

様々な数理シミュレーションに応用可能な 正四面体格子座標系の提案

本間 達^{†1} 若松 秀俊^{†1}

空間内に適切に配置した多数のノードを用いて、数理シミュレーションを行ない、物体内部の位置姿勢の変化やエネルギー分布を可視化する手法がある。一般には、空間座標を直交座標系で座標内の格子点にノードを配置する表現を用いることが多い。しかしながら、各ノードの有効範囲を均一として空間内に最密充填すると、各ノードの中心は正四面体を連続配置した格子座標の節点となる。それゆえ、ノード間の相互作用を検討する場合、正四面体格子座標系で演算を行なうのが適切であると考え、本論文ではこの直交座標系と異なる座標系で、任意のノードと相互作用するノードを特定する手法を提案する。

Proposal of regular tetrahedron lattice coordinate system for a mathematical description of various simulations

SATORU HONMA^{†1} HIDETOSHI WAKAMATSU^{†1}

Mathematical simulations are utilized to visualize the invisible phenomena, such as inside distribution of temperature and stress in a concerning object, by using properly structuralized nodes on each grid point of the orthogonal coordinate system. Here, the close-packed nodes with same effective radius are set on the vertex of the regular tetrahedrons. Thus, the mathematical simulations calculating the interactions among nodes can be appropriately performed on the newly proposed coordinate system, which is constructed by continuous connection of regular tetrahedrons with six basic lattices. Then, the regular tetrahedron lattice coordinate system is well confirmed for the description of definite nodes having interaction with their neighboring ones.

1. はじめに

数理シミュレーションの利用は、外部から可視できない内部現象を可視化し、現在の観測値から起こり得る結果を予測するなど、多くの有益な情報提示を効果的に可能にする。その理由は、演算結果に基づいて作成される画像表現は、シミュレーションに直感的な理解をもたらすことにある。そのために、入力と出力のみに注目してその関係を数学的に表したコンパートメントモデルや、物体を分割した各部分に、科学的な解析により得られた既知の数理モデルが用いられている。そのなかで、状態分布を表現する場合には、空間内に格子点を均一に配置し、その格子点にノード(node)を配置しての演算手法が一般的である[1]。

ところで、最小限の格子点で形成し得る安定構造が正四面体なので[2]、計算プログラム作成が容易で、空間座標の表現に広く用いられている直交座標系で、変形した正四面体を配置し、それらの各頂点にノードを配置し格子点を形成して、演算を行ってきた[1]。

一方、本間らは正四面体を連続配置して形成される格子座標系にノードを配置する手法により、粘弾塑性体モデルによる力学モデル[3][4][5]や熱力学モデルを適用した人体頭部の温度分布可視化モデル[6]を提案してきた。このシミュレーションの結果は、実験装置を用いた測定結果と良好

に一致しており、数理シミュレーションの有効性が示された。

ここでは、これらの研究で用いた正四面体構造の連続配置から構築される正四面体格子座標系を明確に定義することにより、ノードの配置を明確にして、他の座標系との比較しながら、この座標系の有用性を検討する。

2. 正四面体格子座標系の構築

2.1 ノードの等価配置と基本構造

数理シミュレーションにおいて、ノードは一般的に、その周囲の一定範囲に含まれる空間内の状態を代表する。ノード間の距離を一定に配置すると、ノードごとの特性がシミュレーションに反映されるので、この検討に有効である。ノードを中心とする一定の大きさの球を考え、これを空間内に均等かつ最密に配置すると、図1に示すような六方最密格子を形成する。この格子を形成する最小基本構造は4個のノードで構成される正四面体である。したがって、数理シミュレーションにおいて、正四面体を連続配置した格子構造の各格子点とノードが一致すると考えれば、全てのノードを計算上、等価とみなすことが可能である。このとき、1つのノードはその周囲にある12のノードと相互作用する。

一般的には相互作用を及ぼしあうノード (node) 間の接続をリンク(link)として表すが、粘弾塑性体モデルを用いた力学モデル[3][4][5]では、ノードが速度や質量など実体に伴

^{†1} 東京医科歯科大学大学院保健衛生学研究科
Tokyo Medical and Dental University, Graduate School of Health Care Sciences.

う特性を表しており、これらを接続する数理モデルがエネルギーの伝達と蓄積、および減衰などを表現する。このために、ノード間の接続関係およびエネルギーの伝達・蓄積・減衰などを表現する要素(element)を定義し、これを介して接続しているノード同士を本研究では「隣接する」と表現する。

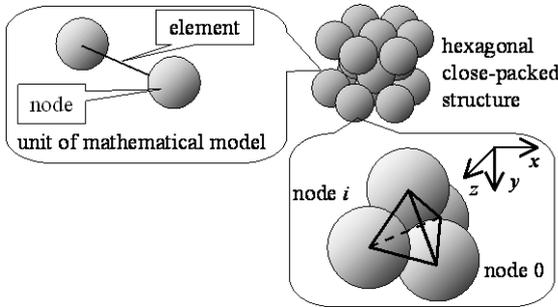


図 1 ノードの接続による物体の構築
 Figure 1 Structural description of an object with the connections of nodes.

2.2 数理シミュレーションの一般式

ノードモデルでは要素が接続する全てのノード間の相互作用を考慮し、各ノードについて現時刻の状態から次の時刻の状態変化を差分方程式で算出する。時刻 t における特定のノード N_0 の状態変数およびこのノード N_0 自体がもつ特性によるバイアス値、およびこれに隣接する 12 個のノード $N_i (i=1\sim 12)$ との間が生じる相互作用により、1 サンプル間隔後の時刻 $t+1$ の状態が算出できる。これを式(1)の一般式で表す。

$$\xi_0(t+1) = \xi_0(t) + \sum_{i=1}^{12} \mathbf{k}_{i0}(t) \{ \xi_i(t) - \xi_0(t) \} + \mathbf{B}_0(t) \quad (1)$$

ここで、 ξ はノードの内部状態を表す変数ベクトルであり、 \mathbf{k} は状態変数の差分に基づいて状態を変化させる係数ベクトルである。また、 \mathbf{B} はノード自体の特性により生じるバイアス値を表す。各変数ベクトルの添字は状態変化を計算するノード N_0 に接続するノードの番号を表しており、 $i0$ はそれぞれノード N_0 と N_i の間に生じる相互作用であることを表している。

粘弾塑性体モデルで構築した物体の位置姿勢および形状の変化を計算する場合[3][4][5]、状態変数は各ノードの座標と速度成分であり、係数ベクトルが弾性、粘性、塑性を表す。熱伝導モデルとして、物体内部の温度分布を算出する場合[6]には、状態変数は各ノードの温度であり、内部で発生する熱量をバイアス値として考えることができる。

2.3 斜交座標系の問題点

正四面体を連続配置した格子構造での各格子点を特定するために、一つの正四面体を任意に選択し、図 2 のよう

にその一つの頂点で接続する 3 本の辺を延長する。これらの直線を便宜的に基準軸と考え、それぞれ \angle_x 軸、 \angle_y 軸、 \angle_z 軸とすれば、各格子点ごとに、一片の長さを基準長とした場合の倍数で表される斜交座標を設定できる。この斜交座標の値は整数であり、これを用いれば任意のノードおよび相互作用するノードを特定可能である。一方、数理シミュレーションで同一の演算を連続処理する場合、配列変数を定義し、この添字のみ変更するのが効率的である。すなわち、この添字を上記の斜交座標で指定して種々のデータを記録すれば、ノードと変数の対応関係が明確である。ところで、多くのプログラム言語で配列変数の添え字は 0 以上の整数で定義するので、全ての斜交座標が正となる「第一象限」の内側にのみ、その全体が含まれる物体を扱うことになる。一方、その一部でもこの範囲から外れる場合には、座標の平行移動などを考慮しなければならない。上述の基準軸は四面体の各辺を延長したので、これによって空間を区切って設定される「第一象限」の領域は図 2 に示すように限定された形状となる。このため演算で取り扱う物体の形状と大きさにより、平行移動してもこの範囲に収めるのが困難な場合があり、汎用的使用には適しているとは言いがたい。

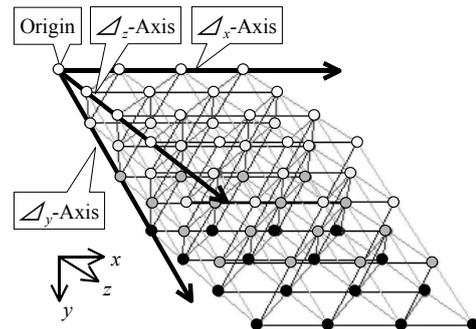


図 2 斜交座標軸の定義
 Figure 2 Definition of oblique axial lattice coordinate.

2.4 正四面体格子座標系の設定

正四面体を連続配置し、基準軸を直線で定義した斜交座標系は座標軸が直交しないので、これにしたがって分割した空間領域の形状および範囲は均等ではない。しかしながら、上述のように配列変数を用いた連続演算を前提とする場合、直交座標と同様に空間を均等に分割する手法を適用すると、空間内の任意形状を確保するのが容易になる。

そこで図 3 に示すように、上述した \angle_x 軸を直交座標系の x 軸と一致し、これと直交する y 軸に沿う格子を y 軸方向の基本格子として設定する。まず x 軸 (\angle_x 軸) と重なる正四面体の一边を X 基本格子とすると、 X 基本格子 (X -lattice) は直線で定義される。ここで、この X 基本格子と頂点で交わる y 軸方向の一边を選択し、 y 軸と沿うように格子点ごとに角度を変える格子を Y 基本格子 (Y -lattice) とする。さらに、

y 軸に対して Y 基本格子と対称な基本格子を便宜的に XY 基本格子(XY-lattice)とする。同様に、Z 基本格子(Z-lattice), ZX 基本格子(ZX-lattice), YZ 基本格子(YZ-lattice)を定め、これらの基本格子を基準として各格子点に格子座標を定める。このように正四面体を連続配置した格子系に基本格子および格子座標を定めた座標系を本研究では、正四面体格子座標系と定義する。正四面体格子座標系の原点は X, Y, Z の各基本格子が交差する節点(node)とし、便宜的に直交座標系の原点と一致するように設定する。格子座標は、X, Y, Z の各基本格子について、原点から数えた節点の個数で表す。このため正四面体格子座標系の格子座標は 0 以上の整数となる。

この正四面体格子座標系では図 3 に示すように、X, Y, Z の各基本格子によって空間を直交座標系とほぼ同様に分割するので、「第一象限」内に任意形状の物体を再現可能である。

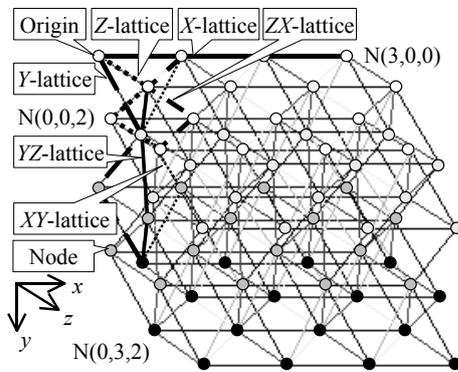


図 3 基本格子の定義

Figure 3 Definition of basic lattices in oblique axial lattice coordinate system.

2.5 格子座標を用いたノードと要素の特定

上述の格子座標を用いてノードと要素を識別する方法を以下のように定義する。

力学系のシミュレーションではノードの位置が移動する場合もあるが、初期配置の格子座標(X, Y, Z)でノードを区別し、N(X, Y, Z)と表記する。ノード間を接続する要素は、これと一致する格子の原点側に接続するノードの格子座標および格子と平行な基本格子の名称で区別する。すなわち要素を表す記号 E_L に基本格子の名前を添字としてハイフンで接続し、起点となるノードの格子座標を記す。例えば、 $E_{L-X}(X, Y, Z)$ はノード N(X, Y, Z) と N(X+1, Y, Z) を接続する X 基本格子に平行な要素を表す。

X, Y, Z の各基本格子を基準として格子座標を定めるので、要素 E_{L-X} , E_{L-Y} , E_{L-Z} の終点の格子座標は、それぞれの X 格子座標, Y 格子座標, Z 格子座標が 1 だけ増加する。一方、 E_{L-XY} は y 軸に対して E_{L-Y} と対称な折れ線なので、始点の Y 格子座標が偶数の場合は、終点の Y 格子座標が 1 増加し、同時に X 格子座標が 1 増加する。また Y 格子座標が

奇数の場合は、終点の Y 格子座標が 1 増加し、同時に X 格子座標が 1 減少する。 E_{L-ZX} , E_{L-YZ} についても同様に考えることが可能であり、起点となるノードの Y 格子座標と Z 格子座標の値が偶数あるいは奇数の場合として分類して、それぞれの要素に関する終点の格子座標を一意に決定することが可能である。

2.6 格子座標を用いた実座標の算出

正四面体格子座標系の格子点は、上述の規則にしたがって配置してあるので、直交座標系における実座標(x_{real} , y_{real} , z_{real})を格子座標(X, Y, Z)および格子の基本長 l を用いて以下の式(2)~(4)で表すことができる。ただし、正四面体格子座標系の原点と直交座標系の原点は一致しているとする。また、式中で用いた mod は $A \bmod B$ と記述したときに A を B で除したときの剰余を表すものとする。

$$x_{real} = [X + \{(Y+1) \bmod 2 + (Z+1) \bmod 2\} / 2] \times l \dots\dots\dots (2)$$

$$y_{real} = Y \times \sqrt{6} / 3 \times l \dots\dots\dots (3)$$

$$z_{real} = [Z \times \sqrt{3} / 2 + \{(Y+1) \bmod 2\} \times \sqrt{3} / 6] \times l \dots\dots\dots (4)$$

これにより格子座標系の格子点の位置が一意に決定できるので、任意の物体の形状に合わせたノードの配置が可能である。

3. ノード配置法の比較検討

3.1 直交座標系におけるノード配置の問題点

一般的に用いられている直交座標系に設定した格子座標を用いた多くの数値シミュレーションでは、図 4 のように 1 つのノード 0 を立方体の頂点の一つとする 8 つの立方体の各頂点との相互作用を算出する。直交座標系は x, y, z の 3 軸およびこれと平行な軸で格子の形成が可能であるが、ノード 0 と相互作用しうる周囲のノードは、ノード間の距離により、立方体の辺で接続するノード①群、立方体の一面の対角線で接続するノード②群、立方体の立体的対角線で接続するノード③群に分類される。ここで、①群は 6 個、②群は 12 個、③群は 8 個のノードを含む。ノード間のエネルギー伝達を表す要素を考えるためには、正四面体格子座標系より多くの要素を考慮し、各群の距離を念頭に置いた演算が必要である。したがって、各格子の長さを正四面体格子座標系と同じと考え、同程度の密度でノードを配置する場合、演算量の増加は避けられない。

ところで、正四面体格子座標系では、演算を統一するために全てのノードを均一とし、その影響する範囲が接触している場合に相互作用が生じると考えた。直交座標系の①群が隣接して接触するノードの距離であると考えれば、②群および③群は接触しないので、これらとの間に相互作用を生じないと考えることが可能である。この場合、①群の

み考慮した演算を行なうので演算量は減少する。このとき、②群および③群の影響はそれぞれと接触する位置のノードを經由して1時刻、あるいは2時刻遅れでノード0に伝達する。

なお、四面体構造はガウスの法則[2]により安定構造であり、立方体構造は不安定構造であることが証明されている。このため、力学モデルによる形状変化を考慮する場合、四面体構造は形状の維持が可能であるが、立方体構造は形状の維持が不可能な場合がある。

これらの点から、直交座標系で形成した格子座標は直感的に理解しやすく、また物体形状の再現も容易である利点があるが、ノードの配置を固定可能であるなどの条件により、適用可能な数理シミュレーションの範囲を明確にする必要がある。

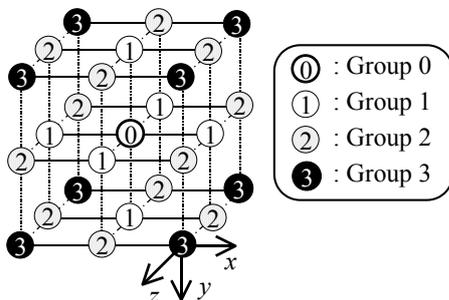


図4 直交座標系におけるノードの対応

Figure 4 Relation among the nodes in the orthogonal coordinate system.

3.2 有限要素法との比較

数理モデルを配置するとき、上述のように一定の大きさを定めた単位格子を連続的に配置する方法ではなく、構築する物体に合わせて形状を優先的に定め、シミュレーションの目的や数理モデルの特性に合わせて分割する有限要素法も広く用いられている[1]。この方法では、基本構造を積み重ねる正四面体格子座標系と比較して形状の誤差はほとんどなく、また変化の少ない部分のノードを減じて演算コストの低減も可能である。すなわち、演算能力が低いコンピュータでも一定以上の数理シミュレーションが実現できる手法である。その一方で、減少したノードの周辺に生じる連続的な状態分布を表現することが困難であり、状態変化が予測できない数理モデルで用いる場合、この部分の誤差を考慮する必要が生じる。

3.3 正四面体格子座標系の特徴

上述した点を考慮して、本研究で提案する正四面体格子座標系では、安定構造である正四面体を連続配置しつつ、一定の規則に従って形成される基本格子を用いて直交座標系とほぼ同等の空間利用を実現している。このとき、格子点に配置する各ノードの実座標は格子座標を用いて決定す

るので、任意形状の構築が容易である。この座標系の格子点に配置されるノードは基本的に直交座標に等価で、かつ最密であり、ノードを接続する要素は格子点を接続する各格子と一致する。

実際に、1つのノードに隣接するノードの数は12であり、直交座標系と比較して演算精度を維持しつつ、演算量を減少することが可能であるが、その一方で、Y, Z基本格子は格子点ごとに進行方向が変化する折れ線であるので、直交座標系の軸に対応しないXY, YZ, ZX基本格子およびこれと平行な格子に配置する要素は、直線で定義される座標軸で定義される座標系と異なり、座標の単純増加で順次特定することができない。しかしながら、その始点のY, Zの格子座標の値により特定可能な一定の法則性が確認されているので、演算プログラムに組み込んで、自動的に決定することが可能である。したがって、この座標系を利用した数理シミュレーションの実現は容易である。

4. おわりに

本研究では、ノードモデルを扱う様々な数理シミュレーションに応用可能な正四面体格子座標系を提案した。この座標系は形状の指定が容易な直交座標系と安定構造である斜交座標系の利点を併せもつので、物体の形状を再現しつつ数理モデルを配置して行う数理シミュレーションの目的に適した格子座標系である。また、隣接するノード数が必要最小限であるので、相互作用を計算するための演算量は減少し、最密かつ等価なノード配置は状態変化の連続的な分布状態を実時間で可視化するのに適している。

本方法は、有限要素法と比較して形状再現が厳密ではないが、均等に配置したノードにより、様々な数理モデルに適用が可能であり、連続的な状態分布の可視化が可能である。すなわち、諸々の数理シミュレーションを行うためのプラットフォームとして利用できる利点を兼ね備えているので、バランスの取れた有効的な手法になり得る。

参考文献

- 1) 館暉, 佐藤誠, 廣瀬通孝: バーチャルリアリティ学, コロナ社, (2010)
- 2) 半谷裕彦, 川口健一: 形態解析 一般逆行列とその応用, 培風館, (1991)
- 3) 本間達, 若松秀俊: 仮想物体を変形・破壊する力覚表示システムの研究, 計測と制御, Vol.51, No.10, pp.968-982(2012)
- 4) Wakamatsu, H. and Honma, S.: Construction and Manipulation of Virtual Continuum Object Using Visco-Elasto-Plastic Tetrahedron Elements for Haptic System, International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, Vol.5-4, pp.738-746 (2011)
- 5) 若松秀俊, 本間達: バーチャルリアリティにおける力覚表示とその応用, 共立出版株式会社, (2011)
- 6) 本間達, 高木豊, 若松秀俊: 脳冷却効果を検討可能な脳内温度分布の可視化モデル, 電気学会論文誌, Vol.133-C, No.2, pp.303-310 (2013)