

有限巡回群の対称性を有するゴールドストーン模型と有限要素法を用いた基底状態探索アプローチ

Goldstone model with \mathbb{Z}_n symmetry and searching ground states based on the finite-element method

小林 未知数 (Michikazu Kobayashi)^{1,2}

¹ 高知工科大学 (Kochi University of Technology), ² 広島大学 (Hiroshima University)

e-mail : kobayashi.michikazu@kochi-tech.ac.jp

1 概要

ゴールドストーン模型は超伝導や超流動といったような量子流体を記述するためにしばしば用いられる。 $U(1)$ 対称性を持つゴールドストーン模型のハミルトニアン \mathcal{H} は

$$\mathcal{H} = \int dx \left\{ a |\nabla \psi|^2 + \frac{\lambda}{2} (|\psi|^2 - v^2)^2 \right\}, \quad (1)$$

で与えられる。ここで ψ は複素スカラー場, a, λ は正の結合定数である。この模型の最もよく知られた、非自明な物理現象として 2 次元空間における Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移があり、これは温度 T の熱平衡状態において、トポロジカル欠陥である量子渦が高温で自由に動き回るのに対して、低温では量子渦と反対のチャージを持つ反量子渦が結合して運動することによって引き起こされる相転移現象である。

式 (1) で与えられるゴールドストーン模型を拡張し、次のようなハミルトニアンを考える。

$$\mathcal{H}_m = \int dx \left\{ a |\nabla \psi|^2 + \frac{b}{n} |\nabla \psi^n|^2 + \frac{\lambda}{2} (|\psi|^2 - v^2)^2 \right\}. \quad (2)$$

ここで b は新たな正の結合定数であるとする。新たに追加された右辺第 2 項は n 周期性を持つ項であり、量子渦分子の存在を可能にする。量子渦分子とは分数チャージを持った量子渦がドメインウォールを介して結合している構造である。 b が大きいとき、量子渦分子が現れるようになり、 b が小さいときには量子渦分子は結合して通常の整数量子渦となる。2 次元空間において式 (2) のハミルトニアンで与えられる平衡状態の相図は多彩であり、特に b が大きいときには BKT タイプと Ising タイプの 2 段階の相転移が起こる [1]。

2 次元空間における安定な量子渦および量子渦分子の構造を調べる [2]。量子渦や量子渦分子の構造は式 (2) の定常解 ϕ として与えられ、

$$\left. \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi^*} \right|_{\psi=\phi} = -a \nabla^2 \phi - b (\nabla^2 \phi^n) \phi^{*n-1} + \lambda (|\phi|^2 - v^2) \phi = 0, \quad \phi(r=R, \varphi) = v e^{i\varphi}, \quad (3)$$

を満たす。ここで r, φ は極座標における動経および方位角である。

式 (3) は非線形項に微分項含まれるため、ラプラシアンが持つ微分の等方性を保証しながら定常解 ϕ を求めるのは非常に困難である。そこで本研究では FreeFEM++ に基づいた有限要素法を用いることにする。

$$\phi(r, \varphi) = v \tanh(r) e^{i\varphi}, \quad (4)$$

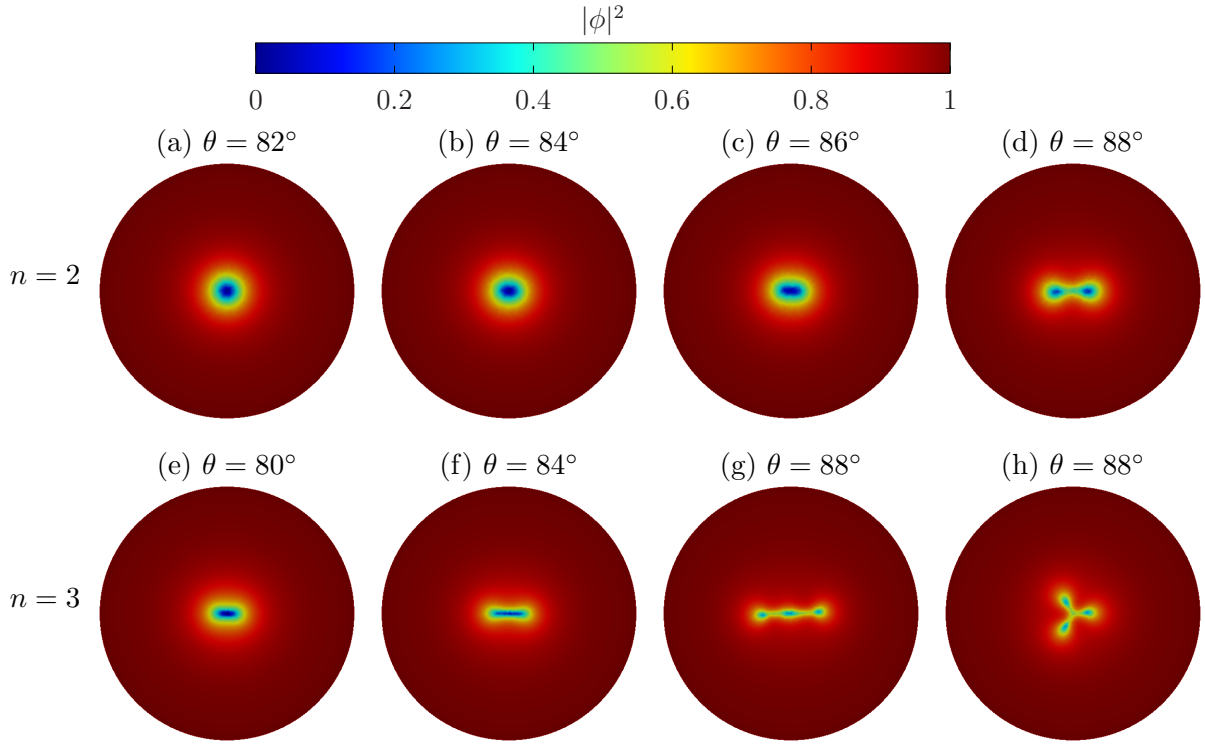


図 1. $v = 1$, $R = 20$, $a = \cos \theta$, $b = \sin \theta$, および $n = 2$ (上) および $n = 3$ (下) における式 (3) の解 .

を初期値として等方メッシュ上に $\phi(x)$ を構成し, Nesterov の加速法によって定常解を探索する . 図 1 に, FreeFEM++ によって得られた式 (3) の解を示す . パラメーターは $v = 1$, $R = 20$ とし, a と b は媒介変数 θ を用いて

$$a = \cos \theta, \quad b = \sin \theta, \quad (5)$$

とし, θ が 0 に近ければ a に比例した通常の微分項が, $\pi/2$ に近ければ n 周期性を持つ新たな微分項が顕著になるように設定する . 計算の結果, $n = 2$, $n = 3$ の両方において θ が $\pi/2$ に近づくと量子渦の回転対称性が破れ, ドメインウォールに繋がれた渦分子構造が現れることが分かった . また, $n = 3$ のときには同じ θ の値において異なる 2 つの定常解が現れる (図 1(g), (h)) ことも明らかとなった . 一方, $n = 4$ では数値不安定性によって微分の等方性が保証されなくなり, 対称性の良い解が得られておらず, さらなるスキームの改良が必要であると思われる .

参考文献

- [1] M. Kobayashi, G. Fejös, C. Chatterjee, and M. Nitta, Vortex confinement transitions in the modified Goldstone model, Phys. Rev. Research, 2 (2020), 013081-1–013081-14.
- [2] M. Kobayashi and M. Nitta, \mathbb{Z}_n modified XY and Goldstone models and vortex confinement transition, Phys. Rev. D, 101 (2020), 085003-1–085003-6.

波動方程式の係数同定問題に対する数値解法の FreeFEM による実装

Numerical simulation for the problem of coefficient identification in linear wave equation by FreeFEM

代田健二 (Kenji Shirota)¹

¹ 愛知県立大学 (Aichi Prefectural University)

e-mail : shirota@ist.aichi-pu.ac.jp

1 はじめに

本講演は、線形弾性波動方程式のラメ係数同定問題を例に、FreeFEM[1] を用いた波動方程式の逆問題に対する数値解法の実装について、一利用者の立場から示すことを目的とする。

$\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ($n = 2, 3$) を線形かつ等方的な線形弾性体であるとし、さらに有界なリプシッツ領域とする。 \mathbf{u} を変位ベクトル、 $\varepsilon(\mathbf{u})$, $\sigma_{\lambda,\mu}(\mathbf{u})$ をそれぞれひずみテンソル、応力テンソルとする。このとき、 $\varepsilon(\mathbf{u}) = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)/2$, $\sigma_{\lambda,\mu}(\mathbf{u}) = 2\mu\varepsilon(\mathbf{u}) + \lambda \text{tr} \varepsilon(\mathbf{u}) I_n$ が成り立つことを仮定する。 λ, μ はラメの弾性係数であり、 tr は行列のトレース、 I_n は n 次単位行列である。支配方程式は、次の弾性波動方程式が成り立つものとする：

$$\rho \partial_t^2 \mathbf{u} = \nabla^T \sigma_{\lambda,\mu}(\mathbf{u}) + \mathbf{f} \quad \text{in } \Omega \times (0, T). \quad (1)$$

$\rho \in C(\bar{\Omega})$ は密度、 $T > 0$ は観測時間の長さ、 $\mathbf{f} \in L^2((0, T); L^2(\Omega; \mathbb{R}^n))$ は与えられた関数とする。係数 $\lambda, \mu \in L^\infty(\Omega)$ は場所にのみ依存し、与えられた定数により関数値の範囲が制限されているものとする。初期変位および速度 $\mathbf{u}(\cdot, 0)|_\Omega = \bar{\mathbf{u}}_0 \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^n)$, $\partial_t \mathbf{u}(\cdot, 0)|_\Omega = \bar{\mathbf{v}}_0 \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^n)$, および表面変位 $\mathbf{u}|_{\partial\Omega \times (0, T)} = \mathbf{g} \in C([0, T]; H^{1/2}(\partial\Omega; \mathbb{R}^n))$ が与えられているものとする。

$\omega \subseteq \Omega$ を与えられた部分領域とし、内部観測 $\bar{\mathbf{u}} \in C([0, T]; H^1(\omega; \mathbb{R}^n))$ が、 $\nabla \bar{\mathbf{u}}$ も含めて与えられているとする。本研究では、これら内部観測より $\lambda(\mathbf{x})$, $\mu(\mathbf{x})$ を同定する問題に対して、その数値解法の開発を目的としている。

2 波動方程式の数値解法に対する FreeFEM による実装

本研究では、ラメ係数同定問題に対する解法として H^1 型解法を採用する [2]。 H^1 型解法は、位相最適化を基礎とした方法であり、 H^2 内積を元にした双一次形式により探索方向を求める反復解法である。その解法において、汎関数、そして導汎関数を求めるために線形弾性波動方程式の初期値境界値問題を繰り返し解く必要があり、それらを解くための機能が実装の際に必要となる。

数値実験のための実装に、本研究では FreeFEM を用いている。その理由は、多様な有限要素が使用可能であり、さらに有限要素近似関数を変数または配列のように使用可能など、本研究での解法を容易に実装できるからである。初期値境界値問題に対する数値解法としては、ニューマーク法を採用している。ここで、 \mathbf{u}_n , \mathbf{v}_n , \mathbf{a}_n は $\mathbf{u}(\cdot, n\Delta t)$, $\partial_t \mathbf{u}(\cdot, n\Delta t)$, $\partial_t^2 \mathbf{u}(\cdot, n\Delta t)$ の近似し、次の双一次形式を用いてアルゴリズムを記述すると、Algorithm 1 のとおりになる。

$$c(\mathbf{u}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{w} \, dx, \quad a_{\lambda,\mu}(\mathbf{u}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \{ \lambda \text{tr} \varepsilon(\mathbf{u}) \text{tr} \varepsilon(\mathbf{w}) + 2\mu \varepsilon(\mathbf{u}) : \varepsilon(\mathbf{w}) \} \, dx$$

またアルゴリズムの 4・5 行目は、FreeFEM において次のとおりに定義可能である。

Algorithm 1 ニューマーク法による線形弾性波動方程式近似アルゴリズム

```
1: Given  $\mathbf{u}_0, \mathbf{v}_0, \beta, \gamma, \Delta t, N_T = T/\Delta t$ 
2: Solve  $c(\mathbf{a}_0, \mathbf{w}) = F_0(\mathbf{w}) - a_{\lambda, \mu}(\mathbf{u}_0, \mathbf{w})$ 
3: for  $n = 0 : N_T - 1$  do
4:   Solve
5:    $\frac{1}{\beta \Delta t^2} c(\mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{w}) + a_{\lambda, \mu}(\mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{w}) = F_{(n+1)\Delta t}(\mathbf{w}) + \left( \frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{u}_n + \frac{1}{\beta \Delta t} \mathbf{v}_n + \left( \frac{1}{2\beta} - 1 \right) \mathbf{a}_n, \mathbf{w} \right)_{L^2(\Omega)}$ 
6:    $\mathbf{a}_{n+1} = \frac{1}{\beta \Delta t^2} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) - \frac{1}{\beta \Delta t} \mathbf{v}_n - \left( \frac{1}{2\beta} - 1 \right) \mathbf{a}_n$ 
7:    $\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \Delta t (\gamma \mathbf{a}_n + (1 - \gamma) \mathbf{a}_{n+1})$ 
8: end for
9: return  $\{\mathbf{u}_n\}$ 
```

```
macro stau(u) ((dx(u[1]) + dy(u[0]))/2) // EOM
macro epsilon(u) [dx(u[0]), stau(u), stau(u), dy(u[1])] // EOM
macro lm(u,v) (2.0*mu*epsilon(u)'*epsilon(v)+lam*div(u)*div(v)) // EOM
macro c(u,v) (dens*u'*v) // EOM
int n = 0;
problem DirectP([u1,u2],[w1,w2],init=n-1) =
  int2d(Th)(c([u1,u2],[w1,w2]) / (be * dt^2) + lm([u1,u2],[w1,w2]))
  - int2d(Th)(fh1 * w1 + fh2 * w2)
  - int2d(Th)(up1 / (be * dt^2) + vep1 / (be * dt) + (1 / (2 * be) - 1) * acp1 * w1)
  - int2d(Th)(up2 / (be * dt^2) + vep2 / (be * dt) + (1 / (2 * be) - 1) * acp2 * w2)
  + on(0,u1=gh1,u2=gh2);
```

ここで up, vep, acp は、 $\mathbf{u}_n, \mathbf{v}_n, \mathbf{a}_n$ を格納するための有限要素近似関数である。また、3 行目以降のループ部分は次のとおりに記述できる。

```
real t = 0.0;
for (n = 1; n <= Nt; n++){
  t += dt;
  gh1 = gdiri1(x,y,t); gh2 = gdiri2(x,y,t); fh1 = fsrc1(x,y,t); fh2 = fsrc2(x,y,t);
  DirectP;
  ac1 = (u1 - up1) / (be * dt^2) - vep1 / (be * dt) - (1.0/(2 * be) - 1.0) * acp1;
  ac2 = (u2 - up2) / (be * dt^2) - vep2 / (be * dt) - (1.0/(2 * be) - 1.0) * acp2;
  ve1 = vep1 + dt * ((1.0 - gam) * acp1 + gam * ac1);
  ve2 = vep2 + dt * ((1.0 - gam) * acp2 + gam * ac2);
  up1 = u1; up2 = u2; vep1 = ve1; vep2 = ve2; acp1 = ac1; acp2 = ac2;
}
```

$gdiri, fsrc$ は、表面変位 \mathbf{g} 、ソース項関数 \mathbf{f} を実装した関数である。ここでは 2 次元問題を例にしているが、3 次元でも同様に記述可能である。また、同様に定義・記述していくことで、 H^1 型解法全体を FreeFEM で実装することが可能である。詳細および数値実験結果については、講演時に示す。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 23K03236 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] F. Hecht, New development in FreeFem++, *J. Num. Math.*, Vol. 20, pp.251-266, 2012.
- [2] 代田健二, 内部観測による線形弾性波動方程式のラメ係数同定問題に対する数値解法, 日本応用数理学会 2024 年度年会講演予稿集, D3-3-1(PDF), 2024.

FreeFEM による三角形領域における定常キャビティ流の計算

Computation of stationary solutions of lid-driven cavity problems in triangular domains by FreeFEM

内海 晋弥 (Shinya Uchiumi)¹¹ 北海道大学 (Hokkaido University)

e-mail : shinya.uchiumi@es.hokudai.ac.jp

1 はじめに

長方形領域におけるキャビティ流れ (lid-driven cavity flow) の計算は Navier–Stokes (NS) 問題の標準的なベンチマーク問題である。長方形領域におけるそれと比較して三角形領域での計算例の報告は少ないが、レイノルズ数 (Re) や三角形形状の変化に応じて、様々な渦を観察できる [1]。

四角形領域では、 $\text{Re} \geq 5800$ で分岐が起きることが報告されている [2]。正三角形領域では、時間発展問題の解法である Lagrange–Galerkin 法を用いて数値的な定常状態に至るまで計算することにより、比較的小さい $\text{Re} \geq 1650$ で複数の定常解が計算された [3]。文献 [4] においては直角二等辺三角形領域において $\text{Re} \geq 5000$ で複数の定常解が計算された。これら [3, 4] の分岐図は異なっている。

本研究においては、この分岐図の相違に着目し、定常解の性質や個数の三角形の形状についての依存性を調べることを目的とする。本稿では、二等辺三角形の頂角を変え、定常解を FreeFEM [5] で計算した結果を紹介する。

2 数値計算の概要

$(\mathbf{u}, p) : \Omega_\theta \rightarrow \mathbf{R}^2 \times \mathbf{R}$ を未知関数とする定常 NS 問題

$$\begin{aligned} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \text{Re}^{-1} \Delta \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{0} & \mathbf{x} \in \Omega_\theta \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 & \mathbf{x} \in \Omega_\theta \end{aligned}$$

を考える。ここで Ω_θ は図 1 第 1 列に示す二等辺三角形領域であり 頂角 $\theta[^\circ]$ はパラメータである。 Re はレイノルズ数を表す正のパラメータである。境界条件も図 1 第 1 列に示す。

標準的な P2/P1 (Taylor–Hood) 要素で流速/圧力の離散化を行う。Picard 反復 (例えば [6]) でいくつかの Re の解を得た後、Newton 法で計算する。

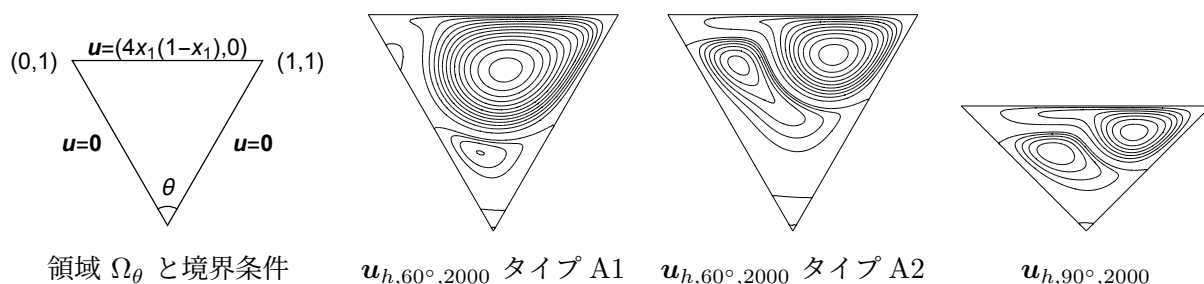


図 1. 第 1 列は領域と境界条件。第 2 から 4 列は数値解の流線。

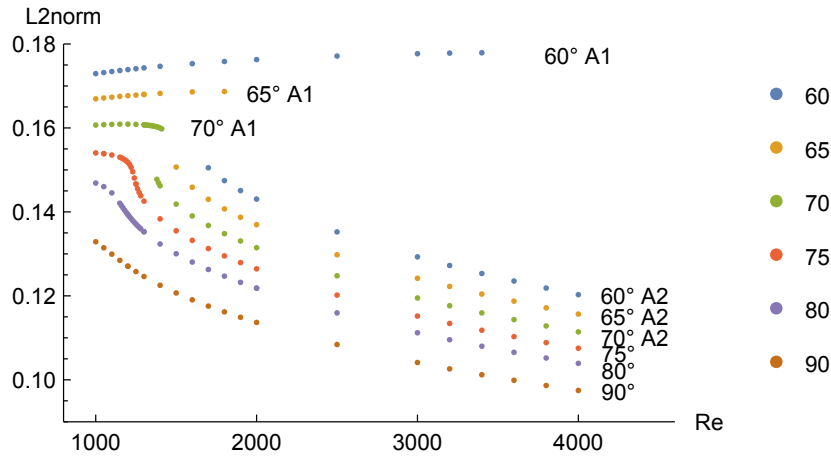


図 2. レイノルズ数 Re と定常解の L^2 ノルム.

3 数値結果

$\theta = \theta_0, Re = Re_0$ における数値解を $\mathbf{u}_{h,\theta_0,Re_0}$ で表す. 必ずしも一意でない. 図 1 の第 2 から 4 列は数値解の流線を表している. $\mathbf{u}_{h,60^\circ,2000}$ タイプ A2 と $\mathbf{u}_{h,90^\circ,2000}$ の形は近いが, $\mathbf{u}_{h,60^\circ,2000}$ タイプ A1 はそうではない. これら 3 つは文献 [1, 3, 4] で報告されている対応する流線と整合している.

図 2 はレイノルズ数と定常解の L^2 ノルム $\|\mathbf{u}_{h,\theta,Re}\|_{L^2(\Omega_\theta)}$ との関係である. $\theta = 60^\circ, 65^\circ, 70^\circ$ のとき, あるレイノルズ数帯において複数の定常解が観察される一方, $\theta = 75^\circ, 80^\circ, 90^\circ$ のときは一つであった. 分岐の構造が変わるのは $\theta = 70^\circ$ の周辺であった.

4 おわりに

本稿の数値計算における解の追跡は Re に関するものが大部分であるが, 頂角 θ に関するそれも使っている. それは FreeFEM の機能の一つである `movemesh` により実装できる.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP21K13838, JP25K00214 の助成を受けた.

参考文献

- [1] E. Erturk and O. Gokcol. Fine grid numerical solutions of triangular cavity flow. *The European Physical Journal - Applied Physics*, 38(1):97–105, 2007.
- [2] A. N. Nuriev, A. G. Egorov, and O. N. Zaitseva. Bifurcation analysis of steady-state flows in the lid-driven cavity. *Fluid Dynamics Research*, 48(6):061405, 2016.
- [3] M. Tabata and S. Uchiumi. Numerical computation of triangular cavity flows by a Lagrange-Galerkin scheme with a locally linearized velocity. *Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering*, 4(1):1–13, 2018.
- [4] B. An, J. M. Bergada, and F. Mellibovsky. The lid-driven right-angled isosceles triangular cavity flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 875:476–519, 2019.
- [5] F. Hecht. New development in FreeFem++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20(3-4):251–265, 2012.
- [6] V. John. *Finite Element Methods for Incompressible Flow Problems*. Springer, 2016.

FreeFEM と IPOPT パッケージを用いた接触変形によるき裂進展の解析

Numerical simulation of crack propagation induced by deformation due to contact boundary using IPOPT in FreeFEM

高石 武史 (Takeshi Takaishi)¹

¹ 武蔵野大学 (Musashino University)

e-mail : taketaka@musashino-u.ac.jp

1 はじめに

境界への接触による荷重や変位は材料の破壊の原因になる場合が多いが、変形に伴い接触領域が変化することで取り扱いは難しく、多くの研究はラグランジェ未定乗数法やペナルティ法などを用いているが破壊現象を調べるには計算コストが高い。本研究では、アーチへの平面接触や刃による切削など、接触境界条件を変位の不等式条件に置き換えられる場合についてフェーズフィールドき裂進展モデルを用いて材料の破壊挙動を調べた。数値シミュレーションにおいて FreeFEM と内点法により最適化を行う IPOPT パッケージを用いることで、変位の上限と下限を適切に設定することで接触境界を表現することができ、フェーズフィールドモデルと併用することで比較的低い計算コストでき裂進展シミュレーションを行える。

2 接触による変形

ここでは、接触条件を変位の不等式条件として設定することで、弾性体の材料と剛体による摩擦のない接触による変形を計算する。

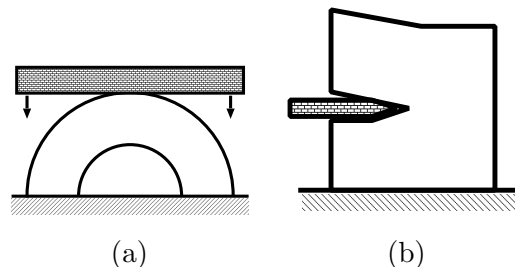


図 1. (a) 足元を固定した 2 次元アーチに対して上部から平面が接触した場合と (b) 板のき裂に刃が入っていく場合の変形。

最初に、材料外側境界での接触する場合として、足元を固定した 2 次元アーチに対して上部から平面が接触する場合の変形について考える (図 1(a)). 外径 1, 内径 0.8 の 2 次元アーチに対して速度 0.1 で上方から平面が降下すると頭頂部の接触により変形が生じる。頭頂部の外周側では $\text{div} u$ が負、内周側では正となることから、各々圧縮と引っ張りの応力が生じていることがわかる (図 2)。

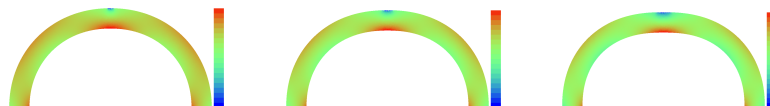


図 2. 足元を固定した 2 次元アーチ (外径 1, 内径 0.8) に対して上部から平面が接触した場合の変形と $\text{div} u$ の分布 (左から $t = 0.2, 0.4, 0.6$).

次に、既に形成されているき裂面が刃の接触により変形する場合を考える (図 1(b)). き裂の入った計算領域 (図 3(a)) を用いてき裂面から刃を接触させることで変形が計算できるが (図 3(b)), 正方形のメッシュにおいてフェーズフィールドで初期き裂を表現した場合もほぼ同様の変形を再現できることがわかる (図 3(c)). 更に、フェーズフィールドを用いた勾配流型の時間発展方程式 [1] と組み合

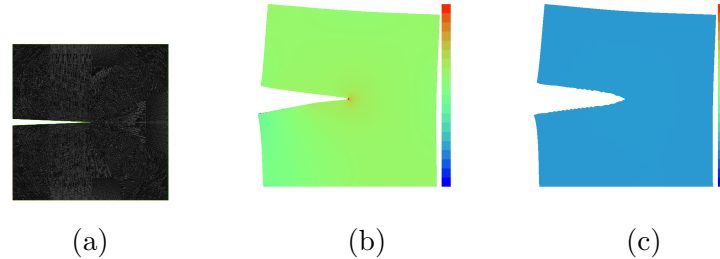


図 3. き裂の入った板に対して、き裂を広げるような刃が内側から接触した場合の変形. (a) き裂入メッシュ, (b) き裂入メッシュでの内側からの接触, (c) フェーズフィールドでき裂を表現した場合.

わせ、刃を右向きに速度 1 で移動させた場合のき裂進展も計算することができる.

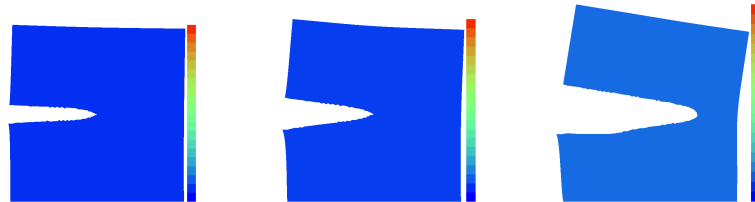


図 4. フェーズフィールドを用いた切削のシミュレーション (左から, $t=0.2, 0.4, 0.8$).

3 まとめと課題

ここでは接触境界条件を変位の不等式条件に置き換えられる場合について調べ、接触による変形と、さらにフェーズフィールドによるき裂進展モデルとの組み合わせでも、FreFEM を用いて比較的低いコストで計算可能であることがわかった. さらに、接触する材料の変形も同様に扱う場合については、Houssein ら [2] が注目する材料と接触する材料を同等に扱うためのアルゴリズムと、FreeFEM と IPOPT を用いた計算例を提示しており、き裂進展モデルと組み合わせで応用することが可能であると考えられる.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 21K03356, 2024 年度武蔵野大学しあわせ研究費の助成を受けた.

参考文献

- [1] Kimura, Takaishi, Alfat, Nakano, Tanaka: Irreversible phase field models for crack growth in industrial applications: thermal stress, viscoelasticity, hydrogen embrittlement, SN Applied Sciences 3(9) 2021.
- [2] Houssein, Garnotel, Hecht, A Symmetric Algorithm for Solving Mechanical Contact Problems Using FreeFEM, Advances in Computational Methods and Technologies in Aeronautics and Industry, Computational Methods in Applied Sciences, vol 57(2022), 235–250.