Hyper-dual numbers を用いた高精度一階・二階数値微分法に基づく 幾何学非線形有限要素法の定式化

藤川 正毅^{*1}, 石川 清貴^{*2}, 眞壁 朝敏^{*3}田中 真人^{*4}, 笹川 崇^{*5}, 表 竜二^{*4}

Geometrically nonlinear finite element implementation based on highly accurate 1st and 2nd numerical derivative scheme using hyper-dual numbers

Masaki FUJIKAWA^{*1}, Kiyotaka ISHIKAWA^{*2}, Chobin MAKABE^{*3},Masato TANAKA^{*4}, Takashi SASAGAWA^{*5} and Ryuji OMOTE^{*4}^{*1, *2, *3} University of the Ryukyus, Department of Mechanical Systems Engineering
1 Senbaru, Nishihara-cho, Nakagami-gun, Okinawa 903-0213, Japan^{*4, *5} Toyota Central R&D Labs., INC.
41-1 Yokomichi, Nagakute-shi, Aichi 480-1192, Japan

Received 18 August 2015

Abstract

This paper proposes a novel implementation scheme of geometrically nonlinear finite element programs, which automatically compute exact internal force vectors and element stiffness matrices by numerically differentiating a strain energy function at each element. This method can significantly simplify the complex implementation procedure which is often observed in conventional finite element implementations, since it never requires B matrices, stress tensors, and elastic tensors by hand. The proposed method is based on a highly accurate numerical derivatives which use hyper-dual numbers and never suffer from any round-off and truncation errors. Several numerical examples are performed to demonstrate the effectiveness and robustness of the proposed method.

Key words : Nonlinear finite element method, Hyper-dual numbers, Internal force, Element stiffness matrix

1. 緒 言

現在のものづくりの現場では、不具合の原因究明、製品の強度・寿命予測、試作・実験の代替手段などを目的として数値シミュレーション技術が広く利用されている（小寺，2011）．その中でも有限要素法は、最も利用されている数値計算手法の1つである．近年では、金属材料からソフトマテリアルの解析まで、様々な実用例が報告されている．

有限要素解析における要素の選択は、計算結果の正確さに関係する重要なものである．そのため高性能な要素の開発が盛んに研究されている．しかし、幾何学非線形問題における一般的な有限要素解析の定式化は複雑かつ煩雑である．例えば Newton-Raphson 法を用いた Total Lagrange 法ベースの一般的な幾何学非線形有限要素法の定式化では、まず所望の形状関数 $\mathbf{N}$ を定義したあとで、 $\mathbf{B}$ マトリクスや変形勾配テンソル $\mathbf{F}$ を計算する．次に、 $\mathbf{F}$

No.15-00454 [DOI:10.1299/transjsme.15-00454], J-STAGE Advance Publication date : 15 January, 2016

^{*1} 正員，琉球大学工学部機械システム工学科（〒903-0213 沖縄県中頭郡西原町字千原 1）

^{*2} 正員，琉球大学大学院理工学研究科生産エネルギー工学専攻

^{*3} 正員，フェロー，琉球大学工学部機械システム工学科

^{*4} 正員，（株）豊田中央研究所（〒480-1192 愛知県長久手市横道 41-1）

^{*5} （株）豊田中央研究所

E-mail of corresponding author: fujikawa@tec.u-ryukyu.ac.jp

の関数として定義された材料構成則から、第2Piola-Kirchhoff 応力 $\mathbf{S}(\mathbf{F})$ 、4 階の整合接線剛性 $\mathbf{D}(\mathbf{F})$ のそれぞれを算出する。最後に、内力ベクトル $\mathbf{Q}$ と要素剛性マトリクス $\mathbf{K}$ を計算する。各計算過程では、ベクトル・行列の大きさや配列の順序を適宜並べ変えなければならない。

以上の実装に伴う煩雑さを改善するため、数値微分を利用した整合接線剛性マトリクス $\mathbf{D}(\mathbf{F})$ の計算手法が多く提案されている。例えば Miehe らは、変形勾配テンソル $\mathbf{F}$ から応力 $\mathbf{S}(\mathbf{F})$ を計算するプログラムを利用して、整合接線剛性マトリクスを数値微分法の 1 つである Forward Difference(FD)法を用いて算出する方法を提案している (Miehe, 1996)。また、この手法を基にして、汎用 FEM の Abaqus ソフトウェアへの組み込みや (Sun et al., 2008)、非線形材料構成則への応用などが報告されている (Pérez-Foguet et al., 2000)、(Hashiguchi and Yamakawa, 2012)。しかし FD 法による整合接線剛性マトリクスの計算では、変動量の設定による打ち切り誤差や丸め誤差の混入が避けられない。そこで、Tanaka らはもう 1 つの数値微分法である Complex step derivative approximation(CSDA)法に注目し、これを応力 $\mathbf{S}(\mathbf{F})$ から整合接線剛性マトリクスを算出する方法へ応用した (Tanaka et al., 2014)。CSDA 法による数値微分演算では丸め誤差が発生しないため、変動量に充分小さい値さえ設定しておけば、常に解析解と同等の精度で整合接線剛性マトリクスを算出可能である。さらに Tanaka らは高精度な数値 2 階微分演算が可能な Hyperdual Step Derivative (HSDS)法 (Clifford, 1873), (Fike, 2013) に注目して、ひずみエネルギー密度関数 $W(\mathbf{F})$ から、応力と整合接線剛性マトリクスの両方を算出する方法を提案した (Tanaka et al., 2015a)。この計算方法は、スカラー値であるエネルギー密度関数から 2 階の応力テンソル、4 階の接線剛性テンソルの両者を数値計算によって自動的に算出するものであり、前述の実装に伴う煩雑な作業を大幅に削減する。また、解析解に基づく実装法と同等の計算結果と収束性能が保証される。

ただし以上の研究は、材料構成則の実装に特化したものである。そのため要素の開発の立場から考えた場合、これらの計算手法は $\mathbf{F}$ から $\mathbf{S}(\mathbf{F})$ や $\mathbf{D}(\mathbf{F})$ の計算の効率化を図っているに過ぎない。内力ベクトル $\mathbf{Q}$ や要素剛性マトリクス $\mathbf{K}$ の算出までを考えると、全体の一部しか効率化できていない。そこで Lee らは、FD 法を用いて $\mathbf{K}$ を算出する方法を提案している (Lee and Park, 2002)。この計算方法は、内力ベクトルを計算するプログラムさえ用意すれば、自動的に要素剛性マトリクスが算出され、プログラムの実装に掛かる煩雑な作業を大幅に削減する。しかし、内力ベクトル $\mathbf{Q}$ の算出のためには $\mathbf{B}$ マトリクスと応力テンソルの計算プログラムが要求される。さらに変動量の設定値により $\mathbf{K}$ の算出精度が変動する問題が残されている。

このように、要素開発を数値微分で定式化した例は少なく、特に近年に注目されている高精度な高階微分が可能な演算方法を応用した事例及びその性能評価は見当たらない。そこで本研究では、幾何学非線形問題を対象として、高精度な数値 1 階・2 階微分演算手法である HSDS 法を用いた新たな有限要素の定式化を提案する。なお今回は、Total Lagrange 法に基づく定式化による例を示し、微圧縮型の超弾性体に焦点を絞り解説する。そのため弾塑性問題などの場合においては別途検証が必要となるが、Incremental variational formulation を利用することで応用可能であると考えている (Tanaka et al., 2015b)。本手法の特徴は、節点変位ベクトルから要素の (各積分点での) ひずみエネルギーを計算するプログラムを用意さえすれば、自動的に内力ベクトル $\mathbf{Q}$ および要素剛性マトリクス $\mathbf{K}$ を算出できる点にある。これにより、従来で煩雑となる各計算過程におけるベクトル・行列の大きさや配列の順序の並べ替えの多くを削減できる。さらに、変位の勾配である変形勾配テンソル $\mathbf{F}$ の算出はひずみエネルギー密度を算出するために必要であるものの、 $\mathbf{B}$ マトリクス、第2Piola-Kirchhoff 応力 $\mathbf{S}(\mathbf{F})$ 、接線剛性マトリクス $\mathbf{D}(\mathbf{F})$ の算出は、HSDS 法による数値微分演算に置き換えられるため、手計算による導出が不要になる。これらの特徴は、従来の定式化と比較して、実装作業の大幅な削減を可能にする。さらに HSDS 法による数値微分演算を採用したことにより、解析解の場合と同等の精度および収束性能が達成できる。本論文では、本提案手法の有効性を確認するため、3 種類の 3 次元ソリッド要素 (4 節点 4 面体要素, 8 節点 6 面体要素, 20 節点 6 面体要素) を用いて基本的な変形解析を従来法と提案法により実施し、両者を比較検討した。

2. ひずみエネルギーに基づく幾何学非線形有限要素解析の定式化

本章ではまず、2.1 節で従来の非線形有限要素法の実装方法についてまとめる。2.2 節では HSDS 法を紹介し、2.3 節では本法による数値微分を用いた非線形有限要素の定式化を記す。なお本論文の定式化では Total Lagrange 法を採用する。

2・1 非線形有限要素の定式化(久田, 野口, 1996)

解くべき平衡方程式を次に示す. なお, テンソルの成分表示は直交デカルト座標系を用いるものとする.

$$\nabla_x (\mathbf{S} \cdot \mathbf{F}^T) + \rho_0 \mathbf{g}^* = 0 \quad (1)$$

ここで, $\mathbf{F}$ は変形勾配テンソル, $\mathbf{S}$ は第 2Piola-Kirchhoff 応力, ρ_0 は基準配置における質量密度, $\rho_0 \mathbf{g}^*$ は単位体積当たりの物体力ベクトル, T は転置である. また,

$$\nabla_x = \frac{\partial}{\partial X_j} \mathbf{e}_j \quad (2)$$

であり, $\mathbf{e}_j (j=1, 2, 3)$ は正規直交基底ベクトルである. また境界条件を,

$$(\mathbf{S} \cdot \mathbf{F}^T)^T \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}^* \quad (3)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^* \quad (4)$$

とする. ここで, $\mathbf{n}$ は基準配置での外向単位法線ベクトル, $\mathbf{t}^*$ は基準配置面に作用する力である. また, 式中の[*]は外部から与えられている成分であることを示している. 従って, $\mathbf{t}^*$ と $\mathbf{g}^*$ は力学的境界条件, $\mathbf{u}^*$ は幾何学的境界条件を表す.

つぎに, 時刻 0 から t までの状態量は全て既知であるとし, 時刻 $t' = t + \Delta t$ の状態を未知とする増分解析を想定する. また, 左肩添字にはその量が生じる時刻を表し, 左下添字は参照配置の時刻を表すものとする. 例えば, ${}^t_0 \mathbf{A}$ は時刻 0 の配置を参照した時刻 t' における $\mathbf{A}$ を表す. ただし Cauchy 応力のように, その量が生じる時刻と参照配置の時刻が一致している場合には, ${}^t \mathbf{T}$ と略記する. 以上の記法を用いると, 式(1)から式(4)に関連する仮想仕事式は次のようになる.

$$\int_V {}^t_0 \mathbf{S} : \delta {}^t_0 \mathbf{E} \, dV = {}^t \delta R \quad (5)$$

ここで,

$${}^t \delta R = \int_{S_t} {}^t_0 \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} \, dS + \int_V \rho_0 {}^t \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} \, dV \quad (6)$$

である. ${}^t_0 \mathbf{S}$, ${}^t_0 \mathbf{E}$ は時刻 0 の初期配置を基準とする時刻 t' の第 2Piola-Kirchhoff 応力テンソル, Green-Lagrange ひずみである. また, S_t は $\mathbf{t}^*$ が負荷される基準配置上の領域であり, V は基準配置上の体積としている. また δ は後に続く量の仮想値であることを示す. なお, 式(6)の ${}^t_0 \mathbf{t}^*$ と $\rho_0 {}^t \mathbf{g}^*$ は次の定義式より与えられる.

$${}^t_0 \mathbf{t}^* := \frac{d {}^t s}{dS} {}^t \mathbf{t}^* \quad (7)$$

$$\rho_0 {}^t \mathbf{g}^* := \frac{d {}^t v}{dV} {}^t \rho {}^t \mathbf{g}^* \quad (8)$$

ここで, s, v はそれぞれ現配置における表面積と体積である. 上記の非線形問題を離散化して Newton-Raphson 法により節点変位ベクトル $\mathbf{U}$ に関して解くことを考える. すると一般に,

$$\begin{aligned} {}^t_0 \mathbf{K}^{(i-1)} \Delta \mathbf{U}^{(i)} &= {}^t \mathbf{P} - {}^t_0 \mathbf{Q}^{(i-1)} \\ {}^t \mathbf{U}^{(i)} &= {}^t \mathbf{U}^{(i-1)} + \Delta \mathbf{U}^{(i)} \\ ({}^t_0 \mathbf{K}^{(0)} &= {}^t_0 \mathbf{K}, {}^t_0 \mathbf{Q}^{(0)} = {}^t_0 \mathbf{Q}, {}^t_0 \mathbf{U}^{(0)} = {}^t_0 \mathbf{U}) \end{aligned} \quad (9)$$

を得る. ここで, 右上付きの (i) は Newton-Raphson 法における繰り返し演算数, $\mathbf{U}$ は全ての節点についての全変位成分を適当に並べた節点変位ベクトルである. また, ${}^t_0 \mathbf{K}$, ${}^t_0 \mathbf{Q}$, ${}^t \mathbf{P}$ はそれぞれ下式のような要素剛性マトリクス, 内力ベクトル, 外力ベクトルである.

$${}^t_0 \mathbf{K} = {}^t_0 \mathbf{K}_L + {}^t_0 \mathbf{K}_{NL} \quad (10)$$

$${}^t_0 \mathbf{K}_L = \sum_e \int_{V_e} ({}^t_0 \mathbf{B}_{L0} + {}^t_0 \mathbf{B}_{L1})^T {}^t_0 \bar{\mathbf{D}} ({}^t_0 \mathbf{B}_{L0} + {}^t_0 \mathbf{B}_{L1}) \, dV_e \quad (11)$$

$${}^t_0\mathbf{K}_{NL} = \sum_e \int_{V_e} {}^t_0\mathbf{B}_{NL}^T {}^t_0\hat{\mathbf{S}} {}^t_0\mathbf{B}_{NL} dV_e \quad (12)$$

$${}^t_0\mathbf{Q} = \sum_e \int_{V_e} \left({}^t_0\mathbf{B}_{L0} + {}^t_0\mathbf{B}_{L1} \right)^T {}^t_0\hat{\mathbf{S}} dV_e \quad (13)$$

$${}^t_0\mathbf{P} = \sum_e \int_{S_e} \mathbf{N}^T {}^t_0\mathbf{t}^* dS_e + \sum_e \int_{V_e} \rho_0 \mathbf{N}^T {}^t_0\mathbf{g}^* dV_e \quad (14)$$

ここで、 S_e と V_e は要素表面と領域、 $\mathbf{N}$ は形状関数、 $\sum$ は要素から構造全体への重ね合わせである。また、 ${}^t_0\mathbf{K}_L$ は初期変位マトリクス(initial displacement matrix)、 ${}^t_0\mathbf{K}_{NL}$ は初期応力マトリクス(initial stress matrix)である。なお、 ${}^t_0\hat{\mathbf{S}}$ は ${}^t_0\mathbf{S}$ のベクトル表記であり、 ${}^t_0\hat{\mathbf{S}}$ は ${}^t_0\mathbf{S}$ を、 ${}^t_0\bar{\mathbf{D}}$ は ${}^t_0\mathbf{D}$ をそれぞれマトリクス表示したものであり、次式のように定義される。

$${}^t_0\hat{\mathbf{S}} = \left\{ {}^t_0S_{11} \quad {}^t_0S_{22} \quad {}^t_0S_{33} \quad {}^t_0S_{12} \quad {}^t_0S_{23} \quad {}^t_0S_{31} \right\} \quad (15)$$

$${}^t_0\bar{\mathbf{D}} = \begin{bmatrix} {}^t_0C_{1111} & {}^t_0C_{1122} & {}^t_0C_{1133} & {}^t_0C_{1112} & {}^t_0C_{1123} & {}^t_0C_{1131} \\ {}^t_0C_{2211} & {}^t_0C_{2222} & {}^t_0C_{2233} & {}^t_0C_{2212} & {}^t_0C_{2223} & {}^t_0C_{2231} \\ {}^t_0C_{3311} & {}^t_0C_{3332} & {}^t_0C_{3333} & {}^t_0C_{3312} & {}^t_0C_{3323} & {}^t_0C_{3331} \\ {}^t_0C_{1212} & {}^t_0C_{1222} & {}^t_0C_{1233} & {}^t_0C_{1212} & {}^t_0C_{1223} & {}^t_0C_{1231} \\ {}^t_0C_{2311} & {}^t_0C_{2322} & {}^t_0C_{2333} & {}^t_0C_{2312} & {}^t_0C_{2323} & {}^t_0C_{2331} \\ {}^t_0C_{3111} & {}^t_0C_{3122} & {}^t_0C_{3133} & {}^t_0C_{3112} & {}^t_0C_{3123} & {}^t_0C_{3131} \end{bmatrix} \quad (16)$$

$${}^t_0\hat{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} {}^t_0S_{11}\mathbf{I} & {}^t_0S_{12}\mathbf{I} & {}^t_0S_{13}\mathbf{I} \\ {}^t_0S_{21}\mathbf{I} & {}^t_0S_{22}\mathbf{I} & {}^t_0S_{23}\mathbf{I} \\ {}^t_0S_{31}\mathbf{I} & {}^t_0S_{32}\mathbf{I} & {}^t_0S_{33}\mathbf{I} \end{bmatrix} \quad (17)$$

なお、

$${}^t_0C = \frac{\partial^2 W}{\partial {}^t_0\mathbf{E} \partial {}^t_0\mathbf{E}} \quad (18)$$

である。ここで、 ${}^t_0\mathbf{E}$ はGreen-Lagrange ひずみである。また、 ${}^t_0\mathbf{B}_L$ は節点速度(もしくは節点変位変分)と ${}^t_0\dot{\mathbf{E}}_L$ (もしくは $\delta {}^t_0\mathbf{E}_L$)を要素ごとに関連付けるマトリクス、 ${}^t_0\mathbf{B}_{NL}$ は節点速度(もしくは節点変位変分)と $\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{X}$ (もしくは $\partial \delta \mathbf{u} / \partial \mathbf{X}$)を要素ごとに関連付けるマトリクスである。要素内の任意の位置の変位は、節点変位からの内挿により次のようになる。

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}^n \mathbf{U}^n \quad (19)$$

ここで n に対して1から m まで総和規約に従うものとする。なお、 m は要素を構成する節点の数である。また、 N^n はある要素の n 番目節点における形状関数である。以上の定義より、

$${}^t_0\mathbf{B}_{L0}^n = \begin{bmatrix} \partial N^n / \partial X_1 & 0 & 0 \\ 0 & \partial N^n / \partial X_2 & 0 \\ 0 & 0 & \partial N^n / \partial X_3 \\ \partial N^n / \partial X_2 & \partial N^n / \partial X_1 & 0 \\ 0 & \partial N^n / \partial X_3 & \partial N^n / \partial X_2 \\ \partial N^n / \partial X_3 & 0 & \partial N^n / \partial X_1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

$${}^t\mathbf{B}_{L1}^n = \begin{bmatrix} \frac{\partial' u_1}{\partial X_1} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} & \frac{\partial' u_2}{\partial X_1} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} & \frac{\partial' u_3}{\partial X_1} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} \\ \frac{\partial' u_1}{\partial X_2} \frac{\partial N^n}{\partial X_2} & \frac{\partial' u_2}{\partial X_2} \frac{\partial N^n}{\partial X_2} & \frac{\partial' u_3}{\partial X_2} \frac{\partial N^n}{\partial X_2} \\ \frac{\partial' u_1}{\partial X_3} \frac{\partial N^n}{\partial X_3} & \frac{\partial' u_2}{\partial X_3} \frac{\partial N^n}{\partial X_3} & \frac{\partial' u_3}{\partial X_3} \frac{\partial N^n}{\partial X_3} \\ \frac{\partial' u_1}{\partial X_2} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} + \frac{\partial' u_1}{\partial X_1} \frac{\partial N^n}{\partial X_2} & \frac{\partial' u_2}{\partial X_2} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} + \frac{\partial' u_2}{\partial X_1} \frac{\partial N^n}{\partial X_2} & \frac{\partial' u_3}{\partial X_2} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} + \frac{\partial' u_3}{\partial X_1} \frac{\partial N^n}{\partial X_2} \\ \frac{\partial' u_1}{\partial X_2} \frac{\partial N^n}{\partial X_3} + \frac{\partial' u_1}{\partial X_3} \frac{\partial N^n}{\partial X_2} & \frac{\partial' u_2}{\partial X_2} \frac{\partial N^n}{\partial X_3} + \frac{\partial' u_2}{\partial X_3} \frac{\partial N^n}{\partial X_2} & \frac{\partial' u_3}{\partial X_2} \frac{\partial N^n}{\partial X_3} + \frac{\partial' u_3}{\partial X_3} \frac{\partial N^n}{\partial X_2} \\ \frac{\partial' u_1}{\partial X_3} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} + \frac{\partial' u_1}{\partial X_1} \frac{\partial N^n}{\partial X_3} & \frac{\partial' u_2}{\partial X_3} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} + \frac{\partial' u_2}{\partial X_1} \frac{\partial N^n}{\partial X_3} & \frac{\partial' u_3}{\partial X_3} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} + \frac{\partial' u_3}{\partial X_1} \frac{\partial N^n}{\partial X_3} \end{bmatrix} \quad (21)$$

である。また、式(12)に対応して、

$$({}^t\mathbf{B}_{NL}^n)^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^n}{\partial X_1} & 0 & 0 & \frac{\partial N^n}{\partial X_2} & 0 & 0 & \frac{\partial N^n}{\partial X_3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^n}{\partial X_1} & 0 & 0 & \frac{\partial N^n}{\partial X_2} & 0 & 0 & \frac{\partial N^n}{\partial X_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^n}{\partial X_1} & 0 & 0 & \frac{\partial N^n}{\partial X_2} & 0 & 0 & \frac{\partial N^n}{\partial X_3} \end{bmatrix} \quad (22)$$

である。

2・2 HDSD による高精度な数値1階・2階微分

本節では数値微分法について簡単にまとめる。まず、ある関数 $f(x)$ を Taylor 展開すると次式を得る。

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) \cdots \quad (23)$$

ここで、Central difference(CD)法により $f'(x)$ と $f''(x)$ を算出することを考える。式(23)の変動量 h を微小に設定したと仮定すれば、次式を得る。

$$f'_{CD}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \quad (24)$$

$$f''_{CD}(x) \approx \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} + O(h^2) \quad (25)$$

ここで、 $O(h)$ は Landau's symbol である。式(24)や(25)では、 h を小さくするほど理論上は計算精度が良くなる。しかし、実際の計算機上では有効桁数が決まっているため、 h を小さくし過ぎると丸め誤差が生じる。

この CD 法による数値微分の問題を克服する方法として、CSDA 法による数値微分法がある(Lyness, 1968)。CSDA 法では変動量 h を虚軸(i)方向にとった Taylor 展開に基づくものである。今回の例題の場合、式(23)は次のように書ける。

$$f(x+ih) = f(x) + ihf'(x) - \frac{h^2}{2!} f''(x) - i \frac{h^3}{3!} f'''(x) \cdots \quad (26)$$

すると、1階微分は次のように書ける。

$$f'_{CSDA}(x) \approx \frac{\Im[f(x+ih)]}{h} + O(h^2) \quad (27)$$

ここで、 $\Im$ は虚部の係数を取り出す演算子である。式(27)の演算には、式(24)とは異なり、差分商近似が現れない。すなわち、丸め誤差の影響がないことから変動量 h を小さく設定しさえすれば解析解と同等の計算精度が保証される(例えば $h = 10^{-100}$ など)。しかしこのような特徴を有する計算は1階微分のみで有効であり、2階微分以上の階数に対しては、差分商近似による演算が避けられない。

より性能の良い微分演算を達成する目的で dual numbers が開発された. この演算では, CSDA と同様に, 非実数軸方向に $\varepsilon^2 = 0$ なる元 ε を定義したものである. これによると, 式(23)は次のように書ける.

$$f(x + \varepsilon h) = f(x) + \varepsilon h f'(x) \quad (28)$$

すると, 1 階微分は次のように書ける.

$$f'_{DN}(x) = \frac{\mathfrak{S}_\varepsilon[f(x + \varepsilon h)]}{h} \quad (29)$$

ここで, $\mathfrak{S}_\varepsilon$ は dual numbers の非実数部 ε の係数を取り出す演算子である. 式(29)の演算には, 丸め誤差と打ち切り誤差の両方が現れない. すなわち, 変動量 h の設定値によらず, 式(29)により任意の有効数字桁内において解析解と同じ精度で結果が得られる. ただし, この計算方法でも, 2 階微分以上の演算に対しては差分商近似による演算が避けられない. そこで, 以上の問題点を克服する方法として, Fike らは HDSD 法を提案した(Fike, 2013). この方法ではまず, 次式のように定義された 2 つの非実数軸の元 ε_1 と ε_2 を考える.

$$\varepsilon_1^2 = 0, \quad \varepsilon_2^2 = 0, \quad \varepsilon_1 \varepsilon_2 = \varepsilon_2 \varepsilon_1 \quad (30)$$

そして式(23)の変動量 h を $h_1 \varepsilon_1 + h_2 \varepsilon_2$ に置き換えると次式を得る.

$$f(x + h_1 \varepsilon_1 + h_2 \varepsilon_2) = f(x) + (h_1 \varepsilon_1 + h_2 \varepsilon_2) f'(x) + h_1 h_2 \varepsilon_1 \varepsilon_2 f''(x) \quad (31)$$

上式は, Taylor 展開の h^3 以上の高次項は ε_1^2 もしくは ε_2^2 の項が含まれるため 0 となる. これにより, $f(x)$ と $f'(x)$ は次式で算出できる.

$$f'_{HDSD}(x) = \frac{\mathfrak{S}_{\varepsilon_1}[f(x + h\varepsilon_1 + h\varepsilon_2)]}{h} = \frac{\mathfrak{S}_{\varepsilon_2}[f(x + h\varepsilon_1 + h\varepsilon_2)]}{h} \quad (32)$$

$$f''_{HDSD}(x) = \frac{\mathfrak{S}_{\varepsilon_1 \varepsilon_2}[f(x + h_1 \varepsilon_1 + h_2 \varepsilon_2)]}{h_1 h_2} \quad (33)$$

ここで, $\mathfrak{S}_{\varepsilon_1}$ は ε_1 の係数を取り出す演算子, 同様に $\mathfrak{S}_{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$ は $\varepsilon_1 \varepsilon_2$ の係数を取り出す演算子としている. 式(32)や(33)を見ればわかるように, HDSD 法では $f(x)$ と $f'(x)$ の計算に差分商近似が含まれない. さらに高次項も完全に消滅することから, 変動量の値に依存しない微分値が得られる. なお, HDSD 法の演算を計算機で実現するためには, 各種の演算規則をプログラミングにより組み込む必要がある. 例えば Fortran を用いる場合には, 演算子多重定義が可能なモジュール機能を利用するのが便利である. 具体的な実装方法の一例は, 参考文献(Tanaka et al., 2015a)の付録に記載されているので参照されたい.

2・3 数値微分法による非線形有限要素法の定式化

本節では, HDSD 法を利用した非線形有限要素法の定式化を提案する. また合わせて比較検討のため, 一般的な数値微分による計算についても記すこととする. まず 2・3・1 項では, 停留ポテンシャルエネルギーの原理について整理し, 続いて数値微分法(FD 法と HDSD 法)への適用方法をまとめる. 続く 2・3・2 項では, 内力ベクトルから要素剛性マトリクスを算出する定義を整理し, 続いて数値微分への適用方法をまとめる. 以上を基にして 2・3・3 項では, HDSD 法による内力ベクトルと要素剛性マトリクスを算出する計算方法についてまとめる. さらに本法と通常非線形有限要素法の定式化の違いについて整理する. なお外力ベクトル $\mathbf{P}$ は, 2・1 節より形状関数 $\mathbf{N}$ が決められた時点で直ちに計算できるため, ここでは問題にしないものとする.

2・3・1 ひずみエネルギーから内力ベクトルの算出

(a) 停留ポテンシャルエネルギー

停留ポテンシャルエネルギーの原理について整理する. ここでの記述は, 参考文献(久田, 野口, 1996)を基に記している. 本論文では材料構成則として超弾性体モデルを考える. このとき, 応力は次式のように計算される.

$$S_{ij} = \frac{\partial W}{\partial E_{ij}} \quad (34)$$

式(34)より, 式(5)と(6)は次のように書くことができる.

$$\delta \int_V W dV = \int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} dV \quad (35)$$

ここで外力についてもポテンシャル R , G が存在するものとして,

$$\mathbf{t}^*_i = -\frac{\partial R}{\partial u_i} \quad (36)$$

$$\rho_0 \mathbf{g}^*_i = -\frac{\partial G}{\partial u_i} \quad (37)$$

と与えられるとすると, 次式を得る.

$$\delta \Phi = 0 \quad (38)$$

ただし,

$$\Phi = \int_V (W + Q) dV + \int_{S_t} R dS \quad (39)$$

である. ここで, Φ は系の全ポテンシャルエネルギーである. すなわち, 物体内 V で Green-Lagrange ひずみ $\mathbf{E}$ および, 表面 S_u 上で $\mathbf{u}=\mathbf{u}^*$ を付帯条件とする任意の微小変分 $\delta \mathbf{E}$ および $\delta \mathbf{u}$ に対して, 平衡状態にある全ポテンシャルエネルギー Φ は停留する. 次に, 外力のポテンシャルが,

$$R = -\mathbf{t}^* \cdot \mathbf{u} \quad (40)$$

$$G = -\rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \mathbf{u} \quad (41)$$

と与えられる場合を想定する. そして, 平衡状態にある Φ に任意である変分 $\delta \mathbf{u}$ を与えた物体 Φ' より $\Phi' - \Phi$ を計算すると次式を得る.

$$\Phi' - \Phi = \delta \int_V \{W(\mathbf{E} + \delta \mathbf{E}) - W(\mathbf{E})\} dV - \int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS - \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} dV \quad (42)$$

ここで,

$$\delta \mathbf{E} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial \delta \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} + \left(\frac{\partial \delta \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right)^T + \left(\frac{\partial \delta \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right)^T \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right) + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right)^T \cdot \left(\frac{\partial \delta \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right) \right\} \quad (43)$$

である. 次に, 式(42)の $W(\mathbf{E} + \delta \mathbf{E})$ に Taylor 展開を適用して整理すれば次式を得る.

$$\Phi' - \Phi = \int_V \left\{ \left(W(\mathbf{E}) + \frac{\partial W}{\partial E_{ij}} \delta E_{ij} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 W}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \delta E_{ij} \delta E_{kl} + \dots \right) - W(\mathbf{E}) \right\} dV - \left(\int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} dV \right) \quad (44)$$

ここで, 変分が微小であるとすれば高次変分項が無視できると仮定し, さらに式(35)を用いれば, 式(44)は次のようになる.

$$\begin{aligned} \Phi' - \Phi &\approx \int_V \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 W}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \delta E_{ij} \delta E_{kl} \right) dV \\ &= \delta^2 \Phi > 0 \end{aligned} \quad (45)$$

すなわち, 平衡点の近傍に限り局所的に最小となる.

(b) 数値微分法による内力ベクトルの算出

停留ポテンシャルエネルギーの式を基にして, 数値微分演算による内力ベクトルの算出を考える. 2・3・1(a)項における変分を $h\delta \mathbf{u}$ とする. ここで, h は数値微分の変動量であり, 微小であるとする. すると 2・3・1(a)項にならって, $h\delta \mathbf{u}$ を与えた物体 Φ' より $\Phi' - \Phi$ を計算すると次式を得る.

$$\Phi' - \Phi = \int_V \{W(\mathbf{E} + h\delta \mathbf{E}) - W(\mathbf{E})\} dV - h \int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS - h \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} dV \quad (46)$$

次に, 式(46)の $W(\mathbf{E} + h\delta \mathbf{E})$ に Taylor 展開を適用して, 高次項を無視すれば, 次式を得る.

$$\begin{aligned}\Phi' - \Phi &= \int_V \left\{ W(\mathbf{E}) + h \frac{\partial W}{\partial E_{ij}} \delta E_{ij} + h^2 \frac{\partial^2 W}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \delta E_{ij} \delta E_{kl} + \dots \right\} dV - h \left(\int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} dV \right) \\ &\approx \int_V \left\{ h \frac{\partial W}{\partial E_{ij}} \delta E_{ij} + h^2 \frac{\partial^2 W}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \delta E_{ij} \delta E_{kl} \right\} dV - h \left(\int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} dV \right) \\ &= h^2 \delta^2 \Phi\end{aligned}\quad (47)$$

式(46)と式(47)より、次式が成立する。

$$\frac{1}{h} \left(\int_V W(\mathbf{E} + h \delta \mathbf{E}) dV - \int_V W(\mathbf{E}) dV \right) + O(h) \approx \int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} dV \quad (48)$$

ここで 2.1 節を参照すると、左辺は内力ベクトルに相当していることが分かる。以上を離散化して整理すると次式を得る。

$$\delta \mathbf{U}^T \mathbf{Q} = \frac{1}{h} \left(\int_V W(\mathbf{U} + h \delta \mathbf{U}) dV - \int_V W(\mathbf{U}) dV \right) + O(h) \quad (49)$$

また変分は任意であったことを考慮して、次のように設定するものとする。

$$\underline{\mathbf{U}}^i := \delta \mathbf{U} \quad (50)$$

ここで、 $\underline{\mathbf{U}}^i$ は i 行目のみ 1 で、その他の行には 0 の値を持つベクトルであるとする。すると最終的に内力ベクトル $\mathbf{Q}$ は次より近似的に得られる。

$$Q_i = \frac{1}{h} \left(\int_V W(\mathbf{U} + h \underline{\mathbf{U}}^i) dV - \int_V W(\mathbf{U}) dV \right) + O(h) \quad (51)$$

(c) HDSD 法による内力ベクトルの算出

平衡状態にある Φ に任意である変分を HDSD 法の非実数軸方向にとるものとして、 $h\varepsilon_1 \delta \mathbf{u}$ を与えた物体 Φ' より $\Phi' - \Phi$ を計算すると次式を得る。

$$\Phi' - \Phi = \delta \int_V \left\{ W(\mathbf{E} + h\varepsilon_1 \delta \mathbf{E}) - W(\mathbf{E}) \right\} dV - h \int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \varepsilon_1 \delta \mathbf{u} dS - h \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \varepsilon_1 \delta \mathbf{u} dV \quad (52)$$

次に、式(52)の $W(\mathbf{E} + h\varepsilon_1 \delta \mathbf{E})$ に Taylor 展開を適用して整理すれば次式を得る。

$$\begin{aligned}\Phi' - \Phi &= \int_V \left\{ W(\mathbf{E}) + h\varepsilon_1 \frac{\partial W}{\partial E_{ij}} \delta E_{ij} \right\} dV - h\varepsilon_1 \left(\int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} dV \right) \\ &= h\varepsilon_1 \int_V \left\{ \frac{\partial W}{\partial E_{ij}} \delta E_{ij} \right\} dV - h\varepsilon_1 \left(\int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot \delta \mathbf{u} dV \right) \\ &= 0\end{aligned}\quad (53)$$

ここで、HDSD 法による演算では、式(53)の演算は厳密にゼロとなる。また、式(52)と式(53)より次式が成立する。

$$\mathfrak{S}_{\varepsilon_1} \left[\int_V W(\mathbf{E} + h\varepsilon_1 \delta \mathbf{E}) dV \right] = \mathfrak{S}_{\varepsilon_1} \left[\left(\int_{S_t} \mathbf{t}^* \cdot h\varepsilon_1 \delta \mathbf{u} dS + \int_V \rho_0 \mathbf{g}^* \cdot h\varepsilon_1 \delta \mathbf{u} dV \right) \right] \quad (54)$$

ここでも HDSD 法による演算では、2.3.1(b)項の数値微分の場合とは異なり、厳密に両辺が一致している。次に 2.1 節を参照すると、左辺は内力ベクトルに相当している。以上を離散化して整理すると次式を得る。

$$\delta \mathbf{U}^T \mathbf{Q} = \frac{1}{h} \mathfrak{S}_{\varepsilon_1} \left[\int_V W(\mathbf{U} + h\varepsilon_1 \delta \mathbf{U}) dV \right] \quad (55)$$

従って、2.3.1(b)項と同様の手順により、最終的に内力ベクトル Q_i の成分は次式により抽出できる。

$$Q_i = \frac{1}{h} \mathfrak{S}_{\varepsilon_1} \left[\int_V W(\mathbf{U} + h\varepsilon_1 \underline{\mathbf{U}}^i) dV \right] \quad (56)$$

2.3.2 内力ベクトルから要素剛性マトリクスの算出

(a) 要素剛性マトリクスの定義

一般に有限要素解析のための離散化後において、要素剛性マトリクスは次式で得られる(久田, 野口, 1996).

$$K_{ij} = \frac{\partial Q_i}{\partial U_j} \quad (57)$$

(b) 数値微分による要素剛性マトリクスの算出

数値微分演算による内力ベクトルの算出は、例えば Lee & Park の研究(Lee, Y. and Park, 2002)が挙げられる。これによると、式(57)は次のように書くことができる。

$$K_{ij} = \frac{1}{h} [Q_i(\mathbf{U} + h\mathbf{U}^j) - Q_i(\mathbf{U})] + O(h) \quad (58)$$

これにより、解析解の導出が煩雑な要素剛性マトリクスの算出をすることなく、内力ベクトルの差分商近似により要素剛性マトリクスが得られる。

(c) HDSD 法による要素剛性マトリクスの算出

式(58)を基にして $\mathbf{Q}(\mathbf{U})$ の $\mathbf{U}$ に対して非実数方向に変動 $\varepsilon_1 \mathbf{U}^j$ を与える。すると、要素剛性マトリクスは次式より得られる。

$$K_{ij} = \frac{1}{h} \Im_{\varepsilon_1} [Q_i(\mathbf{U} + h\varepsilon_1 \mathbf{U}^j)] \quad (59)$$

こちらの場合でも解析解の導出が煩雑な要素剛性マトリクスの算出をすることなく、要素剛性マトリクスが得られる。さらに特筆すべきは、打ち切り誤差および丸め誤差の混入が生じないことである。

2.3.3 本法のまとめ

本論文で提案する HDSD 法による有限要素定式化の計算方法をまとめる。また比較検討のため、一般的な数値微分である CD 法による計算方法についても提示する。なお、前項までの計算は全て FD 法による展開を示しているが、2 階微分を必要とする今回の問題では、CD 法の方が精度の良い解析が可能であると判断したため、CD 法を採用することとした。

CD 法による内力ベクトルと要素剛性マトリクスの計算方法は、2 変数の Taylor 展開を用いることで以下の式で計算できる。

$$Q_i^{\text{CD}} \approx \frac{1}{2h_1} \left[\int_V W(\mathbf{U} + h_1 \mathbf{U}^i) dV - \int_V W(\mathbf{U} - h_1 \mathbf{U}^i) dV \right] \quad (60)$$

$$K_{ij}^{\text{CD}} \approx \frac{1}{2h_1 h_2} \left[\int_V W(\mathbf{U} + h_1 \mathbf{U}^i + h_2 \mathbf{U}^j) dV + \int_V W(\mathbf{U} - h_1 \mathbf{U}^i - h_2 \mathbf{U}^j) dV - 2 \int_V W(\mathbf{U}) dV - K_1^i - K_2^j \right] \quad (61)$$

ここで、

$$K_1^i = \left[\int_V W(\mathbf{U} + h_1 \mathbf{U}^i) dV + \int_V W(\mathbf{U} - h_1 \mathbf{U}^i) dV - 2 \int_V W(\mathbf{U}) dV \right] \quad (62)$$

$$K_2^j = \left[\int_V W(\mathbf{U} + h_2 \mathbf{U}^j) dV + \int_V W(\mathbf{U} - h_2 \mathbf{U}^j) dV - 2 \int_V W(\mathbf{U}) dV \right] \quad (63)$$

である。

一方、HDSD 法による計算は次式となる。

$$Q_i^{\text{HDSD}} = \frac{1}{h_1} \Im_{\varepsilon_1} \left[\int_V W(\mathbf{U} + h_1 \varepsilon_1 \mathbf{U}^i) dV \right] \quad (64)$$

$$K_{ij}^{\text{HDSD}} = \frac{1}{h_1 h_2} \Im_{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \left[\int_V W(\mathbf{U} + h_1 \varepsilon_1 \mathbf{U}^i + h_2 \varepsilon_2 \mathbf{U}^j) dV \right] \quad (65)$$

つまり本法による計算では、節点変位から各要素のひずみエネルギーを計算するプログラムさえ用意すれば、内力ベクトル $\mathbf{Q}$ と要素剛性マトリクス $\mathbf{K}$ の両方を自動的に算出することが可能となる。さらに HDSD 法の演算は打ち切り誤差と丸め誤差の混入がないため、数値微分法でありながら有効桁数をもつ浮動小数点表記においても、解析解と同等の結果が得られる。

最後に、本法と従来法による定式化の違いについてまとめる。図 1 は、要素単位(もしくは積分点単位)で内力ベクトル $\mathbf{Q}$ と要素剛性マトリクス $\mathbf{K}$ を算出するのに必要な基本情報を取り出した図である。図 1(a)より、従来法では要素内の変位ベクトル $\mathbf{U}$ および形状関数 $\mathbf{N}$ から変形勾配テンソル $\mathbf{F}$ を算出し、さらに $\mathbf{B}_{L0}$, $\mathbf{B}_{L1}$ および $\mathbf{B}_{NL}$ を算出、そして $\mathbf{D}$ および $\mathbf{S}$ を算出したのちに $\mathbf{Q}$ と $\mathbf{K}$ が得られる。一方、本法では節点変位から変形勾配テンソル $\mathbf{F}$ を計算し、これを基にひずみエネルギーを算出するプログラムを作成しさえすればよい。式(64)と(65)より、ひずみエネルギー算出のプログラムを利用することで $\mathbf{Q}$ と $\mathbf{K}$ が自動的に算出される。

以上をまとめれば、本法は $\mathbf{B}_L$, $\mathbf{B}_{NL}$, $\mathbf{D}$, $\mathbf{S}$ などの解析解の導出やその実装の作業を削減することが可能となる。また本法はスカラー値であるひずみエネルギーのみを実装しさえすればよい。このため、従来で煩雑となる各計算過程におけるベクトル・行列の大きさや配列の順列の並べ替えの煩雑さの多くを削減できる。以上より、非線形有限要素における要素開発の簡略化が可能となる。

Fig.1 Nonlinear FEM implementation scheme at each integration point by (a) conventional and (b) proposed method.

3. 本法の性能評価

本数値微分法の有効性を 3 種類の例題に適用して検証する。3・1 節では、3 次元 4 節点 4 面体要素を用いて立方体試験片の単軸引張り解析をおこなう。3・2 節では、3 次元 8 節点 6 面体要素を用いて立方体試験片のせん断解析をおこなう。最後の 3・3 節では、3 次元 20 節点 6 面体要素を用いて長方形試験片の片持ち梁の曲げ解析をおこなう。

それぞれの例題における材料構成則には、超弾性構成則の一つである Neo-Hookean モデルを採用する。

$$W = c_1 (\bar{I}_1 - 3) + \frac{1}{D} (J - 1)^2 \quad (66)$$

ここで、 c_1 と D は材料定数であり、それぞれ $c_1=50.0$, $D=0.001$ とする。なお、ここでの材料定数には特別な意味はないため、無次元量としている。また、 J は体積変化率であり変形勾配テンソル $\mathbf{F}$ を用いて $J=\det \mathbf{F}$ と表せる。そして、 $\bar{I}_1$ は、等容変形成分の右 Cauchy-Green テンソルの第 1 不変量であり、次式より得られるものである。

$$\bar{I}_1 = tr(\bar{\mathbf{C}}) = \bar{C}_{ii} \quad (67)$$

ここで、 $\bar{\mathbf{C}}$ は $\mathbf{F}$ と J より $\bar{\mathbf{C}} = J^{-2/3} (\mathbf{F})^T (\mathbf{F})$ である。

なお各例題では、本法と CD 法における変形解析の精度を検証する目的で次の式(68)と(69)を用いる。

$$\text{error} = \sum_i^{3N_n} \sqrt{(U_i^{\text{ana}} - U_i^{\text{CD}})^2} / 3N_n \quad (68)$$

$$\text{error} = \sum_i^{3N_n} \sqrt{(U_i^{\text{ana}} - U_i^{\text{HDSD}})^2} / 3N_n \quad (69)$$

ここで, U^{ana} は内力ベクトルと要素剛性マトリクスを解析解で実装した FEM より得られる結果, U^{CD} と U^{HDS} はそれぞれ内力ベクトルと要素剛性マトリクスを CD 法, HDSD 法で実装した結果, N_n は総節点数である. また要素剛性マトリクスの計算精度についてはそれぞれの例題における収束性能で評価する.

3・1 単軸引張り解析(3次元4節点4面体要素)

本節では, 図 2(a)に示すような立方体要素(1×1×1)の単軸引張り解析を 3次元4節点4面体要素により計算する. 境界条件として, 図 2(a)の頂点番号 1,4,5,8 の x 方向変位, 頂点番号 1,2,5,6 の y 方向変位, 頂点番号 5,6,7,8 の z 方向変位をそれぞれ拘束するものとする. そして頂点番号 2,3,6,7 に一様な変形になるようにかつ合計 120 となる引張り荷重を負荷するものとした. 図 2(b)には有限要素モデルを示す. 今回は節点数 9, 要素数 12 としている. また, 解析は全 5 インクリメントでおこなう.

図 3 には, それぞれの解析結果における最終インクリメント時の変形状態を示す. また, 表 1 には CD 法と HDSD 法の変形解析結果の精度を検証するため, 式(68)と式(69)の結果を示す. 表 2 にはそれぞれの計算方法における収束性能を示す. 表 1 より, CD 法における変形解析の算出精度は変動量 h_1 の設定値に依存している. つまり, CD 法では数値微分における打ち切り誤差と丸め誤差が混入するため, 適切な h_1 の値を探し出さなければならない. 一方, 図 3 と表 1 より HDSD 法による本法では変動量の設定する値によらず, 計算結果は解析解のものと一致している. また, 表 2 より, CD 法における収束性能は, 変動量 h_1, h_2 の設定値により大きく異なる. その設定値を誤れば収束解を得ることができない. 一方, 本法は収束性能も変動量に依存しておらず, 常に解析解と同等の収束性能であることが確認できる.

Fig.2 Initial configuration for the uniaxial tensile test

Fig.3 Displacement distribution results of the uniaxial tensile test for the 5th load step

Table 1 Deformation error calculated by Equations (68) and (69) of the uniaxial tensile test resulting from the different approaches to calculate the internal forces and element stiffness matrices. The choice of the perturbation values in the CD influences on the displacement accuracy. The HDSD yields a quite accurate displacement values under all perturbation values selected.

(a) CD for the 5th load step

		h_2						
		10^{-1}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}	10^{-11}	10^{-13}
h_1	10^{-1}	failed	9.1×10^{-4}	9.1×10^{-4}	9.1×10^{-4}	9.1×10^{-4}	9.1×10^{-4}	9.1×10^{-4}
	10^{-3}	9.2×10^{-8}	9.2×10^{-8}	9.2×10^{-8}	9.2×10^{-8}	9.2×10^{-8}	9.2×10^{-8}	failed
	10^{-5}	8.0×10^{-12}	8.4×10^{-12}	9.1×10^{-12}	6.8×10^{-12}	9.4×10^{-12}	failed	failed
	10^{-7}	1.1×10^{-10}	1.1×10^{-10}	8.3×10^{-11}	1.3×10^{-10}	failed	failed	failed
	10^{-9}	failed	failed	failed	failed	failed	failed	failed

(b) HDSD for the 5th load step

		h_2						
		10^{-1}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}	10^{-11}	10^{-13}
h_1	10^{-1}	3.9×10^{-17}	3.5×10^{-17}	4.1×10^{-17}	3.9×10^{-17}	4.6×10^{-17}	3.6×10^{-17}	3.2×10^{-17}
	10^{-3}	2.6×10^{-17}	2.9×10^{-17}	3.2×10^{-17}	4.4×10^{-17}	4.6×10^{-17}	3.4×10^{-17}	3.0×10^{-17}
	10^{-5}	5.6×10^{-17}	4.0×10^{-17}	2.6×10^{-17}	4.1×10^{-17}	3.8×10^{-17}	4.4×10^{-17}	4.3×10^{-17}
	10^{-7}	3.3×10^{-17}	4.3×10^{-17}	3.5×10^{-17}	4.6×10^{-17}	4.0×10^{-17}	4.3×10^{-17}	3.3×10^{-17}
	10^{-9}	3.3×10^{-17}	3.4×10^{-17}	2.7×10^{-17}	2.7×10^{-17}	4.2×10^{-17}	3.8×10^{-17}	3.5×10^{-17}

Table 2 Convergence results of the uniaxial tensile test based on CD and HDSD. The choice of the perturbation values in CD strongly influences on the convergence behavior. The HDSD show the excellent convergence under all perturbation values selected.

(a) Iteration numbers

		h_2						
		10^{-1}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}	10^{-11}	10^{-13}
h_1	10^{-1}	failed / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	6 / 4
	10^{-3}	6 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	5 / 4	failed / 4
	10^{-5}	6 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	6 / 4	failed / 4	failed / 4
	10^{-7}	6 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4
	10^{-9}	failed / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4

(b) Normalized residual force for the 5th load step

Conventional FEM	CD with $h_1=10^{-5}$			HDSD
	$h_2=10^{-5}$	$h_2=10^{-7}$	$h_2=10^{-8}$	
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
1.93×10^{-4}	1.93×10^{-4}	1.92×10^{-4}	4.93×10^{-4}	1.93×10^{-4}
7.68×10^{-11}	7.66×10^{-11}	4.87×10^{-11}	1.10×10^{-7}	7.68×10^{-11}
1.22×10^{-23}	7.86×10^{-20}	3.85×10^{-20}	6.18×10^{-11}	1.21×10^{-23}
			1.34×10^{-14}	
			6.49×10^{-19}	

3・2 セン断変形解析(3次元8節点6面体要素)

本節では、図 4(a)に示すような立方体要素(1×1×1)のせん断解析を 3 次元 8 節点 6 面体要素により計算する。境界条件として、図 4(a)の頂点番号 1, 2, 5, 6 の x, y, z 方向変位を拘束し、頂点番号 3, 4, 7, 8 にそれぞれ 10 の節点荷重を x 方向に負荷するものとした。図 4(b)には有限要素モデルを示す。今回は節点数 8, 要素数 1 としている。なお、解析は全 5 インクリメントで行うものとする。

図 5 には、それぞれの解析結果における最終インクリメント時の変形状態を示す。また、表 3 には CD 法と HDSD 法の変形解析結果の精度を検証するため、式(68)と式(69)の結果を示す。表 4 には各計算方法における収束性能をそれぞれ示す。表 3 より、今回の例題においても、CD 法の変形解析の算出精度は変動量 h_1 の設定値に依存して変化してしま

う。一方, 図 5 と表 3 より本法では変動量の設定する値によらず, 計算結果は解析解のものと一致している。また, 表 4 より, CD 法における収束性能は, 変動量 h_1, h_2 の設定値により大きく異なる。つまり, 計算結果および収束性能の両方に留意した変動量 h_1, h_2 の設定が必要になる。一方, 本法の収束性能は変動量に依存せず, 常に解析解のものと同等の計算精度であった。

Fig.4 Initial configuration for the shear test.

Fig.5 Results of displacement in x -direction for the shear test.

Table 3 Deformation error calculated by Equations (68) and (69) of the shear test resulting from the different approaches to calculate the internal forces and element stiffness matrices. The choice of the perturbation values in the CD influences on the displacement accuracy. The HDSD yields a quite accurate displacement values under all perturbation values selected.

(a) CD for the 5th load step							
CD	h_2						
	10^{-1}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}	10^{-11}	10^{-13}
h_1	10^{-1}	7.8×10^{-5}	7.8×10^{-5}	7.8×10^{-5}	7.8×10^{-5}	7.8×10^{-5}	failed
	10^{-3}	7.9×10^{-9}	7.9×10^{-9}	7.9×10^{-9}	7.9×10^{-9}	failed	failed
	10^{-5}	3.7×10^{-12}	4.7×10^{-12}	9.8×10^{-12}	4.6×10^{-12}	5.5×10^{-11}	failed
	10^{-7}	3.5×10^{-10}	3.7×10^{-10}	3.1×10^{-10}	failed	failed	failed
	10^{-9}	failed	failed	failed	failed	failed	failed
(b) HDSD for the 5th load step							
HDSD	h_2						
	10^{-1}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}	10^{-11}	10^{-13}
h_1	10^{-1}	2.2×10^{-16}	2.0×10^{-16}	1.7×10^{-16}	2.0×10^{-16}	2.2×10^{-16}	2.0×10^{-16}
	10^{-3}	2.1×10^{-16}	2.5×10^{-16}	2.7×10^{-16}	2.3×10^{-16}	2.6×10^{-16}	2.0×10^{-16}
	10^{-5}	2.6×10^{-16}	2.2×10^{-16}	2.2×10^{-16}	2.1×10^{-16}	2.0×10^{-16}	2.2×10^{-16}
	10^{-7}	2.4×10^{-16}	2.5×10^{-16}	2.7×10^{-16}	2.2×10^{-16}	2.3×10^{-16}	1.9×10^{-16}
	10^{-9}	2.6×10^{-16}	2.1×10^{-16}	2.2×10^{-16}	1.9×10^{-16}	2.6×10^{-16}	2.5×10^{-16}

Table 4 Convergence of the shear test for the 5th load step based on CD and HDSD scheme. The choice of the perturbation values in CD strongly influences on the convergence behavior. Almost all perturbation values lead to results of the failed convergence. The HDSD show the excellent convergence under all perturbation values selected.

(a) Iteration numbers

CD / HDSD		h_2						
		10^{-1}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}	10^{-11}	10^{-13}
h_1	10^{-1}	8 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	5 / 4	failed / 4
	10^{-3}	5 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	4 / 4	failed / 4	failed / 4
	10^{-5}	5 / 4	4 / 4	4 / 4	5 / 4	10 / 4	failed / 4	failed / 4
	10^{-7}	5 / 4	4 / 4	5 / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4
	10^{-9}	failed / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4	failed / 4

(b) Normalized displacement norm for the 5th load step

Conventional FEM	CD with $h_1=10^{-5}$			HDSD
	$h_2=10^{-5}$	$h_2=10^{-7}$	$h_2=10^{-9}$	
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
2.40×10^{-4}	2.40×10^{-4}	2.37×10^{-4}	1.46×10^{-4}	2.40×10^{-4}
5.74×10^{-10}	5.74×10^{-10}	5.98×10^{-10}	2.19×10^{-4}	5.74×10^{-10}
3.21×10^{-20}	3.42×10^{-20}	1.76×10^{-16}	5.36×10^{-8}	3.21×10^{-20}
		9.67×10^{-21}	5.16×10^{-10}	
			2.59×10^{-12}	
			2.84×10^{-13}	
			1.40×10^{-14}	
			4.40×10^{-16}	
			7.61×10^{-18}	

3・3 片持ち梁の解析 (3次元 20 節点 6 面体要素)

図 6(a)に示すような直方体要素 (10×1×1) の片持ち梁の曲げ解析を 3 次元 20 節点 6 面体要素により計算する. 境界条件として, 図 6(a)の頂点番号 1, 4, 5, 8 の x, y, z 方向変位を拘束し, 頂点番号 3, 7 にそれぞれ 0.1 の節点荷重を y 方向に負荷するものとした. 図 6(b)には有限要素モデルを示す. 今回は節点数 104, 要素数 8 としている. なお, 解析は全 2 インクリメントで行うものとする.

図 7 には, それぞれの解析結果における最終インクリメント時の変形状態を示す. また, 表 5 には CD 法と HDSD 法の変形解析結果の精度を検証するため, 式(68)と式(69)の結果を示す. 表 6 には各計算方法における収束性能をそれぞれ示す. 表 5 より, 変形解析の算出精度は変動量 h_1 の設定値に依存して変化してしまう. 一方, 図 7 と表 5 より HDSD 法による本法では変動量の設定する値によらず, 計算結果は解析解のものと一致している. また, 表 6 より, CD 法における収束性能は, 変動量 h_1, h_2 の設定値により大きく異なる. 特に今回の場合では収束解を得るのが困難となる結果が多く, 適切な変動量を探すのは容易でない. 一方, 本法では前回までの結果と同様に, 収束性能も変動量 h_1, h_2 に依存しない. 以上より, 本法は, 数値微分であるにもかかわらず, 解析解と同じ内力ベクトルと要素剛性マトリクスを常に得られることが分かる.

Fig.6 Exapample of the cantileber problem

Fig.7 Results of displacement in y-direction for the cantilever problem.

Table 5 Deformation error calculated by Equations (68) and (69) of the cantilever problem resulting from the different approaches to calculate the internal forces and element stiffness matrices. The choice of the perturbation values in the CD influences on the displacement accuracy. The HDSD yields a quite accurate displacement values under all perturbation values selected.

(a) CD for the 2nd load step							
CD	h_2						
	10^{-1}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}	10^{-11}	10^{-13}
10^{-1}	failed	failed	failed	failed	failed	failed	failed
10^{-3}	failed	failed	4.1×10^{-5}	4.1×10^{-5}	failed	failed	failed
10^{-5}	failed	7.5×10^{-9}	1.5×10^{-8}	failed	failed	failed	failed
10^{-7}	failed	failed	failed	failed	failed	failed	failed
10^{-9}	failed	failed	failed	failed	failed	failed	failed

(b) HDSD for the 2nd load step							
HDSD	h_2						
	10^{-1}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}	10^{-11}	10^{-13}
10^{-1}	1.7×10^{-14}	3.2×10^{-14}	2.0×10^{-14}	4.5×10^{-14}	1.7×10^{-14}	2.6×10^{-14}	3.8×10^{-14}
10^{-3}	3.1×10^{-14}	7.1×10^{-15}	3.9×10^{-14}	2.4×10^{-14}	1.7×10^{-14}	4.9×10^{-14}	1.9×10^{-14}
10^{-5}	4.6×10^{-14}	2.3×10^{-14}	9.3×10^{-15}	9.3×10^{-15}	3.2×10^{-14}	4.6×10^{-14}	1.7×10^{-14}
10^{-7}	6.9×10^{-15}	1.9×10^{-14}	1.7×10^{-14}	3.3×10^{-14}	2.7×10^{-14}	1.3×10^{-14}	3.6×10^{-14}
10^{-9}	3.2×10^{-14}	3.7×10^{-14}	3.5×10^{-14}	3.0×10^{-14}	2.6×10^{-14}	1.8×10^{-14}	6.7×10^{-14}

Table 6 Convergence of the cantilever problem for the 2nd load step based on CD and HDSD scheme. The choice of the perturbation values in CD strongly influences on the convergence behavior. Almost all perturbation values lead to results of the failed convergence. The HDSD show the excellent convergence under all perturbation values selected.

(a) Iteration numbers							
CD / HDSD	h_2						
	10^{-1}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}	10^{-11}	10^{-13}
10^{-1}	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7
10^{-3}	failed / 7	failed / 7	7 / 7	15 / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7
10^{-5}	failed / 7	7 / 7	13 / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7
10^{-7}	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7
10^{-9}	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7	failed / 7

(b) Normalized displacement norm for the 5th load step

Conventional FEM	CD with $h_1=10^{-5}$		$h_1=10^{-3}$	HDSD
	$h_2=10^{-3}$	$h_2=10^{-5}$	$h_2=10^{-7}$	
1	1	1	1	1
8.38×10^{-4}	8.06×10^{-4}	1.34×10^{-3}	9.57×10^{-4}	8.38×10^{-4}
7.91×10^{-7}	6.67×10^{-7}	1.39×10^{-5}	1.33×10^{-6}	7.91×10^{-7}
1.22×10^{-7}	3.84×10^{-7}	9.86×10^{-4}	1.72×10^{-5}	1.22×10^{-7}
1.71×10^{-11}	1.06×10^{-10}	1.35×10^{-8}	1.04×10^{-8}	1.71×10^{-11}
2.38×10^{-16}	2.96×10^{-14}	3.11×10^{-7}	3.37×10^{-9}	2.38×10^{-16}
1.53×10^{-28}	2.35×10^{-21}	2.63×10^{-13}	1.40×10^{-14}	1.59×10^{-28}
		4.01×10^{-15}	3.64×10^{-18}	
		1.92×10^{-17}	8.18×10^{-20}	
		2.13×10^{-18}	2.97×10^{-19}	
		6.22×10^{-20}	8.01×10^{-16}	
		4.39×10^{-20}	5.06×10^{-15}	
		2.87×10^{-21}	2.85×10^{-16}	
			1.87×10^{-19}	
			1.62×10^{-20}	

4. 結 言

本論文では、幾何学非線形問題を対象にして、HDSD 法による高精度な数値 1 階・2 階微分を用いた新しい有限要素定式化を提案した。得られた知見は以下のようである。

- (1) 本法は、要素のひずみエネルギーを計算するプログラムを用意するだけで、内力ベクトルおよび要素剛性マトリクスを自動的に計算することが可能となる。
- (2) 本法の特徴として、従来では計算が必須であった **B** マトリクス、応力テンソル、弾性テンソルの解析解の導出およびプログラムの実装が不要となる。また、用意するプログラムは基本的にスカラー値のひずみエネルギーのみであるため、従来で煩雑となる各計算過程におけるベクトル・行列の大きさや配列の順列の並べ替えの煩雑さの多くを削減できる。そのため、幾何学非線形問題の有限要素解析の実装において、大幅な作業の簡略化が見込まれる。
- (3) HDSD 法による数値微分の計算精度は、変動量の値に関係なく、解析解の結果と同等の精度である。このことから、本法による内力ベクトルおよび要素剛性マトリクスの算出精度においても解析解と一致する。
- (4) 本法の有効性を確認するために、3 次元 4 節点 4 面体要素による単軸引張り解析、3 次元 8 節点 6 面体要素によるせん断解析、3 次元 20 節点 6 面体モデルによる片持ち梁の曲げ解析をおこなった。その結果、本法により出力される結果および収束性能の両方は、解析解のものと全て一致することを確認した。

以上より、本法は解析解と同等の性能を持つ非線形有限要素解析を少ない作業負担で実装可能となる。特に、要素開発の効率化や、新しい計算アルゴリズムの開発の支援ツールとして期待できる。今後は、本法に整合する応力・ひずみの算出法の開発や、計算速度の検証およびその高速化などについて研究する予定である。

文 献

- Clifford, W.K., Preliminary sketch of biquaternions, Proceedings of the London Mathematical Society, Vol.4 (1873), pp. 381–395.
- Fike, J.A., Multi-objective optimization using hyper-dual numbers(Ph.D. Thesis), Stanford university (2013).
- Hashiguchi, K. and Yamakawa, Y., Introduction to finite strain theory for continuum elasto-plasticity (2012), WILEY.
- 久田俊明, 野口裕久, 非線形有限要素法の基礎と応用(1996), 丸善.
- 小寺秀俊, 有限要素法の学び方(2011), 日刊工業新聞社.
- Lee, Y. and Park, K.C., Numerically generated tangent stiffness matrices for nonlinear structural analysis, Computer Methods

- in Applied Mechanics and Engineering , Vol.191, No.51-52 (2002), pp.5833–5846.
- Lyness, J.N., Differentiation formulas for analytic functions, Mathematics of Computation (1968), pp.352–362.
- Miehe, C., Numerical computation of algorithmic (consistent) tangent moduli in large-strain computational inelasticity, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering , Vol.134 (1996), pp.223–240.
- Pérez-Foguet, A., Rodríguez-Ferran, A. and Huerta, A., Numerical differentiation for non-trivial consistent tangent matrices: an application to the mrs-lade model, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.48, No.2 (2000), pp.159–184.
- Sun, W., Chaikof, E.L. and Levenston, M.E., Numerical approximation of tangent moduli for finite element implementations of nonlinear hyperelastic material models, Journal of Biomechanical Engineering, Vol.130, No.6 (2008).
- Tanaka, M., Sasagawa, T., Omote, R., Fujikawa, M., Balzani, D. and Schröder, J., A highly accurate 1st- and 2nd-order differentiation scheme for hyperelastic material models based on hyper-dual numbers, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.283 (2015a), pp.22–45.
- Tanaka, M., Balzani, D. and Schröder, J., Automatic implementation of elasto-plastic incremental formulations at finite strains using hyper-dual numbers, 86th Annual Meeting of the International Association of Applied Mathematics and Mechanics, Vol.15, Issue1 (2015b), pp. 367 – 368.
- Tanaka, M., Fujikawa, M., Balzani, D. and Schröder, J., Robust numerical calculation of tangent moduli at finite strains based on complex-step derivative approximation and its application to localization analysis, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.269 (2014), pp.454–470.

References

- Clifford, W.K., Preliminary sketch of biquaternions, Proceedings of the London Mathematical Society, Vol.4 (1873), pp. 381–395.
- Fike, J.A., Multi-objective optimization using hyper-dual numbers(Ph.D. Thesis), Stanford university (2013).
- Hashiguchi, K. and Yamakawa, Y., Introduction to finite strain theory for continuum elasto-plasticity (2012), WILEY.
- Hisada, T. and Noguchi, H., Basic and application of nonlinear finite element method (1996), Maruzen (in Japanese).
- Kotera, T., The way of learning the FEM (2011), NIKKAN KOGYO SHIMBUN (in Japanese).
- Lee, Y. and Park, K.C., Numerically generated tangent stiffness matrices for nonlinear structural analysis, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering , Vol.191, No.51-52 (2002) pp.5833–5846.
- Lyness, J.N., Differentiation formulas for analytic functions, Mathematics of Computation (1968), pp.352–362.
- Miehe, C., Numerical computation of algorithmic (consistent) tangent moduli in large-strain computational inelasticity, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering , Vol.134, (1996) pp.223–240.
- Pérez-Foguet, A., Rodríguez-Ferran, A. and Huerta, A., Numerical differentiation for non-trivial consistent tangent matrices: an application to the mrs-lade model, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.48, No.2 (2000), pp.159–184.
- Sun, W., Chaikof E.L. and Levenston, M.E., Numerical approximation of tangent moduli for finite element implementations of nonlinear hyperelastic material models, Journal of Biomechanical Engineering, Vol.130, No.6 (2008).
- Tanaka, M., Sasagawa T., Omote, R., Fujikawa, M., Balzani, D. and Schröder, J., A highly accurate 1st- and 2nd-order differentiation scheme for hyperelastic material models based on hyper-dual numbers, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.283 (2015a), pp.22–45.
- Tanaka, M., Balzani, D. and Schröder, J., Automatic implementation of elasto-plastic incremental formulations at finite strains using hyper-dual numbers, 86th Annual Meeting of the International Association of Applied Mathematics and Mechanics, Vol.15, Issue1 (2015b), pp. 367 – 368.
- Tanaka, M., Fujikawa, M., Balzani, D. and Schröder, J., Robust numerical calculation of tangent moduli at finite strains based on complex-step derivative approximation and its application to localization analysis, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.269 (2014), pp.454–470.