

# クラックの周期境界値問題における高速多重極法と均質化法への応用について

An FMM for periodic crack problems and its application to homogenisation problems

松村 知樹<sup>1)</sup>, 西村直志<sup>2)</sup>

Tomoki MATSUMURA and Naoshi NISHIMURA

1) 京都大学大学院工学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: matsumura@mbox.kudpc.kyoto-u.ac.jp)  
 2) 京都大学学術情報メディアセンター (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: nchml@media.kyoto-u.ac.jp)

This paper presents an FMM formulation for periodic boundary value problems for two dimensional crack problems for Laplace's equation. The formulation uses a potential representation for periodic crack problems. Application of the proposed approach to the homogenisation method is presented.

**Key Words:** FMM, Periodic Boundary Value Problems, Homogenisation

## 1. はじめに

境界積分方程式法は、有限要素法や差分法と並んで、初期値・境界値問題を数値的に解く代表的な計算力学の手法の一つである。考える領域の境界のみに着目して解析を実行できるという点で、外部問題、或いはクラック問題に適している。しかし、最終的に帰着される線形連立一次方程式の係数行列が密となるため、それを例えば反復法を用いて解くと要素数  $N$  に対して  $N^2$  のオーダーの計算量が必要となり、大規模問題に適用する際の難点となっていた。それを克服したのが高速多重極法<sup>(1)</sup>に代表される高速解法である。境界積分方程式法に高速多重極法を適用すれば、計算量や必要なメモリの量を  $O(N)$  にまで下げることができる。

一方、近年、微視構造を有する物質の巨視的な力学特性を導く理論として、均質化法<sup>(2,3)</sup>が注目されている。均質化法では、周期的な微視構造をもつ物質が巨視的な構造を成していると仮定し、マクロとミクロのスケールで漸近展開を行なうことによって、微視的な構造を反映させた巨視的な解析を行なうが、その際に、微視的な構造に関する周期境界値問題を解くことが必要になってくる。

微視構造がクラックなどの鋭い形状変化部を含む場合、その解析手法として境界積分方程式法は有望である。しかし、微視構造が複雑な形状を有している時、従来法を用いたのでは最初に述べた  $O(N^2)$  の計算量がネックとなって、十分に大きな解析がおこなえない可能性がある。従って、周期境界値問題に対する高速解法を研究することは有意義であると考えられる。これまで均質化法に境界積分方程式法を適用した論文はいくつかあるが(Koro and Abe<sup>(4)</sup>の文献参照)、

特に高速解法に関する研究として Koro and Abe<sup>(4)</sup>を挙げることが出来る。この研究では wavelet 境界積分方程式法によって速度向上を図っている。ただし、ユニットセルの外周に周期境界条件を科すタイプの手法であるので、通常の境界値問題に比べて行列の圧縮が十分に行なえない傾向がある。そこで本論文では、外周の境界条件を考慮する必要のない高速多重極境界積分方程式法を定式化する。これまで、周期境界条件の下で高速多重極法を用いた研究として、Greengard と Rokhlin<sup>(5)</sup>の初期の仕事を上げることが出来るが、その数学的取り扱いには不明瞭な部分が残っている。そこで本論文ではクラック問題における周期境界値問題の解表示から出発し、数学的明瞭さを保ちつつ多重極法を定式化する。さらに、均質化法を用いて多数のクラックから成る微視構造を有する物質の巨視的な弾性定数を求める。最後に、応用として、周期構造を用いずに巨視的な弾性定数を求める簡便法の精度を検証する。

## 2. 定式化

### 2.1. 境界積分方程式法

2次元 Laplace 方程式におけるクラック周期境界値問題は、以下のように表される。

基礎方程式

$$\Delta u = 0 \quad (\text{in } \Omega \setminus S) \quad (1)$$

クラック上での境界条件

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad (\text{on } S) \quad (2)$$

周期境界条件

$$u(x^1) = u(x^2) \quad (\text{on } \Gamma) \quad (3)$$

$$\frac{\partial u(x^1)}{\partial n} = -\frac{\partial u(x^2)}{\partial n} \quad (\text{on } \Gamma) \quad (4)$$

ここに、 $\Omega$  はユニットセル、 $\Gamma$  は  $\Omega$  の外側の境界、 $S$  はクラック、 $\frac{\partial}{\partial n}$  は境界については外向き、クラックについては任意に定めた正の向きの法線方向微分であり、 $x^1$  と  $x^2$  は  $\Gamma$  上で互いに反対側の点である。

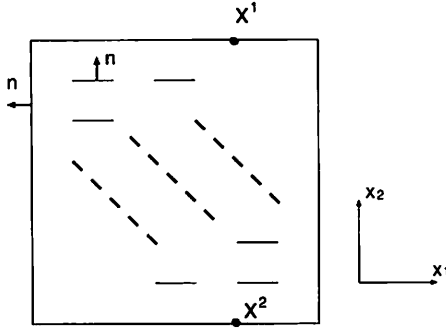


Fig. 1 2次元クラック周期境界値問題

次に、この問題の解表現を導く。以下簡単のために適当に座標をとって、 $\Omega$  は原点を中心とする一辺の長さが1の正方形領域であるとする。

まず、無限領域中にクラック  $S$  がある場合を考える。このとき、解  $u$  の表現は次のようになる。

$$u(x) = \int_S \frac{\partial G(x-y)}{\partial n_y} \phi(y) dS_y \quad (5)$$

ここに、 $\phi$  はクラックの開口変位、 $G$  は2次元 Laplace 方程式の基本解で、

$$G(x-y) = \frac{1}{2\pi} \log \frac{1}{|x-y|} \quad (6)$$

である。

$$z = x_1 + ix_2, \quad \xi = y_1 + iy_2 \quad (7)$$

とおくと、式 (5) は、

$$u(x) = -\text{Re} \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_S \frac{\phi(\xi)}{z-\xi} d\xi \right] \quad (8)$$

と書ける。これは、Weierstrass の  $\zeta$  関数

$$\zeta(z) = \frac{1}{z} + \sum_{w \in N} \left( \frac{1}{z-w} + \frac{1}{w} + \frac{z}{w^2} \right) \quad (9)$$

を用いて疑周期化することができる<sup>(6)</sup>。ここに、 $N$  は

$$N = \{l = m + in \mid m, n: \text{整数}, l \neq 0\}$$

なる複素数の集合である。 $\zeta(z)$  が

$$\zeta(z+1) = \pi + \zeta(z) \quad (10)$$

$$\zeta(z+i) = -\pi i + \zeta(z) \quad (11)$$

を満たすことに注意すると、周期境界値問題の解表現は、

$$u(x) = \text{Re} \left[ -\frac{1}{2\pi i} \int_S \zeta(z-\xi) \phi(\xi) d\xi + \frac{\bar{z}}{2i} \int_S \phi(\xi) d\xi \right] \quad (12)$$

となることが分かる。よって、

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x_1} - i \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} = \frac{1}{2\pi i} \left( \int_S \mathcal{P}(z-\xi) \phi(\xi) d\xi - \pi \bar{M}_0(0) \right) \quad (13)$$

が得られる。ここに、

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(z) &= -\zeta'(z) \\ &= \frac{1}{z^2} + \sum_{w \in N} \left( \frac{1}{(z-w)^2} - \frac{1}{w^2} \right) \end{aligned} \quad (14)$$

は Weierstrass の  $\mathcal{P}$  関数であり、 $M_0(0)$  はユニットセルにおける0次の多重極モーメント

$$M_0(0) = \int_S \phi ds,$$

および、 $-$  は複素共役をあらわす。

## 2.2. 高速多重極法

式 (13) の右辺の積分を計算するために、高速多重極法を用いる。Greengard と Rokhlin の有名な最初の論文<sup>(5)</sup>は、逸早く周期境界条件を取り扱っているが、発散項を物理的考察により有限にする「くりこみ」を使っているために数学的に意味不明な点を残している。以下では、基本的には Greengard-Rokhlin のアイデアに従いながら、式 (13) に基づいて多重極法を定式化し、数学的不明瞭さを取り除くこととする。また、

$$I_p(z) = \frac{z^p}{p!}, \quad O_p(z) = p! z^{-1-p} \quad (15)$$

という記号を用いる。

まず、 $\Omega$  をレベル0のセルとし、多重極モーメント  $M_p$  はレベル0, 1を含む全レベルで計算することにする。ここに、 $\xi_0$  をセル  $C$  の中心とすると、

$$M_q(\xi_0) = \int_C I_q(\xi - \xi_0) \phi(\xi) d\xi \quad (16)$$

である。多重極モーメントの計算法は、通常の高多重極法のものと同じである。

次に、レベル0のセルから始まって下向きに、全てのセルの中心での局所展開係数を求める。この際、レベル0のセルの局所展開係数は、式 (13) への  $M_0$  の寄与と、 $\mathcal{P}$  関数の寄与のうち、式 (14) の和の中の

$$N' = N \setminus N''$$

からの寄与を考える。ここに

$$N'' = \{l = m + in \mid m, n \in \{-1, 0, 1\}, l \neq 0\}$$

である。従って、レベル0のセルの局所展開係数は、

$$L_q(0) = (-1)^q \sum_{p=q}^{\infty} \sum_{w \in N'} O_{p+1}(w) M_{p-q}(0) - \delta_{q0} \pi \bar{M}_0(0) \quad (17)$$

となる。レベル1以下のセルの局所展開係数は、レベル0の局所展開係数で考慮されていない項の式 (13) への寄与を

考慮して計算する。これは Fig.2 において、neighbour level 0 cell と書かれている位置に  $\Omega$  (同図では original level 0 cell と記されている) のレプリカが置かれていると考えた上で通常の多重極法での局所展開係数の算法を適用して求められるものに外ならない。

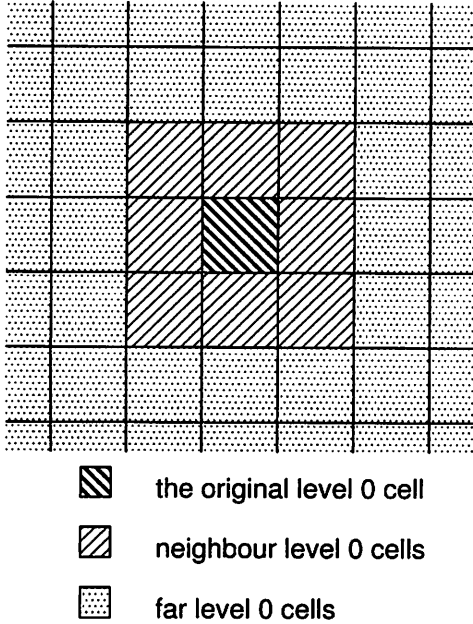


Fig. 2 レベル 0 のセルの位置関係

式 (17) の評価には次式で表される lattice sum

$$\sum_{z \in N^r} \frac{1}{z^r}, \quad r = 2, \dots$$

の値が必要である。これらの和は、 $r$  が 4 の倍数であるとき以外は対称性より 0 となることが容易に分かる。数値計算においてはこれらの lattice sum の値はあらかじめ計算しておき、それを用いれば良い。

### 2.3. 均質化法

以下の考察は Laplace 方程式で支配される任意の物理現象に当てはまるが、ここでは考えを定めるために剪断弾性変形 (剪断弾性定数=1) を想定し、 $u$  は  $x_3$  方向の変位を表すものとする。その上で、微視的なスケールにおいて、多数のクラックを含む物質を考える。各クラックは表面力を受けないものとする。

この時、この物質の巨視的な弾性定数は、均質化法の理論により次のように求められる<sup>(8)</sup> (詳細は文献を参照されたい)。

$$\delta_{ij} + \frac{1}{|\Omega|} \int_{S_c} \phi^j n_i dy \quad (18)$$

ここに、 $\phi^j$  は、クラック上の境界条件が、

$$\frac{\partial \chi^j}{\partial n} = n_j \quad (\text{on } S_c) \quad (19)$$

で与えられる Laplace 方程式の周期クラック境界値問題の解  $\chi^j$  の開口変位である。以上より、巨視的な弾性係数を評価するためには、周期境界条件のもとでクラックの開口変位  $\phi^j$  を求めなければならないことが分かる。

### 3. 数値計算

提案する周期境界値問題の多重極法を用いて、多数のクラックを含む物質の巨視的な弾性定数を求めた。以下ではいくつかの数値例を示す。

#### 3.1. 問題設定

まず、種々の記号を定義する。以下では取り扱うユニットセルは一般には複数の、同一長さ  $2a$  の直線クラックを含むものとする。クラックは基本的に座標方向に整列した場合を取り扱い、 $x_1$  方向のクラック数を  $n_x$ 、 $x_2$  方向のクラック数を  $n_y$  とする。クラック一本当たりの要素分割数は同一 ( $n$ ) とする。

#### 3.2. 直接法による解との比較

周期境界値問題における高速多重極法の解の妥当性を検証するために、従来法を用いて求めた開口変位 (Direct) と、高速多重極法によって求めた開口変位 (FMM) の比較を行なった。従来法では、 $\Gamma + S$  上の通常の境界積分方程式を離散化し、 $S$  上の境界条件と  $\Gamma$  上の周期境界条件を直接離散化して連立一次方程式に帰着させ、開口変位を求めた。その際、解は定数の自由度を持っているため、境界上の要素の一つで  $u$  の値を陽に与えた。条件は、 $a = 0.4$ 、 $n_x = 1$ 、 $n_y = 1$ 、 $n = 200$  でクラックの向きは  $x_1$  方向とし、クラック上の境界条件は  $\frac{\partial u}{\partial n} = n_2 = 1.0$  とした。得られた開口変位は Fig.3 のようになり、異なる方法から得られた両者の結果が一致したため、本論文の方法の正しいことが示された。

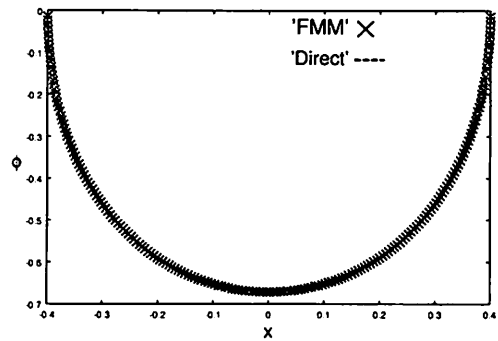


Fig. 3 直接法及び高速多重極法によって求めた開口変位

#### 3.3. 高速多重極法による巨視的な弾性係数の算定

$x_1$  方向を向き、ランダムな平行移動を加えたクラックが複数分布している物体の  $x_2$  方向の巨視的な弾性定数を、周期境界値問題における高速多重極境界積分方程式法を用いて、均質化の理論から得られた式 (18) をもとに計算した。簡単のため、クラックが存在しない場合のもとの物質の弾性定数を 1 とする。計算は、Table 1 に示した 4 つのケースで行った。

Table 1 クラック数などの条件

	$a$	$n_x$	$n_y$	$n$
ケース 1	0.04	10	10	100
ケース 2	0.04	10	50	100
ケース 3	0.04	10	100	100
ケース 4	0.004	100	100	100

それぞれのケースにおけるクラックの配置図を Fig. 4~7 に示す。

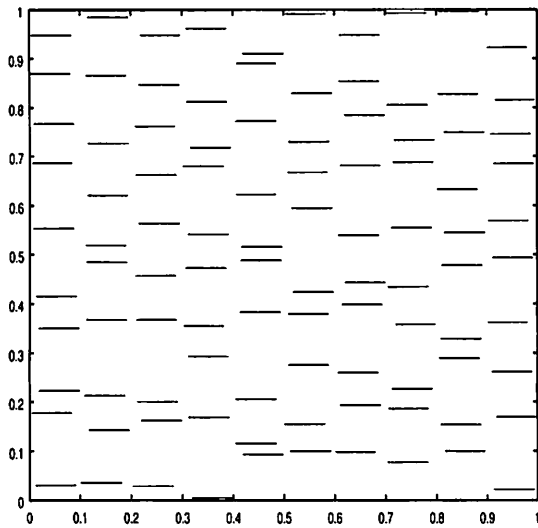


Fig. 4 ケース 1

高速多重極境界積分方程式法で求めた巨視的な弾性係数をそれぞれ  $E_b$  と書く。それぞれのケースで、 $E_b$  は Table 2 のようになった。

Table 2 巨視的な弾性係数

	$E_b$	$E_a$	$E_b/E_a$
ケース 1	0.6009	0.6275	0.9576
ケース 2	0.2719	0.3003	0.9056
ケース 3	0.1964	0.2245	0.8749
ケース 4	0.6038	0.6415	0.9412

なお、 $E_a$  については後述する。

さらにケース 1 とケース 4 について、クラックをランダムに並行移動するだけでなく、 $-\pi/4$  から  $\pi/4$  までの範囲でランダムな回転も与えた場合をそれぞれケース 5、ケース 6 (Fig. 8~9) とする。これらについて、本論文の高速多重極境界積分方程式法を用いて巨視的な弾性定数  $E_{ij}$  を求めた。この場合は、巨視的な弾性定数  $E_{ij}$  はテンソル値となり、各成分は次のようになった。

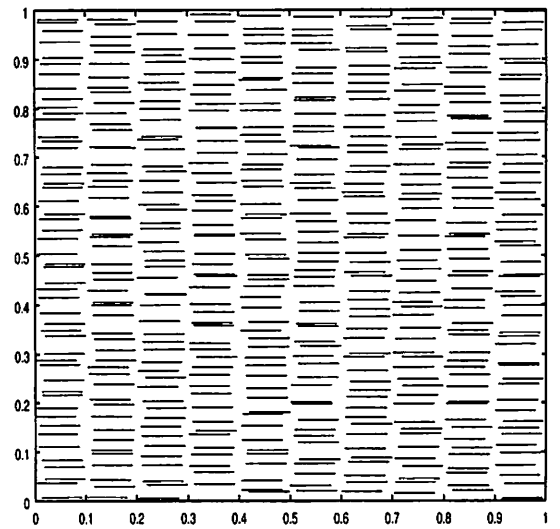


Fig. 5 ケース 2

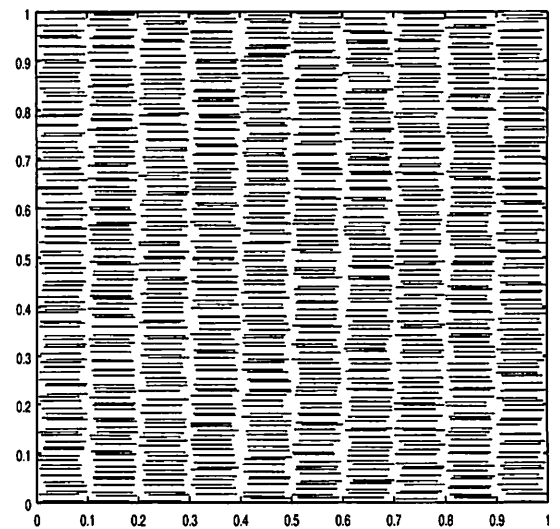


Fig. 6 ケース 3

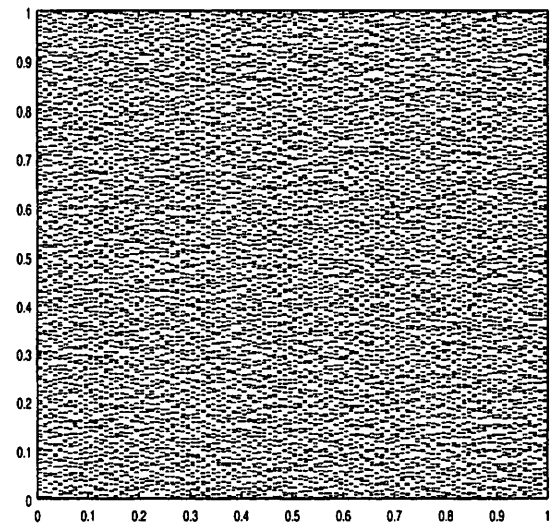


Fig. 7 ケース 4

ケース 5

$$E_{ij} = \begin{pmatrix} 0.9140 & 0.02433 \\ 0.02433 & 0.6486 \end{pmatrix}$$

ケース 6

$$E_{ij} = \begin{pmatrix} 0.9095 & -0.001263 \\ -0.001263 & 0.6523 \end{pmatrix}$$

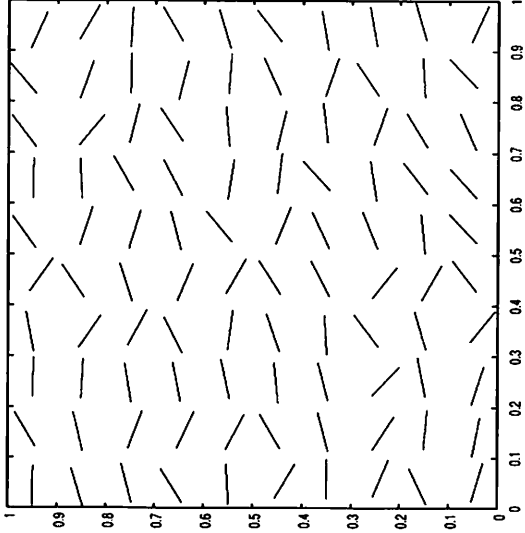


Fig. 8 ケース 5

$\sigma_2 = \frac{\partial u}{\partial x_2}$  を評価する。さらに、次の式によって、 $x_2$  方向の巨視的な弾性係数  $E_2$  を求める (7)。

$$E_2 = \frac{\sigma_2(ave)L}{(\Delta u)_{(ave)}} \quad (20)$$

ここに、 $\sigma_2(ave), (\Delta u)_{(ave)}$  はそれぞれ、

$$(\Delta u)_{(ave)} = \hat{u}(x_2 = L) - \hat{u}(x_2 = 0) \quad (21)$$

$$\sigma_2(ave) = \frac{\hat{\sigma}_2(x_2 = 0) + \hat{\sigma}_2(x_2 = L)}{2} \quad (22)$$

であり、 $\hat{\cdot}$  は辺上の平均値を表す。

Table 2 に示した  $E_a$  は、こうして求めた近似的な巨視的弾性定数を表す。周期構造を考慮して算出した巨視的弾性定数と、簡便法による結果は、クラックの寄与による弾性係数の減少量が大きいほど差が大きくなっているが、それでも差は 1 割前後で抑えられていることが分かる。

### 3.5. 計算時間

周期構造を考慮することによって計算時間がどれほど増大したかを知るため、同一の  $\Omega$  について、周期境界値問題における高速多重境界積分方程式法の計算時間  $t_p$  と、無限領域中に存在する場合の高速多重境界積分方程式法の計算時間  $t_n$  を、前述のケース 1 からケース 4 の場合について比較した (Table 3)。使用したコンピュータは京都大学情報学術メディアセンターの富士通 PRIMEPOWER HPC2500 (メモリ 384Gbyte) であり、4cpu で自動並列化を行なって計算した。この結果より、周期構造を考慮したことによる計算時

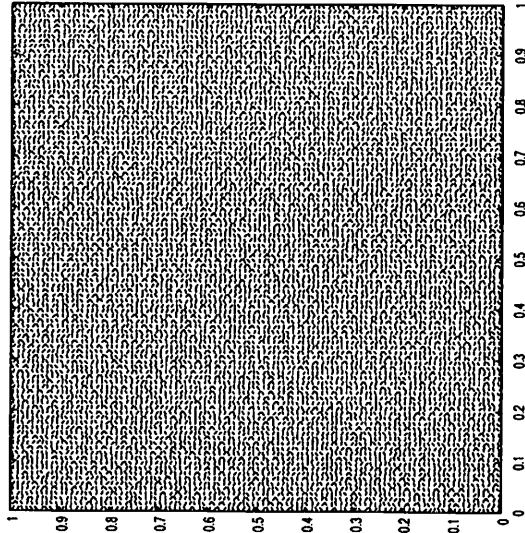


Fig. 9 ケース 6

### 3.4. 簡便法による巨視的弾性定数の精度

巨視的な弾性定数を求めるために、周期境界値問題を解かず、次のような方法を用いることがある。簡単のため、一辺の長さが  $L$  の正方形領域の中に、複数のクラックが  $x_1$  方向に平行に並んでいる場合を考える。まず、これらのクラックが無限領域にあって、遠方場  $u_\infty = x_2$  のもとで変形する場合を考える。境界積分方程式法によってこの問題を解き、正方形領域の上下の二つの辺上のいくつかの点で  $u$  と

Table 3 計算時間の比較

	$t_p$ (sec)	$t_n$ (sec)	$t_p/t_n$
ケース 1	12.62	10.89	1.16
ケース 2	129.1	108.2	1.19
ケース 3	546.7	457.6	1.19
ケース 4	4432	3753	1.18

間の増大は 1.2 倍以下であることが分かる。

## 4. 結論

本論文では、周期構造に対する高速多重境界積分方程式法を用いることによって、正確に、しかも計算時間の大幅な増大もなく、2 次元 Laplace 方程式におけるクラック周期境界値問題を解き、開口変位を精度良く求めることができ、また、得られた開口変位を使って求めた巨視的な弾性定数と、近似的な方法を使って求めた巨視的な弾性定数を比較し、少々ずれはあるものの、近似的な方法によってもある程度妥当な値が求められる事を確認した。

今後の課題としては、今回作成した周期境界値問題における高速多重境界積分方程式法のプログラムを並列化し、さらなる高速計算を可能にすることや、Laplace 問題だけでなく粘弾性問題などにも応用することも考えられる。

## 参考文献

- (1) N. Nishimura (2002), Fast multipole accelerated boundary integral equation methods, *Applied Mechanics Reviews*, **55**, pp.299-324
- (2) 寺田賢二郎・菊池昇 (2003), 均質化法入門, 丸善
- (3) <http://www.civil.tohoku.ac.jp/tei/english/homogenization.htm>
- (4) K. Koro and K. Abe(2002), A wavelet method for reducing the computational cost of BE-based homogenization analysis, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **27**, pp.439-454
- (5) L. Greengard and V. Rocklin(1987), A Fast Algorithm for Particle Simulations, *Journal of Computational Physics*, **73**, pp.325-348
- (6) M. Abramowitz and I.A. Stegun (1972), *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York; Chapter 18: Weierstrass Elliptic and Related Functions
- (7) N. Nishimura and Y.-J. Liu(2004), Thermal Analysis of Rigid-Line Inclusions in a Matrix by the Boundary Integral Equation Method, under submission
- (8) J.L. Lions(1980), Remarks on Some Asymptotic Problems in Composite and in Perforated Materials, *Variational Methods in the Mechanics of Solids*, pp.3-20