

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 に基づくマルチスケールシミュレータの開発

森田 直樹（筑波大学）

概要

本研究は、持続可能な社会の実現に向けた輸送機器への複合材料適用促進のため、定量的強度評価を目的として複合材料のマルチスケールシミュレータの開発を行った。精緻なシミュレーションの必要性により、計算時間・メモリ容量の実用的観点からマルチスケールシミュレータの並列化が課題であり、特にマイクロ構造の計算時間の不均一性が起因となってマクロ構造解析の並列計算性能が低下する問題に対し、周期境界条件を含むマイクロ構造のメッシュ情報をグラフ構造に変換し、グラフ構造に対する静的負荷分散技術を適用することで、並列計算効率の向上を目指した。さらに、計算時間の主体的な部分である連立一次方程式求解の計算時間を削減するため、低次固有モードや事前に取得した解ベクトルを活用する Deflation 前処理を導入し、その有効性を検証した。

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 情報基盤センター
- 大阪大学 D3 センター

1.2 課題分野

- 大規模計算科学課題分野

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
- 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
- 新館 京平（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
- 塚本 顕成（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

- 今口 稜介（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
- 相良 翼（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
- 権太 祐樹（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
- 谷 聖斗（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：マルチスケールシミュレーションの検討
- 清水 嶺（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：マルチスケールシミュレーションの前処理検討
- 平野 皓大（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：マルチスケールシミュレーションの前処理検討
- 森 瑛一朗（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：マルチスケールシミュレーションの検討
- 水田 遼太郎（筑波大学大学院理工情報生命学術院）：マルチスケールシミュレーションの検討
- 柴沼 一樹（東京大学大学院工学系研究科）：負荷分散フレームワークの検討
- He Tianyu（東京大学大学院工学系研究科）：マルチスケールシミュレーションの検討
- 古橋 郁一（東京大学大学院工学系研究科）：マ

マルチスケールシミュレーションの検討

- 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）：負荷分散フレームワークの検討
- 林 雅江（東京大学大学院新領域創成科学研究科）：負荷分散フレームワークの検討

2 研究の目的と意義

持続可能な社会の実現に向けて、我が国でも2050 年までにゼロエミッションを達成するとの宣言がなされ、例えば輸送機器分野ではCO₂排出量削減が喫緊の課題となっている。この解決には躯体の軽量化が効果的であり、高比強度・比剛性への期待から、炭素繊維強化プラスチックに代表される複合材料の強度部材への利用が期待されている。

輸送機器は長期に渡って様々な荷重を受けるため、長期信頼性を保証する強度設計が不可欠である。図 1 に燃料電池自動車に利用される複合材料製圧力容器の解析モデルの例を示す。複合材料の強度評価は、炭素繊維と樹脂を区分するマイクロ構造（ μm オーダー）および部材全体のマクロ構造（m オーダー）の両者における精緻な応力・ひずみの評価が重要となる。時間と費用を要する実験的強度評価手法の代替を目的に、数値シミュレーションによる定量的強度評価に期待が寄せられている。一方、マクロな全体構造にわたってマイクロ構造を直接解像することは計算量・データ量の観点から現実的ではない。そのため、マイクロ構造の平均的な材料特性を取得してマクロな全体構造の応答を計算する、マルチスケールシミュレーションが利用されている。本研究で対象とするシミュレーション手法は、マイクロ構造が周期的であるという仮

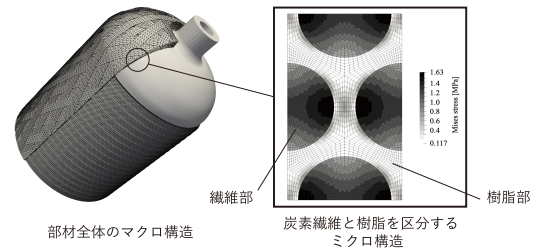


図 1 複合圧力容器の強度評価のための解析モデル例。部材全体を表現するマクロ構造と炭素繊維・樹脂を区分するマイクロ構造からなる、スケールの異なる 2 つのモデルを利用し、マイクロ構造の平均的な材料特性を取得して全体構造の応答を計算する。

定の元、マクロ構造・マイクロ構造それぞれで連立一次方程式の求解を必要とする。マイクロ構造は全体構造に複数設定した評価点（有限要素法における全ての積分点に相当）で平均的な材料特性を取得する。詳細な強度評価のため、マクロ構造およびマイクロ構造の双方で精緻なシミュレーションの必要性が高まっており、計算時間・メモリ容量の実用的観点からマルチスケールシミュレータの並列化が課題となる。

申請者らはこれまで、メッシュなどのシミュレーションに利用する情報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、並列計算時の統一的な負荷分散機能を提供する負荷分散フレームワークの基礎的開発を実施した。その適用例として、複数のメッシュを空間的に重ね合わせ、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を適用例とした重合メッシュ解析システムの開発や、メッシュフリー法のひとつである粒子法に着目した大規模解析システムの開発を実施するなど、複数の成果を得ている。

マルチスケールシミュレータの並列化にあたっては、積層構成や繊維含有率、材料分布の

違いから、全体構造に割り当てられるマイクロ構造の種類が異なる場合が想定される。例えば図 1 では複合材料の積層構造を示しているが、その積層ごとに異なるマイクロ構造を有する場合、応力解析に要する計算時間は均一ではない。そのためマクロ構造を単純にデータ分割すると、マイクロ構造の計算時間の不均一性が起因となって並列計算性能が低下する。その他、マイクロ構造の材料特性に非線形性を考慮する場合も同様であり、全体構造に局所的にひずみ集中が生じた場合、その部分に対応するマイクロ構造の応力解析は、その他部分の応力解析よりも計算時間が長くなる。

効率的な並列計算を実現するためには、マイクロ構造の計算時間の不均一性を考慮した負荷分散が必要になる。またマルチスケールシミュレーションでは、全体構造・マイクロ構造を解像するメッシュ情報のみならず、マイクロ構造の周期性を表現する周期境界条件の情報を取り扱う必要があり、メッシュ情報のみでは負荷分散が実現できない。そのため、グラフ情報に変換・一般化させた負荷分散フレームワークの利用が必要となる。以上より本研究では、これまでの成果である負荷分散フレームワークを開発基盤とし、マルチスケールシミュレータに向けた負荷分散フレームワークの高度化と、並列マルチスケールシミュレータの開発および並列計算性能評価を目的とする。

あわせて実用性向上の観点から、計算時間の大部分を占める連立一次方程式求解の時間を削減するために、反復解法の利用を前提として、既知の基底ベクトルを前処理に利用可能とする Deflation 前処理をマルチスケールシミュレーションに適用し、その有効性を評価する。Deflation 前処理は、任意の既知である線形独立な複数ベクトルを係数行列から縮約して反復法の収束性を向上する手法であり、例えば既知

のベクトルとして係数行列の低次固有モードの情報を利用した場合、縮約操作によって低次固有モードに対応する低次固有値を解くべき問題から削除できるため、条件数低減につながる。本研究では、マイクロ構造解析に利用する有限要素メッシュが高々数種類であることに着目し、ある評価点で計算されたマイクロ構造解析の解ベクトルを、同一のメッシュ情報をもつ他の評価点において、連立一次方程式求解時の前処理として利用する。この枠組みは、計算結果を再利用して計算時間の削減を図る挑戦的な課題であり、その意義は大きい。

その他、複合材料は高い比強度・比剛性を有し、輸送機器の強度部材へ更なる適用が期待されており、材料の精緻な強度評価とそれに付随する大規模シミュレーション技術の開発は重要な課題となる。以上より、負荷分散が可能な並列マルチスケールシミュレータの開発はその意義が大きい。また、炭素繊維の供給量の 1/3 以上を日本企業が占める現状に対し、本研究成果により得られる解析技術は、世界に向けた大きな貢献が期待できると同時に国内産業を牽引できる側面も有している。

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マルチスケールシミュレータは、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。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を適切に設定しなければならない。その決定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が必須であり、この観点から本研究の目的達成に有益である、本拠点公募型共同研究を実施した。

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

初年度である 2024 年度は、(i) マルチスケールシミュレータに向けた静的負荷分散フレームワークの高度化と、並列マルチスケールシミュレータの開発および並列計算性能評価を実施した。あわせて、(ii) 既知の基底ベクトルを前処理に利用可能とする Deflation 前処理をマルチスケールシミュレーションに適用し、既知の解ベクトルを前処理に利用した場合について、前処理性能と計算時間評価を実施した。

(i) 静的負荷分散フレームワークの高度化とマルチスケールシミュレータへの適用

本項目では、マルチスケールシミュレータへの適用を前提に、負荷分散フレームワークの高度化を実施した。具体的には、マイクロ構造の周期性を表現するメッシュ・周期境界条件の情報をグラフ情報に変換するプログラムを作成し、複数のマイクロ構造の情報からグラフ重みを決定する実装を行った。さらに、開発した負荷分散フレームワークを利用して複合材料のマルチスケールシミュレータの並列化を実施した。また本開発にあたっては、多様な数値解析手法への展開を目的とした前回採択時の成果である、メッシュベース法・メッシュフリー法への適用可能性を維持した。この機能の確認のため、有限要素法や、メッシュベース法の発展的な計算手法である重合メッシュ法についても、動作確認を行い、ライブラリとしての後方互換性を確認した。

シミュレータの有効性評価は、微小変形線形弾性問題を対象として実施した。解析モデルは、高圧容器の一部を模した円筒形状のマクロ

モデル（節点数 34,441）と、樹脂と炭素繊維を分けて解像したマイクロモデルで構成される。マイクロモデルは、メッシュの解像度が異なるモデルを 2 種類、具体的には節点数 710 のモデルと、節点数 2,714 のモデルを用いた。境界条件として、円筒形状のマクロモデルに外力としてマクロひずみを与えた。線形ソルバは、共役勾配法と対角スケーリング前処理を用いた。収束判定閾値は 1.0×10^{-8} である。計算機として大阪大学 SQUID を用いた。図 2 に、従来手法（グラフ重み均一）と提案手法（グラフ重み考慮）における、並列加速率を示す。

ここで、ideal は理想的な加速率、micro simulation は従来手法によるマイクロ解析の加速率、macro simulation は従来手法によるマクロ解析の加速率、total は従来手法による解析全体の加速率、improved model と記載は提案手法による加速率を示す。図 2 より、従来手法における加速率と比べ、特に 8 並列以降で提案手法における加速率が向上したことがわかる。計算時間は、全計算時間について 256 並列のとき、従来手法では 608 s、提案手法では 403 s であり、33% の計算時間削減が達成された。以上より、開発したシミュレータを利用して、メッシュ自由度の異なる複数のマイクロ構造をもつシミュレーションに対し、静的負荷分散機能の有効性を確認した。

(ii) ミクロ構造の解析結果を再利用した反復法前処理の検討

本項目では、実用性向上の観点から、計算時間の大部分を占める連立一次方程式求解の時間を削減するために、反復解法の利用を前提として、既知の基底ベクトルを前処理に利用可能とする deflation 前処理をマルチスケールシミュレーションに適用し、その有効性を評価する。導入手法は deflation 前処理に用いる既知の基底として、(a) 固有ベクトル、(b) 剛体モード、

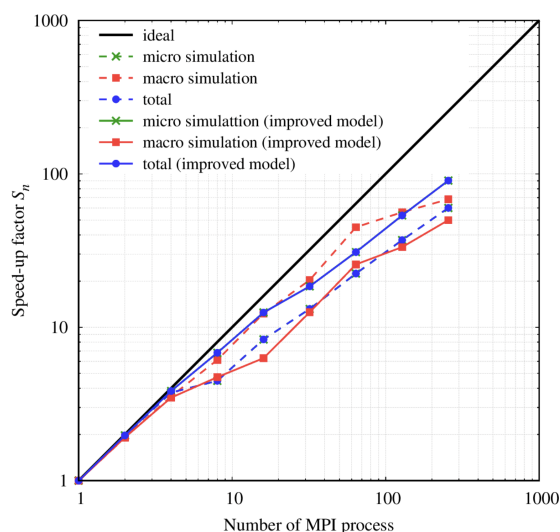


図 2 並列弾性マルチスケールシミュレーションの加速率。図中において、micro simulation の加速率は total の加速率と重なっている。

(c) 以前の解、(d) 固有ベクトルと以前の解、(e) 剛体モードと以前の解を用いる。

導入手法の有効性評価のために、複合材料のミクロスケールユニットセルを対象として検討する。解析モデルは、樹脂は等方弾塑性体、炭素繊維は直交異方弾性体として扱った。線形ソルバとして共役勾配法、deflation 前処理に併用して対角スケーリング前処理を適用した。収束判定閾値は 1.0×10^{-8} である。計算機として大阪大学 SQUID を用いた。

図 3 に各種ベクトルを deflation 基底として採用したときの、反復回数の変化について示す。ここでは、並列数（領域分割数）を 32 とした。材料非線形性を有するため、Newton-Raphson 反復は 5 回で収束した。表 1 に、基底取得時間のよび Newton-Raphson 反復計算を含む総計算時間を示す。計算の結果、標準的な方法である対角スケーリング前処理に比べ、固有ベクトルと以前の解ベクトルを併用したとき、反復回数を最大で 80% 削減した。このとき、総計

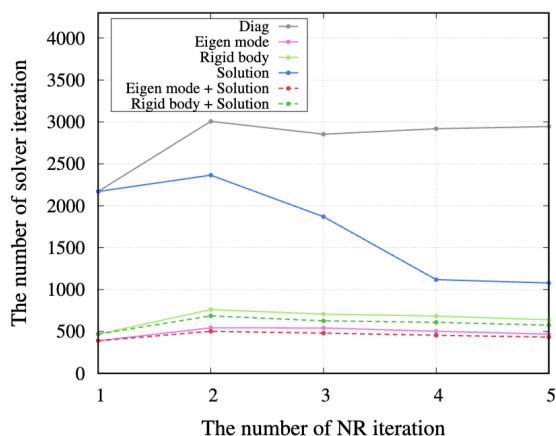


図 3 Deflation 前処理つき共役勾配法の各 Newton-Raphson 反復における反復回数の変化（並列数 32）

算時間は標準的な手法で 200 s、提案手法（固有ベクトルと以前の解ベクトルを併用）で 94 s であり、計算時間を 50% 削減した。以上より、開発したシミュレータを利用して、既知の基底ベクトルを前処理に利用可能とする deflation 前処理の有効性が示された。

6 今年度の進捗状況と今後の展望

初年度の 2024 年度は、(a) 静的負荷分散フレームワークに基づく並列マルチスケールシミュレータの開発と、(b) ミクロ構造の解析結果を再利用した反復法前処理の検討を実施した。

はじめに項目 (a) について、シミュレーションの情報をグラフ情報に変換・一般化させた並列計算フレームワークを利用した並列マルチスケールシミュレータを開発し、計算負荷が均等となる例題を用いた並列計算性能の評価および複合材料の引張試験結果と比較することで妥当性を検証した。さらにこの開発基盤に基づき、メッシュ自由度の異なる複数のミクロ構造をもつシミュレーションに対し、静的負荷分散機能の有効性を確認した。提案手法は、ミクロ構

表 1 Deflation 前処理つき共役勾配法の総計算時間 [s]

線形ソルバ	領域分割数					
	1	2	4	8	16	32
Diag	3,808.	2,011.	968.	520.	279.	200.
Eigen mode	45,671.	12,134.	5,144.	2,637.	1,179.	678.
Rigid body	4,154.	1,984.	900.	312.	163.	91.
Solution	4,035.	1,998.	980.	459.	237.	154.
Eigen mode + Solution	26,656.	12,319.	5,151.	2,647.	1,149.	680.
Rigid body + Solution	3,861.	1,900.	920.	320.	159.	94.

造の節点数をグラフ重みとして静的負荷分散を行うことで、3 万節点規模のマクロモデルに対し、標準的な手法に対して 33% の計算時間削減が達成された。当該項目の進捗状況は計画通りであり、2025 年度は、当該成果を拡張する形で動的負荷分散機能を有するマルチスケールシミュレータの開発を実施する。

次に項目 (b) について、ミクロ構造の解析結果を再利用した反復法前処理の検討のため、既知の基底ベクトルとして低次固有モードを反復法前処理に利用する Deflation 前処理の、領域分割法に基づく並列アルゴリズムを提案した。さらにこの成果に基づき、材料非線形性を有するミクロ構造モデルに対し、低次固有モードや既知の解ベクトルを組み合わせた場合の前処理性能の評価を実施した。提案手法として固有ベクトルを用いた場合、20 万節点規模のミクロ構造モデルに対し、共役勾配法・対角スケーリング前処理と比較して、収束までの反復回数 80%、総計算時間を 50% 削減した。

なお課題申請時には「ある評価点で計算されたミクロ構造解析の解ベクトルを、同一のメッシュ情報をもつ他の評価点において利用する」との検討を予定していたが、材料非線形性を有する問題に対し、既知の基底（初期状態の剛性行列から得られる低次固有ベクトル）を前処理として利用する有効性の評価が、基礎的検討の観

点から最重要である考えたため、当初の検討順序を変更して実施した。検討の結果、Deflation 前処理はマルチスケールシミュレーションにおけるミクロ構造解析に対して、有望な前処理となる可能性がある。以上を踏まえ、当該未着手の検討項目は 2025 年に実施する。

継続課題の 2 年目である 2025 年度は、動的負荷分散機能の基盤フレームワークを開発し、開発フレームワークを用いた動的負荷分散機能を有するマルチスケールシミュレータを開発する。また、マルチスケールシミュレーションに適した Deflation 前処理手法の検討を継続し、ある評価点で計算されたミクロ構造解析の解ベクトルを、同一のメッシュ情報をもつ他の評価点において利用するとの手法を検証する。詳細な検討課題は後述の 3 項目である。

(i) 動的負荷分散機能の基盤フレームワークの開発

本項目は、今後の研究展開を視野にいれ、多様な数値解析手法への適用可能性を考慮した、動的負荷分散フレームワークの開発を行う。具体的には、グラフ構造を統一的なデータ構造として用い、グラフの並列再分割機能と、再分割結果に基づいたグラフ（およびグラフのノードに紐づく物理量）の並列プロセスに対するデータ再分配機能を実装する。

(ii) 動的負荷分散フレームワークのマルチスケールシミュレータへの適用

項目 (i) で開発した動的負荷分散に対応した、複合材料のマルチスケールシミュレータを開発する。開発したシミュレータは、シミュレーション中に適切なグラフ重みを考慮した、計算データの再分配機能に関する有効性を評価する。評価にあたっては、ミクロ構造における、材料非線形性に由来する要素剛性行列および連立一次方程式求解の計算時間の不均一性を対象とする。

(iii) ミクロ構造の解析結果を再利用した反復法前処理の検討

計算時間の主体的な部分を占める連立一次方程式求解部分に対し、既知の基底ベクトルを前処理に利用可能とする Deflation 前処理をマルチスケールシミュレーションに適用し、その有効性を評価する。マルチスケールシミュレータに利用する線形ソルバライブラリに Deflation 前処理を導入し、ある評価点で計算されたミクロ構造解析の解ベクトルを、同一のメッシュ情報をもつ他の評価点において、既知の解ベクトルとして前処理に利用した場合について、前処理性能と計算時間評価を実施する。