

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 13 日現在

機関番号：13701

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25390148

研究課題名(和文) 超並列計算による材料非線形ボクセルFEM解法の開発

研究課題名(英文) Development of material nonlinear voxel FEM method using massively parallel computer

研究代表者

永井 学志 (NAGAI, Gakuji)

岐阜大学・工学部・准教授

研究者番号：90334359

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、ボクセル有限要素計算のための3次元超並列計算手法を開発した。すなわち、MPI/Open-MPによるハイブリッド並列型のライブラリを開発するとともに、GPU計算のためのコードも開発した。また、ボクセルFEMで任意形状を表現するための数値積分法についても検討を行い、次元あたり3点あれば良いという知見を得た。さらに、磁歪材料などの計算のためにボクセルFEM型の節点・辺要素による非線形解法を開発した。

研究成果の概要(英文)：We have developed three-dimensional computational procedure using massively parallel computer for voxel finite element method. The results are followings;

1) Development of MPI/Open-MP hybrid type library for parallel computing and also for GPU. 2) Numerical integration scheme of only three integration points per dimension for representing arbitrary shapes within voxel FEM framework. 3) Development of nonlinear computation for magneto-restrictive materials with voxel-based nodal-edge finite element.

研究分野：計算力学

キーワード：デジタルイメージ 超並列 ボクセルFEM 機能性材料

1. 研究開始当初の背景

まず、コンピュータハードウェアに関して、今世紀に入ってからというもの、単一の演算コアでの逐次実行の計算速度は頭打ちのままである。このような状況を踏まえて、昨今ではパソコンやモバイル端末ですら、SIMD (単一命令複数データ) によるコア内の(i)ベクトル並列化と、メモリ共有による(ii)コアのマルチ化という2重の並列化がなされている。さらに、京スパコンや TSUBAME (東工大 GPU) を筆頭とする大規模クラスタ型の計算機では、(iii)高性能ネットワークで相互接続するメモリ分散型の並列化がなされている。現在でも、GPU の AI への特化を除けば、状況はほとんど同じままである。

つぎに、固体の標準的な数値解法としては FEM が広く普及している。その最大の特徴は複雑な幾何形状を任意の要素形状の集合 (非構造格子) により高精度に近似できることにある。この FEM 解析を超並列化する正統派は、国内であれば奥田・中島グループ (東京大) の解法や、金山グループ (九州大) の領域分割法であり、これらが本命なことに疑いはない。しかし、非構造格子のデータ構造は複雑であるため、その超並列化には高度なグラフ理論 (キーワード: METIS ライブラリ, 多彩色問題) を必要とする。

一方で、各種複合材料のマイクロ挙動 (CFRP の破壊現象、鋳造品の欠陥巣由来の疲労、海綿骨の再成長など) のようなソリッド問題を対象とするとき、X線 CT による 3-D デジタル撮像や、その撮像 3-D 変形場のデジタル画像相関との相性を考えると、ボクセル系 FEM 解析が実に魅力的である。ボクセル系 FEM は基本的に構造格子であるがゆえに、データ構造を単純化できて、したがって超並列化は比較的容易であり、さらにはマルチグリッド反復法も実装し易い。計算力学系や機械材料実験系の研究者が、情報処理系の超並列化の高度な技法を学習しなくて済むという点においても、魅力的である。

2. 研究の目的

本研究の目的は、機能性材料を含めた固体の材料非線形ボクセル FEM 解析を、数千コア以上の超並列計算環境 (GPU やインテル MIC) にて実施することである。本目的を達成するために、以下の小目的に分割する。

- (1) メモリ共有・分散型のハイブリッド計算のために、簡便なデータ構造を提案
- (2) 材料非線形を扱うために、境界のギザギザ問題を緩和する非適合要素を検討
- (3) 磁歪・圧電材料 (curl-curl 型 PDE) のために、ボクセル辺要素を実装・評価

3. 研究の方法

申請においては、機能性材料を含めた固体の材料非線形ボクセル FEM 解法の開発を行うため、研究の目的にて述べた (1) ~

(3) のそれぞれに対して、以下の研究・開発を実施するとした。

- (1-1) 超並列計算用データ構造を検討し、メモリ共有・分散型のハイブリッドコードを作成
- (1-2) そのコードを弾塑性問題に拡張
- (2-1) 仮定ひずみモード埋め込み型の非適合要素などにより、ギザギザ問題の緩和を検討
- (2-2) ボクセル辺・節点混合要素に対してモード埋め込みを検討
- (3) 磁歪の材料非線形問題のため、データ構造をボクセル辺・節点混合要素としコード作成

4. 研究成果

研究の成果としては、上記のすべてでなくその一部である (1-1), (2-1), (3) を達成するに留まった。以下に順を追って述べる。

(1) 超並列ボクセル FEM のための袖通信ライブラリの開発

まず、ボクセル FEM 解析を分散メモリ型による MPI 並列システム上で行う場合、解析領域を分割することにより各ノードに計算を分担させる方法をとる。本研究ではボクセル格子を扱うため、これに特化した一般化 k-d 木による領域分割法を用いる。この方法は次元を順に繰り返しながら再帰的に領域を等分割するものである。

この領域分割にともない、ノード間での通信が発生する。例えば図-1(c) に示すような領域分割の場合、各領域は同図 (b) に示すように各ノードに分配される。すなわち、要素と節点は各ノードに分散した状態で記憶され、特に領域境界上の節点はノード間にまた

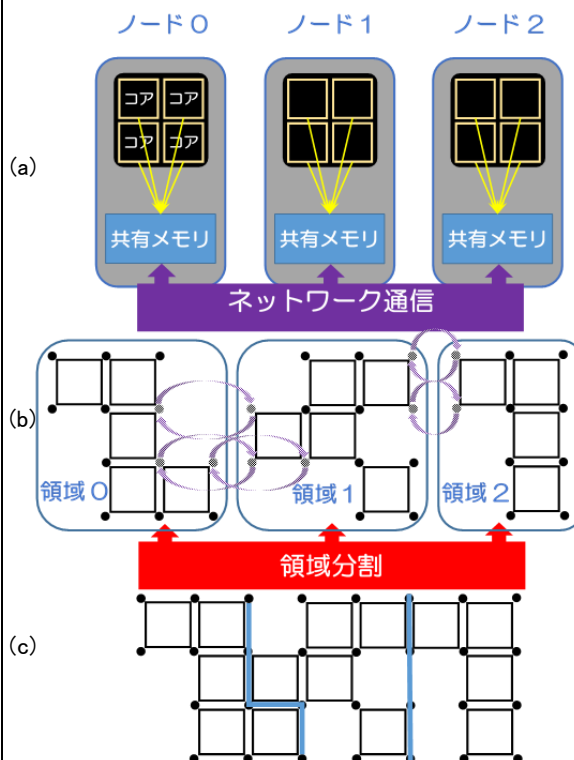


図-1 並列化のための領域分割と MPI 通信

がって2重に記憶される。したがって、内力を節点に足し込んでいく処理では、領域境界上の節点について同図(b)の矢印で結んでいるようなMPI通信を行う。なお、この通信は基本的に単純な1対1対応であり、領域内部の足し込み処理の裏処理として隠蔽する。

つぎに、共有メモリ型によるOpenMP並列システムでは、分配された領域の内力計算 $f_{in} \leftarrow Ku$ を、ノード内の各コアに分担させる方法をとる。しかし、各コアが同時に同位置のメモリに値を書き込む現象（書き込み競合）が発生するため、要素のマルチカラー化によりこれを回避する。マルチカラー化は、互いに依存関係がなく同時に計算できる要素に同じ色を割り当てる方法である。具体的には2色を割り当て、1要素分の厚さで交互に色を割り当てると、同色の層の間では節点を共有しない。そのため、1層分の計算をまとめて1コアに担当させることで書き込み競合を回避する。

最後に、CPUのコアに対応してGPUへの実装法についても、検討した。すなわち、CUDA C および CUDA Fortran によりコード開発を行い、計算速度の観点から最終的に CUDA C を計算速度の律速段階に利用すべきという結論を得た。

(2) 領域表現と数値積分による精度改良

デジタル画像に基づくボクセルFEMにおいて、要素内での領域 Ω_e の表現には、陽関数ではなく陰関数を利用する。すなわち、離散的な画素値を補間することで連続的なスカラ場 $g(\xi)$ を再構成し、境界を表す閾値 θ を用いて、

$$\Omega_e = \{ \xi \in \mathbb{R}^2 \mid g(\xi) - \theta > 0 \}$$

と表す。

さらに数値積分では、Newton-Cotes 積分法の考えに基づき、領域形状を重み係数に反映させる。具体的には、領域 Ω_e における積分 $I = \int_{\Omega_e} f(\xi) d\Omega$ を直接評価するのではなく、次のように2回に分けて評価する。まず、積分点 j における重み係数

$$w_j = \int_{\Omega_e} l_j(\xi) d\Omega$$

を区積分分により十分な精度で評価しておく。ここで、 $l_j(\xi)$ は高々2次程度のラグランジュ補間の基底関数である。つぎに、この w_j を用いて $I \approx \sum_j w_j f(\xi_j)$ と評価する。なお、この評価は反復求解で頻出の可能性があるが、その計算量は一定であるため、複数の要素を効率よく並列に処理できる。

片持ちりの曲げを例に、メッシュサイズを小さくしていったときの数値解の収束性から、本手法に基づくボクセルFEMの性能評価を行う。解析対象のはりとメッシュパターンを図-2に示す。ヤング率は150[GPa]、ポアソン比は0.0とした。図-3に、理論解に対する数値解の比の収束性を示す。従来のボクセルFEMでは、はり高さが結果として2要素となる場合に最大200%の差が生じるが、本手法では約10%の差であった。また、はり高さが4要素の場合には3%の差に収まった。なお、境界付近に不合理な応力が発生しないことも確認した。

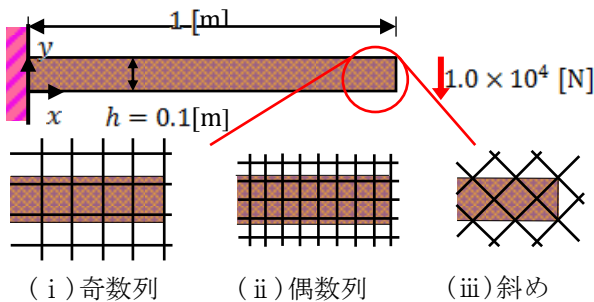


図-2 解析対象とメッシュパターン

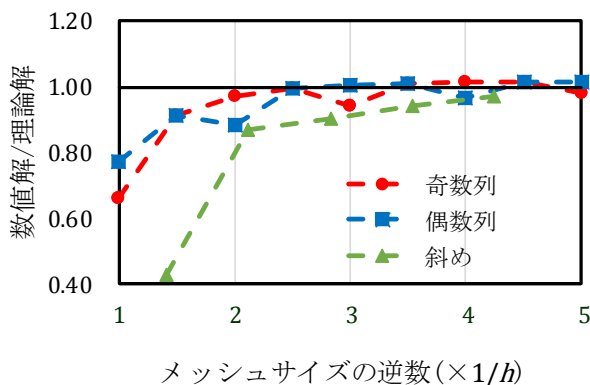


図-3 メッシュサイズの縮小に伴う数値解の収束

(3) 磁歪構成則のボクセル FEM への組み込み

図-4に示すようなL字型の磁歪モデル

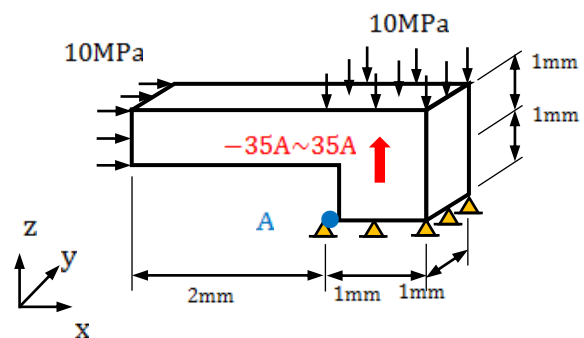
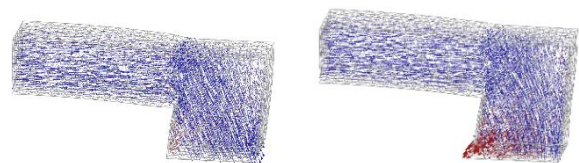


図-4 解析モデル



(b) 全主応力分布

図-5 ベクトル表示 (変形誇張)

ルを考える。機械的な拘束条件として、底面を完全固定し、上面と側面の一部に圧力(-10MPa)を加える。また、磁気的な境界条件として、全側面を無漏れとし、上面と下面の磁位差を正負交番負荷(-35A~35A)する。なお、磁歪の主軸をz軸とする。

図-5に磁位差による主応力の分布を示す。磁位差の増加に伴い、磁束密度も増加し、同図の主応力も底面近傍にて急激に増加している。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計0件)

[学会発表] (計7件)

- ① 夏田, 永井, 桑水流, 小林, 戸田, アルミニウム鑄造合金の疲労試験下 X線 CT 画像からのひずみ場同定, 2017. 05, 大宮
- ② 横井, 永井, 桑水流, 小林, 戸田, X線 CT を用いたアルミニウム鑄造合金のひずみ場同定, M&M2016 材料力学カンファレンス, 2016. 10, 神戸
- ③ 藤本, 永井, 玉川, 加力装置付き X線 CT スキャナと VoxelFEM 解析による粒状ゲルのヤング率測定, 日本計算工学会, 2016. 05, 新潟
- ④ G. Nangai, Y. Nakagawa, GPU Computing of Voxel FEM Using Three-Dimensional Digital Images, ATEM15, 2015. 10, 豊橋
- ⑤ 伊藤, 永井, CUDA Fortran によるボクセル FEM 計算 E-by-E 部の性能評価, 2015. 06, 筑波
- ⑥ 近藤, 中川, 永井, ボクセル FEM コードの改良と Tesla K40 によるベンチマーク, 日本計算工学会, 2015. 06, 筑波
- ⑦ 福手, 佐藤, 永井, 超並列ボクセル FEM のための袖通信ライブラリの開発, 日本計算工学会, 2014. 06, 広島

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計 件)

名称：
発明者：
権利者：

種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

[その他]
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

永井 学志 (NAGAI, Gakuji)

岐阜大学・工学部・准教授

研究者番号：90334359

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：

(4) 研究協力者

()