jh250031

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。マルチスケールシミュレータは、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並列化が課題である。特にミ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ミ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動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、既存の計算結果から連立一次方程式求解に有効な基底を活用する 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
- **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
- **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
- **新舘 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
- **根本 琢巳**（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
- **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
- **山本 歩穂**（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
- **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 CO_2 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ミクロ構造（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ミ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、ミ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、ミクロ構造が周期的であるという仮定の元、マクロ構造・ミ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。ミ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、マクロ構造およびミ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。

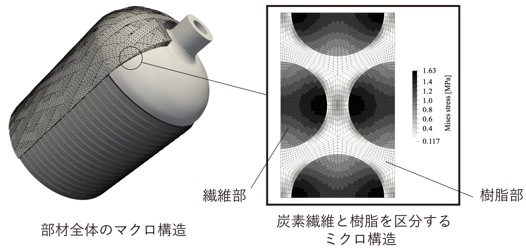

図 1　複合圧力容器の強度評価のための解析モデル例。部材全体を表現するマクロ構造と炭素繊維・樹脂を区分するミクロ構造からなる、スケールの異なる 2 つのモデルを利用し、ミクロ構造の平均的な材料特性を取得して全体構造の応答を計算する。

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ミ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ミ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、ミ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、ミ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ミ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、ミ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・ミクロ構造を解像するメッシュ情報のみならず、ミ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、統一的なデータ構造としてグラフ構造を採用し、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を開発し、並列マルチスケールシミュレータに適用したうえで、その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、ミ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、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。

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

前年度（課題 1 年目）である 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に基づく並列マルチスケールシミュレータを開発し、基礎的検討として、計算負荷が均一に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。

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 前処理の並列アルゴリズムを開発した。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。

5 今年度の研究成果の詳細

継続課題 2 年目となる 2025 年度は、(i) 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した。あわせて、(ii) 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た。

(i) 動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

課題 (i) では、マルチスケールシミュレータへの適用を前提として、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、動的負荷分散フレームワークを開発するとともに、グラフ情報を統一的なデータ構造として扱うことで、マルチスケールシミュレーションにも対応可能な汎用的データマネジメントライブラリを実装した。また、本開発では、多様な数値解析手法への展開を見据え、メッシュベース法およびメッシュフリー法の双方に適用可能な設計とした。本機能の検証として、有限要素法に加え、メッシュベース法を発展させた計算手法である重合メッシュ法への適用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。

次に、開発した負荷分散フレームワークを複合材料のマルチスケールシミュレータに組み込み、動的負荷分散機能を実装した。本実装の基礎的検討として、複合材料のミクロ問題を対象とする微小変形線形弾性解析を実施し、その有効性を評価した。本研究成果は将来的に、複合材料のマルチスケールシミュレーションにおける、ボイド成長を伴う樹脂材料の損傷解析へ展開することを想定している。そこで本検討では、構造格子メッシュに拡張型有限要素法を適用したシミュレーションを評価対象とした。

解析モデルは、複合材料のミクロモデル（要素数 100,000）である。モデルの各辺長さ 10 μm $\times$ 10 μm $\times$ 0.5μm、初期ボイド半径を 5 μm と設定した。初期ボイド半径をまたぐ要素をエンリッチ要素と設定し、当該要素にヘビサイド関数に基づくエンリッチ自由度を付与した。境界条件として、モデル外周部には無限円孔平板の引張問題の理論解に基づく変位を与えた。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。

動的負荷分散に用いる重みは、行列生成時間および連立一次方程式の求解時間に基づいて設定した。これら 2 種類の計算コストを考慮するためには、実計算時間に基づく重みの同定が必要である。そこで本研究では、まず計算負荷を均一と仮定した条件で解析を実施し、その実測時間に基づいて重みを同定した後、動的負荷分散を行う方法を採用した。

表 1 に、32 並列における計算時間を示す。図 2 に、動的負荷分散前後の並列加速率を示す。ここで、ideal は理想的な加速率、matrix generation は行列生成時間、solver は連立一次方程式の求解時間、total は全体計算時間（matrix generation と solver 時間の和）、improved model と記載は提案手法による動的負荷分散後加速率を示す。図 2 より、負荷分散を行わない従来手法と比較して、提案手法により並列加速率が向上していることが確認できる。特に 32 並列においては、従来手法の加速率が 4.1 倍であったのに対し、提案手法では 8.1 倍となり、約 4 ポイントの加速率向上を達成した。合計計算時間は 15.72 s 削減でき、約 51.8% 短縮できた。この検討結果により、動的負荷分散機能が並列計算性能向上に寄与していることを確認できた。

表 1　従来手法および提案手法の計算時間と並列加速率の比較

	従来手法	提案手法
並列数	32	32
剛性行列生成時間 [s]	28.61	9.59
行列求解時間 [s]	1.75	4.87
動的負荷分散時間 [s]	0.00	0.18
合計時間 [s]	30.36	14.64
剛性行列生成加速率	2.97	8.87
行列求解加速率	19.27	6.91
合計時間加速率	3.91	8.11

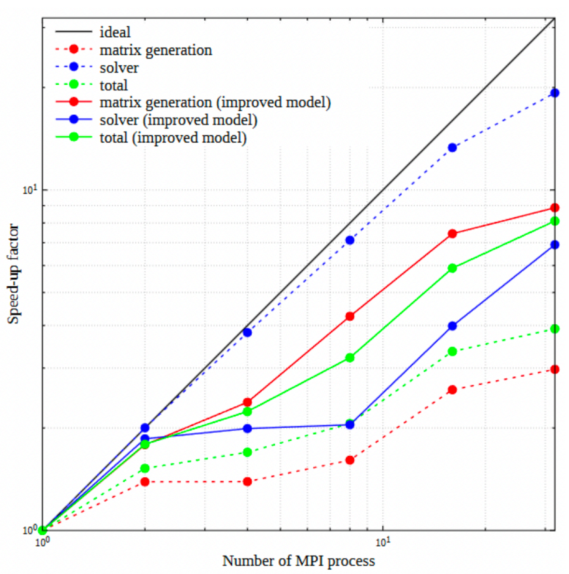

図 2　ミクロスケールシミュレーションを対象とした動的負荷分散前後における加速率の変化。合計計算時間（緑線）で加速率の向上が確認できる。

(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

課題 (ii) では、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タに利用する線形ソルバライブラリに導入し、昨年度から継続して性能評価を行った。具体的には、マルチスケールシミュレーションのミクロ構造解析単体に注目し、材料非線形問題における既知の基底ベクトル取得における検討を実施した。既知の基底ベクトル取得方法については、事前に領域分割を実施し、基底ベクトルの取得領域を分割領域ごとに実施することで基底取得時間を削減する方法および、基底を取得する snapshot（データベース）から incremental SVD に基づき説明性の高い基底を取得する方法が、反復法収束性および計算時間に与える影響を検討した。

本研究の最終的な適用対象は、複合材料のミクロシミュレーションである。一方で、ミクロモデルでは材料不均質性、界面形状、拡張型有限要素法における enrichment 要素、サブセル積分など複数の要因が同時に現れるため、前処理法単体の基本性能を評価しにくい。そこで本検討では、基礎検証問題として既存研究と評価可能な L 字型モデルを用い、前処理法の収束性および計算効率を評価した。L 字型モデルは角部に起因する局所的な解の特異性を含み、ボイド周辺や界面端部など、複合材料ミクロ構造に現れる局所応力集中を簡略化して表すモデルと見なせる。そのため、ミクロシミュレーションへの展開前に、前処理法の基本的な有効性を検証する対象として妥当である。

数値例題には L 字薄板モデルを用いる。本モデルは 171,024 節点、159,180 要素、513,072 自由度からなり、材料は弾塑性体として扱う。時間積分には Newmark-β 法、非線形解法には Newton–Raphson 法、有限要素には六面体一次要素を用いる。解析時間は 2 s、時間刻み幅は 0.02 s とし、全 100 タイムステップの非線形動解析を実施する。境界条件として、モデル底面を固定し、側面に時間的に振幅が変化する荷重を与える。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}

表 2　AMG 前処理、対角スケーリング前処理、deflation 前処理（提案手法）の反復回数と計算時間の比較

並列数	平均反復回数			合計計算時間 [s]		
	AMG	対角スケーリング	Deflation	AMG	対角スケーリング	Deflation
1	1,329	9,692	8,931	62,884	52,936	54,120
2	1,330	9,691	8,710	33,150	31,151	30,982
4	1,331	9,690	8,574	17,693	16,167	15,771
8	1,331	9,690	7,767	10,388	9,309.4	7,981.6
16	1,330	9,690	6,684	6,672.3	5,903.9	4,452.8
32	1,330	9,688	5,505	3,501.5	3,047.0	2,265.3
64	1,330	9,689	4,865	1,539.8	1,351.7	1,650.3
128	1,330	9,689	4,442	549.62	506.27	2,108.6
256	1,329	9,689	3,740	313.75	297.07	2,964.9

である。

提案手法では、1 ステップ目は対角スケーリング付き CG 法により線形方程式を解き、2 ステップ目以降で subdomain incremental POD deflation により deflation 基底を取得・更新する。したがって、1 ステップ目における提案手法の反復回数は、従来の対角スケーリング付き CG 法と一致する。2 ステップ目以降は、取得した deflation 基底を用いた対角スケーリング付き deflated CG 法により線形方程式を解く。Newton–Raphson 法の反復回数は、65 ステップ目までは各ステップ 1 回で収束したが、66 ステップ目以降では材料非線形性の影響により、2 回以上の反復を要するステップが現れた。その結果、本解析では線形ソルバが合計 160 回呼び出された。

表 2 に、計 160 回呼び出された線形ソルバの平均反復回数と合計計算時間を示す。ここで提案手法は、代数的マルチグリッド付き CG 法（AMG）、対角スケーリング付き CG 法と比較した。表 2 より、提案手法では、並列数（=基底取得領域数）に対して平均反復回数が単調減少であることがわかる。これは、基底取得領域数の増加に伴い deflation 基底本数が増加し、deflated CG 法の前処理効果が向上したためである。また、並列数 32 以下では提案手法が従来手法より短い計算時間を示した。一方、並列数 64 以上では、従来手法の方が短い計算時間となった。並列数 64 以上で提案手法の計算時間が従来手法より大きくなった要因は、deflation 前処理の計算コストが、反復回数削減によって得られる時間短縮効果を上回ったためである。特に、deflated CG 法では、並列数の増加に伴い粗問題の求解部分がボトルネックとなり、計算時間が低下しにくくなる。この傾向は既往研究でも示されており、本研究でも同様の結果が得られた。検討の範囲内では、提案手法は最大で約 25.7% の計算時間削減を示した。この最大削減率は 32 並列時に得られ、計算時間は 3,047.0 s から 2,265.3 s に短縮された。また、削減時間が最大となったのは 16 並列時であり、計算時間は 5,903.9 s から 4,452.8 s に短縮され、1,451.1 s の削減となった。評価の結果、基底取得領域数（= 並列分割数）を増加させることで deflation 基底本数が増加し、平均反復回数が低減する傾向が得られた。これ

らの結果から、提案手法は非線形動解析において有効な前処理性能を示し、特に基底取得領域数を適切に設定することで、従来手法に比べて線形ソルバの収束性を改善できることが示された。

6 進捗状況の自己評価と今後の展望

2025 年度は、(a) 動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、および (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。

項目 (a) では、シミュレーション情報をグラフ情報へ変換・一般化する並列計算フレームワークを基盤として、並列マルチスケールシミュレータの開発を進めた。特に、マルチスケールシミュレーションにおいて計算負荷が解析中に変化する問題を対象として、動的負荷分散機能を実装した。基礎検証として、構造格子メッシュに拡張型有限要素法を適用した複合材料ミクロ解析を対象に、行列生成時間および線形ソルバ時間に基づく重み付けを導入し、負荷分散前後の並列計算性能を比較した。その結果、32 並列において全体計算時間は 30.36 s から 14.64 s に短縮され、15.72 s、すなわち約 51.8% の計算時間削減を達成した。これにより、動的負荷分散フレームワークを用いた並列マルチスケールシミュレータ開発は、当初計画に対して順調に進捗していると評価できる。

項目 (b) では、ミクロ構造の解析結果を再利用した反復法前処理として、deflation 前処理に基づく手法の検討を行った。特に、incremental POD deflation に subdomain deflation を導入し、並列計算領域数と基底取得領域数を独立に設定可能な前処理手法として評価した。L 字薄板モデルを対象とした非線形動解析により、対角スケーリング付き CG 法および代数的マルチグリッド付き CG 法との比較を行った。その結果、基底取得領域数の増加により線形ソルバの平均反復回数が低減することを確認した。また、並列領域数と基底取得領域数が一致する条件では、32 並列において計算時間が 3,047.0 s から 2,265.3 s に短縮され、最大で約 25.7% の計算時間削減を達成した。一方で、並列数が大きい場合には deflation 前処理自体の計算コストが支配的となり、必ずしも計算時間が短縮されないことも確認された。この結果から、提案手法の有効性とともに、反復回数削減効果と前処理コストのバランスを考慮した基底取得領域数の設定が重要であることが明らかとなった。

以上より、2025 年度は、動的負荷分散フレームワークの実装とその有効性評価、およびミクロ構造解析結果の再利用を想定した deflation 前処理の基礎検討を実施し、いずれの項目についても当初計画に沿った進捗が得られた。特に、動的負荷分散については約 51.8% の計算時間削減、deflation 前処理については検討範囲内で最大約 25.7% の計算時間削減を確認しており、定量的にも有効性を示す結果が得られた。