jh220047

グラフ構造で一般化された静的負荷分散フレームワークの高度化とメッシュフリー法への適用

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。2021 年度までの検討により、ローカルメッシュ・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拡張型有限要素法（XFEM）により重合メッシュ法の高精度化を進めている。XFEM で拡張された重合メッシュ法はエンリッチ関数の付与により節点あたりの自由度が異なるため、従来の重合メッシュ法で生じる計算負荷の不均一性に加え、XFEM の影響を考慮した負荷分散が必須となる。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。

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 情報基盤センター

1.2　課題分野

- 大規模計算科学課題分野

1.3　共同研究分野 (HPCI 資源利用課題のみ)

- 超大規模数値計算系応用分野

1.4　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
- **馬込 望**（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
- **姜 博**（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
- **細川 恭太**（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
- **中井 悠太**（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
- **常見 隆幸**（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
- **伊藤 博哉**（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：動的負荷分散フレームワークの開発
- **奈良 学**（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：動的負荷分散フレームワークの開発
- **集路 幸正**（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：動的負荷分散フレームワークの開発
- **村井 拓海**（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：動的負荷分散フレームワークの開発
- **高橋 幸大**（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：動的負荷分散フレームワークの開発

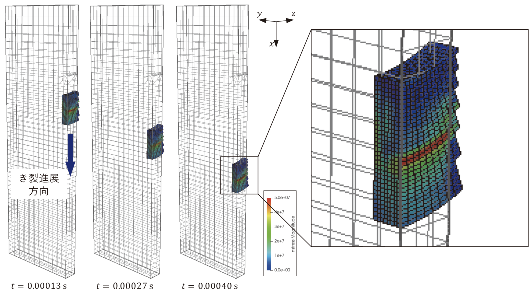

図 1　アクリル試験体を用いた高速亀裂伝播試験の重合メッシュシミュレーション。亀裂周辺を詳細に解像するローカルメッシュが、亀裂進展に合わせて移動する。

- **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、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。重合メッシュ法はローカルメッシュによる局所的な高精度化で計算自由度を削減できる利点があるが、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。

この解決策としてシミュレーションの並列計算がなされる。標準的な有限要素法では、メッシュ構造を利用した領域分割法により、1 要素あたりの計算時間が同一であるという仮定のもと、良好な並列化効率が得られる。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。適用例のひとつである亀裂伝播シミュレーションでは、亀裂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。本研究では最終的に、これらの解決に向けた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の構築と、これを利用した重合メッシュシミュレータの実現を目指す。具体的には、シミュレーション対象を、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することで、数値解析手法に依らない統一的な負荷分散機能を提供する。

2021 年度までの検討により、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拡張型有限要素法（XFEM）により重合メッシュ法の高精度化を進めている。XFEM で拡張された重合メッシュ法はエンリッチ関数の付与により節点あたりの自由度が異なるため、従来の重合メッシュ法で生じる計算負荷の不均一性に加え、XFEM の影響を考慮した負荷分散が必須となる。

また、XFEM はメッシュフリー法のひとつとして知られており、有限要素法の枠組みだけでなく多様な数値解析手法に適用可能である本

フレームワークを利用してこそ、迅速な研究開発が実現可能になる。そこで、フレームワーク設計の妥当性を確認することを目的として、重合メッシュ法だけでなく、メッシュフリー法のひとつである粒子法に適用することで、開発フレームワークの有効性評価を行う。

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。

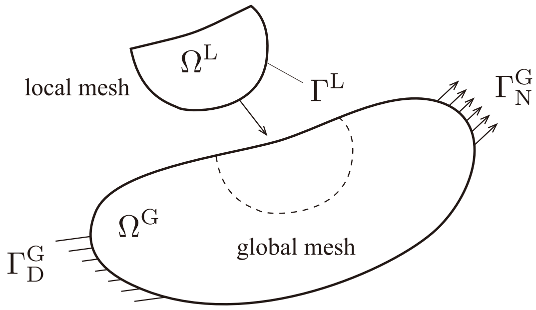

図 2　重合メッシュ法の模式図

4 前年度までに得られた研究成果の概要

4.1 重合メッシュシミュレータの開発

2021 年度の研究成果として、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 Ω_{G} を粗く解像するグローバルメッシュと、関心領域 Ω_{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 $\Gamma_{\mathrm{D}}^{\mathrm{G}}$ は全体領域のうち Dirichlet 境界条件が定義される境界、境界 $\Gamma_{\mathrm{N}}^{\mathrm{G}}$ は全体領域のうち Neumann 境界条件が定義される境界、境界 Γ^{L} は関心領域の境界である。

領域 Ω^{L} では、式 (1) のように、変位 $\boldsymbol{u}$ をグローバルメッシュにおける変位 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{G}}$ とローカルメッシュにおける変位 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{L}}$ の和で表す。

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}^{\mathrm{G}} + \boldsymbol{u}^{\mathrm{L}} \tag{1}$$

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

$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{L}} = \mathbf{0} \ \ \text{on} \ \ \Gamma^{\mathrm{L}} \tag{2}$$

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。

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{K}^{\mathrm{G}} & \boldsymbol{K}^{\mathrm{GL}} \\ \boldsymbol{K}^{\mathrm{LG}} & \boldsymbol{K}^{\mathrm{L}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \boldsymbol{u}^{\mathrm{G}} \\ \boldsymbol{u}^{\mathrm{L}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \boldsymbol{f}^{\mathrm{G}} \\ \boldsymbol{f}^{\mathrm{L}} \end{Bmatrix} \tag{3}$$

ここで、$\boldsymbol{K}$ は剛性マトリックス、$\boldsymbol{u}$ は変位ベクトル、$\boldsymbol{f}$ 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 $\boldsymbol{K}^{\mathrm{GL}}$ は式 (4) のように表される。

$$\boldsymbol{K}^{\mathrm{GL}} = \int_{\Omega^{\mathrm{L}}} \boldsymbol{B}^{\mathrm{G}^{\mathrm{T}}} \boldsymbol{D} \boldsymbol{B}^{\mathrm{L}} \mathrm{d}\Omega^{\mathrm{L}} (= \boldsymbol{K}^{\mathrm{LG}^{T}}) \tag{4}$$

ここで、$\boldsymbol{D}$ は応力 – ひずみ関係行列、$\boldsymbol{B}$ はひずみ – 変位関係行列、Ω 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、$\boldsymbol{B}^{\mathrm{GL}}$ は領域 Ω^{L} 中で連続であるが、$\boldsymbol{B}^{\mathrm{G}}$ は領域 Ω^{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 $n_{\mathrm{rec}} = 3$ となる。

4.2　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

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。

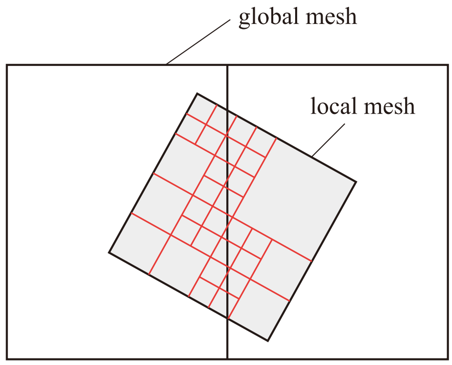

図 3　ローカルメッシュにおける積分領域細分化の例（$n_{rec} = 3$）

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した。

5　今年度の研究成果の詳細

5.1　静的負荷分散フレームワークの XFEM を援用した重合メッシュ法への適用

静的負荷分散フレームワークを構築し、XFEM を援用した重合メッシュシミュレー

タに適用した。本手法は、重合メッシュ法におけるローカル・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を、XFEM のエンリッチ関数により局所的に高精度化を図る。XFEM で拡張された重合メッシュ法はエンリッチ関数の付与により節点あたりの自由度が異なるため、従来の重合メッシュ法で生じる計算負荷の不均一性に加え、XFEM の影響を考慮した負荷分散が必須となる。

そこで 2021 年度の成果を利用して、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、XFEM の影響を考慮した負荷分散を実施する。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た。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および要素剛性行列のみの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。

数値例として、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。図 5 に示す三次元切り欠き材料の 1/4 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。ここで解析モデルは、節点数 42,453、要素数 36,556 である。赤四角で囲われた部分がローカルメッシュであり、その外周部分の節点にヘヴィサイド関数を付与している。材料定数はヤング率 $E = 3.2$GPa、ポ

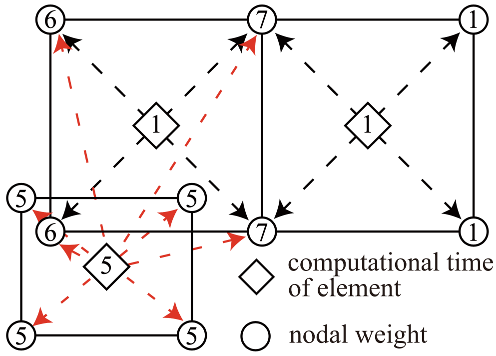

図 4　計算時間を利用した節点重みの付与の例

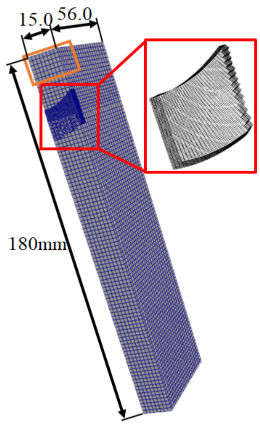

図 5　三次元切り欠き材料の 1/4 モデル

アソン比 $\nu = 0.35$ とした。境界条件として、対称面の法線方向変位を固定し、橙四角部の物体の特定の節点に実験より得た変位を付与する。

解析では、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て対角スケーリング前処理を用いた。最大反復回数は 10,000 回、収束判定閾値を 1.0×10^{-8} とした。並列計算性能評価指標として加速率（Speed-up factor）を使用する。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。

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 に示

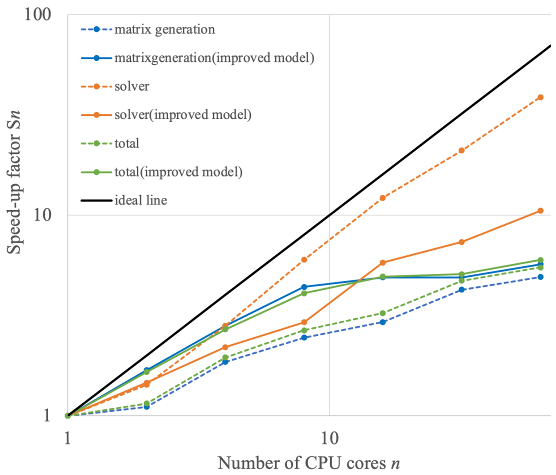

図 6　SFEM における加速率 ($n_{\mathrm{rec}} = 3$)

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。

従来型 SFEM について、表 1 および図 6 より、剛性行列生成時間の加速率は 16 並列のときに 2.93 であり、良好なスケーリング性能を有しているとはいえない。また、線形ソルバの加速率も 16 並列のときに 12.2 であり、相対的に良好なスケーリング性能を有しているが、XFEM の適用により 1 節点あたりの自由度が異なるため、標準的な有限要素法におけるスケーリング性能に比べるとその能力は低い。

改良型 SFEM について、表 2 および図 6 より、剛性行列生成時間の加速率は 16 並列のときに 4.89 であり、従来型に比べ 1.96 ポイントのスケーリング性能が向上した。一方、要素剛性行列生成時間に注目した負荷分散を行ったことで、線形ソルバの加速率は 16 並列のときに 5.81 であり、従来型に比べスケーリング性能は低下した。しかしながら全体計算時間のうち剛性行列生成時間は 95% 以上を占めるため、並列計算性能は向上しており、合計時間では従来型の 67.1 s から改良型 36.2 s に短縮できた。

5.2　メッシュフリー法（粒子法）への適用

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が重要となる。前項で挙げた XFEM はメッシュフリー法のひとつとして知られており、有限要素法の枠組みだけでなく多様な数値解析手法に適用可能である本フレームワークを利用してこそ、迅速な研究開発が実現可能になる。そこで、フレームワーク設計の妥当性を確認することを目的として、重合メッシュ法だけでなく、メッシュフリー法のひとつである粒子法に適用し、開発フレームワークの並列計算性能における有効性評価を実施した。

具体的には、図 7 のように、粒子法における粒子の相互作用関係から解析モデルをグラフ構造として表現し、開発成果を用いてグラフ構造の領域分割を実施し、並列計算時の解の普遍性の検証とスケーリングテストを実施した。総粒子数を 100 万、1,600 万とした 2 ケースでストロングスケーリングによる検証を実施し、1,600 万粒子のモデルでは、2,048 並列において 80% 以上の並列化効率が達成された。粒子法では、影響半径内に存在する粒子の間で物理的な相互作用が生じるため、標準的な有限要素法に比べ、分割領域間のオーバーラッピング領域が大きくなる傾向が確認された。

6　今年度の進捗状況と今後の展望

2022 年度は、XFEM を援用した重合メッシュ法の静的負荷分散およびメッシュフリー法への適用を実施した。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。

XFEM を援用した重合メッシュ法の静的負荷分散

本課題では最終的に、グラフ構造で一般化さ

表 1　従来型 SFEM の計算時間測定結果

Number of MPI process		1	2	4	8	16	32	64
Computation time [s]	matrix gen.	1.54E+02	1.39E+02	1.39E+02	8.29E+01	6.27E+01	5.25E+01	3.62E+01
	solver	2.00E+01	1.40E+01	1.40E+01	7.14E+00	3.34E+00	1.64E+00	9.55E-01
	total	1.79E+02	1.56E+02	1.56E+02	9.17E+01	6.71E+01	5.51E+01	3.80E+01
Parallel efficiency [%]	matrix gen.	1.0	1.11	1.86	2.45	2.93	4.25	4.91
	solver	1.0	1.43	2.81	5.99	12.20	20.99	38.74
	total	1.0	1.15	1.95	2.67	3.25	4.71	5.48

表 2　改良型 SFEM の計算時間測定結果

Number of MPI process		1	2	4	8	16	32	64
Computation time [s]	matrix gen.	1.54E+02	9.15E+01	5.51E+01	3.52E+01	3.16E+01	3.15E+01	2.72E+01
	solver	2.00E+01	1.35E+01	8.99E+00	6.77E+00	3.41E+00	2.69E+00	1.88E+00
	total	1.79E+02	1.09E+02	6.65E+01	4.39E+01	3.63E+01	3.53E+01	3.00E+01
Parallel efficiency [%]	matrix gen.	1.0	1.69	2.81	4.39	4.89	4.90	5.69
	solver	1.0	1.46	2.20	2.92	5.81	7.34	10.52
	total	1.0	1.65	2.70	4.08	4.94	5.08	5.97

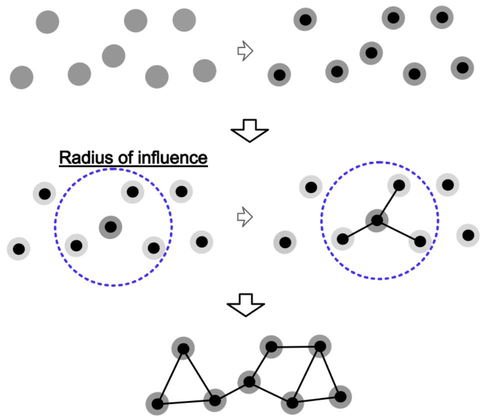

図 7　粒子法におけるグラフ構造作成の模式図

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、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。これまでの検討により、ローカルメッシュ・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。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拡張型有限要素法（XFEM）により重合メッシュ法の高精度化を進め、査読付き国際論文として発表した [研究業績一覧 1, 2]。

XFEM で拡張された重合メッシュ法はエンリッチ関数の付与により節点あたりの自由度が異なるため、従来の重合メッシュ法で生じる計算負荷の不均一性に加え、XFEM の影響を考慮した負荷分散が必須となる。この解決のため、開発した負荷分散フレームワークを XFEM を援用した重合メッシュ法に適用し、数値例により提案手法の有効性を検討した。当該項目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。

メッシュフリー法への適用

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が重要となる。前項で挙げた XFEM はメッシュフリー法のひとつとして知られており、有限要素法の枠組みだけ

でなく多様な数値解析手法に適用可能である本フレームワークを利用してこそ、迅速な研究開発が実現可能になる。そこで、フレームワーク設計の妥当性を確認することを目的として、重合メッシュ法だけでなく、メッシュフリー法のひとつである粒子法に適用することで、開発フレームワークの有効性評価を実施した。当該項目の進捗状況は計画通りであり、査読付き国内論文として発表した [研究業績一覧 3]。

7　研究業績一覧（発表予定も含む）

学術論文 （査読あり）

1. Kazuki Shibanuma, Kota Kishi, Tianyu He, Naoki Morita, Naoto Mitsume, 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, Vol. 399, p.115374, 2022.
2. 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, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 404, p.115843, 2023.
3. 田中克治, 森田直樹, 三目直登, 風上化 LSMPS 法に基づく Euler 型解法による大規模並列解析, 日本計算工学会論文集, p. 20230003, 2023.

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. 伊藤博哉, 三目直登, 柴沼一樹, 森田直樹, 拡張型有限要素法を援用した重合メッシュ解析の並列計算と負荷分散, 第 28 回計算工学講演会, 日本計算工学会, 筑波, 2023 年.

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