様　式　C－19、F－19－1、Z－19　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　５年　６月２１日現在

機関番号：１２１０２

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2022

課題番号：２０Ｋ１９８１３

研究課題名（和文）非整合メッシュを有する領域分割型並列有限要素法のための連立一次方程式解法

研究課題名（英文）Linear Equations Solver for Domain Decomposition Based Parallel Finite Element Methods with Inconsistent Mesh

研究代表者

森田　直樹（Morita, Naoki）

筑波大学・システム情報系・助教

研究者番号：２０７８９０１０

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,200,000円

研究成果の概要（和文）：数値シミュレーションの計算時間の多くを占める連立一次方程式の求解に対し、実用性向上の観点から反復解法と領域分割法による並列計算が用いられる。反復解法の収束性向上には前処理の利用が有効であるが、並列計算により、前処理性能が領域分割数に依存性する問題が生じている。本研究では、前処理性能の領域分割数依存性を低減させる手法の構築を目標として、係数行列の固有ベクトルを利用する固有モード縮約に注目した。標準的な有限要素法および重合メッシュ法を数値例として、並列計算性能の観点から提案手法の有効性を評価した。

研究成果の学術的意義や社会的意義
本研究は、数値シミュレーションの実用性に寄与する並列反復法前処理の提案を行うものである。従来、並列計算で利用するデータ分割数に依存して反復法前処理の性能低下が生じる問題に対し、対象の問題から得られる固有モードを利用して大域的な情報伝達を行うことで、並列数に依存しない前処理手法を構築した。くわえて、既存手法であるマルチグリッド法やバランシング領域分割前処理に対し、提案手法では利用する固有モードの個数で大域的な解の表現能力を制御できる点で学術的意義が大きい。この成果により数値シミュレーションの実用性が向上し、構造物の安全性評価などへの展開が期待される点で社会的意義は大きい。

研究成果の概要（英文）：In numerical simulations, a significant portion of computational time is devoted to solving systems of linear equations. From the perspective of practicality, iterative methods based and parallel computation based on domain decomposition are employed. Although the use of preconditioning is effective for improving the convergence of iterative methods, a problem arises where the performance of preconditioning depends on the number of subdomains due to parallel computation. In this study, we focused on eigenmode deflation using eigenvectors of the coefficient matrix, and we aim to construct a method to reduce the dependence of preconditioning performance on the number of subdomains. As a numerical example, we evaluated the effectiveness of the proposed method from the perspective of parallel computation performance, in the case of a standard and s-version finite element method.

研究分野：計算工学

キーワード：計算工学　連立一次方程式解法　反復法　前処理　有限要素法

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９（共通）

１．研究開始当初の背景

航空機、自動車、建屋などに代表される構造物の構造安全性を評価するため、複雑な任意形状を解析でき非線形特性を考慮した応答が評価できる点で、有限要素法による数値解析が広く利用される。有限要素法は最終的に、疎な係数行列をもつ連立一次方程式の求解に帰着する。本研究では、実問題例への適用を念頭に、解くべき連立一次方程式に以下の条件を設ける。

（A）　問題自由度が大規模（例：精緻なメッシュを必要とするミクロスケール解析）
（B）　非線形動解析（例：材料非線形性、接触解析、流体解析）
（C）　解析対象に由来する悪条件問題（例：薄板シェル構造、メッシュサイズ差）
（D）　複数領域が存在し、領域間のメッシュ界面が非整合（例：接触解析、重合メッシュ解析）

例えば炭素繊維複合材料の精緻なシミュレーションを実現する場合、炭素繊維の直径が数 µm オーダーとなるミクロ構造で数 m オーダーの部材全体を解像する必要があり、材料のマクロモデル化を施しても本質的に解析すべき自由度は大規模になる。解析に要する計算時間は連立一次方程式を解く線形ソルバの計算時間がその多くを占めるため、線形ソルバを効率的に利用することが重要となる。大規模計算機の発達は特筆されるべきであるが、並列計算を意識したアルゴリズムの研究開発なくしては精緻な構造安全性評価は成し得ない。

２．研究の目的

接触解析や重合メッシュ解析への適用を見据え、メッシュ非整合を考慮した大規模問題を求解する連立一次方程式解法の要件を検討する。まず、一つの共有メモリ計算機上で大規模問題全体を構成するのはメモリ使用量の観点から困難であるため、入力メッシュ情報を用いてあらかじめ計算領域を分割する、領域分割型有限要素法を利用する。次に、線形ソルバは直接法と反復法に大別されるが、条件（A）、（B）から、並列計算効率の高い反復法を採用する。反復法ソルバを用いる場合、解くべき問題の条件数を削減し反復法ソルバの収束性を改善する、反復法前処理の利用が必須となる。反復法前処理は、分割領域間にまたがる情報の考慮の有無により、大域的前処理と局所的前処理に大別される。本研究では条件（C）から、高い前処理性能を得るために大域的前処理の利用を考える。

大域的前処理は、分割領域の自由度を縮約・制限し全体構造を表現する低い次元の問題に変換することで収束性の改善を実現するものであり、マルチグリッド法やコースグリッド修正法が挙げられる。一方、条件（D）により、分割領域内に複数の独立した解析領域がある場合は、本来解くべき問題と低い次元の問題が異なっており前処理性能が領域分割に依存する。例えば、一部の前処理では分割領域を剛体とみなして大域的な変形を算出するが、分割領域内に独立した解析領域がある場合はひとつの剛体と見なせない。このような場合を含め、前処理性能の領域分割依存性を低減させる手法が重要である。

そこで本研究では、前処理性能の領域分割依存性を低減させる大域的前処理として、係数行列の固有ベクトルをもとに前処理を施す固有モード縮約に注目し、並列計算性能の評価および領域間のメッシュ界面が非整合となる重合メッシュ法に適用して、提案手法の有効性を評価することを目的とする。

３．研究の方法

Deflated 共役勾配法（Deflated CG 法、Deflated Conjugate Gradient method）とは、係数行列に縮約を施した共役勾配法である。解空間の基底で構成された任意の本数の線形独立なベクトルを入力することでその情報をもとに縮約モデルを作成し計算を行う。Deflated 共役勾配法のアルゴリズムを図 1 に示す。反復アルゴリズム中における標準的な CG 法との差分は、係数行列から既知の基底情報を縮約する 19 行目のみであり、既知の基底としてベクトルを横に並べた行列 W をゼロ行列として入力すると CG 法と等価となる。ここで、入力する既知の線形独立なベクトルとして低次の固有ベクトル Z を使用する場合、固有モード縮約と呼ばれる。大規模自由度問題を扱う場合、問題の条件数は大きくなる傾向があり、反復法の収束性低下が問題となる。Deflated 共役勾配法では、低次固有値 λ_1 から λ_k に対応する k 本の固有ベクトルが他の固有値解法などによって得られ既知である場合、これらの情

報を縮約処理により、反復で得られる基底からその情報を省略することができる。この操作により解くべき問題の条件数をλ_n/λ_1からλ_n/λ_kに削減することができるため、反復法の収束性の向上が期待される。

$r^{(-1)} \leftarrow b - Ax^{(-1)}$
$x^{(0)} \leftarrow x^{(-1)} + W(W^T AW)^{-1} W^T r^{(-1)}$
$r^{(0)} \leftarrow b - Ax^{(0)}$
$g \leftarrow (W^T AW)^{-1} W^T r^{(0)}$
if $(||r^{(0)}||/||r^{(-1)}|| < \varepsilon)$ **then**
    skip main loop
end if
$z^{(0)} \leftarrow M^{-1} r^{(0)}$
$p^{(0)} \leftarrow z^{(0)} - W(W^T AW)^{-1} W^T A z^{(0)}$
for $(i = 1, k++)$ **do**
    $\alpha^{(i)} \leftarrow \frac{(r^{(i-1)})^T z^{(i-1)}}{(p^{(i-1)})^T A p^{(i-1)}}$
    $x^{(i)} \leftarrow x^{(i-1)} + \alpha^{(i)} p^{(i-1)}$
    $r^{(i)} \leftarrow r^{(i-1)} - \alpha^{(i)} A p^{(i-1)}$
    if $(||r^{(i)}||/||r^{(0)}|| < \varepsilon)$ **then**
        exit
    end if
    $z^{(i)} \leftarrow M^{-1} r^{(i)}$
    $\beta^{(i)} \leftarrow \frac{(r^{(i)})^T z^{(i)}}{(r^{(i-1)})^T z^{(i-1)}}$
    $p^{(i)} \leftarrow z^{(i)} + \beta^{(i)} p^{(i-1)} - W(W^T AW)^{-1} W^T A z^{(i)}$
end for
$h \leftarrow (W^T AW)^{-1} W^T A(x^{(i)} - x^{(0)})$
$x^{(i)} \leftarrow x^{(i)} + W(g - h)$

図 1 Deflated 共役勾配法

本研究では解析領域全体の大域的な固有モードを既知の入力基底として利用し、全解析領域、すなわち全体剛性行列に対して縮約処理を施す大域的固有モード縮約により、重合メッシュ法から得られる問題に対する並列計算性能の評価を行う。解析する問題の条件数、入力基底数及び並列数を変化させ、分散メモリ型並列計算機における計算性能を議論する。

４．研究成果

既知の基底として解析モデル全体の固有モードを利用し、全体剛性行列に対して縮約を行う大域的固有モード縮約による連立一次方程式解法の構築と、分散メモリ型並列計算環境で動作する並列計算機能を実装し、構造解析の有限要素法シミュレーションに対して性能評価を実施した。

はじめに構造解析の事象は片持ち梁の曲げ問題を対象とし、縮約数及び並列数を変化させ分散メモリ型並列計算機での計算性能を測定する。片持ち梁モデルは、問題の条件数と線形ソルバの収束性の関係を検討するため、長さの異なる 3 種類の解析モデルを使用した。ここで各モデルの寸法諸元は model 1:（1.0×0.01×0.01 m、363,363 自由度）、model 2 : （2.0×0.01×0.01 m、726,363 自由度）、model 3:（3.0×0.01×0.01 m、1,089,363 自由度）である。物性値はヤング率 E = 206,000 MPa、ポアソン比 $\nu = 0.3$ の鋼材とした。

大域的固有モード縮約前処理の並列計算性能を評価するため、既知の固有モードの次数を0、1、10、25、50、100 に設定した。並列数は 1、2、4、8、16、32、64、128、256 とし、各モデル毎に測定を行う。線形ソルバでは上記の縮約前処理に加えて対角スケーリング前処理を使用し、固有モードの取得には Lanczos 逆べき乗法を用いた。全てのデータは 3 回分測定を行い、検討にはその平均値を使用する。分散メモリ型並列計算機は東京大学の Oakbridge-CX を利用した。収束判定閾値は 1.0×10^{-8} である。

反復回数と縮約基底本数の関係を図 2 に示す。図 2 より、全ての問題において縮約次数の増加に伴って反復回数が単調減少しており、大域的固有モード縮約が効果的に機能することが確かめられた。標準的な共役勾配法と比較して、提案手法は検討の範囲において、反復回数を 2%まで削減することができた。次に、deflated 共役勾配法の計算時間をその成分毎に測定し、計算時間内訳の割合と縮約次数の関係を表 1 に示す。総計算時間（Total）の内訳

は、分割領域間での通信を要する疎行列ベクトル積（SpMV）、ベクトル内積（Inner product）、密行列ベクトル積（DeMV）と分割領域間での通信を要さない密行列ベクトル積（DeMV without comm.）、対角スケーリング前処理（Precond）である。

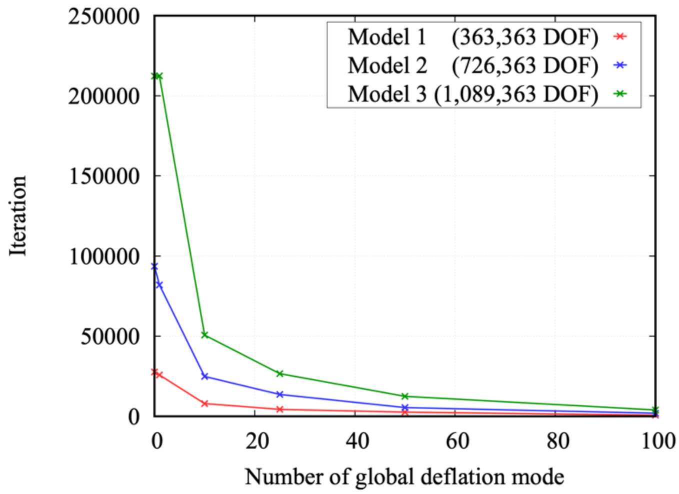

図 2 反復回数と縮約基底本数の関係

表 1 Deflated 共役勾配法における計算時間の内訳

Number of deflation mode	0	1	10	25	50	100
SpMV	82.91 %	71.01 %	56.48 %	41.26 %	30.98 %	14.43 %
Inner product	10.94 %	6.98 %	6.01 %	5.35 %	4.76 %	2.76 %
DeMV	0.00 %	9.55 %	11.66 %	14.30 %	16.32 %	19.62 %
DeMV (without comm)	0.00 %	2.72 %	10.51 %	17.51 %	18.83 %	23.21 %
Precond	3.44 %	2.91 %	2.37 %	1.73 %	1.28 %	0.54 %

表 1 より、疎行列ベクトル積とベクトル内積の計算時間割合は縮約次数の増加に伴って減少し、逆に密行列ベクトル積と分割領域間での通信を要さない密行列ベクトル積の割合は増加することがわかる。これは縮約次数 M が大きくなると固有モード Z のサイズが $N \times M$ に増加することで、縮約処理に要する密行列ベクトル積の演算量が $O(M^2)$ のオーダーであるため、これに含まれる密行列ベクトル演算の計算割合が徐々に卓越するためである。

図 3 に、基底の数 100 における Deflated 共役勾配法の並列計算性能を示す。図 3 より、総計算時間はおよそ理想的な加速率を示すことがわかる。しかし、ベクトル内積に注目すると、並列数が増加するにつれ加速率の増加が緩やかになり、一定の値に漸近する。これは並列数が増えるに従って、ベクトル内積のうち全対全通信の通信時間が占める割合が主体的になったためと考えられる。一方、本手法と検討範囲においてベクトル内積が全体の計算時間に占める割合は大きくないため、この現象が全体の並列計算性能に与える影響は限定的である。また密行列ベクトル積に注目すると、縮約数が比較的小さい場合では加速率が比較的悪いことがわかる。これは、縮約数 M によって deflated 共役勾配法のアルゴリズム上で計算する密行列ベクトル積の計算オーダーが決定されることによるものであり、縮約数が小さい場合領域内での計算量が小さく、通信時間の割合が卓越すると考えられ、これは得られた測定結果の傾向と一致する。

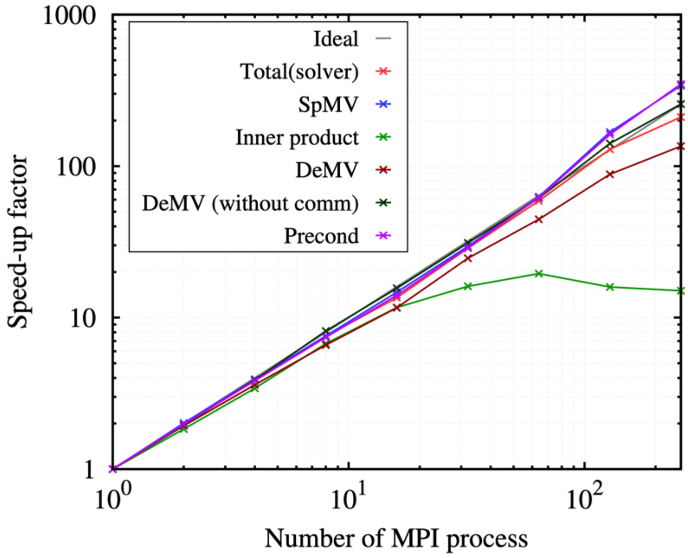

図 3 基底本数 100 における Deflated 共役勾配法の並列計算性能

次に、三次元切り欠き材料の破断試験を模擬した重合メッシュ法による弾性解析を対象として、提案手法の適用可能性評価を実施した。ここで、節点数 42,453、要素数 36,556 のモデルを用い、切り欠きの周辺にローカルメッシュを配置した。材料定数はヤング率 $E=3.2$GPa、ポアソン比 $\nu=0.35$ とした。収束判定閾値は 1.0×10^{-8} である。片持ち梁の曲げ問題と同様に、大域的固有モード縮約前処理の並列計算性能を評価するため、既知の固有モードの次数を 0、1、10 と設定した。並列数はモデルの自由度を加味して、1、2、4、8、16 並列とした。検討の結果､最も有効であったのは固有モードの次数を 10 と設定した場合であり、標準的な共役勾配法と対角スケーリング前処理において反復回数が 795 であったのに対し、提案手法では反復回数を約 36%削減し 504 回で収束する結果が得られた。

これらの結果から 大域的固有モード縮約は、検討したモデルに対して実用で想定される反復回数となる縮約次数においても良好な並列計算性能を示すことが確認された。

5．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計0件

〔学会発表〕　計3件（うち招待講演　0件／うち国際学会　0件）

1．発表者名 森田直樹，岸康太，竹岡侑紀，三目直登，柴沼一樹
2．発表標題 領域分割型有限要素法に基づく重合メッシュ解析の最適ロードバランスの検討
3．学会等名 第25回計算工学講演会，日本計算工学会，オンライン，2020年6月.
4．発表年 2020年

1．発表者名 村井拓海，三目直登，森田直樹
2．発表標題 有限要素解析における縮約モデルを用いた反復法前処理
3．学会等名 第27回計算工学講演会，日本計算工学会，秋田，2022年6月.
4．発表年 2022年

1．発表者名 村井拓海，三目直登，森田直樹
2．発表標題 並列有限要素解析における大域的固有モードを利用した Deflated CG 法の性能評価
3．学会等名 第28回計算工学講演会，日本計算工学会，茨城，2023年6月.
4．発表年 2023年

〔図書〕　計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

－

6．研究組織

	氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考

7．科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕　計0件

８．本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関