

# グラフ構造で一般化された動的負荷分散フレームワーク の構築と重合メッシュ法への適用

森田 直樹 (筑波大学)

## 概要

重合メッシュ法は、シミュレーション領域全体を表現する粗いグローバルメッシュと、注目領域を表現するローカルメッシュを重ね合わせ、局所的な高精度化を実現する方法である。解析対象全体の形状や関心領域で生じる現象を詳細に解像する場合、重合メッシュ法を利用してもなお計算コストが大きくなる。重合メッシュ法の場合、ローカル・グローバルメッシュ間の相互作用に関する計算コストが高いため、1 節点あたりの計算時間が同一と仮定した従来の領域分割法では計算コストが均一にならず、高い並列計算性能を実現できないことが問題となる。この解決のため、高い並列計算性能を実現する動的負荷分散フレームワークを構築し、実用に供する重合メッシュシミュレータの実現を目指す。初年度である 2021 年度は、静的負荷分散フレームワークの構築および重合メッシュシミュレータの開発を実施し、東京大学 Oakbridge-CX により並列計算性能を評価した。

## 1 共同研究に関する情報

### 1.1 共同研究を実施した拠点名

東京大学 (Oakbridge-CX)

### 1.2 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

### 1.3 参加研究者の役割分担

- 森田 直樹 (筑波大学システム情報系、代表) : 全体統括、動的負荷分散フレームワークの開発
- 三目 直登 (筑波大学システム情報系、副代表) : 計算力学・数値解析手法、フレームワーク開発方針策定
- 田中 克治 (筑波大学大学院システム情報工学研究科) : 計算力学・数値解析手法に関する検討
- 橋本 拓弥 (筑波大学大学院理工情報生命学術院) : 計算力学・数値解析手法に関する検討
- 柴沼 一樹 (東京大学大学院工学系研究科) : 亀裂伝播シミュレーションへの展開
- 松田 哲也 (筑波大学システム情報系) : マルチ

スケールシミュレーションへの展開

- 吉川 暢宏 (東京大学生産技術研究所) : マルチスケールシミュレーションへの展開
- 奥田 洋司 (東京大学大学院新領域創成科学研究科) : 動的負荷分散フレームワークの開発

## 2 研究の目的と意義

シミュレーション領域全体の挙動を表現する粗いグローバルメッシュと、注目領域の詳細挙動を表現するローカルメッシュを重ね合わせ、有限要素法の枠組みで局所的な高精度化を実現する「重合メッシュ法」は、図 1 に示す高速亀裂伝播シミュレーションなど、微小な領域で生じる作用が領域全体へ支配的な影響を与える現象のシミュレーションに利用される。重合メッシュ法は局所的に解を高精度化することで計算自由度を削減できるものの、解析対象全体の形

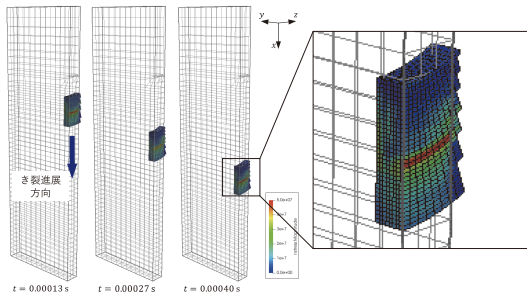


図1 アクリル試験体を用いた高速亀裂伝播試験の重合メッシュシミュレーション。亀裂周辺を詳細に解像するローカルメッシュが、亀裂進展に合わせて移動する。

状や関心領域で生じる現象を詳細に解像する場合、両者のメッシュ解像度が增大し、重合メッシュ法を利用してはなお計算コストが大きくなる。このような問題では実用的な観点から、重合メッシュ法の並列化が重要となる。

標準的な有限要素法では、並列化手法のひとつとして、メッシュ構造を利用した領域分割法が利用される。重合メッシュ法に領域分割法を適用する場合、ローカル・グローバルメッシュ間の相互作用に関する計算コストが高いため、1 節点あたりの計算時間が同一と仮定した従来の領域分割法では計算コストが均一にならず、高い並列計算性能を実現できないことが問題となる。また亀裂伝播シミュレーションの例では、亀裂の進展に伴ってローカルメッシュが移動するため、時間方向へ計算が進むごとにローカルメッシュとグローバルメッシュの内包関係が変化する。これが原因となって、分割領域ごとの計算コストが刻々と不均一に変化し、計算性能が著しく低下する。

以上の状況から、実用に供する重合メッシュシミュレータの実現のため、その並列計算性能の向上が必須となる。そこで有限要素メッシュの情報だけでは最適に分割できない重合メッシュ法に対し、ローカルメッシュとグローバル

メッシュ間の相互作用に関する計算コストをグラフ情報に変換・一般化させ、グラフのノード重みとエッジ重みを適切に設定することで、統一的な負荷分散機能の実現を目指す。最終的に、グラフ構造で一般化されたデータ分割・データマネジメント機能を有する動的負荷分散フレームワークと、このフレームワークを用いた重合メッシュシミュレータを開発する。

2021 年度は、1 節点あたりの計算時間が同一と仮定した従来の領域分割法では計算コストが均一にならない問題に対し、以下の 3 つの研究項目、(i) 静的負荷分散フレームワークの構築、(ii) 重合メッシュシミュレータの開発、(iii) 重合メッシュシミュレータの評価および線形ソルバ・反復法前処理の検討を実施した。

本研究成果の適用例のひとつである高速亀裂伝播シミュレーションは、船体などの大型鋼構造体に生じた脆性亀裂を停止させる革新的設計手法の研究に利用する。市場の国際化に伴い増大する物流量に対し、貿易量の 99 % 以上を担う外航海運において、輸送コスト低減を目的として大型化する船舶の構造安全性の検討は、日本経済を支える重要な研究であり意義が大きい。また重合メッシュ法はこれらの検討に有用であるが、その大規模シミュレーションに向けた並列計算対応は、未だなされていないのが現状である。この状況に対し、動的負荷分散が可能な並列重合メッシュシミュレータ開発の意義は大きい。

### 3 当拠点公募型研究として実施した意義

本研究で開発する負荷分散フレームワークと重合メッシュシミュレータは、大規模シミュレーションを想定した研究開発とその性能評価が不可欠である。動的負荷分散時に高い並列計算効率を実現するためには、グラフのノード重

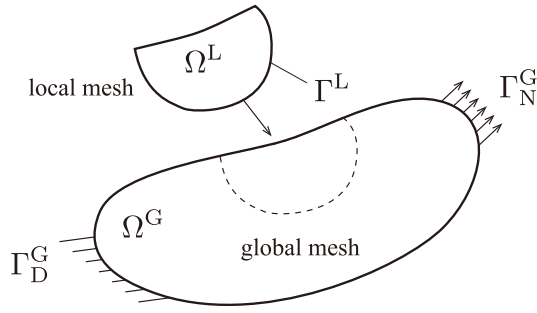


図2 重合メッシュ法の模式図

み・エッジ重みを適切に設定する必要がある。その決定方法は対象となる数値計算手法に深く紐付くため、HPC 分野の研究者と工学、計算力学の高い専門性を有する研究者同士が連携する必要がある。JHPCN の枠組みは本研究の目的を達成するうえで非常に有益であり、この観点から本拠点公募型共同研究として実施した。

#### 4 前年度までに得られた研究成果の概要

該当なし

#### 5 今年度の研究成果の詳細

##### 5.1 重合メッシュシミュレータの開発

2021 年度の研究項目 (ii) として、研究基盤として利用する重合メッシュシミュレータを開発した。本研究では、重合メッシュ法による構造解析を対象とした。図 2 に、重合メッシュ法の模式図を示す。解析領域は、解析対象の全体領域  $\Omega^G$  を粗く解像するグローバルメッシュと、関心領域  $\Omega^L$  を詳細に解像するローカルメッシュを重ね合わせで定義される。ここで、境界  $\Gamma_D^G$  は全体領域のうち Dirichlet 境界条件が定義される境界、境界  $\Gamma_N^G$  は全体領域のうち Neumann 境界条件が定義される境界、境界  $\Gamma^L$  は関心領域の境界である。

領域  $\Omega^L$  では、式 (1) のように、変位  $\mathbf{u}$  を

グローバルメッシュにおける変位  $\mathbf{u}^G$  とローカルメッシュにおける変位  $\mathbf{u}^L$  の和で表す。

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^G + \mathbf{u}^L \quad (1)$$

ただし、この条件のみでは  $\mathbf{u}$  を表す  $\mathbf{u}^G$  と  $\mathbf{u}^L$  の一意性がないため、境界  $\Gamma^L$  において式 (2) の条件を付与する。

$$\mathbf{u}^L = \mathbf{0} \text{ on } \Gamma^L \quad (2)$$

この条件のもと、通常の有限要素法と同様に離散化すると、構造解析において解くべき連立一次方程式 (3) が得られる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}^G & \mathbf{K}^{GL} \\ \mathbf{K}^{LG} & \mathbf{K}^L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}^G \\ \mathbf{u}^L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}^G \\ \mathbf{f}^L \end{Bmatrix} \quad (3)$$

ここで、 $\mathbf{K}$  は剛性マトリックス、 $\mathbf{u}$  は変位ベクトル、 $\mathbf{f}$  は外力ベクトルであり、上付き添え字 G はグローバルメッシュに関する変数、上付き添え字 L はローカルメッシュに関する変数、上付き添え字 GL、LG はグローバルメッシュとローカルメッシュの連成項に関する変数であることを示す。

式 (3) における  $\mathbf{K}^{GL}$  は式 (4) のように表される。

$$\mathbf{K}^{GL} = \int_{\Omega^L} \mathbf{B}^{GT} \mathbf{D} \mathbf{B}^L d\Omega^L (= \mathbf{K}^{LG^T}) \quad (4)$$

ここで、 $\mathbf{D}$  は応力 - ひずみ関係行列、 $\mathbf{B}$  はひずみ - 変位関係行列、 $\Omega$  は解析領域である。また、上付き添え字 T は行列の転置を示す。

式 (4) の被積分関数のうち、 $\mathbf{B}^{GL}$  は領域  $\Omega^L$  中で連続であるが、 $\mathbf{B}^G$  は領域  $\Omega^L$  中のグローバルメッシュにおける要素境界で不連続となる。このような関数を数値積分する場合、被積分関数の不連続性を精度良く取り扱う必要がある。本研究では、グローバルメッシュに跨るローカルメッシュの積分領域を再帰的に細分化して数値積分を行う。ここで、要素の再帰的細

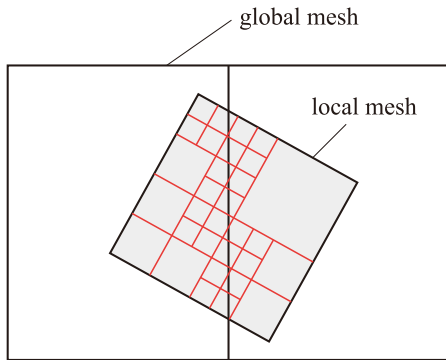


図3 ローカルメッシュにおける積分領域細分化の例 ( $n_{rec} = 3$ )

分化回数を制御するパラメータを  $n_{rec}$  とおいた。あるローカルメッシュについて、グローバルメッシュの境界が存在する場合、 $n_{rec}$  で定めた回数まで繰り返し細分化を行う。図3では  $n_{rec} = 3$  となる。

## 5.2 静的負荷分散フレームワークの構築および重合メッシュ法への適用

2021年度の研究項目(i)として、静的負荷分散フレームワークを構築し、重合メッシュシミュレータに適用した。重合メッシュ法では、ローカルメッシュとグローバルメッシュ間の相互作用に関する部分で、両メッシュの補間関数を用いて係数行列の値を定めるため、単純なメッシュ情報だけでは領域分割法が適用できない。そこでローカルメッシュとグローバルメッシュ間の相互作用をグラフ情報に変換・一般化させることで、多様な数値計算手法に適用可能な一般性を付与した。さらに、グラフのノード重みとエッジ重みを適切に設定することで、統一的な負荷分散機能を実装した。

標準的な領域分割は一般に、各分割領域に属する節点数・要素数が等しくなる制約条件を付与してデータ分割する。この分割により分割領域ごとの計算量が均一になることで高い並列計算効率を実現できる。一方、重合メッシュ法で

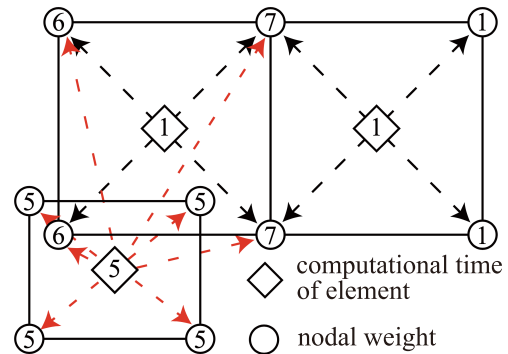


図4 計算時間を利用した節点重みの付与の例

はグローバル・ローカルメッシュの相互作用に要する計算量の影響で各分割領域での計算コストが均一にならず、節点ごとの計算量を均一と仮定した従来の領域分割法を適用しても、高い並列計算性能を発揮できない。そこであらかじめ計算量を予測し、領域分割時の重みとして考慮することで、計算負荷の均一化を目指す。

本研究では領域分割時の重みの決定方法として、実際にかかる計算時間を利用する手法を用いる。具体的には、要素剛性行列の計算に要した時間を節点重みとして付与する(図4)。このように設定された重みの合計が各分割領域で均一となるように領域分割を行うことにより、並列重合メッシュ法の負荷分散を図る。本研究は将来的に動的な亀裂進展解析への適用を計画しているが、その基礎的検討として静的負荷分散を対象とし、重みを決定するための計算は従来のSFEMで行った。以降、従来のSFEMを従来型SFEM、重みの最適化を行うSFEMを改良型SFEMと呼称する。

## 5.3 数値例による評価

2021年度の研究項目(iii)として、重合メッシュシミュレータの評価および線形ソルバ・反復法前処理の検討を行った。ここでは並列計算性能の観点から反復法を利用することとし、さらに領域分割数に依存しない反復法前処理とし

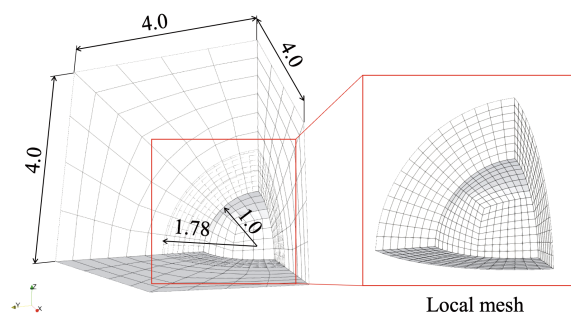


図5 3次元球孔物体の解析モデル

て対角スケーリング前処理を用いた。

図5に示す3次元球孔問題の1/8モデルを対象とした弾性解析を対象として、並列計算性能評価を行う。ここで、計算モデルは、節点数1,973,322、要素数1,920,000である。材料定数は、ヤング率  $E = 100,000$  MPa、ポアソン比  $\nu = 0.3$  とした。境界条件として、対称面の法線方向変位を固定し、物体外部表面に変位の理論解を付与する。本研究では、並列計算機として東京大学のOakbridge-CXを利用した。また、計算できる最小の並列数による計算結果から重みを取得した。

従来型・改良型SFEMにおける計算時間を表1、表2に示す。また、加速率を図6、図7、図8に示す。ここで、matrix gen. は剛性行列生成時間、solver は行列求解時間、total はこれらの合計時間を示す。Time reduction ratio は、従来型SFEMに対する改良型SFEMでの時間削減率である。

従来型SFEMについて、表1より、 $n_{rec} = 4$ では行列生成が全体の90%以上を占め、 $n_{rec} = 5$ においては99%以上を占めていることが分かる。このことから、SFEMはグローバルメッシュとローカルメッシュの相互作用項における数値積分の影響から、 $n_{rec}$ の値が大きくなるほど全体の計算時間に対する剛性行列生成時間の割合が大きくなることが確かめられた。

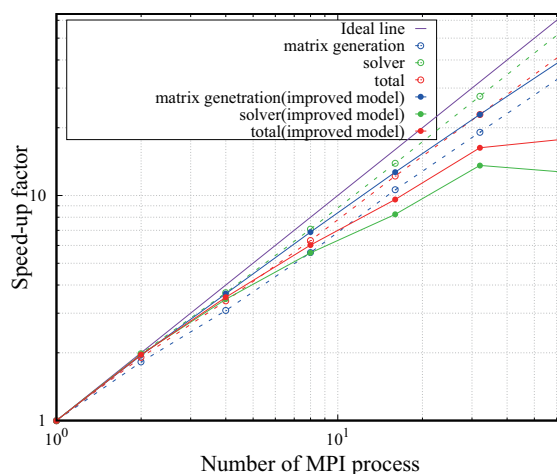


図6 SFEMにおける加速率 ( $n_{rec} = 3$ )

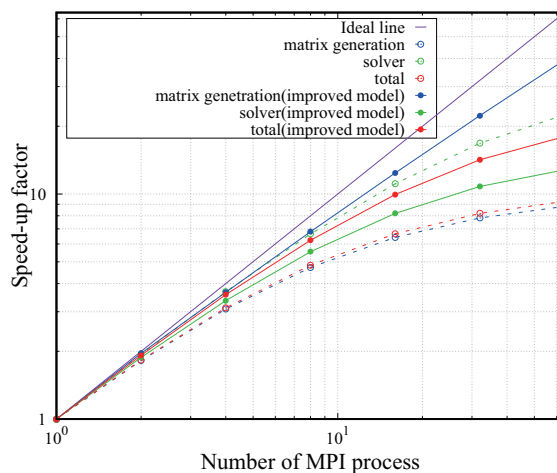


図7 SFEMにおける加速率 ( $n_{rec} = 4$ )

改良型SFEMの結果について、表1、表2より、行列生成の部分では各条件で13%から19%の時間削減が見られた。特に  $n_{rec} = 5$ では、全計算時間を約16%削減できた。図6、図7、図8からも同様に行列生成の部分ではどの条件においても加速率の向上が見られる。これらより、改良型SFEMは  $n_{rec}$ の値が高いほど合計時間の性能向上が実現できた。実問題においては、詳細な応力評価のために  $n_{rec}$ の値を大きく設定することが想定され、その場合においては提案手法が有効であると考えられる。

表 1 従来型 SFEM の計算時間測定結果

$n_{rec}$		3	4	5
Number of MPI process		64	64	256
Computation time [s]	matrix gen.	377	4,814	34,730
	solver	322	288	80
	total	714	5,116	34,820
Percentage of total time [%]	matrix gen.	52.8	94.1	99.7
	solver	45.2	5.6	0.2

表 2 改良型 SFEM の計算時間測定結果

$n_{rec}$		3	4	5
Number of MPI process		64	64	256
Computation time [s]	matrix gen.	327	4,211	28,020
	solver	1,454	1,311	1,145
	total	1,795	5,536	29,180
Percentage of total time [%]	matrix gen.	18.2	76.1	96.0
	solver	81.0	23.7	3.9
Time reduction ratio [%]	matrix gen.	13.2	12.5	19.3
	solver	-351	-355	-1327
	total	-152	-8.21	16.2

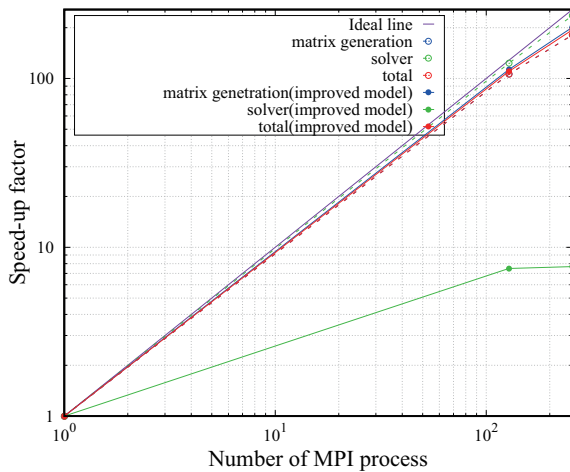


図 8 SFEM における加速率 ( $n_{rec} = 5$ )

## 6 今年度の進捗状況と今後の展望

2021 年度は、重合メッシュ法の静的負荷分散に関して 3 つの研究項目を実施した。テー

マごとに進捗状況および当初目標に対する達成度を示す。

### (i) 静的負荷分散フレームワークの構築

本課題では最終的に、グラフ構造で一般化されたデータ分割・データマネジメント機能を有する動的負荷分散フレームワークの構築を目的に、2021 年度は計算対象をグラフ情報に変換・一般化させ、グラフのノード重みとエッジ重みを適切に設定可能な、静的負荷分散フレームワークを実装した。本フレームワークを利用することで、グローバルメッシュとローカルメッシュの相互作用に関して有限要素メッシュの情報だけでは最適に分割できない重合メッシュ法においても、計算負荷の均一化がなされた並列計算が可能となる。また計算対象をグラフ情報に変換・一般化する点においては、粒子法に代表されるメッシュフリー法など、多様な数値計

算手法への展開を考慮したフレームワーク設計を検討した。研究項目 (i) の進捗状況は計画通りであり、今後は動的負荷分散フレームワークの構築が展望として挙げられる。

#### (ii) 重合メッシュシミュレータの開発

負荷分散フレームワークの適用例のひとつとして、高速亀裂伝播シミュレーションや複合材料の強度評価を想定した重合メッシュシミュレータの開発および領域分割法による並列化を実施した。重合メッシュ法の大規模シミュレーションに向けた並列計算対応は未だなされていないのが現状であり、本研究成果の意義は大きい。また重合メッシュ法について、詳細な検討により、ローカル・グローバルメッシュが重なる領域で、両メッシュの補間関数の不連続性が原因となり、解析精度が低下する問題が明らかになった。現在この問題に対し、エンリッチ関数を節点に付与して局所的に高精度化を図る手順により高精度化を進めている。査読中のため研究業績一覧には記載をしていないが、本研究課題のサポートを受けて開発した重合メッシュシミュレータについて、上記に関する以下2つの論文を投稿しており、研究は十分進捗している。以上より、研究項目 (ii) の進捗状況は計画通りである。

- (a) Kazuki Shibanuma, Kota Kishi, Tianyu He, Naoki Morita, Naoto Mitsum e, Tsutomu Fukui, S-version finite element strategy for accurately evaluating local stress in the vicinity of dynamically propagating crack front in 3D solid, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, submitted.
- (b) Tianyu He, Fumitaka Yasui, Naoto Mitsume, Naoki Morita, Tsutomu Fukui, Kazuki Shibanuma, Internal Neumann

boundary modeling in the s-version finite element method: Problem clarification and solutions verification, Journal: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, submitted.

#### (iii) 重合メッシュシミュレータの評価および線形ソルバ・反復法前処理の検討

静的負荷分散フレームワークを導入した重合メッシュシミュレータの評価および線形ソルバ・反復法前処理の検討を実施した。計算時間の評価では、並列計算性能の観点から反復法を利用することとし、重合メッシュ法の計算負荷の不均一性は数値計算の精度を定めるパラメータで制御した。静的負荷分散フレームワークの有効性を評価するために、領域分割数に依存しない反復法前処理として対角スケーリング前処理を用いて測定を行った。計算負荷の不均一性を变化させた複数のモデルを用いて詳細に評価した結果、追加購入を含む計算トークンを全て使用する結果となった。そのため前処理手法の検討は対角スケーリング前処理の利用に留まったが、基礎的な計算性能測定を十分に実施できた点で研究項目 (iii) の進捗状況はおおむね計画通りである。今後は研究項目 (ii) で今後改良する重合メッシュシミュレータに対する適用可能性評価が展望として挙げられる。

## 7 研究業績一覧（発表予定も含む）

### 学術論文（査読あり）

該当なし

### 国際会議プロシーディングス（査読あり）

該当なし

### 国際会議発表（査読なし）

該当なし

#### 国内会議発表（査読なし）

1. 集路幸正, 三目直登, 柴沼一樹, 森田直樹, 並列重合メッシュ解析の静的負荷分散に関する研究, 第 27 回計算工学講演会, 日本計算工学会, 秋田, 2022 年 5 月.
2. 集路幸正, 三目直登, 柴沼一樹, 森田直樹, 並列重合メッシュ法による静的構造解析の負荷分散手法の検討, 第 66 回理論応用力学講演会, 日本工学会理論応用力学コンソーシアム, OS-1, オンライン, 2022 年 6 月.
3. 田中克治, 森田直樹, 三目直登, オイラー型解法による風上化 LSMPS 法に基づく大規模並列解析, 第 27 回計算工学講演会, 日本計算工学会, 秋田, 2022 年 5 月.
4. 橋本拓弥, 森田直樹, 三目直登, 安定化有限要素法に基づくビンガム流体の領域分割型並列解析, 第 27 回計算工学講演会, 日本計算工学会, 秋田, 2022 年 5 月.

#### 公開したライブラリ等

該当なし

#### その他（特許，プレス発表，著書等）

該当なし