6) 岩田敏彰：7. 産総研が提供する衛星データプラットフォーム LandBrowser，写真観測とリモートセンシング (2019)，**58**，**6**，pp. 292-295.

(7) Shafri，H.Z.M.，Suhaili，A.，Mansor，S.：The performance of maximum likehood, spectral angle mapper, neural network and decision tree classifiers in hyperspectral image analysis，J. Comput Sci.(2007)，**3**，pp. 419-423.

(8) 石田晴海，稲村實：多重分光画像データを利用する土地被覆カテゴリー分類法の分類傾向解析，日本リモートセンシング学会誌 (2003)，**23**，**2**，pp. 126-136.

(9) Kruse，F.A.，A.B Lefkoff，J.W. Boardman，K.B Heide-brecth，A.T. Shapiro，J.P. Barllom and A.F. Goetz. ：The spectral image processing system (SIPS)-Interactive visualization and analysis of imaging spectrometer data.，Remote Sensing of environment(1993)，**44**，pp. 145-163.

(10) De Carvalho，O.A. and Meneses，P. R.：Spectral Correlation Mapper (SCM); An Improvement on the Spectral Angle Mapper (SAM) Summaries of the 9th JPL Airborne Earth Science Work-shop(2000)，pp. 9p.

(11) Girouard,G.，Bannari，A.，El Harti，A. and Desrochers，A.：Validated Spectral Angle Mapper Algorithm for Geologi-cal Mapping: Comparative Study between Quickbird and Landsat-TM，Geo-Imagery Briding Continents Istanbul, Turke(2004)，pp. 599-604.

(12) 松尾芳雄：景観シミュレーションの基礎と応用（その 2)，農業土木学会誌 (2000)，**68**，**9**，pp. 973-974.

(13) 飛田幹男，今給黎哲郎，水藤尚，加藤敏，林文，村上亮：衛星 SAR 画像分析による 2004・2005 年スマトラ沖地震に伴う隆起沈降域の把握，国土地理院時報，農業土木学会誌 (2006)，**109**，pp. 21-32.

(14) 児島利治，宝馨，岡太郎：リモートセンシングの分解能が土地被覆分類精度に及ぼす影響，京都大学防災研究所年報 (1996)，**39**，**B-2**，pp. 1445-458.

(15) Thomlinson，J. R.，V Bolstad，P. and Cohen，W. B.: Co-ordinating Methodologies for Scaling Landcover Classifi-cations from Site-Specific to Global，Remote Sensing of Environment(1999)，**70**，**1**，pp. 16-28.

(16) 橋本秀太郎，田殿武雄，小野里雅彦，堀雅裕，塩見慶：多時期光学観測データを用いた高解像度土地被覆分類手法の開発，日本リモートセンシング学会誌 (2014)，**34**，**2**，pp. 102-112.

(17) 金田真一，カピララトナ ジーワンティニー：光学衛星画像を用いた災害時における浸水被害調査法についての検討，日本リモートセンシング学会誌 (2020)，**40**，**3**，pp. 163-166.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 05-211218 JASCOME

部分観測による X 線計算機断層撮影法の数値的実現

NUMERICAL COMPUTATION OF X-RAY COMPUTERIZED TOMOGRAPHY FROM PARTIAL MEASUREMENT

藤原 宏志 [1)], 大石 直也 [2)], SADIQ, Kamran[3)], TAMASAN, Alexandru[4)]

Hiroshi FUJIWARA, Naoya OISHI, Kamran SADIQ, and Alexandru TAMASAN

1) 京都大学大学院情報学研究科	(〒 606-8501	京都市左京区吉田本町,	E-mail: fujiwara@acs.i.kyoto-u.ac.jp)
2) 京都大学大学院医学研究科	(〒 606-8507	京都市左京区聖護院川原町,	E-mail: noishi@kuhp.kyoto-u.ac.jp)
3)Johann Radon Institute (RICAM)	(〒 4040	Linz, Austria,	E-mail: kamran.sadiq@ricam.oeaw.ac.at)
4)University of Central Florida	(〒 32816	Orlando, Florida, USA,	E-mail: tamasan@math.ucf.edu)

The present paper proposes a novel numerical scheme to X-ray Computerized Tomography from partial measurement data. In order to reduce radiation exposure, it is desirable to irradiate X-ray only around region of interest, while the conventional reconstruction methods such as filtered back projection could not work due to its intrinsic limitation of dependency on whole measurement data. The proposed method gives a direct numerical reconstruction employing a Cauchy type boundary integration in A-analytic theory and a singular integral equation which maps boundary measurement to interior data. Numerical examples using experimental data are also exhibited to show validity of the proposed numerical procedure.

Key Words: Inverse Problems, X-ray Computerized Tomography, Partial Measurement, Direct Reconstruction, Boundary Integration, Singular Integral Equations

1. 緒言

本論文では，部分観測からの X 線計算機断層撮影法 (Computerized Tomography; CT) において，近年提案された Radon 逆変換とは独立な直接再構成手法に対する数値計算スキームを提案する．また実測データをもちいた再構成により，その妥当性を示す．

一般的な X 線 CT では，物体の断層面を通過する全ての直線に沿って X 線の投影データ (すなわち，外部から入射され，物体で減衰を受けて出射される X 線の強度) を測定し，断層面全体の X 線の減衰率を得る．その数理的再構成手法としては逆 Radon 変換 [(13)] に基く Filtered Back Projection (FBP) や Algebraic Reconstruction Techniques (ART) が確立されており [(10)]，医用および産業用の CT 実機に実装されて，広く利用されている．

一方，X 線の被曝量の低減と検査時間の短縮のため，物体中の関心領域 (Region of Interest; ROI) の近傍を通過する X 線のみの照射が望ましい．この部分的な観測からの再構成として，逆 Radon 変換に基く直接解法や，圧縮センシング理論に基く反復解法が提案されている [(12)]．

本論文では，部分観測での X 線 CT に対し，A-analytic 理論に基く直接解法の数値計算アルゴリズムを提案する．本手法は，X 線 CT の減衰係数の再構成を，著者らが輸送方程式を対象として近年提案した，境界の一部での観測から非斉次項を再構成する逆問題 (inverse source problem) [(7)] に帰着させる．この逆問題解法は，逆 Radon 変換とは独立であり，A-analytic 函数 [(2)] の境界値の特徴付け [(14)] および Cauchy の積分公式に相当する境界積分 [(2, 3)] が中心的な役割を果たす．数値計算の視点からは，この境界積分が領域の内部にメッシュを必要とせず，減衰率が各点で独立に計算できるため並列計算に適するという特徴をもつ [(9)]．さらにこの手法は，回転角度が限定された撮影から断層面を再構成するトモシンセシス [(15)] と呼ばれる近年登場した X 線撮影技術にも適用可能と考えられる．提案手法では，結果の精度と安定性を同時に制御するパラメータが現れ，その選択が重要となる．しかし対象の構造，観測誤差，もちいる離散スキームや離散化数にも依存し，事前に解析的に最適値を決定することは困難と考えられるため，数値計算等を利用する事後 (a posteriori) 解析による選択基準を提案する．

次節で，部分観測からの X 線 CT を輸送方程式に帰着さ

2021 年 9 月 30 日受付，2021 年 11 月 1 日受理

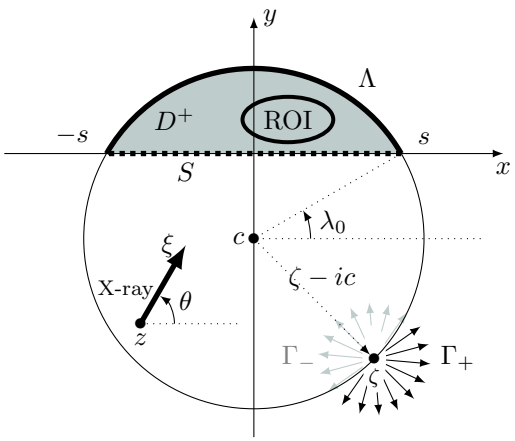


Fig. 1: Introduced coordinate system of $\mathbb{R}^2$ for describing the proposed reconstruction procedure. Region of interest (ROI) is surrounded by arc Λ and chord S. The measurement is performed only on the arc Λ. Note that the length of $\xi \in S^1$ is depicted at reduced scales for clarity.

せて A-analytic 理論を適用する数学解析的手法を述べ，3 節でその数値計算手法を述べる．4 節では実測データをもちいた数値計算例によって提案手法の妥当性を示し，5 節で精度と安定性を制御するパラメータの選択を論じる．

2. 再構成公式

本節では著者らの先行研究 [7] の inverse source problem に基き，X 線 CT の減衰係数の再構成の数学解析的な手順を示す．

対象物体の断層画像を取得する領域 (ROI) を含む断面を D とする．対象物体の外部では X 線の吸収は生じないとし，適当なスケーリングによって D は半径 1 の円の内部として一般性を失わない．提案手法では ∂D の空でない連結部分集合 (弧) Λ からのみ出射される X 線強度を観測し，Λ およびその端点を結ぶ線分 S で囲まれる領域 D^+ における X 線の減衰率 μ を再構成する．ここで $\mu \in C_0^{1,\alpha}(D)$, $\alpha > 1/2$ とし，ROI が D^+ に含まれるように Λ をとる．

線分 S の中点を原点とし，S に沿って x 軸をとる．また，Λ が $\mathbb{R}^2$ の上半平面に位置するように y 軸をとる．線分 S の長さを $2s$ として，D の中心 $(0, c)$ を原点とする極座標における S の端点 $(s, 0)$ の偏角を λ_0 とする．以下では $i = \sqrt{-1}$ を虚数単位として $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ と $z = x + iy \in \mathbb{C}$ を同一視し，ζ は主として D の境界 ∂D もしくはその一部 Λ の点を表すものとする．また X 線の進む方向 $\xi \in S^1$ を極座標 $\xi = (\cos\theta, \sin\theta)$ によって $\theta \in [0, 2\pi)$ と同一視する (Fig. 1)．

入射する強度を一定値 $I_0 > 0$ とし，位置 $z \in \overline{D}$ において $\xi \in S^1$ 方向に進む X 線の強度を $I(z, \xi)$ とするとき，I を入力値 I_0 で正規化した

$$u(z, \xi) = -\log \frac{I(z, \xi)}{I_0}, \quad (z, \xi) \in \overline{D} \times S^1 \tag{1}$$

は次の輸送方程式を満たすことが知られている．

$$\xi \cdot \nabla_z u(z, \xi) = \mu(z), \quad (z, \xi) \in D \times S^1, \tag{2}$$

$$u(\zeta, \xi) = 0, \qquad (\zeta, \xi) \in \Gamma_-. \tag{3}$$

ただし $\nabla_z = (\partial_x, \partial_y)$, $\Gamma_\pm = \{(\zeta, \xi) \in \partial D \times S^1 \,;\, \pm(\zeta - ic) \cdot \xi > 0\}$ である．ここで $D \times S^1$ の集合としての境界は，$\Gamma_0 = \{(\zeta, \xi) \in \partial D \times S^1 \,;\, (\zeta - ic) \cdot \xi = 0\}$ として $\partial D \times S^1 = \Gamma_- \cup \Gamma_+ \cup \Gamma_0$ (disjoint union) であることに注意する．ただし Γ_0 に沿う X 線の軌跡は D と共通部分をもたない．また Γ_-, Γ_+ はそれぞれ X 線の入射と出射に対応する．Γ_- での境界条件 (3) は入射に対応しており，u は I_0 で正規化しているため 0 となる．一方，X 線 CT における代表的な平行ビーム投影において，観測値 (投影データ) では，D の中心 ic から距離 s で ξ 方向に直進する X 線を考え，I_0 の入射に対する物体からの出射強度を，方向ベクトル $\omega = \xi^\perp \in S^1$ の投影面への正射影として観測した値を Radon 変換 $R\mu(\omega, s)$ として与える．この投影データは出射強度の観測であるため Γ_+ で与えることになり，

$$u(\zeta, \xi) = R\mu(\xi^\perp, (\zeta - ic) \cdot \xi^\perp), \quad (\zeta, \xi) \in \Gamma_+ \tag{4}$$

が成立する．

順問題の設定では，D で μ を既知として，境界値問題 (2),(3) の適切性を論じる．また一般的な X 線 CT は，D を通る全ての直線に沿う投影データを観測するため，∂D 全体での出射，すなわち Γ_+ 全体で (4) の $R\mu$ を与えて (2), (3), (4) を満たす μ を D で求める逆問題となる [2, 3, 9]．一方，本論文では，観測値が Γ_+ 全体ではなく，$\Lambda \subset \partial D$ でのみ与えられる部分観測からの μ の再構成を考える．すなわち μ は D で未知であり，(4) の $R\mu$ は $\zeta \in \Lambda$, $(\zeta - ic) \cdot \xi^\perp > 0$ でのみ既知とし，(2), (3), (4) を満たす μ を (D^+ 上で) 再構成する逆問題を考える．

さて $\partial = (\partial_x - i\partial_y)/2$, $\overline{\partial} = (\partial_x + i\partial_y)/2$ とすると $\xi \cdot \nabla_z = e^{-i\theta}\overline{\partial} + e^{i\theta}\partial$ であり，L^2 で $u\big(z, \xi(\theta)\big) = \sum_m u_m(z) e^{im\theta}$ とすると，(2) は $\{e^{im\theta} \,;\, m \in \mathbb{Z}\}$ の直交性と μ の等方性より

$$\overline{\partial} u_1 + \partial u_{-1} = \mu, \tag{5}$$

$$\overline{\partial} u_{-m} + \partial u_{-m-2} = 0, \quad -m = 0, -1, -2, \ldots \tag{6}$$

となる．ここで区分的に滑らかな閉曲線 $\gamma \subset \overline{D}$ に対し，γ の内部に含まれる点 z に対して，$u_{-1}(z)$ は γ 上での複素積分

$$u_{-1}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{u_{-1}(\zeta)}{\zeta - z}\, d\zeta + \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \left(\frac{d\zeta}{\zeta - z} - \frac{d\overline{\zeta}}{\overline{\zeta} - \overline{z}} \right) \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} u_{-1-2j}(\zeta) \left(\frac{\overline{\zeta} - \overline{z}}{\zeta - z} \right)^j \right\} \tag{7}$$

で与えられる [2, 3]．全周 ∂D で観測する場合，(7) で $\gamma = \partial D$ とすると，右辺に現れる $u_{-m}|_{\partial D}$ は (3) および Γ_+ での観測値 (4) から求まり，(5) より D 上での μ が求まる．

しかし本論文で扱う部分観測の場合，$u_{-m}(\zeta)$ は ∂D の一部 Λ 上でしか与えられず，(7) を直接利用することはできない．そこで S が実軸に含まれることから，(6) を満たす $u_{-m}|_S$ が特異積分方程式

$$(I - iH_s)u_{-m}(x) = 2p_{-m}(x), \quad |x| < s$$

を満たすことに着目する [7, 14]．ただし p.v. を Cauchy の主値積分として

$$H_s u_{-m}(x) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{p.v.}\int_{-s}^{s} \frac{u_{-m}(t)}{x-t}dt, \quad |x| < s$$

および

$$\begin{aligned} p_{-m}(x) &= \frac{1}{\pi i}\int_\Lambda \frac{u_{-m}(\zeta)}{\zeta - x}d\zeta \\ &+ \frac{1}{\pi i}\int_\Lambda \left(\frac{d\zeta}{\zeta - x} - \frac{d\overline{\zeta}}{\overline{\zeta} - x}\right)\left\{\sum_{j=1}^{\infty} u_{-m-2j}(\zeta)\left(\frac{\overline{\zeta} - x}{\zeta - x}\right)^j\right\} \end{aligned}$$

である．

ここで作用素 iH_s の $L^2(S)$ 上でのスペクトルは $-1 \le \xi \le 1$ であるが [11]，端点での $I - iH_s$ は単射であり [7]，$(I - iH_s)^{-1}$ は自然な定義域で一意に存在することに注意する．そこでこの解 $u_{-m}|_S$ をもちい，$\gamma = \Lambda \cup S$ として (7) をもちいることで $u_{-1}|_{D^+}$ が求まる．さらに u は実数値ゆえ $u_1 = \overline{u_{-1}}$ であり，(5) より $z \in D^+$ において

$$\mu = \overline{\partial u_{-1}} + \partial u_{-1} = \mathrm{Re}\{\partial_x u_{-1}\} + \mathrm{Im}\{\partial_y u_{-1}\}$$

によって減衰率 μ が求まる．

3. 提案手法の数値的実現

応用の視点からは，前節で述べた数学解析的な再構成手法の数値的手法が重要となる．そこで本節では，前節の再構成手法を数値的に実現するため，現れる線積分を (複合) 中点則で近似するアルゴリズムを提案する．

離散化にあたり，K, L, N, M をそれぞれ正整数とする．そこで Λ を K 等分して

$$\begin{aligned} &\Delta\lambda = \frac{\pi - 2\lambda_0}{K}, \\ &\lambda_k = \lambda_0 + \left(k - \frac{1}{2}\right)\Delta\lambda, \quad 1 \le k \le K, \\ &\zeta_k = e^{i\lambda_k} + ic \in \Lambda \end{aligned}$$

とする．また S を L 等分して

$$\Delta x = \frac{2s}{L}, \quad x_\ell = -s + \left(\ell - \frac{1}{2}\right)\Delta x, \quad 1 \le \ell \le L$$

とする．X 線の進行方向は

$$\Delta\theta = \frac{2\pi}{N}, \quad \theta_n = n\Delta\theta, \quad \xi_n = (\cos\theta_n, \sin\theta_n) \in S^1$$

で離散化し，各 $\zeta_k \in \Lambda$ で $(\zeta_k - ic)\cdot\xi_n^\perp > 0$ の範囲の方向 ξ_n で $R\mu$ が与えられているとする．さらに M をひとつ選んで固定し，m は $-M \le -m \le 0$ を満たす全ての整数，また $-m - 2j \ge -M$ を満たす最小の整数 j を $J = J(m)$ で表す．

数値計算の手順としては，まず

$$u(\zeta, \xi) = \begin{cases} 0, & (\zeta - ic)\cdot\xi^\perp \le 0; \\ R\mu(\xi^\perp, (\zeta - ic)\cdot\xi^\perp), & (\zeta - ic)\cdot\xi^\perp > 0 \end{cases}$$

から $\zeta_k \in \Lambda$ における Fourier 係数 $u_{-m}(\zeta_k)$ を次で近似する．

$$U_k^{(-m)} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} u(\zeta_k, \xi_n)e^{im\theta_n}, \quad 1 \le k \le K.$$

次に，$\Lambda = \{\zeta(\lambda) = e^{i\lambda} + ic\,;\, \lambda_0 < \lambda < \pi - \lambda_0\}$ と表すと，p_{-m} の第 2 項の複素積分は

$$\begin{aligned} &\int_\Lambda \left(\frac{d\zeta}{\zeta - x} - \frac{d\overline{\zeta}}{\overline{\zeta} - x}\right)F(\zeta) \\ &= \int_{\lambda_0}^{\pi-\lambda_0} \left(\frac{ie^{i\lambda}d\lambda}{\zeta(\lambda) - x} - \frac{-ie^{-i\lambda}d\lambda}{\overline{\zeta(\lambda)} - x}\right)F\big(\zeta(\lambda)\big) \\ &= 2i\int_{\lambda_0}^{\pi-\lambda_0} \mathrm{Re}\left(\frac{e^{i\lambda}}{\zeta(\lambda) - x}\right)F\big(\zeta(\lambda)\big)\,d\lambda \end{aligned}$$

であることに注意して，

$$\begin{aligned} P_{-m}(z) &= \frac{1}{\pi}\sum_{k=1}^{K}\frac{U_k^{(-m)}}{\zeta_k - z}e^{i\lambda_k}\Delta\lambda \\ &+ \frac{2}{\pi}\sum_{k=1}^{K}\mathrm{Re}\left(\frac{e^{i\lambda_k}}{\zeta_k - z}\right)\left\{\sum_{j=1}^{J(-m)} U_k^{(-m-2j)}\left(\frac{\overline{\zeta_k} - \overline{z}}{\zeta_k - z}\right)^j\right\}\Delta\lambda \end{aligned}$$

とし，積分方程式を選点法で離散化して，連立一次方程式

$$V_\ell^{(-m)} - \frac{i}{\pi}\sum_{\substack{1\le j\le L \\ j\ne\ell}}\frac{\Delta x}{x_\ell - x_j}V_j^{(-m)} = 2P_{-m}(x_\ell), \quad 1 \le \ell \le L \quad (8)$$

を得る．ここで $V_\ell^{(-m)}$ は S 上での $u_{-m}(x_\ell)$ 相当値であり，数値解析学の立場からは，計算が停止せず数値解が唯一つ求まるために，次が重要である [8]．

定理 1. 任意の正整数 L に対して，連立一次方程式 (8) に現れる係数行列は *(*狭義*)* 正定値である．特に $\{V_\ell^{(-m)}; 1 \le \ell \le L\}$ は唯一つ存在する．

以上で得られる $\{U_k^{(-m)}\}$ と $\{V_\ell^{(-m)}\}$, $-M \le -m \le 0$ をもちいると

$$\begin{aligned} U^{(-1)}(z) &= P_{-1}(z) + \frac{1}{2\pi i}\sum_{\ell=1}^{L}\frac{V_\ell^{(-1)}}{x_\ell - z}\Delta x \\ &+ \frac{1}{2\pi i}\sum_{\ell=1}^{L}\left(\frac{\Delta x}{x_\ell - z} - \frac{\Delta x}{x_\ell - \overline{z}}\right)\left\{\sum_{j=1}^{J(-1)} V_\ell^{(-1-2j)}\left(\frac{x_\ell - \overline{z}}{x_\ell - z}\right)^j\right\} \end{aligned}$$

が $z \in D^+$ で求まる．そこで，充分小さい正数 h_1, h_2 を定めて，中心差分近似により

$$\begin{aligned} \mu(z) \approx\, &\mathrm{Re}\,\frac{U^{(-1)}(z + h_1) - U^{(-1)}(z - h_1)}{2h_1} \\ &+ \mathrm{Im}\,\frac{U^{(-1)}(z + ih_2) - U^{(-1)}(z - ih_2)}{2h_2} \end{aligned}$$

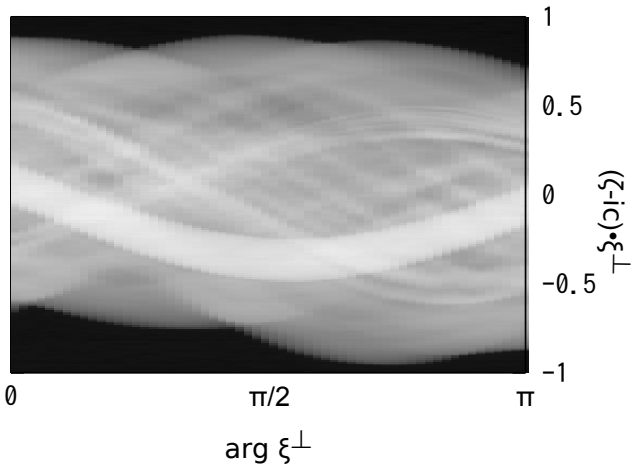


Fig. 2: Measurement data (sinogram) by whole measurement on Γ_+

を得る．

4. 実測値からの再構成例

提案手法の妥当性を示すため，Finnish Inverse Problems Society が公開している実測値のひとつ [1, 4] をもちいた再構成例を示す．

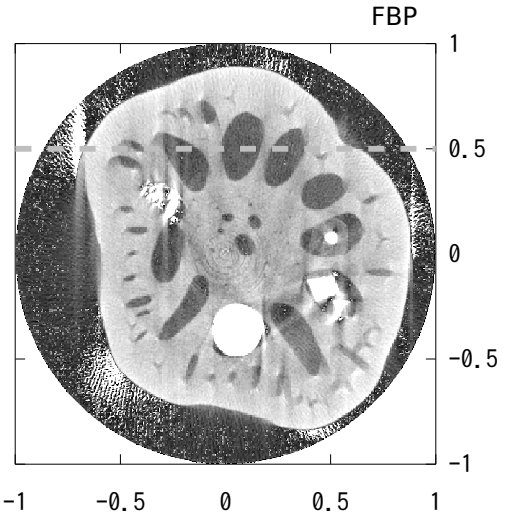


Fig. 3: Reconstructed image by conventional FBP from whole measurement in Fig. 2. The sub domain $y > 0.5$ (above the dotted line) corresponds to ROI in following numerical experiments.

Fig. 2 に，公開されている投影データ (Radon 変換像) の実測値の一部を示す．これは部分観測ではなく全周観測のもので，公開されているデータから物体近傍のみを取り出したものである．横軸は X 線の照射 (進行) 方向に垂直な $\xi^\perp$ の偏角であり，このデータは，方向の区間 $[0, \pi)$ を 180 等分方向して提供されている．また縦軸は，平行に照射した X 線の，D の中心 ic を通過する X 線との距離を表しており，この図の範囲では $[-1, 1]$ 区間を 1887 分割している．

FBP [10, 13] で得られる再構成を Fig. 3 に示す．FBP で典型的な streak アーチファクトを含むものの，D の画像が得られている．

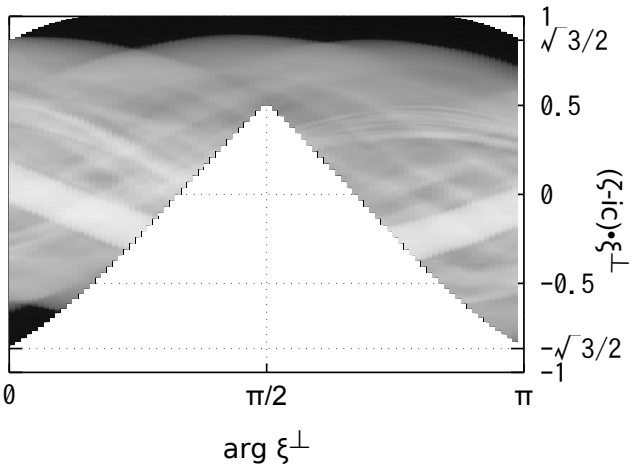


Fig. 4: Sinogram corresponding to partial measurement data on arc $\Lambda = \{\pi/6 < \arg(\zeta - ic) < 5\pi/6\}$.

本節では部分観測をおこなう Λ として $\pi/6 < \arg(\zeta - ic) < 5\pi/6$ の部分を考える．このとき，Fig. 1 のとおり座標軸を設定すると，$c = -0.5$, $\lambda_0 = \pi/6$, $s = \sqrt{3}/2$ となる．部分観測に対応する観測値を Fig. 4 に示す．図示していない部分は，投影データを取得する必要のない部分を示しており，Fig. 2 と比較して，観測回数が有意に減少していることがわかる．例えば $\xi = 0$ (x 軸に平行に X 線を照射) の場合，Fig. 5 の左図に示すとおり，D^+ を通過するのは ic との距離 s が $0.5 < s < 1$ の範囲である．また $\xi = \pi/2$ (y 軸に平行に X 線を照射) の場合，Fig. 5 の右図に示すとおり，D^+ を通過するのは $|s| < \sqrt{3}/2$ の範囲のみとなる．

FBP は，$P_\omega(s) = R\mu(\omega, s)$, $s = (\zeta - ic) \cdot \xi^\perp$ と $|r|$ の逆

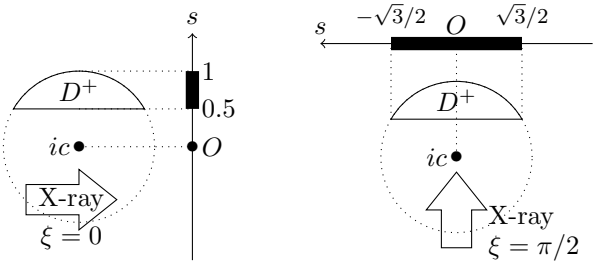


Fig. 5: Parallel beam projection in partial measurement. The axis s is the distance between X-ray and ic. (left) X-ray's direction is $\xi = 0$; (right) X-ray's direction is $\xi = \pi/2$

Fourier 変換の適当な近似 h の合成積によって

$$\mu(z) \approx \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} P_\omega * h(z\cdot\omega)\, d(\arg\omega)$$

で表されるが，本論文で考える部分観測では $P_\omega(s)$ が s について局所的にのみ与えられるため，任意の $z \in D^+$ で合成積 $P_\omega * h$ が計算されず，μ が求まらない．

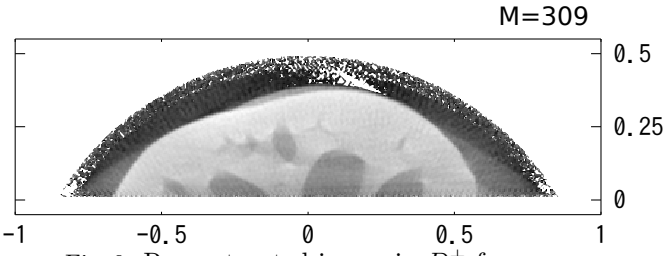


Fig. 6: Reconstructed image in D^+ from partial measurement in Fig. 4 on Λ with $M = 309$.

一方，提案する手法による再構成の結果を Fig. 6 に示す．FBP の再構成 Fig. 3 の $y > 0.5$ の部分と同様の再構成結果が得られており，提案手法の妥当性を示している．ここで Fig. 4 の観測は，Λ を $K = 1977$ 等分することに相当し，$(\Delta\lambda = (2\pi/3)/1977 \approx 2/1887)$，$L$ 上の分点数は $\Delta x \approx \Delta\lambda$ となるよう，$L = 1634$ とした．また $h_1 = h_2 = 1/200$ として，格子点 $D_h^+ = \{z_j = (j_1h_1, j_2h_2) \in D^+\,;\, j = (j_1, j_2) \in \mathbb{Z}^2\}$ 上で $\mu(z_j)$ を求めた．$M = 309$ とするとき，再構成に要した計算時間は，Xeon E5-2650 v4 (2.2GHz) での計算で約 970 秒であり，本研究の実装で主として計算時間を要したのは $\{P_{-m}(x_\ell)\,;\, -M \le -m \le 0, 1 \le \ell \le L\}$ の計算に約 688 秒，$\{U^{(-1)}(z_j)\,;\, z_j \in D_h^+\}$ の計算に約 271 秒であった．また $\{P_{-m}(x_\ell)\}$, $\{U^{(-1)}(z_j)\}$ は x_ℓ, z_j の点ごとに求める自明な並列化が可能であり，この場合， OpenMP による 24 スレッドでの並列計算では約 157 秒であった．そのうち $\{P_{-m}(x_\ell)\}$, $\{U^{(-1)}(z_j)\}$ の時間はそれぞれ約 62 秒，約 92 秒であり，提案手法は並列計算に適することがわかる．

5. 打ち切りパラメータ M の選択への注意

提案する数値計算手法では，u_{-1} および p_{-m} に現れる級数を打ち切るために，現れる Fourier モード (周波数) を制限する整数 M を導入した．全周観測の場合には，この M は正則化パラメータに相当する [5]．本節ではその選択について，幾つかの注意を与える．

本論文では，u の Fourier 係数のひとつである u_0 に注目する．この u_0 は提案する再構成手法では現れないが，X 線の強度が正値であることから (1) で定めた u は実数値であり，したがって

$$u_0(z) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} u\big(z, \xi(\theta)\big)\, d\theta$$

も実数値であることに注意する．さらに式 (7) と同様に

$$u_0(z) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\Lambda\cup S} \frac{u_0(\zeta)}{\zeta - z}\, d\zeta + \frac{1}{2\pi i}\int_{\Lambda\cup S}\left(\frac{d\zeta}{\zeta - z} - \frac{d\overline{\zeta}}{\overline{\zeta} - \overline{z}}\right)\left\{\sum_{j=1}^{\infty} u_{-2j}(\zeta)\left(\frac{\overline{\zeta} - \overline{z}}{\zeta - z}\right)^j\right\}$$

が成立し，前節の離散化アルゴリズムに対応する近似値として

$$U^{(0)}(z) = P_0(z) + \frac{1}{2\pi i}\sum_{\ell=1}^{L}\frac{V_\ell^{(0)}}{x_\ell - z}\Delta x + \frac{1}{2\pi i}\sum_{\ell=1}^{L}\left(\frac{\Delta x}{x_\ell - z} - \frac{\Delta x}{x_\ell - \overline{z}}\right)\left\{\sum_{j=1}^{M/2} V_\ell^{(-2j)}\left(\frac{x_\ell - \overline{z}}{x_\ell - z}\right)^j\right\}$$

が考えられる．

上述のとおり $u_0 \in \mathbb{R}$ であるが，この近似値 $U^{(0)}$ は実数値とは限らない．そこで，虚部 $\mathrm{Im}\, U^{(0)}$ が誤差に対応すると考え，$\mathrm{Im}\, U^{(0)}$ を最小とする M が打ち切りパラメータの候補と考える [6]．

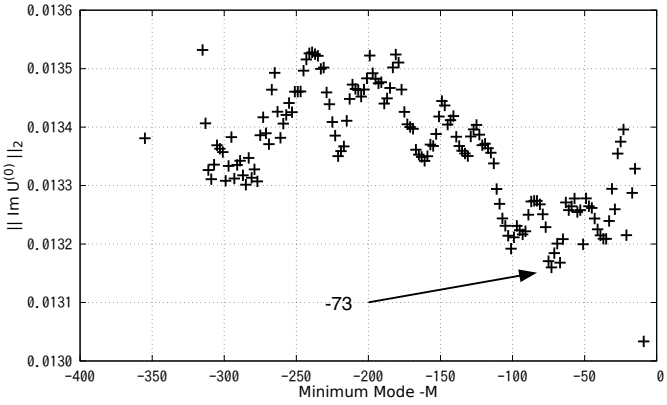


Fig. 7: L^2 norm of the imaginary part of u_0

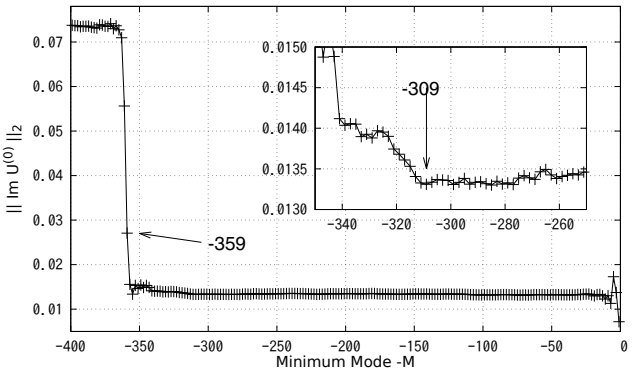


Fig. 8: L^2 norm of the imaginary part of u_0 in wider ranges

Fig. 7 および 8 に M と $\left\|\mathrm{Im}\, U^{(0)}\right\|_2$ の値を示す．Fig. 7 より，M がある程度大きな範囲 (例えば $M > 10$) で $\left\|\mathrm{Im}\, U^{(0)}\right\|_2$ が最小となるのは $M = 73$ であった．一方で Fig. 7 の縦軸

に示す $\left\|\mathrm{Im}\, U^{(0)}\right\|_2$ の範囲の幅は 6×10^{-4} であり，数値計算で用いたパラメータに比して極めて小さいことに注意する．実際，縦軸の範囲を変えると Fig. 8 を得るが，この場合，$M = 73$ や $M = 309$ 付近での $\mathrm{Im}\, U^{(0)}$ の変化に比して $M = 359$ 付近で $\left\|\mathrm{Im}\, U^{(0)}\right\|_2$ が有意に増大していることがわかる．多くの Fourier モードを利用するほど細部の構造が再現されることを期待すると，極小値を与える $M = 309$ および急激な増大前の $M = 357$ も，再構成にもちいるパラメータの候補である．

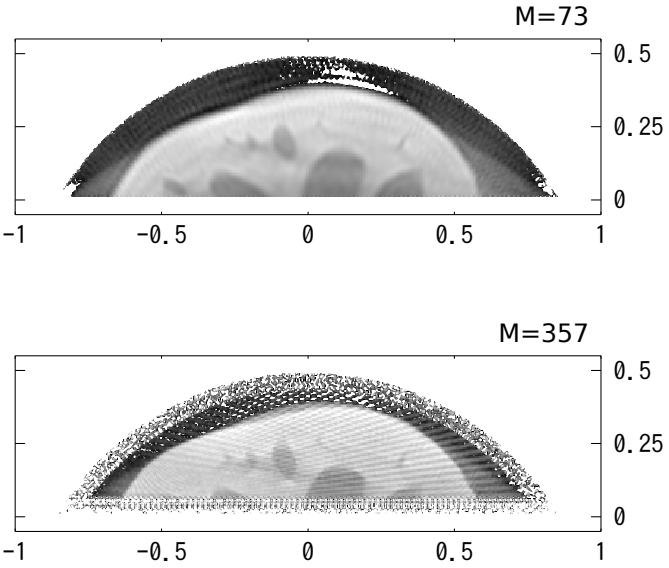


Fig. 9: Image reconstruction by proposed method from partial measurement in Fig. 4 (top) $M = 73$ achieving the minimum; (bottom) $M = 357$ including artifacts

これら $M = 73, 357$ による再構成結果を Fig. 9 に示す．$M = 309$ とした Fig. 6 と同様，$M = 73$ では良好な再構成が得られる．一方，$\left\|\mathrm{Im}\, U^{(0)}\right\|_2$ の増大の直前の $M = 357$ では画像全体にアーチファクトが現れており，この観測データおよび分割数においては，より小さな M を選択すべきであることを示唆している．すなわち，$\left\|\mathrm{Im}\, U^{(0)}\right\|_2$ の微小な変化も重要であることがわかる．

再構成の差を定量的に調べるため，$M = 73, 309, 357$ における再構成と，FBP による再構成の差の相対値を，

$$\mathrm{Diff}^{(M)}(z_{ij}) = \left| \frac{\mu^{(M)}(z_{ij}) - \mu^{(\mathrm{FBP})}(z_{ij})}{\mu^{(\mathrm{FBP})}(z_{ij})} \right|, \quad z_{ij} \in D_h^+ \quad (9)$$

で定義する．ただし $\mu^{(M)}(z_{ij})$, $\mu^{(\mathrm{FBP})}(z_{ij})$ はそれぞれ打ち切りパラメータ M の提案手法と (全周観測の) FBP で得られる z_{ij} での再構成値とする．前節の再構成例において，$\mathrm{Diff}^{(M)}(z_{ij})$ を横軸に，その値をとった格子点数を縦軸にとったものを Fig. 10 に示す．この結果より， FBP の結果を基準としたときの提案手法の誤差は，$M = 73, 309$ の場合で同様の傾向であり，多くの点で 20% 以下となっている．また D_h^+ に含まれる格子点の個数は 24725 個であり，(9) の値が 100 を越えた格子点数は，$M = 73, 309, 357$ の場合にそれぞれ 7326 個 (30%)，7956 個 (32%)，11090 個 (45%) であった．このことから $M = 357$ での再構成は FBP との差が大きいことが定量的にもわかる．さらに $M = 309$ の場合に (9) の値が 100 以上となった点を Fig. 11 に示す．これより，(9) の差が大きくなるのは対象の「外部」($\mu = 0$) に相当していることもわかり，物体「内部」における断層画像は FBP と提案手法で充分に一致していることも定量的にわかる．

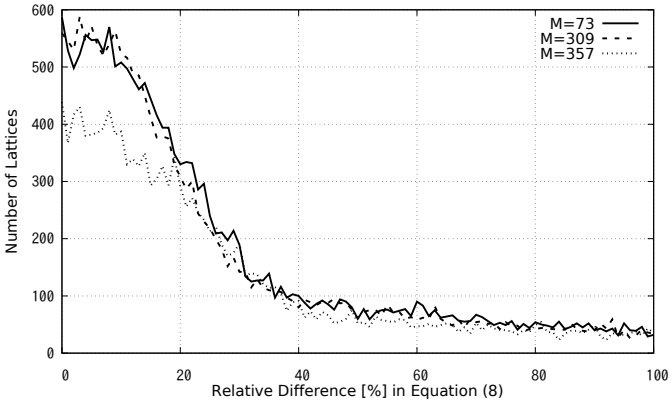


Fig. 10: Number of lattices taking relative differences defined in (9). The number of total lattices is 24725 in D_h^+, and numbers of lattices taking relative differences over 100 are 7326, 2956, and 11090 for $M = 73$, $M = 309$, and $M = 357$ respectively.

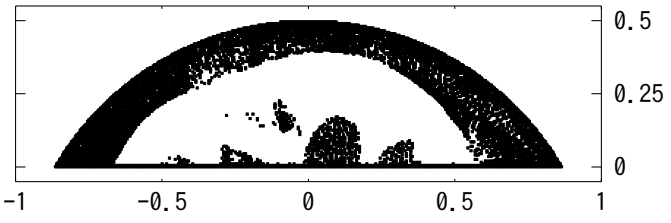


Fig. 11: Region where relative differences (9) is greater than 100 for $M = 309$.

なお Fig. 7 および Fig. 8 で示した $\left\|\mathrm{Im}\, U^{(0)}\right\|_2$ の挙動や，それをもとに論じた M の具体的な値は，一般に，再構成する領域によって異なることに注意する．

6. 結言

本論文では，X 線計算機断層撮影において，A-analytic 理論にもとづく境界積分の手法により，部分観測から再構成画像を取得する数値計算アルゴリズムを提案した．また実測値からの部分的な再構成をおこない，その妥当性を示した．提案手法には正則化パラメータの役割を果たすパラメータ M も現れるが，結果の精度と安定性を両立させるための選択についての基準を論じた．提案する再構成手法は各点ごとの再構成を与えることから，本論文で論じた「領域 D^+ において単一の最適な M」という条件での選択基準は目安に留め，実用化においては，例えば ∂D^+ の近傍では Cauchy 核の数値積分による精度の劣化も考慮し，部分領域ごとに局所的に M を選択するなど，多様な検討が必要と考えられる．

謝辞 本研究の一部は JSPS 科研費 JP20H01821, 21K07593, Austrian Science Fund (FWF) P31053-N32, および NSF grant DMS-1907097 の助成を受けたものです.

参考文献

(1) T. A. Bubba, et al.: *Tomographic X-ray Data of a Lotus Root Filled with Attenuation Objects*, arXiv:1609.07299v2 [physics.data-an] (2016)

(2) A. L. Bukhgeim : *Inversion Formulas in Inverse Problems*, Linear Operators and Ill-Posed Problems by M. M. Lavrentiev and L. Ya. Savalev, (1995), Plenum, New York, pp. 323–378.

(3) D. V. Finch : *The Attenuated X-ray Transform: Recent Developments*, in Inside Out: Inverse Problems and Applications, Math. Sci. Res. Inst. Publ., **47** (2003), Cambridge Univ. Press, Cambridge, pp. 47–66.

(4) Finnish Inverse Problems Society : *Open X-ray Tomographic Datasets*, `https://www.fips.fi/dataset.php` または DOI : 10.5281/zenodo.1254204

(5) 藤原宏志，大石直也 : 境界積分による X 線計算機断層撮影法の正則化， 計算数理工学論文集， **20**(2020) pp. 75–79.

(6) H. Fujiwara, K. Sadiq, and A. Tamasan : *Numerical Reconstruction of Radiative Sources in an Absorbing and Non-diffusing Scattering Medium in Two Dimensions*, SIAM J. Imagin Sci., **13** (2020), pp.535–555.

(7) H. Fujiwara, K. Sadiq, and A. Tamasan : *Partial Inversion of the 2D Attenuated X-ray Transform with Data on an Arc*, Inverse Probl. Imaging, (2021), DOI : 10.3934/ipi.2021047

(8) H. Fujiwara, K. Sadiq, and A. Tamasan : *Numerical Source Reconstruction from Partial Measurement in an Absorbing and Planar Scattering Medium*, (in preparation).

(9) 藤原宏志，A. Tamasan : Cauchy 型積分によるメッシュレス X 線計算機断層撮影法, 計算数理工学論文集, **19**(2019) pp. 1–6.

(10) A. C. Kak and M. Slaney : *Principles of Computerized Tomographic Imaging*, (1988), IEEE Press, New York.

(11) W. Koppelman and J. D. Pincus : *Spectral Representation for Finite Hilbert Transforms*, Math. Z., **71** (1959), pp. 399-407.

(12) 工藤博幸: インテリア CT における画像再構成, Med. Imag. Tech., **34** (2016), pp. 186–197.

(13) J. Radon : *Über die Bestimmung von Funktionen durch ihre Integralwerte längs gewisser Mannigfaltigkeiten*, Berichte Sächsische Akademie der Wissenschaften zu Leipzig, Math.-Phys. Kl., **69** (1917), pp. 262–277.
(English translation : *On the Determination of Functions from Their Integral Values Along Certain Manifolds*, in IEEE Trans. Med. Imaging, **MI-5**(1986), pp. 170–176.)

(14) K. Sadiq and A. Tamasan : *On the Range of the Attenuated Radon Transform in Strictly Convex Sets*, Trans. Amer. Math. Soc., **367** (2015), pp. 5375–5398.

(15) 塩見剛 : トモシンセシスの原理と応用, 医用画像情報学会雑誌, **24** (2007), pp. 22–27.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月)，論文 No. 08-211218 JASCOME

軌道通り変位補正が座屈確率に及ぼす影響

EFFECT OF RAIL LATERAL REALIGNMENT ON TRACK BUCKLING PROBABILITY

阿部　和久 [1)]，新井　優介 [2)]，紅露　一寛 [3)]

Kazuhisa ABE, Yuusuke ARAI and Kazuhiro KORO

1) 新潟大学工学部　(〒 950-2181　新潟市西区五十嵐 2 の町 8050 番地，E-mail:abe@eng.niigata-u.ac.jp)
2) 新潟大学大学院　(〒 950-2181　新潟市西区五十嵐 2 の町 8050 番地，E-mail:f21e027h@mail.cc.niigata-u.ac.jp)
3) 新潟大学工学部　(〒 950-2181　新潟市西区五十嵐 2 の町 8050 番地，E-mail:kouro@eng.niigata-u.ac.jp)

In this paper, effect of the rail lateral realignment in accordance with the 10m-chord versine tolerance is discussed from the viewpoint of track buckling probability. To achieve this, track buckling analysis for a numerical model consisting of tangential continuous welded rails and sleepers is conducted. The initial lateral misalignment is modeled by a stationary random process and generated based on an autocorrelation function. In the numerical analyses, the realignment is defined as an optimal problem with a constraint condition for the allowable 10m-chord versine. The buckling probability is obtained through the Monte Carlo Simulation. Influence of the realignment on the buckling probability is investigated.

Key Words: Buckling Temperature, 10m-Chord Versine Criterion, Monte Carlo Simulation

1. はじめに

鉄道軌道において，継ぎ目を持たないロングレールは列車・軌道系の振動・騒音低減に有効であることなどから，在来線においてもその導入が進められている．しかし，長い区間にわたりまくらぎを介してレールが拘束されることで，夏季の日中など高温時にはレールに著大な圧縮軸力が発生する．特にバラスト軌道では，水平横方向変位 (通り変位) に対する拘束力 (道床横抵抗力) が比較的小さい場合，レールの温度上昇が座屈を惹き起こす危険性がある．

軌道座屈強度は，レール軸力がゼロとなる時のレール温度 (中立温度) や，道床横抵抗力，およびレールの初期不整 (初期通り変位) などに大きく依存する [(1)]．そのため，ロングレール軌道においては，これらの適切な管理が重要となる．一般に，軌道横変位と中立温度からの相対温度 (レール温度) との関係は Fig.1 に示す様なつり合い経路で与えられる．実際の軌道座屈強度は，Fig.1 の A 点における飛び移り座屈時の温度で与えられる．レール温度が当該値に達すると，力学状態は安定なつり合い解を与える C 点へと遷移し，その結果として瞬時に大きな変位が発生する．この座屈温度は，初期通り変位振幅の増加と共に急激に低下する「初期不整鋭敏性」を有する [(2)]．そのため，ランダムな波形で特徴づけられる通常の初期通り変位存在下で，軌道の座屈温度を確定論的に評価することは現実的でない．

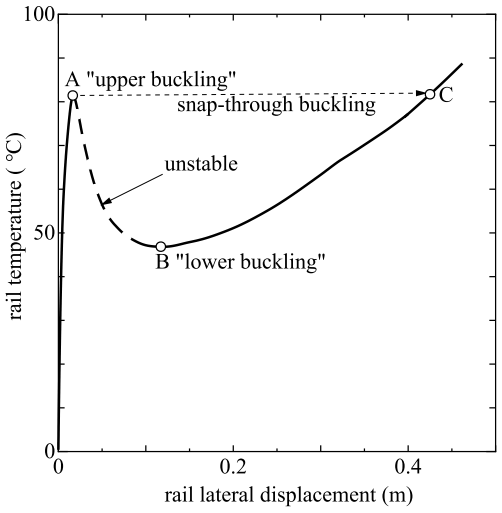


Fig. 1　Relationship between lateral displacement and rail temperature

この様な背景の下，我国における座屈管理は Fig.1 の B 点 (最低座屈強さ) に基づき行われてきた [(3)]．最低座屈強さは，飛び移り座屈後のつり合い経路が取り得る最低温度を与える．この値は，A 点の飛び移り座屈温度とは異なり，通り変位の影響をほとんど受けない [(4)]．したがって，実際に発生

2021.10.5 受付，2021.10.26 受理

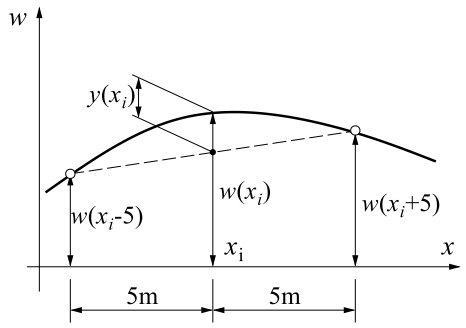


Fig. 2　Schimatic diagram of 10m-Chord versine

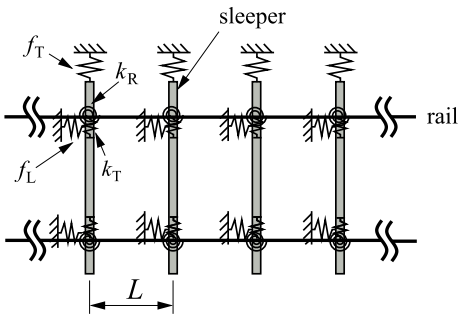


Fig. 3　Modeling of track

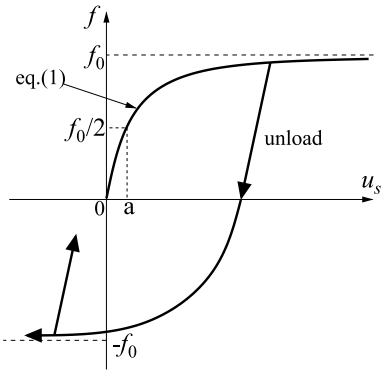


Fig. 4　Hysteresis curve of track resistance

するレール温度が当該値を上回らない様に，軌道の座屈強度を確保することで軌道座屈を確実に防ぐことができる．

しかし，日最高気温が上昇傾向にある近年では，最低座屈強さに基づいた軌道管理が困難になりつつある．そのため，最低座屈強さから実際に大きな変位が発生する飛び移り座屈までの温度差 (座屈余裕度) を考慮した管理基準の緩和に向けた検討がなされている [5]．また，前述のとおり，飛び移り座屈温度はランダムな初期通り変位に強く依存しているため，軌道座屈温度を確率論的に評価する試みも行われつつある [2, 4]．なお，文献 (2), (4) では，初期通り変位を所定の距離相関関数に従うランダム波形で与え，多数の波形サンプルに対するモンテカルロシミュレーション (MCS) より座屈強度確率を求めている．

軌道の通り変位の管理は，それ自体の幾何形状 (原波形) や振幅ではなく，一般に 10m 弦正矢と呼ばれる値に基づいてなされる．なお，10m 弦正矢は，Fig.2 に示す様に，着目点 x_i における通り変位原波形値 $w(x_i)$ と，そこから前後 5m 離れた 2 つの地点における通り変位原波形 $w(x_i-5), w(x_i+5)$ を結ぶ直線上の中点 x_i における値との差 $y(x_i)$ で与えられる．軌道保守過程で 10m 弦正矢に基づき通り変位補正が行われた場合，それが許容値以下に修正されることで，間接的に原波形振幅やその標準偏差などが低減され，その結果，座屈確率も改善されるものと考えられるが，文献 (2), (4) ではその実際の効果は未確認なままである．

そこで本研究では，初期通り変位原波形に 10m 弦正矢の許容値に基づいた補正を加え，それが軌道座屈確率に及ぼす影響について調べる．なお従来，10m 弦正矢の補正法として交差法と呼ばれるものが用いられており，その改良法 [6] なども提案されている．当該法では，5m 間隔に配置された各点での 10m 弦正矢の修正量が求められる．しかし本研究では，座屈解析を行う過程で，各有限要素節点における通り変位原波形自体の補正量を直接求める必要がある．そのため，各節点における 10m 弦正矢値が許容値以下となる様な通り変位原波形の補正量を求めるための一連の過程を最適化問題として定式化し，それに基づく新たな補正法を構成した．

2. 軌道座屈解析の概要

2.1. 軌道のモデル化

直線軌道を対象に，左右ロングレールとまくらぎから構成される軌きょうを考える (Fig.3)．レールは長手方向の伸縮とそれに直交する水平方向たわみ (通り変位) を考慮した Euler ばり要素により離散化する．まくらぎは，レール長手方向変位と通り変位を考慮した剛な棒により表現し，等間隔 L で配置する．Fig.3 に示す様に，レール・まくらぎ間の締結力は，通り変位方向の線形バネ k_T，およびレール・まくらぎ間の回転バネ k_R によって表す．一方，レール伸縮がまくらぎ締結により完全に拘束される「不動区間」においては，レール方向のレール・まくらぎ間相対変位は発生せず，当該方向の締結バネが軌道座屈に及ぼす影響は無視し得るため，レール長手方向についてはレールとまくらぎを剛接する．また，軌道両端の「可動区間」ではレール軸力が低下するため，当該区間で座屈を生ずることは無く，レールの拘束条件が座屈挙動に影響を及ぼす恐れは無いと考えられることから，不動区間同様にレール・まくらぎ間を剛接した．

道床からまくらぎに作用する，軌道横方向の道床横抵抗力と，軌道長手方向の道床縦抵抗力は，非線形モデルで与える．なお，それらの作用力 f_T, f_L は，次式 [7] の骨格曲線と，Fig.4 の様な履歴特性に従うものとする．

$$f_T = f_{0T}\frac{u_{ST}}{a_T + |u_{ST}|}, \qquad f_L = f_{0L}\frac{u_{SL}}{a_L + |u_{SL}|} \tag{1}$$

ここで，f_0 は最終道床抵抗力，u_S はまくらぎ変位，a は道床抵抗力の値が $f_0/2$ となる時の変位であり，下付き添え字の T と L は，それぞれ横抵抗力と縦抵抗力に関する値であ

ることを意味している．

解析に当り，レール両端は変位拘束しない．そのため，式 (1) の道床縦抵抗力 f_L の作用下で，前述の不動区間を除く軌道両端の 120〜200m 前後の区間において，レール伸縮とそれに伴う軌道長手方向へのまくらぎ移動とが発生する [(2)]．

2.2. 軌道の座屈解析

レールは有限変位理論に基づき離散化する．その下で，左右レールそれぞれにランダムな初期通り変位を設定し，弧長増分法 [(8)] によりつり合い経路を求める．

初期通り変位原波形は，以下の距離相関関数 $R(x)$ に従うものとして作成した．

$$R(x) = \frac{\sigma^2}{1 + (x/b)^2} \tag{2}$$

ここで，σ は通り変位原波形の標準偏差，b は長さの次元を持つ定数 (相関長) である．

式 (2) に従うランダムな初期通り変位原波形は，次式より生成される [(2)]．

$$\{\mathbf{W}\} = [\mathbf{\Phi}][\mathbf{M}^{1/2}]\{\boldsymbol{\xi}\} \tag{3}$$

ここで，$\{\mathbf{W}\}$ は有限要素節点における初期通り変位から成るベクトル，$\{\boldsymbol{\xi}\}$ は期待値ゼロ，標準偏差 1 の正規乱数を成分とするベクトルである．$[\mathbf{\Phi}]$ と $[\mathbf{M}^{1/2}]$ は次式の固有ベクトル $\{\boldsymbol{\phi}_i\}$ を縦ベクトル成分として並べて得られる行列，および固有値の平方根 $\sqrt{\mu_i}$ を対角成分に持つ対角行列である．

$$[\mathbf{C}]\{\boldsymbol{\phi}_i\} = \mu_i\{\boldsymbol{\phi}_i\} \tag{4}$$

なお，分散・共分散行列 $[\mathbf{C}]$ の成分 c_{ij} は，i, j 番有限要素節点の軌道長手方向座標 x_i, x_j について，$c_{ij} = R(|x_i - x_j|)$ で与えられる．

2.3. MCS による座屈強度確率の評価

式 (3) よりランダムな初期通り変位原波形を生成して，それに基づく座屈解析から最低座屈強さと飛び移り座屈強度 (温度) を求める．この一連の操作を多数のサンプルに適用して MCS を実施する．得られた座屈温度から，次のカーネル密度推定 [(9)] により確率密度関数 $p(t)$ を求める．

$$\begin{aligned} p(t) &= \frac{1}{Nh\sqrt{2\pi}} \sum_{i=1}^{N} e^{-(t-t_i)^2/(2h^2)}, \\ h &= \sigma_t \left(\frac{4}{3N}\right)^{1/5} \end{aligned} \tag{5}$$

ここで，t はレール温度，σ_t は座屈温度データ t_i から求めた標準偏差，N は MCS のサンプル数である．

式 (5) に対応する確率分布関数 $P(t)$ は次式により評価する．

$$\begin{aligned} P(t) &= \int_{-\infty}^{t} p(\tau)\, \mathrm{d}\tau \\ &= 1 - \frac{1}{N\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^{N} Erf\left(\frac{t - t_i}{\sqrt{2}h}\right) \end{aligned} \tag{6}$$

ここで，$Erf(t)$ は誤差関数であり，本研究では次式により定義する．

$$Erf(t) = \int_{t}^{\infty} e^{-\tau^2}\, \mathrm{d}\tau \tag{7}$$

3. 10m 弦正矢許容値に基づく通り変位原波形補正法

3.1. 10m 弦正矢と通り変位原波形との関係式

レールをはり要素で分割する際に，i 番節点の軌道長手方向座標値を $x_i = i\Delta x$ で与えるものとする．なお，Δx は x 方向の節点間隔である．$n = 5/\Delta x$ とおくと，i 番節点から前後に 5m 離れた節点の番号は $i \pm n$ で与えられる．すると Fig.2 に示した 10m 弦正矢 $y(x_i) = y_i$ は次式で与えられる．

$$y_i = w_i - \frac{1}{2}(w_{i-n} + w_{i+n}) \tag{8}$$

ここで，w_i は i 番節点における通り変位原波形値である．

式 (8) より，y_i と w_i を成分に持つベクトル $\{\mathbf{Y}\}$ と $\{\mathbf{W}\}$ との関係は，次式の様に表すことができる．

$$\{\mathbf{Y}\} = [\mathbf{H}]\{\mathbf{W}\} \tag{9}$$

ここで，$\{\mathbf{W}\}$ が $w_1, \cdots, w_M$ を成分に持つものとすると，$\{\mathbf{Y}\}$ の成分は $y_{n+1}, \cdots, y_{M-n}$ で与えられることとなる．また，$[\mathbf{H}]$ は，式 (8) に基づいて定まる長方形行列である．

3.2. 初期通り変位原波形の補正計算

ここでは，補正前の初期通り変位原波形と，それに対する 10m 弦正矢の節点値を改めて w_{0i}, y_{0i} で与える．また，そこからの補正量をそれぞれ w_i, y_i で与える．「**1. はじめに**」で述べたとおり，通り変位は 10m 弦正矢に基づいて管理がなされる．その過程を再現するために，各節点における 10m 弦正矢の絶対値 $|y_{0i} + y_i|$ が，その許容値 y_{max} 以下となる様な，初期通り変位原波形節点値の補正 w_i を求めたい．本研究では，この操作を次の目的関数 J の最小化問題として定義する．

$$\begin{aligned} \underset{w}{\text{Minimize}}\ J &= \frac{1}{2}\sum_i w_i^2 + \frac{1}{2}\sum_i \lambda_i[(y_{0i} + y_i)^2 - y_{max}^2], \\ \lambda_i &\geq 0, \quad \lambda_i[(y_{0i} + y_i)^2 - y_{max}^2] = 0 \end{aligned} \tag{10}$$

ここで，λ_i は未定乗数ベクトル成分である．

目的関数の主要部分は式 (10) の右辺第 1 項目であり，通り変位原波形の補正量を最小限に抑えるために設けたものである．右辺第 2 項は，10m 弦正矢の許容値に関する制約条件である．その具体的な値は本来恒等的にゼロとなるので，J の値は右辺第 1 項目により与えられる．

J の w_i に関する感度は次式で与えられる．

$$\frac{\partial J}{\partial w_i} = w_i + \sum_m \lambda_m(y_{0m} + y_m)h_{mi} \tag{11}$$

ここで，h_{mi} は式 (9) の行列 $[\mathbf{H}]$ の成分である．

w_i の最適解を勾配法により求める．その際の修正量 Δw_i は次式により与えるものとする．

$$\Delta w_i = -\alpha \frac{w_{max}}{J'_{max}} \cdot \frac{\partial J}{\partial w_i} \tag{12}$$

ここで，α は正の定数，w_{max} と J'_{max} はそれぞれ w_i，および $\partial J/\partial w_i$ の絶対最大値である．

Table 1　Track characteristics

lateral stiffness of fastener	k_T (MN/m)	40
torsional stiffness of fastener	k_R (kN· m/rad)	20
limiting lateral resistance	f_{0T} (kN/sleeper)	5.5
displacement at $f_{0T}/2$	a_T (mm)	1.0
limiting longitudinal resistance	f_{0L} (kN/rail)	2.5
displacement at $f_{0L}/2$	a_L (mm)	1.0

次に，未定乗数ベクトル成分 λ_i の導出について述べる．ある節点 i において $|y_{0i}+y_i| > y_{max}$ であるとき，次式を満たす様に y_i の修正量 Δy_i を設定する．

$$(y_{0i}+y_i+\Delta y_i)^2 \approx (y_{0i}+y_i)^2+2(y_{0i}+y_i)\Delta y_i = y_{max}^2 \quad (13)$$

式 (13) を Δy_i について解くと次式を得る．

$$\Delta y_i = \frac{y_{max}^2-(y_{0i}+y_i)^2}{2(y_{0i}+y_i)} \quad (14)$$

式 (9) より，Δy_i と Δw_i との関係は次式で与えられる．

$$\{\Delta \mathbf{Y}\} = [\mathbf{H}]\{\Delta \mathbf{W}\} \quad (15)$$

一方，式 (11), (12) より，Δw_i は次式で与えられている．

$$\Delta w_i = -\alpha[w_i + \sum_m \lambda_m(y_{0m}+y_m)h_{mi}] \quad (16)$$

式 (14), (16) を式 (15) に代入すると，λ_i に関する次の連立方程式を得る．

$$\sum_{j,m} h_{im}h_{jm}(y_{0j}+y_j)\lambda_j = -y_i - \frac{y_{max}^2-(y_{0i}+y_i)^2}{2\alpha(y_{0i}+y_i)} \quad (17)$$

式 (17) を解くことで未定乗数 λ_i が求められる．

4. 解析結果

4.1. 解析条件

50kgN レールで構成されるロングレール軌道を想定し，水平面内 (弱軸回り) 曲げ剛性を 663 kN·m^2，伸び剛性を 1.32 GN と設定した．また，線膨張係数は 12×10^{-6} (1/°C) とした．まくらぎ間隔は 0.6 m とし，軌道長 720 m (まくらぎ 1200 本) をモデル化して，まくらぎ支持点間のレールをはり要素で 2 分割して離散化した．通常の軌道条件下では，座屈温度は概ね 2.5m 以上の初期通り変位波長成分の影響を受ける．本解析における要素長はそれに比べ十分に短く，よって当該要素分割数が結果に影響を及ぼす恐れは無い．なお，この条件では $5/\Delta x$ は約 16.7 となり，整数値を与えない．そこで以下の解析では，式 (8) の n を 17 に設定した．この場合，弦長は 10.2m となるが，10m との差は僅かであるため，当該条件での結果を 10m 弦正矢に基づく補正と見なすこととした．

その他，レール・まくらぎ締結バネと道床横・縦抵抗力に関する諸量は Table 1[(5)] に示す値に設定した．なお，最終道床横抵抗力 f_{0T} はまくらぎ 1 本分，最終道床縦抵抗力 f_{0L} はレール 1 本分 (まくらぎ 1/2 本分) の値である．

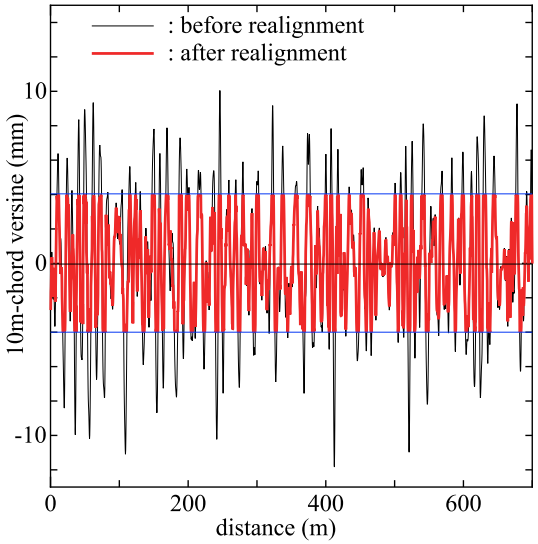


Fig. 5　10m-chord versine data before and after realignment (y_{max}=4mm)

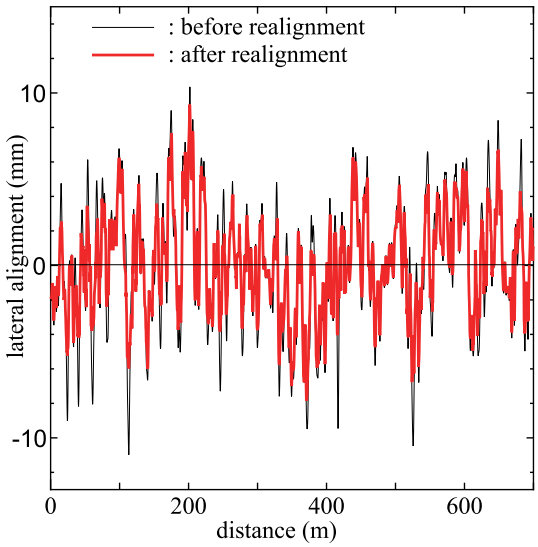


Fig. 6　Lateral alignment data before and after realignment (y_{max}=4mm)

ランダムな初期通り変位を作成する際の相関長は，過去の測定データに基づいた推定値 d=2.84 m に設定した．また，以下の解析では，MCS のサンプル数を 5000 とした．なお，文献 (2) の MCS では，座屈確率が 0.1%程度であればサンプル数を 1000 とした場合と 5000 とした場合との差異は比較的小さかった．

4.2. 軌道通り変位原波形補正法の有効性の確認

標準偏差 σ=4mm の下，式 (3) により初期通り変位原波形を生成した．その 10m 弦正矢値に対する許容値 y_{max} を 4mm に設定して，**3.2.** に述べた手法により通り変位原波形補正を実施した．補正前後における 10m 弦正矢波形の一例を Fig.5 に示す．補正前の 10m 弦正矢には，10mm を超える箇所も存

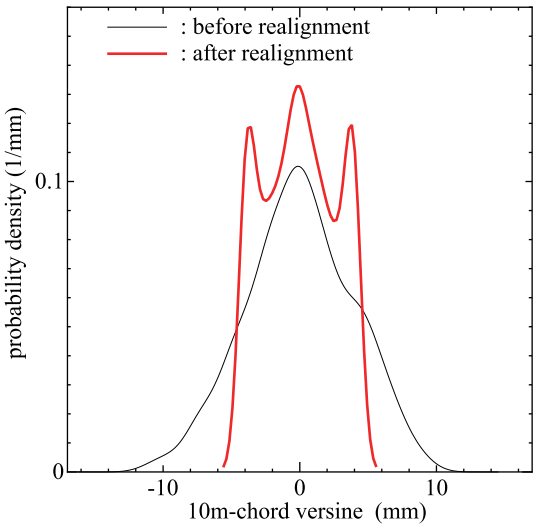


Fig. 7　Probability density functions of 10m-chord versine before and after realignment (y_{max}=4mm)

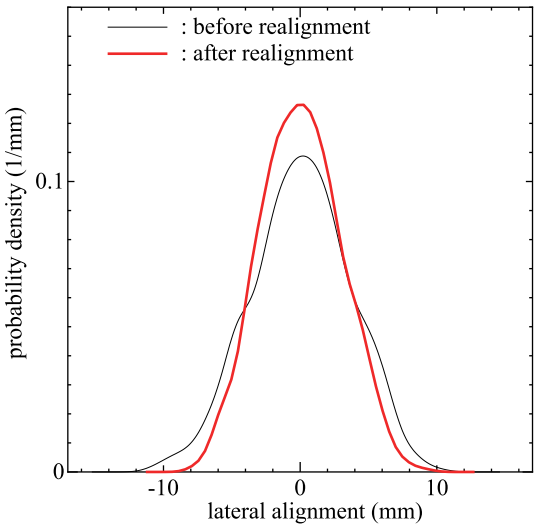


Fig. 8　Probability density functions of lateral alignment before and after realignment (y_{max}=4mm)

在している．一方，補正後の 10m 弦正矢は，設定した許容値である y_{max}=4mm 以下に概ね抑えられており，本補正法の有効性が確認できる．

なお，本解析では式 (12) の α を 0.2 と設定した．また，通り変位原波形補正量 w_i を求める反復過程の収束判定は，次式で与えた．

$$\frac{|\Delta J|}{J_{max}} \leq \varepsilon \tag{18}$$

ここで，ΔJ は目的関数 J の前修正ステップからの増分，J_{max} は現修正ステップまでにおける J の最大値，ε は収束判定値であり，本研究では ε=0.01 とした．なお，この条件下では，収束までに概ね 20 ステップを要した．

Fig.5 の各 10m 弦正矢に対応する通り変位原波形を Fig.6 に示す．10m 弦正矢に基づく補正により，通り変位の振幅が全体に小さくなっている様子が確認できる．ただし，当然のことながら，通り変位原波形自体には，補正後も 4mm を超える比較的大きな振幅が多くの箇所で認められる．

次に，10m 弦正矢の許容値に基づく補正が，10m 弦正矢波形や通り変位原波形の確率特性に及ぼす影響について調べる．まず，有限要素節点における 10m 弦正矢値の確率密度関数について，補正前後を比較した結果を Fig.7 に示す．Fig.7 より，補正前は確率密度関数が広く分布していたものが，補正により概ね許容値以内に収められている様子が窺える．また，補正後は許容値近傍の確率密度関数が増大し，3 箇所にピークが現れている．

続いて，補正前後における通り変位原波形の確率密度関数を Fig.8 に示す．Fig.6 では 10m 弦正矢許容値に基づく波形補正によって原波形の振幅が縮小される様子を確認したが，Fig.8 の確率密度関数の分布からもそのことが再確認できる．ただし，10m 弦正矢に認められた様な，補正後における確率密度関数形状の著しい変化は認められない．ちなみに，σ=4mm で作成した初期通り変位原波形に対する補正後の標準偏差は 2.9mm であった．

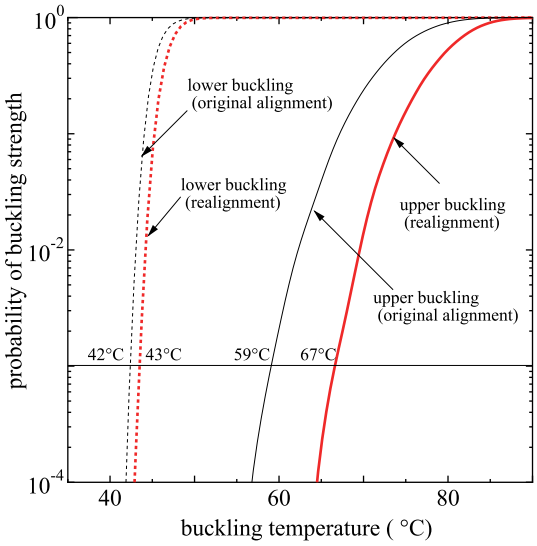


Fig. 9　Probability of buckling strength (σ=4mm)

4.3. 通り変位原波形補正が軌道座屈確率に及ぼす影響

初期通り変位原波形の標準偏差 σ=4mm，10m 弦正矢の許容値 y_{max}=4mm のケースを対象に，通り変位原波形補正前後における座屈強度 (温度) の確率分布関数を求めた結果を Fig.9 に示す．Fig.9 には飛び移り座屈強度 (実線) と最低座屈強さ (破線) の確率分布関数を示した．なお，当該軌道モデルの場合，軌道両端から 200m を除く中央部の約 300m が不動区間となっており，概ねこの範囲内で座屈が発生する．実際の軌道では，一定距離 (例えば 1km) 当りの座屈確率を基準に管理するのが適切であると考えられるが，異なる区間長での座屈確率は Fig.9 の結果から容易に換算可能 [(2)] である．

Fig.9 より，通り変位原波形の補正により，飛び移り座屈強度が大幅に向上する様子が確認できる．例えば，座屈強度確率 0.1%で比較すると，通り変位原波形補正により座屈温度は 59 ℃から 67 ℃にまで上昇しており，10m 弦正矢の許容

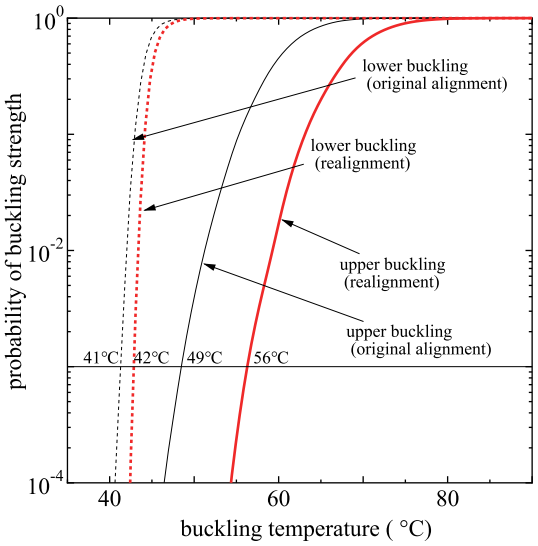


Fig. 10　Probability of buckling strength (σ=6mm)

値に基づく波形補正が座屈強度向上に有効に作用することがわかる．一方，最低座屈強さの場合，飛び移り座屈強度とは異なり，通り変位原波形補正の前後において 1 ℃程度しか変化していない．その結果，最低座屈強さと飛び移り座屈強度との差で与えられる座屈余裕度は，通り変位原波形補正によって 17 ℃から 24 ℃にまで増加しており，最低座屈強さに基づいた管理基準値のより大幅な緩和が期待できる．

次に，初期通り変位原波形の標準偏差 σ が 6mm のケースにおける座屈強度の確率分布関数を Fig.10 に示す．なお，10m 弦正矢の許容値 y_{max} は 4mm のままである．Fig.10 より，10m 弦正矢許容値に基づく通り変位原波形補正によって，σ=4mm の場合と同様に，飛び移り座屈強度が大きく向上することが確認できる．ただし，その向上度は σ=4mm のケースと同程度であるものの，初期通り変位の標準偏差が 2mm 増加したことで確率分布関数自体が低温側に移動しており，座屈余裕度は補正後であっても 14 ℃と相対的に低めとなっている．このことから，座屈余裕度は補正前の通り変位波形振幅に大きく依存することがわかる．

5. おわりに

ランダムな初期通り変位を有する軌道の座屈強度確率に，10m 弦正矢許容値に基づく通り変位原波形補正が及ぼす影響について調べた．また，そのために，当該の通り変位補正法を最適化問題として定式化し，具体的手法を構成した．

従来の補正法は 10m 弦正矢を補正対象としているが，本手法では通り変位原波形自体を対象としている．これにより，通り変位原波形の節点値を直接扱う座屈解析に，10m 弦正矢に基づいた補正過程を組み込むことが可能となった．また解析例を通して，本補正法により 10m 弦正矢の許容値をみたす波形が適切に得られることを確認した．

10m 弦正矢が許容値以下となる様に通り変位原波形を補正することが，必ずしも原波形自体の振幅低減に直結するとは限らないため，その操作がどの程度軌道座屈強度の改善につながり得るのかが明らかではなかった．そこで補正前後における軌道座屈強度の確率分布関数を MCS より求めた．その結果，飛び移り座屈強度に関して大幅な向上が認められ，10m 弦正矢に基づく補正が座屈強度改善に有効であることが確認できた．

謝辞　本研究は科研費 (20K04661) の助成を受けたものである．ここに記して謝意を表する．

参考文献

(1) U.S. Department of Transportation : Track buckling prevention: theory, safety, concepts, and applications, Chap.4, National Technical Information Service, 2013.

(2) 阿部和久，水野雄太，紅露一寛 : 通り変位波形におけるバラツキが軌道座屈強度の確率特性に及ぼす影響，鉄道工学シンポジウム論文集，No.24, pp.167-174, 2020.

(3) 鉄道総合技術研究所　編 : 鉄道構造物等設計標準・同解説　軌道構造，11 章　ロングレール，丸善出版，2012.

(4) 岩井　翔，阿部和久，紅露一寛 : 通り変位と道床横抵抗力のバラツキを考慮した軌道座屈余裕度の確率的評価，鉄道工学シンポジウム論文集，No.25，pp.69-76, 2021.

(5) 西宮裕騎，片岡宏夫 : 座屈発生点を考慮したロングレールの座屈安定性の評価法に関する一考察，鉄道工学シンポジウム論文集，No.20，pp.9-15, 2016.

(6) 江原　学 : 正矢を用いた線形修正法 (交差法) の評価と実施工での検証，鉄道工学シンポジウム論文集，No.16, pp.157-164, 2012.

(7) 宮井 徹 :エネルギー法による軌道座屈の数値解析, 鉄道技術研究報告, No.1271, 1984.

(8) 岩崎英治，松野純一，長井正嗣 : 弧長法のための一反復解法と弧長自動設定法，応用力学論文集，Vol.5, pp.207-216, 2002.

(9) Bowman, A.W. and Azzalini, A. : Applied smoothing techniques for data analysis, The kernel approach with S-plus illustrations, p.31, Oxford Science Publications, 1997.

ヘリンボン及びトリプルジャンクションパターンの発達に対する影響因子解析

EFFECTIVE FACTORS ANALYSIS ON EVOLUTION OF HERRINGBONE AND TRIPLE-JUNCTION PATTERNS

田中 大地[1)], 菊池 正太郎[2)], 松原 成志朗[3)], 永島 壮[4)], 奥村 大[5)]

Daichi TANAKA, Shotaro KIKUCHI, Seishiro MATSUBARA, So NAGASHIMA and Dai OKUMURA

1) 名古屋大学大学院工学研究科（〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: tanaka.daichi@e.mbox.nagoya-u.ac.jp）

2) 名古屋大学大学院工学研究科（〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: kikuchi.shotaro@f.mbox.nagoya-u.ac.jp）

3) 名古屋大学大学院工学研究科（〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: seishiro.matsubara@mae.nagoya-u.ac.jp）

4) 名古屋大学大学院工学研究科（〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: so.nagashima@mae.nagoya-u.ac.jp）

5) 名古屋大学大学院工学研究科（〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: dai.okumura@mae.nagoya-u.ac.jp）

In this study, we analyze effective factors on evolution of herringbone (HB) and triple-junction (TJ) patterns occurring on a compressed film bonded to a soft substrate, which in turn is bonded to a rigid support. Three-dimensional finite element analysis is performed assuming the occurrence of the HB and TJ patterns, which are caused by superposition of the hexagonal dimple mode and stripe modes in three symmetric directions. Pattern evolution relatively decreases the total elastic energy of film/substrate system as the overstress increases, obtaining the quantitative difference between the HB and TJ patterns by parameterizing film and substrate properties, i.e., the Young's modulus ratio (E_f/E_s=10~1000) and the thickness ratio (h_s/h_f =1~100). It is found that the HB pattern is dominant in most cases but the TJ pattern becomes comparable in a specific case of a small Young's modulus ratio and a small overstress. The decrease of h_s/h_f makes the HB pattern superior to the TJ pattern.

Key Words: Pattern evolution, Surface instability, Buckling, Wrinkling, Finite element analysis

1. 緒　　言

表面不安定[(1)~(3)]は，固体力学の分野において，古典的ではあるが挑戦的な研究課題として近年盛んに研究されており，哺乳類の大脳皮質のしわの形成に代表されるように[(4)~(7)]，生体システムの発達や形態形成の基礎的理解と結び付くことが期待されている．したがって，軟質基盤上に硬質膜という組み合わせを最も基本的な構成要素とみなし，硬質膜に作用する面内圧縮応力を駆動力として，パターンの発生・発達を研究することが重要となる[(8)~(11)].

パターン化の初期段階では，膜表面にはディンプルと呼ばれるくぼみが周期的に生じることが実験的に観察されており[(12),(13)], 理論的には臨界応力[(2)]においてリンクルと呼ばれる正弦波形のしわが生じ，このリンクルは異なる方向に任意に生じ得ることから，その重畳発生によってディンプル構造は形成される[(8),(9),(11)]．一方，この臨界応力を基準としてさらに応力が増大するにしたがって，パターンは異なる形態に発達する．最終的に大きな過応力状態において，ヘリンボンやラビリンスパターン（ランダムヘリンボン）が観察されており，中間的な状態でも多様なパターンが生じ得る[(12),(13)].

2021 年 10 月 6 日受付，2021 年 11 月 10 日受理

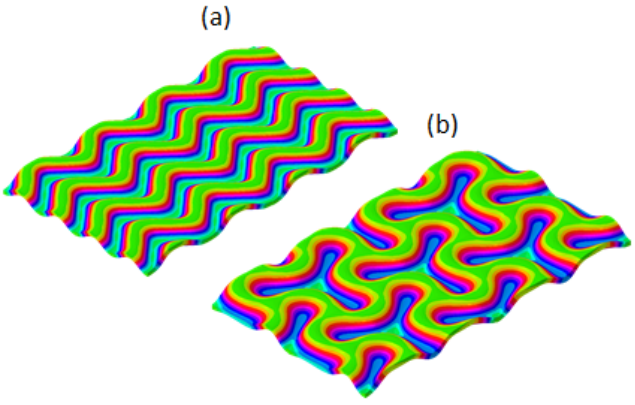


Fig. 1　Schematic illustration of surface patterns: (a) herringbone (HB) pattern and (b) triple-junction (TJ) pattern [(17)].

実験では，ヘリンボンパターンが観察されることが多いため，このパターンに着目して研究は進められたが[(8),(9),(11)]，超臨界状態において膜表面にランダムな摂動負荷を与える有限要素解析[(14)]によって，ヘリンボンパターンとカウンターパートとなるトリプルジャンクションパターンの存在が明らかとなった（Fig. 1）．この解析では，基盤と膜のヤング率比が 10 以下の場合を想定しており，この領域においてトリプ

ルジャンクションパターンがヘリンボンパターンとエネルギー的に共存可能となり，大脳皮質に生じるしわの形態にはこの共存の機構が重要であることが議論されている[14]．しかし，共存関係に影響する因子の解析は十分ではなく，ランダムな摂動負荷を用いているため，ヘリンボンやトリプルジャンクションパターン自身の発生機構も明らかではなかった．

一方，著者らの研究グループでは，有限要素解析において，逐次的な座屈固有値解析[15]を実施することによって，ディンプルパターンからヘリンボンパターンに発達する過程にて生じる逐次的な分岐点を同定し，どのような分岐モードの発生によって変形パターンが発達するかを明らかにする解析を進めている[16),(17]．結果として，ヘリンボンパターンは第一分岐点で生じるディンプルモードと第二分岐点で生じるストライプモードや長方形チェッカーボードモードによって形成されることを示した[17]．さらに，第二分岐点は，ディンプルパターンの対称性に起因して多重分岐となり，分岐モードの選択的な重畳によってトリプルジャンクションパターンも生じ得ることを示した[17]．すなわち，ヘリンボンパターンとトリプルジャンクションパターンは同じ分岐点から派生する兄弟パターンであり，この知見を用いれば，座屈後解析によって系統的にパターン発達の解析を行い，結果を比較することができる．

そこで本研究では，ヘリンボン及びトリプルジャンクションパターンの発達に対する影響因子を有限要素解析によって幅広く明らかにすることを考える．2 章では，ヘリンボン及びトリプルジャンクションパターンが生じることを前提とする簡易的な解析方法を提案する．3 章では，有限要素モデルについて述べる．解析では，膜と基盤のヤング率比及び膜厚比をパラメータとする．4 章では解析結果を示す．パターン発展過程のエネルギー差を詳細に解析することによって，大半の場合にヘリンボンパターンが優勢であることと，特定の小さなヤング率比と小さな過応力状態の組み合わせにおいてトリプルジャンクションパターンがヘリンボンパターンと同等になり得ることを示す．さらには，膜厚比の減少はヘリンボンパターンを優勢にすることも示す．最後に 5 章では結言を述べる．

2. 解析方法

本研究で用いる解析方法は，Kikuchi らの研究[17]によって得られた知見に基づいており，Fig. 2 に膜基盤構造体の代表体積要素を示す．膜と基盤の層間は完全接着されており，膜の自由表面（x_3=h_s+h_f）は応力フリー，基盤の底面（x_3=0）には完全拘束を与える．また，側面には周期境界条件を与える．なお，膜に生じる面内圧縮応力は熱ひずみによって与え，温度上昇を負荷パラメータとする．有限要素解析では，膜厚 h_f で無次元化した寸法を考え，膜厚比 h_s/h_f の他に L_1/h_f と L_2/h_f が設定すべき寸法となる．したがって，h_s/h_f の値が十分に大きければ，基盤底面の完全拘束の影響は無視できるようになり，小さくなるにつれてこの影響は現れる．本研究では，膜厚比の影響をパラメトリックに考える（3 章参照）．

Kikuchi らの解析[17]によって，ヘリンボンパターンとトリプルジャンクションパターン（Fig. 1）は同じ分岐点から派生する兄弟パターンであることが明らかにされており，Fig. 3 に第一及び第二分岐点で生じる分岐モードをそれぞれ示す．図中のコンターは分岐モードの主成分である面外方向成分に対応している．第一分岐点では，六方配列のディンプルモード（$\boldsymbol{\phi}_{\mathrm{HEX}}^{(1)}$）が生じることを想定しており[11)-(13)]，このため L_2/L_1=$3^{1/2}$ の値を用いている．第二分岐点では，六方ディンプルモードの対称性に起因して，等価な 3 つの方向にストライプモード（$\boldsymbol{\phi}_{0}^{(2)}$，$\boldsymbol{\phi}_{+60}^{(2)}$，$\boldsymbol{\phi}_{-60}^{(2)}$）がそれぞれ生じる．したがって，第二分岐点では 3 つの分岐モードの組み合わせに依存して異なる分岐経路が現れる．ヘリンボンパターンは $\boldsymbol{\phi}_{0}^{(2)}$（対称性を考えると，$\boldsymbol{\phi}_{-60}^{(2)}$ もしくは $\boldsymbol{\phi}_{-60}^{(2)}$ でも同じ），トリプルジャンクションパターンは $\pm\boldsymbol{\phi}_{0}^{(2)}\pm\boldsymbol{\phi}_{+60}^{(2)}\pm\boldsymbol{\phi}_{-60}^{(2)}$（符号の組み合わせによらない）が作用することによって，第二分岐点からそれぞれパターン発展する．Fig. 4 は対応する分岐モードが重畳されたコンター図であり，発達した後のヘリンボン及びトリプルジャンクションパターン（Fig. 1）の特徴をおおよそ表していることがわかる．

Fig. 3 と Fig. 4 は特定の寸法や材料定数を設定して座屈固有値解析を実施することによって得られた結果であるが，本研究では座屈固有値解析をせずに，ヘリンボンパターンとトリプルジャンクションパターンの発達する分岐経路を解析することを考える．このため，ヘリンボンパターンを解析す

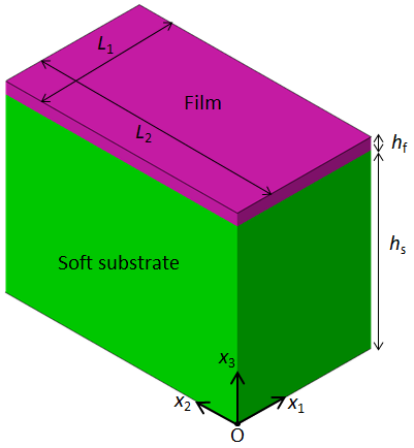


Fig. 2　Initial dimensions of a compressed film bonded to a soft substrate, which in turn is bonded to a rigid support.

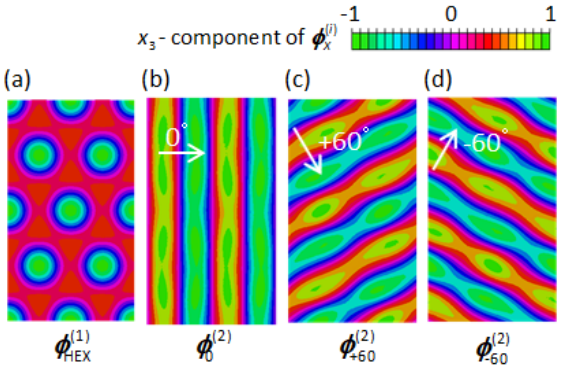


Fig. 3　Bifurcation modes of (a) hexagonal dimple mode ($\boldsymbol{\phi}_{\mathrm{HEX}}^{(1)}$) at the first bifurcation and (b)–(d) stripe modes in three symmetric directions ($\boldsymbol{\phi}_{0}^{(2)}$, $\boldsymbol{\phi}_{+60}^{(2)}$ and $\boldsymbol{\phi}_{-60}^{(2)}$), respectively, at the second bifurcation on the first bifurcated path[17].

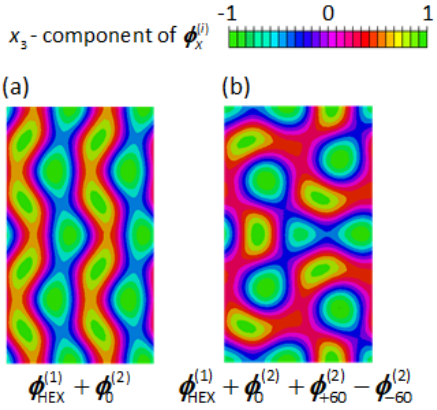


Fig. 4 Initial imperfection consisting of (a) $\phi_{\mathrm{HEX}}^{(1)}+\phi_0^{(2)}$ evolving to herringbone pattern and (b) $\phi_{\mathrm{HEX}}^{(1)}+\phi_0^{(2)}+\phi_{+60}^{(2)}-\phi_{-60}^{(2)}$ evolving to triple-junction pattern[17].

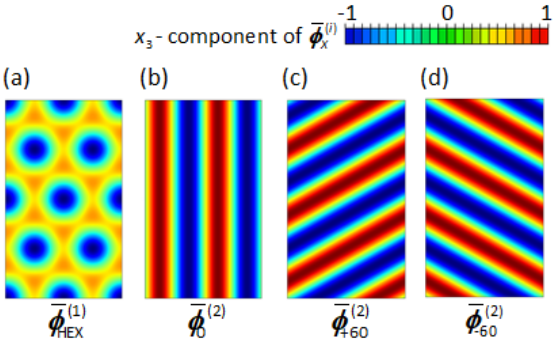


Fig. 5 Bifurcation modes consisting of superposition of simple sinusoidal waves with amplitude in x_3 direction: (a) $\bar{\phi}_{\mathrm{HEX}}^{(1)}$, (b) $\bar{\phi}_0^{(2)}$, (c) $\bar{\phi}_{+60}^{(2)}$, and (d) $\bar{\phi}_{-60}^{(2)}$ (cf. Fig. 3).

るときには，初期不整として $\phi_{\mathrm{HEX}}^{(1)}+\phi_0^{(2)}$ を用い，トリプルジャンクションパターンを解析するときには，同様にして，$\phi_{\mathrm{HEX}}^{(1)}+\phi_0^{(2)}+\phi_{+60}^{(2)}-\phi_{-60}^{(2)}$ を初期不整として用いる．なお，第二分岐点の分岐モードは，第一分岐経路上で生じる六方ディンプルパターンの影響を受けて，若干ゆがんでいることがわかる（Fig. 3）．しかしながら，初期不整として用いる分には，このゆがみを考慮する必要はないと考えられ，本研究では，Fig. 5 に示されるように，六方ディンプルモード（$\bar{\phi}_{\mathrm{HEX}}^{(1)}$）及びストライプモード（$\bar{\phi}_0^{(2)}$，$\bar{\phi}_{+60}^{(2)}$，$\bar{\phi}_{-60}^{(2)}$）を x_3 方向にのみ振幅を有する正弦波によって生成し，膜表面にのみ小さな大きさで与える．この結果，Fig. 5 に示される簡易モードからヘリンボン及びトリプルジャンクションパターンを誘起する初期不整は Fig. 6 のように作成される．したがって，寸法や材料定数を変更しても，座屈固有値解析によって分岐モードを繰り返し解析する必要性を伴わない．

3. 解析モデル

有限要素解析に用いる要素分割を Fig. 7 に示す．第一分岐点において六方ディンプルモードの発生を想定するため，$L_2/L_1=3^{1/2}$ となっており，膜厚比には十分に大きな値として $h_s/h_f=95$ を設定する．L_1/h_f（もしくは L_2/h_f）の値は後述するように同定する．ただし，この値に関わらず，Fig. 7 に示される要素分割を用いる．Abaqus で解析することを考え，三次元ソリッド要素 C3D8RH を採用する．節点数と要素数は

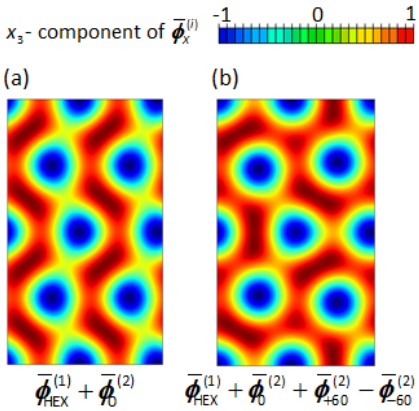


Fig. 6 Initial imperfection consisting of (a) $\bar{\phi}_{\mathrm{HEX}}^{(1)}+\bar{\phi}_0^{(2)}$ and (b) $\bar{\phi}_{\mathrm{HEX}}^{(1)}+\bar{\phi}_0^{(2)}+\bar{\phi}_{+60}^{(2)}-\bar{\phi}_{-60}^{(2)}$ (cf. Fig. 4).

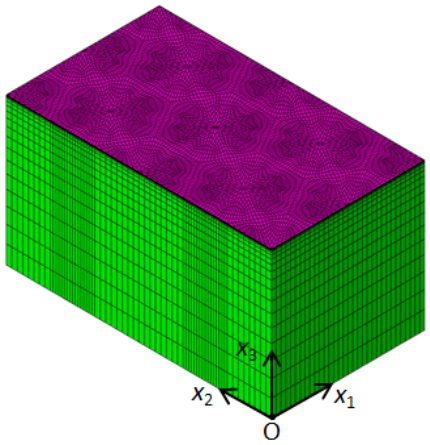


Fig. 7 Finite element meshes of representative volume element.

それぞれ 122,330，115,200 であり，膜は厚さ方向には 10 分割，基盤は厚さ方向に 15 分割されている．2 章で述べたように，六方ディンプルパターンのためには $\bar{\phi}_{\mathrm{HEX}}^{(1)}$，ヘリンボンパターンのためには $\bar{\phi}_{\mathrm{HEX}}^{(1)}+\bar{\phi}_0^{(2)}$，トリプルジャンクションパターンのためには $\bar{\phi}_{\mathrm{HEX}}^{(1)}+\bar{\phi}_0^{(2)}+\bar{\phi}_{+60}^{(2)}-\bar{\phi}_{-60}^{(2)}$ で構成される初期不整を与える．したがって，膜表面の節点にのみ初期不整を与え，その大きさは，膜厚 h_f で無次元化し，面外方向成分の最大値を 0.01 に規格化して与える[16),(18)].

膜には等方的な線膨張係数を α=0.01 として与え，温度 T を上昇させることによって，面内圧縮応力を増加させる．線膨張係数や温度は本質的には意味のない値であるから，パターン発展を伴わない主経路上で得られる値を用いて無次元化する[8),(11),(17)]．すなわち，主経路上では膜の面内に生じる応力は均質な等二軸圧縮状態となるため，温度に対応した x_1 及び x_2 方向の圧縮応力を $\sigma_0(T)$ (>0)，さらには第一分岐点での臨界圧縮応力を $\sigma_0^c(T_c)$ と表し，以後，T や T_c を用いず，過応力状態を説明する上で便利な σ_0/σ_0^c の値を用いる（以後，この値を過応力と呼ぶ）．同様にして，パターン発展に対するエネルギー的な比較のため，代表体積要素中に蓄えられる弾性ひずみエネルギーを $U(T)$と表し，主経路上での値 $U_0(T)$ を用いて無次元化する．したがって，第一分岐点を超えてパターン化が進むと（すなわち σ_0/σ_0^c>1），U/U_0 は減少し，その程度を比較することによって，発達するパターンの優劣を

評価する．

本研究では，ヤング率比と膜厚比をパラメトリックに考えて影響因子を調べる．膜と基盤は，非圧縮性を有する neo-Hookean 超弾性モデルに従うと仮定し，ポアソン比は 0.5 となる．ヤング率をそれぞれ E_f，E_s として，ヤング率比 E_f/E_s =10，100，1000 の場合を解析する．一方，膜厚比は，用意した代表体積要素の底面寄りの節点を完全拘束することによって，h_s/h_f <95 の場合も解析する[18]．節点の位置に依存するため，h_s/h_f の値は必ずしもキリの良い数字にはならないが，改めてモデルを作成する必要がないため便利である．

最後に，L_1/h_f（もしくは L_2/h_f）の決定方法について述べる．第一分岐点で生じるリンクルの波長は，理論解[2),(8)]に従うことが知られており[16)~(18)]，波長 λ_{th} は $\lambda_{th}/h_f=2\pi(3E_s/E_f)^{-1/3}$，臨界圧縮応力 σ_{th} は $\sigma_{th}/E_f=(1/3)(3E_s/E_f)^{2/3}$ と表される．したがって，六方ディンプルモード（Fig. 3(a)，Fig. 5(a)）を構成するリンクル波形の波長が λ_{th}/h_f となるように L_1/h_f の値を決定することができる．上述の理論解は，膜と基盤は非圧縮性を有すると仮定し，膜厚比は十分に大きい場合（$h_s/h_f\to\infty$）の結果である．膜厚比が有限の値を取り，小さくなる場合の理論解[10),(18)]も存在しており，この場合には，ある閾値を超えると波長は短くなり，臨界圧縮応力は増加する傾向を有する．本研究では，影響因子の解析を主目的とし，解析結果の比較を容易にするために，膜厚比が波長に及ぼす影響を考慮せず，$\sigma_0^c=\sigma_{th}$ として過応力 σ_0/σ_0^c を評価する．

4. 解析結果

Fig. 8 は，六方ディンプルモード $\bar{\phi}_{HEX}^{(1)}$ を初期不整に用いるときの，臨界圧縮応力のヤング率比及び膜厚比に対する依存性を示している．マーカー付きの実線は有限要素解析によって得られた値，鎖線は $h_s/h_f\to\infty$ の場合の理論値である．なお，有限要素解析では U/U_0 が 1 から 0.1%減少したところの圧縮応力の臨界値とみなした．この図が示すように，膜厚比が大きい場合（h_s/h_f =95）には，解析値は理論値と良い一致を示しており，2・3 章で述べた解析手法とモデル化がうまく機能している．膜厚比が小さくなると，徐々に基盤底面から拘束効果を受けるようになり，プラトー領域を経て，ヤング率比に依存して臨界圧縮応力は増加傾向を示すようになる．臨界圧縮応力が変化すると，リンクルの波長も変化すると考えられるため[10),(18)]，本解析手法では図中にプロットしており，臨界圧縮応力が増加傾向を示す前までの膜厚比を解析範囲とみなし，ヘリンボンパターンとトリプルジャンクションパターンの発現優位性について比較する．

はじめに，ヘリンボン（HB）及びトリプルジャンクション（TJ）パターンの解析によって得られるエネルギー変化と過応力の関係を Fig. 9 に示す．この図は，E_f/E_s =10，1000 の場合であり，膜厚比が十分に大きく，基盤底面からの拘束効果が無視できる場合には，ヘリンボンパターンとトリプルジャンクションパターンの間のエネルギー差はほとんど優劣のないようにみえる．一方，膜厚比が小さくなると（h_s/h_f =28.5），ヤング率比が高い場合（E_f/E_s =1000），トリプルジャンクションパターンのエネルギー減少は鈍くなる．ヘリンボンパターンのエネルギー減少にその傾向は現れておらず，すなわち，ヤング率比が高く，膜厚比が小さい条件下ではヘリンボンパターンが明らかに優位となることがわかった．

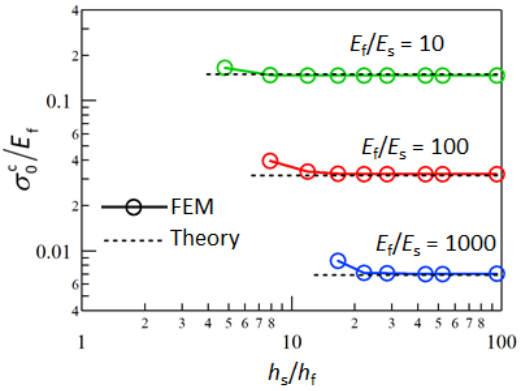


Fig. 8　Comparison of σ_0^c/E_f as a function of h_s/h_f.

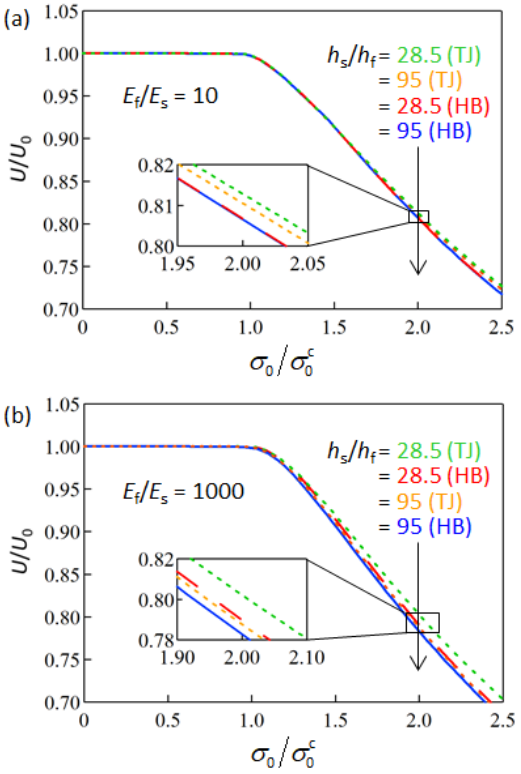


Fig. 9　Comparison of U/U_0 as a function of σ_0/σ_0^c for (a) E_f/E_s=10 and (b) E_f/E_s=1000.

Fig. 10 と Fig. 11 には，σ_0/σ_0^c=2.5 における面外方向の変位のコンター図を示しており，ヤング率比及び膜厚比がヘリンボン及びトリプルジャンクションパターンの発展に及ぼす影響を示している．これらの図が示すように，ヘリンボンパターンの発達には，ヤング率比や膜厚比の影響がほとんど現れないことがわかる（Fig. 10）．したがって，パターン発達によるエネルギー減少にもこれらの変化は陽に現れないと考えられる．一方，トリプルジャンクションパターンの発達には，これらの影響は顕著であることがわかった（Fig. 11）．すなわち，ヤング率比が大きくなるとトリプルジャンクション部の変形が幅広となり，さらに膜厚比が小さくなると，その中心部分の面外方向の変形が抑制される．したがって，パターン発達によるエネルギー解放が抑制されることとなり，

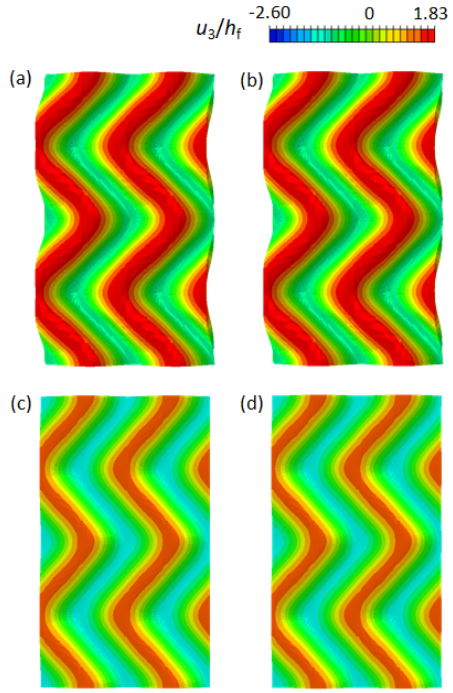


Fig. 10 Deformed configurations at σ_0/σ_0^c=2.5 in the case of herringbone pattern with (a) {E_f/E_s, h_s/h_f}={10, 95}, (b) {E_f/E_s, h_s/h_f}={10, 28.5}, (c) {E_f/E_s, h_s/h_f}={1000, 95}, and (d) {E_f/E_s, h_s/h_f}={1000, 28.5}.

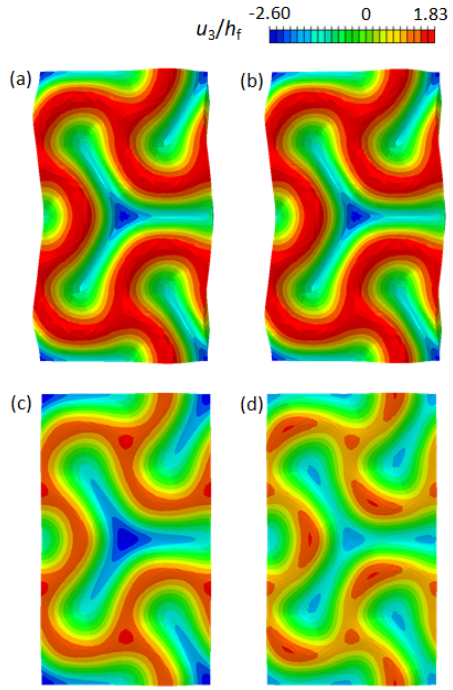


Fig. 11 Deformed configurations at σ_0/σ_0^c=2.5 in the case of triple-junction pattern with (a) {E_f/E_s, h_s/h_f}={10, 95}, (b) {E_f/E_s, h_s/h_f}={10, 28.5}, (c) {E_f/E_s, h_s/h_f}={1000, 95}, and (d) {E_f/E_s, h_s/h_f}={1000, 28.5}.

このような機構によって，ヘリンボンパターンが優勢となり，トリプルジャンクションパターンが劣勢になると推察できる．

より詳細な定量的検討のため，ヘリンボンパターンとトリプルジャンクションパターンのエネルギー差の変化を Fig. 12 に示す．なお，U_{HB} と U_{TJ} はヘリンボンパターンとトリプルジャンクションパターンが発達するときの代表体積要素中に蓄えられる弾性ひずみエネルギーを示している．したがって，$(U_{TJ}-U_{HB})/U_0$ の値が正の場合にはヘリンボンパターン，負の場合にはトリプルジャンクションパターンが優勢となり，その差が大きくなるほど定量的にもこの傾向が強いと理解できる．

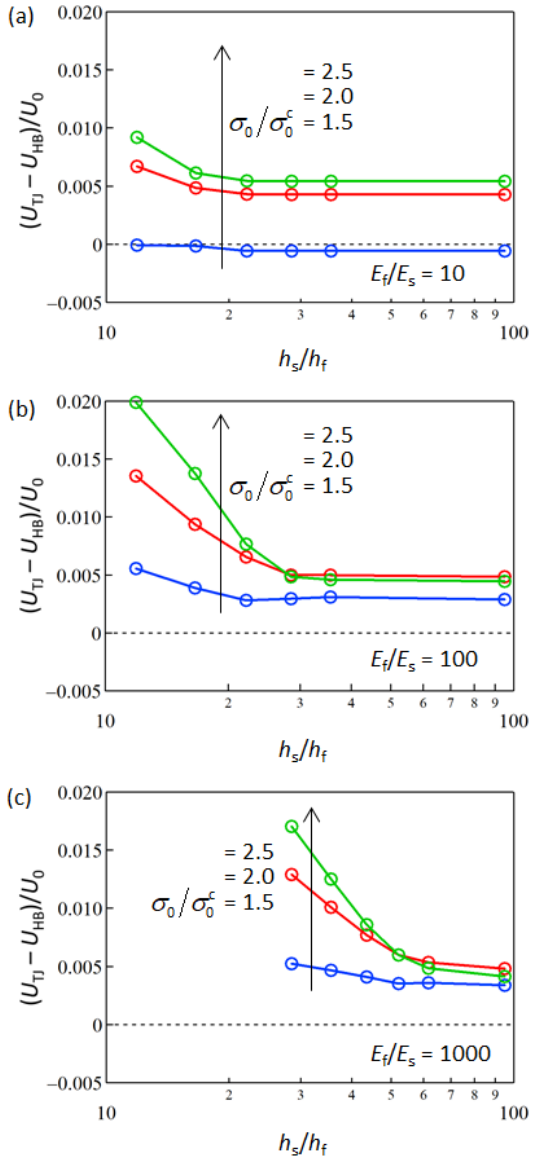


Fig. 12 Energy difference, $(U_{TJ}-U_{HB})/U_0$, between herringbone and triple-junction patterns as a function of h_s/h_f and σ_0/σ_0^c; (a) E_f/E_s =10, (b) E_f/E_s =100, and (c) E_f/E_s =1000.

これらの図を見ると，膜厚比が十分に大きく，基盤底面の拘束効果が無視できる場合には，過応力が大きくなると，ヤング率比に関わらず，エネルギー差は 0.005 あたりに分布している．一方，ヤング率比が小さい場合（E_f/E_s=10）には，過応力レベルが小さい初期段階（σ_0/σ_0^c=1.5）において，エネルギー差は負の値を取り，ヘリンボンパターンではなくトリプルジャンクションパターンが陽に優勢となることがわかった．すなわち，この過応力レベルの周辺が，文献(14)で議論されているヘリンボンパターンとトリプルジャンクシ

ョンパターンの共存領域に対応すると考えられる．このときのエネルギー差の絶対値は 0.001 程度であるから，過応力が増加してエネルギー差が正の値として 0.005 を取る場合というのは，ヘリンボンパターンが優勢であると類推でき，文献(14)の結果と合わせて整合的に解釈することができる．

本研究では膜厚比の影響も解析しており，膜厚比が小さくなると，エネルギー差は正の方向に拡がり，すなわち，先に述べたようにヘリンボンパターンが優勢となる．エネルギー差は，ヤング率比によって変化し，図中では 0.010～0.020 まで過応力の増加に伴って増加する．すなわち，基盤底部の拘束効果はヘリンボンパターンを優勢にすることがわかった．

5. 結　　言

本研究では，軟質基盤上の硬質膜に生じるヘリンボンパターンとトリプルジャンクションパターンの発達に及ぼす影響因子の有限要素解析を行った．座屈固有値解析を実施しない簡易的な解析方法を用いたが，どちらのパターンについてもその発達過程を解析することができた．詳細なエネルギー差の比較によって，大半の場合においてヘリンボンパターンが優位であり，特定の小さなヤング率比と小さな過応力状態の組み合わせにおいてトリプルジャンクションパターンが同等もしくは優勢であることがわかった．この知見は文献(14)の結果と整合する．また，膜厚比が小さくなると，基盤底面の拘束効果が生じるようになり，この効果はヘリンボンパターンを優勢にすることがわかった．この原因として，トリプルジャンクションパターンの変形はこの拘束効果によって抑制されるのに対して，ヘリンボンパターンにはこの抑制機構が現れないためであると考えられる．

最後に，今後の課題について述べる．本研究では簡単のため，ポアソン比が 0.5（非圧縮）の場合を想定したが，圧縮性がパターン発展に及ぼす影響を調べることは重要である．また，エネルギー差を評価してパターン発展の優位性を議論したが，このエネルギー差がパターン発展の安定性に及ぼす影響については異なる議論が必要かもしれない．さらに，パターンが発達すると，自己接触を伴うクリースが発生する可能性があり，クリースとリンクルの相互作用解析は新しく必要な解析技術となり得る．このような解析技術の発達と解析結果の蓄積によって，生体システムに生じる複雑なパターンの固体力学的理解が進展すると考えられる．

謝　　辞

本研究はJSPS科研費JP19H00739の助成を受けて行われた．ここに記して謝意を表する．

参考文献

(1) M.A. Biot: Mechanics of incremental deformations: theory of elasticity and viscoelasticity of initially stressed solids and fluids, including thermodynamic foundations and applications to finite strain, 1965, Wiley.

(2) H.G. Allen: In: Analysis and design of sandwich panels, Pergamon Press, 1969, New York.

(3) A.N. Gent, I.S. Cho: Surface instabilities in compressed or bent rubber blocks, Rubber Chemistry and Technology, **72**(1999), pp.253–262.

(4) D.P. Richman, R.M. Stewart, J.W. Hutchinson, V.S. Caviness Jr.: Mechanical model of brain convolutional development, Science, **189**(1975), pp.18–21.

(5) S. Budday, P. Steinmann, E. Kuhl: The role of mechanics during brain development, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, **72**(2014), pp.75–92.

(6) T. Tallinen, J.Y. Chung, F. Rousseau, N. Girard, J. Lefèvre, L. Mahadevan: On the growth and form of cortical convolutions, Nature Physics, **12**(2016), pp.588–593.

(7) L.da.C. Campos, R. Hornung, G. Gompper, J. Elgeti, S. Caspers: The role of thickness inhomogeneities in hierarchical cortical folding, Neuroimage, **231**(2021), No.117779.

(8) X. Chen, J.W. Hutchinson: Herringbone buckling patterns of compressed thin films on compliant substrates, Journal of Applied Mechanics, **71**(2004), pp.597–603.

(9) B. Audoly, A. Boudaoud: Buckling of a thin film bound to a compliant substrate—Part I: formulation, linear stability of cylindrical patterns, secondary bifurcations, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, **56**(2008), pp.2401–2421.

(10) Z.Y. Huang, W. Hong, Z. Suo: Nonlinear analyses of wrinkles in a film bonded to a compliant substrate, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, **53**(2005), pp.2101–2118.

(11) S. Cai, D. Breid, A.J. Crosby, Z. Suo, J.W. Hutchinson: Periodic patterns and energy states of buckled films on compliant substrates, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, **59**(2011), pp.1094–1114.

(12) D. Breid, A.J. Crosby: Effect of stress state on wrinkle morphology, Soft Matter, **7**(2011), pp.4490–4496.

(13) M. Guvendiren, S. Yang, J.A. Burdick: Swelling-induced surface patterns in hydrogels with gradient crosslinking density, Advanced Functional Materials, **19**(2009), pp.3038–3045.

(14) T. Tallinen, J.S. Biggins: Mechanics of invagination and folding: hybridized instabilities when one soft tissue grows on another, Physical Review E, **92**(2015), No.022720.

(15) D. Okumura, J. Sugiura, H. Tanaka, Y. Shibutani: Buckling and postbuckling of etching-induced wiggling in a bilayer structure with intrinsic compressive stress, International Journal of Mechanical Sciences, **141**(2018), pp.78–88.

(16) H. Miyoshi, S. Matsubara, D. Okumura: Bifurcation and deformation during the evolution of periodic patterns on a gel film bonded to a soft substrate, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, **148**(2021), No.104272.

(17) S. Kikuchi, S. Matsubara, S. Nagashima, D. Okumura: Diversity of the bifurcations and deformations on films bonded to soft substrates: robustness of the herringbone pattern and its cognate patterns, (submitted).

(18) H. Miyoshi, D. Okumura: Effect of soft substrate thickness on wrinkle analysis of a gel film, Transactions of the Japan Society for Computational Methods in Engineering, **19**(2019), pp.31–36 (in Japanese).

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 10-211218 JASCOME

WEB-BASED VISUALIZATION FRAMEWORK ON FREEFEM

Yu-Hsun LEE[1)] and 藤原 宏志[2)]

Yu-Hsun LEE and Hiroshi FUJIWARA

1) 京都大学大学院 情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: andylee@acs.i.kyoto-u.ac.jp)
2) 京都大学大学院 情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: fujiwara@acs.i.kyoto-u.ac.jp)

FreeFEM is a friendly integrated numerical computation software for partial differential equations in 2D and 3D based on the finite element methods. In the present paper, we introduce an intuitive web interface for the visualization of numerical results calculated by FreeFEM. With our web-based user interface, the users can easily access data interactivity and explore customizable graphics on modern browsers such as Edge, Safari, and Chrome. Also, the users can interact with a live render animation for problems with time evolution. We include a Hypertext Transfer Protocol (HTTP) server package in our FreeFEM dynamic loading module written in the programming language C++.

Key Words: FreeFEM, Visualization, Client-Server Model, Domain Decomposition Method, Parallel Computation, CAE, Education of FEM

1. Introduction

In the present paper, we propose a novel visualization framework on FreeFEM[(1)], which is one of the integrated development environments for the finite element methods (FEM). Since the default FreeFEM visualization assumes that the program runs on the local machine, various network and security configurations are required to visualize numerical results obtained by FreeFEM on remote computers. In order to overcome the drawbacks, we adopt web technology to improve the usability of interactive visualization in large-scale computation and educational purposes. The present study shows design and implementation of interactive visualization of numerical results via client-server architecture. It depends only on open source libraries and its framework is easily applicable to other numerical simulation environments.

FEM is a method for approximately solving differential equations by discretizing function spaces. By virtue of its mathematical foundations, it has been widely used not only in research and development but also in education. In recent years, the domain decomposition method (DDM) and parallel linear solvers have been commonly employed for large-scale computations appeared in advanced research and development. Several commercial [(2)(3)] and non-commercial [(1)(4)] environments are available, and they are commonly equipped with mesh generation on a domain of the problem, numerical integrations, linear solvers, and visualization of results. In other words, they enable us to concentrate on the input and output of the problems of interest by FEM.

FreeFEM is an open-source FEM package mainly developed by J. L. Lions Laboratory in France. Since it provides a simple original script language designed for FEM computations, users can specify domains, weak forms, and solvers which form the central roles and characteristics of FEM without precise knowledge of scientific programming languages and parallel computation by Message Passing Interface (MPI) or OpenMP. However, its output directly to the screen is assumed to be done on the local machine. Therefore, it is impossible to display numerical results on the local screen obtained with FreeFEM executed on remote machines such as supercomputers. Moreover, the visualization tool `ffglut` equipped with FreeFEM is based on OpenGL 1.0, which is inefficient and outdated. Main development team of FreeFEM are also planning to replace `ffglut` with new client `FFGraphics`[(5, 6)] which is developed with Vulkan[(7)].

The purpose of this study is an improvement of FreeFEM output issues. To this end, we adopt a client-server architecture. It also provides a Web-based User Interface (WUI) to control output information. Compare than the new client

2021 年 10 月 8 日受付, 2021 年 11 月 15 日受理

FFGraphics proposed by FreeFEM team, WUI has much more mobility than desktop client and the users do not need to install any extra package on their computers or mobile devices. By exploiting this feature, the web server function is integrated in the proposed module, and thus only standard browsers are required to visualize the results in the proposed framework. Our implementation is available from GitHub[8], and consists of two parts; one is a dynamic loading module in FreeFEM on the server-side, and the other is a web application for rendering data in the modern browser on client machines. Multiple users can simultaneously connect to the server provided by the module, and they can choose output information independently. For understanding FEM output, isolines and bird's eye view are presented. In order to facilitate a multifaceted understanding of FEM computations, users can see mesh numbering and DDM status. That is, our presented framework is also suitable for educational purposes.

In the next section, we show the architecture of the web-based framework. The third section is devoted to the usage of the dynamic module and web interface. Then we will introduce the visualization of MPI. Finally, we will show visualization in 3D computation.

2. Architecture

The proposed client-server architecture enables users to share the same data among different platforms. For cluster computing, the users can visualize the result immediately by the browsers without downloading data. For educational purposes, students and instructors can interact with the numerical result and obtain an intuitive understanding.

To implement the web-based interface, we use a client-server architecture in this work. We include a cross-platform non-blocking HTTP server-Mongoose[9] through the dynamic loading interface provided by FreeFEM. Mongoose is the most popular networking library on Github and used by various open source and commercial products[9] which ensure the usability of the client-server communication. Over the proposed HTTP server, we built several Web Application Programming Interfaces (APIs) to communicate with the data generated by FreeFEM. Moreover, we implement the framework under multithreading architecture. Thus users can check the visualization results in real-time during time-stepping computation, which is introduced in Fig. 3. For the communication between server and client, we use the gzip library `libz`[10] to compress the file size of numerical results at most 95% and improve the data transmission performance.

In the client part, modern web browsers are available to receive and process the transferred data. For the 2D images, we use the HTML5 canvas element for raster-based rendering, which provides better performance with many meshes then rendering vector graphics. For those who want to store high resolution graphics, users can also switch it to Scalable Vector Graphics (SVG) mode provided by `svg.js`[11]. Table 1 shows comparison of HTML5 canvas mode and SVG mode.

Table 1 Comparison between HTML5 canvas and SVG in 2D mode

	HTML5 canvas	SVG
package	built-in	SVG.js
render method	raster-based	vector-based
performance (30x30 square mesh, 1800 triangles)	258ms	1075ms

We also provide the bird's eye view for the scalar field data by using `three.js`[12], which is a cross-browser JavaScript library using Web Graphics Library (WebGL). The hidden surface removal is also processed by WebGL automatically. Both `svg.js` and `three.js` are well known graphics libraries in drawing 2D and 3D images.

3. Usage of the Web-based Framework

The proposed environments consists of 4 files and a folder:

- `webplot.cpp`: main source code
- `mongoose.c, mongoose.h`: Mongoose[9], a networking library for C/C++
- `macro_ddm.idp`: extended macro for MPI visualization
- `index.html`: main web application
- `static`: JavaScript packages and CSS files

The `webplot.cpp` is designed as a dynamic loading module of FreeFEM, and manipulates the data from FreeFEM and establishes web APIs communication over integrated Mongoose server. The `macro_ddm.idp` will be introduced in section 4. The proposed web application is implemented in `index.html` and included libraries like `svg.js` and `three.js` are in the `static` folder.

3.1. Compile

The proposed environments is available on GitHub[8]. To compile the module, the gzip library `libz`[10] should be linked. After downloading the source file, use the FreeFEM built-in command

```
$ ff-c++ mongoose.c webplot.cpp -lz
```

to compile the module. After the compilation, the dynamic module will be generated in the folder same as `webplot.cpp` (the filename of generated module on Linux platform will be `webplot.so`, on macOS will be `webplot.dylib`, and on Windows will be `webplot.dll`).

Moreover, the static file folder and `index.html` should be placed in the same directory with generated dynamic module `webplot.so`.

3.2. Usage of the Module

To use the web-based interface, the users have to load the proposed module to set up the server and APIs. Fig. 1 shows an example to pass the data through the `webplot()` function and the `server()` function to start the server.

```
load "webplot"
//load dynamic module

server();
//start server
border ba(t=0,1.0){x=t;   y=0;  label=1;};
border bb(t=0,0.5){x=1;   y=t;  label=1;};
border bc(t=0,0.5){x=1-t; y=0.5;label=1;};
border bd(t=0.5,1){x=0.5; y=t;  label=1;};
border be(t=0.5,1){x=1-t; y=1;  label=1;};
border bf(t=0.0,1){x=0;   y=1-t;label=1;};

mesh Th = buildmesh( ba(6)+bb(4)+bc(4)+
                     bd(4)+be(4)+bf(6) );

fespace Vh(Th,P1);
Vh u,v;
func f = 1;

solve Function(u,v)
  = int2d(Th)(dx(u)*dx(v)+dy(u)*dy(v))
    - int2d(Th)(f*v) + on(1,u=0);

webplot(Th);
webplot(u,Th);
//pass data through webplot()

show();
//keep server thread launching
```

Fig. 1 Usage of the web-based module in FreeFEM `edp` file

Users can set following options to setup the server with `server()` command, and the value inside brackets [ ] is the default value:

- host[`127.0.0.1`] : run server on the IP address.
- port[`1234`] : run server on the port.

Note that the default IP address, 127.0.0.1, is only accessible from the local computer. In order to make the server accessible from other machines via network, the IP address of the server machine must be specified by the option. For example, when the server is accessible through 192.168.2.1 with port 8000, the users can set the options with the following code. The architecture of remote computing with these example options is shown in Fig. 2.

```
server(host="192.168.2.1",port=8000)
//or
server(host="0.0.0.0",port=8000)
```

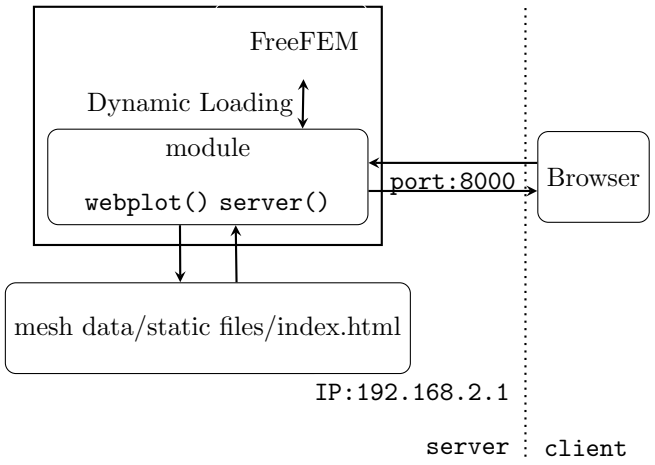


Fig. 2 Architecture of system under remote computing

For the options of figures, the users can setup the preferences of the figures on the web interfaces which will be introduced in the next subsection. The `webplot()` function is equipped with an option

- `cmm[""]` : comment shown on the graph.

For instance, in time evolution problems, if the users need to generate a series of plots with comments of specifying timestep, the `cmm` option provides the functionality to set the customize text as the example shown in Fig. 3.

3.3. Usage of the Web Interface

After the server has been started, the users can launch the web application on a browser via `http://<host>:<port>`. The left column of the interface provides some functionalities of specifying plotted materials and styles as shown in Fig. 4. The users can click the checkboxes to change the details such as index of mesh, isolines, labels of edges, etc. to

```
load "webplot"
server();
int TIMESTEPS=100;
...
for ( i = 1; i <= TIMESTEPS; i++) {
  ...
  webplot(phi,Th,cmm="time: t="+t);
}
show();
```

Fig. 3 Usage of `cmm` with a time evolution problem

show on the screen. The preview window is located on the right side and will render the figure with the user's preferences instantly. Fig. 5 shows the isolines and color bar, and Fig. 6 shows the mesh, vertices, and triangles indices and labels of edges. Fig. 7 and Fig. 8 show the bird's eye view with mesh or wireframe, whose view angle can be changed by mouse interactively. Users can also download the figure in `PNG` (available for 2D images and bird's views) or `SVG` (only for 2D images) formats as they see in the preview window. By default, we use the HTML5 canvas for raster-based rendering, and the users can also switch to SVG mode for vector graphics by clicking the "Preview in SVG" checkbox.

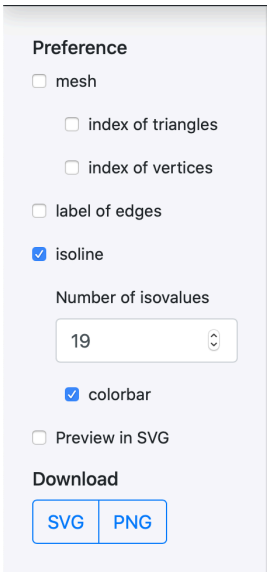


Fig. 4 Preference check boxes on web interface

4. Visualization of MPI

FreeFEM includes an additional macro `macro_ddm.idp` for domain decomposition methods which enables us to split the domain into several independent subdomains for parallel

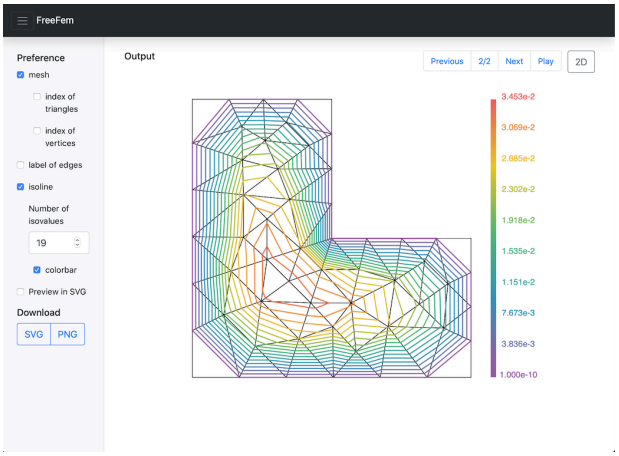


Fig. 5 Isolines as a result of Fig. 1. This is the default style.

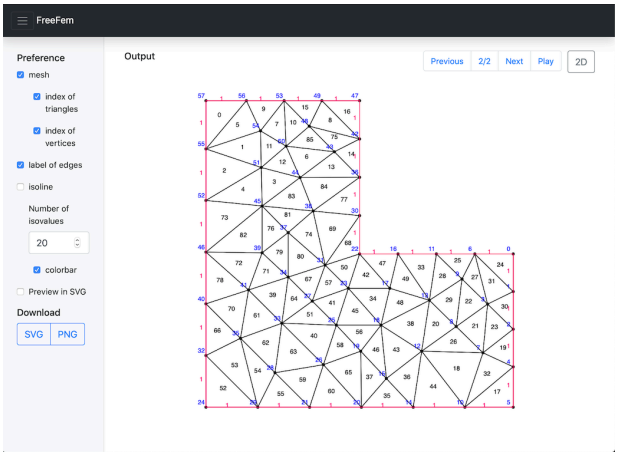


Fig. 6 Mesh indices and labels of edges (blue: vertex, black: triangle, red: edge label). Edge labels are specified in border instructions in Fig. 1

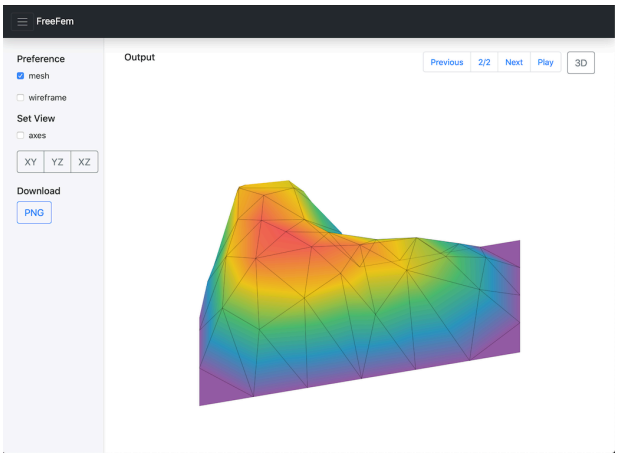


Fig. 7 Bird's eye views with mesh as a result of Fig. 1

computing. In order to visualize results of the computations, we extend the macro function `plotMPI()` in `macro_ddm.idp` to provide the MPI version of `webplot()` as shown in Fig. 9. For the `server()` function, we also implement the macro function `serverMPI()` to help the users to start the integrated server on the root process as shown in Fig. 10. The Fig. 11 and Fig. 12 depict the status of domain decomposi-

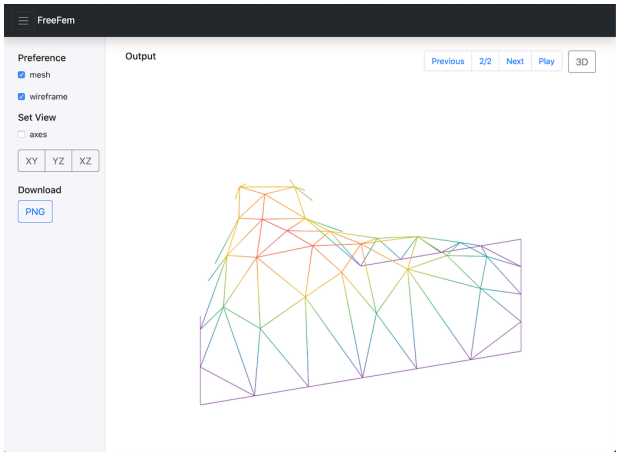


Fig. 8 Bird's eye views with colored wireframe as a result of Fig. 1

tion, and an example of the transient diffusion equation in FreeFEM library[13] respectively.

```
load "webplot"
macro plotMPI(Th, u, Pk, def, K, params)
...
if(mpirank == 0) {
  meshN[int] meshTab(mpisize);
  XhPlotPrivate<K>[int] def(uTab)(mpisize);
  ...
  for(int i = 0; i < mpisize; ++i) {
    webplotMPI(uTab[i],meshTab[i],
               i+1,mpisize,params);
  }
}
...
```

Fig. 9 Sample code of extended macro function `plotMPI()`

```
macro serverMPI(params)
if(mpirank == 0) {
    server(params);
}//
```

Fig. 10 Sample code of macro function `serverMPI()`

5. 3D Computations

FreeFEM can process with 3D volume mesh and boundry surface mesh. Similarly as stated in Section 2, our module supports these meshes. Fig. 13 shows an example of 3D volume mesh visualization. The users can set up the inter-

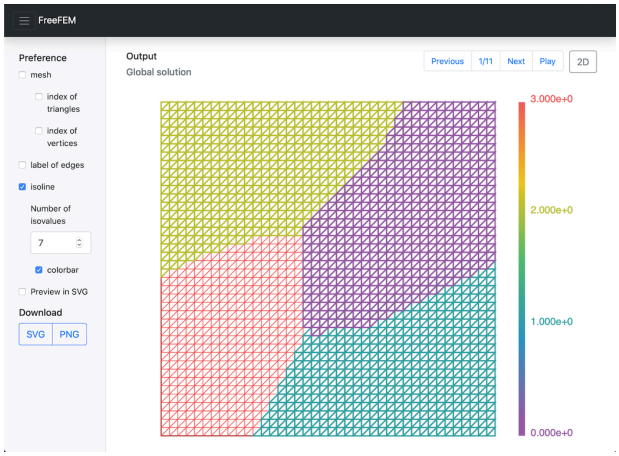


Fig. 11 Domain decomposition status with four processes generated by `plotMPI()` in Fig. 9

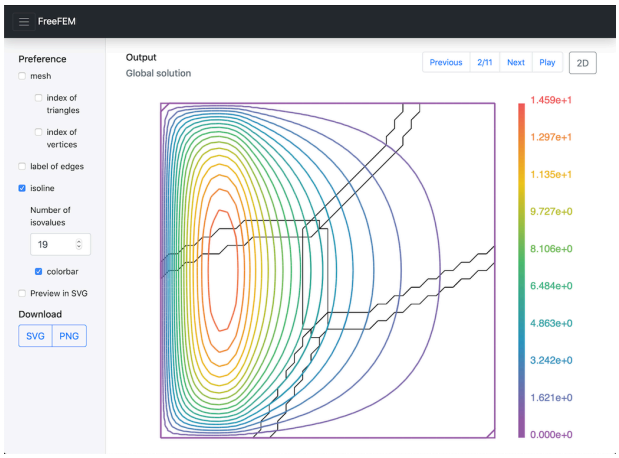


Fig. 12 Isolines of the numerical solution and domain decomposition status with four processes generated by `plotMPI()` in Fig. 9

section view of 3D results as Fig. 14 shows. Since 3D volume mesh contains a lot of tetrahedron elements, it is challenging to handle 3D model rendering for some mobile device. Thus, we still optimizing the visualization for 3D computations. For the MPI computation for 3D problems, similar to 2D MPI visualization, the macro function `plotMPI()` is also used.

6. Concluding remarks

In this paper, we discussed the web-based architecture for visualization on FreeFEM. The proposed framework is possible porting to other FEM computation software which provides Application Programming Interface to let us retrieve information such as numerical results and triangulation of the domain. The current distribution provides visualization of results of 2D and 3D computation and the status of domain decomposition for MPI computation. For demonstration, an online gallery is hosted at `https://freefem.andylee.tw`.

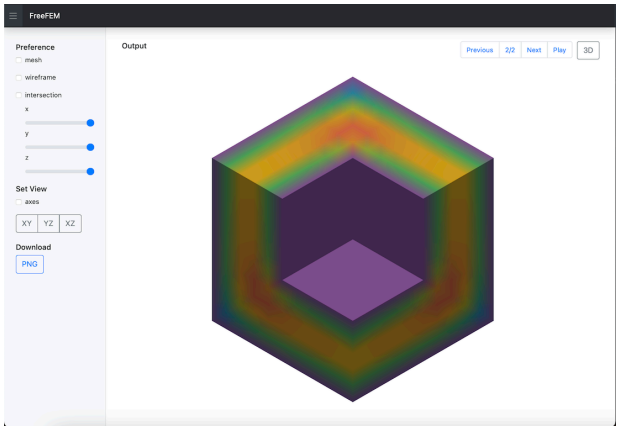


Fig. 13 Default style for 3D volume mesh

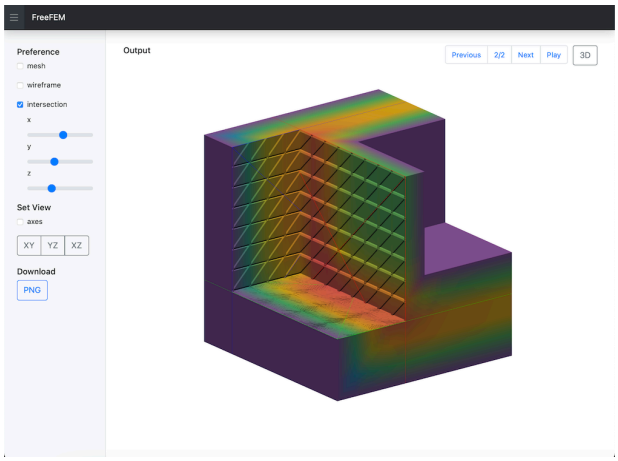


Fig. 14 Intersection view for 3D volume mesh

Acknowledgment This work was supported by JSPS KAKENHI Grant Numbers JP20H01821.

参考文献

(1) F. Hecht, New development in freefem++, J. Numer. Math., Vol. 20 (2012), 251–265.

(2) ABAQUS UNIFIED FEA, `https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus/`

(3) Ansys: Engineering Simulation & 3D Design Software, `https://www.ansys.com`

(4) M. S. Alnaes, J. Blechta, J. Hake, A. Johansson, B. Kehlet, A. Logg, C. Richardson, J. Ring, M. E. Rognes and G. N. Wells, The FEniCS Project Version 1.5, Archive of Numerical Software, vol. 3, 2015.

(5) F. Hecht, FreeFem-sources(feature-newplot), `https://github.com/FreeFem/FreeFem-sources/tree/feature-newplot`

(6) Q. Tessier, FreeFEM-graphic-client, `https://github.com/FreeFem/FreeFEM-graphic-client`

(7) Khronos Group, Vulkan, `https://www.vulkan.org`

(8) Y. Lee, freefem_webplot, `https://github.com/andylee830914/freefem_webplot`

(9) S. Lyubka, Mongoose, `https://www.cesanta.com`

(10) J. Gailly, M. Adler, zlib, `https://zlib.net`

(11) W. Fierens, svg.js, `https://svgjs.com`

(12) R. Cabello, three.js, `https://threejs.org`

(13) `heat-2d-PETSc.edp`, FreeFEM Documentation, `https://github.com/FreeFem/FreeFem-sources/tree/develop/examples/hpddm/heat-2d-PETSc.edp`

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 11-211218 JASCOME

経頭蓋点状散乱体配列レンズの頭蓋内音場最適化

INTRACRANIAL ACOUSTIC FIELD OPTIMIZATION OF A POINT-LIKE-SCATTERERS-ARRAYED TRANSCRANIAL LENS

植田 毅 [1)]

Tsuyoshi Ueta

1) 東京慈恵会医科大学物理学研究室 (〒 182-8570 東京都調布市国領町 8-3-1, E-mail: tsuyoshi_ueta@jikei.ac.jp)

The lens constructed by optimally arranging point-like scatterers on a lattice was proposed according to the concept of Fresnel lens, and it showed superior performance focusing the incident plane wave on a focal point and suppressing the sound field except the vicinity of the focal point. In the present study, we have investigated the transcranial focusing performance of the point-like-scatterers-arrayed lens. The objective function is defined as the sound field vanishes within the skull except the focus(es) and becomes higher at the focus(es) than around. The placement of the point-like scatterers is optimized in terms of the objective function. It has confirmed that the lens focused the incident plane wave with enough intensity even transcranially.

Key Words: Fresnel lens, point-like scatterers, optimization, integral equation, transcranial focusing

1. はじめに

脳梗塞は脳の動脈が狭窄または閉塞し，脳の組織に供給される血流が滞ることに伴い，脳組織が壊死した状態を言う。脳梗塞を防ぐためには，脳動脈の狭窄や閉塞を速やかに解消する必要がある。脳梗塞に対する処置は，血栓溶解薬を発症後３時間以内に静脈内投与し，血栓を解消することにほぼ限られる。急性期の脳梗塞において血栓溶解剤の効果を促進する非侵襲的治療法として，閉塞部位への超音波の経頭蓋的照射が有効とされ，臨床応用が期待されている [(1)]。

しかし，頭蓋内での超音波の反射波の干渉により脳にダメージを与えることが問題となっている [(2)]。そこで，頭蓋骨と脳組織もフォノニック構造として取り込むことにより，脳内での干渉を起こさせることなく超音波を経頭蓋的に患部の形状に高精度かつ適時的に集束させるデバイスの基礎研究に取り組んできた。

この研究では，当初，メッシュ状マイクロ流路に液体金属（ガリスタン）を導入し，位置制御を行うことにより音響レンズを構成し，生体内の変化にリアルタイムに対応して変形するリアルタイム・アダプティブなフォノニック構造を実現することを目標としていた [(3, 4, 5)]。頭蓋骨内の焦点から発する点源音波と遠方からの入射平面波（参照音波）との干渉パタンからフォノニック構造を構成し，経頭蓋音響フレネルレンズとして，その特性を有限要素法を用いて高精度に数値解析することにより，経頭蓋での超音波の実用的集束を確認した [(6, 7)]。

レンズ機能は確認できたものの，トポロジー最適化による形状，配置の最適化には大規模な計算が必要でリアルタイム，アダプティブな構成は困難であり，表面張力の影響でマイクロ流路へのガリスタンの注入が非常に難しいことが判明した。また，空気中から直接超音波を頭部に入射させた場合，頭蓋骨での反射が非常に強いことも考慮し，頭部を水とほぼ同じ媒体（超音波ゼリー）で覆う方向で修正した。水とほぼ同じメディアの中では気泡が強く超音波を散乱する。そこで，新たに頭部を覆うメディアの中にクロスバースイッチを設置し，それにより必要な時，必要な場所に気泡を発生させることにより音響フレネルレンズを構成することを構想している。

気泡を点状散乱体として，点状散乱体を配列することにより音響レンズをモデル化する。このモデルに入射する平面波の振る舞いを調べるために，積分方程式法を用いることにより，散乱体の位置の音場のみを未知変数とするコンパクトな定式化ができる。方程式が低次元になることにより，焦点のみで音場強度が大きくなるように点状散乱体の配置を容易に最適化することが可能となる。

このレンズのモデルとして，頭部近傍に置いた点状散乱体の数および配列を最適化することにより，レンズを実現できることを確認している [(8, 9)]。また，最適化前の散乱体の初

2021 年 10 月 11 日受付，2021 年 11 月 19 日受理

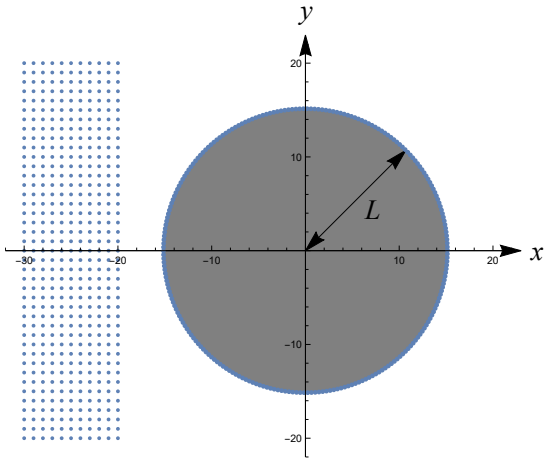


Fig. 1　Illustration of a Fresnel lens constructed by arrayed point-like scatterers and of the target domain to optimize the sound field.

期配置に依らず，同じ配置集束することが確かめられ，初期状態を散乱体がない状態から最適化すればよいことを確認している [10]。

本研究では，頭蓋骨内に焦点を設定し，その焦点に入射平面波を集束させ，かつ，頭蓋骨内の焦点以外の点で音場が 0 になるように点状散乱体の配置を最適化し，点状散乱体を配列することで十分な機能を実現できることを確認する。

2. 点状散乱体によるレンズ模型

系全体が，物性が水に近く，音速が c_0 の媒体で満たされているとする。頭蓋骨内も同じ媒体で満たされているとする。Fig.1 の左無限遠方（$x \to -\infty$）から x 軸に平行に入射する平面波を灰色で示す目的領域内（頭蓋骨内）にある（場合によっては複数の）焦点に集束させるレンズを図中に · の配列で示す正方格子上に置く点状散乱体で構成する [9]。格子定数（格子の間隔）d を系の代表的長さとして，これを用いて長さをスケールする。本研究では自由度を絞るために散乱体の散乱能は全て同じであるとし，レンズは散乱体があるかないかのみで構成される。

頭蓋骨は原点に中心を持つ半径 L の円上に，半径 a の点状散乱体を $L\left(\cos\left(2n\theta\right), \sin\left(2n\theta\right)\right), (n = 1, \cdots, [\pi/\theta])$ のように配列することによりモデル化する。ただし，$\theta \equiv 4\sin^{-1}\left(a/L\right)$ であり，$[\cdots]$ はガウス記号である。本研究では，頭蓋骨をつくる点状散乱体の散乱能をレンズを構成する点状散乱体の 1/3 とする [11]。

3. 定式化

媒体の密度 $\rho(\boldsymbol{r})$，弾性率 $K(\boldsymbol{r})$ が空間変化する場合の，周波数 ω の音場 $\psi(\boldsymbol{r},\omega)$ の支配方程式は

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \frac{\rho}{K}\omega^2\right)\psi(\boldsymbol{r},\omega) = \left(\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla}\rho\right)\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r},\omega) \qquad (1)$$

と書ける。

頭蓋外の媒体での音速を c_0，波数を $k = \omega/c_0$ とし，空間変化する音速の変化は音速を $c(\boldsymbol{r})$ とすると，支配方程式は

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + k^2\right)\psi(\boldsymbol{r},\omega) &= \left(1 - \frac{c_0}{c(\boldsymbol{r})}\right)k^2\psi(\boldsymbol{r},\omega) \\ &\quad + \left(\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla}\rho\right)\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r},\omega) \qquad (2)\\ &= V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},\omega) \\ &\quad + \left(\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla}\rho\right)\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r},\omega) \qquad (3)\end{aligned}$$

と変形し，散乱ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ を定義する。本模型では，密度 ρ，弾性率 K が空間変化するのは点状散乱体部分のみである。

点 $\boldsymbol{R}$ を中心とする点状散乱体を半径 a の円形領域での音速を c として

$$v_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{r}) = \left(1 - \frac{c_0}{c(\boldsymbol{R})}\right)(ka)^2\frac{1}{\pi a^2}\theta\left(a - |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}|\right) \qquad (4)$$

と表す。ここで，$\theta(x)$ はヘヴィサイドの階段関数である。$\left(1 - \frac{c_0}{c(\boldsymbol{R})}\right)(ka)^2$ がこの散乱体の散乱能となる。N 個の散乱体がある場合，n 番目の散乱体の位置ベクトルを $\boldsymbol{R}_n$ として，全体の散乱ポテンシャルは

$$\begin{aligned}V(\boldsymbol{r}) &= \sum_{n=1}^{N} v_{\boldsymbol{R}_n}(\boldsymbol{r}) \\ &= \sum_{n=1}^{N}\left(1 - \frac{c_0}{c(\boldsymbol{R})}\right)(ka)^2\frac{1}{\pi a^2}\theta\left(a - |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n|\right) \qquad (5)\end{aligned}$$

と書ける。

この場合，式 (3) の右辺第 2 項の $\boldsymbol{\nabla}\rho$ は散乱体表面のみで値を持つが，散乱体の表面で強く音波を反射するため，$\boldsymbol{\nabla}\psi \simeq 0$ としてこの項を無視する。

式 (3) に共役なグリーン関数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega)$ を用いると，開放系で，入射平面波がある場合の方程式は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{ikx} - \int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega)V(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \qquad (6)$$

となる。散乱ポテンシャルは式 (5) で与えられるから

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}) &= e^{ikx} - \int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega)\sum_{n=1}^{N}\left(1 - \frac{c_0}{c(\boldsymbol{R}_n)}\right)(ka)^2 \\ &\quad \times\frac{1}{\pi a^2}\theta\left(a - |\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_n|\right)\psi(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \\ &= e^{ikx} - \sum_{n=1}^{N}\left(1 - \frac{c_0}{c(\boldsymbol{R}_n)}\right)(ka)^2\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega) \\ &\quad \times\frac{1}{\pi a^2}\theta\left(a - |\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_n|\right)\psi(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \qquad (7)\end{aligned}$$

となる [12, 13, 14, 15]。

散乱体の有効散乱半径が十分小さいとして，$\left(1 - \frac{c_0}{c(\boldsymbol{R}_n)}\right)(ka)^2$ を一定に保ったまま，$a \to 0$ とすると，$\frac{1}{\pi a^2}\theta\left(a - |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n|\right) \to \delta\left(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n\right)$ となるから

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{ikx} - \sum_{n=1}^{N}\left(1 - \frac{c_0}{c(\boldsymbol{R}_n)}\right)(ka)^2 G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}_n;\omega)\psi(\boldsymbol{R}_n) \qquad (8)$$

を得る。

点状散乱体の位置 $\boldsymbol{R}_m$ の音場 $\psi(\boldsymbol{R}_m)$ に対する自己無撞着な方程式を得るために $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{R}_m$ とすると，式 (8) の右辺の和の中に $G(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{R}_n; \omega)$ が現れるが，$G(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{R}_m; \omega)$ は発散する。しかし，実際には，式 (7) の右辺は発散しないため，$a \to 0$ の極限を取る前の積分

$$\int G(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{r}'; \omega) \frac{1}{\pi a^2} \theta\left(a - |\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m|\right) \psi(\boldsymbol{r}') d\boldsymbol{r}'$$

をより正確に評価する必要がある。点状散乱体内で音場 $\psi(\boldsymbol{r}')$ は変化しないとし，また，積分の中で

$$G(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{r}'; \omega) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}\left(k|\boldsymbol{R}_m - \boldsymbol{r}'|\right) \tag{9}$$

$$\approx \frac{i}{4}\left\{1 + i\frac{2}{\pi}\left(\ln\left(k|\boldsymbol{R}_m - \boldsymbol{r}'|\right) + \gamma - \ln 2\right)\right\} \tag{10}$$

のように展開する。ここで，$H_0^{(1)}$ は 0 次第 1 種ハンケル関数，γ は Euler 定数である。

このとき，

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\pi a^2}\int G(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{r}')\theta(a - |\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m|)\psi(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \\
&\sim \frac{i}{4\pi a^2}\psi(\boldsymbol{R}_m)\int H_0^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m|\right) \\
&\qquad\qquad \times \theta(a - |\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m|)d\left(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m\right) \\
&\sim \frac{i}{4\pi a^2}\psi(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a \left\{1 + i\frac{2}{\pi}\left(\ln r + \ln k + \gamma - \ln 2\right)\right\} 2\pi r dr \\
&= -\frac{1}{4\pi}\left(2\ln\frac{ka}{2} + 2\gamma - 1 - i\pi\right)\psi(\boldsymbol{R}_m)
\end{aligned} \tag{11}$$

のように評価できる。

したがって，音場 $\psi(\boldsymbol{r})$ は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{ikx} - \sum_{n=1}^{N}\left(1 - \frac{c_0}{c(\boldsymbol{R}_n)}\right)(ka)^2\,\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}_n; \omega)\psi(\boldsymbol{R}_n)$$

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}_n; \omega) \equiv \begin{cases} \frac{i}{4} H_0^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n|\right), & \boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{R}_n \\ -\frac{1}{4\pi}\left(2\ln\frac{ka}{2} + 2\gamma - 1 - i\pi\right), & \boldsymbol{r} = \boldsymbol{R}_n \end{cases} \tag{12}$$

と与えられる [12, 13, 14, 15]。

式 (12) において $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{R}_m$ とすると，散乱体がある点における音場 $\{\psi(\boldsymbol{R}_m)\}$ を与える自己無撞着な方程式から得られる。$\{\psi(\boldsymbol{R}_m)\}$ が決定すると，式 (12) により任意の点の音場が求まる。

4. 散乱体がない場合の音場（初期状態）

レンズを構成する散乱体がない状態が最適化により点状散乱体レンズを構成する初期状態となるので，その場合の頭蓋骨周辺の音場の様子を確認する。頭蓋骨を模擬する点状散乱体の半径を $a/d = 0.05$, $\left(1 - \frac{c_0}{c}\right)(ka)^2 = 5/12$, 波数 $kd = 4\pi$ と設定し，振幅 1 の平面波を入射させた場合の頭蓋骨周辺の音場を計算した。頭蓋骨内の音場強度の 3 次元プロットを Fig.2 に示す。Fig.3 は x 軸（入射方向）上の音場強度である。頭蓋骨外の部分に背景色を付けて示している。これらの図から，入射波は頭蓋骨により反射されるが，部分的には頭蓋内に透過し，頭蓋骨の後背部による反射波との干渉により，頭

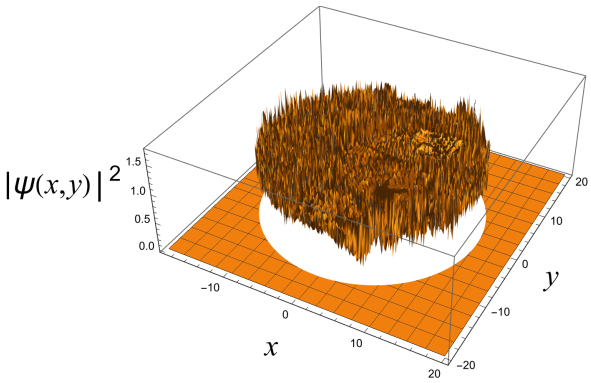


Fig. 2　3D plot of $|\psi|^2$ within the objective domain for the case without the lens.

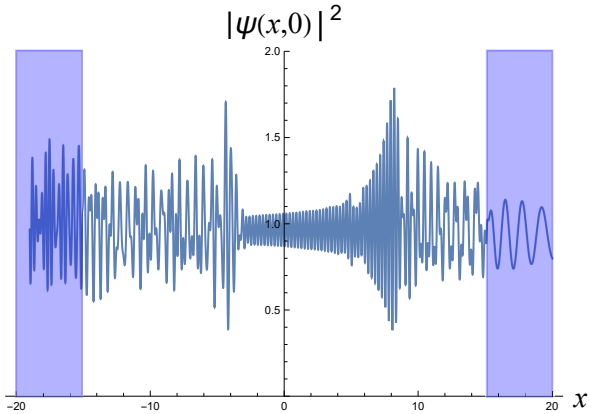


Fig. 3　The intensity of sound pressure $|\psi|^2$ along x-axis for the case without the lens.

部全部と後部に空間的に激しく変化する音場強度の高い部分が発生していることが確認できる。この場合は深刻な状態ではないが，頭蓋骨の形状によっては頭蓋骨によるレンズ効果も含め頭蓋内での音場強度極端に大きくなることも考えられる。

5. 配列最適化

散乱体が存在しない状態を初期条件として，設定した対象領域（Fig.1 の灰色部分（脳内））での音場強度を小さくし，焦点でのみ大きな強度をもつように散乱体の数および配置を最適化する。

最適化のために，最適化対象領域（頭蓋内）に正方格子を設定し，目的関数を定義する。その目的関数をモンテカルロ法に依り最小化する。

5.1. 目的関数

対象領域に波動関数の評価のために正方格子 $\boldsymbol{\xi}_{i,j} = \alpha(i,j)$ を設定する。α は格子間隔である。ただし，この格子点は焦点を含むようにとる。n_f 個の焦点の座標を $\boldsymbol{r}_{\mathrm{f},i}$ として，焦点以外の波動場の強度を小さくするための目的関数は

$$J_\mathrm{vf} = \sum_{i,j}{}' \left|\psi\left(\boldsymbol{\xi}_{i,j}\right)\right|^2 - \sum_{i=1}^{n_\mathrm{f}} \left|\psi\left(\boldsymbol{r}_{\mathrm{f},i}\right)\right|^2 \tag{13}$$

と定義される。ここで，$\sum_{i,j}{}'$ は点 $\boldsymbol{\xi}_{i,j}$ が対象領域内にある場合のみ加算することを意味する。

焦点においては，$\left|\psi\left(\boldsymbol{r}_{\mathrm{f},i}\right)\right|^2$ が上に凸であるという条件を課す。具体的には，最近接格子への変位ベクトルを $\{\boldsymbol{a}_i\}$, $(i = 1 \sim 4)$ として，目的関数を

$$J_\mathrm{fp} = \sum_{i=1}^{n_\mathrm{f}} \sum_{j=1}^{4} \left\{\left|\psi\left(\boldsymbol{r}_{\mathrm{f},i} + \boldsymbol{a}_j\right)\right|^2 - \left|\psi\left(\boldsymbol{r}_{\mathrm{f},i}\right)\right|^2\right\} \tag{14}$$

のように定義する。

これらより，焦点以外での波動強度を小さくし，焦点のみで急峻なピークをもたせるための目的関数は

$$J = J_\mathrm{vf} + cJ_\mathrm{fp} \tag{15}$$

と書ける。ここで，c は重みのパラメータである。

実用的には，両者の項数がほぼ同等になるように，$c =$ (最適化領域の格子点数)/4 とする。

5.2. モンテカルロ法による最適化

点状散乱体の数および配置の最適化はモンテカルロ法を用いて以下の手順で行う。

レンズを構成する現在の点状散乱体の配置について，レンズを構成する散乱体および頭蓋骨モデルを構成する散乱体の位置の音場 $\{\psi(\boldsymbol{R})\}$ についての自己無撞着方程式を解き，その解を用いて最適化対象領域の格子点の音場を求める。

次に，乱数に依り散乱体が配置される格子点 $\boldsymbol{R}$ を 1 つ選び，そこに散乱体が配置されていれば，散乱体を取り除き，散乱体が配置されていなければ，散乱体を配置し，新たな散乱体の配置を決定する。その新しい配置に対し，同様の過程で目的関数を計算する。散乱体の配置の変更前に対する変更後の目的関数の差 ΔJ を求める。

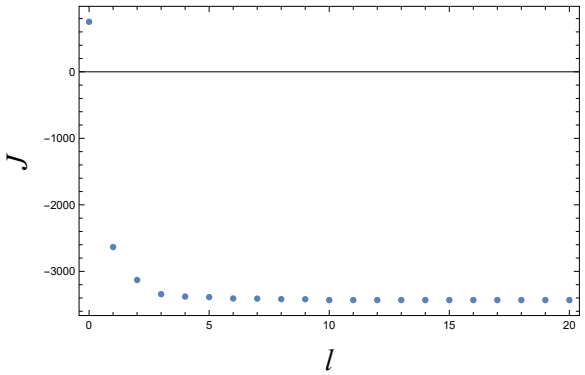


Fig. 4　Variation of the objective function J with l for the focus $(0,0)$.

熱浴法を用いて，閾値

$$p_\mathrm{c} = \frac{e^{-\Delta J}}{1+e^{-\Delta J}} = \frac{1}{1+e^{\Delta J}} \tag{16}$$

を求め，[0,1] の範囲の乱数 p に対して，$p < p_\mathrm{c}$ の場合，散乱体の新しい配置に変更し，それを満たさない場合には元の状態のままにする。

この手続きを散乱体の配置格子点の数の回数だけ行えば，平均として全ての散乱体の配置格子点について 1 回の最適化を行ったことになるので，これを繰り返しの単位とし，ステップと呼ぶ。本来なら，最適化では目的関数が収束するまで繰り返すが，本研究では 30 ステップまで計算している（Fig.4, 9, 14 にはそのうち 20 までを示している）。

6. 最適化された散乱体配置とそのレンズ性能

半径 $L/d = 1+10\sqrt{2} \simeq 15.14$ の頭蓋骨を考える。頭蓋骨を構成する点状散乱体の散乱能を $\left(1-\frac{c_0}{c}\right)(ka)^2 = 5/12$ とし，レンズを構成する点状散乱体の散乱能は $\left(1-\frac{c_0}{c}\right)(ka)^2 = 5/4$ とする。半径はどちらの散乱体も $a/d = 0.05$ とする。レンズを構成する散乱ポテンシャルを配置する格子は x 軸方向に 11 層，y 軸方向に 41 層とする。

波数 $kd = 4\pi$ の平面波が入射する場合に，3 つの焦点に対して，点状散乱体がない状態を初期状態として，その最適配置を決定する。また，頭蓋内，頭蓋近傍で音圧強度を計算することにより，決定されたレンズの性能を評価する。目的関数を計算する対象領域の格子間隔は $\alpha = 1$ とする。

6.1. 焦点 $(0,0)$ の場合

円形モデル頭蓋骨の中心 $(0,0)$ を焦点とする場合の計算結果を示す。

初期状態から最適化手続きのステップ数 l に対する目的関数の値の変化を Fig.4 に示す。Fig.4 より目的関数 J は速やかかつ単調に減少し，$l = 10$ 以後 J の値は全く変化しておらず，収束している。

最終の点状散乱体の配置を Fig.5 に示す。この計算では x 軸についての対称性を条件として課していないがほぼ対称な形状に収束している。

この配置の点状散乱体に平面波を入射させた場合の目的領域（頭蓋内）における音圧強度の 3 次元プロットを Fig.6

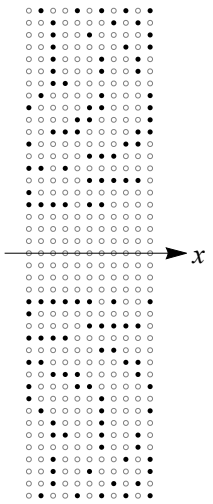


Fig. 5　Final configuration of the point-like scatterers for the focus $(0, 0)$.

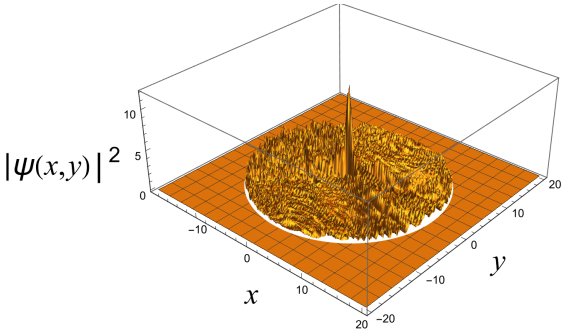


Fig. 6　3D plot of the intensity of the sound pressure $|\psi|^2$ within the objective domain for the final configuration of the point-like scatterers shown in Fig.5.

に示す。$|\psi|^2$ は焦点 $(0, 0)$ において鋭いピークを持ち，入射平面波は非常によく集束されている。焦点以外では，焦点におけるピークの高さに対して相対的に十分小さいレベルに抑えられている。

入射方向に対して垂直な y 方向の集束の状態を詳しく見るために，Fig.7 に y 軸上の音圧強度の変化 $|\psi(0, y)|^2$ を示す。頭蓋骨外の部分に背景色を付けて示している。$|\psi(0, y)|^2$ は焦点において極めて急峻なピークが現れており，焦点から離れた点では音圧強度は比較的平坦で十分小さな値に抑えられてる。

入射方向に対して縦方向の集束の状態を確認するために，Fig.8 に x 軸上の音圧強度 $|\psi(x, 0)|^2$ を示す。頭蓋骨外の部分に背景色を付けて示している。x 方向にも顕著なピークが見られ，そのピークの半値幅は 1.53 で，y 軸方向の半値幅 0.349 に比べ，4.3 倍以上になっている。焦点以外での $|\psi(x, 0)|^2$ は焦点より前方（レンズ側）では概ね 2 以下に抑えられており，焦点の後方，頭蓋骨近傍の干渉の包絡線のピーク値もおよそ 2.4 に抑えられている。

6.2. 焦点 $(7, 0)$ の場合

レンズの位置に対して頭蓋内で焦点の位置が深い場合の

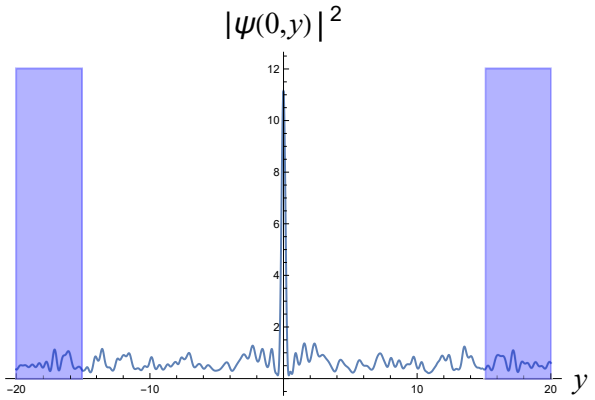


Fig. 7　The intensity of the sound pressure $|\psi(0, y)|^2$ on the y-axis for the final configuration of the point-like scatterers shown in Fig.5.

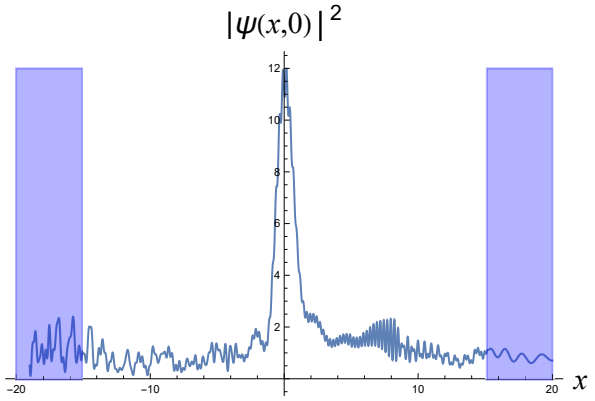


Fig. 8　The intensity of the sound pressure $|\psi(x, 0)|^2$ on the x-axis for the final configuration of the point-like scatterers shown in Fig.5.

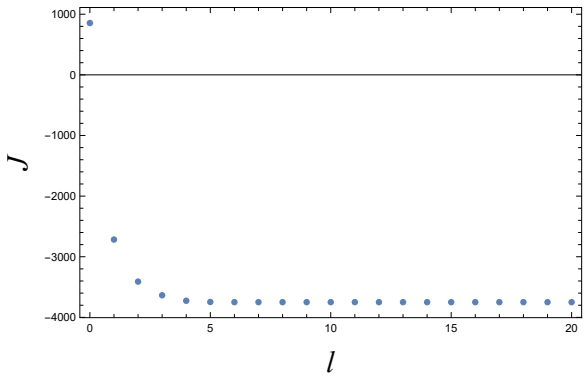


Fig. 9　Variation of the objective function J with l for the focus $(7, 0)$.

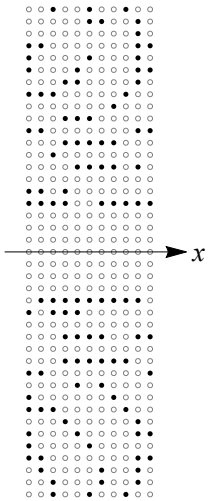


Fig. 10　Final configuration of the point-like scatterers for the focus $(7, 0)$.

集束特性を見るために，$(7, 0)$ を焦点とした場合の計算結果を示す。

目的関数のステップ数 l 依存性を Fig.9 に示す。目的関数 J は焦点が $(0, 0)$ の場合よりも速やかに減少し，$l = 6$ 以後，J の値は全く変化していない。

最終の点状散乱体の配置を Fig.10 に示す。この場合も x 軸について対称な形状に収束している。

この場合の頭蓋内の音圧強度は Fig.11 のようである。音圧強度 $|\psi(7, y)|^2$，$|\psi(x, 0)|^2$ をそれぞれ Fig.12，13 に示す。頭蓋骨外の部分に背景色を付けて示している。$|\psi|^2$ は焦点 $(7, 0)$ において鋭いピークを持ち，入射平面波は非常によく集束されている。焦点以外の点では音圧強度は平坦で十分小さな値に抑えられてる。この場合も，ピークの x，y 方向それぞれの半値幅が 2.40，0.457 であり，その比は 5 倍以上になっている。

6.3. 焦点 $(0, 7)$ の場合

焦点位置がレンズ正面からずれた場合の集束特性を調べるために，$(0, 7)$ を焦点とした場合の計算結果を示す。

目的関数のステップ数 l 依存性を Fig.14 に示す。目的関数 J は焦点が $(0, 0)$ の場合よりも速やかに減少し，J は $l = 6$

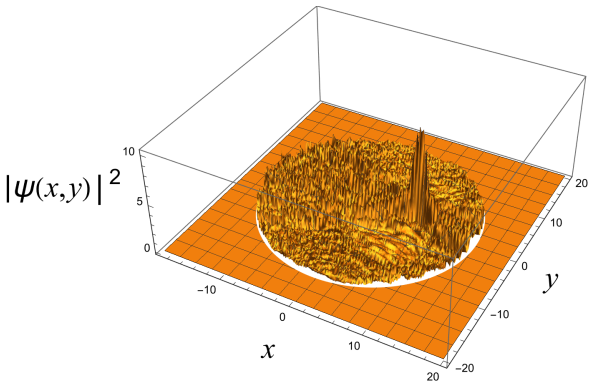


Fig. 11　3D plot of the intensity of the sound pressure $|\psi|^2$ within the objective domain for the final configuration of the point-like scatterers shown in Fig.10.

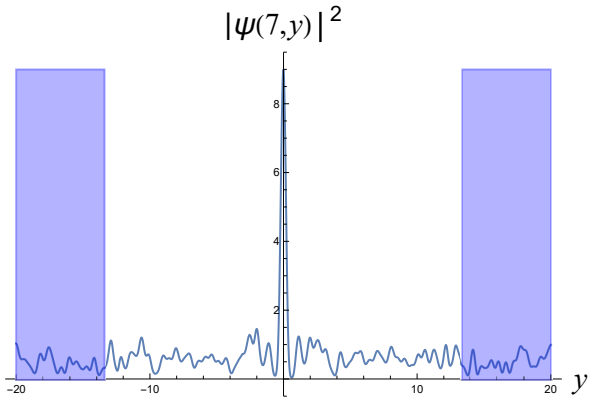


Fig. 12　The intensity of the sound pressure $|\psi(7, y)|^2$ on the y-axis for the final configuration of the point-like scatterers shown in Fig.10.

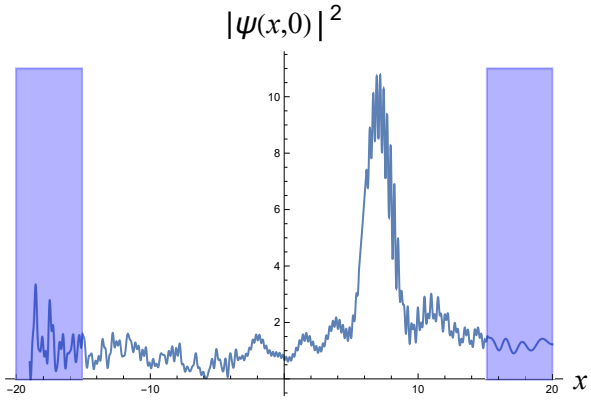


Fig. 13　The intensity of the sound pressure $|\psi(x, 0)|^2$ on the x-axis for the final configuration of the point-like scatterers shown in Fig.10.

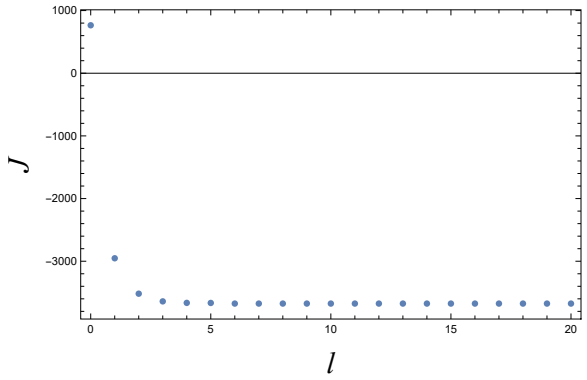


Fig. 14　Variation of the objective function J with l for the focus $(0, 7)$.

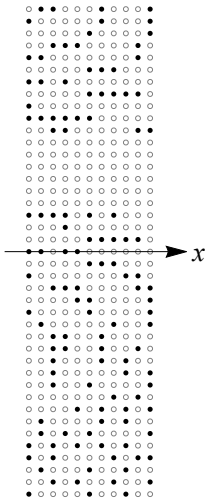


Fig. 15　Final configuration of the point-like scatterers for the focus $(0, 7)$.

で収束している。

最終の点状散乱体の配置を Fig.15 に示す。この場合は，$(0, 0)$ を焦点とする場合の配置を焦点方向に平行移動した構造に似た配置に収束している。

頭蓋内の音圧強度は Fig.16 のようである。音圧強度 $|\psi(0, y)|^2$, $|\psi(x, 7)|^2$ をそれぞれ Fig.17，18 に示す。頭蓋骨外の部分に背景色を付けて示している。 焦点がレンズの設計領域の中心からずれている場合でも，$|\psi|^2$ は焦点 $(0, 7)$ において鋭いピークを持ち，入射平面波は非常によく集束され，焦点以外の点では音圧強度は平坦で十分小さな値に抑えられてる。この場合も，ピークの x，y 方向それぞれの半値幅が 1.279, 0.372 であり，その比は 3.5 倍より小さくなっている。

7. 結論

点状散乱体を矩形領域に正方格子上に点状散乱体を適切な配置で並べる経頭蓋音響レンズを提案し，その特性を調べた。レンズを構成する点状散乱体の配置は,「頭蓋内にある焦点で音場強度が近傍より大きい」,「焦点位置以外の頭蓋内の音場は 0 になる」という条件を表す目的関数をモンテカルロ法により最小化した。最適化は多くて 11 回の繰り返しで収

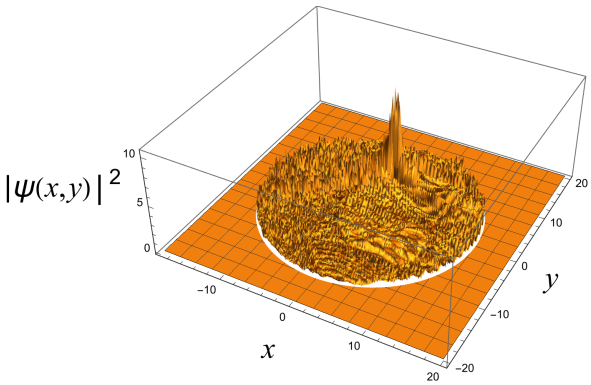


Fig. 16　3D plot of the intensity of the sound pressure $|\psi|^2$ within the objective domain for the final configuration of the point-like scatterers shown in Fig.15.

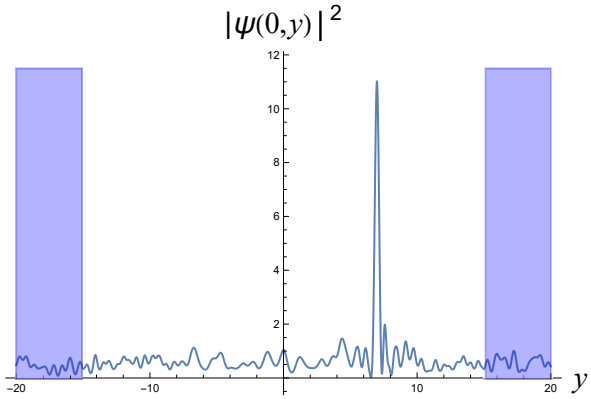


Fig. 17　The intensity of the sound pressure $|\psi(0, y)|^2$ on the y-axis for the final configuration of the point-like scatterers shown in Fig.15.

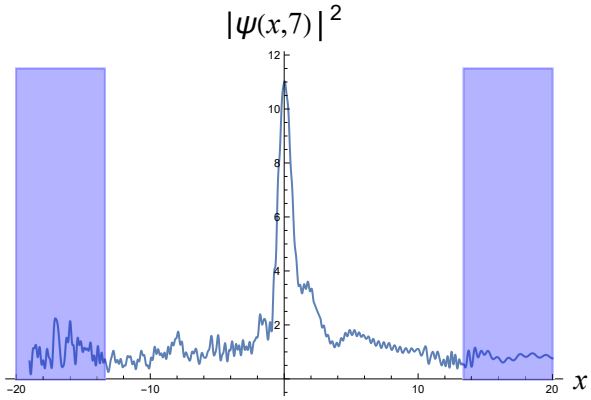


Fig. 18　The intensity of the sound pressure $|\psi(x, 7)|^2$ on the x-axis for the final configuration of the point-like scatterers shown in Fig.15.

束しており，簡便な手法で点状散乱体の最適な配置の決定が期待される。頭蓋骨も点状散乱体を並べることによりモデル化し，頭蓋外から入射する平面波の集束特性を調べた。頭蓋内の様々な位置に設定した焦点において，音圧強度の極めて急峻なピークを作り，ピークの高さに対し，周辺の音圧強度は十分低いレベルに抑えられていることを確認した。また，ピークの広がりは，焦点がレンズに対して平行に移動しても大きな影響は受けないが，焦点がレンズから遠ざかると大きくなる。

ピークは入射方向の広がりがそれに垂直な方向に比べ 3 倍から 5 倍大きいが，これはフレネルレンズの特性である。入射方向のピークの広がりを抑えるためには，レンズの横幅を広げる，散乱体を置く領域を矩形ではなく，頭蓋骨を囲むような領域に設定するなどが考えられる。

本論文で示した計算例よりもさらに焦点が頭蓋骨に接近している場合や頭蓋骨の形状が楕円形など細長い部分を持ち，焦点がその近傍にある場合には，予備的計算で焦点と頭蓋骨の間で振幅の大きな干渉が生じることがあることが分かっている。この原因は，本研究の段階では目的関数を評価する点は一様な正方格子上に取っているので，焦点と頭蓋骨の間が狭くなると目的関数の評価点数が少ない，もしくは無い状態が生じてしまうためと考えられる。したがって，この現象は目的関数を評価する点の格子をアダプティブメッシュにするなどの工夫により解消できると期待される。

今後，頭蓋骨の形状の影響，頭蓋骨のモデルの散乱体の散乱強度の影響を調べる必要があるが，実用的なレンズが設計可能であることが確認できた。今後，複数焦点の場合の解析，3 次元系への拡張が望まれる。

謝辞:

本研究は JSPS 科研費 課題番号 18K04028, 19H00740 および平成 31 年度 東京慈恵会医科大学研究助成費の助成を受けて行われました。

参考文献

(1) 阿部優子, 荻原誠, 窪田純, 松島雅人, 谷藤泰正, 古幡博: 経頭蓋超音波併用脳血栓溶解装置の有効性に関する in vitro 実験, 東京慈恵会医科大学雑誌, **120** (2005), pp. 213–214.

(2) 齋藤理, 井口保之, 小川武希, 横山昌幸: 超音波のヒト頭蓋骨片透過における直進性検証, 東京慈恵会医科大学雑誌, **128** (2013), pp. 211–212.

(3) H. Isakari, K. Kuriyama, S. Harada, T. Yamada, T. Takahashi and T. Matsumoto: A topology optimisation for three-dimensional acoustics with the level set method and the fast multipole boudnary element method, Mechanical Engineering Journal, **1** (2014), CM0039.

(4) 安藤 真: マイクロチューブを用いたアダプティブ超音波収束システムの開発に向けたトポロジー最適化に関する研究, 名古屋大学修士論文, (2017).

(5) 齋藤優里, 安藤 真, 荒上祐一, 高橋 徹, 植田 毅, 飯盛浩司, 松本敏郎: 超音波収束を用いた脳梗塞医療を援用するためのトポロジー最適化システムの開発, 第 31 回計算力学講演会講演論文集, (2018) 223.

(6) 糸賀 響, 植田 毅: 脳血栓の治療に向けた音響レンズの基礎的設計, 第 32 回計算力学講演会講演論文集, (2019) 219.

(7) S. Jiménez-Gambín, N. Jiménez, J. M. Benlloch and F. Camarena: Holograms to Focus Arbitrary Ultrasonic Fields through the Skull, Phys. Rev. Appl., **12** (2019), 014016.

(8) A. Spadoni and C. Daraio: Generation and control of sound bullets with a nonlinear acoustic lens, PNAS, **107** (2010), pp. 7230–7234.

(9) 植田 毅: 点状散乱体の配置の最適化によるフネレルレンズ設計, 計算工学講演会論文集, **25** (2020), C-10-04.

(10) 植田 毅: 点状散乱体レンズの配列最適化における初期状態依存性, 第 34 回計算力学講演会講演論文集, (2021) 059.

(11) G. Tayeb and S. Enoch: Combined fictitious-sources-scattering-matrix method, J. Opt. Soc. Am. A, **21** (2004), pp. 1417–1423.

(12) T. Ueta: Boundary Element Method for Electron Transport in the presence of pointlike scatterers in magnetic fields, Phys. Rev. B, **60** (1999), pp. 8213–8217.

(13) 宮川 悠, 植田 毅: 点状磁性散乱体が存在する場合の境界要素法, 計算数理工学論文集, **4** (2004), pp. 1–6.

(14) Y. Miyagawa and T. Ueta: A novel numerical method for the analysis of electron transport in the presence of pointlike magnetic scatterers, J. Phys.: Condens. Matter, **20** (2008), 365208.

(15) 植田 毅: Krein 公式によるグリーン関数を用いた境界要素法 - フラクタル配置点状散乱体への応用 -, 計算数理工学論文集, **14** (2014), pp. 101–106.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月)，論文 No. 13-211218 JASCOME

二次元電磁波動散乱問題の複素固有値を対象とするNyström境界積分方程式法を用いたパラメトリック形状最適化

A PARAMETRIC SHAPE OPTIMIZATION USING THE NYSTRÖM-BOUNDARY INTEGRAL EQUATION METHOD FOR COMPLEX EIGENVALUES OF ELECTROMAGNETIC SCATTERING PROBLEMS IN 2D

三澤　亮太 [1)]，髙橋　勇二朗 [2)]，馬　哲旺 [3)]，大平　昌敬 [4)]

Ryota MISAWA, Yujiro TAKAHASHI, Zhewang MA and Masataka OHIRA

1) 埼玉大学大学院理工学研究科 (〒 338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255, E-mail: misawa@mail.saitama-u.ac.jp)
2) 埼玉大学工学部 * (〒 338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255)
3) 埼玉大学大学院理工学研究科 (〒 338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255, E-mail: maz@mail.saitama-u.ac.jp)
4) 埼玉大学大学院理工学研究科 (〒 338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255, E-mail: mohira@mail.saitama-u.ac.jp)

Complex eigenvalues in open space (scattering eigenvalues) are of great interest because they are expected to be a helpful index for designing electromagnetic devices, thus optimization of complex eigenvalues is an important problem. In this paper, we propose a simple shape optimization method for complex eigenvalues for two dimensional electromagnetic scattering problems. Specifically, we reduce the shape optimization problem to a parametric optimization problem with the help of boundary integral equation discretized with a high-order Nyström method. The reduced parametric optimization problem is solved with a gradient method and the CMA-ES. We show some numerical examples to show the effectiveness and performances of the method.

Key Words: Scattering eigenvalues, Shape optimization, Sakurai-Sugiura method, Boundary integral equation, Nyström method

1. 序論

電磁波動散乱問題の複素固有値は通信素子設計の有効な指標となることが期待され，それを対象とした最適設計は重要な課題である．そこで，本研究では二次元電磁波動散乱問題の固有値を対象とした形状最適設計を考える．

散乱問題の固有モードは遠方で指数的に増大するため，その数値計算は必ずしも容易ではない．固有値計算において一般的に用いられている有限要素法では，この遠方で増大する固有モードを陽に取り扱う難しさが生じる．一方で，境界積分方程式法を用いた解法では，必要となる計算は散乱体の境界のみで閉じ，遠方で指数的に増大する固有モードを陽に計算する必要がないため，比較的容易に固有値計算を行うことができる．また，PML などの放射条件を近似する人工的な条件を導入する必要がない利点も有する．境界積分方程式を用いた固有値計算には非線形固有値の計算が必要となるが，これは櫻井杉浦法 (以下，SSM)[(1)] により容易に解くことが可能である．

そこで，本論文では電磁波動散乱問題の固有値を対象とした素子設計の基礎的検討として，二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 問題の複素固有値を対象とした，Nyström 法によって離散化された境界積分方程式とパラメトリックな形状表現に基づく，パラメトリック形状最適化を提案する．具体的には，形状を Fourier 級数で表現し，その Fourier 係数を設計変数とした最適化を行う．最適化問題の解法の一つとして，本論文では勾配法を考える．ただし，上記の形状表現では，自己交差や曲率が無限大となる点が最適化の途中で現れることで，計算精度を著しく低下させたり，無意味な形状を得るなどのおそれがある．これらの望ましくない形状を抑制するための幾何的特性 (例えば最大曲率や形状の幅) の勾配を導出することは困難である．そこで，本論文では最適化問題の解法として勾配法に加え，勾配が不要な共分散行列適応進化戦略 (Covariance matrix adaptation-evolution strategy,

*現所属：エクシオグループ株式会社

2021 年 10 月 15 日受付，2021 年 11 月 12 日受理

以下 CMA-ES)[2, 3] をともに考える．

境界積分方程式法を用いた複素固有値の最適化に関する先行研究として，以下のような研究が存在する．松島ら [4, 5] は開空間における散乱問題の複素固有値を対象とした，境界積分方程式法を用いたレベルセットトポロジー最適化法を提案している．先行研究で行われたトポロジー最適化と比すると本論文の方法の自由度は低く，また境界をパラメトリックに表現しているため，適用範囲や得られる最適形状に制約は課されるものの，一方で本論文の方法の定式化と実装は極めて容易である．また，メッシュ生成が不要であり，高精度数値積分公式を用いることによって，少ない未知数で問題を解くことができる利点を有する．また，Kleefeld らの研究 [6, 7] は境界積分方程式と周回積分型固有値解法を用いたパラメトリックな形状表現に基づく固有値の最適化を行っているという点で本研究と一致しているが，彼らは内部問題や内部 transmission 問題を対象とし，それらの固有値を最大化や最小化するような形状を求めることを目的とした研究を行っている．一方で，本論文は散乱問題の，特に共振器のような構造の複素固有値の制御を目的としており，対象とする問題が異なっている．また，彼らは陰的形状表現に基づきメッシュを生成し，最適化には Nelder-Mead 法を用いている．一方で，本論文では勾配を容易に計算するために陽的形状表現と Nyström 法を利用し，勾配法と CMA-ES を用いた最適化を行っている点が異なる．Fourier 級数を用いたパラメトライズは素朴な方法であり新しくは無いが，散乱問題の複素固有値を対象とし本論文と同一の方法で共振器型の形状の形状最適化を行った例は著者らの知る限りなく，本論文の数値計算結果が提供する知見は有用であると考えられる．

本論文の構成は以下の通りである．第 2 節では，境界値問題および取り扱う最適化問題の定式化を行う．第 3 節では，形状最適化の手法と複素固有値の勾配の導出について説明する．第 4 節では，数値計算例を示し提案方法の有用性を示す．第 5 節では，本研究で得られた成果と今後の課題をまとめる．

2. 問題の定式化

2.1. 二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 境界値問題

本論文では時間方向に $e^{-j\omega t}$ (ここに ω は角周波数，$j=\sqrt{-1}$) で依存する二次元の時間域 Maxwell 方程式により導かれる二次元 Helmholtz 方程式の境界値問題を考える．本論文で考える境界値問題の定式化を以下に示す．領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ を有界な散乱体とし，その境界を $\partial\Omega$, 補領域を $\Omega^C := \mathbb{R}^2 \backslash (\Omega \cup \partial\Omega)$ とし，Ω^C 中に入射波 u^{inc} があるとする．

二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 境界値問題は

$$\left(\nabla^2 + k^2\right) u(\boldsymbol{X}) = 0 \text{ in } \Omega^C \tag{1}$$

$$u(\boldsymbol{X}) = 0 \text{ on } \partial\Omega \tag{2}$$

かつ，十分大きい $R > 0$ に対して散乱波が以下の級数で表されるという放射条件を満たす u を求める問題である．

$$u(\boldsymbol{X}) - u^{\mathrm{inc}}(\boldsymbol{X}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n H_n^{(1)}(k|\boldsymbol{X}|) e^{in\theta}, \text{ for } |\boldsymbol{X}| > R \tag{3}$$

ただし，k は波数であり，角周波数 ω を用いて $k = \omega\sqrt{\epsilon\mu}$, $\epsilon > 0$, $\mu > 0$ とする．ここに，ϵ, μ はそれぞれ誘電率，透磁率を表す．本研究では真空を想定し，さらに光速を 1 とする無次元化を行い $\epsilon = 1$, $\mu = 1$ とする．また，$\partial/\partial n$ は法線微分 (法線ベクトル $\boldsymbol{n}$ は Ω の外向きを正とする) であり，以下では $q := \partial u/\partial n$ とする．また，式 (3) において $H_n^{(1)}$ は第一種 n 次の Hankel 関数，$a_n \in \mathbb{C}$ は定数係数，θ は $\boldsymbol{X}$ の偏角である．以上の境界値問題の固有値は入射波が $u^{\mathrm{inc}} \equiv 0$ である斉次問題が非自明解 $u \neq 0$ を持つような $\omega \in \mathbb{C}$ と定義され，$u \neq 0$ は対応する固有関数となる．このような ω は負の虚部を持つ複素数となり，固有関数 u は遠方で指数的に増大する．

2.2. 境界積分方程式

本論文では，境界値問題 (1)-(3) およびその固有値問題は，以下の Burton-Miller 型の境界積分方程式 [8] を用いて解く．

$$\left(\left(S + \frac{\alpha}{2} I + \alpha D^T\right) q\right)(\boldsymbol{X}) = u^{\mathrm{inc}}(\boldsymbol{X}) + \alpha \frac{\partial u^{\mathrm{inc}}(\boldsymbol{X})}{\partial n} \tag{4}$$

ここに，α, I はそれぞれ定数, 恒等作用素であり，S, D^T は二次元 Helmholtz 方程式の基本解 $G(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}') = (j/4) H_0^{(1)}(k|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}'|)$ を用いて以下のように表される積分作用素である．

$$(Sq)(\boldsymbol{X}) := \int_{\partial\Omega} G(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}') q(\boldsymbol{X}')\, ds_{X'} \tag{5}$$

$$\left(D^T q\right)(\boldsymbol{X}) := \int_{\partial\Omega} \frac{\partial G(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}')}{\partial n_X} q(\boldsymbol{X}')\, ds_{X'} \tag{6}$$

本論文では，境界 $\partial\Omega$ は角度方向の媒介変数表示 $\boldsymbol{\xi} : \theta \in [0, 2\pi] \to \boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^2$ で表せる滑らかな閉曲線とする．すなわち，境界 $\partial\Omega$ は $\partial\Omega = \left\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 | (x, y) = \boldsymbol{\xi}(\theta),\ \theta \in [0, 2\pi]\right\}$ とかける．式 (5),(6) は，$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{\xi}(\tau)$ とし，積分点 $\boldsymbol{X}' = \boldsymbol{\xi}(\theta)$ とし，変数変換するとそれぞれ以下のようになる．

$$(Sq)(\tau) = \int_0^{2\pi} G(\boldsymbol{\xi}(\tau), \boldsymbol{\xi}(\theta)) J(\theta) q(\theta)\, d\theta \tag{7}$$

$$\left(D^T q\right)(\tau) = \int_0^{2\pi} \frac{\partial G(\boldsymbol{\xi}(\tau), \boldsymbol{\xi}(\theta))}{\partial n_X} J(\theta) q(\theta)\, d\theta \tag{8}$$

ここに，$J(\theta)$ は Jacobian，α は定数係数であり本論文では $\alpha = 0$ または $\alpha = -j/k$ と選ぶ．

本論文では，式 (4) で $u^{\mathrm{inc}} \equiv 0$ とした斉次境界積分方程式が非自明解を持つような ω を求め，固有値を求める．このようにして得られた固有値は必ずしも元の境界値問題の固有値とは限らず「見かけの固有値」[9] であるおそれがあるが，係数 α を $\alpha = -j/k$ と選ぶことにより実軸の近くに固有値が現れることが防げ [10]，また見かけの固有値の虚部は正となるので，負の虚部を持つ境界値問題の固有値と容易に区別できる [11]．

2.3. Nyström 法による境界積分方程式の離散化

本論文では，式 (4) を Hao らの論文 [12] の 4 節の，Alpert の数値積分公式 [13] を用いる Nyström 法により離散化する．

この定式化は以下のようになる．作用素 S, D^T を θ に関する積分で表した式 (7) および式 (8) の積分範囲 $[0, 2\pi]$ を等間隔に N 分割した点 θ_j： $2\pi j/N\,(j = 1, 2, \cdots, N)$ を積分点とし，固有関数 q の各積分点上の値を並べたベクトルを

$$\boldsymbol{q} := (q(\theta_1), q(\theta_2), \cdots, q(\theta_N))^T$$

とし，これが未知ベクトルとなる．このとき，作用素 S, D^T は以下のように数値積分で近似される．

$$(Sq)(\theta_i) \approx \sum_{j=1}^{N} w_j G(\boldsymbol{\xi}(\theta_i), \boldsymbol{\xi}(\theta_j)) J(\theta_j) q(\theta_j) =: \sum_{j=1}^{N} \hat{S}_{ij} q(\theta_j) \tag{9}$$

$$(D^T q)(\theta_i) \approx \sum_{j=1}^{N} w_j \frac{\partial G(\boldsymbol{\xi}(\theta_i), \boldsymbol{\xi}(\theta_j))}{\partial n_X} J(\theta_j) q(\theta_j) =: \sum_{j=1}^{N} \hat{D}_{ij}^T q(\theta_j) \tag{10}$$

ただし，右辺の $\hat{S}_{ij}, \hat{D}_{ij}^T$ はそれぞれ積分作用素 S および D^T の離散化係数行列 $\hat{S}, \hat{D}^T$ の (i, j) 成分，w_j は Alpert の数値積分公式 (本論文では 16 次のものを利用する) を用いる Hao らの Nyström 法によって与えられる重み係数である (ただし，対角項付近は積分点以外の関数値も利用され厳密にはこの形のみでは書けない)．以降，本論文では特に断りが無い限り作用素に ˆ をつけたものはその作用素の Nyström 法による離散化係数行列を表すものとする．

2.4. 最適化問題の定式化

本論文で考える最適化問題の定式化を示す．境界 $\partial\Omega$ の媒介変数表示の x, y 成分が Fourier 級数を用いて以下のように表せるとする．

$$x(\theta) = \sum_{i=0}^{N_F} a_i \cos i\theta,\ y(\theta) = \sum_{i=1}^{N_F} b_i \sin i\theta \tag{11}$$

ここに，N_F は Fourier 級数の最大次数である．すなわち，境界 $\partial\Omega$ は式 (11) のパラメータ

$$\boldsymbol{p} = (a_0, \cdots, a_{N_F}, b_1, \cdots, b_{N_F})$$

により形状が決定される．本論文では，波を捉える窪みを持つ共振器型の構造 (例えば付録 A に示す形状) を想定し x 方向には (原点について) 非対称，y 方向には対称な形状として上記のような sine/cosine の Fourier 級数表現とした．このとき，Ω の面積 A は

$$A = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{n}\, ds_X, \tag{12}$$

(ここに $\boldsymbol{X} = (x, y)$)，および境界 $\partial\Omega$ の最大曲率 (Mcur とする) は以下で与えられる．

$$\mathrm{Mcur} := \max_{\theta} \frac{|x'(\theta)y''(\theta) - x''(\theta)y'(\theta)|}{(x'(\theta)^2 + y'(\theta)^2)^{3/2}} \tag{13}$$

ここに $'$ は θ に関する微分を表す．なお，0 次項 a_0 は位置を変更するだけで形状には寄与しないため，全空間中の単一散乱体を考えている限りは無視してよいが，導波路問題や散乱体が複数ある問題では考慮する必要がある．本論文では，初期形状における特定の固有値 ω を与えられた目標値 ω_0 へ近づける最適化問題を考え，目的関数 $f(\boldsymbol{p})$ を ω と ω_0 の距離 $f(\boldsymbol{p}) := |\omega(\boldsymbol{p}) - \omega_0|$ とする以下の最小化問題を考える．

$$\inf_{\boldsymbol{p}} |\omega(\boldsymbol{p}) - \omega_0| \tag{14}$$

3. CMA-ES、勾配法を用いた形状最適化

3.1. 最適化問題の数値解法

本論文では，最適化問題 (14) を数値的に解き最適な形状パラメータ $\boldsymbol{p}$ を求め，最適形状を決定する．ただし，式 (11) による形状表現では必ずしも閉曲線が得られるとは限らず，自己交差するような構造や，またそうでなくとも曲率が非常に大きな点を持つ形状が得られる可能性がある．最適化を勾配法を用いて行う場合，最適化の過程においてこのような望ましくない形状の出現を抑制するために自己交差などの幾何的条件をパラメータ $\boldsymbol{p}$ を用いて解析的に表しさらにその微分を求め，制約条件として加える必要がある．しかしながら，そのような条件と形状パラメータ $\boldsymbol{p}$ の関係およびその微分を求めることは必ずしも容易ではない．そこで，本論文では幾何的制約を取り入れるために，勾配が不要である CMA-ES[2, 3] の利用を考える．CMA-ES は実関数の最小化問題における確率論的方法の一つであり，構造最適化にも多数利用されている (例えば [14])．CMA-ES は目的関数の勾配が不要であるという利点を持ち，また局所最適解に陥りにくいと期待される．詳細は原著 [2, 3] を参照されたい．一方で勾配法は，確率論的方法と異なり一般に目的関数値を各ステップで減少させることができるので，[14] で触れられているように上述の CMA-ES の解を初期値として勾配法による最適化を行うことで解を洗練させられると考えられる．そこで，本論文では CMA-ES と勾配法の二通りによる最適化を考える．

3.2. 形状感度の導出

勾配法で必要となる固有値の形状感度 $(= \nabla_p \omega)$ を導出する．ここでは，Kao ら [15] の論文で体積積分方程式の密度関数に関する摂動から導出しているのと同様に，$\alpha = 0$ とした式 (4) の直接微分に基づき導出する．いま，ω は形状パラメータ $\boldsymbol{p}$ で与えられる境界の非重複な固有値とする．形状パラメータ $\boldsymbol{p}$ の成分のうちの一つを代表して p とする．また，境界上において定義される関数の $\mathcal{L}^2$ 内積の記号を以下のように導入する．

$$f \cdot g := \int_{\partial\Omega} \overline{f(x)} g(x)\, ds_x$$

いま，形状パラメータ p が Δp 変化し，固有値 ω および固有関数 q がそれぞれ $\Delta\omega$, Δq 変化したときの境界積分方程式 $S(\omega, p)q = 0$ の摂動を考えると以下のようになる：

$$S(\omega, p)q = 0 \ \longrightarrow S(\omega + \Delta\omega, p + \Delta p)(q + \Delta q) = 0$$

変化量の 2 次以上の項を無視すると

$$\left(S(\omega,p)+\frac{\partial S}{\partial \omega}\Delta\omega+\frac{\partial S}{\partial p}\Delta p\right)(q+\Delta q)=0$$
$$\Rightarrow S\frac{\Delta q}{\Delta p}+\frac{\Delta\omega}{\Delta p}\frac{\partial S}{\partial \omega}q+\frac{\partial S}{\partial p}q=0$$

任意の ϕ に対して $q^*\cdot(S\phi)=0$ を満たす境界上定義される関数 q^* と上式の $\mathcal{L}^2$ 内積をとり，$\Delta p\to 0$ とすると $\partial\omega/\partial p$ は以下のように求まる．

$$\frac{\partial\omega}{\partial p}=-\frac{q^*\cdot\dfrac{\partial S}{\partial p}q}{q^*\cdot\dfrac{\partial S}{\partial \omega}q} \tag{15}$$

なお，境界積分方程式 (4) で $\alpha=0$ とした場合は $q^*=\overline{q}$(q の複素共役) となり，q^* は計算する必要はない．また，固有値計算においては見かけの固有値を避けるために Burton-Miller の式 (4) を用いるが，上記の感度計算においては得られた固有値の中から真のもののみを選択すればよいので $\alpha=0$ とした式を考えれば十分である．

式 (15) 中の作用素 $\partial S/\partial p$ は式 (7) を直接微分して以下のように計算できる (数学的正当化は例えば [16] を参照)

$$\frac{\partial S}{\partial p}q=\int_0^{2\pi}\left\{-\nabla_{X'}G(\boldsymbol{\xi}(\tau),\boldsymbol{\xi}(\theta))\cdot\left(\frac{\partial\boldsymbol{\xi}(\tau)}{\partial p}-\frac{\partial\boldsymbol{\xi}(\theta)}{\partial p}\right)J(\theta)+G(\boldsymbol{\xi}(\tau),\boldsymbol{\xi}(\theta))\frac{\partial J(\theta)}{\partial p}\right\}q(\theta)\,d\theta \tag{16}$$

同様に，作用素 $\partial S/\partial\omega$ は以下のように与えられる．

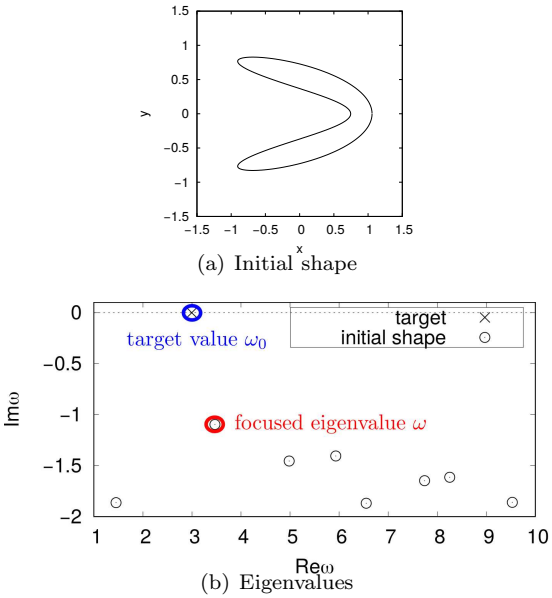
$$\frac{\partial S}{\partial\omega}q=\int_0^{2\pi}\frac{\partial G(\boldsymbol{\xi}(\tau),\boldsymbol{\xi}(\theta))}{\partial\omega}J(\theta)q(\theta)\,d\theta$$

本論文における勾配法では，以上のように直接微分法で求めた固有値の感度を用いて最適解の候補を更新する．一般に，直接微分法による感度計算では式 (16) の計算をすべての設計変数 p に対して行うため，計算コストが高くなり不利となるおそれがある．ただし，式 (16) の形からわかるように，設計変数に依存するベクトルに乗じられる核関数はどの設計変数による微分を考えているかに依らず，共通の係数行列と設計変数個のベクトルとの積になる．したがって，本論文では実装には至らなかったが高速直接解法により効率よく計算ができると期待される．さらに，本論文で利用する Nyström 法は他の離散化方法よりも比較的少ない離散化要素数 (積分点数 N) で十分に精度良く計算が可能であると期待されるため，計算コストは大きな問題とならないと考えられる．

以上の最適化法により最適化問題を解く．実装についていくつか付記する．本論文では CMA-ES の実装として libcmaes[17] を用いる．また，勾配法としてはリスタート付 Nesterov の加速最急降下法 [18, 19] を用い，各最適化ステップにおけるステップサイズは Armijo の基準 [20] を用いて直線探索で決定する．

4. 数値計算例

具体的な問題設定として，Fig. 1 (a) の持つ固有値 $\omega=3.4677-j1.0967$ に注目し，これを目標値 $\omega_0=2.9956-j1.1876\times10^{-3}$ へ近づける問題 (14) を考える．Fig. 1 (a) の固有値分布 [1] と，目標値 ω_0 の複素平面上での関係を Fig. 1 (b) に示した．Fig. 1 (b) 中で，注目する固有値 ω と目標値 ω_0 はそれぞれ “focused eigenvalue” および “target value” として記してある．なお，本節でこのような問題設定を行った理由については付録 A を参照されたい．以下の計算では Fourier



(a) Initial shape

(b) Eigenvalues

Fig. 1 (a): Initial shape. (b): Eigenvalues of the initial shape and the target value ω_0.

級数 (11) の最大の次数は $N_F=5$，境界積分方程式の離散化積分点数 N(式 (9)-(10) の N) を $N=500$，また SSM の閉路は前ステップで得られた固有値 (初回は初期固有値) を中心とする半径 0.1 の円とした．このとき SSM で固有値を探すための閉曲線は小さいため，SSM の周回積分の積分点数は 8 点とする台形公式で計算した．また，最適化の終了条件は目的関数が一定値以下になる場合 (勾配法では目的関数値が 10^{-6} 以下，CMA-ES では個体数に関係なく $|\omega-\omega_0|$ が閾値 10^{-6} 以下になる設計変数の組が一つでも見つかる場合) または，目的関数の計算回数が一定回数 (勾配法は各ステップの直線探索が終了した時点で 2000 回，CMA-ES では個体数に関係なく 4000 回) を超えた場合とした．なお，付録 B に示すように上述の閾値 $=10^{-6}$ までの収束は上述の計算条件における Nyström 法の精度から必ずしも保証はされないが，初期形状から期待される精度を基準として，今回はこのように設定した．詳細は付録 B を参照されたい．また，目的関数の計算のために必要な固有値は SSM により計算され，そのため複素平面上の複数点個の積分点を波数とする境界積分方程式を解くことを要するため，目的関数の計算コストが高く占める．そこで，ここでは解の更新 (ステップ) 回数ではなく目的関数の評価回数に注目している．すなわち，直線探索でステップサイズを決定するまでや，CMA-ES の各世代の全ての個体の目的関数値を求めるのに必要な目的関数の評価回数を考える．以下では，最適化のステップと区別して，目的関

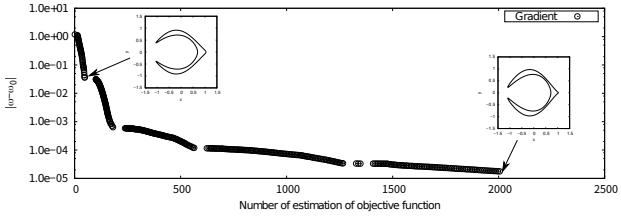
数の計算を行うことを「試行 (try)」と呼ぶことにする．

計算には京都大学大型計算機システム B(CPU: Intel Xeon Broadwell(2.1GHz)) を使用し，目的関数の計算を行うプログラムは Fortran90 により作成し，SSM による固有値計算は MPI 並列化し 8 プロセス並列で実行した．また，CMA-ES の諸パラメータはステップサイズ以外は推奨値を利用した．以下の計算時間は最長で約 2 時間 20 分程度であった．ただし，今回の数値計算のために実装したコードは効率的なコードとは程遠く改良の余地は十分にある．

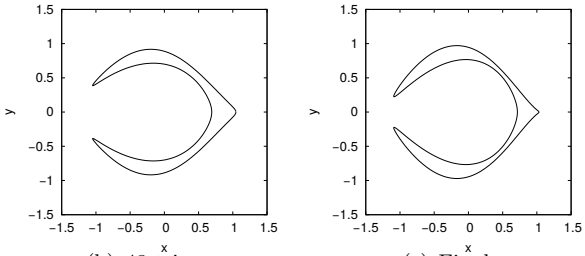
4.1. 勾配法による形状最適化

勾配法 (リスタート付 Nesterov 加速最急降下法) により無制約問題 (14) を解いたときの収束履歴を Fig. 2 (a) に示す．Fig. 2 (a) より，目的関数値は最終的に $O(10^{-5})$ まで減少しており，勾配法による最適化が成功していることがわかる．また，収束履歴ははじめの数十回の試行で急激に目的関数値が減少しその後は緩やかな減少となっているが，目的関数の急減少が終了する点 (試行 48 回の点) の形状 (Fig.2 (b)) と，最終形状 (試行 2005 回の点) の形状 (Fig.2 (c)) は似ており，早い段階で局所最適解に近い解が得られていると考えられる．Fig.2 (c) の固有値分布を Fig.3に示す[2](丸印)．Fig.3より，確かに目標値 (target) 近くに固有値が得られていることがわかる．

ただし，得られた形状には式 (13) で与えられる最大曲率が 200 を超えるような曲率が大きい部分 ($x = \pm 1$ 付近) が認められる．そこで，このような部分を避けるための幾何的制約を加えた CMA-ES による最適化を考える．



(a) Convergence history



(b) 48 tries　　(c) Final

Fig. 2　Optimization result obtained by the gradient method (no-constraint problem). (a): Convergence history (b): Shape at 48 tries. (c)Final shape.

[1,2] Fig. 1 (b) および Fig. 3の計算も SSM で求めたが，これらは円周ではなく複数の長方形経路を用いて実行し，また長方形経路の各辺上の数値積分は Gauss の数値積分公式を用いた．

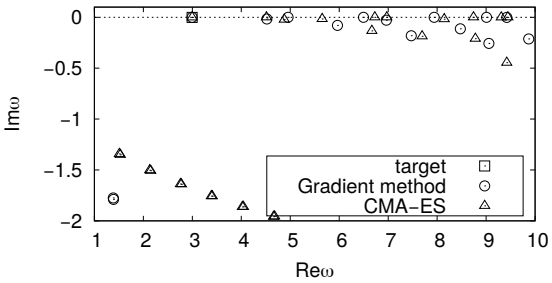


Fig. 3　Eigenvalues for Fig.2 (c) and Fig.4 (d).

4.2. CMA-ES による形状最適化

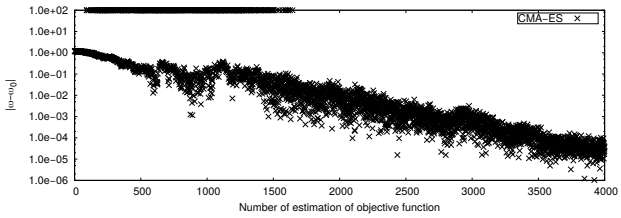
前小節と同様の最適化問題を CMA-ES により解く．ただし，ここでは Fig. 2 (b),(c) に見られた曲率が大きい部分が出現することを抑制するために，最大曲率をペナルティ項として加え，目的関数を以下のように設定した．

$$f(\boldsymbol{p}) = |\omega - \omega_0| + \beta \mathrm{Mcur}(\boldsymbol{p})$$

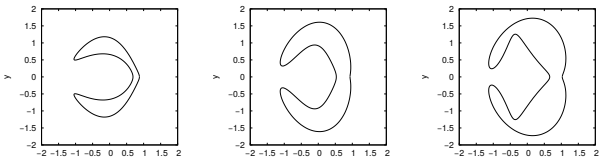
ただし，Mcur, β はそれぞれ式 (13) で与えられるその形状の最大曲率，および最大曲率にかかる係数であり，$\beta = 10^{-4}$ とした．また，自己交差をする形状が生成されることを防ぐために以下のような処理を追加した．形状の周長を l とし，ある積分点 i, j 間の周に沿った距離を $l_{i,j}$ としたとき，$0.1l < l_{i,j}$ となるような積分点における最小距離 $d_{i,j}$ が一定値以下 (本論文では $d_{i,j} \leq 0.05$ とした) となったとき，自己交差が起こっているか，形状の幅が小さすぎると判定し，その形状における目的関数値は固有値の値に関わらず $f(\boldsymbol{p}) = 100$ および $|\omega - \omega_0| = 100$ とした．さらに，最大曲率 Mcur > 100 の場合と SSM の経路を含む一辺 0.2 の正方形内に固有値が得られなかった場合も同様に固有値の値に関わらず $f(\boldsymbol{p}) = 100$ および $|\omega - \omega_0| = 100$ とした．なお，以上に示したパラメータは経験的に定めた．以上の目的関数の設定により，数値計算が破綻，もしくは精度が著しく悪化する自己交差や曲率が非常に大きな点を持つ形状の出現を抑制できることが期待される．上記の問題を CMA-ES により解いたときの $|\omega - \omega_0|$ の収束履歴を Fig.4 (a)，$|\omega - \omega_0|$ の値が初めて 10^{-1} を切った形状，初めて 10^{-2} を切った形状および最も小さくなったときの形状 (それぞれ 549， 871 および 3922 試行) を Fig.4 (b),(c),(d) にそれぞれ示した．なお，Fig.4 (a) において値が 100 となっているのは固有値が出現しなかった場合や上記の幾何制約を満たさなかった場合である．Fig.4 (a) より $|\omega - \omega_0|$ は 10^{-6} 程度まで減少しており最適化に成功していることがわかる．また，得られた形状は勾配法の場合と比べ，曲率が大きい部分が少なく，加えた幾何的制約が有効に働いていることがわかる．Fig.4 (d) の固有値分布を Fig.3に示した (三角印)．Fig.3より，確かに目標値 (target) 近くに固有値が得られていることがわかる．

なお勾配法 (Fig. 2) および CMA-ES(Fig. 4) の実行に要した計算時間は，勾配法は約 1 時間 17 分，CMA-ES は約 2 時間 17 分であった．単純な比較は難しいが，試行回数は勾配

法が約 2005 回，CMA-ES は 4000 回であるので，勾配法の方が感度計算 (15) の実行のために多少時間を要していると考えられる．そのため，次数 N_F や積分点数 N が増えると，感度計算への高速解法の導入が重要になると考えられる．



(a) Convergence history



(b) 549 tries (c) 871 tries (d) 3922 tries

Fig. 4 Optimization result obtained by the CMA-ES (with penalty for large curvature and narrow width). (a): Convergence history, (b),(c),(d): Shape at 549, 871 and 3922 tries, respectively.

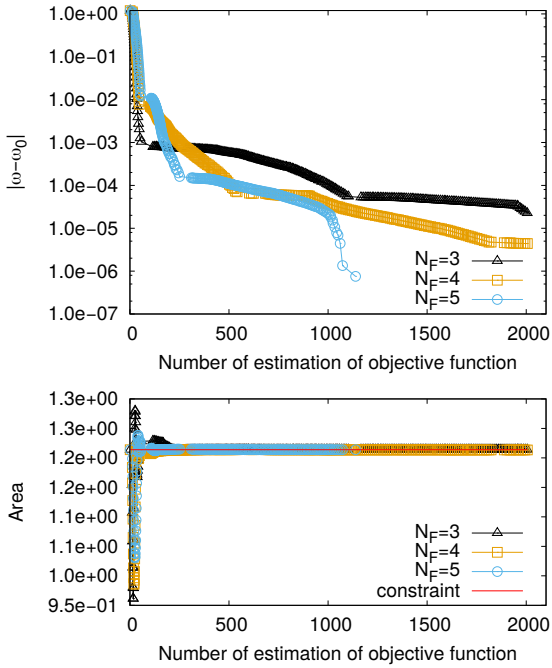
4.3. 面積制約付問題

次に，面積制約を加えた問題を解いた結果を示す．ここでは初期形状 (Fig. 1 (a)) の面積 $A_0 = 1.2138$ を保つような制約条件を考え，Lagrange の未定定数法により以下の目的関数の最小化問題を解く．

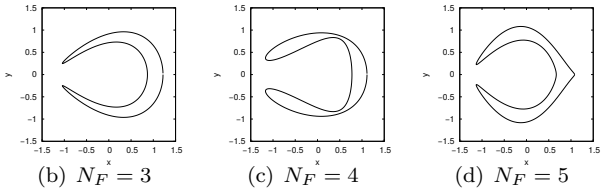
$$f(\boldsymbol{p}) = |\omega - \omega_0| + \lambda(A - A_0)^2$$

ここに，A は式 (12) で与えられる面積，また λ は Lagrange 乗数である．本論文では，各ステップにおける λ は Otomori らの論文 [21] の式 (32) と同様に指数関数を用いて与えた．以上の面積制約付問題を勾配法で解いた結果を Fig. 5に示す．Fig. 5 (a) に Fourier 級数 (11) の最大次数を $N_F = 3, 4, 5$ とした場合の $|\omega - \omega_0|$ の収束履歴 (上) と，面積 A の履歴 (下) を示している．Fig. 5 (a) より，どの次数においても最初の数十回の試行で目的関数値は急減少できており，また制約条件はいずれの場合も概ね満たされていることがわかる．各次数を比較すると，最適化初期の目的関数値の減少は N_F が小さいほうがやや速いが，全体の収束速度は N_F が大きい方が速い傾向にある．また，面積制約値からのオーバーシュートは $N_F = 5$ の場合が小さい．それぞれの次数の最終形状を Fig. 5 (b),(c),(d) に示した．

同様に，CMA-ES を用いて面積制約付問題を解いた結果を Fig.6に示した ((a) 上図 : $|\omega - \omega_0|$，(a) 下図 : 面積,(b),(c),(d): それぞれ $N_F = 3, 4, 5$ の最も $|\omega - \omega_0|$ が小さくなったときの形状)．なお，前小節と同様に面積制約に加え，幾何的制約も加えている．Fig.6 (a) より，いずれの次数も目的関数を減少させ，制約条件も概ね満たされていることがわかる．また，



(a) Convergence history



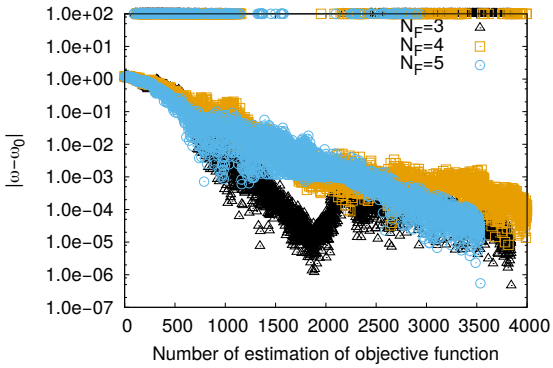
(b) $N_F = 3$ (c) $N_F = 4$ (d) $N_F = 5$

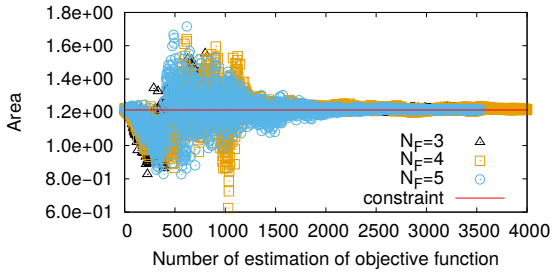
Fig. 5 Optimization result obtained by the gradient method (area constraint) (a): Convergence history (upper:$|\omega - \omega_0|$, lower:area), (b), (c), (d): Final shape for $N_F = 3, 4, 5$, respectively.

最適形状は勾配法の結果よりも丸みをおびており，最大曲率に対するペナルティが効果的に働いたと考えられる．最適化初期の収束の速さは $N_F = 3$ が最も速く，$N_F = 4, 5$ は同程度の速度である．

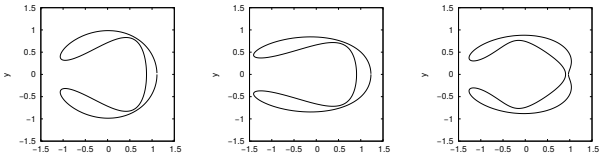
4.4. 勾配法と CMA-ES を組み合わせた形状最適化

前小節までの結果より，勾配法と CMA-ES を併用する場合は，幾何的制約を加えた少ない N_F での最適化を CMA-ES で実行したうえで，N_F を大きくした勾配法を実行すると効率的に最適化を行えると考えられる．そこで，本小節では勾配法と CMA-ES を併用した結果を示す．ここでは，Fig. 6に示した $N_F = 3$ の場合の 640，721 および 921 試行の形状 (それぞれ，$|\omega - \omega_0|$ の値が初めて $10^{-1}, 10^{-2}$ および 10^{-3} を下回る点である) よりリスタートし，$N_F = 5$ とした勾配法による最適化を行った．収束履歴 Fig.7 (a)(上 : $|\omega - \omega_0|$，下 : 面積) より，いずれからリスタートしても，勾配法による最適化初期での目的関数値は CMA-ES の傾きに比すると急激に減少している．また，面積が制約値に近づくまでの試行回数は CMA-ES よりも速いことがわかる．Fig.7 (b),(c),(d) にそれぞれリスタート=640, 721, 921 の場合の，リスタート開始時の形状 (左)，$|\omega - \omega_0|$ の急激な減少直後の形状 (真中)，





(a) Convergence history



(b) $N_F = 3$ (c) $N_F = 4$ (d) $N_F = 5$

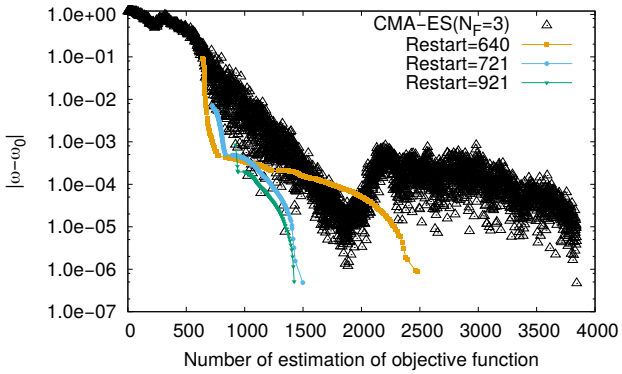
Fig. 6 Optimization result obtained by the CMA-ES (area and the geometric constraints) (a): Convergence history (upper:$|\omega - \omega_0|$, lower:area), (b), (c), (d): Shape where $|\omega - \omega_0|$ gets the smallest value during the optimization for $N_F = 3, 4, 5$, respectively.

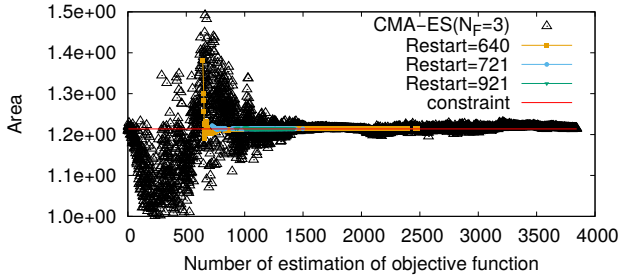
および最終形状 (右) を示した．いずれの場合も，Fig.5 (b) や Fig.5 (d) ほど曲率は大きくなく，CMA-ES における曲率の制約が効果的に働いたと考えられる．以上から，勾配法と CMA-ES を併用した場合は，CMA-ES 単体で最適化を行うよりも収束までの試行回数を減少でき，また勾配法単体で行うよりも幾何的制約がある程度入った状態で最適化を行えると考えられ，勾配法と CMA-ES の併用の有効性が確かめられた．

5. 結言

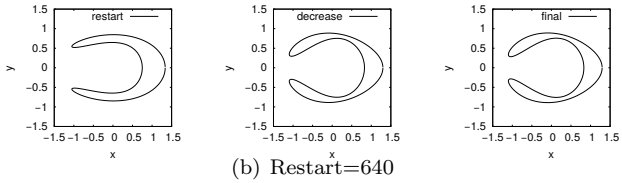
本論文では，二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 境界値問題の複素固有値を対象とした形状最適化問題を，Nyström 法により離散化された境界積分方程式法を用いて，形状の Fourier 級数表現の係数に関するパラメトリックな最適化問題へ帰着させ， CMA-ES と勾配法を用いて解く方法を提案し，数値実験によりその有効性や特性を確かめた．

今後の課題として，高速多重極法や高速直接解法を用いた諸計算の高速化，より効果的な CMA-ES と勾配法の併用法および幾何制約の導入法の検討，より複雑な問題設定での検討などが挙げられる．また，本論文では全空間の外部 Dirichlet

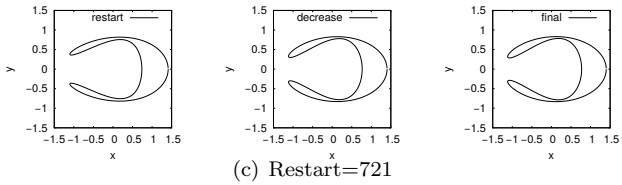




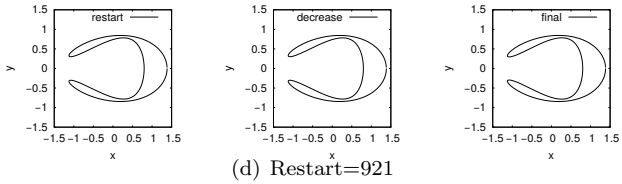
(a) Convergence history



(b) Restart=640



(c) Restart=721



(d) Restart=921

Fig. 7 Combined use of the CMA-ES ($N_F = 3$) and gradient method ($N_F = 5$). (a): Convergence history (upper:$|\omega - \omega_0|$, lower:area). Three figures in (b), (c), (d) show the restart, in-progress and the final shapes for Restart=640, 721, and 921, respectively: The left, middle and right figures show shapes at the restart tries ("restart"), shapes at the tries just after sudden decrease of $|\omega - \omega_0|$ becomes flat ("decrease"), and shapes at the final tries ("final"), respectively.

問題を取り扱ったが，他の境界条件の場合や，周期領域や導波路の問題に対する拡張を行うことも今後の課題である．

付録 A 4 節の問題設定について

4 節で考えた問題設定について説明する．4 節の目標値 $\omega_0 = 2.9956 - j1.1876 \times 10^{-3}$ は式 (11) で $N_F = 5$ 次まで利用する Fourier 級数で媒介変数表示される閉曲線 Fig. 8が持つ固有値の一つであり，また初期形状 Fig. 1 (a) は Fig. 8の形状表現の Fourier 級数を 2 次で打ち切って得られるものである．以下の理由でこのような問題設定を行った．最小化問題 (14) に対し目的関数値をゼロとする解の存在は明らかではなく，最適化計算が収束しなかったりやや大きい値で目的関数が停滞した場合に問題設定に無理があったのか，最適化計算の問題であるか判別ができないおそれがある．そこで，問題の可解性の不明瞭さを緩和して最適化が成功しているか否か可能な限り判断できるように，初期形状と大きさや形状が大きくかけ離れていない形状 (Fig. 8) が持つ固有値 $\omega_0 = 2.9956 - j1.1876 \times 10^{-3}$ を目標値とする問題設定を考えた (なお，CMA-ES による幾何制約として 4 節では最大曲率が 100 を超えない条件を与えたが，Fig.8の最大曲率は約 89.2 であることから，無理な幾何制約設定ではないと考えられる．)．ただし，最適化問題自体は式 (14) で定義される「ある固有値を目標値へ接近させる」ものであり「Fig. 8を同定する」ものではないため，最適化の結果は必ずしも Fig. 8と一致したり似た形になるとは限らないことに注意されたい．実際，4 節の数値計算結果に示すようにこの最適化問題の目的関数を小さくする解は複数得られ，また $N_F = 5$ に限らず，$N_F = 3, 4$ としても得られる．

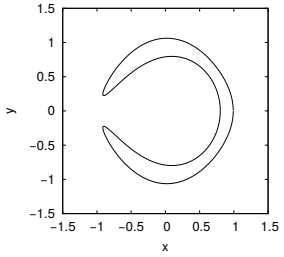


Fig. 8 A shape which has the target value $\omega_0 = 2.9956 - j1.1876 \times 10^{-3}$ as an eigenvalue.

付録 B Nyström 法の精度

本節では Nyström 法で離散化された境界積分方程式の精度を確かめる．ただし，一般形状に対する二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 問題 (1)-(3) の解と固有値の解析解を得ることは困難である．そこで，ここでは静的問題 (二次元 Laplace 方程式) の Dirichlet 問題の境界積分方程式を考え精度を評価する．本論文では低周波域の計算を行っており，複雑な境界形状ではその境界上の特異積分の誤差が計算全体の精度へ大きく影響すると考えられ，静的問題に対する計算精度をある程度の精度評価指標として用いることができると考えられる．未知関数を q とする以下の境界積分方程式を考える．

$$(S_0 q)(\boldsymbol{X}) = \left(\left(\frac{I}{2} + D_0 \right) u_0 \right)(\boldsymbol{X}) \tag{17}$$

ここに，S_0，D_0 はそれぞれ二次元 Laplace 方程式の基本解 $G_0(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}') = -\log|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}'|/(2\pi)$ を用いて以下のように定義される一重層ポテンシャル，二重層ポテンシャルである．

$$(S_0 q)(\boldsymbol{X}) := \int_{\partial\Omega} G_0(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}') q(\boldsymbol{X}')\, ds_{X'} \tag{18}$$

$$(D_0 u)(\boldsymbol{X}) := \int_{\partial\Omega} \frac{\partial G_0(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}')}{\partial n_{X'}} u(\boldsymbol{X}')\, ds_{X'} \tag{19}$$

また，u_0 は二次元 Laplace 方程式の解であり，ここでは

$$u_0(\boldsymbol{X}) = x^2 - y^2$$

とする ($\boldsymbol{X} = (x, y)$)．式 (17) は $u(\boldsymbol{X}) = x^2 - y^2$ を解とする二次元 Laplace 方程式の内部 Dirichlet 問題 (境界値 u_0) の境界積分方程式であるから，式 (17) の未知関数 q の解析解は $q = \partial u_0/\partial n_X$ で与えられ，以下で定義される，解析解を基準とした数値解の相対誤差を求めることができる．

$$\text{error} := \sqrt{\frac{\int_{\partial\Omega} |q^{\text{nume}}(\boldsymbol{X}) - q^{\text{ana}}(\boldsymbol{X})|^2\, ds_X}{\int_{\partial\Omega} |q^{\text{ana}}(\boldsymbol{X})|^2\, ds_X}} \tag{20}$$

ここに q^{nume}，q^{ana} はそれぞれ数値解および解析解である．式 (20) をある形状における Nyström 境界積分方程式法の精度評価の指標とする．Table 1に 4 節で示した各形状に対して積分点数 $N = 500$ とした Nyström 法で式 (17) を解いたときの式 (20) で与えられる誤差を示した (ただし，Fig.7についてはそれぞれ final のものを示した)．Table.1より，最悪で $O(10^{-3})$ の誤差であり，したがって特異積分はいずれの形状でも $O(10^{-3})$ までの精度で実行できていると考えられる．4

Table 1 Error defined in eq.(20) for each shape. For Figs 7, we show error for the “final” shapes in (b), (c), (d).

shape	error	shape	error
Fig.1(a)	0.148E-08	Fig.6(b)	0.131E-03
Fig.2(c)	0.406E-04	Fig.6(c)	0.329E-04
Fig.4(d)	0.545E-08	Fig.6(d)	0.134E-05
Fig.5(b)	0.199E-04	Fig.7(b)	0.120E-07
Fig.5(c)	0.293E-06	Fig.7(c)	0.468E-02
Fig.5(d)	0.205E-04	Fig.7(d)	0.297E-03

節に示した最適化計算では，収束の閾値を 10^{-6} と設定したが，Table 1に示したように初期形状は $O(10^{-9})$ 程度の誤差と考えられるものの，得られた最適形状によっては $O(10^{-3})$ 程度の場合もあり，また数値的に求めた固有値の値には SSM の計算誤差も加わるため，4 節の閾値 10^{-6} までの収束は今回の境界積分方程式の精度の観点から必ずしも保証されると言えない．しかしながら最適化後の誤差指標を事前に予測す

ることは容易ではなく，初期形状の誤差指標を基準として今回は上述のように閾値を 10^{-6} として設定した．最適化の各ステップにおける形状に対して精度を一定に保つためには，今回は実装に至らなかったが最適化の各ステップで精度指標を基づき積分点数 N の変更することや，あるいは精度指標 (20) そのものを CMA-ES における制約条件やペナルティ項として導入すればよいと考えられる．今回は $N_F = 5$ までを取り扱ったが，より高次の N_F ではより複雑な形状が出現しやすいと考えられるため，形状に応じた積分点数 N の調整が高次の N_F ではより重要になると考えられる．

謝辞

本研究は JSPS 科研費 19K20285 の助成を受けました．また，二名の校閲者より有益なご意見を頂きました．ここに記して謝意を表します．

参考文献

(1) J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, and K. Kimura, A numerical method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals, JSIAM Letters, **1** (2009), pp. 52–55.

(2) N. Hansen and A. Ostermeier, Adapting arbitrary normal mutation distributions in evolution strategies: The covariance matrix adaptation, in Proceedings of IEEE international conference on evolutionary computation, IEEE, 1996, pp. 312–317.

(3) N. Hansen, The CMA evolution strategy: A tutorial, arXiv preprint arXiv:1604.00772, (2016).

(4) 松島慶, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎, 境界要素法と櫻井 · 杉浦法を用いた開放型共振器のトポロジー最適化, 計算数理工学論文集, **19** (2019), pp. 49–54.

(5) 松島慶, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎, 散乱行列と境界要素法に基づく周期散乱問題におけるトポロジー最適化, in 日本応用数理学会年会予稿集, 2020, pp. 421–422.

(6) A. Kleefeld, Shape optimization for interior Neumann and transmission eigenvalues, in Integral Methods in Science and Engineering, Birkhäuser, Cham, 2019, pp. 185–196.

(7) D. Abele and A. Kleefeld, New Numerical Results for the Optimization of Neumann Eigenvalues, in Computational and Analytic Methods in Science and Engineering, Birkhäuser, Cham, 2020, pp. 1–20.

(8) A. J. Burton and G. F. Miller, The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems, Proceedings of the Royal Society of London. A., **323** (1971), pp. 201–210.

(9) 小林昭一 (編), 波動解析と境界要素法, 京都大学学術出版会, 2000.

(10) C.-J. Zheng, H.-F. Gao, L. Du, H.-B. Chen, and C. Zhang, An accurate and efficient acoustic eigensolver based on a fast multipole BEM and a contour integral method, Journal of Computational Physics, **305** (2016), pp. 677–699.

(11) 三澤亮太, 西村直志, 見かけの複素固有値の分布に基づいた 2 次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題における単一積分方程式法の考察, 計算数理工学論文集, **16** (2016), pp. 73–78.

(12) S. Hao, A. H. Barnett, P.-G. Martinsson, and P. Young, High-order accurate methods for Nyström discretization of integral equations on smooth curves in the plane, Advances in Computational Mathematics, **40** (2014), pp. 245–272.

(13) B. K. Alpert, Hybrid Gauss-trapezoidal quadrature rules, SIAM Journal on Scientific Computing, **20** (1999), pp. 1551–1584.

(14) 飯盛浩司, 松島慶, 鶴田健二, 高橋徹, 松本敏郎, 共分散行列適応進化戦略と S 行列を用いたフォノニック構造のパラメータ最適化, 計算数理工学論文集, **20** (2020), pp. 65–73.

(15) C.-Y. Kao and F. Santosa, Maximization of the quality factor of an optical resonator, Wave motion, **45** (2008), pp. 412–427.

(16) M. Bonnet, Differentiability of strongly singular and hypersingular boundary integral formulations with respect to boundary perturbations, Computational mechanics, **19** (1997), pp. 240–246.

(17) `https://github.com/beniz/libcmaes`.

(18) Y. Nesterov, A method of solving a convex programming problem with convergence rate $O(1/k^2)$, Soviet Mathematics Doklady, **27** (1983), pp. 372–376.

(19) B. O'Donoghue and E. Candes, Adaptive restart for accelerated gradient schemes, Foundations of computational mathematics, **15** (2015), pp. 715–732.

(20) L. Armijo, Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives, Pacific Journal of mathematics, **16** (1966), pp. 1–3.

(21) M. Otomori, T. Yamada, K. Izui, and S. Nishiwaki, Matlab code for a level set-based topology optimization method using a reaction diffusion equation, Structural and Multidisciplinary Optimization, **51** (2015), pp. 1159–1172.

計算数理工学論文集 Vol. 10 (2021 年 12 月), 論文 No. 14-211218 JASCOME

演算子積分時間領域境界要素法を用いた様々な異方性弾性体中の空洞による3次元弾性波動散乱解析

Analysis of 3-D Elastic Wave Scattering by a Cavity in Various Anisotropic Media Using Convolution Quadrature Time-domain Boundary Element Method

斎藤　隆泰 [1)]，古川　陽 [2)]，廣瀬　壮一 [3)]

Takahiro SAITOH, Akira FURUKAWA and Sohichi HIROSE

1) 群馬大学大学院理工学府環境創生部門　准教授 (〒 376-8515 群馬県桐生市天神町 1-5-1, E-mail:t-saitoh@gunma-u.ac.jp)
2) 北海道大学工学研究院土木工学部門　准教授 (〒 060-8628 札幌市北区北 13 条西 8 丁目, E-mail:afurukawa@eng.hokudai.ac.jp)
3) 東京工業大学環境・社会理工学院土木工学系　教授 (〒 152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail:shirose@cv.titech.ac.jp)

This paper presents a convolution quadrature time-domain boundary element method (CQBEM) for general three-dimensional anisotropic elastodynamics. A convolution quadrature method (CQM), first proposed by Lubich, is applied to the convolutions of time-domain boundary integral equations for general three-dimensional anisotropic elastodynamics. Laplace-domain fundamental solutions are utilized for this proposed time-domain BEM formulation. Elastic wave scattering by a cavity in various anisotropic solids is analyzed using a hybrid parallelization with MPI and OpenMP to validate the proposed CQBEM.

Key Words: Time-domain BEM, General anisotropy, Convolution quadrature method (CQM), Elastic waves

1. はじめに

本論文では, 一般の 3 次元異方性弾性波動問題に対する演算子積分時間領域境界要素法 (CQBEM: Convolution Quadrature Boundary Element Method)，すなわち，どのような異方性問題に対しても適用可能な CQBEM を開発し，具体的に様々な異方性弾性波動場の可視化結果を示すことで，本手法の妥当性について検討する．CQBEM は，演算子積分法 (CQM: Convolution Quadrature Method)[(1)(2)] を時間領域境界要素法の時間方向の離散化に適用したものであり，Schanz により提案された [(3)]．その後，福井ら [(4)]，Saitoh ら [(5)] により，高速多重極法 [(6)(7)] を適用した高速化等がなされ，工学の様々な問題へ適用されてきた [(8)]．CQBEM は，従来の時間領域境界要素法に比べて，時間増分が小さい場合でも比較的安定に計算を行うことができるだけでなく，分散性 (周波数が変化すると波動速度も変化する) 波動問題のように，時間領域基本解を閉じた形で求めることが困難な問題にも有効である．また，時間領域基本解が複雑な問題に対して，比較的容易に求解のスキームを実行することができる．そのため，分散性波動問題ではないものの，基本解が複雑で，波動速度が方向に依存する異方性弾性波動に対する時間領域の問題にも CQBEM は適用されてきた．例えば，Zhang[(9)] は，純面外異方性弾性波動問題を CQBEM を用いて解いている．古川ら [(10)] は，純面内異方性弾性波動問題を CQBEM を用いて解いている．斎藤ら [(11)]，Furukawa ら [(12)] は，一般の 3 次元異方性問題に対する CQBEM の定式化を示している．

もちろん，従来の時間領域境界要素法を用いた異方性弾性波動解析も行われている．それらの多くは Wang と Achenbach[(13)] により導かれた基本解を用いており，例えば，廣瀬ら [(14)] は，純面内問題に対して，様々な異方性材料中の欠陥による散乱問題を解いている．一方，Tan ら [(15)] は，純面内問題に対して，き裂による散乱問題を解いている．また，一般の 3 次元異方性弾性波動問題へと拡張し，その定式化の一部についても示している [(16)]．さらに志戸岡ら [(17)] は，一般の 3 次元異方性弾性波動問題に対して高速多重極法を適用した場合の定式化を示している．このように，時間領域境界要素法を用いた異方性弾性波動解析は，従来法, CQBEM の両者でいくつかの解析例が見られるものの，特に一般の 3 次元異方性弾性波動問題に対して，具体的に弾性波動場を解析した例は，著者らの知る限り例はなく，定式化までに留まっている．実際，計算負荷が問題となり，例えば文献 [(11)(12)(16)(17)] においても，一般の異方性弾性波動問題に対する基本解に，等方性の弾性定数を与えて境界データの計算精度を確認する程度に留まっている．

2021 年 10 月 18 日受付，2021 年 11 月 21 日受理

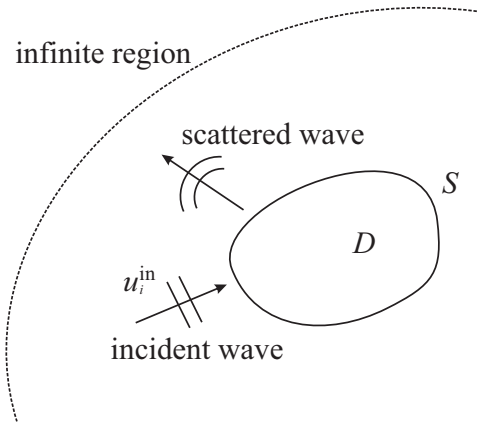


Fig.1　Elastic wave scattering in anisotropic media.

そこで，本研究では，前論文 [11] を拡張し，具体的に一般の 3 次元異方性弾性波動問題を CQBEM により解析する．その際，具体的にいくつかの異方性材料に対する弾性定数を与え，一般の異方性弾性波動問題を解析できていることを確認する．また，計算負荷の軽減策として，MPI と OpenMP を用いたハイブリッド並列化を施す [18]．以下では，一般の 3 次元異方性弾性波動問題に対する基礎式について簡単に説明した後，時間領域境界積分方程式や，CQBEM について簡単に説明する．最後に，3 次元解析での群速度曲線について説明すると共に，実際の数値解析例を示すことで，解析手法の妥当性等について確認する．

2. 解くべき問題と異方性弾性波動問題の基礎式

以下では，直交直線座標系に関する座標成分を $x_i (i = 1,2,3)$ で表し，アルファベットの右下添え字は総和規約に従うとする．また，変位や表面力といった他の物理量に対しても同様の表記を用いることとする．

さて，Fig.1 のような 3 次元で均質な無限異方性弾性体領域における入射波による散乱問題について考える．入射波 u_i^{in} が空洞 D の表面 S に到達するまで，境界上の変位は静止過去の条件を満足するものとする．

3 次元異方性弾性波動問題において，変位 u_i および応力 σ_{ij} は，簡単のため，物体力を無視すれば，それぞれ次の運動方程式，応力-変位の関係式を満足する．

$$C_{ijkl}u_{l,kj} = \rho\ddot{u}_i \tag{1}$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}u_{k,l} \tag{2}$$

ここで，$(\,)_{,j}$ および $\dot{(\,)}$ はそれぞれ空間 x_j および時間 t に関する微分を表す．また，ρ は異方性弾性体の密度であり，C_{ijkl} は弾性定数を表す．なお，異方性弾性波動問題の場合は，弾性定数 C_{ijkl} を直接用いるのではなく，Voigt 記号による弾性定数 $C_{\alpha\beta}(\alpha,\beta = 1,\ldots,6)$ を使った表記法がよく用いられる．C_{ijkl} と $C_{\alpha\beta}$ の変換関係は次の式で表される [19]．

$$\alpha = \begin{cases} i & : (i = j) \\ 9-(i+j) & : (i \neq j) \end{cases} \tag{3}$$

$$\beta = \begin{cases} k & : (k = l) \\ 9-(k+l) & : (k \neq l) \end{cases} \tag{4}$$

本論文においては，総和規約等を適用する CQBEM の定式化中では C_{ijkl}，その他の箇所では $C_{\alpha\beta}$ と弾性定数の表記を使い分けることとする．

3. 解くべき問題に対する演算子積分時間領域境界要素法

3.1. 時間領域境界積分方程式

2 節で簡単に説明した空洞による散乱問題を時間領域境界要素法で解くことを考える．境界 S 上および 3 次元無限異方性弾性体中の変位 u_i は，空洞における表面力フリーの境界条件を考慮すれば，次の時間領域境界積分方程式を解くことで求まる．

$$\bar{C}_{ij}u_j(\boldsymbol{x},t) = u_i^{\text{in}}(\boldsymbol{x},t) - \int_S T_{ij}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t) * u_j(\boldsymbol{y},t)dS_y \tag{5}$$

ここで，$*$ は時間に関する畳込み積分，$\bar{C}_{ij}$ は境界形状に依存するいわゆる自由項を表す．また，$T_{ij}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t)$ は 3 次元異方性弾性波動問題における二重層核を表す．二重層核の計算に必要な 3 次元異方性弾性波動問題における時間領域基本解は，Wang と Achenbach により単位球面上の積分を含んだ形で最初に提案され [13]，他の論文において，その数値的な取扱いについて議論がなされている [16]．しかしながら，後に説明するように，CQBEM では時間領域の解を求めるにも関わらず，直接に時間領域基本解を用いないため，ここでは時間領域基本解の詳細については省略する．通常，式 (5) の時間領域境界積分方程式は，時間と空間に関して適切な離散化を施し，逐次的に第一ステップから解を求めていくことが行われるが，以下では，式 (5) の畳込み積分の評価に，次節で述べる Lubich により提案された CQM を用いる．

3.2. CQM を用いた離散化

ここでは，CQM を用いて式 (5) を離散化する．詳細は文献 [11][12] に譲り，定式化のポイントについて簡単にまとめておく．Lubich の CQM は，次の畳込み積分

$$f * g(t) = \int_0^t f(t-\tau)g(\tau)d\tau, \quad t \geq 0 \tag{6}$$

を，関数 f のラプラス変換を用いて離散化近似する方法である．すなわち，時間 t を時間増分 Δt を用いて N ステップに分割することを考えれば，畳込み積分は CQM により次のように近似することができる．

$$f * g(n\triangle t) \simeq \sum_{j=0}^{n} \omega_{n-j}(\triangle t)g(j\triangle t), \quad (n = 0,1,\ldots,N) \tag{7}$$

ただし，$\omega_j(\triangle t)$ は重み関数であり，f のラプラス変換 $\hat{f}$ により次のように表される．

$$\omega_n(\triangle t) \simeq \frac{\mathcal{R}^{-n}}{L}\sum_{l=0}^{L-1} \hat{f}\left(\frac{\delta(\zeta_l)}{\triangle t}\right) \mathrm{e}^{\frac{-2\pi i n l}{L}} \tag{8}$$

ここで，$\mathcal{R}, L, \delta$ は CQM のパラメータ [1][2] である．ただし，$\mathcal{R}$ は目標とする精度 ϵ によって決定されるパラメータであり，

$$\mathcal{R} = \epsilon^{\frac{1}{2L}} \tag{9}$$

により決定される．また，δ は，BDF1 や BDF2 といった差分法により計算される [1][2]．

今，式 (5) を区分一定要素で離散化することを考える．すなわち，境界 S を M 個の境界要素で離散化し，選点をそれぞれの境界要素中央に取り，式 (5) の畳込み積分に式 (7) の CQM を用いれば，$\boldsymbol{x} \in S$ における第 n ステップに関して，次の離散化された時間領域境界積分方程式を得ることができる．

$$\frac{1}{2}u_i(\boldsymbol{x}, n\Delta t) = u_i^{\text{in}}(\boldsymbol{x}, n\Delta t) - \sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{k=1}^{n} B_{ij}^{n-k}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^{\alpha})u_j^{\alpha}(k\Delta t) \tag{10}$$

ここで，右上添字 α は，選点 $\boldsymbol{y}$ に関する指標を表す．また，B_{ij}^{m} は二重層核に関する影響関数であり，次のように表される．

$$B_{ij}^{m}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \frac{\mathcal{R}^{-m}}{L}\sum_{l=0}^{L-1}\left[\int_S \hat{T}_{ij}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s_l)dS_y\right] e^{-\frac{2\pi iml}{L}} \tag{11}$$

ただし，s_l は $s_l = \delta(\zeta_l)/\Delta t$ で定義される．また，$\hat{T}_{ij}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s)$ は，ラプラス変換域における 3 次元異方性弾性波動問題における二重層核である．式 (11) における影響関数の積分核は，式 (7)，(8) の CQM を用いたことにより，時間領域ではなくラプラス変換域の積分核であることに注意する．式 (10) を第 n ステップにて, 境界未知量を左辺に, 境界既知量を右辺に移行すれば, 次の式を得る.

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}u_i(\boldsymbol{x}, n\triangle t) + \sum_{\alpha=1}^{M} B_{ij}^{0}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^{\alpha})u_j^{\alpha}(n\triangle t)\\ =&u_i^{\text{in}}(\boldsymbol{x}, n\triangle t) - \sum_{\alpha=1}^{M}\sum_{k=1}^{n-1} B_{ij}^{n-k}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^{\alpha})u_j^{\alpha}(k\triangle t)\end{aligned} \tag{12}$$

式 (12) に着目すると，右辺は第 n ステップ以前の境界既知量のみで構成されることから，初期条件により，第一ステップから順番に，最終の第 N ステップまで逐次的に解を求めることが可能である．以上より，CQM を用いた場合の時間領域境界積分方程式の離散化は示された．

4. 数値計算に対するいくつかの補足

本節では，3 節で示した CQBEM の数値計算に対するいくつかの補足事項についてまとめておく．

4.1. 単位球面に関する積分

式 (11) における二重層核 $\hat{T}_{ij}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s)$ は，対応する基本解 $\hat{U}_{ij}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s)$ により計算される．文献 [13][16] 等で示されているように，時間領域や周波数領域における 3 次元異方性弾性波動問題に対する基本解は，一般に単位球面に関する積分を含む．本研究では CQBEM で解析するため，ラプラス変換領域に関する基本解を用いるが，この傾向は同様である．ラプラス変換領域における 3 次元異方性弾性波動問題の基本解 $\hat{U}_{ij}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s)$ は次の式で与えられる．

$$\hat{U}_{ij}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s) = \hat{U}_{ij}^{S}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + \hat{U}_{ij}^{D}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s) \tag{13}$$

ただし，$\hat{U}_{ij}^{S}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ は基本解の静的部分，$\hat{U}_{ij}^{D}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s)$ は動的部分であり，

$$\hat{U}_{ij}^{S}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \frac{1}{8\pi^2 r}\int_{|\boldsymbol{n}|=1} \Gamma_{ij}^{-1}(\boldsymbol{n})dS(\boldsymbol{n}) \tag{14}$$

$$\hat{U}_{ij}^{D}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, s) = -\frac{1}{8\pi^2}\int_{|\boldsymbol{n}|=1}\sum_{m=1}^{3}\frac{sE_{im}E_{jm}}{\rho c_m^2}e^{-s|\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})|}dS(\boldsymbol{n}),$$
$$\text{ただし}, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{x} > 0 \tag{15}$$

で与えられる．ここで r は $r = |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|, \boldsymbol{n}$ は単位球面を表す単位ベクトル，c_m は 3 次元異方性弾性体中を伝搬する弾性波動の位相速度，Γ_{ij} は弾性定数 C_{ijkl} から成る Christoffel テンソル，E_{im}，λ_m は，それぞれ Christoffel 方程式から決定される固有値と固有ベクトルを表している [19]．単位球面に関する積分は基本的に数値的に評価する必要がある．本研究では，単位球面に関する被積分関数 f を次のように数値積分で評価した．

$$\begin{aligned}\int_{|\boldsymbol{n}|=1} f(\boldsymbol{n})dS(\boldsymbol{n}) &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f(\theta, \phi)\sin\theta d\theta d\phi\\ &= \int_0^{2\pi}\int_{-1}^{1} f(\cos^{-1}(x), \phi)dxd\phi\\ &= \sum_{I=0}^{2p}\sum_{J=1}^{p+1}\eta_I^p f(\phi_I^p, \lambda_J^p)\omega_J^p\end{aligned} \tag{16}$$

ただし, θ, ϕ はそれぞれ単位球面上のベクトル $\boldsymbol{n}$ の球座標系における天頂角と方位角である．また，ω_J^p は $p+1$ 点のガウスの数値積分における J 番目の積分点の重み，λ_J^p は J 番目の積分点の座標成分に関する逆余弦，$\phi_I = 2\pi I/(2p+1)$, η_I^p は $\eta_I^p = 2\pi/(2p+1)$ である．すなわち，被積分関数 $f(\boldsymbol{n})$ の単位球面上の積分は，θ 方向に対してはガウスの数値積分を，ϕ 方向に対しては台形公式を用いて評価した．

4.2. 並列化

異方性弾性波動問題では，4.1 節で示したような単位球面に関する数値積分を実行した後，通常の境界要素法と同様の空間に関する積分を実行する必要がある．さらに，式 (11) で示すように，これら 2 つの積分の外には，CQM のパラメータ L に関する総和を含む．そのため，計算負荷はかなり大きなものとなる．そこで，MPI と OpenMP を用いたハイブリッド並列化を施すことで計算負荷を軽減させる．Fig.2 は，本研究で用いた MPI-OpenMP ハイブリッド並列化の概略図を示している．Fig.2 左側は各 m に対する式 (11) の影響関数による行列を，右側は入射波ベクトルを示している．要素数 M を使用する MPI プロセス数 N_p で割り，各 MPI プロセスが担当する境界要素行列の計算担当数を決める．この担当数を $k = M/N_p$ とする．ただし，各要素同士で計算される小行列は 3×3 の成分を持つため，実質，各プロセスの担当行列のサイズは，各 m 当たり，$3k \times 3M$ となることに注意する．また，通常 MPI では，プロセス番号をゼロから数える

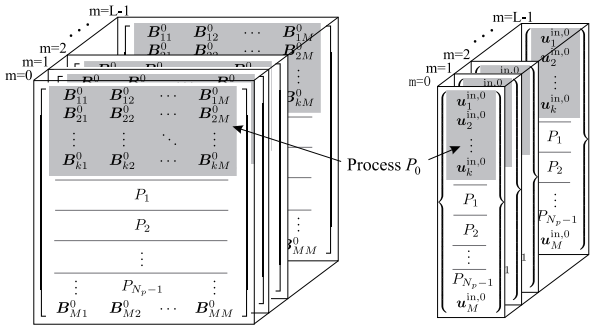


Fig.2　A schematic of parallelization used in this study.

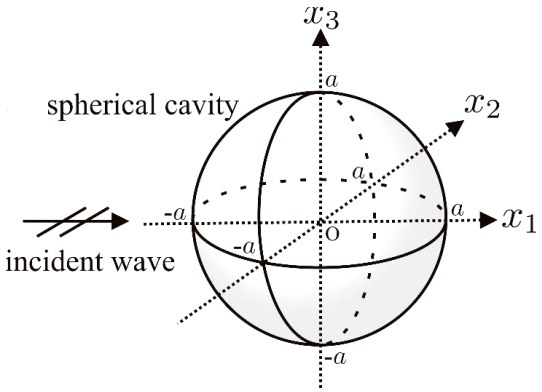


Fig. 3　Elastic wave scattering by a cavity with radius a in an anisotropic medium.

ため，各プロセスを表わす記号 P は $P=0,\ldots,P_{N_P-1}$ としている．すなわち，Fig.2 に示すように，行割りにより，各 m に対する境界要素行列は，各プロセスにより等分割される．入射波ベクトルに対しても同様である．実際の計算では，式 (11) におけるカッコ内 [ ] の計算をした後，FFT を用いて $m=0,\ldots,L-1$ に対する境界要素行列の成分を一度に求めることができる [18]．すなわち，Fig.2 左側の奥行方向の計算に対応する．なお，このカッコ内 [ ] の計算に対しては，OpneMP を用いて計算を低減させた．

5. 数値解析例

以下，数値解析例を示す．解析対象として，Fig.3 のような半径 a の球状の空洞による入射平面波の散乱問題を考える．なお，解析には京都大学学術情報メディアセンターにおける Camphor2(System A) の CRAY XC40[20] を用いた．1 ノードあたりのプロセッサは Intel Xeon Phi KNL(Xeon Phi CPU 7250) であり，プロセッサ数 (コア数) は 68，メモリーは 96GB である．計算では 1 つの MPI プロセスを，1 ノードに割り当てることとする．解析には 4.2 節で示したハイブリッド並列化を用いた．用いた MPI プロセス数は $N_p=8$ であり，1 つのプロセス当たり OpenMP による 68 並列を施した．空間の離散化には三角形一定要素を用い，要素数 $M=800$ とした．CQM のパラメータである L は，全ての計算において $L=N$ とし，総時間ステップ数 N と等しくとることで，式 (11) の計算に FFT を施し，計算を高速化している．一方，式 (9) における

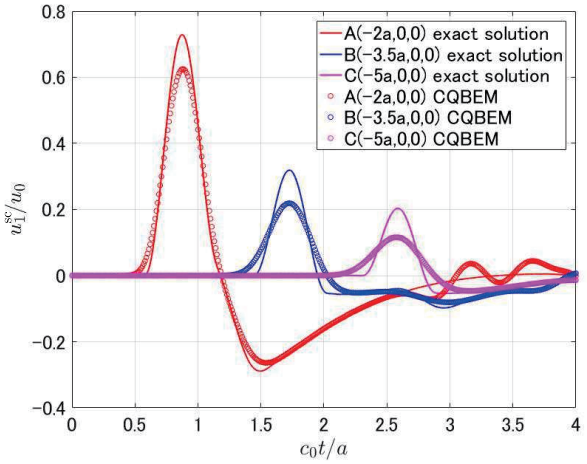


Fig. 4　Time variations of u_1/u_0 at A, B and C obtained by CQBEM with BDF1.

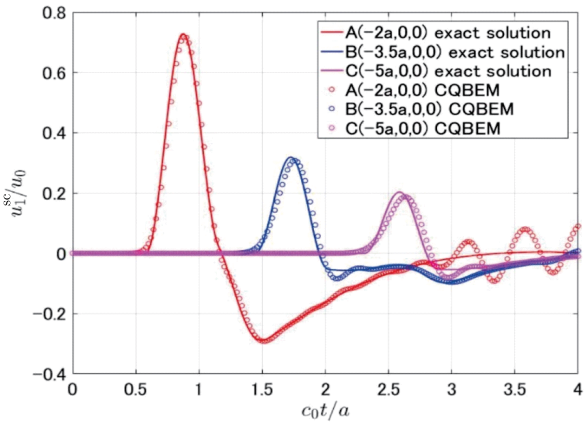


Fig. 5　Time variations of u_1/u_0 at A, B and C obtained by CQBEM with BDF2.

精度パラメータ ϵ は $\epsilon=1.0\times10^{-10}$ とした．式 (16) の計算では，試験的に $p=150$ とした．ただし，実用的には計算時間の観点から，異方性の度合いに応じて p の値は変化させる必要があると考えられる．また，解析には，x_1 方向に伝搬する次の平面波を用いた．

$$u_i^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t)=u_0\delta_{i1}(1-\cos\alpha) \tag{17}$$

$$\alpha=\begin{cases}\dfrac{2\pi}{T}\left(t-\dfrac{x_1+a}{c_{\mathrm{qP}}}\right) & \text{for } (0\le\alpha\le1)\\ 0 & \text{for otherwise}\end{cases} \tag{18}$$

ただし，c_{qP} は入射波の x_1 方向の波速，u_0 は振幅，T は入射波の周期を表す．

5.1. 精度の確認

一般の 3 次元異方性弾性波動問題は，計算負荷が極めて大きい．そのため，実際の変位場を計算する前に，いくつかの数値実験により解析に用いるおよそのパラメータについて決定しておく．ここでは，式 (13) の基本解の計算に含まれる弾性定数 C_{ijkl} に等方性材料に対するパラメータを与え，Fig.3 に対する散乱問題を解くことで，x_1 軸上の A 点 $(x_1/a=-2.0)$，B 点 $(x_1/a=-3.5)$，C 点 $(x_1/a=-5.0)$ における散乱波 u_1^{sc}

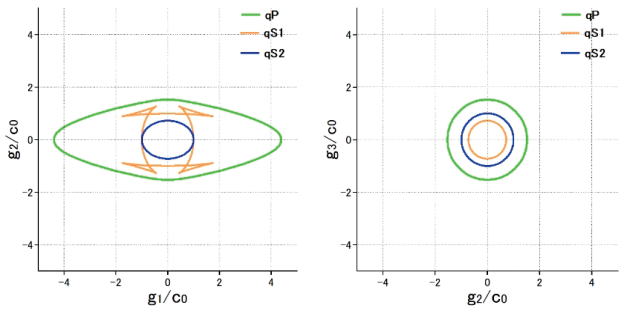


Fig. 6　Group velocity curves of a uni-directional CFRP in (a)x_1-x_2 plane (b)x_2-$x_3$plane.

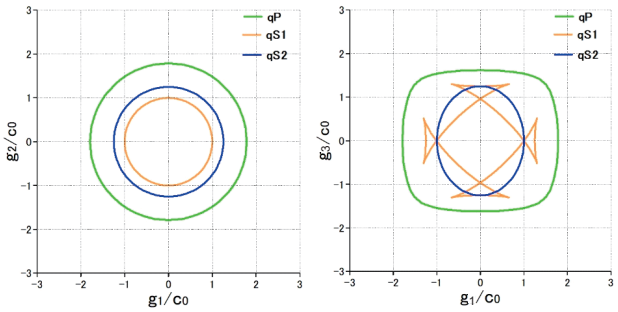


Fig.7　Group velocity curves of an austenite steel in (a)x_1-x_2 plane (b)x_2-$x_3$plane.

を計算する．等方性材料に対するフォークト表記された弾性定数は，次式で与えた．

$$\frac{C_{\alpha\beta}}{C_{66}} = \begin{bmatrix} 3.0 & 1.0 & 1.0 & 0 & 0 & 0 \\ & 3.0 & 1.0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 3.0 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{Sym.} & & 1.0 & 0 & 0 \\ & & & & 1.0 & 0 \\ & & & & & 1.0 \end{bmatrix} \tag{19}$$

ただし，式 (19) は，C_{66} で無次元化されていることに注意されたい．Fig.4, Fig.5 は，式 (8) における CQM パラメータの δ の計算に，それぞれ BDF1, BDF2 を用いた場合の A, B, C 点における散乱波 $u_1^{\rm sc}/u_0$ の時間変化を示している．いずれも総時間ステップ数 $N = L = 512$ とした．また，入射波を P 波とし，式 (17) で $c_{\rm qP} = \sqrt{3}c_0$(c_0 は S 波速度) とし，時間増分は，S 波速度 c_0 より，$c_0\Delta t/a = 0.01$, 入射波の周期 $c_0T/a = 1.0$ としている．比較のため，Pao と Mow[21] による周波数領域での解析解を逆フーリエ変換することで求めた解を実線で示してある．

Fig.4 より，BDF1 を用いた場合は，A, B, C 各点における最大変位振幅が Pao と Mow の解による数値解と一致していないことがわかる．また，各点における波形の立ち上がり時刻も，やや異なることがわかる．一方，Fig.5 の BDF2 の場合に着目すると，A, B, C 各点における最大振幅や波形の立ち上がり時刻は比較的良く一致していることがわかる．なお，Fig.5 の A 点における CQBEM の数値解は，時刻 $3.0 \le c_0t/a \le 4.0$ 程度において，やや振動している．これは BDF2 を用いて球を一定要素で離散化した場合に生じる現象である．この振動は，時間増分を小さく設定したとしても生じ，発散はしない[22]．BDF2 ではなく，RK(ルンゲクッタ) 法を用いることでその精度は改善されると考えらるが，計算負荷は増大する[23]．以下では，計算負荷を優先し，BDF2 を用いて計算を行うこととする．

5.2. 異方性弾性体中の空洞による入射波の散乱解析

次に，具体的に異方性弾性体中の空洞による入射波の散乱解析を行う．計算は BDF2 を用い，総時間ステップ数 $N = L = 256$, 時間増分 $c_0\Delta t/a = 0.02$ とした．また，異方性弾性体の場合は 5.1 節で示したような参照となる数値解を求めることは困難であるため，結果のおよその妥当性を群速度曲線[19] と比較，並びに波面の到達位置で評価する．解析対象とする一方向 CFRP，オステナイト系鋼材の群速度曲線は，それぞれ Fig.6, Fig.7 に示すとおりである．なお，後に示す解析結果の比較のために，等方弾性体の場合の空洞による入射波の散乱解析結果も Fig.8 に示しておく．Fig.8 は，5.1 節の BDF2 を用いた場合の条件下で得られた空洞周辺の変位場 $|\boldsymbol{u}|/u_0$ の一例である．ただし，Fig.8(a),(c) は時間ステップ数 n が $n = 80$ の，Fig.8(b),(d) は $n = 144$ の場合の結果である．

5.2.1　一方向 CFRP の場合

まず，一方向 CFRP 中の空洞による入射波の散乱解析結果を示す．一方向 CFRP の弾性定数 $C_{\alpha\beta}$ は次のように与えた．

$$\frac{C_{\alpha\beta}}{C_{66}} \simeq \begin{bmatrix} 19.3 & 8.0 & 8.0 & 0 & 0 & 0 \\ & 15.1 & 8.3 & 0 & 0 & 0 \\ & & 15.1 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{Sym.} & & 0.52 & 0 & 0 \\ & & & & 1.0 & 0 \\ & & & & & 1.0 \end{bmatrix} \tag{20}$$

Fig.9 は一方向 CFRP 中の空洞による散乱解析結果を示しており，Fig.9(a),(b) は $x_1 - x_2$ 平面，Fig.9(c),(d) は $x_2 - x_3$ 平面での結果を示している．なお，Fig.9(a),(c) および Fig.9(b),(d) は，それぞれ時間ステップ数 n が $n = 32, 64$ の場合の結果である．この場合，入射波の周期は $c_{\rm qP}T/a \simeq 2.53$ で与えた．Fig.9(a),(b) の $x_1 - x_2$ 平面における結果に着目すると，発生する散乱波は，x_1 方向に速く伝搬していることがわかる．入射波が空洞の後方に位置する Fig.9(b) の場合では，qS 波 (擬似横波) が発生している様子も見て取れる．Fig.6 で示した群速度曲線によると，Fig.6(a) で示すように，$x_1 - x_2$ 面内では，x_1 方向に qP 波が速く伝搬し，遅れて qS 波が発生する．すなわち，Fig.9 で示した結果は Fig.6 で示した群速度曲線にしたがって，およそ波動が伝搬していることがわかる．また，Fig.6(a) より，x_1 方向の群速度 g_1/c_0 はおよそ $g_1/c_0 \simeq 4.39$

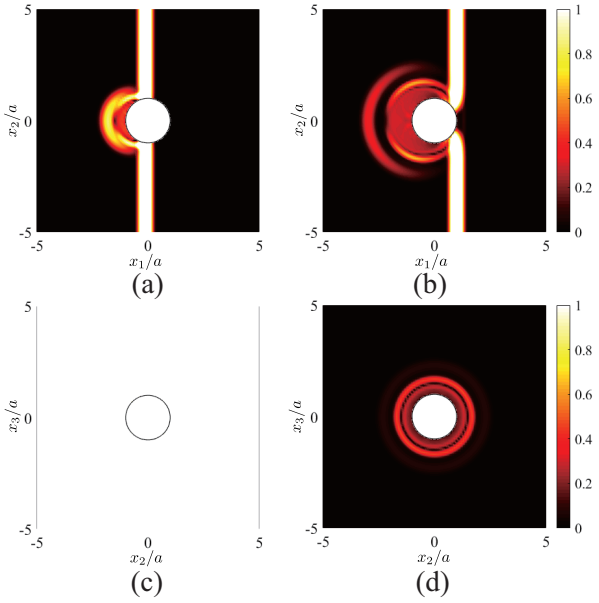


Fig. 8　Elastic wave scattering by a cavity in an isotropic solid in (a),(b) x_1-x_2 plane and (c),(d) x_2-$x_3$plane.

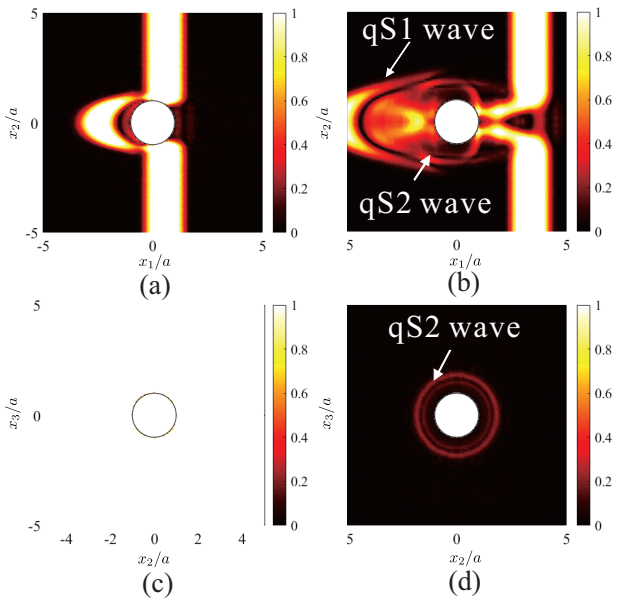


Fig. 9　Elastic wave scattering by a cavity in a uni-directional CFRP in (a) x_1-x_2 plane and (b) x_2-$x_3$plane.

程度である．時間増分は $c_0 t/a = 0.02$ であるから，$n = 32$ ステップまでに qP 波はおよそ $4.39 \times 0.02 \times 32 \simeq 2.81$ 程度，伝搬することになる．実際，Fig.9(a) より，qP 波の波面は，空洞左端から同程度伝搬していることがわかる．

一方，Fig.9(c) に着目すると，Fig.9(a) の結果から考察すれば，入射波がおよそ $x_2 - x_3$ 面に到達しているため，変位場 $|\boldsymbol{u}|/u_0$ がおよそ，その最大振幅値を示し，入射変位による支配的な結果となっていることがわかる．その後，Fig.9(d) より，発生した散乱波は等方性の場合の Fig.8(d) と同様に，等方に伝搬している様子を見て取れる．実際，Fig.6(b) の $x_2 - x_3$ 面における群速度曲線を見ても，波動は等方に伝搬すると考えられる．すなわち，Fig.6 の群速度曲線の結果より，数値解析結果のおよその妥当性を示すことができたと考えられる．

5.2.2　オステナイト系鋼材の場合

次に，オステナイト系鋼材中の空洞による入射波の散乱解析結果を示す．なお，オステナイト系鋼材の弾性定数 $C_{\alpha\beta}$ は次のように与えた．

$$\frac{C_{\alpha\beta}}{C_{66}} \simeq \begin{bmatrix} 3.16 & 1.19 & 1.76 & 0 & 0 & 0 \\ & 3.16 & 1.76 & 0 & 0 & 0 \\ & & 2.63 & 0 & 0 & 0 \\ & \text{Sym.} & & 1.57 & 0 & 0 \\ & & & & 1.57 & 0 \\ & & & & & 1.0 \end{bmatrix} \tag{21}$$

ただし，式 (19) 同様，式 (21) は C_{66} で無次元化されていることに注意されたい．Fig.10 はオステナイト系鋼材中の空洞による散乱解析結果を示しており，Fig.10(a),(b) は $x_1 - x_2$ 平面，Fig.10(c),(d) は $x_1 - x_3$ 面での結果を示している．ただし，式 (21) の弾性定数 C_{66} の値からわかるように，一方向 CFRP の場合とは異なり，$x_1 - x_2$ 面を等方性とし，$x_1 - x_3$ 面が異方性を示すように弾性定数を与えていることに注意されたい．このようにした理由は，3 次元解析における $x_1 - x_2$, $x_2 - x_3$, $x_1 - x_3$ の全ての面に対し，前節と合わせて異方性の影響を正しく表すことができているかを確認するためである．なお，Fig.10(a),(c) および Fig.10(b),(d) は，それぞれ時間ステップ n が $n = 80, 144$ の場合の結果である．この場合，入射波の周期は $c_{\mathrm{qP}} T/a \simeq 1.03$ で与えた．Fig.10(a), (b) より，$x_1 - x_2$ 面における解析結果に着目すると，$x_1 - x_2$ 面において，散乱波は Fig.8(a), (b) と同様に，等方に伝搬している様子を確認できる．この結果は，$x_1 - x_2$ 面におけるオステナイト系鋼材中の群速度曲線の結果である Fig.7(a) と一致している．すなわち，$x_1 - x_2$ 面では，群速度曲線による考察通り，弾性波動は等方性としての性質を示すことがわかる．

一方，Fig.10 の $x_1 - x_3$ 面の結果に着目すると，入射波が空洞に当たった後，散乱波が発生していることがわかる．Fig.7(b) のオステナイト系鋼材に対する群速度曲線によれば，qP 波はおよそ矩形の波面を持って伝搬し，qS1 波は x_1, x_3 方向で波面がクロスしていることがわかる．実際，Fig.10(c) では，入射波が空洞に到達後に発生する散乱 qP 波が矩形に，Fig.10(d) では，波面がクロスした qS1 波が発生していることがわかる．また，Fig.7(a) より，x_1 方向の群速度 g_1/c_0 はおよそ $g_1/c_0 \simeq 1.79$ 程度である．時間増分は $c_0 t/a = 0.02$ であるから，$n = 80$ ステップまでに qP 波はおよそ $1.79 \times 0.02 \times 80 \simeq 2.86$ 程度，伝搬することになる．実際，Fig.10(c) より，qP 波の波面は，空洞左端から同程度伝搬していることがわかる．すなわち，Fig.10 より，$x_1 - x_2, x_1 - x_3$ 面のいずれに対しても，およそ正しく群速度曲線にしたがって異方性の影響を考慮出来ていることがわかる．

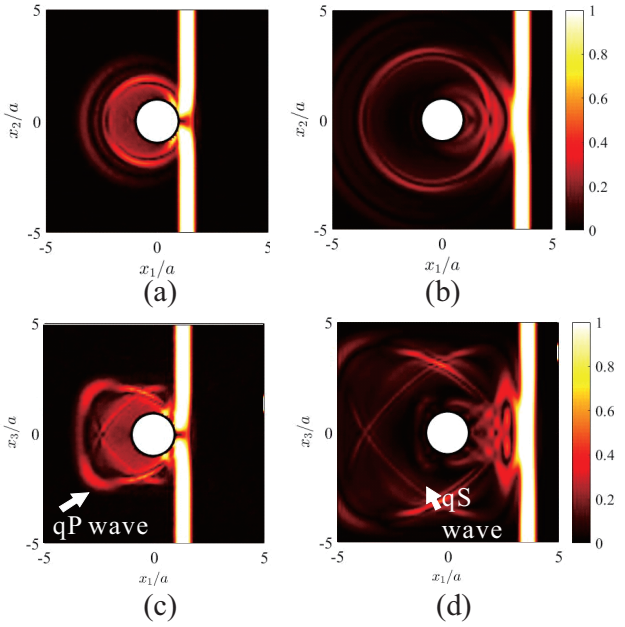


Fig. 10　Elastic wave scattering by a cavity in an austenite steel in (a) x_1-x_2 plane and (b) x_3-$x_1$plane.

なお，空洞境界上の変位をハイブリッド並列化を用いて求めるのに要した時間は，およそ 25 時間程度であった．

6. 結論および今後の展望

本論文では, Lubich の CQM を適用した CQBEM により，異方性弾性体中の空洞による散乱解析を具体的に実行した．計算負荷が大きいことから，京都大学のスーパーコンピューターによるハイブリッド並列化を用いて計算時間を低減させた．具体的に 3 次元で異方性材料の弾性定数を与えた場合でも，得られた散乱波動場はおよそ群速度曲線に従うことが確かめられた．

実際に数値解析を行うことで，解析のおよその妥当性は確かめられたものの，依然として解析に多大な計算時間が必要となる．そのため，今後は実用を見据えて，式 (16) における p の選択方法の検討や，影響関数の計算に機械学習の導入を検討する等，何らかの方法を用いて必要計算時間を低減させる工夫を検討していきたい．

謝辞

本研究は，R2 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (拠点研究機関：京都大学，Project ID:jh200052-NAH) および R3 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (拠点研究機関：京都大学，北海道大学，Project ID:jh210033-NAH), ならびに科学研究費補助金基盤研究 (C)(21K0423100) の支援の下で実施された．

参考文献

(1) Lubich, C. : Convolution quadrature and discretized operational calculus I *Numer. Math.*, **52**, (1988), pp. 129-145.

(2) Lubich, C. : Convolution quadrature and discretized operational calculus Ⅱ, *Numer. Math.*, **52**, (1988), pp. 413-425.

(3) Schanz, M. : Wave Propagation in Viscoelastic and Poroelastic Continua: A Boundary Element Approach, Springer, (2001).

(4) 福井卓雄，岡山美央，石田貴之：2 次元波動伝播問題における演算子積分時間領域境界要素法および高速多重極法の適用，計算数理工学論文集，**6**, (2006), pp.153-158.

(5) Saitoh, T., Hirose, S. and Fukui,T. : Convolution quadrature boundary element method and acceleration by fast multipole method in 2-D viscoelastic wave propagation, *Theor. and Appl. Mech. Japan*, **57**, (2009), pp. 385-393.

(6) Rokhlin, V: Rapid solution of integral equations of classical potential theory, *J. Comput. Phys.*, **60**, (1985), pp. 187-207.

(7) Greengard, L. and Rokhlin, V. : A fast algorithm for particle simulations, *J. Comput. Phys.*,**73**, (1987), pp. 325-348.

(8) Abreu, A. I., Carrer, J. A. M. and Mansur, W. J. : Scalar wave propagation in 2D: a BEM formulation based on the operational quadrature method, *Eng. anal. Bound. Elem.*, **27**, (2003), pp. 101-105.

(9) Zhang, Ch.: Transient elastodynamic antiplane crack analysis of anisotropic solids, *Int. J. Solids and Struc.*, **37**, (2000), pp. 6107-6130.

(10) 古川陽，田中遊雲，斎藤隆泰，廣瀬壮一：2 次元異方性弾性波動問題に対する演算子積分時間領域境界要素法，応用力学論文集 A2(応用力学), **68**, (2012), pp. 269-278.

(11) 斎藤隆泰，田中遊雲，廣瀬壮一：3 次元異方性弾性波動問題における Lubich の方法を用いた時間領域境界要素法，計算数理工学論文集, **10**, (2010), pp.111-116.

(12) Furukawa, A, Saitoh, T. and Hirose, S.: Convolution quadrature time-domain boundary element method for 2-D and 3-D elastodynamic analyses in general anisotropic elastic solids, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, **39**, (2014), pp.64-74.

(13) Wang, C.-Y. and Achenbach, J. D. :Elastodynamic fundamental solutions for anisotropic solids, *Geophys, J. Int.*, **118**, (1994), pp.384-392.

(14) 廣瀬壮一，桂健太郎：異方性材料中の様々な欠陥による散乱特性，応用力学論文集，**2**, (1999), pp.119-125.

(15) Tan, A., Hirose, S., Zhang, Ch., and Wang, C.-Y.: A 2D time-domain BEM for transient wave scattering analysis by a crack in anisotropic solids, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, **28**, (2005), pp. 610-623.

(16) Tan, A., and Hirose, S.: 3D time domain boundary element formulation for anisotropic elastic solid, *J. JASCOME*, **7**, (2008), pp. 285-290.

(17) 志戸岡永，大谷佳広，西村直志：3 次元時間域異方性動弾性問題における高速多重極境界積分方程式法について，応用力学論文集，**11**, (2008), pp.109-116.

(18) 斎藤隆泰，瀬川尚揮，石田貴之，廣瀬壮一：並列化された演算子積分時間領域高速多重極境界要素法による大規模多重散乱解析，計算数理工学論文集, **11**, (2011), pp. 95-100.

(19) Auld, B. A.: Acoustic fields and waves in solids, vol. 1,2, (1990), R. E. Krieger.

(20) http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/supercomputer/

(21) Pao, Y.-H. and Mow, C. C.: Diffraction of Elastic Waves and Dynamic Stress Concentrations, Crane and Russak, New York, (1973).

(22) 丸山泰蔵，斎藤隆泰，廣瀬壮一：陰的 Runge-Kutta 法を用いた演算子積分時間領域境界要素法および 3 次元スカラー波動問題への応用, 計算数理工学論文集，**12**, (2012), pp.91-96.

(23) Maruyama, T., Saitoh, T., Bui, T.Q. and Hirose, S.: Transient elastic wave analysis of 3-D large-scale cavities by fast multipole BEM using implicit Runge-Kutta convolution quadrature, *Comput. Method Appl. M.*, **303**, (2016), pp.231-259.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 15-211218 JASCOME

等方弾性体・粘弾性体中の空洞に対する線形化 Born 逆散乱解析の適用性の検討

CONSIDERATION ON APPLICABILITY OF LINEARIZED INVERSE SCATTERING ANALYSIS BASED ON BORN APPROXIMATION FOR CAVITY IN ISOTROPIC ELASTIC AND VISCOELASTIC MEDIA

竹田 晴彦 [1], 斎藤 隆泰 [2], 廣瀬 壮一 [3]

Haruhiko TAKEDA, Takahiro SAITOH and Sohichi HIROSE

1) 群馬大学大学院理工学府 修士課程 (〒 376-8515 群馬県桐生市天神町 1-5-1,E-mail:t160c056@gunma-u.ac.jp)
2) 群馬大学大学院理工学府 准教授 (〒 376-8515 群馬県桐生市天神町 1-5-1,E-mail:t-saitoh@gunma-u.ac.jp)
3) 東京工業大学環境・社会理工学院 教授 (〒 152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1,E-mail:shirose@cv.titech.ac.jp)

The linearized inverse scattering analysis based on the Born approximation is a method to reconstruct defects in a solid using scattered waves generated by the interaction between incident waves and defects. In general, the Born approximation is known as effective for weak scatterers like inclusions. However, the Born approximation has been empirically used for defect shape reconstruction of strong scatterers like cavities. Therefore, in this research, the applicability of the linearized inverse scattering method based on the Born approximation for a cavity in elastic and viscoelastic media is considered. After the formulation for the linearized inverse scattering method for a cavity is introduced, the effectiveness of the far-field and the Born approximations is discussed. Some numerical results for several cavities are shown to check the applicability of the linearized inverse scattering method based on the Born approximation.

Key Words: Viscoelastodynamics, Linearized inverse scattering analysis, Far-field approximation, Born approximation.

1. はじめに

本論文では，等方性弾性波動および粘弾性波動を対象に, 線形化逆散乱解析法の空洞への適用性について検討する. 線形化逆散乱解析法は, 欠陥からの散乱波を用いて無限弾性体中の欠陥位置や形状を再構成する手法であり, 現在までに多くの解析が行われてきた. 例えば, Kitahara ら [1] は, 線形化逆散乱解析を用いて, 3 次元無限等方弾性体中の空洞やき裂の位置, 形状の再構成を行っている. また, Kimoto ら [2] は, 線形化逆散乱解析の理論を二層体中の欠陥推定に応用し, 3 次元スカラー波動場における欠陥像の推定に成功している. 中畑らは, 線形化逆散乱解析の高速化 [3] や, 欠陥像の高精度イメージング法 [4] を提案している. 加えて, 山田ら [5], Guillermin ら [6] は, 実験によって観測された計測波形データを用いて, 実問題に対する逆散乱解析の適用及びその性能の評価を行ってきた. また近年では, 波速が方向依存性を示す異方性弾性波動問題 [7] に対する逆散乱解析 [8][9] の開発や, 波動が分散性と減衰性を示す粘弾性波動問題 [10][11] に対する逆散乱解析法 [12] も開発されている.

さて, 線形化逆散乱解析では, 対象とする波動問題における散乱波の積分表現式を起点として, その定式化が行われる. 散乱波の計算には, 対象とする波動問題における基本解の遠方場表現を求める必要がある. また, 散乱波の積分表現式は, 未知波動場の変位を含むため, 一般に, Born 近似 [13] 等の近似を導入することによって式を線形化することで定式化がなされる. ここで注意すべき点は, 線形化逆散乱解析法で用いる遠方場表現や線形化法の近似精度である. 基本解の遠方場表現に関しては, Schmerr[14] や藤原ら [15] によって, それぞれ検討されており, 等方性および異方性弾性波動問題に対する基本解の遠方場表現の有効性が確認されている. 一方, 積分表現式の線形化法の一種である Born 近似は, 一般に低周波近似と呼ばれ, 介在物等の透過性の弱散乱体に対して有効な近似であるとされる. ただし, 中畑ら [4], Rose[13], Hsu ら [16] の検討によれば, Born 近似を用いた線形化逆散乱解析は, 弱散乱体である介在物のみならず, 強散乱体である空洞に対しても, その形状を良好に再構成することが示されている. しかしながら, これらの結果は経験的に得られているに過ぎず, 弱散乱体に

2021 年 10 月 16 日受付，2021 年 11 月 16 日受理

対して有効である Born 近似が, なぜ強散乱体である空洞の欠陥形状再構成にも有効であるかの詳しい検討は, 著者らの知る限り示されていない.

そこで本研究では, 強散乱体に対する Born 近似の適用性の検討の初期段階として，従来より研究が進められている等方弾性波動, および, 著者らの前論文で扱った粘弾性波動 [12] を対象に，Born 近似を用いた線形化逆散乱解析が，どのような形状の強散乱体に対して有効であるかを確認する. 以下では先ず, 本研究における解くべき問題を示す. その後, 線形化逆散乱解析の定式化について簡単に示す. 数値解析例として, 逆散乱解析に用いる基本解の遠方場表現, および, 様々な形状の空洞に対する Born 近似の有効性について検討する. その後, 空洞に対する再構成結果を示し, 線形化逆散乱解析の適用性を検討する. ここで, 逆散乱解析に用いる空洞からの散乱波の計算は, 著者らの前論文 [12] 同様, 演算子積分時間領域境界要素法 (CQBEM)[17][18] を用いて求める. CQBEM は, 従来の時間領域境界要素法に対して演算子積分法 (CQM)[19] を適用することで, 粘弾性波動問題のような波動が分散性を示す問題であっても安定に精度よく計算できる手法である. 最後に, 結論や今後の課題等について述べる.

2. 解くべき問題

解くべき問題は, 2 次元無限等方弾性体, または粘弾性体中の空洞の位置や形状を再構成する逆問題である. なお, 定式化については, 粘弾性波動問題について記述すれば, 等方弾性体の場合も計算可能なため, ここでは粘弾性波動問題を対象とした定式化について説明する. さて, Fig.1 に示すような, 等方・均質な 2 次元無限粘弾性体 D 中に, 空洞 D_c が存在する場合を考える. 空洞のおよその位置は分かっているものとし, Fig.1 中の空洞近傍の原点 $\boldsymbol{o}$ に向け, 十分遠方から入射波 u_i^{in} を送信し, 空洞による散乱波 u_i^{sc} を, 入射波と同じ方向に位置する点 $\boldsymbol{x}$ において取得する. この操作を, 入射方向の角度 θ を $0 \leq \theta < 2\pi$ と変化させて, 空洞を取り囲むようにあらゆる方向で波動の送受信を行うとする. ここで, 入射波 u_i^{in} は, 空洞の境界表面 S により散乱されるとし, 入射波が空洞に到達するまでは, 静止過去の条件を満足するものとする. すなわち, 初期条件 $u_i(\boldsymbol{x}, t=0) = 0$ および $\partial u_i(\boldsymbol{x}, t=0)/\partial t = 0$ を考慮すれば, 位置 $\boldsymbol{x}$, 時刻 t における変位 $u_i(\boldsymbol{x}, t)$ が満足する粘弾性波動問題に対する時間領域での基礎方程式, および境界条件は, それぞれ次のように表される.

$$\mu(t) * \dot{u}_{i,jj}(\boldsymbol{x}, t) + \left(K(t) + \frac{1}{3}\mu(t) \right) * \dot{u}_{j,ij}(\boldsymbol{x}, t)$$
$$= \rho \ddot{u}_i(\boldsymbol{x}, t) \quad \text{in } D \tag{1}$$
$$t_i = 0 \ \text{ on } \ S \tag{2}$$

ただし, ρ は密度, $\mu(t)$, $K(t)$ はそれぞれ, せん断弾性係数, 体積弾性係数に対する緩和関数を表し, 不遡及の公理 $\mu(t) = 0$, $K(t) = 0$, $-\infty < t < 0$ を満足するものとする. また $*$ は畳込み積分, $\dot{(\ )}$ および $(\ )_{,i}$ はそれぞれ, 時間および空間に関する微分 $\partial/\partial t$, $\partial/\partial x_i$ を, t_i は表面力を表す.

式 (1) を, 初期条件および式 (2) の境界条件の下で解き, 得られた散乱波を用いて逆散乱解析を実行することで, 2 次元無限粘弾性体 D 中の空洞 D_c の位置や形状の再構成を行う.

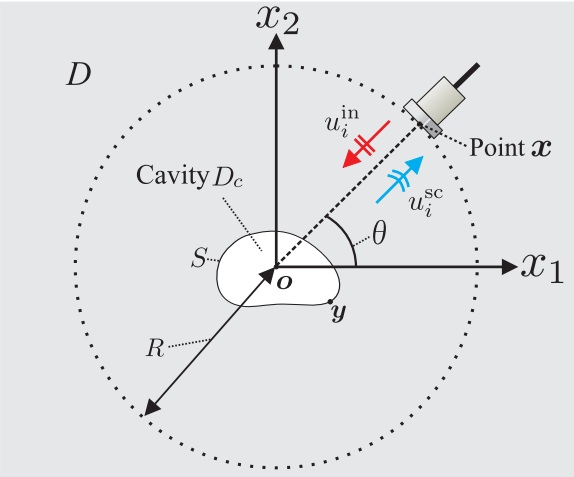


Fig. 1　Inverse scattering model.

3. 粘弾性波動問題に対する線形化逆散乱解析の定式化

式 (1) を基礎式とする時間領域における粘弾性波動問題の場合, 散乱波の積分表現式に時間領域の基本解および緩和関数が現れる. しかしながら，波動に分散性を持つ粘弾性波動問題の場合, 時間領域の基本解および緩和関数の直接計算は困難である. そのため, 以下で説明する線形化逆散乱解析の定式化では, 周波数領域における散乱波の積分表現式を起点として定式化を行う. その際, 通常の弾性波動問題で用いる弾性定数や基本解の計算を, 弾性-粘弾性対応原理 [20] により, 粘弾性体における複素緩和関数や基本解に置き換えて計算することとなる.

3.1. 粘弾性波動問題に対する散乱波の積分表現式

式 (1) の時間に関するフーリエ変換を取れば, 粘弾性波動問題に対する周波数領域での基礎方程式は以下のようになる.

$$\tilde{\mu}^*(\omega)\tilde{u}_{i,jj}(\boldsymbol{x}, \omega) + \left(\tilde{K}^*(\omega) + \frac{1}{3}\tilde{\mu}^*(\omega) \right) \tilde{u}_{j,ij}(\boldsymbol{x}, \omega)$$
$$= -\rho\omega^2 \tilde{u}_i(\boldsymbol{x}, \omega) \quad \text{in } D \tag{3}$$

ここで, ω は角周波数, $\tilde{\mu}^*(\omega)$, $\tilde{K}^*(\omega)$ はそれぞれ, 周波数領域におけるせん断弾性係数および体積弾性係数に対する複素緩和関数である. さて, 2 次元面内粘弾性波動問題における周波数領域での散乱波 $\tilde{u}_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x}, \omega)$ に関する積分表現式は, 空洞の境界 S において表面力フリーを仮定すると, 次式で表される.

$$\tilde{u}_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x}, \omega) = -\int_S \tilde{T}_{ij}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)\tilde{u}_j(\boldsymbol{y}, \omega) dS_y \tag{4}$$

ここで, $\tilde{u}_j(\boldsymbol{y}, \omega)$ は空洞境界 S 上の全変位を表す. また, $\tilde{T}_{ij}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)$ は 2 次元面内粘弾性波動問題における周波数領域の二重層核であり,

$$\tilde{T}_{ij}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega) = n_k(\boldsymbol{y})\tilde{G}^*_{jkpq}(\omega)\frac{\partial}{\partial y_q}\tilde{U}_{ip}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega) \tag{5}$$

と定義される．ここで，$n_k(\boldsymbol{y})$ は境界 S 上の点 $\boldsymbol{y}$ における外向き (空洞の中を向く) 単位法線ベクトル成分, $\tilde{G}^*_{jkpq}(\omega)$ は周波数領域における複素緩和関数であり, 等方・均質な粘弾性体の場合,

$$\tilde{G}^*_{jkpq}(\omega) = \left(\tilde{K}^*(\omega) - \frac{2}{3}\tilde{\mu}^*(\omega)\right)\delta_{jk}\delta_{pq} + \tilde{\mu}^*(\omega)(\delta_{jp}\delta_{kq} + \delta_{jq}\delta_{kp}) \quad (6)$$

と表される. また, 式 (5) において, $\tilde{U}_{ip}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\omega)$ は 2 次元面内粘弾性波動問題に対する周波数領域の基本解であり，次式で表される．

$$\tilde{U}_{ip}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\omega) = \frac{\mathrm{i}}{4\tilde{\mu}^*(\omega)}\left[H_0^{(1)}(\tilde{k}_T r)\delta_{ip} + \frac{1}{\tilde{k}_T^2}\left(H_0^{(1)}(\tilde{k}_T r) - H_0^{(1)}(\tilde{k}_L r)\right)_{,ip}\right] \quad (7)$$

ここで, i は虚数単位, $H_0^{(1)}(kr)$ は第 1 種 0 次 Hankel 関数, δ_{ip} はクロネッカーのデルタであり，$r = |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|$ である. また, $\tilde{k}_L$, $\tilde{k}_T$ はそれぞれ粘弾性波動問題における周波数領域の縦波および横波の複素波数である.

さて, 式 (7) に対し, $r \simeq |\boldsymbol{x}| - \hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y}$ なる遠方場近似を導入する. ハンケル関数 $H_0^{(1)}(kr)$ の無限遠での漸近展開

$$H_0^{(1)}(kr) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi k|\boldsymbol{x}|}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k|\boldsymbol{x}|-\frac{\pi}{4})}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y}}, \ (|\boldsymbol{x}| \gg |\boldsymbol{y}|) \quad (8)$$

を式 (7) に代入することで, 基本解の遠方表現 $\tilde{U}_{ij}^{\mathrm{far}}$ を得る. さらに, $\tilde{U}_{ij}^{\mathrm{far}}$ を式 (5) に代入することで, 二重層核の遠方表現 $\tilde{T}_{ij}^{\mathrm{far}}$ を得る. さて, 遠方場での波動は, 一般に縦波と横波が分離されて観測される. そこで, 本研究では, 散乱波の縦波 (L) 成分のみを考慮する. すると式 (4) は, 次式のようになる.

$$\tilde{u}_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x},\omega) = -\frac{\mathrm{i}\tilde{k}_L B_{ijk}^L}{\sqrt{8\pi\tilde{k}_L|\boldsymbol{x}|}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\tilde{k}_L|\boldsymbol{x}|+\frac{\pi}{4})} \times \int_S n_k(\boldsymbol{y})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tilde{k}_L\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y}}\tilde{u}_j(\boldsymbol{y},\omega)dS_y \quad (9)$$

ここで, B_{ijk}^L は, $B_{ijk}^L = -\{(1-2\kappa)\delta_{jk} + 2\kappa\hat{x}_j\hat{x}_k\}\hat{x}_i$, $\kappa = \tilde{k}_L/\tilde{k}_T$, $\hat{\boldsymbol{x}}$ は $\boldsymbol{x}$ の単位ベクトルである. さて, 式 (9) の右辺の積分は空洞境界 S 上の変位を含んでおり, このままでは非線形解析が必要となる. そこで, 次の節では Born 近似を施すことで方程式を線形化近似し, 空洞に対する欠陥形状再構成式を導出する.

3.2. 空洞に対する線形化逆散乱解析

ここでは, 前節で得られた式 (9) の散乱波の積分表現式に対して, Born 近似を施すことで方程式を線形化する. Born 近似では, 式 (9) における空洞境界 S 上の点 $\boldsymbol{y}$ での変位 $\tilde{u}_j(\boldsymbol{y},\omega)$ を入射波変位 $\tilde{u}_j^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{y},\omega)$ で近似する. ここで本研究における入射波 $\tilde{u}_j^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{y},\omega)$ は, 縦波平面波と仮定し, 周波数領域において次のように与える.

$$\tilde{u}_j^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{y},\omega) = F(\omega)\hat{d}_j^{\mathrm{in}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\tilde{k}_L\hat{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{in}}\cdot\boldsymbol{y}} \quad (10)$$

ただし, $\hat{\boldsymbol{d}}^{\mathrm{in}}$ は入射波の偏向方向を表す単位ベクトル, $\hat{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{in}}$ は入射波の進行方向を表す単位ベクトルである. なお, 本解析における散乱波の取得法は, 非破壊評価の分野におけるパルス・エコー法を想定する. よって, $\hat{\boldsymbol{d}}^{\mathrm{in}}$ および $\hat{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{in}}$ と, 散乱波の観測方向の単位ベクトル $\hat{\boldsymbol{x}}$ の関係は, $\hat{\boldsymbol{d}}^{\mathrm{in}} = \hat{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{in}} = -\hat{\boldsymbol{x}}$ と表せる. また, $F(\omega)$ は次式で与える.

$$F(\omega) = 2u_0\sqrt{\pi}t_p\left(\frac{\omega t_p}{2}\right)^2\mathrm{e}^{-\left(\frac{\omega t_p}{2}\right)^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_s} \quad (11)$$

ただし, u_0 は変位振幅, t_p は入射波の中心周波数に対応する時間パラメータ, t_s は位相のずれを表す. さて, Born 近似により, 空洞境界 S 上の変位 $\tilde{u}_j(\boldsymbol{y},\omega)$ を入射波の変位 $\tilde{u}_j^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{y},\omega)$ に置き換えた後, 式 (9) に対し, Gauss の発散定理を適用することで式変形を行う. さらに式 (9) に対し, 空洞内部でのみ 1 の値をとり, その他の領域ではゼロとなる次の特性関数 $\Gamma(\boldsymbol{y})$

$$\Gamma(\boldsymbol{y}) = \begin{cases} 1 & (\boldsymbol{y} \in \text{Cavity}) \\ 0 & \text{for otherwise} \end{cases} \quad (12)$$

を導入することで, 式 (9) の積分を全領域 A へと拡張する. 実際に, 式 (12) を用いて, 式 (9) を整理すると, 空洞に対する散乱波の積分表現式は次のようになる.

$$\tilde{u}_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x},\omega) = \frac{\tilde{k}_L^2\hat{d}_i^{\mathrm{in}}F(\omega)}{\sqrt{2\pi\tilde{k}_L|\boldsymbol{x}|}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\tilde{k}_L|\boldsymbol{x}|+\frac{\pi}{4})} \times \int_A \Gamma(\boldsymbol{y})\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\tilde{k}_L\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y}}dV_y \quad (13)$$

ここで, 式 (13) に対し, $\boldsymbol{K} = 2\tilde{k}_L\hat{\boldsymbol{x}}$ なる $\boldsymbol{K}$ 空間を考える. $\boldsymbol{K}$ 空間において, $\hat{\boldsymbol{x}}$ に対する変数変換を行い, 式 (13) に逆フーリエ変換を適用すれば, 特性関数 $\Gamma(\boldsymbol{y})$ を次のように導出することができる.

$$\Gamma(\boldsymbol{y}) = \int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{\sqrt{2\pi\tilde{k}_L|\boldsymbol{x}|}\tilde{u}_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x},\omega)\hat{d}_i^{\mathrm{in}}}{\pi^2\omega F(\omega)} \times \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\tilde{k}_L|\boldsymbol{x}|-2\tilde{k}_L\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y}+\frac{\pi}{4})}d\omega d\theta \quad (14)$$

ただし, θ は Fig.1 に示すような偏角である. 式 (14) で導出された特性関数 $\Gamma(\boldsymbol{y})$ は, 空洞内部でのみ値を持つ関数であるため, 式 (14) の右辺を精度よく計算することで, 粘弾性体中の空洞の位置や形状の再構成が可能となる.

さて, 式 (14) の特性関数 $\Gamma(\boldsymbol{y})$ に含まれる周波数領域の散乱波 $\tilde{u}_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x},\omega)$ は, 時間領域の散乱波 $u_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x},t)$ が求まっていれば, その時間に関するフーリエ変換によって得ることができる. ここで, 式 (14) 自体の評価は, $\tilde{u}_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x},\omega)$ を直接, 周波数領域で計算した方が厳密であると思われる. しかしながら, 時間領域の散乱波 $u_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x},t)$ を周波数領域の散乱波 $u_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x},\omega)$ にフーリエ変換する際に含まれる数値誤差は, 本研究で扱う, 線形化 Born 逆散乱解析の適用性の検討に大きな影響は与えないものと考えられる. よって本研究では, 現実の計測実験に即した解析とするために, 演算子積分時間領域境界要素法 (CQBEM)[17][18] を用いた時間領域の散乱波 $u_i^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x},t)$ の計算を出発点として, 線形化 Born 逆散乱解析の適用性の検討を行う. なお, 粘弾性波動問題における CQBEM を用いた空洞によ

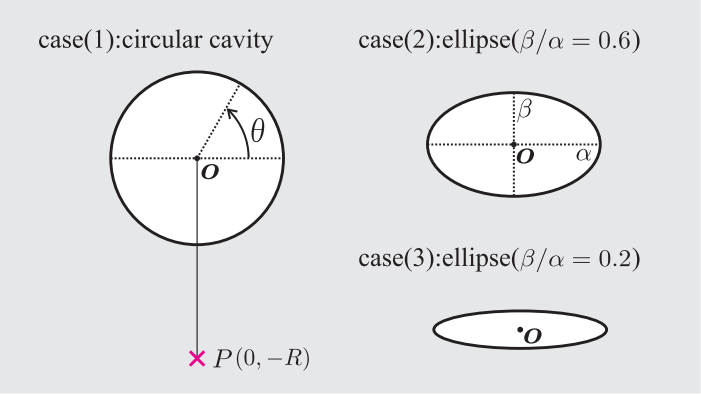


Fig. 2　Target cavity shape (a) circular cavity, (b) ellipse($\beta/\alpha = 0.6$), and (c) ellipse($\beta/\alpha = 0.2$).

る散乱解析法については, Saitoh ら [21][22] により提案されていることから, それらの説明は当該文献に譲るものとする.

4. 数値解析例

以下, 数値解析例を示す. まず, 本解析で用いた粘弾性モデルについて簡潔に説明する. その後, 解析に用いた入射波について説明する. 加えて, 遠方表現された基本解の近似精度, および, 様々な形状の空洞に対する Born 近似の有効性について検討する. 最後に, 空洞に対する逆散乱解析結果を示し, 等方弾性体および粘弾性体中の空洞に対する欠陥形状再構成能について検討する. ただし, 等方弾性体に対する計算は, 粘弾性波動問題における初期縦波速度 c_{L0} を用いて行うものとする.

さて, 本数値解析で対象とする空洞は, Fig.2 に示すように, (1) 半径 $r = a$ の真円空洞, (2) 長軸半径 α を $\alpha = a$, 短軸半径を β とした時, $\beta/\alpha = 0.6$ の楕円空洞, (3) $\beta/\alpha = 0.2$ の楕円空洞の計 3 つのケースとし, 全ての空洞の中心は座標原点 $\boldsymbol{o}$ とする. また, 以下の計算では, 時間ステップ数 $N = 1024$, 時間増分を $c_{L0}\Delta t/a \simeq 0.04$ と設定して計算を行った.

4.1. 三要素標準モデル

粘弾性波動問題を扱う場合, そのモデル化はいくつか存在するが, 以下の解析においては, Fig.3 のように粘弾性体を粘性係数 η のダッシュポットと, ばね定数 μ_1, μ_2 の二つのばねにより表す三要素標準モデル [23] を用いて解析を行った. なお, 本解析では, CQBEM により計算された時間領域における散乱波をフーリエ変換することで, 逆散乱解析に用いる周波数領域での散乱波を求めている. CQBEM では，ラプラス変換領域での基本解が必要となる. そのため, ここでは CQBEM の計算で用いるラプラス変換領域での三要素標準モデルについて簡単に説明する. 時間領域の入射波および逆散乱解析の計算に用いる周波数領域での三要素標準モデルに関しては, Fukui らの文献 [11] 等を参照されたい.

三要素標準モデルの場合, ラプラス変換領域における複素せん断弾性係数は次のようになる.

$$\mu^*(s) = \frac{1 + s\tau_\sigma}{1 + s\tau_\epsilon}\mu_R \tag{15}$$

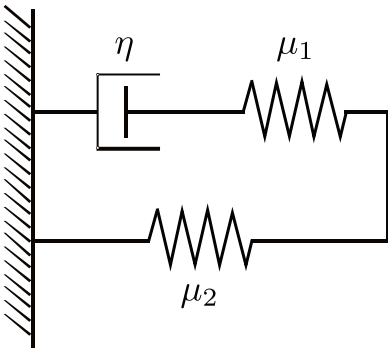


Fig. 3　Three-element standard linear viscoelastic model.

ただし, τ_σ および τ_ϵ はそれぞれ, 応力緩和時間, ひずみ緩和時間であり三要素標準モデルのパラメータを用いて

$$\tau_\sigma = \eta\left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}\right), \quad \tau_\epsilon = \frac{\eta}{\mu_1} \tag{16}$$

と表される. また, $\mu_R = \mu_2$ は緩和弾性係数であり, $t \to \infty$ におけるせん断弾性定数になる. $t \to 0$ における弾性定数は初期弾性定数 μ_0 であり, 応力緩和時間 τ_σ とひずみ緩和時間 τ_ϵ を用いて次式で表される.

$$\mu_0 = \lim_{s\to\infty}\mu^*(s) = \mu_R\frac{\tau_\sigma}{\tau_\epsilon} \tag{17}$$

以下の数値解析で用いた粘弾性パラメータは, 緩和せん断弾性係数と初期せん断弾性係数の比を $\mu_R/\mu_0 = 0.85$, 体積弾性係数と初期弾性係数の比 $K/\mu_0 = 5/3$, また, 初期縦波速度 c_{L0} の波が case(1) の空洞を通過する基準時間 $T_0 = 2a/c_{L0}$ を用いて, $\tau_\sigma = 0.5T_0$, $\tau_\epsilon = 17T_0/40$ として計算を行っている. また, 体積弾性係数 K は粘弾性効果を持たせず一定に与え, せん断弾性係数 μ にのみ粘弾性体の性質を与えて解析を行った.

4.2. 入射波特性の確認

以下では, 解析に用いた入射波の特性について考察しておく. 用いた入射波は縦波平面 Ricker 波であり, 式 (10), (11) に対してフーリエ逆変換 $\mathcal{F}^{-1}$ を用いて次式で与えられる.

$$u_i^{\rm in}(\boldsymbol{x}, t) = u_0\hat{d}_i^{\rm in}\mathcal{F}^{-1}\left[2\sqrt{\pi}t_p\left(\frac{\omega t_p}{2}\right)^2 \mathrm{e}^{-\left(\frac{\omega t_p}{2}\right)^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\tilde{k}_L\hat{\boldsymbol{p}}^{\rm in}\cdot\boldsymbol{x}+\omega t_s)}\right] \tag{18}$$

ただし, 式 (18) の入射波は, 厳密には静止過去の条件を満足しないことに注意されたい. Fig.4 (a), (b) は, 式 (18) に対し, $\hat{d}_i^{\rm in} = \hat{p}_i^{\rm in} = (1, 0)$ として与えた場合の, $x_1/a = 4.0, 7.0, 10.0, 13.0$ における入射波 $u_1^{\rm in}/u_0$ の時刻歴波形, および, そのフーリエスペクトルをそれぞれ示している. また, Fig.4 (a), (b) 中の黒色点線は等方弾性体に対する入射波 $u_1^{\rm in}/u_0$ の計算結果である. ただし, Fig.4(b) のフーリエスペクトルに関するそれぞれの結果は, 等方弾性体の場合の最大スペクトル値 $u_{\max}$ で正規化している事に注意されたい. 入射波の計算に用いたパラメータは, 入射波の中心周波数に対応する無次元化波数 $ak_{L0}^{\rm in}$ を $ak_{L0}^{\rm in} = 2.5$, $t_p = T_0/ak_{L0}^{\rm in}$, $t_s = 2.0T_0$ として与えている. Fig.4(a) より, 時間領域の入射波 $u_1^{\rm in}(t)/u_0$ は粘弾性体の影響を受け, 減衰して

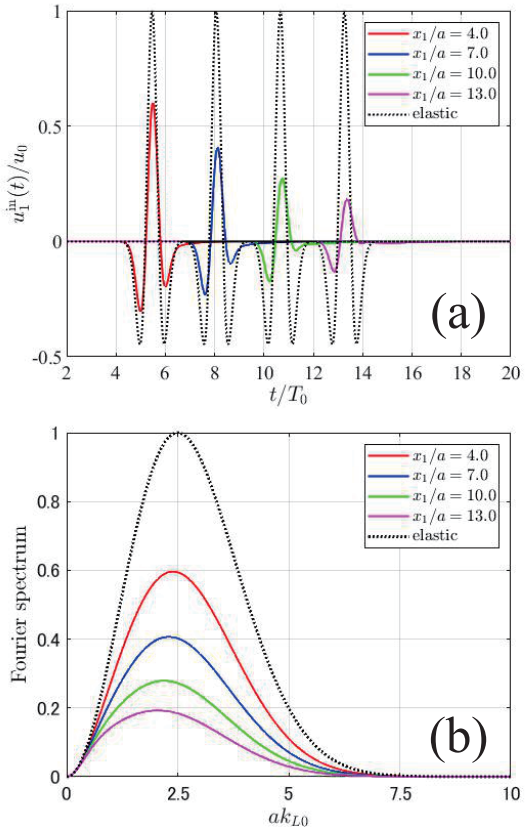


Fig. 4 Incident wave forms $u_i^{\rm in}/u_0$ caliculated by eq.(18) at $x_1/a = 4.0, 7.0, 10.0$ and 13.0. (a)time histories and (b)Fourier spectrums.

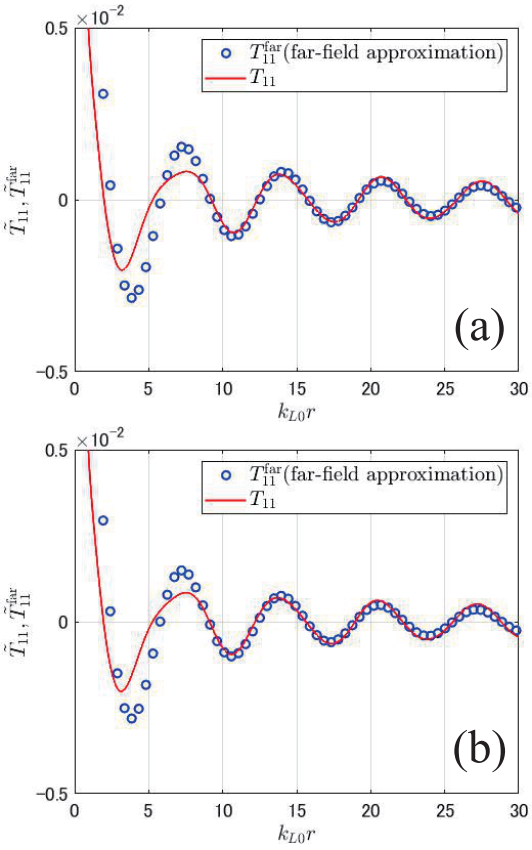


Fig.5 Far-field approximation for double layer kernel $\tilde{T}_{11}^{\rm far}$ for (a) an elastic medium and (b) a viscoelastic medium.

いる様子が確認できる. また, Fig.4(b) より, 入射波の中心周波数が粘弾性効果を受けることで減少しており, 粘弾性波動の分散性を確認できる. なお, 中心周波数 $ak_{L0}^{\rm in} = 2.5$ と設定した場合, 入射波の初期波長 λ_0 は $\lambda_0 = 2\pi a/(ak_{L0}^{\rm in}) \simeq 2.5a$ となる. すなわち, case(1)-(3) の対象空洞の全ての欠陥長に比べ, 波長がやや長くなるような中心周波数を用いている. この設定は, 入射波の波長が欠陥長に比べ大きくなるような低周波帯域において有効となる Born 近似の性質 [4] と, 高周波の入射波を用いる場合, その波動が粘弾性効果によって著しく減衰してしまい, 欠陥からの散乱波の取得が難しいという点を考慮している.

4.3. 遠方場近似の精度の確認

次に, 線形化逆散乱解析に適用した遠方場近似の精度について検討する. ここでは, 例として 2 次元面内等方弾性波動および粘弾性波動問題に対する周波数領域での二重層核 $\tilde{T}_{11}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)$, およびその遠方表現 $\tilde{T}_{11}^{\rm far}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)$ を比較する. Fig.5(a), (b) に, それぞれ等方弾性波動および粘弾性波動に対する $\tilde{T}_{11}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)$ および $\tilde{T}_{11}^{\rm far}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)$ の無次元化波数 $k_{L0}r$ に対する比較結果を示す. Fig.5(a), (b) 中の曲線は通常の二重層核 $\tilde{T}_{11}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)$, 丸印は遠方場近似された二重層核 $\tilde{T}_{11}^{\rm far}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)$ を示している. Fig.5(a), (b) より, 等方弾性体および粘弾性体の両者の結果においても, 無次元化波数 $k_{L0}r$ が大きくなるにつれ, 遠方場近似された二重層核 $\tilde{T}_{11}^{\rm far}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)$ が通常の二重層核 $\tilde{T}_{11}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \omega)$ に近づく様子が確認出来る. よって, 以下の解析では, Fig.1, 2 において, 遠方場近似の条件が概ね成立する距離 $R = r = 14a$ において, 散乱波を取得するものとする.

4.4. Born 近似の適用性の確認

次に, Born 近似の適用性に関して検討する. ここで扱う Born 近似は, 3 節で示した通り, 強散乱体である空洞境界上の変位 $\tilde{u}_i(\boldsymbol{y}, \omega)$ を入射波変位 $\tilde{u}_i^{\rm in}(\boldsymbol{y}, \omega)$ で置き換えることで線形化近似する手法である. よって, 本節では空洞境界上の変位 $\tilde{u}_i(\boldsymbol{y}, \omega)$ と, その位置における入射波変位 $\tilde{u}_i^{\rm in}(\boldsymbol{y}, \omega)$ を比較する. その際, 対象とする空洞の形状や粘弾性の性質が, Born 近似の適用性にどのように影響を与えるのかを検討する. Fig.6(a)-(f) に, case(1)-(3) の空洞に対する, 無次元化波数 $ak_{L0} = 2.5$ での空洞境界上の変位 (boundary value) の実部 $\mathrm{Re}[\tilde{u}_i(\omega) \cdot \hat{d}_i^{\rm in}]$ および入射波変位 (incident wave) の実部 $\mathrm{Re}[\tilde{u}_i^{\rm in}(\omega) \cdot \hat{d}_i^{\rm in}]$ と, Fig.2 の空洞に対する偏角 θ との関係をそれぞれ示す. なお, Fig.6 中の丸印は空洞境界上の変位を表し, 曲線は入射波変位を表している. また, Fig.6(a), (c), (e) には等方弾性体, (b), (d), (f) には粘弾性体に対する計算結果を示している. ただし, これらの結果は, 式 (18) の入射波を x_2 方向に向けて入射させた場合, すなわち $\hat{\boldsymbol{d}}^{\rm in} = \hat{\boldsymbol{p}}^{\rm in} = (0, 1)$ の場合の CQBEM による解析結果をフーリエ変換することで得られたものであることに注意されたい. さらに, プロット値は, それぞれのグラフ中の絶対値の最大値 $|u_{\max}|$ で正規化している.

Fig.6(a), (b) より, case(1) の真円空洞においては, 入射波

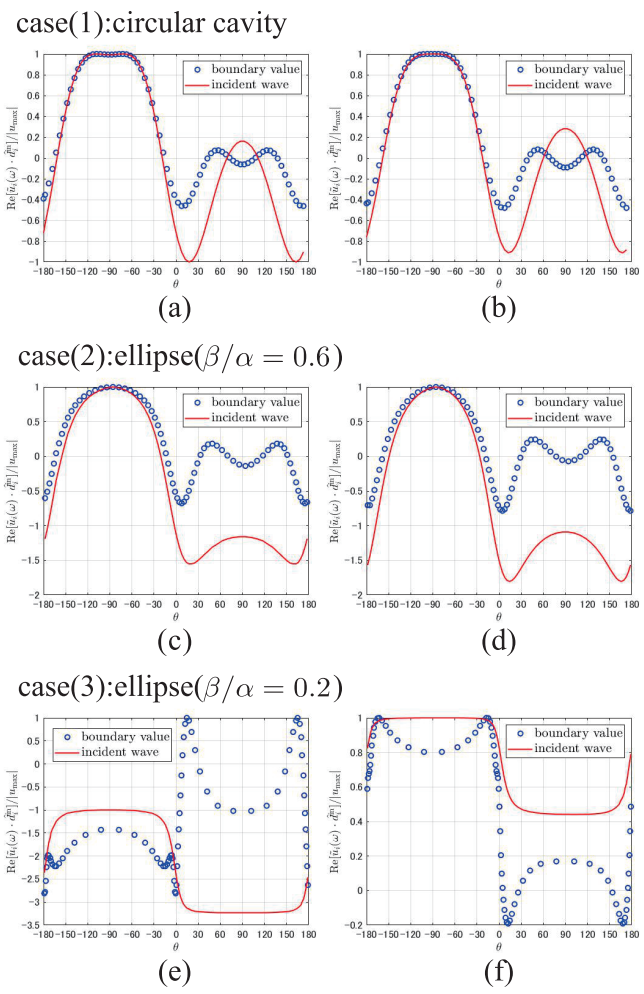


Fig.6　Real part of boundary and incident wave values on each cavity for case(1)-(3) at non-dimensional wave number $ak_{L0} = 2.5$. (a), (c), (e) an elastic medium and (b), (d), (f) a viscoelastic medium.

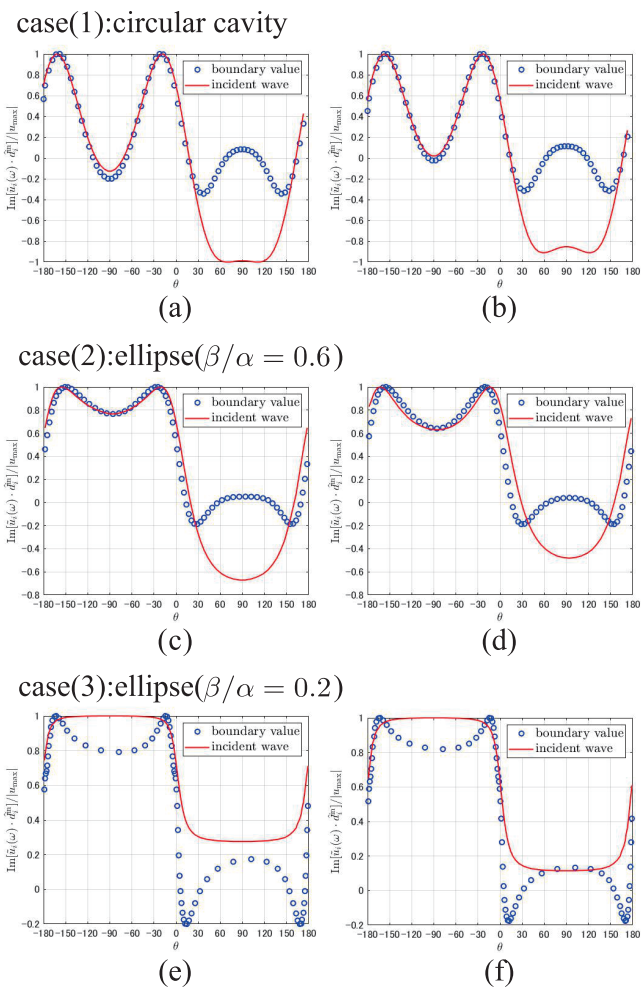


Fig. 7　Imaginary part of boundary and incident wave values on each cavity for case(1)-(3) at non-dimensional wave number $ak_{L0} = 2.5$. (a), (c), (e) an elastic medium and (b), (d), (f) a viscoelastic medium.

の照射面である $-180° \leq \theta \leq 0°$ において, 境界上の変位 $\mathrm{Re}[\tilde{u}_i(\omega) \cdot \hat{d}_i^{\mathrm{in}}]/|u_{\max}|$ と入射波変位 $\mathrm{Re}[\tilde{u}_i^{\mathrm{in}}(\omega) \cdot \hat{d}_i^{\mathrm{in}}]/|u_{\max}|$ が概ね一致していることが分かる. また, Fig.6(c), (d) より, case(2) の楕円空洞 ($\beta/\alpha = 0.6$) に関しては, 入射波の照射面における境界上の変位と入射波変位は, 完全には一致していないものの, プロット値の波形自体は似た形状となっていることがわかる. しかしながら, Fig.6(e), (f) より, case(3) の楕円空洞 ($\beta/\alpha = 0.2$) に対しては, 境界上の変位と入射波変位は一致していないことが分かる. また, 入射波の照射面の反対方向である $0° \leq \theta \leq 180°$ においては, Fig.6 中の全てのグラフにおいて, プロット値の波形形状すら一致していないことがわかる.

同様に, Fig.6 に対応する虚部 $\mathrm{Im}[\tilde{u}_i(\omega) \cdot \hat{d}_i^{\mathrm{in}}]$ の結果を Fig.7(a)-(f) に示す. Fig.7(a)-(f) より, 虚部の場合も, 概ね実部の場合と同様の傾向を示すことが分かる.

また, Fig.8(a), (b) および Fig.8(c), (d) は, それぞれ case(2) および case(3) の空洞を $\theta = 30°$ 回転させた場合の, 無次元化波数 $ak_{L0} = 2.5$ における境界上の変位と入射波変位の比較結果を示している. Fig.8(a), (c) には, それぞれの空洞に対する境界上の変位と入射波変位の実部を, Fig.8(b), (d) には, それらの虚部を示している. ただし, ここでは等方弾性体に対する結果のみを示していることに注意されたい. Fig.8(a) では, $-150° \leq \theta \leq -30°$, Fig.8(b) では, $-120° \leq \theta \leq 30°$ において境界上の変位と入射波変位が良好に一致している. すなわち case(2) の空洞の場合は, その空洞を傾けた場合であっても, 入射波の照射面における境界上の変位と入射波変位がよく一致することが確認できる. 一方, Fig.8(c) では, $\theta = -150°$ 付近においては, 境界上の変位と入射波変位が概ね一致しているものの, それ以外の点ではほとんど一致していない. また, Fig.8(d) では, 境界上の変位と入射波変位はほとんど一致していないことが分かる. よって, 前述した Fig.6, 7 における傾向の通り, case(2) の空洞に対しては, 入射波の照射面における境界上の変位と入射波変位は概ね一致するものの, case(3) の空洞に対しては境界上の変位と入射波変位はほとんど一致しないことが分かる.

Fig.9(a)-(f) は, 無次元化波数 $ak_{L0} = 1.25$ における境界上の変位 $\mathrm{Re}[\tilde{u}_i(\omega) \cdot \hat{d}_i^{\mathrm{in}}]/|u_{\max}|$ と入射波変位 $\mathrm{Re}[\tilde{u}_i^{\mathrm{in}}(\omega) \cdot \hat{d}_i^{\mathrm{in}}]/|u_{\max}|$ の比較結果を示している. 無次元化波数 $ak_{L0} = 1.25$ に対す

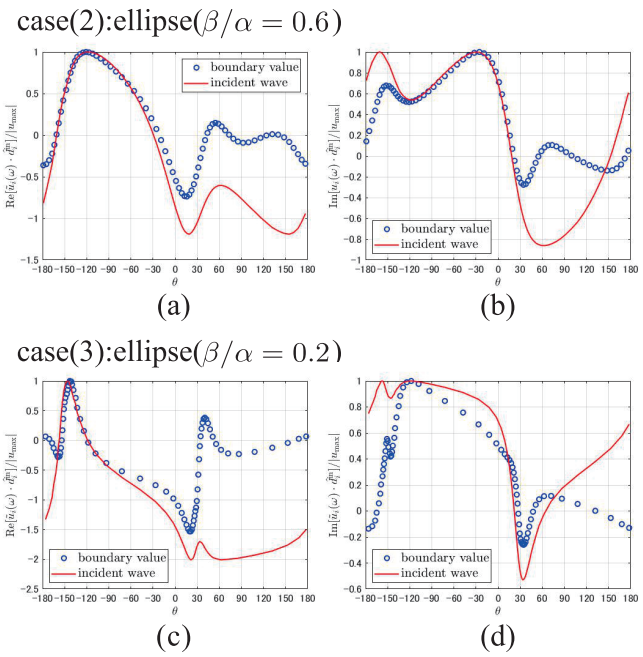


Fig. 8　Real and imaginary parts of boundary and incident wave values on 30° inclined cavities for case(2), (3) in an elastic medium at non-dimensional wave number $ak_{L0} = 2.5$. (a), (b) for case(2) and (c), (d) for case(3).

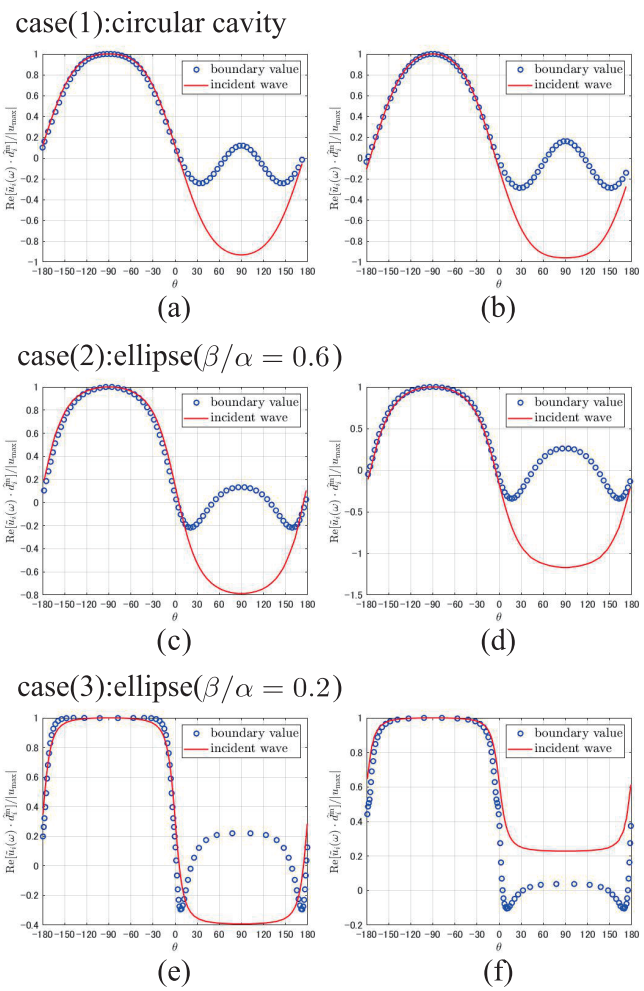


Fig.9　Real part of boundary and incident wave values on each cavity for case(1)-(3) at non-dimensional wave number $ak_{L0} = 1.25$. (a), (c), (e) an elastic medium and (b), (d), (f) a viscoelastic medium.

る解析結果では, case(1)-(3) の全ての形状の空洞において, 入射波に照射される境界上の変位と入射波変位は良好に一致していることが分かる.

また, Fig.10(a)-(f) は, Fig.9 に示す結果と同様の計算を行った場合の, 境界上の変位と入射波変位の虚部 $\mathrm{Im}[\tilde{u}_i(\omega)\cdot\hat{d}_i^{\mathrm{in}}]$ を示している. 実部の計算結果に比べ, 境界上変位と入射波変位の一致部分がやや減少するものの, 入射波に照射される面においては, 境界上の変位と入射波変位が概ね一致している事が分かる. これらの結果より, 無次元化波数 $ak_{L0} = 2.5$ での計算結果に比べ, 低い周波数である $ak_{L0} = 1.25$ での計算結果の方が Born 近似の精度が向上していることがわかる.

以上の考察より, 一般的に Born 近似は介在物等の弱散乱体に対して適用できる手法であるが, case(1) の空洞ように, 形状が真円に近い強散乱体であれば, ほぼ入射波の照射面で Born 近似を用いて良いことが確かめられた. よって, 真円形状の強散乱体に対して Born 逆散乱解析を適用する場合は, 入射波の欠陥に対する照射面を増やすことで精度よく欠陥形状の再構成が出来ることが考えられる. 一方, case(3) の空洞のように, 形状が真円から外れる強散乱体の場合, 入射波の照射面であっても, 高周波帯域において Born 近似の精度が低下する事が確認された. すなわち, 形状が真円から外れるような強散乱体に対して Born 逆散乱解析を適用する場合, その再構成精度が低下することが推察される.

4.5. 空洞に対する逆散乱解析結果

最後に, case(1)-(3) の空洞に対する逆散乱解析結果を, Fig.11(a)-(f) に示す. Fig.11 の (a), (c), (e) は等方弾性体中の空洞に対する解析結果であり, (b), (d), (f) は粘弾性体中の空洞に対する解析結果である. なお, Fig.11 では, 原点中心, 一辺が $6a$ の可視化領域に対し, 特性関数 $\Gamma(\boldsymbol{y})$ をその最大値 $\Gamma_{\max}$ で正規化した値をプロットすることで欠陥像を再構成している. 逆散乱解析に用いた散乱波は, Fig.1 において, $R = 14a$ 上の観測点 $\boldsymbol{x}$ 方向から座標原点 $\boldsymbol{o}$ に向けて, 入射波の空洞に対する散乱解析を行い, その観測点 $\boldsymbol{x}$ において散乱波を受信するといったパルス・エコー法を想定して計算を行う. この一連の計算を, 入射角 $\theta = 5°$ から空洞の全周を取り囲むように, 10° 刻み ($\Delta\theta = 10°$) で計 36 点で行う. このように観測点を欠陥に対して全周に配置した理由は, 4.4 節の考察より, 入射波の欠陥に対する照射面をできるだけ増やすことが, 強散乱体である空洞の再構成精度向上に繋がると考えられるためである. なお, 式 (14) の特性関数 $\Gamma(\boldsymbol{y})$ の計算には, 無次元化波数 ak_{L0} に対して, $0.5 \le ak_{L0} \le 10.0$ の範囲における散乱波を用いて計算を行っており, 無次元化波数の刻みは $\Delta(ak_{L0}) \simeq 0.07$ と設定している. また, Fig.11 中の白色点線は, 正解空洞の境界を表している.

Fig.11 の解析結果より, 粘弾性の影響を受ける場合であっても, 特性関数 $\Gamma(\boldsymbol{y})$ の値は, 空洞境界内部に大きく出ており,

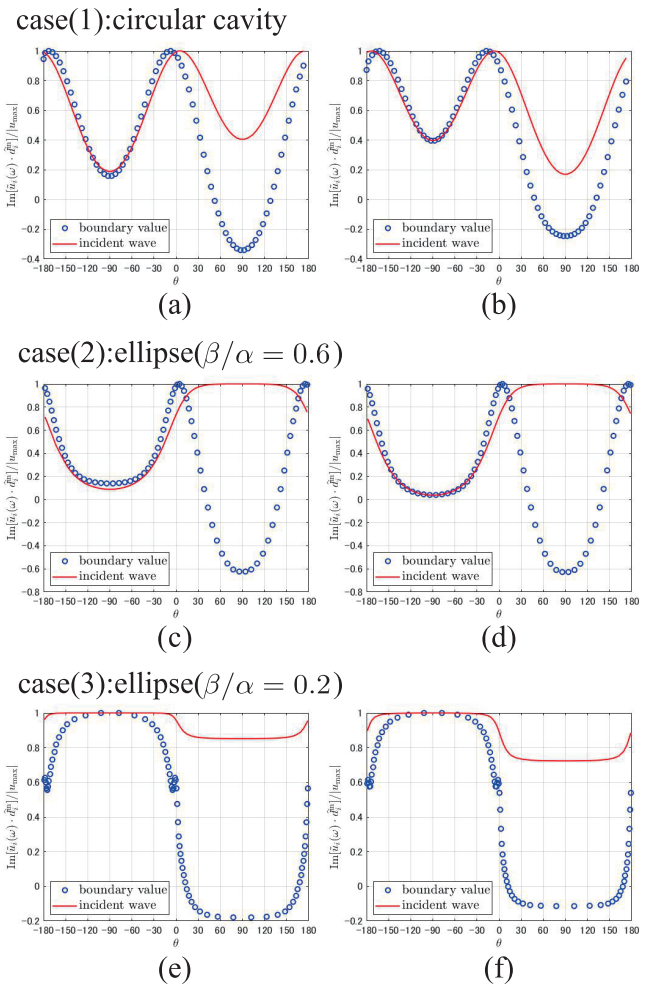


Fig. 10　Imaginary part of boundary and incident wave values on each cavity for case(1)-(3) at non-dimensional wave number $ak_{L0} = 1.25$. (a), (c), (e) an elastic medium and (b), (d), (f) a viscoelastic medium.

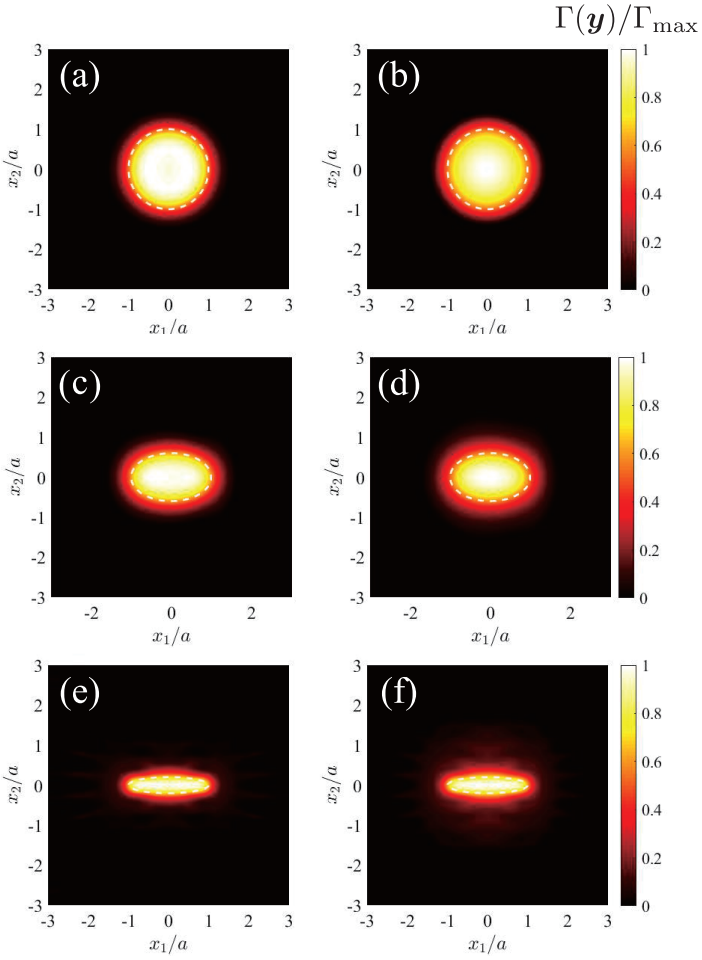


Fig. 11　Shape reconstruction of each cavity for case(1)-(3) in (a), (c), (e) an elastic medium and (b), (d), (f) a viscoelastic medium.

欠陥の位置や形状を概ね再構成出来ている. しかし, 粘弾性を考慮した場合の解析結果では, 仮定した空洞部の外側に特性関数 $\Gamma(\boldsymbol{y})$ の値がやや大きく出ており, その再構成精度が, 等方弾性体の再構成結果と比べて, やや落ちていることが分かる. これは, 粘弾性効果により, 入射波の波長が, 等方弾性体の場合に比べ大きくなったことや, 逆散乱解析に用いた散乱波の高周波成分が減少したことに起因するものであると考えられる. また, Fig.11(e), (f) は, Born 近似の精度が低く見積もられた case(3) の楕円空洞に対する再構成結果であるが, 楕円空洞の外側に, 空洞の位置や形状とは無関係の特性関数 $\Gamma(\boldsymbol{y})$ の値が現れていることが分かる. これは, 前節で議論した, Born 近似の適用性能が低下したことが大きな影響を与えているものと考えられる.

5. おわりに

本論文では, Born 近似を用いた場合の空洞に対する線形化逆散乱解析の適用性について考察した. 基本解の遠方場近似や, 強散乱体である様々な空洞の形状に対する Born 近似の有効性について検討した. また, 等方弾性体と粘弾性体中の様々な形状の空洞に対して逆散乱解析を実行し, 欠陥形状再構成を行った. 解析結果より, 弱散乱体に対して有効である Born 近似を用いたとしても, 強散乱体である空洞の形状が真円に近い場合, 入射波に照射される境界において Born 近似が概ね成立することを示した. よって, 真円空洞のような単純な強散乱体を対象にした場合, 入射波の空洞に対する照射面を増やすことで, 線形化逆散乱解析法により空洞を精度良く再構成できることが確認された. 一方, 空洞の形状が真円と離れ, 長軸の長い楕円に近づく場合, 入射波に照射される境界であっても, Born 近似の精度が低下し, それに伴って空洞の形状再構成精度も低下することを示した. 今後は, 適用性のさらなる検討, 散乱波に計測誤差が含まれる場合の影響, 並びに異方性材料中の強散乱体に対する Born 近似および線形化逆散乱解析法の適用性の検討を行う予定である.

謝辞

本研究の一部は, 令和 2 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (課題番号:jh200052-NAH, 拠点共同研究先:京都大学) および令和 3 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (課題番号:jh210033-NAH, 拠点共同研究先:京都大学, 北海道大学) 並びに科学研究費補助金基盤研究 (B)(20H0223022)

の支援の下，実施されました．

参考文献

(1) Kitahara, M., Nakahata, K. and Hirose, S.: Elastodynamic inversion for shape reconstruction and type classification of flaws, *Wave motion*, **36** (2002), pp. 443–455.

(2) Kimoto, K. and Hirose, S.： A 3D linearized inverse scattering method for scatterers in a two layered medium, *Struct. Eng./Earthq. Eng.,* **22**(2) (2005), pp. 201s–207s.

(3) 中畑和之, 大西正浩, 北原道弘: 線形化逆散乱解析の高速化と欠陥形状再生への適用, 応用力学論文集, **5** (2002), pp. 67–74.

(4) 中畑和之, 北原道弘：計測波形による欠陥形状の再生と使用周波数帯域に関する考察, 応用力学論文集, **3** (2000), pp. 91–98.

(5) 山田真幸, 宮腰寛之: 線形化逆散乱解析法による三次元欠陥形状再構成， 土木学会論文集 A, **64**(1) (2008), pp. 133–141.

(6) Guillermin, R., Lasaygues, P., Sessarego, J.P. and Wirgin, A.: Inversion of synthetic and experimental acoustical scattering data for the comparison of two reconstruction methods employing the Born approximation, *Ultrasonics*, **39** (2001), pp. 121–131.

(7) Furukawa, A., Saitoh, T. and Hirose, S.：Convolution quadrature time-domain boundary element method for 2-D and 3-D elastodynamics analyses in general anisotropic elastic solids, *Eng. Anal. Bound Elem*, **39** (2014), pp. 64–74.

(8) 斎藤隆泰, 稲垣祐生, 下田瑞斗： 異方性弾性体中の欠陥に対する 2 次元逆散乱解析, 非破壊検査, **66**(2) (2017), pp. 84–89.

(9) 斎藤隆泰, 小野寺貴, 古川陽, 廣瀬壮一：純面外波を利用した異方性弾性体中のき裂に対する逆散乱解析, 土木学会論文集 A2(応用力学), **74** (2018), pp. 65–74.

(10) Schanz, M. and Antes, H.: Application of operational quadrature methods in time domain boundary element methods, *Meccanica*, **32**(3) (1997), pp. 179–186.

(11) Fukui, T. and Funato, K.： Time domain boundary element method in anti-plane viscoelastic wave propagation problems, Proc. 7th Japan-China Symp. Boundary Element Methods, M.Tanaka and Z. Yao(eds.), Elsevier, (1996), pp. 47–56.

(12) 竹田晴彦, 斎藤隆泰：演算子積分時間領域境界要素法を用いた粘弾性体中の空洞に対する 3 次元順解析および逆散乱解析, 計算数理工学論文集, **20** (2020), pp. 1–6.

(13) Rose, J.H.: Elastic wave inverse scattering in non-destructive evaluation, *J. Pure Appl. Geophys.*, **131** (1989), pp. 715–739.

(14) Schmerr, L. W.： Fundamentals of ultrasonic nondestructive evaluation, Plenum Press, (1998).

(15) 藤原千織, 永田泰昭, 廣瀬壮一: 異方性厚板鋼に対する超音波探傷試験の遠方場解析, 応用力学論文集, **5** (2002), pp. 881–886.

(16) Hsu, D.K., Rose, J.H. and Thompson, D.O.: Reconstruction of inclusions in solids using ultrasonic Born inversion, *J. Appl Phys.*, **55** (1984), pp. 162–168.

(17) 福井卓雄, 岡山美央, 石田貴之：2 次元波動伝播問題における演算子積分時間領域境界要素法および高速多重極法の適用, 計算数理工学論文集, **6** (2006), pp. 153–158.

(18) 斎藤隆泰, 石田貴之, 福井卓雄, 廣瀬壮一：演算子積分法および高速多重極法を用いた新しい二次元時間領域動弾性境界要素法について, 応用力学論文集, **11** (2008), pp. 193–200.

(19) Lubich, C.: Convolution quadrature and discretized operational calculus I, *Numer. Math.,* **52** (1988), pp. 129–145.

(20) 小林昭一編著: 波動解析と境界要素法, 京都大学学術出版会, (2000).

(21) Saitoh, T., Hirose, S. and Fukui, T.： Convolution quadrature time-domain boundary element method and acceleration by the fast multipole method in 2-D viscoelastic wave propagation, *Theor. appl mech. Japan,* **57** (2009), pp. 385–393.

(22) 斎藤隆泰, 福井卓雄, 廣瀬壮一, 石田貴之 : 粘弾性面内波動問題における演算子積分時間領域境界要素法および高速多重極法の適用，計算工学論文集, 論文番号 No.20080021, (2008).

(23) ファン, Y. C. (大橋義夫, 村上澄男, 神谷紀生 共訳): 固体の力学 / 理論, 培風館, (1970).

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 16-211218 JASCOME

エポキシ樹脂モデルの架橋構造と変形挙動に関する分子動力学的研究

MOLECULAR DYNAMICS STUDY ON DEFORMATION BEHAVIOR AND CROSSLINKED STRUCTURE OF EPOXY RESIN MODELS

西村 正臣 [1)], 中田 政宗 [2)]

Masaomi NISHIMURA and Masamune NAKATA

1) 信州大学学術研究院（工学系） (〒 380-8553 長野市若里 4-17-1, E-mail: nishimu@shinshu-u.ac.jp)
2) 信州大学大学院総合理工学研究科 (〒 380-8553 長野市若里 4-17-1, E-mail: 21w4061d@shinshu-u.ac.jp)

In order to discuss the relationship between crosslinked structure and deformation behavior of epoxy resin, we have performed tensile simulation on epoxy resin models with different conversion degree by the molecular dynamics method. Epoxy resin models are made by crosslinking reaction simulation, in which new bonds are formed between epoxy radicals in DGEBF as a base resin and amines in DETDA as a curing agent. Atomic models with only straight-chains without tertiary amines are also created by control on bonding changes in the crosslinking reaction simulation. Stress responses in the late stage of tensile deformation were different due to crosslinked structure. Stress rises were observed in high conversion models in which more than half of the total molecular was contained in a molecular chain network. Tensile deformation continued at constant flow stresses in low conversion models with only straight-chains. Stress drops were caused by growth of voids during deformation in other models. Then we evaluated non-affine displacement and stress change of molecular chains. Monomers showed lower non-affine displacements than other molecular chains. Crosslinked chains that connect molecular chains played a prominent role in stress rises.

Key Words: Molecular Dynamics Method, Epoxy Resin, Crosslinked structure, Molecular Chains, Tensile Deformation

1. 緒言

エポキシ樹脂などをマトリクス材料とし，炭素繊維を強化材料とした複合材料である炭素繊維強化プラスチック (CFRP) は，軽量かつ高強度，高剛性という優れた特性を持つことから，様々な工業分野で活躍している．複合材料のさらなる性能向上を目指すためには，複合化する前の各材料特性の十分な理解が必要である．高分子材料である樹脂材料は共有結合によりつながれた分子鎖が形作る原子レベルでの複雑な三次元構造によって特性が異なる．直鎖状の分子鎖を基本として分子鎖が複雑に絡まりあったような原子構造を有する熱可塑性樹脂と，分子鎖同士がさらに共有結合によって結びつき網目状の架橋構造と呼ばれるネットワークを形成する熱硬化性樹脂に樹脂材料は大きく分けられる．エポキシ樹脂は後者に分類され，高い架橋密度により優れた力学的特性がもたらされていると考えられている．

樹脂材料の力学特性については，連続体力学に基づいた様々なモデル化がなされているが，近年急速に発展してきた原子シミュレーションにより原子構造をそのままモデル化する試みも多くなされている．原子シミュレーションの一つである分子動力学法では，原子・粒子間の相互作用を各材料の特徴に併せてフィッティングし，数値積分により逐次的に追跡することによって原子構造の動的な変化を把握することができる．力学特性にあまり寄与しない水素などを陽に扱わずにある程度の分子の塊を粒子化して相互作用を考える粗視化モデルによる検討は，計算機負荷が下がることもあって古くから実施されてきた [(1),(2)]．計算機能力が向上した現在でも，扱える粒子数の向上による大規模計算により，空間スケールや時間スケールを広げた解析が実施されている [(3),(4)]．内藤

2021 年 10 月 21 日受付，2021 年 11 月 12 日受理

ら [4] は粗視化モデルで非晶質ポリエチレンを対象として引張シミュレーションを実施することで，分子鎖の絡み合いと変形時の応力変化の関係について検討している．一方，計算機能力の向上により高分子の全原子をモデル化した分子動力学シミュレーションもさらに広く検討されている [5]~[13]．Fujimoto ら [5] はポリカーボネートと PMMA の全原子モデルを対象とした引張シミュレーションを実施することで，変形応答の違いから樹脂材料の延性と脆性の違いを示している．

エポキシ樹脂は，主剤と硬化剤を混ぜ合わせ，熱硬化処理を行うことで用いられる．熱硬化処理の際に，主剤と硬化剤の分子間に結合を作り出す架橋反応が発生して，次々にモノマー分子同士がつながっていくことによって架橋構造と呼ばれる複雑なネットワーク構造を形成する．原子シミュレーションにおいても，架橋反応を模して主剤分子と硬化剤分子からエポキシ樹脂の原子構造がモデル化される．Wu ら [7] は，分子動力学法と静力学的にエネルギー安定化を模擬する分子力学手法を併用することによって，非常に高い架橋反応率のモデルを作成し，密度や弾性係数について検討している．Oya ら [8] は，第一原理計算により得られた活性化エネルギーなどの情報を基に架橋反応を模擬し，分子動力学法によってガラス転移点やヤング率と架橋構造の関係について検討している．

本研究でも，主剤にビスフェノール F ジグリシジルエーテル (DGEBF)，硬化剤にジエチルトルエンジアミン (DETDA) を用いて，架橋反応を模擬することでエポキシ樹脂モデルを作成して，分子動力学法による引張変形シミュレーションを実施する．DGEBF/DETDA を対象とした分子動力学解析も少なくはない．Tack ら [9] は，異なる力場を用いて作成した DGEBF/DETDA に対して密度や体積弾性率の違いなどを示している．Varshney ら [10] は，架橋反応率の異なる DGEBF/DETDA モデルに対して分子鎖長の違いなどを示している．Li ら [12] は，DGEBF/DETDA と DGEBA/33DDS を対象として，架橋反応率を変化させた場合の自由体積の違いなどを示している．Patil ら [13] は，反応分子動力学を用いて DGEBF/DETDA の架橋反応率の違いによる種々の物性値の違いを示すとともに，高架橋密度のモデルと実験結果とを比較している．一方で，これまでの検討の多くはエポキシ樹脂モデルの原子構造の評価に重きを置かれており，力学特性については弾性係数などについて検討されているが，大変形に対する変形挙動を議論した研究は少ない．

そこで本研究では，架橋反応率の異なる DGEBF/DETDA 系の原子モデルを対象として，ひずみ 2.0 までの比較的大きな引張変形を与えることで，架橋構造と変形挙動との関係について検討する．さらに，架橋反応シミュレーションにおいて，分岐を作らずに直鎖状にしか結合を作らないように制限したモデルも解析対象に加えることで，同じ分子量でも架橋ネットワークを有する場合と直鎖状分子鎖による絡み合いしか存在しない場合の違いについて比較検討する．

2. 解析手法

2.1. 分子動力学法

分子動力学法（MD 法）は，系を構成する個々の原子について運動方程式を作成し，これを数値積分することによって全原子の運動を追跡する手法である．本研究では，汎用分子動力学ソフトである LAMMPS を用いる．

原子 i に作用する力 $\mathbf{F}_i$ は系全体のポテンシャルエネルギー E_{tot} の空間座標についての勾配ベクトルから次式のように求められる．

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial E_{\mathrm{tot}}}{\partial \mathbf{r}_i} \tag{1}$$

今回，ポテンシャル関数には有機ポリマーの解析を目的として開発された PCFF(polymer consistent force field)[14] を用いる．PCFF は CFF91[15] を元に，金属，有機ポリマーの解析を目的として開発された力場であり，複数のパラメータによる高精度な解析が期待される．PCFF のポテンシャルエネルギーは，

$$E_{\mathrm{tot}} = E_{\mathrm{bond}} + E_{\mathrm{angle}} + E_{\mathrm{dihedral}} + E_{\mathrm{improper}} + E_{\mathrm{vdW}} \tag{2}$$

と表現され，E_{bond} は結合長，E_{angle} は結合角，E_{dihedral} は二面角，E_{improper} は面外角，E_{vdW} はファンデルワールス力に関する項である．それぞれの関数形に関する詳説については本論文では省略する．

2.2. 原子応力

熱による影響を無視した場合，解析対象となる系全体の応力は以下の式で表される．

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial U}{\partial \eta_{ij}}\right) \tag{3}$$

ここで，U は系の内部エネルギー，V は系の体積，η_{ij} はラグランジュひずみであり，ここでの添え字 i, j は座標軸を意味する．なお，本研究においては，系の温度を低温に設定しているために，U を式 (2) で求まるポテンシャルエネルギーと等しいものとみなせる．

系全体のポテンシャルエネルギーは，各原子の周辺原子との距離や角度に依存した関数であるため，各原子の寄与に分けることが可能である．すなわち，任意の原子 α に関するポテンシャルエネルギー E_α の和として考えることができる．

$$E_{\mathrm{tot}} = \sum_{\alpha} E_\alpha \tag{4}$$

ポテンシャルと同様に，原子 α の位置に生じる原子応力 σ_{ij}^{α} を原子数 N を用いて次式のように定義することで，系全体の応力を原子応力 σ_{ij}^{α} の平均値と対応させることができる．

$$\sigma_{ij}^{\alpha} = \frac{N}{V}\left(\frac{\partial E_\alpha}{\partial \eta_{ij}}\right) \quad , \quad \sigma_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\alpha}\sigma_{ij}^{\alpha} \tag{5}$$

本研究では，エポキシ樹脂を構成する分子鎖の特徴の違いについて検討するために，分子鎖毎に原子応力の平均を評価することで比較する．

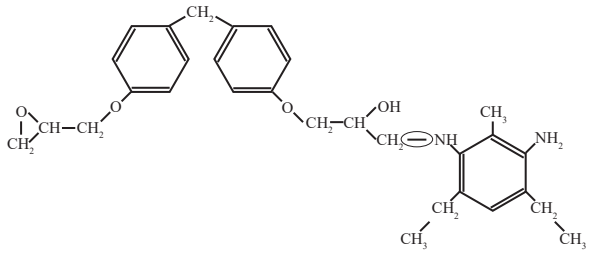


Fig. 1　Crosslink in DGEBF and DETDA.

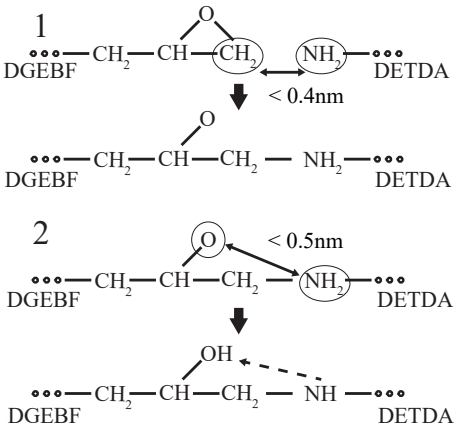


Fig. 2　Process of crosslinking reaction.

3. 解析モデル

3.1. 架橋反応シミュレーション

初期構造モデルとして，960 個の主剤ビスフェノール F ジグリシジルエーテル (DGEBF) 分子と，480 個の硬化剤ジエチルトルエンジアミン (DETDA) 分子を，セル辺長 14nm の周期境界セル内にランダムに配置した．作成した初期構造モデルに対して 500K の下で，体積一定（NVT アンサンブル）の構造緩和を 10ps と，圧力 0 に制御 (NPT アンサンブル) での構造緩和を 20ps 実施した．

初期構造緩和が済んだ構造に対して，架橋反応シミュレーションを実施した．エポキシ樹脂は熱硬化処理を施すことで主剤と硬化剤が架橋反応を起こし Fig.1 に示す結合を作り出し，次々に分子同士が繋がっていくことで，ネットワークのような構造を作り出す．エポキシ樹脂の機械的特性や化学的安定性は架橋構造に影響されるため，MD 法では如何にして架橋構造を再現するのかが重要となる．本研究では，Fig.2 に示すように反応部が一定の距離内に接近した時，結合状態を組み替えるシミュレーションを行うことで架橋反応を再現した．まず，主剤の CH_2 と硬化剤の NH_2 が 0.4nm 以内に接近したときに C 原子と N 原子間での結合を作成し，CH_2 と O の結合を削除する．その後 NH_2 と O が 0.5nm 以内に接近した時に NH_2 の H 原子を O と結合させる．またこの際，範囲内に架橋の選択肢が複数存在する場合はランダムに選択される．

さらに本研究では，架橋ネットワークの有無による違いについて検討することを目的として，架橋反応シミュレーション中に硬化剤の各 N 原子に対して，1 つの架橋結合しか生成できないような制限を加え，3 級アミンが存在しないようなモデルも作成した．制限を加えない場合は，硬化剤中の 2 つの N 原子がそれぞれ 2 つずつ Fig.1 に示す架橋結合を持つ 3 級アミンに変化することで分岐のあるネットワーク構造となる．1 級アミンから 2 級アミンへの変化のみに制限した架橋反応シミュレーションを行うことで，分岐点のない直鎖状の分子鎖構造しか持たない原子モデルとなる．

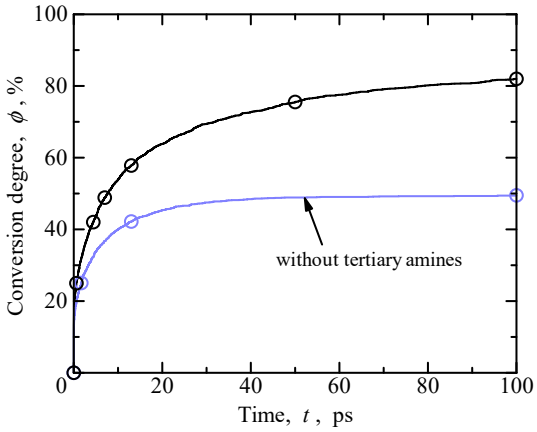


Fig. 3　Conversion degree in crosslinking reaction simulation.

NVT アンサンブルで制御温度を 500K に制御し 100ps の架橋シミュレーションを行った結果として，架橋反応率 ϕ の推移を Fig.3 に示す．ここで，架橋反応率 ϕ とは，主剤に 2 つある反応部 (エポキシ基) に対して硬化剤との結合に変換された割合を意味している．図中の丸印は，変形対象となるモデルを作成した点に相当するが，詳細については次節で説明する．図に示すように，架橋反応シミュレーションを始めると同時に，急激に反応率が上昇しており，近接していた主剤と硬化剤との間に新たな結合が生成されたことがわかる．ある程度結合の生成がなされると，結合ができる範囲内に相手原子が少なくなるために，ϕ の上昇傾向は徐々になだらかになっていき，100ps の時点で約 81%となった．一方，架橋反応を制限して 3 級アミンの生成を抑制したシミュレーションでも，ϕ は上昇していき 49%まで至った．今回の架橋反応率 ϕ は，全主剤のエポキシ基に対する硬化剤との反応割合を意味しているので，硬化剤の反応を制御した場合は，最大で 50%となる．すなわち，$\phi = 49\%$ は，ほぼすべての硬化剤が 2 つの主剤と結合している状態に変化したことを意味している．

3.2. 構造緩和計算

架橋構造の違いについて検討するために，架橋反応シミュレーションにより得られた結果から，構造緩和と制御温度の低下を実施することで，変形解析の対象モデルとした．まず，Fig.3 に印を付けた時点での構造を取り出して，それぞれの構造に対して以下に示す 4 段階のシミュレーションを実施した．第 1 段階目では，制御温度を 500K に維持したまま静水

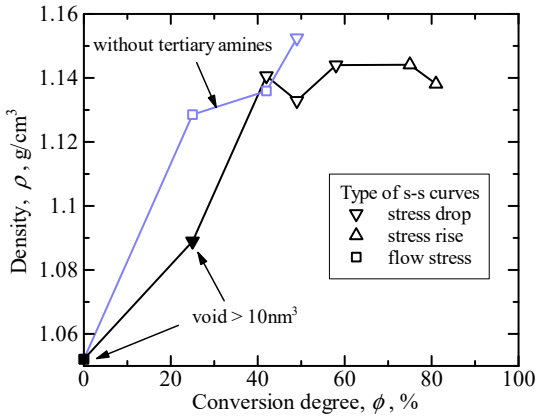


Fig. 4　Relationship between density and conversion degree.

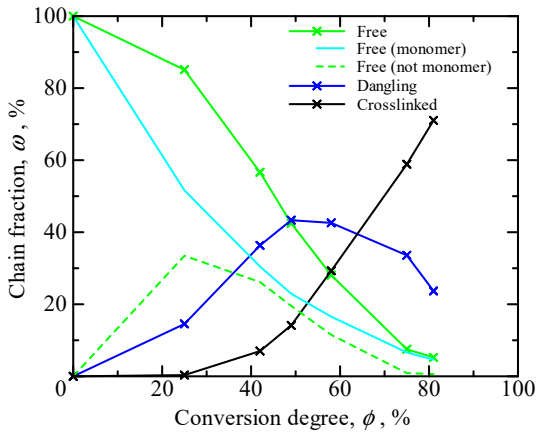
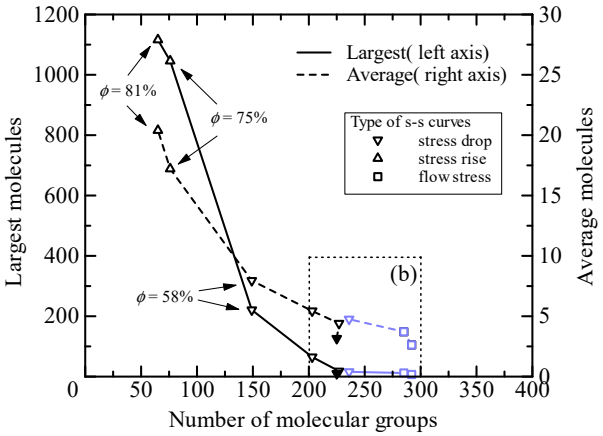
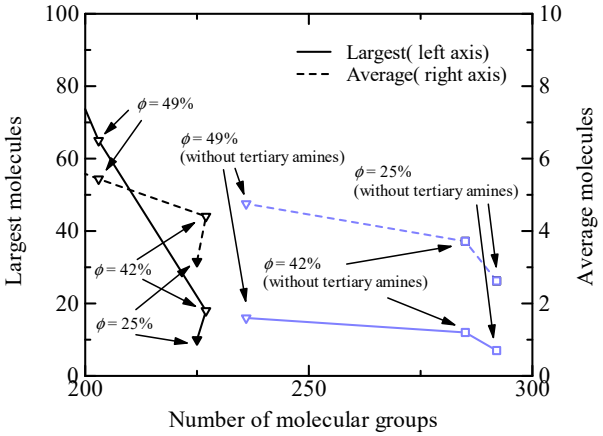


Fig. 5　Fraction of molecular chains.



(a)



(b)

Fig. 6　Connectivity number in molecular groups.

圧応力が 0 になるように 10ps の構造緩和を実施した．第 2 段階目では，各軸方向を独立に制御して各垂直応力が 0 になるように 20ps の構造緩和を実施した．第 3 段階目では，引き続き各垂直応力を 0 に制御したまま 20ps かけて制御温度を 500K から 1K に減少させた．第 4 段階目では，各垂直応力を 0 に制御と制御温度 1K を維持したまま 200ps の構造緩和を行った．なお，3 段階目までは積分時間ステップを 0.1fs として，4 段階目は低温での解析となるので積分時間ステップを 1fs に変更して実施した．

Fig.4 に各モデルの架橋反応率 ϕ と密度 ρ の関係を示す．黒塗りの印で示した $\phi = 0\%$ と $\phi = 25\%$ モデルでは，初期から 10nm^3 以上の比較的大きなボイドが内部に存在していた．ボイドの存在により，他のモデルに比べて極端に密度が低下したと考えられる．一方，大きなボイドが存在しなかったその他のモデルについては，1.14g/cm^3 程度の値となった．架橋反応を制限したモデルでは ϕ の増加に伴い密度も増加しているように見えるが，制限していないモデルでは架橋反応率と密度の相関性は少ない．ただし本シミュレーションでは，モデル作成時に低温に制御温度を下げているために，架橋反応により生成したネットワーク構造によって原子構造の収縮が制限されると考えられ，構造の違いが密度の違いに強く影響して常温での結果とは少し異なる可能性がある．一方，架橋反応を制限したモデルでは，結合によるネットワーク構造は形成されないので，単純に架橋反応率が上昇するほど分子間が密に収縮できるために ϕ と ρ とが比較的相関を持ったのだと考えられる．なお，図中の印については，後に示す引張シミュレーションでの応力ひずみ曲線の変形後期に見られる傾向の違いで分別している．△が応力が急上昇したモデル，▽が応力が急降下したモデル，□がほぼ一定応力で変形が進行したモデル，であり以後もモデルの違いを簡易的に示す場合に用いるものとする．

架橋構造のネットワークについて，分子鎖の違いを Li らの方法 [11] にしたがって評価したのが Fig.5 である．架橋結合によって 3 級アミンとなる N 原子を架橋端点とし，架橋反応していない主剤中のエポキシ基もしくは硬化剤中の 1 級アミンを自由端として考えた場合，自由端—自由端，自由端—架橋端，架橋端—架橋端のいずれかの直線状分子鎖に分けることが可能である．これらの分子鎖を，それぞれ自由鎖 (Free chain)，ダングリング鎖 (Dangling chain)，架橋鎖 (Crosslinked chain) として分別することによって，分子鎖ネットワークの構造の違いを評価している．架橋ネットワー

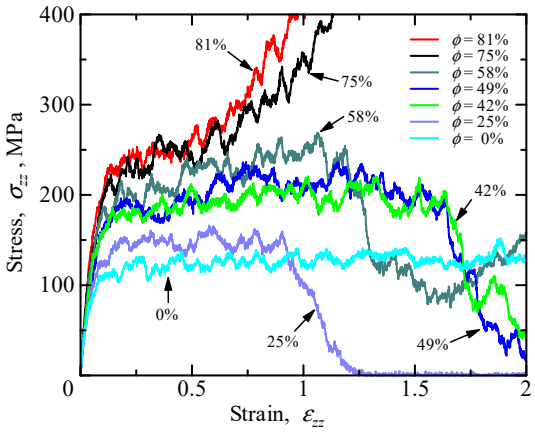
クにおいて，架橋鎖が分子鎖同士を繋ぐ部分であり，ダングリング鎖が構造の末端に位置する．自由鎖はネットワーク構造に含まれない単独の直鎖である．Fig.5 で得られた架橋反応率の違いによる分子鎖構造の割合変化は，Li らの結果 [11] とほぼ一致しており，本研究で得られた架橋構造が MD 法で得られる一般的な構造となっていると判断できる．Li らの結果 [11] では，新たな結合が生成されていない主剤や硬化剤も自由鎖に含めているが，本研究では，これらを単一分子として分けて評価して，自由鎖を分割して評価することとする．なお，架橋反応を制限したモデルでは，3 級アミンが存在しないので，架橋反応率が異なっていてもすべてが自由鎖として判定され，単一分子の割合は制限しない場合とほぼ一致していたので Fig.5 には示さずに省略する．

Fig.5 では，3 級アミンを端点として分子鎖ネットワークを直鎖状に細かく分けることで構造を分類しているが，分けられることによってネットワーク構造全体を把握することは難しくなっている．そこで，架橋構造の繋がりをたどり，一部でも共有結合で連結している分子群を一つのネットワークとして，その数を評価した結果を Fig.6 に示す．Fig.6(a) には，すべてのデータが含まれており，(a) 中の点線での範囲について表示スケールを変えて拡大したものを Fig.6(b) に示す．横軸が，全体の分子群の数を示しており，主剤と硬化剤の分子構造が 2 つ以上連結している分子群の総数に対応する．縦軸については，分子群の中で最も多く分子構造が連結しているものを最大分子連結数として左軸（実線）に示し，分子連結数の平均を右軸（破線）に示す．架橋反応率 ϕ が大きくなるに連れて，分子の連結が多くなるために，全体としての分子群の数が小さくなると同時に，一つのネットワークに含まれる分子連結数が多くなることがわかる．ϕ が 75%以上では最大分子連結数が 1000 を超えており，7 割以上の分子構造が同じ分子鎖ネットワークに属していることとなる．一方で，ϕ が 42%以下では最大が 20 を下回るため比較的短いネットワーク構造が多く分散していることがわかる．また，ϕ =42%と ϕ =25%では，分子群の数がほとんど変わらずに平均連結数が増えていることから，低架橋反応率においては，新しい架橋反応による既存の分子鎖の拡張が主であり，架橋による分子群同士の連結は少ないことが示唆される．また，色を変えて示した 3 級アミンが存在しないモデルでは，架橋による直鎖の分岐が存在しないことから，平均分子連結数は通常モデルと大きく変わらないものの，全体の分子群の数は多くなった．以上より，75%以上のモデルでは，全体の 7 割以上を占める一つの分子鎖ネットワークが構造全体を支配しているのに対して，架橋率が小さくなると細かい分子鎖の相互関係が重要になるものと考えられる．

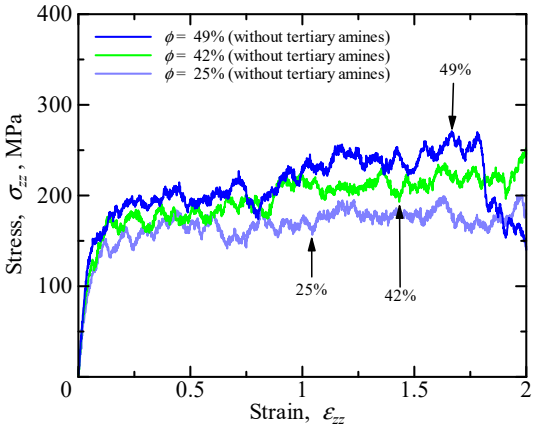
4. 引張シミュレーション

4.1. 解析条件

前章で得られたモデルを対象として，単軸引張シミュレーションを実施した．z 軸方向にひずみ速度が 10^9/s に対応するように，MD 計算ステップ毎に全原子座標を均等に拡げる



(a) Models of $\phi = 0\% \sim 81\%$.



(b) Models of $\phi = 25\% \sim 49\%$ without tertiary amines.

Fig. 7　Stress-strain curves.

ことで引張ひずみを与えた．横方向の x 軸，y 軸については，応力を 0 に制御した．温度は前章の構造緩和計算から引き続き 1K に制御し，積分時間ステップは 1fs とした．

4.2. 解析結果および考察

Fig.7 に引張シミュレーションにより得られた応力ひずみ線図を示す．まず，通常の架橋反応シミュレーションで得られたモデルでの結果に対応する Fig.7(a) にて，架橋反応率の違いによる応力ひずみ曲線の違いを見ると，いずれのモデルにおいても，引張ごく初期に線形的に応力が上昇して，徐々に非線形となり，ひずみ 0.2 程度以降は増減を繰り返すような変化に以降している．線形的な応力増加は，原子間が均一に引き延ばされることで，分子鎖内の共有結合が引き延ばされるとともに，分子鎖間に作用するファンデルワールス引力が生じることによりもたらされる．変形が進むと，分子鎖同士の絡み合いがずれたり，分子間の相対位置が不均一に変化して応力緩和が生じることで，ひずみ増加による応力増加とバランスを取るために，応力一定での変形に移行すると理解できる．さらに本研究では，原子構造の違いと変形応答との関係を明確化するために温度を低くして熱振動などの影響を極力排除しているので，$\phi = 0\%$や 25% のように架橋構造が少ないモデルでも，熱拡散により分子が流体的なふるま

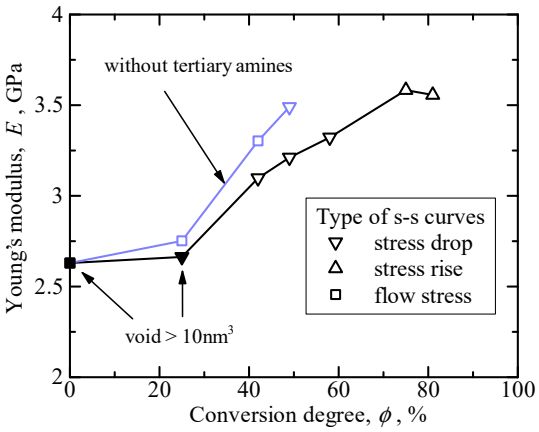


Fig. 8　Young's modulus.

いをすることなく，他のモデルに近い応力応答となったと考えられる．ひずみ 0.5 までの流動応力は，架橋反応率が大きいほど高い値で推移している．さらにひずみを与えることで，モデル毎に応答が大きく異なった．$\phi = 0\%$ では，ほぼ一定の応力のまま引張終了まで至った．$\phi = 75\%, 81\%$ では，ひずみ 0.5 付近から応力増加に転じており，その後も増加し続けて引張終了時においては，それぞれ 1.0GPa，2.1GPa まで達した．その他のモデルでは，$\phi = 25\%, 42\%, 49\%, 58\%$ で，それぞれひずみ 0.8，1.7，1.7，1.2 付近で応力が急減した．Fig.7(b) には，架橋反応を制限して 3 級アミンを含まないようにしたモデルの応答を示す．ひずみ 0.5 付近までの変形初期については，(a) で示したモデルとほぼ同様の傾向を示したが，3 級アミンを含まない $\phi = 25, 42\%$ モデルは，変形後期もほぼ一定応力のまま変形が推移した．$\phi = 49\%$ のモデルにおいては，制限しない架橋モデルと同様にひずみ 1.8 において応力低下が確認された．なお，ここで示した変形後期における引張応答の違いに応じて，Fig.4，6，8 中のマークを変えて示している．

応力ひずみ曲線における $\varepsilon_{zz} = 0 \sim 0.02$ の範囲での最小二乗近似により得られた初期傾きよりヤング率を算出して，架橋反応率との関係を Fig.8 にまとめた．架橋反応率の上昇に伴い，ヤング率も増加する傾向が確認できるが，$\phi = 75\%$ と $\phi = 81\%$ では 81%の方が低くなっており，密度の違いも大小関係に影響していることが示唆される．また，3 級アミンを含まないモデルの方が，高い値を示しているが，これについても，密度の大小関係が影響していると考えられる．一方で，黒塗りで示した初期ボイドを含む $\phi = 0\%, 25\%$ は他モデルとの密度差に比べて，ヤング率に大きな違いが見られなかった．

引張変形下におけるボイドの変化について評価するために，分子が存在しない領域を特定して，変形下における最大ボイド体積の推移として Fig.9 にまとめた．シミュレーションセルを 0.5nm 幅程度の領域に分割して，水素以外の原子が存在しない分割領域をボイド領域とし，隣接する領域がボイド領域であれば同一のボイドとして体積を評価した．$\phi = 0\%$

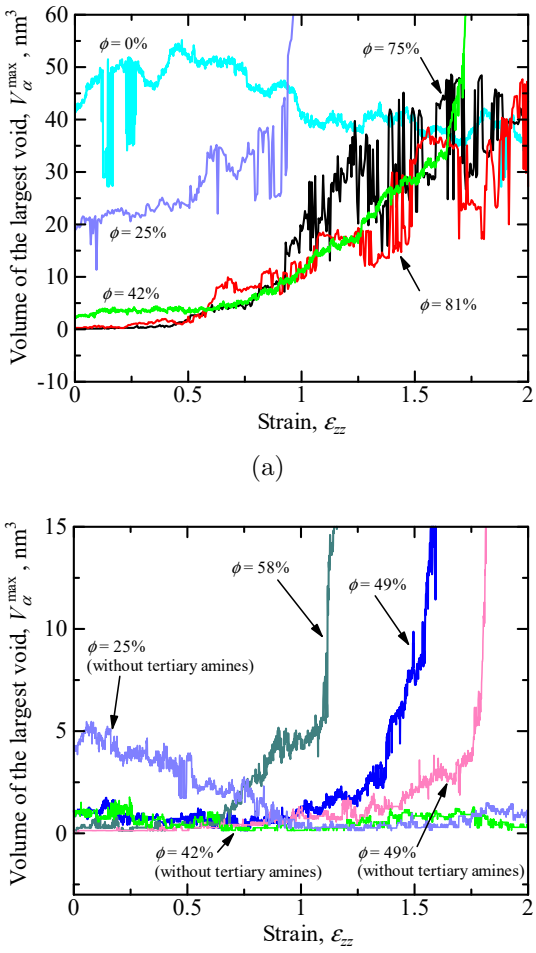


Fig. 9　Volume change of the largest void.

では，初期から最大 42nm^3 程度のボイドが存在しているが，変形中はほとんど体積が変わっていなかった．本解析では，架橋構造と力学特性との直接的な関係を検討するために低温での解析としているので，架橋構造がない $\phi = 0\%$ モデルにおいてはひずみによる均一変形が主となり，ボイドが拡大せずにほぼ一定応力のまま変形が推移したものと考えられる．一方，$\phi = 25\%$ モデルでは初期から最大 20nm^3 程度のボイドが存在しており，ひずみ 0.9 付近からそのボイドが拡大することによって構造全体の破断に至った．$\phi = 42\%$ モデルでは，3nm^3 程度のボイドが変形中に徐々に拡大しており，ひずみ 1.7 あたりでの応力低下と対応してボイドも急拡大した．この 2 モデルでは，初めからあったボイドが拡大することで破断に至っていた．一方，応力が急増した $\phi = 75\%, 81\%$ モデルでは，ボイドがない状態からひずみ 0.5 あたりからボイドが発生している．さらに徐々にボイドの拡大はみられるが，先の 2 モデルのように急拡大することはなかった．

Fig.9(b) には縦軸の範囲を狭めて表示している．応力低下が見られた $\phi = 49\%$ の 2 モデルと $\phi = 58\%$ のモデルでは，変形中に生じたボイドが成長して 10nm^3 程度に達するといずれも急拡大しており，ボイドの急拡大と応力低下が対応していた．一方，3 級アミンを持たない $\phi = 25\%$ モデルでは，

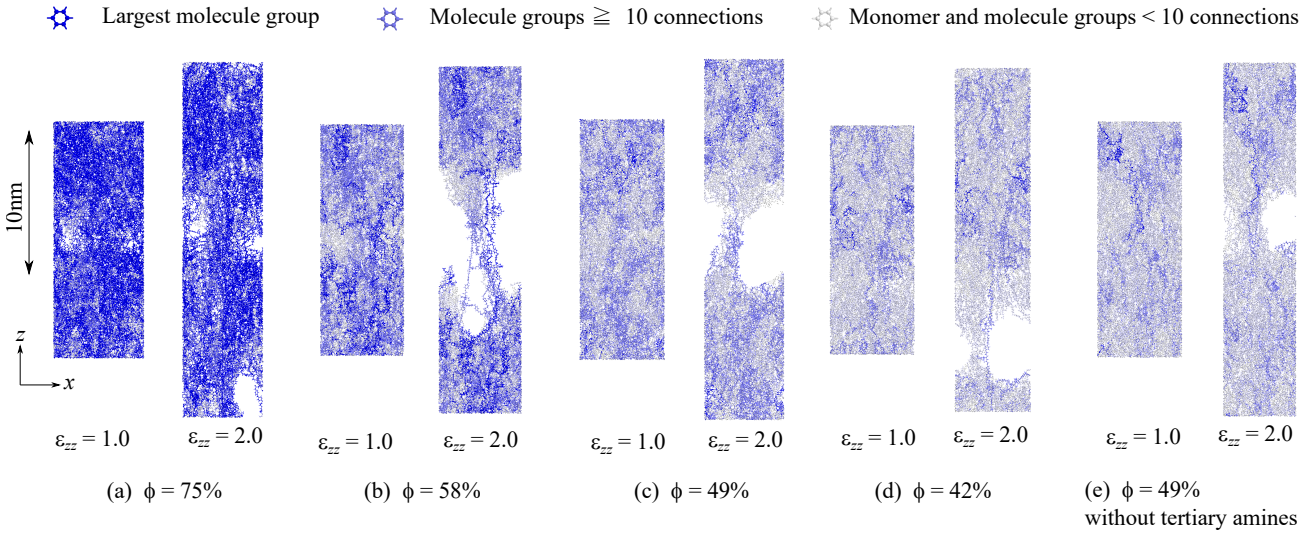


Fig. 10　Atomic structure colored with connectivity number in molecular groups.

初期に 4nm^3 程度のボイドが観察されたが，変形中も拡大することなく，むしろ縮小していた．以上より，ボイドが生成，拡大しないモデルでは，応力低下も応力上昇も生じておらず，変形下でのボイドの変化がエポキシ樹脂の変形挙動を理解する上で重要であることが示唆された．

引張時における原子構造の変化について把握するために，ボイドの拡大が確認されたいくつかのモデルのひずみ 1.0，2.0 における原子構造を Fig.10 に示す．図においては，水素以外の原子と結合を示しており，分子群の連結数の違いにより色を変えて示した．最大の連結数をとる分子群について最も濃く示し，結合数 10 以上の分子群を薄く示し，その他の分子群と単一分子については白で示した．(a) に示した $\phi = 75\%$ モデルでは，Fig.6 に示したとおり，最大分子群が半分以上を占めているので，引張によって濃く示した分子ネットワークが引き延ばされるような状態となっている．ボイドはそのネットワークの隙間として観察されるが，分子鎖ネットワークが密に形成されているので，ある程度ボイドが拡大するとそれ以上は拡大しないと考えられる．(b)〜(e) のモデルについては，いずれも原子構造の図からはひずみ 1.0 の時点ではボイドははっきりとは確認できないが，ひずみ 2.0 においてはボイドが急拡大した結果として，原子が全く存在しない領域が確認され，一部の分子鎖構造で上下がつながっているが，破断に近い状態となっている．ボイドが拡大している位置を，ひずみ 1.0 の時点における原子構造で確認すると，いずれのモデルでも比較的薄い色となっており，分子の連結数が比較的少ない分子群の位置でボイドが生じた可能性がある．

これまでの内容を整理すると，Fig.7 の応力ひずみ曲線から変形後期において応力上昇もしくは応力降下するモデルにおいては，Fig.10 に示すようなボイドの拡大が対応しており，ボイドが急拡大する前の段階からボイドが生成，成長していることが Fig.9 より示唆されている．一方で，$\phi = 0\%$ や 3 級アミンを含まない $\phi = 25\%$ モデルでは，初期にボイドが形成されていてもそれが広がり破断に至ることはなかったため，分子鎖の架橋や絡み合いが少ないモデルでは変形の偏りが少なく，ボイドを成長させるための駆動力が小さいと考えられる．すなわち，ボイドが急拡大する前のボイド生成および成長段階において，分子鎖構造との関係性を見出すことが出来れば，破壊挙動の起点となる構造が見いだせるものと考えられる．そこで，分子鎖を Fig.5 に示したグループ毎に分けて，各分子の非アフィン変位量を評価した．本研究では，全原子について均一ひずみを与えることで変形を与えているので，MD 法の逐次計算よる不均一変形が生じない場合は，完全なアフィン変形となる．そこで，z 軸方向の実際の変位量からアフィン変位分を差し引くことで非アフィン変位量を算出する．具体的には，

$$\Delta r_z = \frac{r_z^{\varepsilon}}{1+\varepsilon_{zz}} - r_z^0 \tag{6}$$

として算出しており，r_z^{ε} が変形中の任意のひずみにおける原子座標，r_z^0 が変形前の原子座標である．式 (6) の非アフィン変位量の二乗を分子鎖毎に平均化して，比較したのが Fig.11 である．Fig.11 では，(a)〜(f) は架橋反応率 81% ～ 25% を示し，Fig.5 に示した分子鎖毎に平均している．一方，(g)〜(i) は 3 級アミンを含まない 49% ～ 25% の結果であるが，これらのモデルではすべてが自由鎖として判定されるので，Fig.6 に示した分子群の連結分子数によって分子鎖を分けて平均化しており，図中 ω_{free} の上付き数字により連結数を表している．なお，各図中にそれぞれのモデルで平均化した分子鎖の割合を示している．いずれのモデルにおいても，ひずみ 0.3 付近までの変形初期においては，分子鎖による違いはほぼ見られず，非アフィン変位量が同じように上昇している．それ以後はモデルにより差異はあるものの，単一分子 (ω_{monomer}) が他の分子鎖グループに比べて増加量が少なくなっている傾向が見て取れる．これは，非弾性的な変形が増すにつれて，

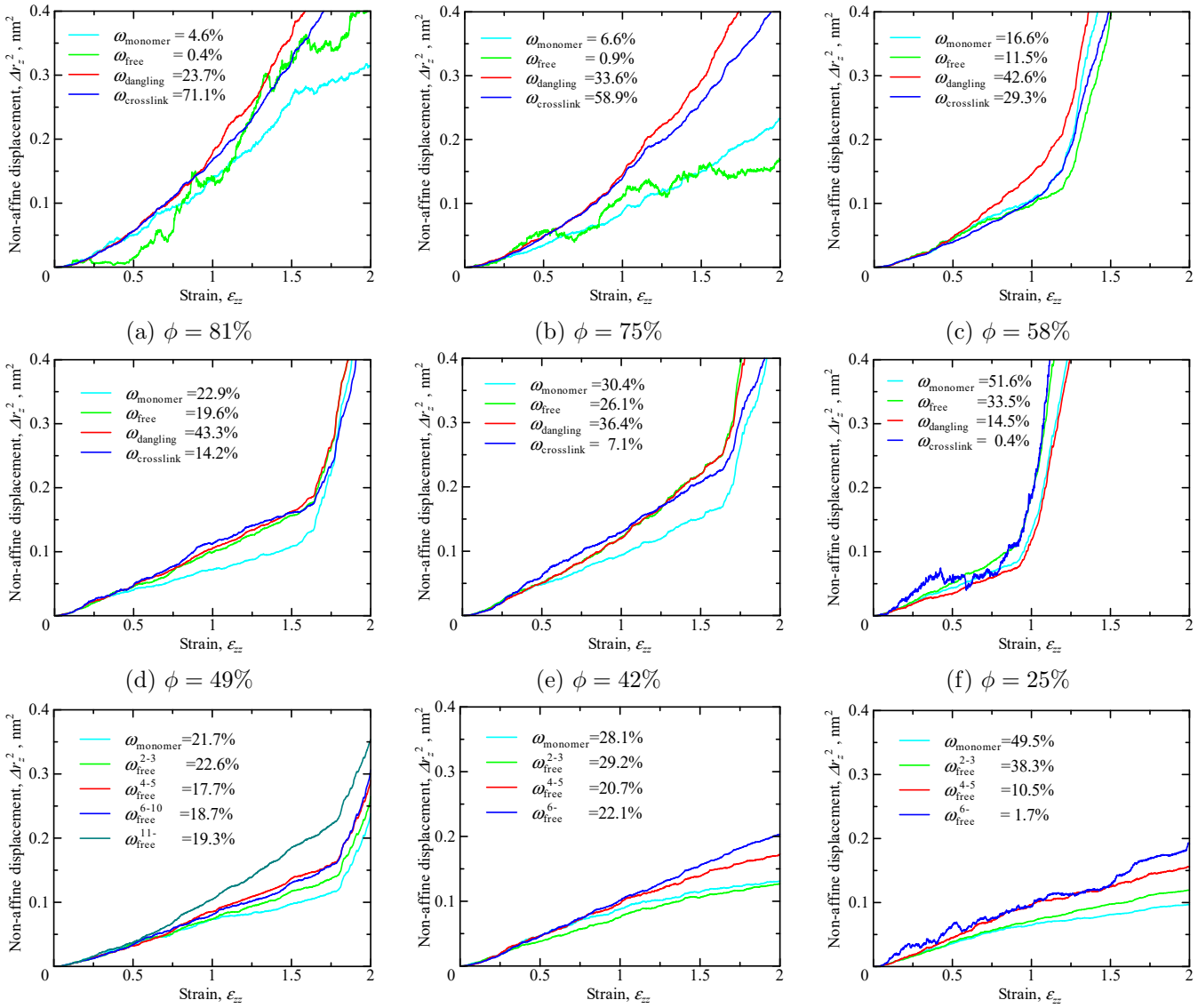


Fig. 11　Non-affine displacement of molecular chains.

分子鎖として他の分子と繋がっている構造の方が連結された分子群からの影響を受けて不均一な変形が生じやすいことを意味している．(a)，(b) を見ると，ひずみ 0.5 以降で架橋鎖とダングリング鎖が大きく上昇しており，他のモデルに比べても非アフィン変位量の増加幅が大きい．Fig.6 に示したように，これらのほとんどが一つの分子鎖ネットワークに含まれているため，ネットワーク構造が引き延ばされることによって不均一性が増し，非アフィン成分が増加したものと理解できる．さらに変形が進行するとダングリング鎖の方が架橋鎖よりも上側に推移しており，ネットワーク構造による不均一変形に加えて一端が拘束されていないことによる自由度の違いが反映されていると解釈できる．次に，応力降下が見られた (c)∼(g) を見ると，応力降下するひずみに対応して非アフィン変位量が急増している．これらは，Fig.10 で見られたようにボイドが急拡大することで，ボイド上下の構造が大きく離れるため，非アフィン成分が急増したためである．ただし，ボイドの生成に関与する急増前の非アフィン変位量を比較しても (c)∼(f) では明確な違いは見い出せなかった．一方，(g) では最も分子鎖の長いグループがひずみ 0.5 以降に他よりも非アフィン変位が増しており，分子鎖の長さと非アフィン変位量の大小関係がほぼ一致していた．(h)，(i) でも同様の傾向が見られるため，3 級アミンを含まず直鎖型のみで構成される構造においては，分子鎖が長いほうが分子鎖同士の絡み合いの影響を受けやすいので，非アフィン変位量が増大すると理解できる．

分子鎖毎の応力変化についても検討するために，先の Fig.11 と同様の分子鎖グループに分けて，式 (5) に示した原子応力を平均して評価した．Fig.12 に分子鎖毎に平均した応力を示す．それぞれの割合に応じて足し合わせると系全体の応力となるので，比較のために系全体の応力も併せて示す．初期構造の違いにより分子鎖毎に評価したときの初期応力には多少のばらつきがあるが，変形初期のひずみ 0.2 程度までは，分子鎖の種類にかかわらず応力が増加しており，構造全体で弾性的な変形が生じていることが示唆される．(a)，(b) におい

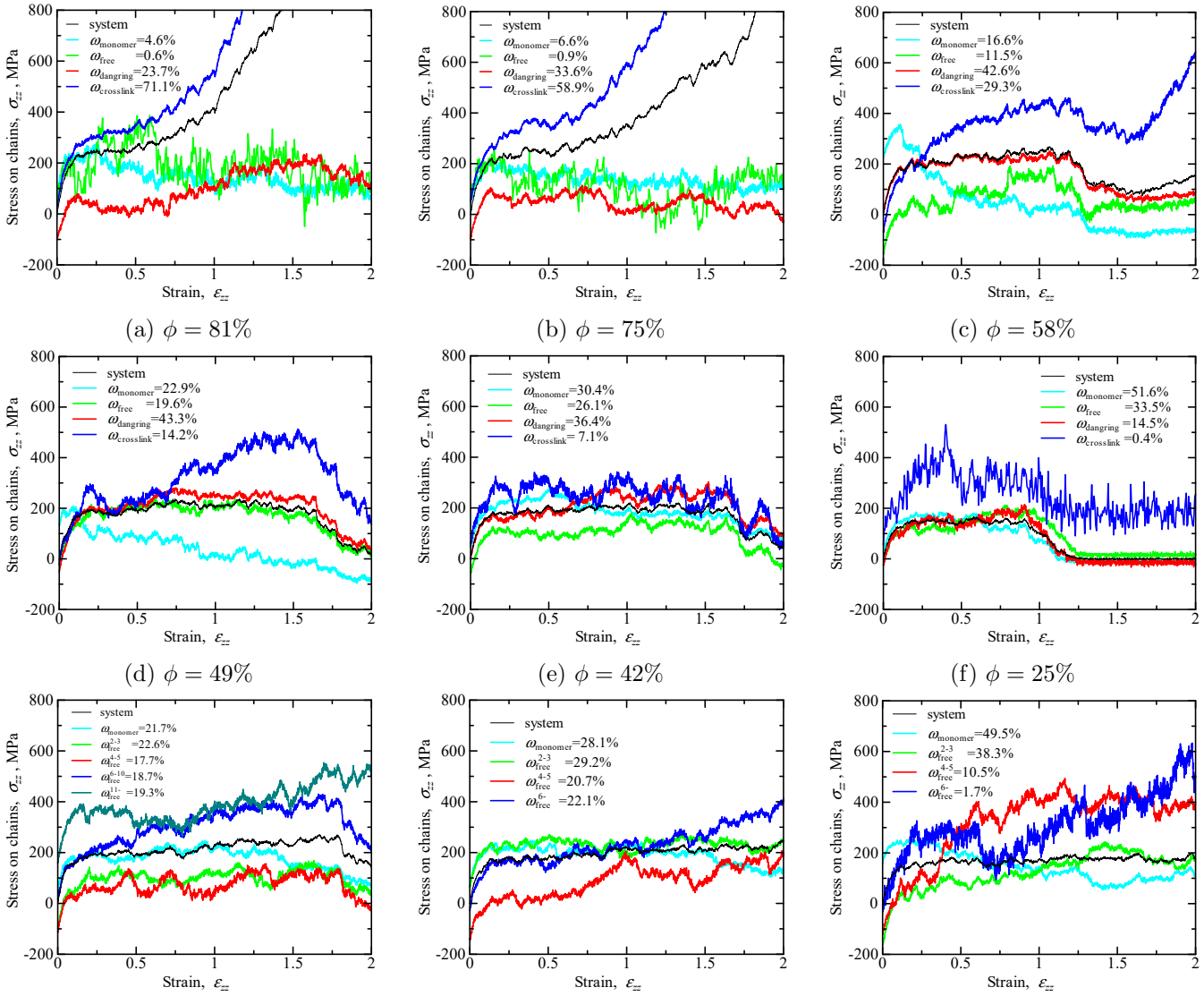


Fig. 12　Stresses on molecular chains.

ては変形後期に系全体の応力が上昇するのに対応して，架橋鎖の応力が上昇しており，その他の分子鎖はほとんど応力が上昇していない．Fig.11 の結果から，架橋鎖とダングリング鎖が同一ネットワークで変形していると示唆されていたが，分子鎖同士をつなぐ役割である架橋鎖が応力上昇のほとんどを担っていることがわかる．(c)，(d) においても，ボイドによる応力低下が生じるまでは架橋鎖の応力が上昇し続けており，架橋によるネットワーク構造が形成されているモデルでは，分子群をつなぐ架橋鎖が引き延ばされることで応力上昇を主に担っていると言える．一方，(e)，(f) では，架橋鎖の応力上昇傾向は見られず，分子鎖割合 $\omega_{crosslink}$ が 10%以下と少ないために十分なネットワーク構造が形成されていないことが示唆される．架橋鎖以外のダングリング鎖と自由鎖の応力変化は，ボイドによる応力低下に連動して応力が低下しているものの，それ以外の応力変化については共通の傾向は見いだせない．(g)~(i) の 3 級アミンを含まないモデルでは，分子連結数が 6 以上の長い直鎖の方が変形中に応力上昇しており，他の分子鎖との絡み合いが架橋構造の架橋鎖のような役割となり，応力上昇を担っていることが示唆される．最後に単一分子（$\omega_{monomer}$）の応力変化傾向を見ると，(c),(d) モデルで比較的早い段階から応力が減少して計全体の応力を大きく下回っている．この 2 つのモデルは Fig.9 で示したように，変形途中にボイド生成されて破断に至ったモデルである．同様に変形途中にボイドが生成されたモデルである (g) のグラフをよく見ると，ボイドによる応力低下が生じるひずみ 1.8 よりも前の段階で単一分子の応力が低下傾向を示し，系の応力から外れていることがわかる．単一分子については，Fig.11 で他の分子鎖からの影響が少ない可能性を示したが，応力も担わない単一分子の出現がボイドの生成に寄与した可能性が示唆される．

5. 結言

本研究では，エポキシ樹脂の架橋構造と変形挙動との関係を検討するために，架橋反応率の異なる原子モデルを対象として分子動力学法による引張シミュレーションを実施した．主

剤としてビスフェノールFジグリシジルエーテル (DGEBF), 硬化剤としてジエチルトルエンジアミン (DETDA) を用いて，主剤のエポキシ基と硬化剤のアミンが一定距離に近づくと新たな結合を形成する架橋反応シミュレーションを実施して解析モデルを作成した．さらに，硬化剤アミンの結合変化を抑制することで，3 級アミンを含まない直鎖状の分子鎖のみで構成されるような原子構造モデルも作成して比較対象とした．作成されたモデルにおいて，架橋反応率が特に低いモデルでは比較的大きなボイドを含んでいたが，架橋反応率に伴う分子鎖構造の分布などは一般的な分子構造モデルと同様の結果が得られた．引張ひずみが 2 に達するまで引張シミュレーションを実施した結果，引張初期においては弾性的な変形から徐々に非線形性が増していき，ひずみ 0.2 以降は一定の応力範囲で増減を繰り返しながら変形が進行した．ひずみ 0.5 以降の変形後期における応力応答は大きく 3 つの傾向に分類された．架橋反応率が高く全体の分子構造の半分以上が一つの分子鎖ネットワークに含まれるようなモデルでは応力が上昇し続けた．架橋反応率が 0%と直鎖状の分子鎖構造しか持たずに架橋反応率が 42%以下のモデルにおいては，ひずみ 0.5 以降も一定の流動応力のまま変形が進行した．それ以外の，架橋反応率が低いモデルと直鎖構造モデルの中で最大架橋反応率のモデルでは，初期からのボイドが拡大するか，変形途中にボイドが成長して，破断が生じることにより応力低下が確認された．分子鎖の種類によって非アフィン変位量や応力変化を検討したところ，単一分子は他の分子鎖構造に比べて非アフィン変位量が少ないこと，直鎖状のみの構造では分子鎖の連結数が多くなるほど非アフィン変位量が大きくなること，架橋反応率が高くネットワーク構造が形成されているモデルでは分子鎖同士を繋ぐ架橋鎖が応力上昇の多くを担っていること，変形途中にボイドが生成されるモデルにおいては単一分子の応力が変形中に低下傾向を示すこと，などが明らかとなった．ただし，変形下におけるボイド生成と分子鎖構造との関係については明確になっていないため，引き続き詳細な検討が必要である．また，今回のモデルでは一部で初期からボイドを含むモデルが存在したが，架橋反応条件やモデル作成条件を改善して初期ボイドが少ないモデルを作成したうえで，今回得られた分子鎖構造と変形応答との関係が普遍性のある結果であるかを評価することを今後の課題としたい．

6. 謝辞

本研究は，JST，未来社会創造事業，JPMJMI19C3 の支援を受けたものである．ここに記して謝意を表する．

参考文献

(1) J. Rottler, M. O. Robbins：Growth, microstructure, and failure of crazes in glassy polymers， Physical Review E， **68** (2003)， No. 011801.

(2) K. Yashiroa, T. Ito, Y. Tomita ：Molecular dynamics simulation of deformation behavior in amorphous polymer: nucleation of chain entanglements and network structure under uniaxial tension，International Journal of Mechanical Sciences， **45** (2003)，pp. 1863–1876.

(3) A. Kubo, J. M. Albina, Y. Umeno ：Construction of master yield stress curves for polycarbonate: A coarsegrained molecular dynamics study， Polymer， **177** (2019)，pp. 84–90.

(4) 内藤圭史，落合優介，坪井伶以，二村晟平，屋代如月：非晶質ポリエチレンの強度に対し分子鎖長および分子鎖絡み合いの及ぼす影響:分子動力学および第一原理計算による解析，Journal of Fiber Science and Technology， **76** (2020)，pp. 268–274.

(5) K. Fujimoto, Z. Tang, W. Shinoda, S. Okazaki ：All-atom molecular dynamics study of impact fracture of glassy polymers. I: Molecular mechanism of brittleness of PMMA and ductility of PC，Polymer，**178** (2019)，No. 121570.

(6) Z. Tang, K. Fujimoto, S. Okazaki ：All-atom molecular dynamics study of impact fracture of glassy polymers. II: Microscopic origins of stresses in elasticity, yielding, and strain hardening，Polymer，**207** (2020)，No. 122908.

(7) C. Wu, W. Xu ：Atomistic molecular modelling of crosslinked epoxy resin，Polymer，**47** (2006)，pp. 6004–6009.

(8) Y. Oya, M. Nakazawa, K. Shirasu, Y. Hino, K. Inuyama, G. Kikugawa, J. Li, R. Kuwahara, N. Kishimoto, H. Waizumi, M. Nishikawa, A. Waas, N. Odagiri, A. Koyanagi, M. Salviato, T. Okabe ：Molecular dynamics simulation of cross-linking processes and material properties for epoxy resins using first-principle calculation combined with global reaction route mapping algorithms， Chemical Physics Letters， **762** (2021)，No. 138104.

(9) J. L. Tack, D. M. Ford ：Thermodynamic and mechanical properties of epoxy resin DGEBF crosslinked with DETDA by molecular dynamics，Journal of Molecular Graphics and Modelling，**26** (2008)，pp. 1269–1275.

(10) V. Varshney, S. S. Patnaik, A. K. Roy, B. L. Farmer ：A molecular dynamics study of epoxy-based networks: Cross-linking procedure and prediction of molecular and material properties，Macromolecules，**41** (2008)，pp. 6837–6842.

(11) C. Li, A. Strachan ：Evolution of network topology of bifunctional epoxy thermosets during cure and its relationship to thermo-mechanical properties: A molecular dynamics study，Polymer，**75** (2015)，pp. 151–160.

(12) C. Li, A. Strachan：Free volume evolution in the process of epoxy curing and its effect on mechanical properties，Polymer，**97** (2016)，pp. 456–464.

(13) S. U. Patil, S. P. Shah, M. Olaya, P. P. Deshpande, M. Maiaru, G. M. Odegard ：Reactive molecular dynamics simulation of epoxy for the full cross-linking process, ACS Applied Polymer Materials, (2021), in press.

(14) H. Sun ：Compass: An ab initio force-field optimized for condensed phase applications-Overview with details on alken and benzene compounds, Journal of Physical chemistry B, **102** (1998), pp. 7338–7364.

(15) H. Sun, S. J. Mumby, J. R. Maple, A. T. Hagler ：An ab Initio CFF93 all-atom force field for polycarbonates, Journal of the American Chemical Society, **116** (1994), pp. 2978–2987.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月)，論文 No. 17-211218 JASCOME

トーラスと同相な完全導体による電磁波動散乱問題に対する選点法を用いたisogeometric境界要素法における Calderónの前処理について

On Calderón's preconditioner for isogeometric boundary element methods using collocation for electromagnetic wave scattering problems with a PEC homeomorphic to a torus

田原 寛太 [1)]，新納 和樹 [2)]

Kanta TAHARA and Kazuki NIINO

1) 京都大学情報学研究科 (〒 600-8501 京都市左京区吉田本町)
2) 京都大学情報学研究科 (〒 600-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: niino@i.kyoto-u.ac.jp)

The Calderón preconditioner for the isogeometric BEM (boundary element method) discretised with the collocation for Maxwell's equations is investigated in this paper. The Calderón preconditioning for the EFIE with the Galerkin method in general requires the use of the dual basis function, which causes much computational time. We show that the dual basis function in the isogeometric BEM can be introduced in the same way as the original basis function, and that the computational time of a matrix corresponding to the EFIO (Electric field integral operator) discretised with the dual basis function is as much as that with the original basis function. With some numerical examples, we verify that matrices preconditioned with the proposed method are well-conditioned.

Key Words: Isogeometric boundary element method, Calderón preconditioner, EFIE, collocation

1. 序論

Maxwell 方程式に対する境界積分方程式の一つである EFIE (Electric Field Integral Equation)[(1)] は，最も単純な定式化の一つとしてこれを用いた数値解法が広く研究されている．EFIE は離散化した際の線型方程式の係数行列に対応する作用素が悪条件であるため，この線型方程式を反復解法で解く際に反復回数が増加する原因となることが知られている．この問題の解決策として Calderón の前処理 [(2)] が知られているが，EFIE に素朴に Calderón の前処理を適用すると離散化が破綻することが知られており，これを回避するために多くの研究では，EFIE の離散化に通常用いられる基底関数である RWG (Rao-Wilton-Glisson) 基底 [(3)] に加えて，その双対基底である BC (Buffa-Christiansen) 基底 [(4)] を用いて離散化を行う．BC 基底は，RWG 基底を定義する三角形メッシュをさらに分割したメッシュ上で定義されるため，自由度が増加することでより多くの計算時間が必要になる問題がある [(5)]．我々のグループでは四角形メッシュで領域境界を近似し，roof-top 関数を基底関数とすることで双対基底も roof-top 関数となることを示した [(6)] が，この場合も双対基底の計算にメッシュの再分割が必要である．

一方，EFIE に限らず Maxwell 方程式に対する積分方程式の離散化において，領域境界を三角形メッシュで近似しその上で RWG 基底を導入した上で素朴な選点法を考えると，自然な選点がメッシュの辺の中点となり積分作用素が発散するため，選点法が適用できないことが知られている．我々のグループでは境界要素法と isogeometric 解析を組み合わせることで境界を滑らかに近似でき，これによって EFIE を選点法で離散化できることを示した [(7)]．

本研究では isogeometric 解析において選点法で離散化された EFIE に Calderón の前処理を適用する方法について論ずる．isogeometric 解析における EFIE では B-spline 関数のテンソル積で表される基底関数を用いるが，その双対基底も異なるメッシュ上での同じ基底関数で表される．特に最低次の B-spline 関数による基底関数は roof-top 関数に一致するため，isogeometric 解析における双対基底は roof-top 関数の

2021 年 10 月 25 日受付，2021 年 11 月 25 日受理

双対基底の拡張にあたることを示す．さらにこの方法では双対基底によって離散化された行列の計算のために，メッシュの再分割は必要なく，自由度を増加させずに係数行列を計算できることを示す．

本稿の構成は以下のとおりである．第 2 節では，提案手法を議論するための予備的な定式化として isogeometric 解析を用いた選点法による EFIE の離散化について述べる．第 3 節では，isogeometric 境界要素法における Calderón の前処理と双対基底について述べる．その後第 4 節で数値例を示し，第 5 節で結論と今後の課題について述べる．

2. 予備的な定式化

2.1. 電磁波動散乱問題及び積分方程式

領域 Ω^- は滑らかな境界 $\Gamma = \partial\Omega^-$ を持つトーラスに同相な領域とし，$\Omega^+ = \mathbb{R}^3 \backslash \overline{\Omega^-}$ とする．Ω^- を占める完全導体による周波数域における散乱問題を考える:

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = \mathrm{i}\omega\mu\boldsymbol{H}, \quad \nabla \times \boldsymbol{H} = -\mathrm{i}\omega\varepsilon\boldsymbol{E} \quad \text{in}\,\Omega^+,$$
$$\boldsymbol{E}^+ \times \boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on}\,\Gamma,$$
$(\boldsymbol{E}^{\mathrm{sca}}, \boldsymbol{H}^{\mathrm{sca}}) = (\boldsymbol{E} - \boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}, \boldsymbol{H} - \boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}})$ に対する放射条件.

ここに $\boldsymbol{n}$ は Γ 上 Ω^- から見た外向き単位法線ベクトル，ω は周波数，ε, μ はそれぞれ Ω^+ における誘電率と透磁率，$\boldsymbol{E}^+$ は Ω^+ における $\boldsymbol{E}$ の境界 Γ 上への極限，$(\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}, \boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}})$ は与えられた入射波，$(\boldsymbol{E}^{\mathrm{sca}}, \boldsymbol{H}^{\mathrm{sca}})$ は散乱波である．

この問題に対応する境界積分方程式の定式化の一つとして，以下の EFIE が知られている:

$$\mathrm{i}\omega\mu Q\boldsymbol{j} = \boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}} \times \boldsymbol{n} \tag{1}$$

ここに $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{H}^+$ は表面電流，

$$Q\boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{n} \times \int_\Gamma \left(1 + \frac{\nabla\nabla}{k^2}\right) G(x,y)\boldsymbol{\phi}(y)\mathrm{d}S_y, \tag{2}$$
$$k = \omega\sqrt{\varepsilon\mu},$$
$$G(x,y) = \frac{\mathrm{e}^{ik|x-y|}}{4\pi|x-y|},$$

また，$\boldsymbol{H}^+$ は Ω^+ における $\boldsymbol{H}$ の境界 Γ 上への極限である．

2.2. B-spline 関数による散乱体形状の表現

isogeometric 境界要素法を導入する準備として，散乱体境界 Γ を B-spline 関数で表現する．$D = (0,1] \times (0,1]$ とし，D にデカルト座標 s_I, $(I = 1,2)$ を導入する．s_I 軸上に節点 $0 = s_I^0 < s_I^1 < \cdots < s_I^{n_I} = 1$ を設け，$s_I^{-i} = s_I^{n_I - i} - 1$, $s_I^{n_i+i} = s_I^i + 1$ とする $(i = 1,2)$．一般に節点 $t_0 \le t_1 \le \cdots \le t_{p+1}$ を有する p 次 B-spline 関数を $B_p(t : t_0, t_1, \cdots, t_{p+1})$ と書き，幾何形状を表現する基底関数を次のように取る:

$$\begin{aligned}&\phi^{ij}(s_1, s_2)\\ =&B_2(s_1 : s_1^{i-2}, s_1^{i-1}, s_1^i, s_1^{i+1})B_2(s_2 : s_2^{j-2}, s_2^{j-1}, s_2^j, s_2^{j+1})\\ &(0 \le i \le n_1 + 1, 0 \le j \le n_2 + 1)\end{aligned}$$

これらの基底の Greville 座標

$$(s_1^{ig}, s_2^{jg}) = \left(\frac{s_1^{i-1} + s_1^i}{2}, \frac{s_2^{j-1} + s_2^j}{2}\right)$$

において，Γ 上の点 x^{ij} を通る条件

$$x^{ij} = \sum_{k=1}^{n_1}\sum_{j=1}^{n_2} \phi^{kl}(s_1^{ig}, s_2^{jg})\hat{x}^{kl} \quad (1 \le i \le n_1, 1 \le j \le n_2) \tag{3}$$

を $\hat{x}^{kl}$ について解く．求まった $\hat{x}^{kl}$ より B-spline 関数で表現される Γ の近似式は，$s_1^{i-1} \le s_1 \le s_1^i$, $s_2^{j-1} \le s_2 \le s_2^j$ を満たす (s_1, s_2) に対して

$$x(s_1, s_2) = \sum_{k=i-1}^{i+1}\sum_{l=j-1}^{j+1} \phi^{kl}(s_1, s_2)\hat{x}^{kl} \tag{4}$$

で与えられる．但し，この式において $1 \le k \le n_1, 1 \le l \le n_2$ を満たさない k と l については，それぞれ $\bmod n_1, \bmod n_2$ の意味で取ることとする．

2.3. isogeometric 解析

本稿では未知関数 $\boldsymbol{j}$ を B-spline 関数を用いて補間する．幾何学量については C^1 級であることのみを要求する．Buffa ら [8] によると，Γ 上の $H_{\mathrm{div}}^{-\frac{1}{2}}$ に属する関数 $\boldsymbol{j}$ は

$$\boldsymbol{j}_i(y) \approx \sum_\alpha \frac{1}{J}\frac{\partial y_i}{\partial s_I} N_I^\alpha(s) j^\alpha$$

の形に離散化できる．ここに N_I^α, $(I = 1,2)$ は D 上の $H_{\mathrm{div}}^{-\frac{1}{2}}$ の基底（I がベクトル添字）であり，

$$(B_p(s_1) \times B_{p-1}(s_2), B_{p-1}(s_1) \times B_p(s_2))$$

の形を有する．ここに $B_p(s)$ は s に関して周期 1 の p 次周期 B-spline 関数 $(p \ge 1)$ である．また α はこのような基底関数の通し番号，$j^\alpha \in \mathbb{C}$ は係数である．また，幾何形状 $y(s_1, s_2)$ は $(s_1, s_2) \in D$ についてそれぞれ周期 1 の C^1 級周期関数であり，

$$J = \sqrt{\left|\frac{\partial y}{\partial s_1} \times \frac{\partial y}{\partial s_2}\right|}$$

は Jacobian である．なお特に断らない限り，大文字，小文字の添字について，それぞれ範囲 2, 3 の範囲で総和規約を適用する．

本稿では $p = 2$ とする．その結果 N_I^α は

$$\alpha = 2((i-1)n_2 + j) - 1$$
$$N_1^\alpha(s_1, s_2) = B_2(s_1 : s_1^{i-2}, s_1^{i-1}, s_1^i, s_1^{i+1})B_1(s_2 : s_2^{j-1}, s_2^j, s_2^{j+1})$$
$$N_2^\alpha(s_1, s_2) = 0$$

となるもの（Fig. 1 の黒矢印）と，

$$\alpha = 2((i-1)n_2 + j)$$
$$N_1^\alpha(s_1, s_2) = 0$$
$$N_2^\alpha(s_1, s_2) = B_1(s_1 : s_1^{i-1}, s_1^i, s_1^{i+1})B_2(s_2 : s_2^{j-2}, s_2^{j-1}, s_2^j, s_2^{j+1})$$

となるもの（Fig. 2 の黒矢印）に分けられる． それぞれの図において，四角形の頂点が格子点 s_I^i に対応しており，それぞれの基底関数の台は図に示した 6 つの四角形である．し

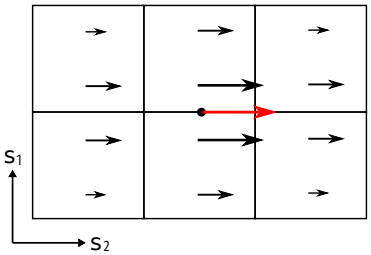


Fig. 1　A basis function directing s_1 direction. Six squares are support of the basis function. Circular dot indicates the collocation point. Red arrow shows the direction in which the boundary integral equations are evaluated at the collocation point.

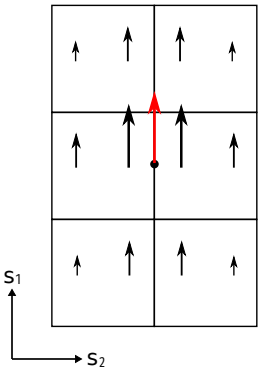


Fig. 2　A basis function directing s_2 direction. Six squares are support of the basis function. Circular dot indicates the collocation point. Red arrow shows the direction in which the boundary integral equations are evaluated at the collocation point.

たがって EFIE（式 (1)）を選点法で離散化する場合，選点を Fig. 1 の黒点に対応する点

$$\left(\frac{s_1^{i-1}+s_1^i}{2}, s_2^j\right) \quad (1 \le i \le n_1,\ 1 \le j \le n_2), \tag{5}$$

及び Fig. 2 の黒点に対応する点

$$\left(s_1^i, \frac{s_2^{j-1}+s_2^j}{2}\right) \quad (1 \le i \le n_1,\ 1 \le j \le n_2), \tag{6}$$

とし，図中の赤矢印に対応する Γ 上の接ベクトルを $\boldsymbol{t}$ として，

$$\mathrm{i}\omega\mu(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t})\cdot(Q\boldsymbol{j}) = (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t})\cdot(\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}\times\boldsymbol{n}) \tag{7}$$

をそれぞれの選点において評価することが自然であることがわかる [7]．これにより式 (1) の EFIE は以下の代数方程式に帰着される．

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \tag{8}$$

ここに

$$(A)_{mn} = \mathrm{i}\omega\mu(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m)\cdot\left(Q\left(\frac{1}{J}\frac{\partial\boldsymbol{y}}{\partial s_I}N_I^n\right)\right)(x_m), \tag{9}$$

$$(\boldsymbol{x})_n = j^n,$$

$$(\boldsymbol{b})_m = (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m)\cdot(\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}(x_m)\times\boldsymbol{n}),$$

$(\cdot)_{mn}$ は行列の (m,n) 要素，$(\cdot)_m$ はベクトルの第 m 要素，x_m は m 番目の選点，$\boldsymbol{t}_m$ は選点 x_m におけるベクトル $\boldsymbol{t}$ に対応するベクトルであり，

$$\boldsymbol{t}_m = \begin{cases} \frac{\partial x}{\partial s_1} & \text{if } x_m = x\left(\frac{s_1^{i-1}+s_1^i}{2}, s_2^j\right) \\ \frac{\partial x}{\partial s_2} & \text{if } x_m = x\left(s_1^i, \frac{s_2^{j-1}+s_2^j}{2}\right) \end{cases} \tag{10}$$

である．

3. isogeometric 境界要素法における Calderón の前処理

3.1. Calderón の公式

式 (2) で定義された作用素 Q は以下の Calderón の公式

$$k^2Q^2 = -\frac{1}{4}\mathcal{I} + \mathcal{K}$$

を満たす [9]．ここに $\mathcal{I}$ は単位作用素，$\mathcal{K}$ はコンパクト作用素である．これより k^2Q^2 は単位作用素の定数倍にコンパクト作用素を除いて等しいので，線形方程式の求解に反復法を用いる際，式 (1) を直接離散化して解くよりも，EFIE の両辺に $-\mathrm{i}\omega\varepsilon Q$ を乗じた式

$$k^2Q^2\boldsymbol{j} = -\mathrm{i}\omega\varepsilon Q(\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}\times\boldsymbol{n}) \tag{11}$$

を離散化した式を解く方が反復回数を削減できることが期待される．

3.2. Calderón の前処理の離散化

式 (11) の離散化を考察するために，式 (9) で定義された行列 A と作用素 Q の関係について考察する．行列 A を線形写像と見なしたときの定義域のベクトル空間は，$H_{\mathrm{div}}^{-\frac{1}{2}}(\Gamma)$ の基底関数

$$\frac{1}{J}\frac{\partial\boldsymbol{y}}{\partial s_I}N_I^n \tag{12}$$

の係数を並べたベクトルの集合と見なすことができる．実際，

$$\boldsymbol{j} = \sum_n \frac{1}{J}\frac{\partial\boldsymbol{y}}{\partial s_I}N_I^n j^n$$

とし，基底関数の係数を並べたベクトルを $\boldsymbol{x}$, $((\boldsymbol{x})_n = j^n)$ とすると，

$$(A\boldsymbol{x})_m = (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m)\cdot(\mathrm{i}\omega\mu Q\boldsymbol{j})(x_m)$$

となり，ベクトル $A\boldsymbol{x}$ の第 m 成分は，ベクトル場 $\mathrm{i}\omega\mu Q\boldsymbol{j}$ の選点 x_m における値の $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m$ 方向成分である．したがって作用素 Q^2 に対応する行列を，行列 A から構成するためには，あるベクトル場の選点 x_m における $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m$ 方向成分を並べたベクトルを，同じベクトル場を基底関数で補間した際の係数を並べたベクトルに変換する変換行列が必要である．また $A\boldsymbol{x}$ は選点 x_m 上の $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m$ 方向成分に対応するが，選点 x_m を台の中心に持つ基底関数 (12) は直交方向である $\boldsymbol{t}_m$ 方向に向いているため，$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m$ 方向に向いた新たな基底を導入するのが自然である．

以上の考察より，Q^2 の離散化として以下のような方法を提案する．まず選点 x_m 上で $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m$ 方向を向いた基底関数を導入するために，Fig. 3 の様に元のメッシュ(図中黒点線)

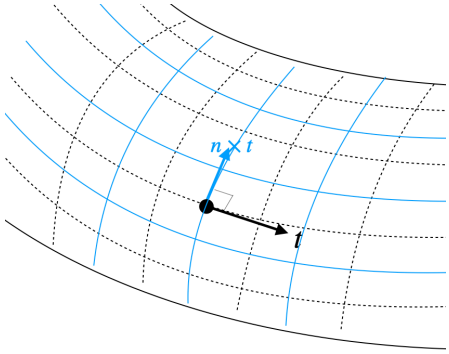


Fig. 3　The boundary Γ decomposed with the original mesh (black dotted lines) and the mesh for dual basis function (blue lines).

を半分ずらしたメッシュ(図中青線) を構成する．これは式 (3) で $\widehat{x}^{kl}$ を決定するための選点 x^{ij} を変更するのみで実現できる（具体的な方法は 4 節で述べる）．このようにして得られた幾何形状を $\widehat{\boldsymbol{y}}$ とし，この上で定義される基底関数

$$\frac{1}{J}\frac{\partial \widehat{\boldsymbol{y}}}{\partial s_I}N_I^n$$

を考える．本稿ではこの基底関数を元の基底関数 (12) に対する双対基底と呼ぶ．実際 2.2 節で定義した $H_{\mathrm{div}}^{-\frac{1}{2}}(D)$ の基底関数 N_I^n を $p=1$ とすると，上で定義した基底関数は Roof-top 関数とその双対基底に対応する [6]．

また元のメッシュの各選点 x_m 上でベクトル場の $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m$ 方向成分 (f_m とする) が与えられたとき，このベクトル場を双対基底で補完するためには，各選点で立式される連立方程式

$$T\widetilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}$$

を解いて $\widetilde{\boldsymbol{x}}$ を定めれば良い．ここに

$$\begin{aligned}(T)_{mn} &= \left\{(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{t}_m)\cdot\frac{1}{J}\frac{\partial\widetilde{\boldsymbol{y}}}{\partial s_I}N_I^n\right\}\Big|_{\widetilde{\boldsymbol{y}}=x_m}, \qquad (13)\\ (\widetilde{\boldsymbol{x}})_n &= \widetilde{j}^n,\\ (\boldsymbol{f})_m &= f_m\end{aligned}$$

である．さらに N_I^n の定義より $N_1^n=0$ または $N_2^n=0$ なので，式 (13) 中の I に関する総和規約は $I=1$ または $I=2$ と見なせることと，D の分割が十分に細かいとき $\frac{\partial\boldsymbol{y}}{\partial s_I}\approx\frac{\partial\widetilde{\boldsymbol{y}}}{\partial s_I}$ であることに注意すると，式 (10) より

$$\begin{aligned}(T)_{mn} &= \left\{\frac{1}{J}\boldsymbol{n}\cdot\left(\frac{\partial\boldsymbol{y}}{\partial s_K}\times\frac{\partial\widetilde{\boldsymbol{y}}}{\partial s_I}\right)N_I^n\right\}\Big|_{\widetilde{\boldsymbol{y}}=x_m}\\ &\approx\begin{cases}N_2^n(s_m) & (K=1,I=2)\\ -N_1^n(s_m) & (K=2,I=1)\\ 0 & (K=I)\end{cases} \qquad (14)\end{aligned}$$

となり，T は幾何形状に依存しない．但し s_m は選点 x_m に対応する D 上の点である．式 (14) より，$(T)_{mn}$ は選点 x_m における N_I^n の辺と平行な成分の値に対応するため，2 次 B-spline 関数 B_2 の各区間の中点での値に等しい．したがって T は各行に非零の要素数が 3 の疎行列であり，s_1, s_2 軸の分割が等間隔のとき狭義優対角行列であることがわかる．

同様に双対基底を定義したメッシュ上の選点 $\widetilde{x}_m$ で，ベクトル場の $\boldsymbol{n}\times\widetilde{\boldsymbol{t}}_m$ 方向成分が与えられたときに，このベクトル場を元の基底関数で補間することを考えると対応する行列 $\widetilde{T}$ は

$$\begin{aligned}(\widetilde{T})_{mn} &= \left\{(\boldsymbol{n}\times\widetilde{\boldsymbol{t}}_m)\cdot\frac{1}{J}\frac{\partial\boldsymbol{y}}{\partial s_I}N_I^n\right\}\Big|_{\boldsymbol{y}=\widetilde{x}_m}\\ &= -T\end{aligned}$$

となる．

以上より，式 (11) は以下の様に離散化できることがわかる．

$$\widetilde{T}^{-1}\widetilde{A}T^{-1}A\boldsymbol{x} = \widetilde{T}^{-1}\widetilde{A}T^{-1}\boldsymbol{b}. \qquad (15)$$

4. 数値計算例

本稿では領域 Ω^- として，境界 Γ が

$$\begin{aligned}x_1 &= (a+b\cos\theta)\cos\phi\\ x_2 &= (a+b\cos\theta)\sin\phi\\ x_3 &= b\sin\theta\\ &(0\le\phi\le 2\pi,\quad 0\le\theta\le 2\pi)\end{aligned}$$

で表されるトーラス形状を考えた．以下の数値例では $a=3, b=1$，$\varepsilon=\mu=1$ とした．また入射波は

$$\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}} = (0, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx_1}, 0)$$

とした．3.2 節で示した通り提案手法では 2 種類の基底関数を導入するために 2 種類のメッシュを用意する．メッシュは式 (3) において x_k^{ij} を

$$x_1^{ij} = (a+b\cos\theta^j)\cos\phi^i \qquad (16)$$
$$x_2^{ij} = (a+b\cos\theta^j)\sin\phi^i \qquad (17)$$
$$x_3^{ij} = b\sin\theta^i \qquad (18)$$

とし，求めた $\widetilde{x}^{kl}$ から式 (4) により定義されるが，通常の基底関数を与えるためのメッシュでは式 (16), (17), (18) において

$$\begin{aligned}\phi^i &= 2\pi s_1^{ig}\\ \theta^j &= 2\pi s_2^{jg}\end{aligned}$$

とし，双対基底を与えるためのメッシュは

$$\begin{aligned}\phi^i &= 2\pi\left(s_1^{ig}+\frac{1}{2n_1}\right)\\ \theta^j &= 2\pi\left(s_2^{jg}+\frac{1}{2n_2}\right)\end{aligned}$$

とした．

波数を $k=1$，メッシュの分割数を $(n_1,n_2)=(15,5),(30,10),(45,15),(60,20)$ としたときの，式 (8) の係数行列 A と式 (15) の係数行列 $\widetilde{T}^{-1}\widetilde{A}T^{-1}A$ の条件数をプロットした図が Fig. 4

である．この図の横軸は各分割数に対する自由度 $2n_1n_2$ である．行列 A は悪条件であり，メッシュサイズが大きくなるに従い条件数も大きくなるが，行列 $\widetilde{T}^{-1}\widetilde{A}T^{-1}A$ の条件数は小さい値で安定しており，Calderón の前処理が予想通りの効果を挙げていることがわかる．また $(n_1, n_2) = (15, 5), (60, 20)$

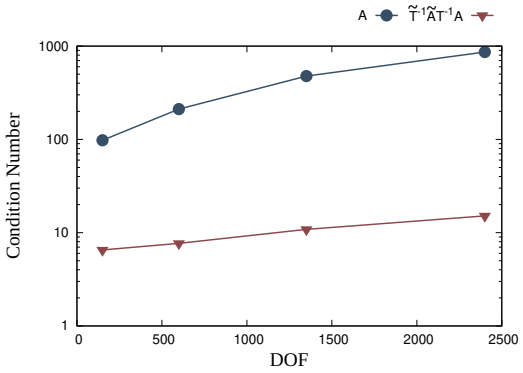


Fig. 4　Condition numbers of A and $\widetilde{T}^{-1}\widetilde{A}T^{-1}A$.

の場合について，行列 A と $\widetilde{T}^{-1}\widetilde{A}T^{-1}A$ の固有値を複素平面上にプロットした図を Figs. 5, 6 に，これらの図の原点付近の拡大図を Figs. 7, 8 に示す．Figs. 5, 7 より $(n_1, n_2) = (15, 5)$ の場合，Calderón の前処理を適用した行列は固有値が $-\frac{1}{4}$ 周辺に集まっていることがわかる．一方 Figs. 6, 8 に示す $(n_1, n_2) = (60, 20)$ の場合では，自由度が増加したことにより，行列 $\widetilde{T}^{-1}\widetilde{A}T^{-1}A$ の固有値の分布が $-\frac{1}{4}$ 周辺から広がっているが，絶対値最小の固有値が行列 A のそれより大きいため，これにより条件数が改善していると考えられる．

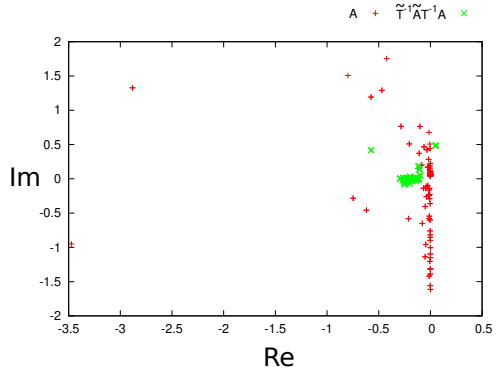


Fig. 5　Eigenvalues of A and $\widetilde{T}^{-1}\widetilde{A}T^{-1}A$ for $(n_1, n_2) = (15, 5)$.

5. 結論

本稿では選点法を用いた isogeometric 境界要素法における Calderón の前処理の実装法を提案した．境界 Γ を 2 種類のメッシュで近似し，それぞれのメッシュで同じ基底関数を導入することで Calderón の前処理が実装できることを示した．またこの方法では 2 種類のメッシュとして同じ分割数のメッシュを用いるため，BC 基底などで必要となるメッシュの再分割が必要なく，係数行列と前処理行列が同じ計算量で計算できる．本稿では Calderón の前処理の実装について，最も

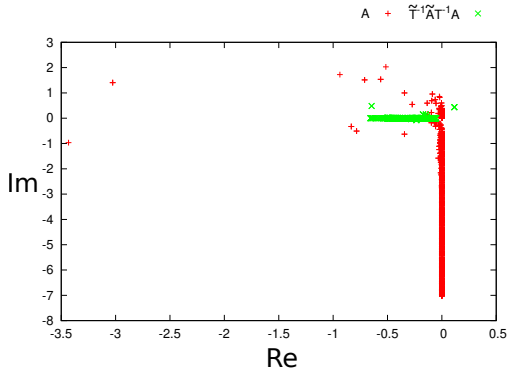


Fig. 6　Eigenvalues of A and $\widetilde{T}^{-1}\widetilde{A}T^{-1}A$ for $(n_1, n_2) = (60, 20)$.

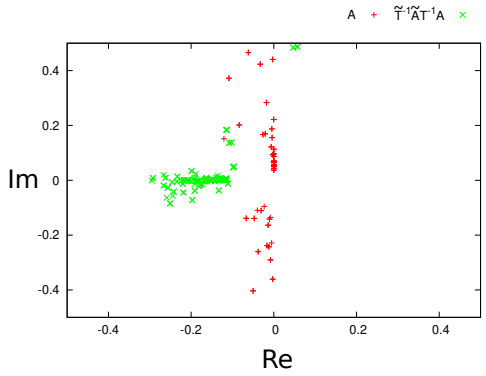


Fig. 7　An enlarged drawing of Fig. 5 around the origin.

基礎的な部分に着目するために，領域形状をトーラスと同相なものに限定することで，単一のパッチ D によって境界全体が近似できる場合を取り扱った．通常の isogeometric 解析で用いられるような複数のパッチを張り合わせて境界形状を表現する場合は，パッチをまたぐ基底関数とその双対基底を導入する必要がある．特に境界形状が立方体境界と同相な場合，立方体の角をまたぐ双対基底が精度の悪化などを引き起こすことが roof-top 関数の場合に知られており [6]，提案手法も同様の問題を持つと考えられる．この問題に対応することは今後の課題である．

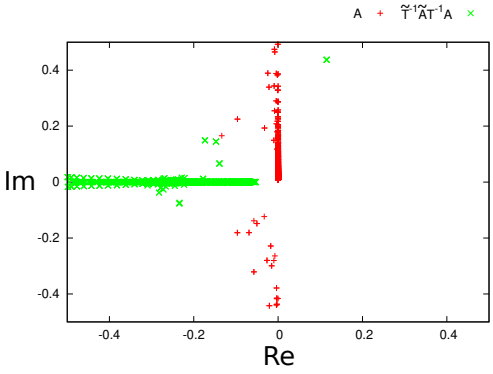


Fig. 8　An enlarged drawing of Fig. 6 around the origin.

参考文献

(1) W. C. Chew. *Waves and fields in inhomogeneous media*. IEEE press New York, 1995.

(2) O. Steinbach and W.L. Wendland. The construction of some efficient preconditioners in the boundary element method. *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 9, No. 1, pp. 191–216, 1998.

(3) S. Rao, D. Wilton, and A. Glisson. Electromagnetic scattering by surfaces of arbitrary shape. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, Vol. 30, No. 3, pp. 409–418, 1982.

(4) A. Buffa and S.H. Christiansen. A dual finite element complex on the barycentric refinement. *Mathematics of Computation*, Vol. 76, pp. 1743–1769, 2007.

(5) F.P. Andriulli, K. Cools, H. Bagci, F. Olyslager, A. Buffa, S. Christiansen, and E. Michielssen. A multiplicative Calderón preconditioner for the electric field integral equation. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, Vol. 56, No. 8, pp. 2398–2412, 2008.

(6) K. Niino and N. Nishimura. Calderón's preconditioning approaches for PMCHWT formulations for Maxwell's equations. *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*, Vol. 25, pp. 558–572, 2012.

(7) 新納和樹, 西村直志. Maxwell 方程式における isogeometric 境界積分法と選点法による離散化. 計算数理工学論文集, Vol. 19, pp. 91–94, 2019.

(8) Annalisa Buffa, Giancarlo Sangalli, and Rafael Vázquez. Isogeometric analysis in electromagnetics: B-splines approximation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199, No. 17-20, pp. 1143–1152, 2010.

(9) J.C. Nédélec. *Acoustic and Electromagnetic Equations: Integral Representations for Harmonic Problems*. Springer Verlag, 2001.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 18-211218 JASCOME

熱伝導問題を対象とした拡張レベルセット法に基づく複数材料トポロジー最適化

MULTI-MATERIAL TOPOLOGY OPTIMIZATION FOR A HEAT CONDUCTION PROBLEM BASED ON AN EXTENDED LEVEL SET METHOD

野田 雅貴 [1)], 野口 悠暉 [2)], 山田 崇恭 [3)]

Masaki NODA, Yuki NOGUCHI and Takayuki YAMADA

1) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 文京区弥生 2-11-16, E-mail: noda-masaki442@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)
2) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 文京区弥生 2-11-16, E-mail: noguchi@mech.t.u-tokyo.ac.jp)
3) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 文京区弥生 2-11-16, E-mail: t.yamada@mech.t.u-tokyo.ac.jp)

This paper proposes a topology optimizaion method for multi-material structures targeting a heat conduction problem. We first introduce the concept of an extended level set method with a matrix-valued level set function. Next, the maximization of thermal diffusion problem is formulated within the framework of the extended level set method. We add some notes on the numerical implementation including the updating schme of the level set function based on the distribution of the topological derivative. Several numerical examples are provided to demonstrate the validity of the proposed method and the effectiveness of the extended level set method in heat conduction problems.

Key Words: Extended Level Set Method, Multi-material, Topology Optimization, Heat Conduction

1. はじめに

機械製品の更なる性能向上や新機能創出のために，複数の材料を用いて機械構造を設計する，複数材料設計法が注目されている．複数の材料の特性を最大限発揮するためには，各材料を適材適所に配置する必要があり，複数材料トポロジー最適化手法が研究されている．

トポロジー最適化手法の中でもレベルセット法に基づく方法は，明瞭な境界を持つ構造を最適解として得られる利点があり，レベルセット法に基づく複数材料トポロジー最適化手法がいくつか提案されている [1, 2, 3, 4, 5]．Piecewise Constant Level Set 法 [2] は単一のレベルセット関数の整数値と各材料を対応づける手法である．他の手法と比較して設計変数が少なく，計算コストを抑えられる利点を持つが，多数の材料が存在する場合には各材料間でのトポロジーの変化が限定されるという欠点がある．Color Level Set 法 [1] および Multi-Material Level Set 法 [3] は複数のレベルセット関数の正負の組み合わせによりそれぞれの材料領域を表現する手法である．Piecewise Level Set 法に比較して材料変更の自由度は高いが，全ての材料間でトポロジーの変化を考慮できるような設計感度を導出することは難しい．Vector Valued Level Set 法 [4] は M 材料の構造を表現するために $M-1$ 次元ベクトル値関数であるレベルセット関数を用いる．レベルセット関数によって張られるベクトル空間を対称的な領域に分割し，各分割領域を最適化で用いる材料と対応づけることで，複数材料の表現を行う．前述の手法とは異なり，この手法では全ての材料間でトポロジーの変化を考慮しつつ設計変数の更新ができる利点を持つものの，材料間の界面はレベルセット関数の零等位面としては直接的に示されないため，材料間の界面の特性を個別に制御することは困難であるなどの課題がある．

Level Set 法を複数材料表現へ一般的に拡張した手法である，eXtended Level Set（拡張レベルセット, 以下 X-LS）法による材料表現に基づくトポロジー最適化手法 [5] は，最適化に用いる材料から 2 材料を選ぶ全ての組み合わせに対してそれぞれレベルセット関数を考え，その零等位面と 2 材料の界面を対応づける．この定義では，各材料を同等に扱うことができ，初期構造依存性が低い点に加えて，レベルセット関

2021 年 10 月 27 日受付，2021 年 11 月 19 日受理

数の各成分に対して正則化が可能であるため，材料界面の複雑度を材料の組み合わせ毎に制御できるという利点がある．さらに先行研究 [5] では，X-LS 法のレベルセット関数のプロファイルに制約を設けることで前述の手法 [1, 2, 3, 4] で用いる材料表現が得られることが示されており，X-LS 法は他のレベルセット法に基づく複数材料トポロジー最適化手法の概念を含んだ汎用性の高い手法であることが示唆される．他方，先行研究 [5] では，構造問題を対象に X-LS 法に基づく複数材料トポロジー最適化手法が提案されているのみで，複数材料による構造設計が期待される他の物理場への拡張はなされていない．そこで本研究では，機械構造物における熱による材料の劣化，変形を避けるための放熱性能や，熱機関における熱変換効率を高めるために重要な，熱伝導問題を対象として，X-LS 法に基づく複数材料トポロジー最適化手法を構築し，手法の有効性を検証する．まず，行列値を持つレベルセット関数を用いた X-LS 法の概念について述べる．次に，X-LS 法の枠組みの中で，熱拡散最大化問題を定式化する．さらに，トポロジー導関数の分布に基づいてレベルセット関数を更新する方法など，数値的な実装方法についても説明する． 最後に，いくつかの数値例を示し，提案手法の妥当性と X-LS 法の有効性を示す．

2. X-LS 法に基づく構造表現

ここでは，X-LS 法に基づく構造表現の定式化について述べる．初めに，従来のレベルセット法では，設計領域 $D \subset \mathbf{R}^d$（d は扱う問題の次元）において定義される実数値関数であるレベルセット関数 $\phi(\boldsymbol{x})$ $(\boldsymbol{x} \in D)$ を用いて，2 材料（材料 0,1）からなる構造を以下のように表現する．

$$\begin{cases} \phi(\boldsymbol{x}) > 0 & \text{if } \boldsymbol{x} \in \Omega_1 \\ \phi(\boldsymbol{x}) = 0 & \text{if } \boldsymbol{x} \in \Gamma_{01} \\ \phi(\boldsymbol{x}) < 0 & \text{if } \boldsymbol{x} \in \Omega_0 \end{cases} \tag{1}$$

ここで，Ω_0, Ω_1 はそれぞれ材料 0,1 が占める領域であり，Γ_{01} はそれらの境界である．

X-LS 法では，レベルセット法における材料表現において 2 材料の境界がレベルセット関数の零等位面 $\phi = 0$ によって示される点に着目し，レベルセット法を複数材料表現へ拡張する．すなわち，$M(\geq 2)$ 種類の材料のうち各 2 材料 $i, j \in \{0, 1, \ldots, M-1\}$ $(j \neq i)$ の組み合わせごとに，対応するレベルセット関数 ϕ_{ij} を設計領域 D において定義し，零等位面 $\phi_{ij} = 0$ を以下のように対応づける．

$$\begin{cases} \phi_{ij}(\boldsymbol{x}) > 0 & \text{if } \boldsymbol{x} \in \Omega_i \\ \phi_{ij}(\boldsymbol{x}) = 0 & \text{if } \boldsymbol{x} \in \Gamma_{ij} \\ \phi_{ij}(\boldsymbol{x}) < 0 & \text{if } \boldsymbol{x} \in \Omega_j \end{cases} \tag{2}$$

ここで，Ω_i, Ω_j はそれぞれ材料 i, j が占める領域であり，Γ_{ij} はそれらの境界である．

レベルセット関数 ϕ_{ij} を i, j 成分にもつ行列値関数 Φ を X-LS 関数と定義する．なお，$\phi_{ii} = 0$ とする．式 (2) の対称性から，X-LS 関数は以下の等式を満たすものと仮定する．

$$\phi_{ij} = -\phi_{ji} \tag{3}$$

式 (2) の拡張レベルセット関数の定義に基づき，複数材料からなる構造を表現することを考える．まず，領域 Ω_m に対する特性関数 ψ_m を以下のように定義する．

$$\psi_m(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & \boldsymbol{x} \in \Omega_m \\ 0 & \boldsymbol{x} \notin \Omega_m \end{cases} \tag{4}$$

X-LS 法では，X-LS 関数 Φ を用いて特性関数 ψ_m を以下のように表現する．

$$\psi_m(\Phi) = \prod_{k \neq m} H(\phi_{mk}) \tag{5}$$

$$\sum_m \psi_m = 1 \tag{6}$$

ただし，$H(s)$ は以下のように定義されるヘビサイド関数である．

$$H(s) = \begin{cases} 1 & s \geq 0 \\ 0 & s < 0 \end{cases} \tag{7}$$

なお，式 (6) は X-LS 関数に対する制約である．特性関数の定義式 (2) より，点 $\boldsymbol{x}$ において，2 つ以上の材料が割り当てられていれば，それらの特性関数がそれぞれ 1 となり，その総和は 2 以上である．いずれの材料も割り当てられていなければ，全ての材料の特性関数は 0 となり，それらの総和は 0 である．一方，一つの材料だけが割り当てられていれば，その材料の特性関数は 1，その他の材料の特性関数は 0 となるため，総和は 1 である．従って，式 (6) の制約が満たされていれば，各点 $\boldsymbol{x}$ においていずれかただ一つの材料が割り当てられる．

3. 最適化問題の定式化

本研究では，代表的な熱伝導問題として内部発熱のある系における熱拡散最大化問題を取り扱う．すなわち，状態場として温度場 u を考える．各材料 m の熱伝導係数 κ_m は温度に依存せず，等方的であるものとし，各 2 材料 i, j である領域の境界 Γ_{ij} で温度，及び熱流束は連続とする．設計領域における内部発熱 Q は一様であるものとし，断熱境界 Γ_n と温度を 0 に規定する境界 Γ_d を与える．設計領域内での平均温度を目的関数 F として設定し，各材料に対して上限を $\bar{V}_m$ とする体積制約 G_m を与えた上で，F を最小化することを考える．

X-LS 法による構造表現を用いれば，複数材料トポロジー最適化問題は以下のように定式化される．

$$
\begin{aligned}
\inf_{\Phi} \quad & F &&= \frac{\int_D u d\Omega}{\int_D u^* d\Omega} && \\
\text{s.t.} \quad & -\nabla\cdot(\kappa_m \nabla u) &&= Q && \boldsymbol{x} \in \Omega_m \\
& u_i &&= u_j && \boldsymbol{x} \in \Gamma_{ij} \\
& \kappa_i \nabla u_i \cdot \boldsymbol{n}_{ij} &&= \kappa_j \nabla u_j \cdot \boldsymbol{n}_{ij} && \boldsymbol{x} \in \Gamma_{ij} \\
& \nabla u \cdot \boldsymbol{n}_D &&= 0 && \boldsymbol{x} \in \Gamma_n \\
& u &&= 0 && \boldsymbol{x} \in \Gamma_d \\
& G_m &&\equiv \frac{\int_D \psi_m d\Omega}{\int_D d\Omega} - \bar{V}_m && \\
& &&\leq 0 && \\
& \textstyle\sum_m \psi_m &&= 1 && \text{in } D \\
& \psi_i &&= 1 && \text{in } \Gamma_i \cup \Omega_i^*
\end{aligned}
\tag{8}
$$

ここで u^* は目的関数を規格化するための基準となる温度場を表す．u_i, u_j は材料 i, j 内における温度場である．$\boldsymbol{n}_{ij}$ は材料 i, j である 2 領域間の境界 Γ_{ij} の法線ベクトル，$\boldsymbol{n}_D$ は設計領域 D の境界の法線ベクトルである．Γ_i, Ω_i^* はそれぞれ，材料 i が割り当てられることを事前に指定されている材料規定境界，および材料規定領域である．

4. 数値実装法

式 (8) の最適化問題の解を直接的に求めることは非常に困難であるため，本研究では勾配法的に求める．すなわち，適当な X-LS 関数の初期値を与え，徐々に目的関数が減少し，かつ制約条件が満たされるように X-LS 関数を更新することで最適解を得る．以下に概要を記す．なお詳細については文献 [5] を参照されたい．

4.1. X-LS 関数の更新

X-LS 関数の更新は，Yamada らの手法 [6] に倣い，以下の偏微分方程式を有限要素法を用いて繰り返し解くことにより行う．

$$
\begin{aligned}
\phi_{ij} - \tau_{ij} L^2 \nabla^2 \phi_{ij} &= \phi_{ij}^{\mathrm{old}} \\
&\quad + C_{ij} \frac{\overline{\mathcal{D}_{ij} F} + \sum_m \lambda_m \mathcal{D}_{ij} G_m}{\int_D |\overline{\mathcal{D}_{ij} F} + \sum_m \lambda_m \mathcal{D}_{ij} G_m| d\Omega} \\
&\qquad \text{in } D \\
\phi_{ij} &= 1 \qquad \text{on } \Gamma_i \cup \Omega_i^* \\
\phi_{ij} &= -1 \qquad \text{on } \Gamma_j \cup \Omega_j^* \\
\boldsymbol{n}_D \cdot \nabla \phi_{ij} &= 0 \qquad \text{on } \partial D \backslash (\Gamma_i \cup \Gamma_j)
\end{aligned}
\tag{9}
$$

ここで ϕ_{ij}^{old} は更新前の X-LS 関数である．$\overline{\mathcal{D}_{ij} F}$ は 4.2 節に述べる平均化された拡張トポロジー導関数である．C_{ij} は X-LS 関数の更新幅を制御する係数である．λ_m は材料 m の体積制約に対する制御係数であり，体積制約関数の拡張トポロジー導関数 $\mathcal{D}_{ij} G_m$ を制御することで，制約が満たされるように働くものである．左辺第 2 項は正則化項であり，レベルセット関数を拡散させ，平滑化するように働く．これにより，極度に複雑な構造が得られないように最適化を進めることが可能になる．L は設計領域の代表長さである．τ_{ij} は正則化の度合いを決める正則化係数であり，この係数を調整することによって，得られる最適構造における，材料境界 Γ_{ij} の幾何学的複雑さを制御することが可能となる．式 (2) の対称性を満たすため，$\tau_{ij} = \tau_{ji}$ とする．材料規定境界 Γ_m 及び材料規定領域 Ω_m^* では，規定された材料が割り当てられるようにレベルセット関数を 1 または −1 に固定する．設計領域 D の境界で材料規定境界に含まれない場所では，設計領域外部からの影響を排除するためノイマン条件を設定する．なお，トポロジーの変化を阻害させないために，上記の方程式を解いてレベルセット関数の絶対値が 1 を上回った部分については，絶対値が 1 となるように修正を加える．

$$
\phi_{ij} \leftarrow \max\{-1, \min\{1, \phi_{ij}\}\} \tag{10}
$$

4.2. 感度解析

本研究では，設計感度として以下のように定義される拡張トポロジー導関数 $\mathcal{D}_{ij} F$ を用いる．

$$
\mathcal{D}_{ij} F = D_{ij}^T F \times \psi_i - D_{ji}^T F \times \psi_j \tag{11}
$$

ここで，$D_{ij}^T F$ は材料 i である領域中に微小な半径を持つ材料 j である領域が生じたときの目的関数の変化率を示す，2 材料の問題設定におけるトポロジー導関数であり，目的関数が規格化されない $\int_D Q u d\Omega$ であれば，熱拡散最大化問題においては以下のように表される [7]．

$$
D_{ij}^T \left(F \int_D Q u^* d\Omega \right) = \frac{2\kappa_i(\kappa_j - \kappa_i)}{\kappa_j + \kappa_i} \nabla u \cdot \nabla u \tag{12}
$$

本研究では，目的関数は $\int_D Q u^* d\Omega$ により規格化されているため，2 材料の問題設定におけるトポロジー導関数は以下のように表される．

$$
D_{ij}^T F = \left(\int_D Q u^* d\Omega \right)^{-1} \frac{2\kappa_i(\kappa_j - \kappa_i)}{\kappa_j + \kappa_i} \nabla u \cdot \nabla u \tag{13}
$$

また，体積制約に関する 2 材料の場合のトポロジー導関数は以下のように表される．

$$
D_{ij}^T G_m = \begin{cases} 1 & (j = m) \\ -1 & (i = m) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{14}
$$

4.3. トポロジー導関数の平均化

最適化計算の安定化のために，目的関数のトポロジー導関数を以下のように平均化する [5]．

$$
\overline{\mathcal{D}_{ij} F} = (1 - K_T) \overline{\mathcal{D}_{ij} F}^{\mathrm{old}} + K_T \mathcal{D}_{ij} F \tag{15}
$$

ここで $\overline{\mathcal{D}_{ij} F}^{\mathrm{old}}$ は最適化計算の 1 ステップ前における平均化されたトポロジー導関数 $\overline{\mathcal{D}_{ij} F}$ の値であり，0 ステップ目では 0 とした．K_T は最適化計算の安定性と収束性に寄与する時定数であり，これが小さいほど安定性が向上するが，収束は遅くなりやすい．収束計算の安定化のためには，式 (4.1) においてレベルセット関数の更新幅に寄与する τ_{ij}, C_{ij} を小さくするという手法がより一般的だが，感度を平均化する手

法は比較的安定化しやすいため，本研究ではこちらの手法を用いた．

4.4. 制御係数の更新

制御係数 λ_m は体積制約関数 G_m を用いて以下のように計算する．

$$I_m = \max\{0, I_m^{\mathrm{old}} + (G_m + (G_m - G_m^{\mathrm{old}}))\} \tag{16}$$

$$\lambda_m = K_m^P \left(\max\{0, G_m\} + (G_m - G_m^{\mathrm{old}})\right) + K_m^I I_m \tag{17}$$

ここで，$I_m^{\mathrm{old}}, G_m^{\mathrm{old}}$ は最適化計算の 1 ステップ前における I_m, G_m の値である．0 ステップ目においては，$I_m^{\mathrm{old}} = 0$, $G_m^{\mathrm{old}} = 0$ とする．K_m^P, K_m^I は制御ゲインである．

4.5. レベルセット関数の近似による材料の割り当て

式 (6) が満たされない場合，M 種類のどの材料にも割り当てられない領域が生じることになる．本来は式 (6) の条件をレベルセット関数に対する制約として扱う必要があるが，本研究では簡易的に，条件を満たす以下のような近似されたレベルセット関数 $\tilde{\phi}_{ij}$ を用いる．

$$\hat{\psi}_m = \prod_{k \neq m} \frac{1 + \phi_{mk}(\boldsymbol{x})}{2} \tag{18}$$

$$\tilde{\phi}_{ij} = \hat{\psi}_i - \hat{\psi}_j \tag{19}$$

なお，このような近似を用いても，例として $\phi_{AB} = 1, \phi_{BC} = 1, \phi_{CA} = 1$ となるような領域では，$\tilde{\phi}_{AB} = 0, \tilde{\phi}_{BC} = 0, \tilde{\phi}_{CA} = 0$ となってしまい，いずれの材料の領域にも属さない領域となる．（式 (2) の定義では，各材料の“境界である領域”，ということになる．） 本研究では，最適化過程においてこの領域が生じた場合には，3 材料の中間の材料定数を持つ領域として扱うことにより計算を続行する．対象とする問題設定によっては，この中間領域が設計領域の大部分を占めるような結果となり，最適化計算が適切に行われない，工学的に有用な解が得られないなどの問題が生じることが考えられる．そのような場合には式 (6) の条件を制約として考慮しつつ，最適化を行う必要がある．

4.6. 特性関数の近似

有限要素を再生成する手間を省略するため，本研究では Ersatz material approach に基づき熱伝導係数の空間分布を表現することにより，複数材料から成る最適構造を表現する．まず，式 (5) の特性関数 ψ_m を次のように $\tilde{\psi}_m$ に近似する．

$$\tilde{\psi}_m(\boldsymbol{x}) = \frac{\displaystyle\prod_{k \neq m} \tilde{H}(\tilde{\phi}_{mk}(\boldsymbol{x}))}{\displaystyle\sum_l \prod_{k \neq l} \tilde{H}(\tilde{\phi}_{lk}(\boldsymbol{x}))} \tag{20}$$

ここで $\tilde{H}$ は以下に定義される近似ヘビサイド関数である．

$$\tilde{H}(s) \equiv \begin{cases} 0 & (s < -h) \\ \dfrac{1}{2} + \dfrac{s}{h}\left[\dfrac{15}{16} - \dfrac{s^2}{h^2}\left(\dfrac{5}{8} - \dfrac{3}{16}\dfrac{s^2}{h^2}\right)\right] & (-h \leq s \leq h) \\ 1 & (s > h) \end{cases} \tag{21}$$

ただし h $(0 < h < 1)$ は材料定数の遷移幅を制御する定数である．

この近似された特性関数 $\tilde{\psi}_m$ を用いて，複数材料を考慮した熱伝導係数 $\kappa'(\boldsymbol{x})$ は以下のように表現される．

$$\kappa'(\boldsymbol{x}) = \sum_m \kappa_m \tilde{\psi}_m(\boldsymbol{x}) \tag{22}$$

5. 数値解析例

ここでは提案手法の妥当性を検証するため，数値解析例を示す．図 1 に問題設定を示す．赤色の領域は設計領域 D であり，一様な内部発熱 $Q = 1$ を与える．青色で示した境界 Γ_d では温度を $u = 0$ と規定し，灰色で示した境界 Γ_n には断熱条件 $\nabla u \cdot \boldsymbol{n}_D = 0$ を課す．設計領域 D は一辺の長さが 1 の正方形とした．温度規定境界 Γ_d は長さを 0.2 とし，設計領域の下辺中央に配置した．以下に示す数値例の全てにおいて，

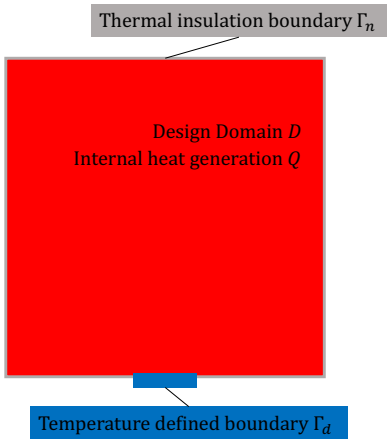
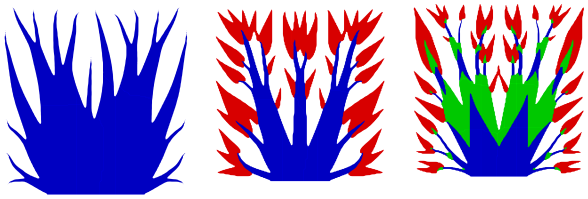


Fig. 1: Design domain and problem settings

解析領域を 8 万個の三角形要素によって分割しており，代表長さは $L = 1$ とした．用いる材料は材料 0,1,2,3 の順にプラスチック，銅，鋼，アルミを仮定し，それぞれ熱伝導率を 4.0, 372, 40, 204 [W/mK] とした．以下に示す最適構造を表す図では，それぞれ白，青，赤，緑色の領域に対応する．なお，熱伝導率の比が大きい場合には，最適化計算が不安定になるため，プラスチックの熱伝導率を実際の値よりも大きく設定している．X-LS 法において最適化の対象とする材料の種類を $M = 2, 3, 4$ とし，それぞれの条件で最適化計算を行った．このとき用いる材料は，$M = 2$ の場合はプラスチックと銅とし，$M = 3$ の場合はそれに鋼を加え，$M = 4$ の場合はさらにアルミを加えた．各材料領域に対して与える体積制約については，プラスチックに対しては導入せず，その他の材料については，設計領域の 50%を $M - 1$ で割った値をそれぞれの上限値 $\bar{V}_m$ とした．レベルセット関数の初期値は $\phi_{ij} = 0$ とした．いずれの材料 $m \in \{0, 1, 2, 3\}$ に対しても，材料規定境界 Γ_m 及び材料規定領域 Ω_m^* は設定しない．目的関数を規格化するための温度場 u^* はそれぞれの初期構造における温度場とした．X-LS 関数の更新幅を制御する係数は $C_{ij} = 1$ とした．制御ゲインの値はそれぞれ $K_m^P = 0.2, K_m^I = 0.2$ とした．トポロジー導関数の平均化における時定数は $K_T = 0.05$

とした．材料定数の遷移幅を制御する定数の値は $h = 0.2$ とした．

初めに，正則化係数を $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$ と固定したとき，最適化計算に用いる材料の種類を $M = 2, 3, 4$ とした場合について最適化結果を示す．それぞれの条件について，十分な回数の最適化ステップの後，体積制約関数は 0.1%未満となること，規格化された目的関数の 1 ステップでの変化量は 0.1%未満となることを確認し，最適化結果とした．得られた最適構造を図 2 に示す．また，$M = 3$ の最適構造における温度場の分布を図 3 に示す．また，図 4 に材料の数が $M = 4$ である条件における収束履歴を示す．



(a) $M = 2$　(b) $M = 3$　(c) $M = 4$

Fig. 2: Optimized configurations for different numbers of materials when regularization parameter $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$

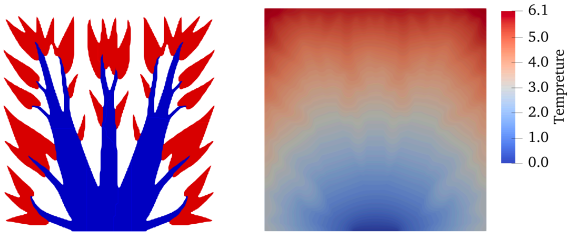


Fig. 3: Optimized configuration for $M = 3$ (left) and the temperature field for the optimized configuration (right)

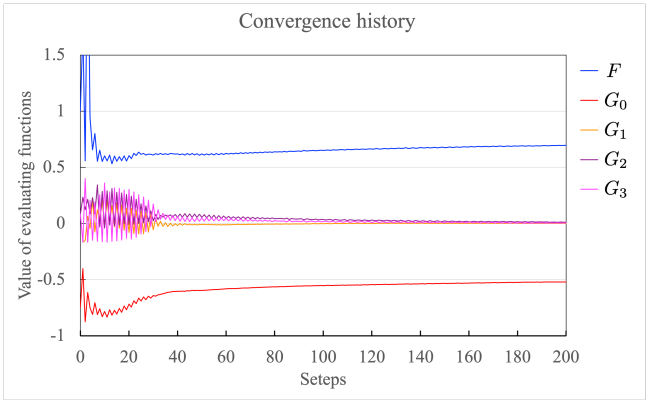
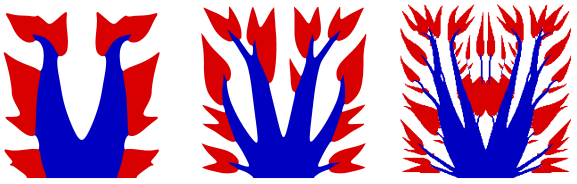


Fig. 4: Convergence history of objective function F and constraint functions for volume constraints G_m for $M = 4$

図 4 から，200 ステップにおいて目的関数値および制約関数値の 1 ステップごとの変動はそれぞれおおよ 0.01 を下回っており，ほぼ収束している．$M = 2, 3, 4$ の時の目的関数はそれぞれ $0.610, 0.653, 0.719$ となった．それぞれの最適化結果において，各材料の体積はそれぞれの上限値となった．得られた構造は，枝分かれした構造が設計領域全体を覆うように分布して局所的に高温になるような領域をなくすように配置されている点，枝状の構造はそれぞれ直線的に温度規定境界から伸びている点，熱流束の集中する温度規定境界に近づくにつれ金属部材が太くなっている点，図 2(b),(c) では温度規定境界に近い部分に比較的熱伝導率の高い銅（青色領域）やアルミ（緑色領域）が配置され，それらの先端に熱伝導率の低い鋼（赤色領域）が集中している点から，物理的に妥当な構造であると言える．また最適構造の材料分布は全体に滑らかであり，チェッカーボードのような構造は見られず，それぞれの領域の界面においても，メッシュ粗さ程度の凹凸は見られるものの，微細な棘状の構造等は見られず，正則化が適切に行われたことがわかる．

次に，用いる材料の数を $M = 3$ に固定し，正則化係数 τ_{ij} を $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-4}, 4.0 \times 10^{-5}, 4.0 \times 10^{-7}$ と設定した場合について最適化を行なった．最適化結果を図 5 に示す．図 2(b) 及び，図 5 を比較すると，正則化係数 τ_{ij} の値が大きいほど，細かな枝が一つにまとまった構造が得られており，τ_{ij} の設定によって幾何学的複雑さを制御可能であることが示せた．$\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-4}, 4.0 \times 10^{-5}, 4.0 \times 10^{-7}$ の時の目的関数はそれぞれ $0.732, 0.666, 0.654$ となった．また，図 2(b) に示した $M = 3$ かつ $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$ の時の目的関数値は 0.653 であった．このことから，τ_{ij} が小さければ幾何学的複雑さが許容され，目的関数値がより良い値を示す傾向が確認できた．なお，$\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$ と $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-7}$ の 2 条件では目的関数値には大きな違いが無いが，これは $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-7}$ の場合では構造の細かさに対してメッシュの細かさが十分でなく，解析の精度が得られなかったことなどが原因として考えられる．そこで，$\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-7}$ の場合について，要素数を 4 倍の 32 万個に増やして計算を行った．得られた最適構造を図 6 に示す．この場合には目的関数値は 0.648 となり，$\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$ の時の目的関数値 0.653 より良い目的関数値が得られることが確認できた．



(a) $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-4}$　(b) $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-5}$　(c) $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-7}$

Fig. 5: Optimized configurations for different values of regularization parameters τ_{ij}

さらに，用いる材料の数を $M = 3$ に固定し，3 つの正則

Fig. 6: Optimized configurations with fine mesh, where $M = 3$ and regularization parameters $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-7}$

化係数 $\tau_{01} = \tau_{10}, \tau_{12} = \tau_{21}, \tau_{20} = \tau_{02}$ のうち，1 つを他の 2 つの正則化係数と比較して大きく設定した場合と，逆に小さく設定した場合について最適化計算を行った．図 7 は，一つを大きく $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-4}$，その他を小さく $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$ 設定した場合の最適構造である．一方，図 8 は，一つを小さく $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$，その他を大きく $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-4}$ 設定して最適化を行なった場合の結果である．プラスチックと銅の境界に対する正則化係数が小さい 3 つの条件については，十分な回数の最適化ステップの後，体積制約関数は 0.1%未満となること，規格化された目的関数の 1 ステップでの変化量は 0.1%未満となることを確認し，最適化結果とした．プラスチックと銅の境界に対する正則化係数が大きい残りの 3 つの条件については，体積制約の収束が悪く，最適化の過程で構造が大きく変化しながら繰り返し同様の構造が現れる傾向にあったため，構造が大きく変化し始める前の構造を結果として示す．なお，構造が大きく変化し始める前においては，体積制約関数 G_m の値は 0.1%未満となり，目的関数 F の値の 1 ステップでの変化量は 0.1%程度であった．

(a) $\tau_{02} = 4.0 \times 10^{-4}$ (b) $\tau_{01} = 4.0 \times 10^{-4}$ (c) $\tau_{12} = 4.0 \times 10^{-4}$

Fig. 7: Optimized configurations with one regularization factor set to large $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-4}$ and the other two to small $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$

それぞれの最適化結果において，各材料の体積はそれぞれの上限値となった．図 7(a),(b),(c) に示した最適構造では，目的関数値はそれぞれ $0.668, 0.694, 0.663$ となった．図 8(a),(b),(c) に対しては，目的関数値はそれぞれ $0.708, 0.689, 0.711$ となった．いずれの場合でも目的関数値は，全ての τ_{ij} を大きく（$\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-4}$）設定した時の目的関数値 0.732 より小さく，全ての τ_{ij} を小さく（$\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$）設定した時の目的関数値 0.653 より大きくなっている．また，図 2(b) と図 7(c) を比較すると，全体的な構造の複雑さに相違は見られないものの，図 7(c) では，赤色で示された鋼である領域

(a) $\tau_{02} = 4.0 \times 10^{-6}$ (b) $\tau_{01} = 4.0 \times 10^{-6}$ (c) $\tau_{12} = 4.0 \times 10^{-6}$

Fig. 8: Optimized configurations with one regularization factor set to small $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-6}$ and the other two to large $\tau_{ij} = 4.0 \times 10^{-4}$

に，青色で示された銅である領域が入り込むような構造は見られなくなっており，鋼と銅の境界の幾何学的複雑さが小さい構造が得られている．図 5(a) と図 8(b) を比較すると，全体的な構造の複雑さは同様であるものの，図 8(b) 左右中央部分にはプラスチックである白色領域中に，銅である青色の細長い領域が生じており，幾何学的複雑さが許容されて最適化が行われていることがわかる．このように，それぞれの 2 材料の組み合わせごとに，幾何学的複雑さを制御可能であることが示された．

6. 結言

本研究では，X-LS 法に基づく複数材料トポロジー最適化手法を熱問題へ適用し，内部発熱のある系において数値解析例を示した．また，正則化係数を境界ごとに別個に設定し，境界ごとに幾何学的複雑さを制御可能であることを示し，熱伝導問題においても X-LS 法の利点が得られることを示した．

7. 謝　　辞

本研究の一部は，JST 創発的研究支援事業，JPMJFR202J の支援を受けたものです．ここに記して感謝します．

参考文献

(1) Wang, M. Y. and Wang, X.: “Color” level sets: a multi-phase method for structural topology optimization with multiple materials, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **193.6–8**(2004), pp. 469–496.

(2) Wei, P. and Wang, M. Y.: Piecewise constant level set method for structural topology optimization, International Journal for Numerical Methods in Engineering, **78.4**(2009), pp. 379–402.

(3) Wang, Y., Luo, Z., Kang, Z. and Zhang, N.: A multi-material level set-based topology and shape optimization method, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **283**(2015), pp. 1570–1586.

(4) Gangl, P.: A multi-material topology optimization algorithm based on the topological derivative, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **366**(2020), p. 113090.

(5) Noda, M., Noguchi, Y., and Yamada, T.: Extended level set method: a multiphase representation with perfect symmetric property, and its application to multi material topology optimization, arXiv preprint arXiv:2108.06482.

(6) Yamada, T., Izui, K., Nishiwaki, S., and Takezawa, A.: A topology optimization method based on the level set method incorporating a fictitious interface energy, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **199.45**(2010), pp. 2876–2891.

(7) Amstutz, S.: Sensitivity analysis with respect to a local perturbation of the material property, Asymptotic analysis, **49.1, 2**(2006), pp. 87–108.

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 19-211218 JASCOME

遠方近似を用いた3次元時間域境界要素法による仮想空間における移動点のリアルタイム可聴化

A Real-Time Auralization in a Virtual Space Using Time Domain Boundary Integral Equation Method with the Far Field Approximation

吉川 仁 [1)], 西上 駿祐 [2)]

Hitoshi YOSHIKAWA and Shunsuke NISHIGAMI

1) 京都大学大学院情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: yskhit@i.kyoto-u.ac.jp)
2) 株式会社ギフティ (〒 141-0022 東京都品川区東五反田 2-10-2, E-mail:)

A numerical computation of a sound that a character moving in the 3D virtual space hears is considered. We consider wave acoustics for the accurate computation of the sound field having the several complicated scatterers. We solve the scattered wave field using time domain BIEM and store the computed boundary values in advance. We compute the sound of the moving point with the integral representation formula and the far field approximation in real time. The real-time auralization is realized with the game engine, Unity3D.

Key Words: game sound, real-time auralization, BEM, BIEM, Unity

1. はじめに

近年、バーチャルリアリティ技術の発展によりプレイヤー自身がバーチャル空間内を動き回るゲームや、プレイヤーが操作するキャラクターが3次元のオープンワールドを自由に移動できるゲームが数多く開発されている。ファーストパーソン・シューティングゲー (FPS) やサードパーソン・シューティングゲーム (TPS) などの対戦シューティングゲームにおいては、敵の発砲音を聞くことで敵の位置情報を得るテクニックなども存在する [(1)]。これらのゲームでは、バーチャル空間内を移動するキャラクターやプレイヤー自身に聞こえる音をより正確に再現することが求められている [(2)]。

樫山ら [(3, 4)] は幾何音響理論に基づく解析を行い、音響のパワーレベルを算出し、バーチャル空間でのリアルタイム可聴化を実現している。しかしながら、この手法では音の特性である波動性が失われてしまうことや、複雑な散乱体形状に対応しづらいといった問題点があり、正確な音場の再現には限界があった。Raghuvanshi ら [(5)] も音波の伝播経路を直達音と反射音に分けてリアルタイム可聴化を実現しているが、こちらも音の波動性を考慮しておらず、正確な音場を再現しているとは言い難い。このように、現在行われているバーチャル空間での音場の数値解析は、幾何音響シミュレーションを用いた簡易的な数値手法であり、波動性を考慮した正確な音場の再現が可能な数値解析が必要とされている [(6)]

そこで、本研究では、**Fig.1** に示すような3次元バーチャル空間内を移動するキャラクターに聞こえる音をリアルタイムに再現することを目的とする。なお、本論文における “リアルタイム ”の意味は、ゲーム内における実時間を意味する。つまり、キャタクターがバーチャル空間を移動するに合わせて、その位置での音を実時間で計算することを目的とする。

これまでに、時間域境界要素法 [(7)] を用いることで散乱体を1つ持つような単純な領域でのリアルタイム可聴化が実現されている。境界要素法には、領域の境界上での境界量を事前に計算しておけば、任意の内点での解は簡単なベクトル積演算を行うだけで求まるという特徴がある。この特徴を利用し、境界量と影響係数とのベクトル積演算のみをリアルタイムで実行することで計算時間を短縮し、散乱体を1つ持つような単純な領域でのリアルタイム可聴化を実現した [(8, 9)]。しかし、領域内に複数の散乱体がある場合には、ベクトルの次元数が大きくなりベクトル積演算でさえ計算時間が大きくなるため、依然リアルタイム可聴化には至っていない。そこで、本研究では、キャラクター位置から遠方にある散乱体からの影響に対しては近似を用いて計算することで計算時間を短縮し、複数の散乱体が存在する領域でのリアルタイム可聴化を試みる。

2021 年 11 月 4 日受付, 2021 年 11 月 22 日受理

Fig. 1　バーチャル空間内を移動するキャラクター

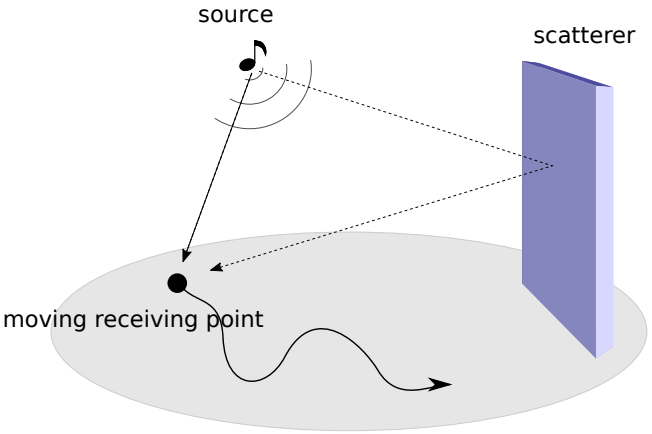


Fig. 2　点音源からの球面波を入射波とする散乱音場

2. 時間域境界積分方程式による音場解析

Fig.2 に示すような散乱体を持つある閉じた 3 次元領域の外部領域 D における、位置 $\boldsymbol{x}$、時刻 t での音圧 $u(\boldsymbol{x},t)$ について次の初期値境界値問題を考える。

$$\ddot{u}(\boldsymbol{x},t) - c^2 u_{,ii}(\boldsymbol{x},t) = 0, \quad \boldsymbol{x} \in D,\ t > 0 \tag{1}$$

$$u(\boldsymbol{x},0) = \dot{u}(\boldsymbol{x},0) = 0, \quad \boldsymbol{x} \in D \tag{2}$$

$$u(\boldsymbol{x},t) = \bar{u}(\boldsymbol{x},t), \quad \boldsymbol{x} \in S_D,\ t > 0 \tag{3}$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}(\boldsymbol{x},t) = \bar{q}(\boldsymbol{x},t), \quad \boldsymbol{x} \in S_N,\ t > 0 \tag{4}$$

$$u(\boldsymbol{x},t) \to u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t), \quad |\boldsymbol{x}| \to \infty \tag{5}$$

ここに、c は音速、$u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t)$ は入射波、S は D の境界であり、境界 S の一部で Dirichlet 境界条件が課せられる境界を S_D、Neumann 境界条件が課せられる境界を S_N とする。なお、$S = S_D \cup S_N$ である。また、$\dot{(\ )}$ は時間に関する微分 $\dfrac{\partial}{\partial t}$ を、$(\ )_{,i}$ は空間に関する微分 $\dfrac{\partial}{\partial x_i}$ を表す。$\dfrac{\partial}{\partial n} = n_i(\boldsymbol{x})\dfrac{\partial}{\partial x_i}$ であり、$\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x} \in S$ における領域 D より外に向いた単位法線ベクトルを表す。$\bar{u}(\boldsymbol{x},t)$, $\bar{q}(\boldsymbol{x},t)$ は既知関数である。本研究では、入射波 $u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t)$ として、静止した 1 点の点音源 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{o}}$ から発信される音 $u^{\mathrm{o}}(t)$ を考える。入射波 $u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t)$ は、波速 c の球面波として次の様に与えられる。

$$u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t) = \frac{u^{\mathrm{o}}(t - r_{\mathrm{o}}/c)}{4\pi r_{\mathrm{o}}}, \quad r_{\mathrm{o}} = |\boldsymbol{x}^{\mathrm{o}} - \boldsymbol{x}| \tag{6}$$

2.1. 境界積分方程式法による境界量の計算

波動方程式の初期値境界値問題 (式 (1)〜(5)) より得られる境界積分方程式は次の通りである。

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}u(\boldsymbol{x},t) =& u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t) \\ &+ \int_S\int_0^t \Gamma(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y},t-s)\frac{\partial u}{\partial n}(\boldsymbol{y},s)dsdS \\ &- \int_S\int_0^t \frac{\partial \Gamma}{\partial n_y}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y},t-s)u(\boldsymbol{y},s)dsdS, \\ & \qquad \boldsymbol{x} \in S,\ t > 0\end{aligned} \tag{7}$$

ここに、Γ は 3 次元波動方程式の基本解であり、

$$\Gamma(\boldsymbol{x},t) = \frac{\delta(t - |\boldsymbol{x}|/c)}{4\pi|\boldsymbol{x}|} \tag{8}$$

である。ここに、$\delta(t)$ は Dirac のデルタ関数である。境界積分方程式 (7) を未知な境界値である $u(\boldsymbol{x},t)$, $\boldsymbol{x} \in S_N$ と $\dfrac{\partial u}{\partial n}(\boldsymbol{x},t)$, $\boldsymbol{x} \in S_D$ について解く。時間域の境界積分方程式法では、境界 S を複数の境界要素 S_j, $j = 1,\cdots,N$ に分割し、また時間刻み幅を Δt とし、境界積分方程式 (7) 右辺の積分を時間ステップ毎に数値的に計算し、未知境界量 $u(\boldsymbol{x}^j, n\Delta t), \boldsymbol{x}_j \in S_N$ と $\dfrac{\partial u}{\partial n}(\boldsymbol{x}^j, n\Delta t), \boldsymbol{x}_j \in S_D$, $n = 1,2,\cdots$ を求める。ここに、$\boldsymbol{x}^j$ は境界要素 S_j の代表点である。

2.2. 解の積分表現を用いた内点計算

境界積分方程式を解くことで、境界 S 上の $u(\boldsymbol{x},t)$, $\dfrac{\partial u}{\partial n}(\boldsymbol{x},t)$ が全て得られるため、領域 D 内の任意の点 $\boldsymbol{x}$ での解が、解の積分表現

$$\begin{aligned}u(\boldsymbol{x},t) =& u^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},t) \\ &+ \int_S\int_0^t \Gamma(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y},t-s)\frac{\partial u}{\partial n}(\boldsymbol{y},s)dsdS \\ &- \int_S\int_0^t \frac{\partial \Gamma}{\partial n}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y},t-s)u(\boldsymbol{y},s)dsdS, \\ & \qquad \boldsymbol{x} \in D,\ t > 0\end{aligned} \tag{9}$$

より求まる。この計算は内点計算とも呼ばれ、境界積分方程式法では、式 (9) 右辺の境界積分も数値的に計算する。

2.3. リアルタイム可聴化のための工夫

本研究において、式 (9) の内点 $\boldsymbol{x}$ はバーチャル空間内を動くキャラクターの位置を表す。キャラクターはバーチャル空間内を時間と共に連続的に動く。そのため、キャラクター位置と関係なく求められる境界量は式 (7) により事前に数値的に求めておき、内点計算のみをキャラクターの移動と共にリアルタイムで計算する。

さらに、例えば完全反射条件 ($\bar{q}(\boldsymbol{x},t) = 0$) のように境界条件が時間依存ではない場合について、ベクトル積演算量とメモリにストアしておく境界値の量を減らすために、次の手順で内点計算を行う [9]。以下では、式 (3),(4) において時間依存しない境界条件を考える。

$$\bar{u}(\boldsymbol{x},t) = \tilde{u}(\boldsymbol{x}) \tag{10}$$

$$\bar{q}(\boldsymbol{x},t) = \tilde{q}(\boldsymbol{x}) \tag{11}$$

1. まず、時間域の内挿関数 $M_T^m(t)$ を用いて点音源から発信される音 u° を次の様に離散化する。

$$u^{\circ}(t) \simeq \sum_{m=1}^{N_T} u^{\circ}(m\Delta t) M_T^m(t) \tag{12}$$

ここに、発信音 $u^{\circ}(t)$ は $0 \leq t \leq N_T \Delta t$ の音データとする。

2. 次に、メモリにストアするデータ量を少なくするために、サポートが短い関数である M_T^1 を入射波とする次の初期値境界値問題の境界値を数値的に求めてメモリにストアする。

$$\ddot{u}^M(\boldsymbol{x},t) - c^2 u^M_{,ii}(\boldsymbol{x},t) = 0, \quad \boldsymbol{x} \in D,\ t > 0 \tag{13}$$

$$u^M(\boldsymbol{x},0) = \dot{u}^M(\boldsymbol{x},0) = 0, \quad \boldsymbol{x} \in D \tag{14}$$

$$u^M(\boldsymbol{x},t) = \tilde{u}(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in S_D,\ t > 0 \tag{15}$$

$$\frac{\partial u^M}{\partial n}(\boldsymbol{x},t) = \tilde{q}(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in S,\ t > 0 \tag{16}$$

$$u^M(\boldsymbol{x},t) \to \frac{{M_T}^1(t - r_{\circ}/c)}{4\pi r_{\circ}}, \quad |\boldsymbol{x}| \to \infty \tag{17}$$

なお、Δt は一定であり、また考えている問題は線形の問題であるため、解の重ね合わせの原理より式 (9) 右辺の時間積分を離散化して求まる数値解 $u(\boldsymbol{x}, n\Delta t)$ は、式 (13)〜式 (17) に示した初期値境界値問題の解 $u^M(\boldsymbol{x}, n\Delta t)$ を用いて、次の畳み込みの形で計算できる。

$$u(\boldsymbol{x}, n\Delta t) = \sum_{m=1}^{n} u^{\circ}(m\Delta t) u^M(\boldsymbol{x}, (n-m+1)\Delta t) \tag{18}$$

なお、区分線形の時間内挿関数は次の通りであり $2\Delta t$ のサポートを持つ。

$$M_T^m(t) = \begin{cases} \dfrac{t}{\Delta t} - m + 1, & (m-1)\Delta t \leq t < m\Delta t, \\ \dfrac{-t}{\Delta t} + m + 1, & m\Delta t \leq t < (m+1)\Delta t, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{19}$$

区分線形の内挿関数 $M_T^1(t)$ を点音源からの音として計算された境界値 $u^M(\boldsymbol{x},t), \boldsymbol{x} \in S$, 内点の値 $u^M(\boldsymbol{x},t), \boldsymbol{x} \in D$ も $2\Delta t$ の時間幅のサポートを持つ事から、非ゼロの境界値の記憶に必要なメモリ量や畳み込み演算量を約 $\dfrac{2}{N_T}$ に減らすことができる。

3. 遠方近似を用いた計算

キャラクター位置 $x(t)$ が散乱体から遠く離れているときには、式 (9) 右辺第 2 項、第 3 項に対して遠方近似を用いて計算することにより計算時間の短縮を試みる。遠方近似を用いるにあたり、複数個存在する散乱体の I 番目の散乱体の重心を $\boldsymbol{O}^I$、その境界を S_I $I = 1, 2, \cdots$ とし、$\boldsymbol{x}^I = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{O}^I$, $\boldsymbol{y}^I = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{O}^I$ とする。式 (9) 右辺第 2 項、第 3 項において、

$$r = |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}| = |\boldsymbol{x}^I - \boldsymbol{y}^I| \simeq |\boldsymbol{x}^I| - \frac{\boldsymbol{x}^I \cdot \boldsymbol{y}^I}{|\boldsymbol{x}^I|} \tag{20}$$

$$\frac{1}{r} \simeq \frac{1}{|\boldsymbol{x}^I|}\left(1 + \frac{\boldsymbol{x}^I \cdot \boldsymbol{y}^I}{|\boldsymbol{x}^I|^2}\right) \tag{21}$$

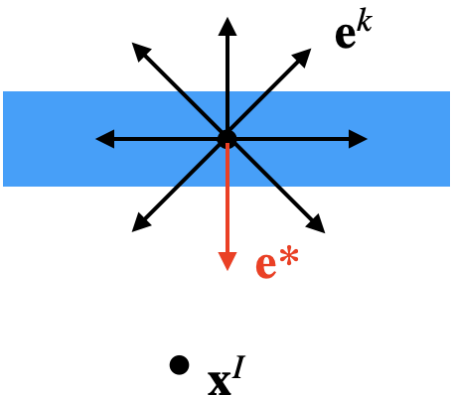


Fig. 3　到達時間差の近似

なる遠方近似を導入し、$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ を分離することで、散乱体 I ごとに $\boldsymbol{y} \in S_I$ に関する積分を予め計算し保持しておく。

また、式 (9) に現れる畳み込み積を行う際には、境界要素 $S_j \subset S_I$ からキャラクター位置 $\boldsymbol{x}$ までの影響の到達時間差を考える必要がある。到達時間差はキャラクター位置 $\boldsymbol{x}$ に依存するが、全ての位置での時間差を予め計算し記憶してくには膨大なメモリ容量が必要となる。そこで、キャラクターの移動をキャラクターが立つ平面である x_1x_2 平面内に制限されることを仮定し、各散乱体上の境界要素からの影響を、x_1x_2 平面を均等に分割した 8 方向

$$\boldsymbol{e}^k = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{k\pi}{4} \\ \sin\dfrac{k\pi}{4} \\ 0 \end{pmatrix}, k = 0, 1, \cdots, 7 \tag{22}$$

に限定し、8 方向についての時間差 τ^k

$$\tau^k \simeq n\Delta t - \frac{1}{c}\left(|\boldsymbol{x}^I| - \boldsymbol{e}^k \cdot \boldsymbol{y}^I\right) \tag{23}$$

の境界要素からの影響を事前に計算しメモリにストアしておく。そのうえで、リアルタイムで動くキャラクターと散乱体の方向 $\dfrac{\boldsymbol{x}^I}{|\boldsymbol{x}^I|}$ とが最も近い方向

$$\boldsymbol{e}^* = \left\{ \boldsymbol{e}^k \ \middle|\ \max_k \left(\frac{\boldsymbol{x}^I}{|\boldsymbol{x}^I|} \cdot \boldsymbol{e}^k \right) \right\} \tag{24}$$

を求め、ストアされている $\boldsymbol{e}^*$ 方向の到達時間差を用いて影響を計算する (**Fig.3**)。つまり、式 (9) 右辺第 2 項について、キャラクターから遠方の散乱体 S_I からの影響は近似を用いて次のように求める。

$$
\begin{aligned}
&\int_{S_I}\int_0^{n\Delta t}\frac{\delta\left(n\Delta t-s-\frac{r}{c}\right)}{4\pi r}\frac{\partial u^M}{\partial n}(\boldsymbol{y},s)dsdS\\
\simeq&\sum_{\{j|S_j\in S_I\}}\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}^I|}\left(1+\frac{\boldsymbol{x}^I\cdot\boldsymbol{x}^{jI}}{|\boldsymbol{x}^I|^2}\right)\\
&\frac{\partial u^M}{\partial n}\left(\boldsymbol{x}^{jI},\tau^*\right)H\left(n\Delta t-\frac{|\boldsymbol{x}^I|}{c}\right)|S_j|\\
=&\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}^I|}H\left(n\Delta t-\frac{|\boldsymbol{x}^I|}{c}\right)\left\{\sum_j\frac{\partial u^M}{\partial n}\left(\boldsymbol{x}^{jI},\tau^*\right)|S_j|\right.\\
&\left.+\frac{\boldsymbol{x}^I}{|\boldsymbol{x}^I|^2}\cdot\sum_j\boldsymbol{x}^{jI}\frac{\partial u^M}{\partial n}\left(\boldsymbol{x}^{jI},\tau^*\right)|S_j|\right\} \qquad (25)
\end{aligned}
$$

ここに、

$$
\begin{aligned}
\tau^* &= n\Delta t-\frac{r}{c}\\
&\simeq n\Delta t-\frac{1}{c}\left(|\boldsymbol{x}^I|-\frac{\boldsymbol{x}^I\cdot\boldsymbol{y}^I}{|\boldsymbol{x}^I|}\right)\\
&\simeq n\Delta t-\frac{1}{c}\left(|\boldsymbol{x}^I|-\boldsymbol{e}^*\cdot\boldsymbol{y}^I\right) \qquad (26)
\end{aligned}
$$

であり、$|S_j|$ は境界要素 S_j の面積で境界積分は Gauss の 1 点積分を用いている。式 (9) 右辺第 3 項についても同様の遠方近似を用いて求める。

4. 計算精度について

内点計算の近似の精度検証のため、次の解析解を持つ Neumann 境界値問題を解き、内点における解析解と近似解との誤差を求める。**Fig.4** に示すような中心が $(0.25, 0.25, 0.075)$m で、x_1, x_2, x_3 軸方向に平行で、辺の長さがそれぞれ 0.5, 0.5, 0.15m の散乱体を持つ 3 次元無限領域を D とし、静止した点音源の座標を $\boldsymbol{x}^{\mathrm{o}} = (0.25, 0.25, -2)$m とする。入射波、Neumann 境界条件は下記の通りである。

$$
u^{\mathrm{o}}(t) = \left(1-\cos\frac{2\pi}{\Lambda}t\right)H(t) \qquad (27)
$$

$$
\bar{q}(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial u^{\mathrm{o}}(t-r_o/c)}{\partial n} \qquad (28)
$$

ここに、$\Lambda = 1.66\times10^{-3}$sec とした。境界 S を 640 個の三角形要素に分割し、$\Delta t = 1.66\times10^{-4}$sec、波速は $c = 340.29$m/sec とする。遠方近似を用いて、受音点を $\boldsymbol{x} = (0.25, 0.25, 0)$m から x_3 軸負の方向に遠ざけながら内点計算をしたところ、散乱体の中心からの距離と 2 ノルム誤差の関係は **Fig.5** のようになり、散乱体の中心からの距離が 2m あたりからは、先行研究 [9] で示した遠方近似を用いずに内点計算を行った際の数値誤差 (2.4×10^{-2}) と同程度となり、許容できる誤差となることがわかった。

5. Unity を用いたゲームアプリへの実装

バーチャル空間の構築には、Unity Version 2020.1.13f1 Personal を用いる [10]。中心がそれぞれ (0.25, 0.25, 0.075)m,(4.075, 0.25, -2)m で、x_1, x_2, x_3 軸方向に平行で、各辺の長さが 0.5, 0.5, 0.15m の 2 つの散乱体を持つ 3 次元無限領域を D とし、静止した点音源の座標を $\boldsymbol{x}^{\mathrm{o}} = (0.25, 0.25, -2)$m とする。

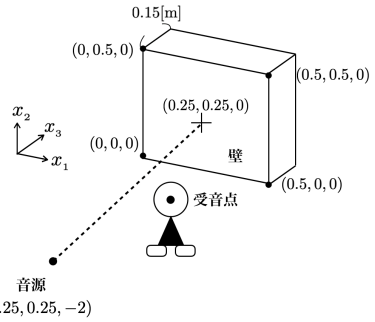


Fig. 4　解析領域

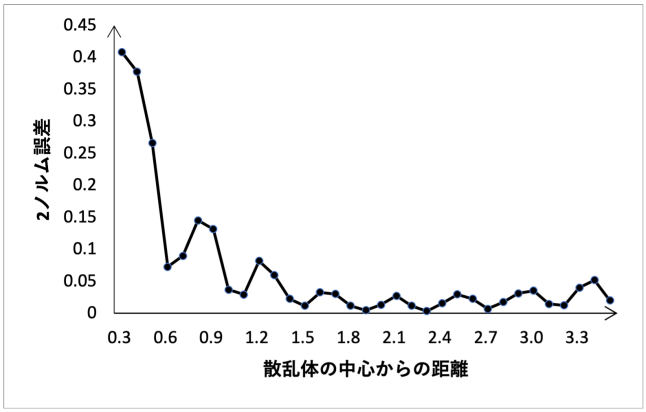


Fig. 5　散乱体の中心からの距離と 2 ノルム誤差の関係

点音源から発信する音 $u^{\mathrm{o}}(t)$ を式 (27) と同じとする。ここに、$\Lambda = 1.33\times10^{-3}$sec とする。また、境界条件は境界 ∂D 全てにおいて斉次 Neumann 条件とした。時間域境界積分方程式法による数値解析では、1 つの散乱体表面を 640 個の三角形要素で分割する (計 1280 要素)。また、サンプリング周波数を 12kHz($\Delta t = 8.33\times10^{-5}$sec) とする。フレームレートは 30fps を用いる。Unity はサンプリング周波数が 48kHz であり、音声を出力する関数 [11] は $\Delta\tau = \dfrac{1028}{48000} = 0.021$sec 毎に呼び出されるため、0.021sec ごとにキャラクターの位置情報の取得更新を行い、移動する内点の音場計算を行った。キャラクター位置と散乱体の中心との距離が 2m 以下の場合には内点計算式 (9) により計算し、2m を超える場合には遠方近似を用いた内点計算により計算する。48kHz の音の作成に必要となるデータ数は 0.021sec 毎に 1024 個であるが、本研究では 256 個のデータを計算し、線形補間により 1024 個分のデータを作成する。この操作を繰り返すことで、移動するキャラクターが聞く音を計算し出力する。

開発した Mac 用のアプリを下記 URL に掲載する。

`http://www-cm.acs.i.kyoto-u.ac.jp/`
`yskw/SoundVR_2021jascome.app.zip`

6. 結論

標準的なスペックのラップトップ PC(MacBook Pro 2.2 GHz クアッドコア Intel Core i7) でアプリを起動し、2 つの散乱体を持つ空間内 (**Fig.6**) でキャラクターを動かしたところ、

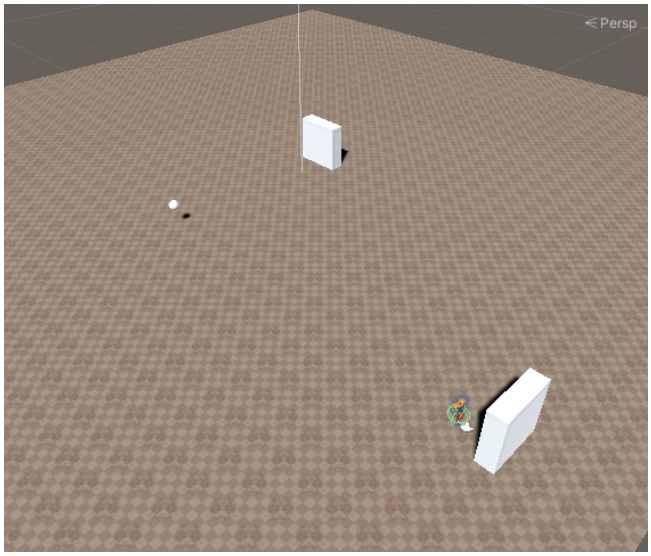


Fig. 6　2 つの散乱体を持つ仮想空間

キャラクターが聞く音をリアルタイムで再現できていることが確認できた。キャラクターを散乱体の近くを移動させることで、2 つの散乱体からの散乱波の影響も表現できていることが確認できた。遠方近似を用いた計算ではリアルタイムに実行する計算量が少なく、散乱体が 2 つ以上の場合にも十分リアルタイム可聴化が可能であると考えられる。

今回行った実装での音の作成方法では、音の作成間隔である 0.021sec 間の音同士のつなぎ合わせが連続的でないことにより、ノイズを含んだ音が鳴ってしまっている。音を連続的につなげることでノイズを含まない音を作成することは今後の課題である。また、今回の解析では音源を静止している 1 つの点音源とした。解いている問題は線形の問題であるため、音源が複数ある場合は同様の数値解析の結果を重ね合わすことで対応可能である。しかし、移動する音源を扱う場合には、移動する音源に対する応答は事前計算ができないため、今回の手法では対応が困難である。幾何音響理論に基づいた手法と提案手法をうまく使い分けるなど、移動音源への対応も今後の課題である。

謝辞

Unity でのゲームアプリ制作に協力頂いた川口功氏に厚く御礼を申し上げ、感謝の意を表します。

参考文献

(1) アスキーストア HP
https://ascii.jp/elem/000/004/063/4063805/

(2) 岸智也, 小島健二, 中原雅考, 羽入敏樹, 星和磨: テレビゲームにおけるサウンドエフェクト:インタラクティブリバーブの開発 (小特集:音楽制作を彩る音づくりの技術‘ エフェクタ”), 日本音響学会誌, **68-7**(2012), pp.362-368.

(3) 田近伸二, 樫山和男, 志村正幸: VR 技術を用いた対話型道路交通騒音評価システムの構築, 応用力学論文集, 土木学会, **13**(2010), pp.231–240.

(4) 谷川将規, 守屋陽平, 江嶋孝, 樫山和男, 志村正幸: VR 技術を利用した道路交通騒音評価システムの立体音響化と現実感向上に関する研究, 土木学会論文集 A2 (応用力学), **69-2**(2013), pp.I_155–I_162.

(5) Raghuvanshi, N., Snyder, J., Mehra, R., Lin, M., Govindaraju, N.: Precomputed Wave Simulation for Real-Time Sound Propagation of Dynamic Sources in Complex Scenes, ACM Transactions on Graphics, **29-4-68**(2010), pp.1–11.

(6) 尾本 章, 柏 紘: VR における音場再生の役割, 日本バーチャルリアリティ学会誌, **25-2**(2020), pp.13–18.

(7) 小林昭一他: 波動解析と境界要素法, (2000), 京都大学学術出版会.

(8) 石床竜一, 吉川仁: 時間域 BIEM による音場解析結果の VR 空間での可聴化について, 計算数理工学論文集, **18**(2018), pp.81–84.

(9) 吉川仁, 鈴木賢人: 時間域 BIEM を用いたゲームエンジンによる 3 次元空間を移動する受音点のリアルタイム可聴化, 計算数理工学論文集, **20**(2020), pp.89–94.

(10) Unity のホームページ
https://unity3d.com/jp

(11) KAYAC engineers' blog
https://techblog.kayac.com/dynamic-waveform-generation-without-audio-clip

計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月), 論文 No. 20-211218 JASCOME

サンプル点における曲面の勾配を考慮した Bスプライン近似に基づくレベルセットトポロジー最適化

A LEVEL-SET-BASED TOPOLOGY OPTIMISATION METHOD BASED ON A B-SPLINE APPROXIMATION USING SURFACE GRADIENTS AT SAMPLING POINTS

飯盛 浩司 [1)]

Hiroshi ISAKARI

1) 慶應義塾大学理工学部 (〒 223-8522 横浜市港北区日吉 3-14-1, E-mail: isakari@sd.keio.ac.jp)

In our previous paper, we proposed to discretise the level-set function by a B-spline surface in topology optimisation, which enabled us to implicitly control the geometric complexity of optimal designs by tuning the number of basis functions consisting of the B-spline surface. We later found, however, that the structure optimised by the original method could end up with a configuration having wavy boundaries caused by the Gibbs-like phenomena. This is due to the interpolation of the topological derivative, which is essentially discontinuous, by a smooth function. In this paper, we report that we can ameliorate this by modifying the definition of the B-spline surface approximation. In the present method, the B-spline surface approximating the topological derivative is constructed such that it fits the sampled data as well as specified gradients in a least-square sense.

Key Words: Topology optimisation, Level-set method, B-spline approximation

1. はじめに

トポロジー最適化 [(1)] は構造最適化の中でも最も設計自由度の高い方法として知られ、抜本的な性能の改善や新機能を付与するような設計が可能であるとされる。トポロジー最適化では、設計問題を、ユーザが設定した領域における最適な材料分布を求める問題に帰着する。素朴には、有界な設計領域で定義された特性関数 (例えば、設計対象内の各点で 1, その他の点で 0 と定義する) を求めれば良いが、このように定義した特性関数はいたるところ不連続であっても構わないことから、その解は製造が不可能なほどに複雑な形状となり得る [(2)]。したがって、実際に造形可能であるような工学的に意味のある解を求めるためには工夫を要する。これまでに均質化法に基づく方法 [(1)] や solid isotropic material with penalisation (SIMP) 法 [(3)] などの方法が提案され、広く利用されている。一方で、これらの方法を使用した場合に避けることのできないいわゆるグレースケールの発生を嫌って、レベルセット法 [(4, 5, 6, 2)] に基づく 0/1 のデザインを追求する方法も提案されている。

このような長年にわたる努力にも関わらず、設計案の幾何学的な複雑さをコントロールしながらトポロジー最適化を行うことは簡単ではない。これを実現可能な方法の代表例は Yamada らの方法 [(2)] である。当手法では、最適解の探索に用いるレベルセット関数の時間発展を反応拡散方程式で記述するが、その拡散係数を大きく (小さく) 設定することにより、幾何学的に単純 (複雑) な最適設計案を求めることができる。我々も、Amstutz の方法 [(6)] においてレベルセット関数を B スプライン曲面で表現することにより設計案の幾何学的複雑さを指定した上でトポロジー最適化を実行可能であることを示した [(7)]。B スプライン曲面は有界な台を持つ多項式 (B スプライン基底関数) の重ね合わせであることから、多くの基底関数を用いた場合には複雑な形状、少ない基底関数を用いた場合には単純な形状を導くことができる。これまでに、光学迷彩装置 [(8)]、弾性メタサーフェス [(9)]、広帯域な動作周波数を持つ音響レンズおよび遮音構造 [(10)] などの最適設計への適用例を通じて、その有効性を確認してきた。

しかしながら、当手法で得られる最適形状の境界は不自然に波打つ場合がある。この現象は以下のように理解することができる。当手法ではレベルセット関数を、自身とトポロジー導関数 [(11)] の重み付き和で逐次置き換えていくことにより形状を更新し最適解を探索する。したがって、レベルセッ

2021 年 10 月 30 日受付, 2021 年 11 月 26 日受理

ト関数のみならずトポロジー導関数も B スプライン曲面で表現する必要があり、先行研究においてはトポロジー導関数を補間する B スプライン曲面を用いた [7]。一方で、トポロジー導関数は設計対象の境界を跨いで不連続である。良く知られているように (例えば [12] を参照のこと)、不連続関数を滑らかな関数で補間 (あるいは近似) すると、不連続点の近傍で Gibbs 現象が発生する。これに伴い、B スプライン曲面で表現したレベルセット関数が意図に反して波打ち、その零等値線で表される設計対象境界も波打ってしまう場合がある。

そこで本論文では、先行研究 [7] における B スプライン曲面補間の方法を見直すことを検討する。具体的には、サンプル点において計算したトポロジー導関数を最小二乗近似する B スプライン曲面を構成するが、サンプルデータと B スプライン曲面の L_2 misfit を最小化するだけではなく、その勾配値を所望の値に制御する [13] ことでトポロジー導関数を近似する B スプライン曲面を生成する。

以下、第 2 節で B スプライン曲面を用いたレベルセット法を記述した後に、第 3 節で曲面近似の詳細を述べる。第 4 節においてここで提案する曲面近似の性能を検証し、さらに提案法によるトポロジー最適化の実行例を示す。最後に第 5 節において本論文の結論を述べる。

2. B スプライン曲面を用いたレベルセット法

本節では、B スプライン曲面のレベルセットに基づくトポロジー最適化 [7] について述べる。

本論文では、例として、以下で定義される形状汎関数

$$J = \sum_{m=1}^{M} f(u(\boldsymbol{x}_m^{\mathrm{obs}})) + \int_{\Gamma} g(u(\boldsymbol{x}), q(\boldsymbol{x}))d\Gamma \tag{1}$$

を最小化する領域形状 $\Omega \subset D$ を探索するトポロジー最適化問題を考える。ここに、$D \subset \mathbb{R}^2$ は有限の大きさの設計領域である。また、$\boldsymbol{x}_m^{\mathrm{obs}} \in \Omega \setminus D$ $(m = 1, \cdots, M)$ において実数値関数 f が定義され、Ω の境界 Γ で実数値関数 g が定義される。u は以下の境界値問題

$$\nabla^2 u(\boldsymbol{x}) + k_1^2 u(\boldsymbol{x}) = 0 \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega} \tag{2}$$

$$\nabla^2 u(\boldsymbol{x}) + k_2^2 u(\boldsymbol{x}) = 0 \quad \boldsymbol{x} \in \Omega \tag{3}$$

$$\lim_{\eta \downarrow 0} u(\boldsymbol{x} + \eta \boldsymbol{n}) = \lim_{\eta \downarrow 0} u(\boldsymbol{x} - \eta \boldsymbol{n}) \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma \tag{4}$$

$$\lim_{\eta \downarrow 0} \frac{q(\boldsymbol{x} + \eta \boldsymbol{n})}{\epsilon_1} = \lim_{\eta \downarrow 0} \frac{q(\boldsymbol{x} - \eta \boldsymbol{n})}{\epsilon_2} \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma \tag{5}$$

$$\frac{\partial u^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x})}{\partial |\boldsymbol{x}|} - \mathrm{i}k_1 u^{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{x}) = o\left(\frac{1}{\sqrt{|\boldsymbol{x}|}}\right) \quad \text{as } |\boldsymbol{x}| \to \infty \tag{6}$$

の解であるとする。また、$q(\boldsymbol{x}) := \boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla u(\boldsymbol{x})$ は Γ における u の flux であり、単位法線 $\boldsymbol{n}$ は Ω の外向きを正とする。また、ϵ_1、ϵ_2 はそれぞれ領域 $\mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}$、$\Omega$ で定義される定数であり、これを用いて波数は $k_i = \omega\sqrt{\epsilon_i}$ $(i = 1,\ 2)$ と定義される。ω は入射波 u^{in} の角周波数であり、$u^{\mathrm{sc}} := u - u^{\mathrm{in}}$ は散乱波である。

なお、ここでは後に示す数値計算例の都合上 u を 2 次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題の解であるとしたが、本研究で開発するトポロジー最適化は他の境界値問題を対象とする場合にも適用可能である。

上記の最適化問題を解くため、形状 Ω を以下で定義されるレベルセット関数 ϕ

$$(\mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}) \cup D = \{\boldsymbol{x} \mid \phi(\boldsymbol{x}) > 0\} \tag{7}$$

$$\Gamma = \{\boldsymbol{x} \mid \phi(\boldsymbol{x}) = 0\} \tag{8}$$

$$\Omega = \{\boldsymbol{x} \mid \phi(\boldsymbol{x}) < 0\} \tag{9}$$

$$\|\phi\| = 1 \tag{10}$$

で表現する。ここで、(10) は ϕ の持つ定数倍の自由度を排除するための正規化を表し、ノルム $\|\cdot\|$ の選択については後述する。このように定義したレベルセット関数を、仮想的な時刻 t を導入し、適当な初期仮定から以下

$$\frac{\partial \phi(x)}{\partial t} = \mathrm{sgn}(\phi)\{[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} J](\boldsymbol{x}) - (\mathcal{D}_{\mathrm{T}} J, \phi)\phi(\boldsymbol{x})\} \tag{11}$$

で時間発展させることでトポロジー最適化問題の (局所) 解を求めることができる [14]。ここに、$[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} J](\boldsymbol{x})$ はトポロジー導関数であり、本問題に対しては以下のように定義される。

$$[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} J](\boldsymbol{x}) = \lim_{\rho \downarrow 0} \frac{[\delta J]_\rho(\boldsymbol{x})}{\pi \rho^2} \tag{12}$$

ここに、$[\delta J]_\rho(\boldsymbol{x})$ は材料定数 ϵ_i $(i = 1,\ 2)$ を持つ物体で満たされた領域内の点 $\boldsymbol{x}$ に材料定数 ϵ_{3-i} を持つ半径 ρ の円形の材料を配置した時の目的関数の変化量を表す。また、$(\cdot, \cdot)$ はノルム (10) を誘導する内積である。

本研究では、時間発展方程式 (11) を解くにあたって、ϕ と $\mathcal{D}_{\mathrm{T}} J$ を以下のように離散化する。

$$\phi(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=0}^{n} \sum_{\ell=0}^{m} B_k^p(x_1) B_\ell^q(x_2) \hat{\psi}_{k\ell} \tag{13}$$

$$[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} J](\boldsymbol{x}) \simeq \sum_{k=0}^{n} \sum_{\ell=0}^{m} B_k^p(x_1) B_\ell^q(x_2) \hat{T}_{k\ell} \tag{14}$$

ここに、B_k^p $(k = 0, \cdots, n)$ は p 次の B スプライン基底関数であり、ここでは等間隔の clamped な knot[13] を用いて定義する。n、m の大小を調整することにより、最適形状の幾何学的複雑さを調整できる。また、$\hat{\psi}_{k\ell}$、$\hat{T}_{k\ell} \in \mathbb{R}$ は制御変数である。このような離散化のもとで、時間発展方程式 (11) に現れるレベルセット関数とトポロジー導関数を形式的にそれぞれに対応する制御変数に置き換えることができる。さらに時間微分を前進差分で近似すれば、(11) の求解は、レベルセット関数の制御変数をその制御変数とトポロジー導関数の制御変数の重み付き和で逐次的に置き換えていくことに帰着される。

3. B スプライン曲面近似

本節では、トポロジー導関数を近似する B スプライン曲面 (14) の制御変数 $\hat{T}_{k\ell}$ を求める方法について述べる。

先行研究においては、$(n+1)(m+1)$ 個ある Greville 点 [13] で計算したトポロジー導関数 ((14) の左辺) を補間する B スプライン曲面を用いた。しかしながら、トポロジー導関数は

Γ において不連続であり、このような方法で求めた B スプライン曲面は Γ の近傍で振動する。そこで、本研究では

$$P := \sum_{i=0}^{N}\sum_{j=0}^{M}\left|[\mathcal{D}_{\mathrm{T}}J](\tilde{\boldsymbol{x}}_{ij}) - \sum_{k=0}^{n}\sum_{\ell=0}^{m}B_k^p(\tilde{x}_i)B_\ell^q(\tilde{y}_j)\hat{T}_{k\ell}\right|^2 + \sum_{i=0}^{N}\sum_{j=0}^{M}c_{ij}\left|X(\tilde{\boldsymbol{x}}_{ij}) - \sum_{k=0}^{n}\sum_{\ell=0}^{m}\frac{\mathrm{d}B_k^p(\tilde{x}_i)}{\mathrm{d}x_1}B_\ell^q(\tilde{y}_j)\hat{T}_{k\ell}\right|^2 + \sum_{i=0}^{N}\sum_{j=0}^{M}d_{ij}\left|Y(\tilde{\boldsymbol{x}}_{ij}) - \sum_{k=0}^{n}\sum_{\ell=0}^{m}B_k^p(\tilde{x}_i)\frac{\mathrm{d}B_\ell^q(\tilde{y}_j)}{\mathrm{d}x_2}\hat{T}_{k\ell}\right|^2 \quad (15)$$

を最小化する制御変数 $\hat{T}_{k\ell}$ を採用する。ここに、$\tilde{\boldsymbol{x}}_{ij} = (\tilde{x}_i, \tilde{y}_j)$ は設計領域 D 内の格子点であり、これらの点においてトポロジー導関数をサンプルする。$N+1$、$M+1$ はそれぞれ x_1、x_2 方向の格子点の数、c_{ij}、$d_{ij} > 0$ は定数である。また、X と Y は以下で定義される。

$$X(\tilde{\boldsymbol{x}}_{ij}) = \begin{cases} \dfrac{[\mathcal{D}_{\mathrm{T}}J](\tilde{\boldsymbol{x}}_{i+1,j}) - [\mathcal{D}_{\mathrm{T}}J](\tilde{\boldsymbol{x}}_{i-1,j})}{\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_{i-1}} & \text{if } \hat{\boldsymbol{x}}_{ij} \notin \mathcal{N}(\Gamma) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (16)$$

$$Y(\tilde{\boldsymbol{x}}_{ij}) = \begin{cases} \dfrac{[\mathcal{D}_{\mathrm{T}}J](\tilde{\boldsymbol{x}}_{i,j+1}) - [\mathcal{D}_{\mathrm{T}}J](\tilde{\boldsymbol{x}}_{i,j-1})}{\tilde{y}_{j+1} - \tilde{y}_{j-1}} & \text{if } \hat{\boldsymbol{x}}_{ij} \notin \mathcal{N}(\Gamma) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (17)$$

ここに、$\mathcal{N}(\Gamma)$ は Γ の近傍であり、ここでは Γ からの距離が格子点間距離の二倍よりも小さい点の集合とする。すなわち、(トポロジー導関数が不連続となる) 境界 Γ の近傍では急激な変化を抑制しつつ、それ以外の領域では H_1 ノルムの意味でトポロジー導関数を最小二乗近似する B スプライン曲面を用いる。ただし、トポロジー導関数の勾配は直接求めることが難しいため中央差分を用いて計算する。なお、CAD などの分野においては (16)、(17) の X、Y を恒等的に零とする、すなわち近似曲面の勾配を小さく保ちながら最小二乗近似する方法が用いられることもある [13] が、本研究ではトポロジー導関数を可能な限り精度良く近似するため上記の定義を行った。また、サンプル点 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{ij}$ を格子点に取ることができ、簡単にトポロジー導関数の勾配を推定できることも上記の定義を行った理由のひとつである。(15) を最小にする条件は、

$$\partial P/\partial \hat{T}_{kl} = 0 \quad (18)$$

で与えられる。(18) から得られる $(n+1)(m+1)$ 元の連立一次方程式を解くことにより制御変数 $\hat{T}_{kl}$ を得る。なお、ここに現れる連立一次方程式の係数行列は B スプライン基底関数の台の局所性より疎行列である。しがたって、必要な行列を圧縮行格納 (CSR) 方式で保持し、GMRES などの反復法を用いて解けば良い。

本研究ではトポロジー導関数の近似曲面として (15) を用いることから、レベルセット関数の時間発展 (11) に現れる内積についても H_1 ノルムを採用する。

4. 数値計算例

4.1. 近似曲面の精度について

本節では、3 節で示した曲面近似法の妥当性を検証する目的で実施した数値計算の例を示す。ここでは、以下の不連続な曲面 (Fig. 1(f) を参照)

$$f(x_1, x_2) = H\left(\frac{1}{36} - \left(x_1 - \frac{1}{4}\right)^2 - \left(x_2 - \frac{1}{4}\right)^2\right) + \sin 2\pi x_1 \cos 2\pi x_2 H\left(x_1 - \frac{1}{2}\right) H\left(x_2 - \frac{1}{2}\right) \quad (19)$$

を考える。ここに、$H(\cdot)$ は Heaviside 関数である。$0 \le x_1,\ x_2 \le 1$ 内の 101×101 点の等間隔な格子点において f の値をサンプリングし、これを以下の意味で近似する B スプライン曲面を生成する:

(a) (16)、(17) を用いて (15) を最小化する提案法 (Proposed approximation)

(b) (16)、(17) において X および Y を恒等的に零とした上で (15) を最小化 (Reguralised L_2 least-square approximation)

(c) 全てのサンプル点に対して (16)、(17) の上式で定義される X および Y を用いて (15) を最小化 (H_1 least-square approximation)

(d) (15) において $c_{ij} = d_{ij} = 0$ としたものを最小化 (L_2 least-square approximation)

また、比較のため

(e) 先行研究 [7] で用いていた方法。すなわち、Greville 点でサンプリングした f を補間する方法 (Interpolation)

による B スプライン曲面も生成する。B スプライン曲面を構成する基底関数の数は x_1、x_2 方向それぞれに 51 個とし、その次数は 2 とした。また、c_{ij}、d_{ij} はサンプル点 $\hat{\boldsymbol{x}}_{ij}$ の属するノット区間の幅 Δ を用いて $1/(10\Delta^2)$ と設定した。

Fig. 1 に、上記 (a)–(e) により得られた近似曲面を「正解」(f) と併せて示す。従来用いていた補間の場合 (e) には、Gibbs 現象が顕著に現れており、不連続点 (左下の円周と $1/2 < x_1 < 1$, $x_2 = 1/2$) の周辺において曲面が振動している様子が観察される。補間のかわりに近似を用いる (a)–(d) においてそのような現象は抑制されているものの、特に (c) と (d) においては依然として不連続点の周辺で曲面の振動が認められる。一方で、不連続点付近における近似曲面の勾配を零に近づける提案法 (a) および (b) は精度良くもとの曲面を復元できているように見える。(a) と (b) の差異は図からはほとんど判別できないが、10201 個のサンプル点における正解と近似曲面の絶対誤差の平均 $\varepsilon_{\mathrm{ave}}$ は (a) の場合に 1.166×10^{-2}、(b) の場合に 1.198×10^{-2} であり、(a) の方が若干精度が良いことが確認できた。なお、(c)、(d)、(e) の場合には、それぞれ $\varepsilon_{\mathrm{ave}} = 1.181 \times 10^{-2}$、$1.274 \times 10^{-2}$、$1.250 \times 10^{-2}$ であった。

4.2. 光学迷彩構造のトポロジー最適化

つぎに、提案法によるトポロジー導関数の近似 B スプライン曲面を用いたトポロジー最適化の実行例を示す。ここで

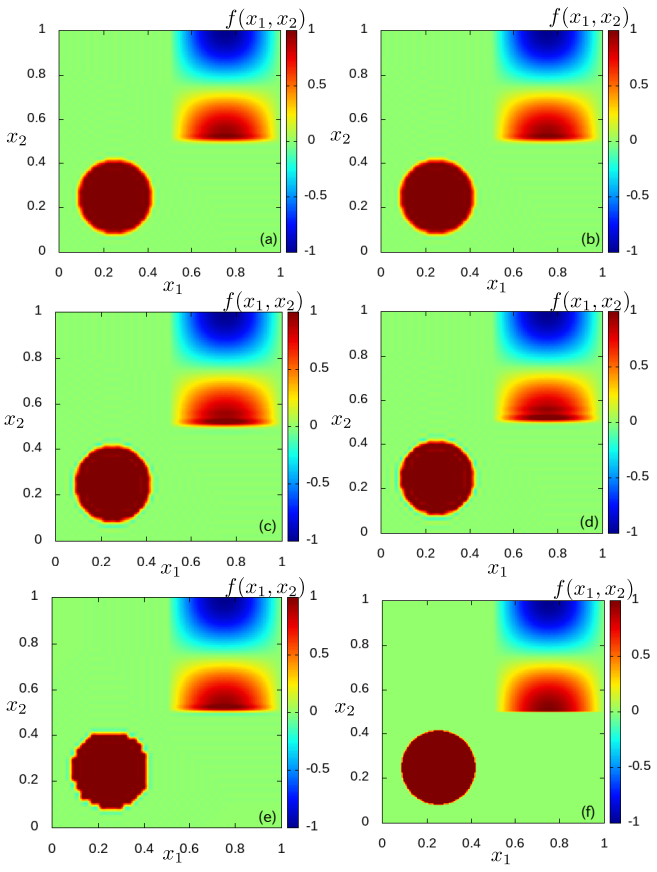


Fig. 1 B-spline surfaces approximating the surface defined by (19) (plotted in (f)) by various approximation and interpolation schemes. See the main text for the detailed algorithms to generate (a)–(e).

は、光学迷彩装置のトポロジー最適化を例題として取り上げ、先行研究 [8] と同じ最適化問題を解いた。すなわち、設計領域を $D = [-30, 30]^2$ とし、x_1 軸正の方向に伝播する角周波数 $\omega = 0.5$ の平面波に対して、散乱断面積 σ [15] と原点を中心とした半径 7 の円内における電磁場の強度を最小化する誘電体分布を探索した。すなわち、目的関数 J を以下のように定義した。

$$J = c_1\sigma + \frac{c_2}{M}\sum_{m=1}^{M} |u(\boldsymbol{x}_m^{\mathrm{obs}})|^2 \tag{20}$$

ここに、$c_1 = 0.1$、$c_2 = 1.0$ は重み定数、$\boldsymbol{x}_m^{\mathrm{obs}}$ $(m = 1, \cdots, M)$ は電磁場を最小化する円内に M 個配置した観測点の座標を表す。(20) の右辺第一項により不可視化対象および光学迷彩装置による散乱場強度を遠方において最小化する。また、第二項により、与えた円内部の全電磁場を最小化し、そのような領域に配置した任意形状の任意材料を不可視化することができる [16]。初期形状としては、$(x_1, x_2) = (-15, 15)$、$(15, 15)$、$(-15, -15)$、$(15, -15)$ を中心とする半径 8.0 の円形誘電体を 4 つ与えた。材料定数は $\epsilon_1 = 1.0$、$\epsilon_2 = 2.0$ とした。トポロジー導関数をサンプリングする点として、設計領域内に 101×101 点の格子点を配置し、B スプライン基底関数の数 n_{cp} を $n_{\mathrm{cp}} = 21\times21$、$31\times31$、$41\times41$、$51\times51$ の 4 種類設定して数値計算を実行した。最適化の収束判定の条件は、先行研究 [7] と同様に、直線探索によって定まる形状更新のステップ幅 κ (その定義は原著 [7] を参照されたい) が 5×10^{-4} を下回わることとした。また、目的関数およびサンプル点におけるトポロジー導関数の計算には境界要素法を用いた。境界要素は、サンプル点におけるレベルセット関数の値をもとにすべての最適化ステップにおいて再生成した [17]。

Fig. 2 に得られた最適形状を示す。n_{cp} が大きくなるにつれて複雑な形状が得られていることが分かる。実際、Ω_2 の周長と面積の比は、1.190 ($n_{\mathrm{cp}} = 21\times21$ のとき)、1.353 ($n_{\mathrm{cp}} = 31\times31$ のとき)、1.623 ($n_{\mathrm{cp}} = 41\times41$ のとき)、1.970 ($n_{\mathrm{cp}} = 51\times51$ のとき) であった。一方で、大まかな形状はいずれの場合にも似たものが得られていることも見てとれる。ユーザは、製造性を鑑み、得られた構造のいずれかを選択して利用することができる。

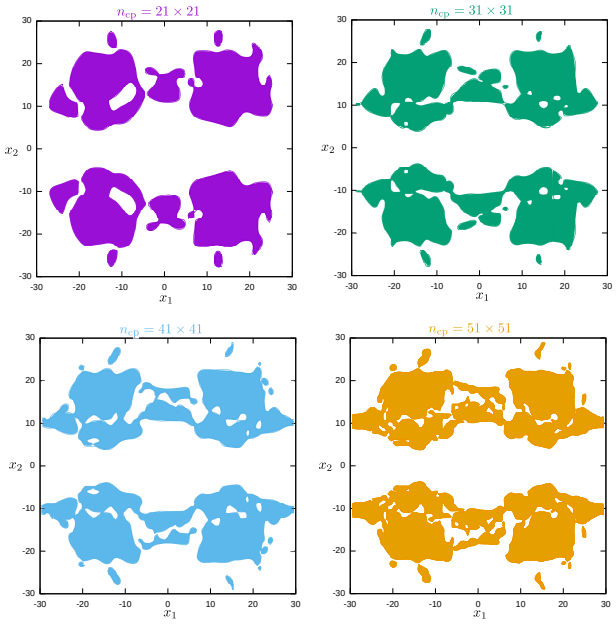


Fig. 2 Optimised cloaking devices for $n_{\mathrm{cp}} = 21\times21$, 31×31, 41×41, 51×51. The coloured area indicates Ω_2 in which dielectric (w/ $\epsilon = 2.0$) is allocated. As n_{cp} increases, geometrically complicated configuration is obtained.

さらに、最適化の過程における目的関数の推移を Fig. 3 に、最適形状周辺の磁場 (実部) を Fig. 4 に示す。n_{cp} が大きいほど目的関数の値は小さくなり、クローキングデバイスとして優れたものが得られていることが分かる。また、先行研究 [8] で得られた構造のうち、得られた散乱断面積の最小値は 0.3064 であったが、$n_{\mathrm{cp}} = 51\times51$ の場合にはこれを 0.05701 まで減少させることができた。従来法を用いた場合

よりも性能の良い構造を得ることができたと言える。

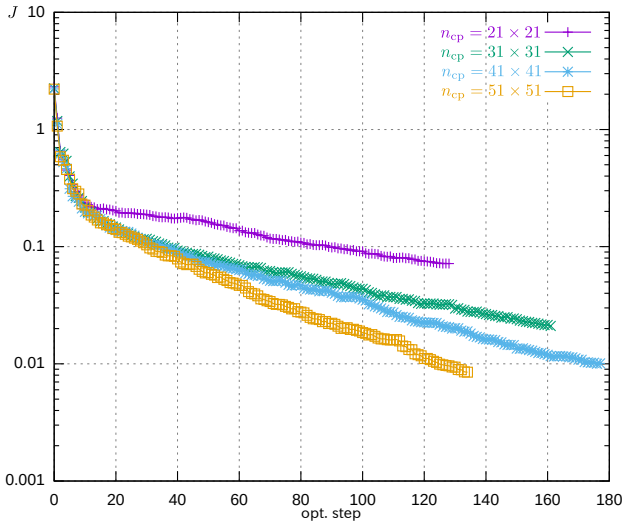


Fig. 3　History of the objective function.

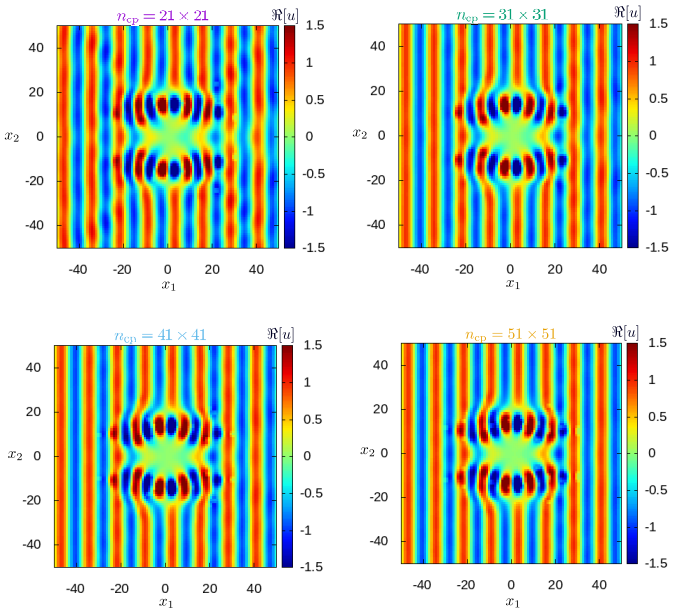


Fig. 4　The magnetic intensities around the design domain. The optimised structure with large n_{cp} can reduce the scattering more effectively.

5. おわりに

本論文では、B スプライン曲面のレベルセットを用いたトポロジー最適化 [7] において、トポロジー導関数を B スプラインで近似する際にその勾配の情報を用いる方法、そのような曲面で表現したトポロジー導関数を用いたトポロジー最適化を提案した。開発した手法を用いると、波動問題に関連するトポロジー最適化の中でも比較的難しい問題であると考えられる光学迷彩装置の最適設計を、得られる設計案の幾何学的複雑さを制御しながら実行できることを示した。また、目的関数の値をより小さくできるという意味で、従来法を改良できたと言える。今後の課題としては、3 次元問題に対する提案法の実装を行うこと、局所的に形状の複雑さを制御可能な手法を開発することなどが挙げられる。

参考文献

(1) M. P. Bendsøe and N. Kikuchi. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 71, No. 2, pp. 197–224, 1988.

(2) T. Yamada, K. Izui, S. Nishiwaki, and A. Takezawa. A topology optimization method based on the level set method incorporating a fictitious interface energy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199, No. 45, pp. 2876–2891, 2010.

(3) M. P. Bendsøe and O. Sigmund. Material interpolation schemes in topology optimization. *Archive of applied mechanics*, Vol. 69, No. 9, pp. 635–654, 1999.

(4) M. Y. Wang, X. Wang, and D. Guo. A level set method for structural topology optimization. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Vol. 192, No. 1, pp. 227–246, 2003.

(5) G. Allaire, F. Jouve, and A. M. Toader. Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method. *Journal of computational physics*, Vol. 194, No. 1, pp. 363–393, 2004.

(6) S. Amstutz and H. Andrä. A new algorithm for topology optimization using a level-set method. *Journal of Computational Physics*, Vol. 216, No. 2, pp. 573–588, 2006.

(7) 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎. B スプライン曲面のレベルセットを用いたトポロジー最適化. 計算数理工学論文集, Vol. 17, pp. 125–130, 2017.

(8) 山本遼, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎. 散乱断面積最小化によるクローキングデバイスのトポロジー最適設計. 計算数理工学論文集, Vol. 19, pp. 67–72, 2019.

(9) K. Matsushima, H. Isakari, T. Takahashi, and T. Matsumoto. A topology optimisation of composite elastic metamaterial slabs based on the manipulation of far-field behaviours. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 63, No. 1, pp. 231–243, 2021.

(10) J. Qin, H. Isakari, K. Taji, T. Takahashi, and T. Matsumoto. A robust topology optimization for enlarging working bandwidth of acoustic devices. *Interna-*

tional Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 122, No. 11, pp. 2694–2711, 2021.

(11) A. Sokolowski, J.and Zochowski. On the topological derivative in shape optimization. *SIAM journal on control and optimization*, Vol. 37, No. 4, pp. 1251–1272, 1999.

(12) T. J. R. Hughes, J. A. Cottrell, and Y. Bazilevs. Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Vol. 194, No. 39-41, pp. 4135–4195, 2005.

(13) L. Piegl and W. Tiller. *The NURBS book*. Springer Science & Business Media, 1996.

(14) S. Amstutz. Analysis of a level set method for topology optimization. *Optimization Methods and Software*, Vol. 26, No. 4-5, pp. 555–573, 2011.

(15) H. Ammari, B. Fitzpatrick, H. Kang, M. Ruiz, S. Yu, and H. Zhang. *Mathematical and computational methods in photonics and phononics*, Vol. 235. American Mathematical Soc., 2018.

(16) K. Nakamoto, H. Isakari, T. Takahashi, and T. Matsumoto. A fast topology optimisation for material- and geometry-independent cloaking devices with the BEM and the $\mathcal{H}$-matrix method. *arXiv preprint arXiv:1611.08072*, 2016.

(17) H. Isakari, K. Nakamoto, T. Kitabayashi, T. Takahashi, and T. Matsumoto. A multi-objective topology optimization for 2D electro-magnetic wave problems with the level set method and BEM. *European Journal of Computational Mechanics*, Vol. 25, No. 1-2, pp. 165–193, 2016.

A ROBUST TOPOLOGY OPTIMISATION IN 2D ACOUSTICS FOR IMPEDANCE MATERIALS USING THE BOUNDARY ELEMENT METHOD

Jincheng QIN[1)], Hiroshi ISAKARI[2)], Toru TAKAHASHI[3)], Toshiro MATSUMOTO[4)]

1) Nagoya University (〒 464-8603 Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, E-mail: qin.jincheng@g.mbox.nagoya-u.ac.jp)
2) Keio University (〒 223-8522 3-14-1, Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, E-mail: isakari@sd.keio.ac.jp)
3) Nagoya University (〒 464-8603 Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, E-mail: toru.takahashi@mae.nagoya-u.ac.jp)
4) Nagoya University (〒 464-8603 Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, E-mail: t.matsumoto@nuem.nagoya-u.ac.jp)

Topology optimisation is well known as a powerful tool for designing various structures. However, the optimal structure obtained by it can fail to handle uncertainties originating from its working environment. For example, an acoustic device optimised at a given frequency cannot guarantee its performance if the frequency deviates a little from the assumption. On the other hand, it is desirable to design devices insensitive to environmental perturbation. We here develop a topology optimisation to find a robust acoustic design concerning perturbation in the exciting frequency. The design target is characterised by the impedance boundary condition. We formulate an appropriate objective function and its topological sensitivity and then incorporate them into a topology optimisation method with the level-set method. The feasibility of the present method is shown in a numerical example of sound barrier designs with wide working bandwidth.

Key Words: Robust topology optimisation, Topological derivative, Boundary element method, Acoustics

1. Introduction

Recent years have witnessed growing and extensive demands for high-performance designs. The best performance of a design depends not only on its structural and material configurations but also on the working environment which makes up the system. Owing to the consideration of both aspects, topology optimisation turns out to be one of the most flexible design tools with broad applications such as truss structure[(1)], wave lens[(2)], wave cloak[(3)], and so forth. Usually, during a standard topology optimisation (which is henceforth called "deterministic" optimisation in this paper), the structure is optimised to an ideal configuration with one or multiple fixed design parameters assumed. However, even a slight perturbation in the design parameter can, in turn, lead to a drastic deterioration in performance since the optimum works in the inevitable presence of uncertainty encountered in the real world. It is, therefore, of importance to take the uncertainties into account at the design stage.

So far, several strategies have been proposed to resolve the issue. Worst-case-based topology optimisation[(4)] is one of the most efficient approaches. Its applicable range is, however, limited because balancing the result obtained for the worst case with the deterministic optimum does not provide the structure that can handle the "intermediate" uncertainties in a complicated situation. Another strategy with the surrogate model[(5)] also has a similar weakness because a small number of sampled possibilities may often be insufficient for recovering well the physical complexity. Reliability-based topology optimisation [(6)] and the Monte-Carlo method[(7)] get various possible cases involved to emulate uncertainties in accurate manners. Their expensive computation, however, keeps away the interest of application in practice. Robust topology optimisation refines the quantification of probability with the notions of expectancy and variance. It successfully models the uncertainty with fidelity at a relatively cheap cost. Such advantages make it a prevalent topic for applications in classical structural optimisations such as compli-

Received Nov. 1, 2021, Accepted Nov. 26, 2021

ance minimisation[8, 9, 10, 11].

On the other hand, little attention has been paid to wave problems. Sato et al.[12, 13] incorporated the robust topology optimisation into designs for electromagnetic wave cloaking, in which the uncertainties in the incident frequency and angle are considered. The robustness is evaluated by the derivatives of the objective function with respect to the incident frequency and angle. Evaluating the frequency derivatives requires solving the Helmholtz equation in the exterior domain with a source term. They truncate the unbounded region using the PML boundary condition and evaluate the frequency derivatives with the finite element method (FEM). Usually, such an explicit evaluation with domain integrals involved is computationally expensive and may have limited their approximation up to second order. We have, in the previous study [14], established a boundary-element-based method to efficiently compute the derivatives. Unlike the FEM-based one, our method does not involve any volume integral and thus can naturally and efficiently deal with the exterior acoustic field. We have also pointed out that, with the help of automatic differentiation, we can facilitate the arbitrary higher-order approximation of uncertainty. With these strategies, we came up with a robust topology optimisation for acoustically rigid structures and significantly broaden the working bandwidth of acoustic devices compared with the second-order cases. Soft materials such as sponges and plastics are, however, preferred rather than rigid materials because of their flexibility and cheaper costs as usual choices for building acoustic devices. Motivated by the engineering value, in this work, we extend our robust optimisation for acoustic structures with impedance boundary conditions.

2. Problem statement of the deterministic topology optimisation

In this section, we briefly show the standard topology optimisation of deterministic type as preliminaries for presenting the proposed robust topology optimisation.

We here consider the following exterior boundary value problem (BVP) in 2D:

$$\nabla^2 p(\mathbf{x}) + k^2 p(\mathbf{x}) = 0 \quad \mathbf{x} \in \Omega, \tag{1}$$

$$p(\mathbf{x}) = 0 \quad \mathbf{x} \in \Gamma_p, \tag{2}$$

$$q(\mathbf{x}) := \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \nabla p(\mathbf{x}) = 0 \quad \mathbf{x} \in \Gamma_q, \tag{3}$$

$$q(\mathbf{x}) = \frac{i\rho\omega}{z} p(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_z, \tag{4}$$

$$\text{Outgoing radiation condition for } p^{\mathrm{sc}}, \tag{5}$$

where p denotes the complex amplitude of the sound pressure and q is its normal flux across the boundary $\Gamma := \overline{\Gamma_p \cup \Gamma_q \cup \Gamma_z}$. As depicted in Fig. 1, in this work we specify the normal direction $\mathbf{n}$ on Γ directed from the open fluid domain Ω. $k = \omega/v$ stands for the wavenumber, where ω and v are the angular frequency and sound speed in Ω, respectively. ρ is the density of the inviscid and compressive fluid filled in Ω. z denotes the sound impedance on Γ_z of the solid filled in $\mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}$. The sound field is assumed time-harmonic with time dependence $e^{-i\omega t}$. The Sommerfeld radiation condition (5) is imposed to guarantee the solution of scattering waves $p^{\mathrm{sc}} = p - p^{\mathrm{in}}$ to be physically outgoing, where p^{in} is the incident field. Under the constraints defined by (1)–(5). We want to find a solid object in a user-specified design domain D, i.e $\mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega} \subset D$, optimising the following objective function:

$$F(\omega) = \sum_{m=1}^{M} f\left(p\left(\mathbf{x}_m^{\mathrm{obs}}\right)\right) + \int_{\Gamma} g(p(\mathbf{x}), q(\mathbf{x}))\mathrm{d}\Gamma(\mathbf{x}), \tag{6}$$

where f and g are real functionals defined on some observation points $\mathbf{x}_m^{\mathrm{obs}} \in \Omega \setminus D$ for $m = 1, \cdots, M$ and the boundary Γ, respectively.

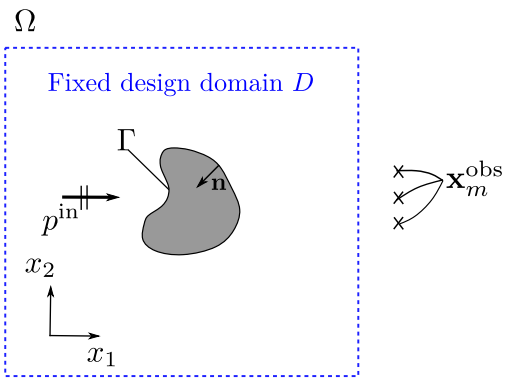


Fig. 1: Illustration of the problem.

The level-set method is employed to operate optimisations. To represent the configuration of a structure, we introduce a level-set function defined as

$$\phi(\mathbf{x}) > 0 \quad \text{if } \mathbf{x} \in \Omega \cap D, \tag{7}$$

$$\phi(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{if } \mathbf{x} \in \Gamma, \tag{8}$$

$$\phi(\mathbf{x}) < 0 \quad \text{if } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}, \tag{9}$$

whose evolution is governed by[15]

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = [\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F](\mathbf{x}, t) - (\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F, \phi)_{L^2(D)} \phi(\mathbf{x}, t), \tag{10}$$

where

$$(\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F, \phi)_{L^2(D)} = \int_D [\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F](\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \mathrm{d}\Omega, \tag{11}$$

is the L^2 inner product of $\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F$ and ϕ in the design domain D, and t is the fictitious time corresponding to an optimisation step. $\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F$ represents the topological derivative defined as

$$[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F](\mathbf{x}) = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \frac{[\delta F]_{\varepsilon}(\mathbf{x})}{a(\varepsilon)}, \tag{12}$$

in which $[\delta F]_{\varepsilon}(\mathbf{x})$ is the change in objective functional when a circular geometric perturbation of radius ε is introduced at $\mathbf{x}$, and $a(\varepsilon)$

is a monotonically increasing function of $\varepsilon > 0$ vanishing at $\varepsilon = 0$.

We use a finite difference method to solve (10). At the beginning of every optimisation step, boundary Γ is regenerated according to the distribution of ϕ. See, for example, our previous publication[16] for more details.

When the geometric perturbation at $\mathbf{x}$ is the creation of a hole whose boundary condition is specified as the impedance boundary condition with the impedance z, the topological derivative[17] is given as

$$\left[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F\right](\mathbf{x}) = \Re\left[\frac{i\rho\omega p(\mathbf{x})\lambda(\mathbf{x})}{z}\right], \tag{13}$$

in a two-dimensional Helmholtz problem defined as (1)–(5), where the adjoint variable λ solving the following BVP:

$$\nabla^2\lambda(\mathbf{x}) + k^2\lambda(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^{M} \frac{\partial f\left(\mathbf{x}_m^{\mathrm{obs}}\right)}{\partial p}\delta\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}_m^{\mathrm{obs}}\right) = 0 \quad \mathbf{x} \in \Omega, \tag{14}$$

$$\lambda(\mathbf{x}) = -\frac{\partial g}{\partial q}(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_p, \tag{15}$$

$$\mu(\mathbf{x}) := \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \nabla\lambda(\mathbf{x}) = \frac{\partial g}{\partial p}(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_q, \tag{16}$$

$$\mu(\mathbf{x}) = \frac{i\rho\omega}{z}\left(\lambda + \frac{\partial g}{\partial q}\right)(\mathbf{x}) + \frac{\partial g}{\partial p}(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_z, \tag{17}$$

$$\frac{\partial\lambda(\mathbf{x})}{\partial|\mathbf{x}|} - \mathrm{i}k\lambda(\mathbf{x}) = o\left(\frac{1}{\sqrt{|\mathbf{x}|}}\right) \quad \text{as } |\mathbf{x}| \to \infty, \tag{18}$$

is introduced. Here, δ is the Dirac delta. The forward ((1)–(5)) and adjoint BVPs (14)–(18) can be solved by using the boundary element method.

3. Robust topology optimisation

3.1. Objective function

In the aforementioned topology optimisation, the angular frequency ω describes a monochrome oscillating state. The optimal configuration evolves to fit this highly specific circumstance. As a consequence, its performance might degrade drastically when the working frequency slightly deviates from ω. If we hope to ameliorate such a sensitive behaviour of the optimum, we need to include the frequency response in the vicinity of ω in the objective function. To do this, we first introduce a stochastic variable subject to some distribution. We here assume, instead of a fixed value, that ω follows the following normal distribution:

$$\mathrm{E}[\omega] := \int_{-\infty}^{\infty} \omega \frac{e^{-\frac{(\omega-\omega_0)^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi}\sigma}\mathrm{d}\omega = \omega_0, \tag{19}$$

$$\mathrm{E}\left[(\omega - \omega_0)^2\right] = \sigma^2, \tag{20}$$

in which ω_0 and σ denote the expectancy and standard deviation of the (stochastic) angular frequncy, respectively. The higher-order moments[18] of the perturbation in the frequency are given as

$$\mathrm{E}\left[(\omega - \omega_0)^n\right] = s_n(n-1)!!\sigma^n, \tag{21}$$

for $n = 1, 2\cdots$ where !! represents the double factorial, and $s_n = (1 + (-1)^n)/2$ is defined. With such ω the objective function F in (6) also becomes stochastic. The expectancy $\mathrm{E}[F(\omega)]$ and variance $\mathrm{Var}[F(\omega)]$ respectively measure the average magnitude and variation of F over a frequency range of interest. With the help of Taylor series expansion, their approximation at ω can be written as

$$\mathrm{E}[F(\omega)] \simeq F(\omega_0) + \sum_{n=1}^{N} \frac{F^{(n)}(\omega_0)}{n!}\mathrm{E}\left[(\omega - \omega_0)^n\right], \tag{22}$$

and

$$\mathrm{Var}[F(\omega)] \simeq \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}\left[s_{n+m}(n+m-1)!! - s_n s_m(n-1)!!(m-1)!!\right]\frac{F^{(n)}(\omega_0)}{n!}\frac{F^{(m)}(\omega_0)}{m!}\sigma^{n+m}, \tag{23}$$

respectively. For the simplicity of notation, here and in the remaining of this paper, we use $F^{(n)}$ to denote the n^{th} derivative of a variable F with respect to ω. The main idea of the robust topology optimisation is to optimise the expectancy of F meanwhile suppressing its variance. We thus define the objective function for a robust design as

$$J = (1-\eta)F(\omega_0) + \eta\left\{\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}\left[s_{n+m}(n+m-1) - s_n s_m(n-1)!!(m-1)!!\right]\frac{F^{(n)}(\omega_0)}{n!}\frac{F^{(m)}(\omega_0)}{m!}\sigma^{n+m}\right\}^{\frac{1}{2}}, \tag{24}$$

in which the weight between two terms is adjusted with a coefficient $0 \le \eta \le 1$. We just keep the 0^{th} order term for the approximation of expectancy. In such a way letting $\eta = 0$ or $N < 2$ in (24) recovers the sheer deterministic objective function in (6). The standard deviation is employed instead of the variance to guarantee that the dimensions of the first and second terms in RHS of in (24) are identical to each other.

3.2. Topological derivative

The last subsection gives the objective function for the robust optimisation. By the chain rule, we can express the topological derivative corresponding to (24) as

$$\mathcal{D}_{\mathrm{T}} J = (1-\eta)[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F(\omega_0)] + \left\{\eta\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{M}\left[s_{n+m}(n+m-1)!! - s_n s_m(n-1)!!(m-1)!!\right]\frac{F^{(n)}(\omega_0)}{n!}\frac{[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F^{(m)}](\omega_0)}{m!}\sigma^{n+m}\right\}/\sqrt{\mathrm{Var}_N\, F}, \tag{25}$$

where $\mathrm{Var}_N\, F$ denotes the RHS of (23).

We can easily compute the angular frequency derivatives of the objective functional $F^{(n)}$ in (25) by solving angular frequency differentiated boundary integral equations[14]. Also, in the previous

study, for an exterior Helmholtz problem with the Neumann boundary condition, we observe

$$\left[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F^{(n)}\right] = \left[\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F\right]^{(n)}, \tag{26}$$

i.e. the differential order of an objective functional with respect to the angular frequency and a geometric change, is commutative. It is reasonable to infer that such commutativity also works for the current impedance problem. In this paper, we check (26) only numerically.

4. Numerical examples

4.1. Validation of the topological derivative

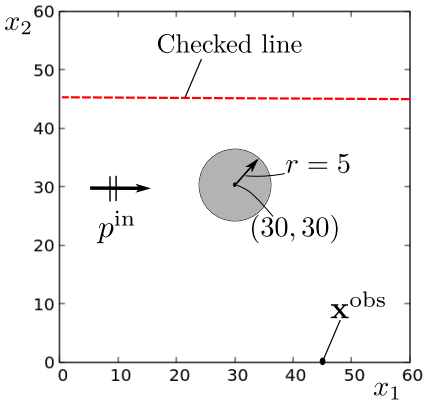


Fig. 2: Setup for the validation of the topological derivative. On the red line the topological derivative is computed.

In this section, we perform a dimensionless numerical experiment to validate the commutativity of the topological derivative (26). As depicted in Fig. 2, we put a circle of radius $r = 5$ at $(30, 30)$ whose boundary is of impedance type with $z = 3$. In the boundary element analysis, we discretised it into 200 constant elements. We specify the density of the fluid as $\rho = 1$ and the sound speed as $v = 1$. With these settings, the perpendicular sound absorption rate of the boundary is 75%. We monitor the objective function set as $F = |p(\mathbf{x}_{\mathrm{obs}})|^2$ with $\mathbf{x}_{\mathrm{obs}} = (45, 0)$ when a plane wave e^{ikx_1} with $k = 0.3$ propagates along the x_1 direction. As the topological derivatives $\mathcal{D}_{\mathrm{T}} F^{(n)}$ estimates the perturbation in the n^{th} order angular frequency derivative of the objective function $F^{(n)}$, it should coincide with the following "topological difference":

$$\left[\mathcal{D}_{T_{\mathrm{Diff}}} F^{(n)}\right](\mathbf{x}) = \frac{F_\varepsilon^{(n)}(\mathbf{x}) - F^{(n)}}{2\pi\varepsilon}, \tag{27}$$

where $F_\varepsilon^{(n)}(x) - F^{(n)}$ is the perturbation in $F^{(n)}$ when Ω_ε of radius ε is introduced at $\mathbf{x}$, if ε is sufficiently small. To check this, we computed the topological derivative as well as (27) at several points on the red line in Fig. 2. In the experiments, we used $\varepsilon = 0.0001$ for the reference. Fig. 3 and Fig. 4 shows the good agreement between the topological derivative and difference in the cases of $n = 1$ and $n = 6$, respectively. Since we have justified (26) numerically, we conclude that we may use (25) in the topology optimisation for a robust design.

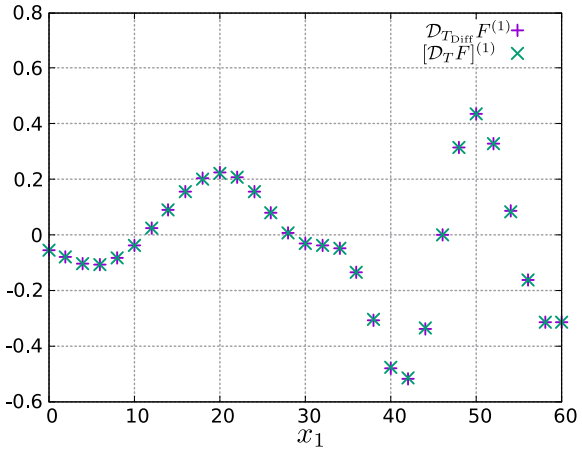


Fig. 3: Comparison between the topological difference and derivative at 1^{st} differential order

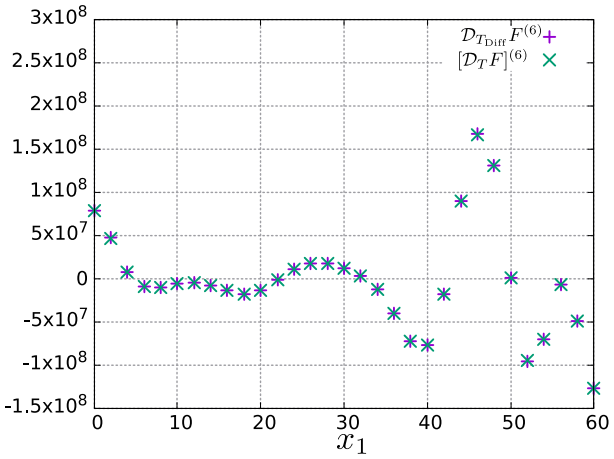


Fig. 4: Comparison between the topological difference and derivative at 6^{th} differential order

4.2. Robust design of sound barriers

This subsection presents robust designs of sound barriers using the proposed method. As depicted in Fig. 5, a circular initial configuration of radius $r = 3.2$ is put at the centre of the fixed design domain $D = [-10, 10]^2$. We explore the optimal shapes which minimises the sound norm $F = |p(\mathbf{x}_{\mathrm{obs}})|^2/2$ at $\mathbf{x}_{\mathrm{obs}} = (15, 0)$ against the incident plane wave $e^{i\omega x_1/v}$ with a mean angular frequency $\omega = 1.5$. The boundary is of impedance type with $z = 3$ prescribed. Other material constants are the same as what we used in Section 4.1. We specify $\sigma = 0.075$ and $\eta = 0\%$, 30%, and 60% for the robustness to different extents. To guarantee sufficient accuracy of approximating the frequency response[14] as $\sigma = 5\%$ of ω_0, the Taylor series expansion is truncated up to order $N = 6$. We let the unit-amplitude incident wave with the sweeping frequency $\omega \in (1, 2)$ impinge the optimal configurations shown in Fig. 6 to examine their responses. As can be seen in Fig. 7, the robust optimum can minimise the sound norm more consistently over the

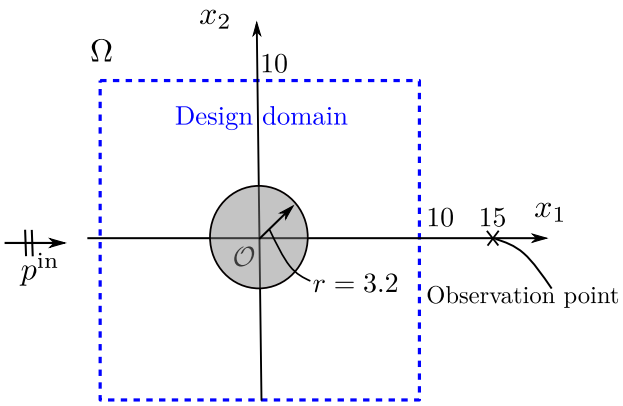


Fig. 5: Initial settings for optimisations of sound barriers

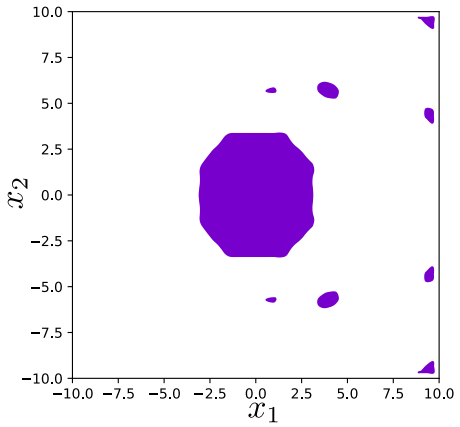
bandwidth $[\omega_0 - 3\sigma, \omega_0 + 3\sigma]$. As a contrast, at $\omega = 1.5$ the best performance of the deterministic optimum is observed. More deterministic performance is traded off for the robustness with a larger η specified. Fig. 8, Fig. 9 and Fig. 10 show the distribution of sound intensity around the optimised barriers. As can be observed in the robust designs, the size of their separate pieces has a larger variance which accounts for the handling of various incident waves with different wavelengths.

5. Conclusion

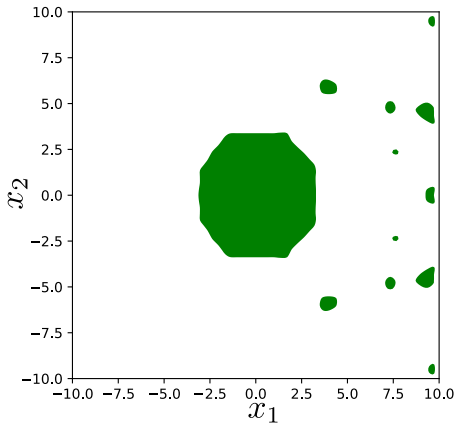
In this paper, we proposed a robust topology optimisation for structures with the impedance boundary condition. The topological derivative of a two-dimensional impedance problem has been derived and numerically validated. By using the proposed method, we successfully design sound barriers with wide working bandwidths. Our method is well suited for designing robust wave devices and can be conveniently extended for problems concerning uncertainties in other design variables such as the incident angles, the density of the fluid and so forth as long as the derivative of the objective with respective to the relevant parameter can efficiently be computed. Future related topics may also concern the acoustic-elastodynamic coupled problem for more realistic modelling of soft materials, as well as possible extensions to applications of periodic structures. Finally, it is worth mentioning that our robust topology optimisation is established based on the assumption that the frequency response of the acoustic system is smooth. In a case where the smooth condition is not satisfied, for example, if there is a real eigenvalue lying in the bandwidth of interest, the Taylor approximation can be inaccurate. It is therefore necessary to examine the distribution of eigenvalues before applying our method to either interior problems or metamaterials made up of periodic structures.

6. Acknowledgement

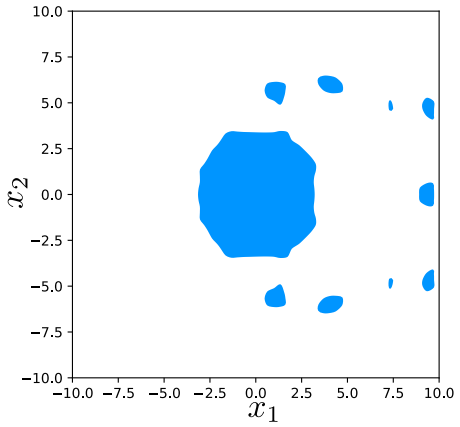
This study is sponsored by JSPS KAKENHI (no. 19H00740). J. Qin would like to appreciate China Scholarship Council for supporting his doctoral study.



(a) $\eta = 0$ (deterministic)



(b) $\eta = 30\%$



(c) $\eta = 60\%$

Fig. 6: Optimal configurations with different weight η

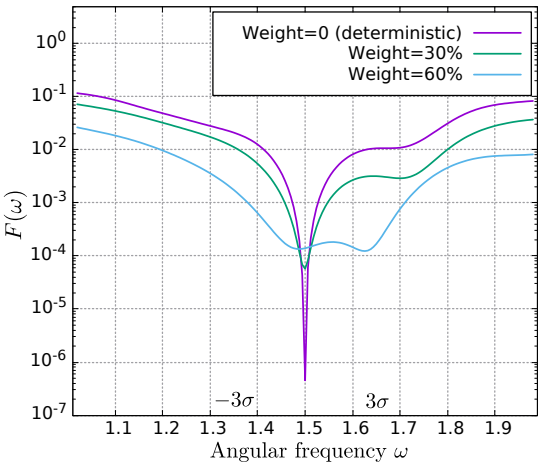


Fig.7: Frequency responses of the optimal configurations tested by the sweeping frequency

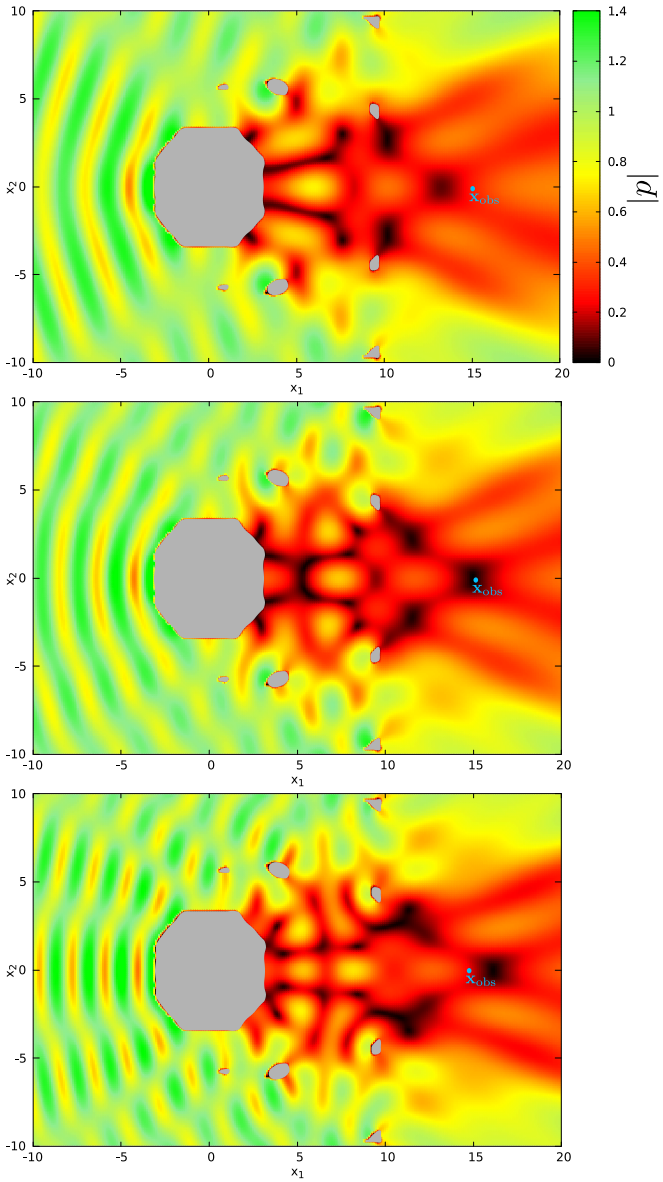


Fig. 8: Contour plots of sound intensity around the optimal sound barrier with $\eta = 0$ (deterministic) for $\omega = \omega_0 - 3\sigma$ (upper), ω_0 (middle), $\omega_0 + 3\sigma$ (lower)

参考文献

(1) Konstantinos Daniel Tsavdaridis, James J Kingman, and Vassilli V Toropov. Application of structural topology optimisation to perforated steel beams. *Computers & structures*, Vol. 158, pp. 108–123, 2015.

(2) Quang Dat Tran, Gang-Won Jang, Hyu-Sang Kwon, and Wan-Ho Cho. Shape and topology optimization of acoustic lens system using phase field method. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 56, No. 3, pp. 713–729, 2017.

(3) Hiroshi Isakari, Kenta Nakamoto, Tatsuya Kitabayashi, Toru Takahashi, and Toshiro Matsumoto. A multi-objective topology optimisation for 2d electro-magnetic wave problems with the level set method and bem. *European Journal of Computational Mechanics*, Vol. 25, No. 1-2, pp. 165–193, 2016.

(4) Xiaoyu Gu, John E Renaud, Stephen M Batill, Raymond M Brach, and Amarjit S Budhiraja. Worst case propagated uncertainty of multidisciplinary systems in robust design optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 20, No. 3, pp. 190–213, 2000.

(5) Irfan Kaymaz. Application of kriging method to structural reliability problems. *Structural Safety*, Vol. 27, No. 2, pp. 133–151, 2005.

(6) Chandan Mozumder, Neal Patel, Donald Tillotson, John Renaud, and Andrés Tovar. An investigation of reliability-based topology optimization. In *11th AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference*, p. 7058, 2006.

(7) Jie Liu, Guilin Wen, Qixiang Qing, Fangyi Li, and Yi Min Xie. Robust topology optimization for continuum structures with random loads. *Engineering Computations*, Vol. 35, No. 2, pp. 710–732, 2018.

(8) Nozomu Kogiso, WonJin Ahn, Shinji Nishiwaki, Kazuhiro Izui, and Masataka Yoshimura. Robust topology optimization for compliant mechanisms considering uncertainty of applied loads. *Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing*, Vol. 2, No. 1, pp. 96–107, 2008.

(9) Alireza Asadpoure, Mazdak Tootkaboni, and James K Guest. Robust topology optimization of structures with uncertainties in stiffness–application to truss structures. *Computers & Structures*, Vol. 89, No. 11-12, pp. 1131–1141, 2011.

(10) Boyan Stefanov Lazarov, Mattias Schevenels, and Ole Sigmund. Topology optimization with geometric uncertainties by perturbation techniques. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 90, No. 11, pp. 1321–1336, 2012.

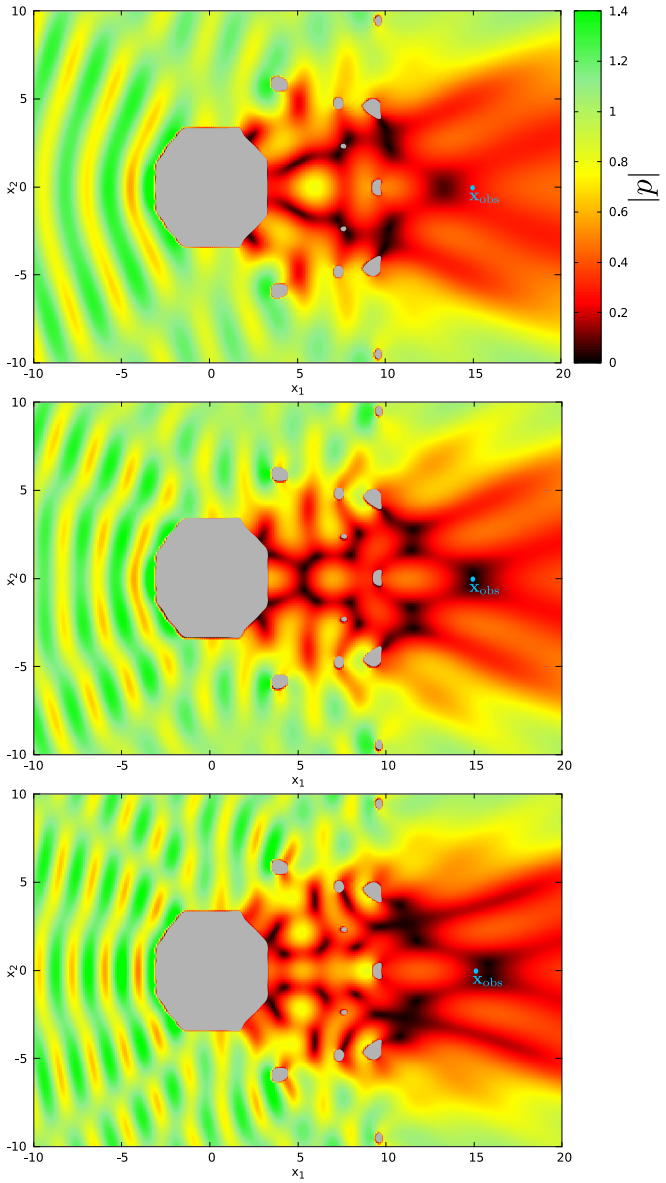


Fig. 9: Contour plots of sound intensity around the optimal sound barrier with $\eta = 30\%$ for $\omega = \omega_0 - 3\sigma$ (upper), ω_0 (middle), $\omega_0 + 3\sigma$ (lower)

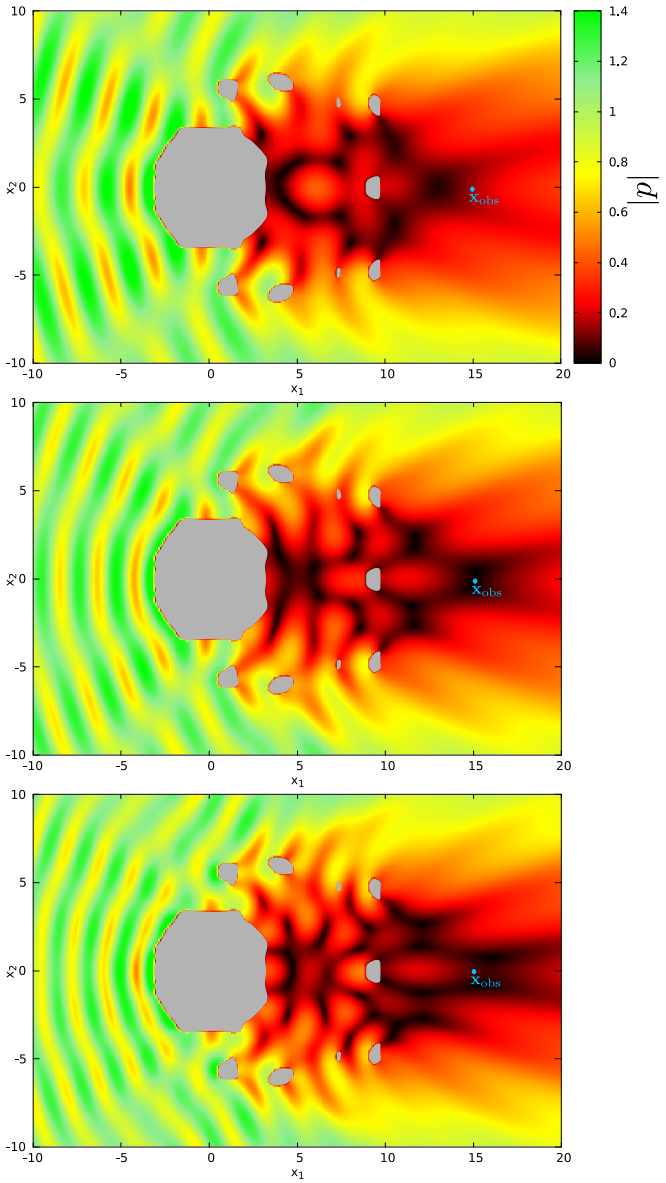


Fig. 10: Contour plots of sound intensity around the optimal sound barrier with $\eta = 60\%$ for $\omega = \omega_0 - 3\sigma$ (upper), ω_0 (middle), $\omega_0 + 3\sigma$ (lower)

(11) Qinghai Zhao, Xiaokai Chen, Zheng-Dong Ma, and Yi Lin. Robust topology optimization based on stochastic collocation methods under loading uncertainties. *Mathematical Problems in Engineering*, 2015.

(12) 佐藤勇気, 泉井一浩, 山田崇恭, 西脇眞二. 電磁クローキング構造の広帯域化を目的としたロバストトポロジー最適化. 年次大会 2017, p. J1210204. 一般社団法人 日本機械学会, 2017.

(13) Yuki Sato, Kazuhiro Izui, Takayuki Yamada, and Shinji Nishiwaki. Robust topology optimization of optical cloaks under uncertainties in wave number and angle of incident wave. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 121, No. 17, pp. 3926–3954, 2020.

(14) Jincheng Qin, Hiroshi Isakari, Kouichi Taji, Toru Takahashi, and Toshiro Matsumoto. A robust topology optimization for enlarging working bandwidth of acoustic devices. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 122, No. 11, pp. 2694–2711, 2021.

(15) Samuel Amstutz and Heiko Andrä. A new algorithm for topology optimization using a level-set method. *Journal of computational physics*, Vol. 216, No. 2, pp. 573–588, 2006.

(16) 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎. B スプライン曲面のレベルセットを用いたトポロジー最適化. 計算数理光学論文集, Vol. 17, pp. 125–130, 2017.

(17) 花田萌美, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎. 2 次元音響問題における境界要素法を用いたインピーダンス境界条件を有する散乱体のトポロジー最適化. 計算数理工学論文集, Vol. 15, pp. 37–42, 2015.

(18) Harold Cramer. Mathematical methods of statistics, Princeton Univ. *Press, Princeton, NJ*, 1946.

© 著者 2021
本論文集に収録されているすべての論文は、原著論文として計算数理工学論文集 第 21 巻（2021）に発表されたもので、著作権は著者に属し、特に断らない限りクリエイティブ・コモンズ・ライセンスの CC BY NC ND を採用しています (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)。

© The author(s) 2021
All the articles in this volume are originally published in Transactions of the Japan Society for Computational Methods in Engineering, Vol.21, 2021, under the terms of the Creative Commons Attribution License CC BY NC ND (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/) unless otherwise noted. The copyright of each article belongs to the author(s).

計算数理工学論文集 第 21 巻

令和 3 年 12 月 18 日発行
編集発行：日本計算数理工学会

（問合せ先）
〒464-8603 名古屋市千種区不老町
名古屋大学大学院工学研究科 機械システム工学専攻 計算力学研究グループ 内
日本計算数理工学会・事務局
TEL: 052-789-2780
FAX: 052-789-3123

（ホームページ）
http://www.matsumoto.nuem.nagoya-u.ac.jp/jascome/

Printed in Japan / ISSN 1348-5245