

研究課題別評価

1 研究課題名： マイクロ流体デバイス開発のための流体－構造連成共振現象逆解析

2 研究者氏名： 松本 純一

3 研究のねらい：

近年、微細加工技術の進歩により数 μm ～数 mm サイズのマイクロマシンの開発が盛んに行われ、その関連技術の発展は急速に進んでいる。マイクロマシンは、スケールが小さいことから、体内埋め込み用医療機器、高性能で小型な産業機器等の開発が可能となる機械技術として医療・産業界にとって重要である。

マイクロマシンの技術開発の中では、化学工学の分野を中心に、特にポンプ・バルブといったマイクロ流体デバイスの開発が関心を集めている。マイクロ流体デバイス内部の流体(液体)挙動は、通常スケールの流体挙動とは異なり、微小スケールの影響で粘性力が極端に卓越した独特な流れ現象となっている。粘性力の卓越した流れ場では、流れが遅く流体の挙動が緩やかであるため一般的に流体の運動効率は高くない。そこで、高効率かつ高性能なマイクロ流体デバイスを開発するための一つの考えとして、アクチュエータ(構造)部の小さな力を、いかに大きなエネルギーに変換して流体に作用させるかが重要なポイントとなる。その作用手段として、流体のもつ固有の振動数(流れの周期)と構造物のもつ固有の振動数(振動の周期)とが互いに干渉し合って大きな共振を起こす同期現象である、流体－構造連成の共振現象の利用が考えられる。

本さがけ研究では、コンピュータを用いた三次元実モデルの数値シミュレーションにより、共振をうまく利用して小さな力のアクチュエータ源で構造物を駆動させ、流体を大きく動かすことを可能にする共振制御解析手法の開発を目的としている。大きな共振振動の発生には、単に構造物の振動量を大きくするだけでは効果は見られないため、流体と構造物の持つ固有の振動数(固有値)を近い値となるようにコントロールしなければならない。共振振動などに代表される流体－構造連成問題特有の固有値に関する現象は非常に複雑であり、この現象をコンピュータ上に再現し、その計算結果を用いて逆解析を行う解析技術は難易度も高く、未解決の分野である。この複雑な固有値を制御することに着目し、共振制御解析を行い、大規模並列三次元解析にてその有効性を検証する。本研究は近い将来のマイクロ流体デバイスの高機能化、小型化に資する数値解析技術の開発を目標としている。

4 研究成果：

本研究を実現するためには、図1に示すように、三次元流体－構造強連成解析、三次元固有値解析、形状同定逆解析技術の開発および統合が必要となる。本研究のイメージは図2であり、JSTさがけ研究で行った研究成果は主に次の5つである。

- 1) 高精度かつ計算効率の優れた直交基底気泡関数要素数値解析方法
- 2) 並列版三次元流体－構造強連成解析プログラムの開発
- 3) 非定常問題での形状同定並列逆解析
- 4) 64プロセッサ(CPU)中規模計算機を使用した一億自由度以上の超大規模並列固有値解析
- 5) 並列版三次元流体－構造強連成逆解析システムの統合

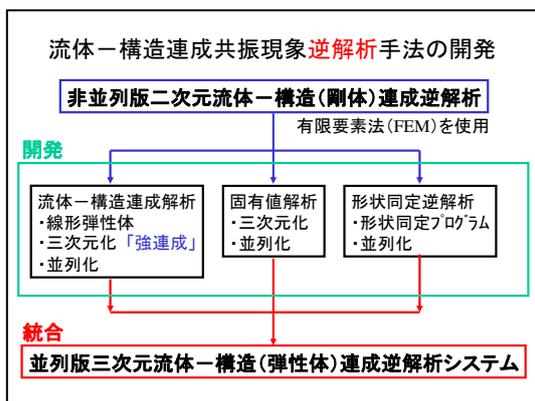


図1 共振現象逆解析手法の開発

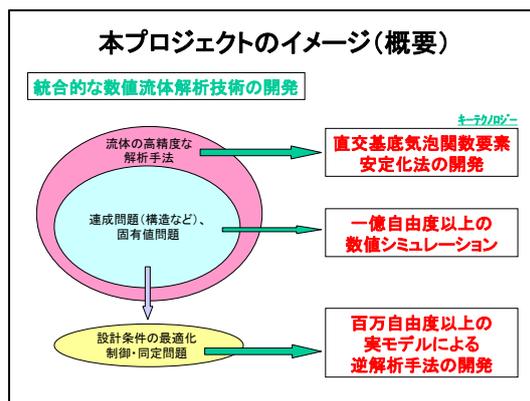


図2 本プロジェクトのイメージ

以下にJSTさきがけ研究で得られた5つの成果の説明を示す。

4. 1 高精度かつ計算効率の優れた直交基底気泡関数要素数値解析方法

時間微分項を含む偏微分方程式の数値解析方法では、時間方向の離散化手法として、陽解法と陰解法が用いられる。陽解法は、未知量を求めるために、疎な分布行列の逆行列を必要としない解法であり、陰解法は、疎な分布行列の逆行列を必要とする解法である。空間方向の数値離散手法の一つである有限要素法を使用して、時間方向の離散化に陽解法を適用する場合には、通常、疎な分布行列(整合質量行列)の各行の成分を足し合わせて(集中化させて)、対角項のみに成分をもたせた近似行列(集中質量行列)が使用される。集中質量行列を用いた場合には、行列の成分が対角項のみであるので、逆行列は各対角成分を逆数にした行列になり、数値解析上、近似なしの整合質量行列およびその逆行列を使用する場合に比べて、非常に少ない記憶容量、計算時間で解析を実行することができる。しかしながら、集中質量行列を使用した場合には、集中質量行列が元の質量行列と同一の行列ではなく近似行列となるために、得られた解析結果が整合質量行列の逆行列を使用した結果に比べて精度が悪く、解析結果の信頼性に問題があった。本研究では、有限要素法の一解法である気泡関数要素にて、各基底が直交する条件を導入し、整合質量行列を集中化せず、対角行列となる整合質量行列を開発した(直交基底気泡関数要素数値解析方法)。開発した解法は、整合質量行列の近似を行わずに、対角質量行列となっているため、集中質量行列を使用したときのような精度の劣化はなく、通常の整合質量行列を使用した場合と同等な精度を保ちつつ、集中質量行列と使用した場合と同じ、計算効率、少メモリ化を実現した解法である(図3参照)。

4. 2 並列版三次元流体-構造強連成解析プログラムの開発

流体-構造強連成問題を扱うにあたり、複雑な連成挙動を数値解析手法にて計算するためには、(1)精度が良く安定であり、(2)流体-構造連成の正確な相互作用を表現でき、(3)高効率な大規模解析への適用が可能な手法が必要となる。本研究では、上記の3つの条件を満たす解法として直交基底気泡関数要素安定化法を用いた強連成手法の開発を行った(図4参照)。直交基底気泡関数要素安定化法は、流速と圧力に対して上限下限条件を満たす要素(MINI 要素)を採用した混合補間型の手法であり、流速の近似関数に2レベル気泡関数(直交基底となる気泡関数)、重み関数に3レベル気泡関数(安定化作用制御項を導く気泡関数)を導入した定式化により数値不安定性を回避する方法である(1)。また、定式化が簡便であることから、強連成などの複雑な定式化に有効であり(2)、直交基底気泡関数要素は質量行列が対角行列となるので、質量行列の人為的な集中化(集中質量行列)を用いることなく分離型解法の採用ができ、整合圧力ポアソン方程式の解法にて、高精度を保ちながら計算効率の高い大規模並列解析を行うことが可能となった(3)。

4.3 非定常問題での形状同定並列逆解析

従来の安定化手法に比べて定式化が極めて簡便な気泡関数要素安定化法を使用した非定常問題の形状同定並列逆解析プログラムを開発した。評価関数に流体力を用いた非圧縮 Navier-Stokes 方程式 (非定常非線形問題) の形状同定解析の適用を検討した。検証の問題として円柱周りの解析を取り上げ、レイノルズ数 0.1 (Stokes 流れとなる領域)、20 (カルマン渦の発生しない領域)、250 (カルマン渦が発生する領域) の 3 ケースの抗力の同定形状解析を行った。3 ケースいずれの場合にも目的とした抗力が得られる同定形状を解析できた (図4参照)。

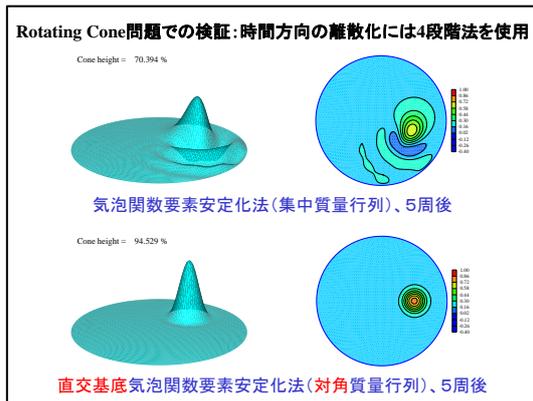


図3 直交基底気泡関数要素数値解析方法

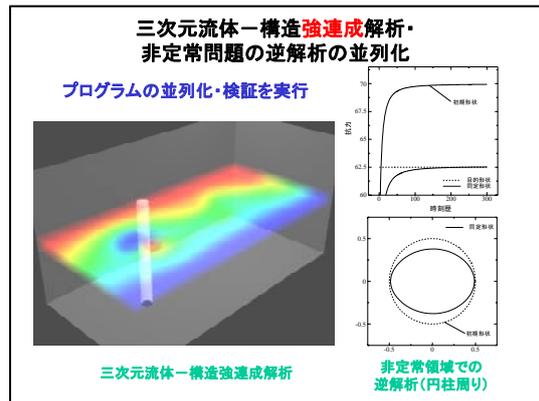


図4 流体-構造強連成解析と形状同定逆解析

4.4 64 プロセッサ (CPU) 中規模計算機を使用した一億自由度以上の超大規模並列固有値解析

有限要素法に特化した超大規模固有値問題用に、Arnoldi 法を用いた並列ソルバーを提案した。Arnoldi 法は、非常に大きな行列を、絶対値の大きい固有値から順に m 個を含む m 元の行列 (上 Hessenberg 行列) に変換する方法である。有限要素法での固有値問題は、振動解析・系の安定性解析がほとんどであり、そのときに必要な情報は、低次の振動モード・系の不安定モードの数~数十の固有値・固有ベクトルである。Arnoldi 法はスペクトル変換を適用することにより、知りたい部分の m 個の固有値をもった m 元の行列を作成するので、有限要素法での固有値解析に非常に適した方法である。Arnoldi 法アルゴリズムの並列化を有限要素法の特徴を活かした方法 (element by element 手法) を用いて行い、計算の高速化、省メモリ化を図った。実問題への解析例として、一億自由度を超える射出成形機固定盤の構造固有値解析を 64 プロセッサの中規模 PC クラスタを使用した分散メモリ型並列解析手法で行い提案手法の有効性を示した (図5参照)。

4.5 並列版三次元流体-構造強連成逆解析システムの統合

4.1~4.4では、国内/PCT 特許出願を行った流体解析手法の新規的な解法 (直交基底気泡関数要素安定化法) を軸とし、1) 三次元流体-構造連成並列解析、2) 三次元構造固有値並列解析、3) 形状同定並列逆解析のプログラム開発を行った。これまでに開発してきた1)~3)のプログラムを統合し、図6の実現方法により共振制御流体-構造連成逆解析シミュレーション技術の構築を試み、本プロジェクトの取り纏め成果とする。

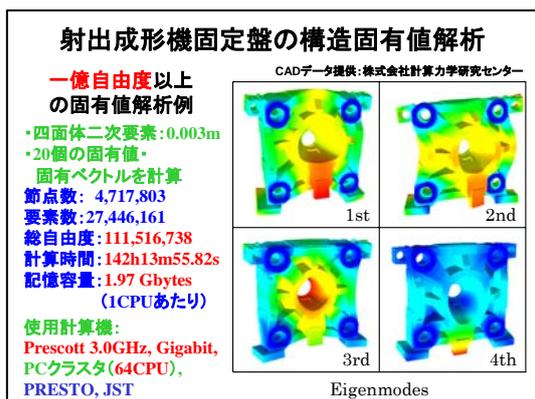


図5 一億自由度並列固有値解析

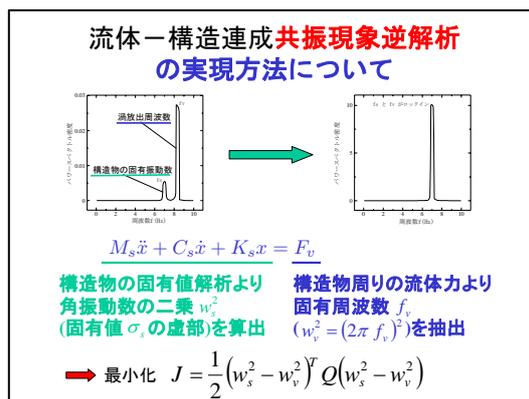


図6 実現方法について

5 自己評価:

流体—構造連成共振現象逆解析は、通常の流体—構造連成解析に比べて計算アルゴリズムが複雑になり、数十倍～数百倍の記憶容量・計算速度を必要とする。この事柄が、現在のところ、流体—構造連成問題の三次元逆解析がほとんど行われていない原因の一つとなっている。流体—構造連成共振現象逆解析を実現させるためには、多くの記憶容量と膨大な計算時間を必要とする超大規模解析が不可欠であり、32～64プロセッサ規模のPCクラスタの使用を前提とし、図2に示した計算規模を目標に本プロジェクトを遂行した。

これまでの研究で、高精度を保ちながら計算速度の高速化、少メモリ化を実現できる直交基底気泡関数要素数値解析方法(流体解析手法)を開発し、この解法を軸として、64プロセッサを使用したPCクラスタで、流体—構造強連成問題では数千万自由度、固有値解析では一億自由度、逆解析では数百万自由度の計算を可能とするプログラム開発に成功し、計算規模の面では当初の目標を達成したと考えている。しかしながら、計算時間は、予想していた以上にかかり、数百万自由度の逆解析では、最低でも数週間の計算時間を要する結果となった。

三次元実モデルの流体—構造強連成逆解析を手軽に行うには、現状では改良すべき点も残されているが、本研究の機会を与えて頂いたことに感謝するとともに、今後は、開発したプログラムをより現実的な計算時間で終了できる数値解析システムへと発展させ、高機能なマイクロ流体デバイス設計に役立つ実用的な逆解析シンセシス技術の開発を目指して研究を進めてゆきたい。

6 研究総括の見解:

マイクロ流体デバイスは医療・情報産業への応用が期待されている。松本研究者は、マイクロ流体デバイスの技術開発に応用するために、コンピュータを用いた三次元実モデルの数値シミュレーションにより、共振をうまく利用して小さな力のアクチュエータ源で構造物を駆動させ、流体を大きく動かすことを可能にする共振制御解析手法の確立を行った。複雑な連成挙動を数値解析手法にて計算するためには、精度がよく安定であり、流体—構造連成の正確な相互作用を表現でき、高効率な大規模解析への適用が可能な手法が必要となる。本研究では新しい流体解析方法である、直交基底気泡関数要素安定化方法を用いた強連成手法を開発し、高精度を保ちながら計算効率が高く、省メモリ化を実現した大規模並列解析を行ったことを高く評価する。

7 主な論文等:

論文(査読付き)

1. 松本純一: 安定化気泡関数有限要素法を用いた非圧縮粘性流れにおける形状同定解析, 応用力学論文集, 6, pp.267-274, 2003.
2. 松本純一: 気泡関数を用いた非圧縮粘性流れ解析のための2レベル-3レベル有限要素法, 応用力学論文集, 7, pp.339-346, 2004.
3. 松本純一: Krylov 部分空間反復法を用いた Arnoldi 法による有限要素並列固有値解析, 日本応用数理学会論文誌, 15(2), pp.145-158, 2005.

4. Junichi Matsumoto: A Relationship between Stabilized FEM and Bubble Function Element Stabilization Method with Orthogonal Basis for Incompressible Flows, *Journal of Applied Mechanics, JSCE*, **8**, pp.233–242, 2005.

特許出願

1. 発明者: 松本純一

発明の名称: 直交基底気泡関数要素数値解析方法、直交基底気泡関数要素数値解析プログラムおよび直交基底気泡関数要素数値解析装置

出願人: 独立行政法人 科学技術振興機構、独立行政法人 産業技術総合研究所

出願日: 特願 2004-343213(平成 16 年 11 月 26 日:50 頁)

2. 発明者: 松本純一

発明の名称: 直交基底気泡関数要素数値解析方法、直交基底気泡関数要素数値解析プログラムおよび直交基底気泡関数要素数値解析装置

出願人: 独立行政法人 科学技術振興機構、独立行政法人 産業技術総合研究所

出願日: 特願 2005-071239(平成 17 年 3 月 14 日:79 頁)

特願 2004-343213 の国内優先権出願

3. 発明者: 松本純一

発明の名称: 直交基底気泡関数要素数値解析方法、直交基底気泡関数要素数値解析プログラムおよび直交基底気泡関数要素数値解析装置

出願人: 独立行政法人 科学技術振興機構、独立行政法人 産業技術総合研究所

出願日: PCT/JP2005/021727(平成 17 年 11 月 25 日:102 頁)

口頭発表(国際、国内)

1. 松本純一: 気泡関数要素安定化法による熱流体—構造強連成解析, 計算工学会講演会, **9**, pp.451–452, 2004.5.
2. Junichi Matsumoto: Shape Identification for Navier–Stokes Equations with Unsteady Flow Using Bubble Function Element Stabilization Method, *the Sixth World Congress on Computational Mechanics (WCCM VI) in conjunction with the Second Asian–Pacific Congress on Computational Mechanics*, Proceedings in CD-ROM, 2004.9.
3. 松本純一: Krylov 部分空間反復法を用いた Arnoldi 法による一億自由度並列固有値解析, 計算力学講演会(日本機械学会), **18**, pp.161–162, 2005.11.
4. 松本純一: 陽解法に基づいた直交基底気泡関数要素による有限要素解析, 計算力学講演会(日本機械学会), **18**, pp.167–168, 2005.11.
5. 松本純一: 直交基底気泡関数有限要素法による流体—構造強連成問題の形状同定, 数値流体力学シンポジウム, **19**, Proceedings in CD-ROM, 2005.12.

他に国際口頭発表3編、国内口頭発表16編