

jh180028-NAJ

非局所弾性理論に基づく格子欠陥力学場のアイソジオメトリック解析

垂水 竜一 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)

概要 本研究課題では、非局所弾性理論に基づくアイソジオメトリック解析 (IGA : IsoGeometric Analysis) を用いることによって、格子欠陥力学場を解析するための新しい数値計算方法の開発を目的としている。研究の初年度となる 2018 年度は、(i)これまで Mathematica を用いて進めてきた IGA プログラムの大型計算機 (OCTOPUS) への移植、および、(ii)大容量主記憶ノードを用いた大自由度系 (2,000 万自由度) の解析、という二つの研究目標を設定したが、これらは何れも研究期間内に達成することができた。そこで、新しい研究目標として大規模 IGA を実現するための並列計算方法の開発を進めた。具体的には、剛性行列の部分行列への分割を用いた restricted additive Schwarz (RAS)法の検証、および物理領域分割を用いた 1 レベル、および 2 レベル Overlapped Additive Schwarz (OAS)法の検証を行った。重調和方程式に対するテスト計算では、IGA への 2 レベル OAS 法の適用は極めて良好であり、大規模並列計算へ向けた足掛かりを固めることができた。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

- 大阪大学サイバーメディアセンター
- 名古屋大学情報基盤センター

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

- 垂水 竜一 (大阪大学基礎工学研究科)
研究方針の策定、および研究課題の統括
- 荻野 正雄 (名古屋大学情報基盤センター)
IGA の大規模並列計算方法の開発
- 鈴木 厚 (大阪大学サイバーメディアセンター)
IGA の大規模並列計算方法の開発
- 小林 舜典 (大阪大学工学研究科)
IGA の大規模並列計算の実装、ならびに計算結果の検証
- 堀川 由人 (大阪大学工学研究科)
IGA の大規模並列計算の実装、計算結果の検証

2. 研究の目的と意義

固体材料が示す力学的な性質の多くは、その内

部に存在する転位等の格子欠陥に支配されている。そのため、材料内部における格子欠陥の振る舞いを正確に理解・予測することは、材料力学研究において最も重要な研究課題の一つである。この問題に対して、これまで第一原理計算や分子動力学計算を用いた計算機シミュレーションが精力的に進められてきた。これらの方法を用いれば、格子欠陥の振る舞いを原子レベルの高い空間分解で解析することができるが、そうして得られた結果をマクロな力学特性と結び付けることは必ずしも容易ではない。一方、有限要素法に基づいた結晶塑性解析を用いれば、マクロな視点から材料力学解析を進めることができる。しかしながら、この方法では転位の集団を粗視化して捉えるため、個々の転位を解析する場合には空間分解能が不足する。このように、材料内部の格子欠陥は結晶格子オーダーの空間スケールを持っているが、個々の格子欠陥の示す力学的な振る舞いを工学的に重要なマクロな力学特性と結び付けるためには、原子レベル解析とマクロな材料力学解析を結び付ける、マルチスケールな立場からの理論・計算方法の開発が不可欠である。このような解析を実現し得る新しい枠組みの一つとして、本研究では非局所弾性理論に基づく大規模 IGA (Isogeometric Analysis) の開発を行う。ここで非局所弾性理論とは、従来

の古典弾性理論（フックの法則）を基盤としながらも、その構成式に取り入れられた非局所項（ひずみ勾配項）を介して結晶の微視的情報が取り入れられており、そのためマルチスケールな材料力学問題を、一つの理論内で統一的に取り扱うことができる。また、この方法が解析対象とする空間スケールは、既存の解析方法（第一原理・分子動力学計算と結晶塑性有限要素解析）の中間に位置していることから、広範な時・空間スケールにおける固体力学の現象の解析が期待される。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

研究代表者のグループでは、これまで格子欠陥力学研究をマクロな視点から行うための基礎研究を進めており、そのための基本理論として、従来の古典弾性理論を一般化した非局所弾性理論の構築、およびその数値解析時の基盤となる IGA のプログラミングを進めてきた。ここで IGA とは、NURBS (NonUniform Rational B-Spline) を基底関数としたガラーキン法に基づく弱形式解析の一種である。IGA の計算コストは従来の有限要素法 (FEM) と同等以上となることから、IGA を用いて高精度な三次元解析を行うためには、大型並列計算機の利用が不可欠である。しかしながら、研究代表者のグループではこれまで大型計算機を用いた研究経験がなく、これに必要な専門知識をゼロから獲得するためには、時間的・人的・経済的に膨大な研究資源が必要となる。

この問題に対して、本プログラムの共同研究拠点には FEM に精通した計算機科学・応用数学の専門家が多数存在することから、これらの専門家との共同研究を行うことで、高度な専門知識をごく短期間で獲得することが期待される。加えて、採択課題には計算機資源の利用枠も与えられることから、大型計算機の使用に関する経済的コストの問題も解決される。これらの理由から、本研究を JHPCN 共同研究として実施することは、研究の円滑な推進という意味で極めて重要な学術的意義を有している。実際、本報告書内で後述するように、共同研究開始から半年が経過した現時点において

既に大きな研究の推進が実現されている。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

本共同研究は今年度より開始されたため、前年度までに得られた研究成果はない。

5. 今年度の研究成果の詳細

(1) 格子欠陥力学場の大規模数値解析

当初の研究計画としては、これまで Mathematica を用いて進めていた IGA 解析 (10 万自由度規模の小規模解析) を大型計算機上へ移植するとともに、100 万自由度規模の問題は直接法を用いて、また 1,000 万自由度規模の問題は反復法を用いて、それぞれ大型計算機上で数値計算を行い、格子欠陥周辺の応力場を決定することを研究目標とした。今年度のこれまでの共同研究の結果、これらの研究課題は何れも予定通り達成することができた。数値計算の一例として、OCTOPUS を用いて行った 2,000 万自由度規模の IGA 解析結果を Fig. 1 に示す。この解析では、弾性体内部に符号の異なる 6 本の刃状転位対を対向で配置させており (Fig. 1(a))、その際に生じる応力場 (Fig. 1(b)) と、規格化された変位場 (Fig. 1(c)) を表している。このような特徴的な転位配置はキンク変形を生み出すと考えられてきたが、複数本の転位の作る力学場の解析には高解像な三次元計算が必須であることから、これまで境界値問題を解くことで実際の変形解析が行われることはなかった。解析の結果、Fig. 1(a) のように配置させた刃状転位対は実際にキンク変形を誘導しており、キンク界面部では応力場の局在化が生じていることが確認できる。また、Fig. 1(c)に見られるように二つのキンク界面に挟まれたキンク帯内部では渦状の回転変形が観察され、従来キンク変形解析に用いられてきた回位によるモデリングの有効性を確認することができた。

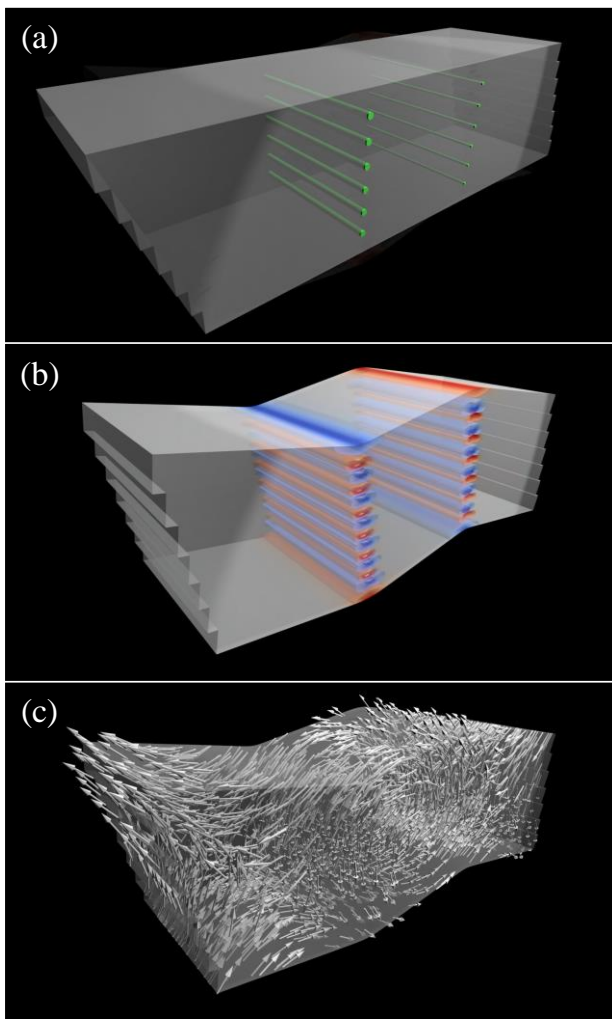


Fig. 1: 三次元弾性体内に刃状転位対を導入して得られたキंक変形計算結果の一例.

(2) 行列分割を用いた大規模並列計算

これまで進めてきた IGA 解析の大型計算機への移植は当初計画通りに完了し、また 2,000 万を超える大自由度系の問題も解くことができたため、残りの研究期間は当初計画の自然な発展である IGA の大規模並列計算に関する基礎研究を行うこととした。Fig. 1 に示した大自由度系の問題は、OCTOPUS の大容量記憶ノードを用いて計算を行っている。このノードを用いると、2,000 万自由度の IGA 計算は実行することができるが、将来はこれ以上の自由度を有する大規模問題や、複雑な非線形問題の解析が必要となることから、早めに MPI を用いた IGA の大規模並列計算に関する基礎研究を進めておく必要がある。

IGA を用いた非局所弾性体の数値解析は、疎行

列によって表された連立一次方程式の解析問題に帰着するが、この問題は直接法、もしくは反復法を用いることで数値的に解くことができる。ここで直接法とは、行列の LU 分解に基づく数値解析法の一つである。直説法の計算量は疎行列の条件数には依存せず、非零の要素数に依存することが知られている（具体例として、2 次要素(P2)を用いて弾性体の問題を FEM 解析する場合、その計算量は自由度 N に対して $O(N^{2.5})$ となる）。本共同研究が解析対象とする非局所弾性体は、応力の平衡方程式（強形式）に 4 階微分項を含んでおり、また剛性行列の生成には NURBUS 基底を用いている。そのため、P2 要素を用いた古典弾性体の FEM 解析と比べて疎行列の条件数が悪化しており、また条件数の解析自由度依存性が増えている可能性があることから、反復法よりも直接法を用いた解法が優位であると考えられる。

直接法を用いた解析対象としては、立方体領域を持つ非局所弾性体を考え、IGA 基底の数を x -, y -, z -方向に均等に 60^3 , 70^3 , 80^3 と取った。この問題を、192 GB のメモリーを持つ Intel Xeon CPU (12 コア) を用いて計算した結果を表 1 に示す。ここで、直接法ソルバーは Intel Pardiso と Dissection を用いている。問題の自由度は、803 の場合で 153.6 万である。この問題は、Intel Pardiso では 180 GB のメモリーを割り当てたキューで実行することができたが、Dissection ではメモリーオーバーが発生した。P2 要素を用いて 100 万自由度の問題を FEM 解析する場合には 60 GB 程度のメモリーが必要であるが、ここで解析対象とする 2 次の NURBS 基底による IGA は、基底関数の台の広がりから疎行列 1 行あたりの非零数が大きく、P2 要素よりもメモリーの消費量が多いことが明らかとなった。

Table 1: IGA 基底の数の増加に対する直接法の計算時間.

IGA bases	60 ³	70 ³	80 ³
DOF	648,000	1,029,000	1,536,000
nnz	84,469,864	135,952,944	204,987,024
Intel Pardiso	251.41	671.25	1,411.2
Dissection	130.39	412.31	—
	time(sec.)		

表 1 から明らかなように、1,000 万自由度を超える大規模な IGA 問題を、通常のクラスターシステム下の直接法で解析することは極めて困難である。そこで、反復法の一つである GMRES 法を用いた前処理として restricted additive Schwarz (RAS)法を構成し、個々の部分問題の解を直接法で求める方法を検討した。ここで RAS 法とは、全体行列を重なりのある部分行列に分割し、得られた部分問題の解を、行列の重なり具合を表現する離散的な単位の分割による重みを考慮して和をとる演算である。部分問題の構成にあたっては、疎行列の非零要素をグラフと見做し、グラフ分割ソフト METIS を用いてこれを行った。METIS を用いたグラフ分割では互いに重なりのない部分行列が得られるが、各部分行列にそのエンタリーに繋がる添字を含めることによって、一層分の拡張を施した重なりのある部分行列が得られる。この行列分割において重なりのある境界に着目すると、左右一層の拡張 ($\ell=1$)から 3 つの自由度の重なり ($d=3$)をもつ部分行列が構成されることになる。表 2 に一層の拡張を行なった場合 ($\ell=1, d=3$)、および三層の拡張を行なった場合 ($\ell=3, d=7$)の 1-レベル RAS 法前処理による GMRES 反復計算の結果を示す。部分問題の直接法による解析には Intel Pardiso を使用した。この結果から明らかなように、部分行列の重なりを大きくすると GMRES 法の収束は 40 %程度改善されるが、全体の計算時間は 2 倍程度必要となることが分かる。これは重なりによって部分行列の自由度が増大し、その LU 分解を行う際に直接法にかかる計算コストが増えたことが原因と考えられる。また、重なりを大きくすると演算量メモリー量ともに増えており、特に 80³ で 64 部分行列の場合はメモリーオーバーが発生した。

Table 2: 1-レベル RAS 法前処理の部分行列数と重なり幅に対する GMRES 法の反復回数と計算時間。GMRES の残差収束判定は 10^{-9} に設定。

IGA bases	60 ³		70 ³		80 ³	
DOF	648,000		1,029,000		1,536,000	
nnz	84,469,864		135,952,944		204,987,024	
$\ell=1, d=3$						
8	43	148.69	47	265.01	51	566.81
16	50	136.00	57	236.63	59	478.33
24	54	144.33	60	236.63	63	449.04
32	57	138.05	63	238.31	66	434.88
48	61	152.49	68	249.83	73	438.41
64	63	154.49	70	238.90	75	433.69
$\ell=3, d=7$						
8	28	270.03	30	421.53	32	919.68
16	33	282.45	36	431.11	37	934.83
24	36	318.02	40	523.83	41	991.74
32	39	318.02	41	508.67	42	957.97
48	42	388.67	45	567.05	49	1,418.0
64	45	423.87	49	588.11	—	—
	#itr time(sec.)					

(3)物理領域分割を用いた並列計算

前節で述べたように、行列分割を基本とした 1-レベル RAS 法では、部分行列の分割数の増加とともに全体の GMRES 解法の反復回数が増加する傾向にある。また、部分行列の重なりを増やすと収束は加速されるが、部分行列の分割数依存性は改善されないという問題がある。そこで、粗空間での行列の近似を追加する 2-レベル法を導入し、収束性の改善を図ることにした。古典弾性体の FEM 解析における 2-レベル法では、弾性体の零エネルギーモード（剛体運動の自由度）を部分領域から集めることで構成されている。この際、部分行列への分割は行列のグラフ分割ではなく、物理領域の領域分割に基づいて行われる。IGA 解析で 2-レベル法を導入するためには、物理領域の分割による NURBUS 基底の分割を行うとともに、適切な疎空間を設定する必要がある。

Cho-Pavarino-Scacchi 等によって 2018 年に報告されている既存の研究を参考にして、ここでは非局所弾性体と同じ 4 階微分項を持つ 1 次元重調和方程式を解析対象とし、これを以下に示す二つの方法で物理領域分割に基づく数値計算を進めた。

- 1 - level Overlapped Additive Schwarz 法 (1-レベル OAS 法)
- 2-level Overlapped Additive Schwarz 法

(2-レベル OAS 法)

ここで 1-レベル OAS 法は、分割された物理領域ごとに対応する NURBS 基底を用いて 剛性行列(疎行列)を計算し、得られた結果を足し合わせることで前処理行列とする方法である。行列分割における additive Schwarz 法は離散的な単位の分割を陽に導入していることから、restricted AS 法と呼ばれる。これに対して部分領域の NURBS 基底の選択では単位の分割は自然に組み込まれていることから、overlapped AS 法と呼ぶことにする。2-レベル OAS 法は 1-レベル OAS 法に粗空間の情報を加えて前処理行列とする方法である。ここで粗空間とは、基底関数の数を削減して作成された領域全体の剛性行列を指している。

これら二つの方法を用いて次式で表される 1 次元重調和方程式

$$\Delta \Delta u = \cos 2\pi x \tag{1}$$

を数値解析した結果を Fig. 2 に示す。ここで、NURBS 基底関数の次数は 3 次、基底関数の数は 1,000、領域分割数は 10 とし、Overlap Index はゼロとしている。また、参考のために対角スケールリングを前処理行列として用いた結果を合わせて示している。この結果を見ると、対角スケールリングを用いた計算では 800 回の反復回数で解は収束していないのに対して、1-レベル OAS 法では 300 回程度の反復で解の収束が認められる。これに対して、2-レベル OAS 法では 30 回程度の反復計算で解が収束している様子が確認できる。

次に、同様の計算を領域分割数 D を変更 (D=2,4,8,16) した際に得られた結果を Fig. 3 に示す。この結果を見ると、分割する部分領域数の増加に伴って 1-レベル OAS 法の収束性が低下しているのに対して、2-レベル OAS 法では収束に必要な反復回数に変化が見られていない。同様の傾向は、二次元系に対する重調和方程式の解析結果からも確認している。これらの結果は、NURBS を用いた IGA による 4 階微分方程式の解析では、2-レベル OAS 法による領域分割が極めて有効であることを示している。

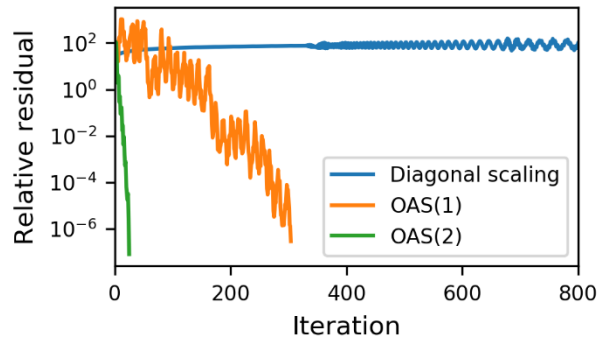


Fig. 2: 1-レベル OAS 法, 2-レベル OAS 法, および対角スケールリング法を前処理として使用した際に得られた反復回数と残差の関係。

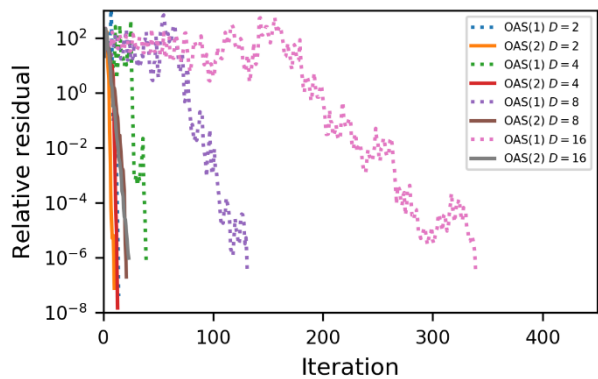


Fig. 3: 1-レベル OAS 法, 2-レベル OAS 法, および対角スケールリング法を前処理として使用した際に得られた反復回数と残差の関係。凡例中の D は領域分割数を表している。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

本共同研究の開始時点において、研究代表者らのグループで行っていた IGA 計算は最大でも 10 万自由度程度であった。そのため、当初研究計画では Mathematica のプログラミングを大型計算機へ移植するとともに、最大で 1,000 万自由度規模の問題解析を行うことを研究目標として設定したところが、本共同研究は当初の予想を超えて順調に進行し、研究期間内で当初の目標はほぼクリアすることができた。そのため、従来研究の自然な発展として IGA に適した大規模並列計算方法の開発を進めることにした。その結果、2-レベル OAS 法が IGA の並列計算を行う上で極めて有望であることが明らかとなった。次年度 (2019 年度) は、本研究の継続課題が採択されていることから、引

き続き IGA の大規模並列計算方法の開発, およびこれを用いた格子欠陥力学場解析を進めていく予定である.

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

該当なし

(2) 国際会議プロシーディングス

該当なし

(3) 国際会議発表

- ① R.Tarumi, S.Kobayashi, A.Suzuki and M.Ogino, "Isogeometric Analysis for Long-time Diffusion of Solute Atoms around Lattice Defects", International symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity (APCP2018), Oct. 25th to 27th, 2018, Tokyo, Japan.
- ② S.Kobayashi, R.Tarumi, A.Suzuki and M.Ogino, "Isogeometric modeling and large-scale computation for stress field around lattice defects", The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018), Oct. 28th to Nov. 2nd, 2018, Osaka, Japan.
- ③ S.Kobayashi and R.Tarumi, "Extended Isogeometric Analysis for Two-dimensional Kink Deformations", The 4th International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Mille-feuille Structure (LPSO2018), Dec. 3th to 5th, 2018, Kumamoto, Japan.
- ④ Ryuichi Tarumi, "Dislocation-based Modeling and Isogeometric Analysis for Kink Deformation", Russia-Japan International Seminar on Advanced Materials (RJISAM-IV, December 6th, 2018, Kumamoto University, Japan), Invited.

(4) 国内会議発表

- ① 垂水竜一, "非局所弾性体の数理とその格子欠陥力学解析への応用", 第 28 回格子欠陥フォーラム (2018 年 9 月 7 日 大阪大学 吹田キャンパス).
- ② 垂水竜一, "非局所弾性体の数理とその格子欠

陥力学解析への応用", 第 28 回格子欠陥フォーラム (2018 年 9 月 7 日 大阪大学 吹田キャンパス).

- ③ 垂水竜一, "連続体力学に基づくキंक変形・強化機構の解析", 日本金属学会 2018 年秋期講演大会 (2018 年 9 月 20 日 東北大学 川内キャンパス) (基調講演).
 - ④ 垂水竜一, "ミルフィーユ構造物質に生じるキंक変形の弾性論的解析", 明治大学 CMMA colloquium (2018 年 10 月 2 日 明治大学 中野キャンパス).
 - ⑤ 小林舜典, 垂水竜一, 鈴木厚, 荻野正雄, "刃状転位対を用いたキंक変形モデルのアイソジオメトリック解析", 日本機械学会第 31 回計算力学講演会 (2018 年 11 月 24 日 徳島大学 常三島キャンパス).
 - ⑥ 垂水竜一, "連続体力学に基づく格子欠陥力学場の表現と解析", 日本材料学会塑性工学部門委員会 (2019 年 3 月 1 日 キャンパスプラザ 京都) (依頼講演).
 - ⑦ 山田翔, 小林舜典, 鈴木厚, 垂水竜一, "Overlapped Additive Schwartz 法を用いたアイソジオメトリック解析の並列計算", 日本機械学会 関西学生会学生員卒業研究発表講演会 (2019 年 3 月 10 日 立命館大学) (Best Presentation Award 受賞).
 - ⑧ 矢野和也, 小林舜典, 垂水竜一, "刃状転位対の準静的運動に対する拡張アイソジオメトリック解析", 日本機械学会 関西学生会学生員卒業研究発表講演会 (2019 年 3 月 10 日 立命館大学).
 - ⑨ 小林舜典, 堀川由人, 垂水竜一, "微分幾何学的に定式化された格子欠陥へのアイソジオメトリック解析", 日本物理学会 第 74 回年次大会 (2019 年 3 月 17 日 九州大学).
- (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)
該当なし