

(51)Int.Cl.

F I

G 0 6 F 17/13 (2006.01)

G 0 6 F 17/13

G 0 1 M 19/00 (2006.01)

G 0 1 M 19/00

Z

請求項の数3 (全21頁)

(21)出願番号 特願2002-571598(P2002-571598)
 (86)(22)出願日 平成14年5月13日(2002.5.13)
 (86)国際出願番号 PCT/JP2002/004617
 (87)国際公開番号 W02002/093412
 (87)国際公開日 平成14年11月21日(2002.11.21)
 審査請求日 平成14年6月3日(2002.6.3)

(73)特許権者 599172782
 株式会社アライドエンジニアリング
 東京都品川区大井1丁目21番17号
 (73)特許権者 503360115
 独立行政法人科学技術振興機構
 埼玉県川口市本町4丁目1番8号
 (74)代理人 100100402
 弁理士 名越 秀夫
 (74)代理人 100088214
 弁理士 生田 哲郎
 (72)発明者 秋葉 博
 東京都品川区大井1丁目21番17号 株
 式会社アライドエンジニアリング内

最終頁に続く

(54)【発明の名称】並列有限要素法計算システム

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

自由度100万以上の超大規模構造問題を解く並列有限要素法計算システムであって、
全体領域を複数の部分領域に分割する領域分割手段、
該分割された部分領域を各計算ノード(CPU)に割り当てる部分領域分配手段、
各ノードにおいて受け持ちの部分領域に対する剛性マトリックスを作成する手段、
全自由度表示のcoarse空間の基底を各ノードの担当部分領域に対して作成し、各部分領域の剛性マトリックスを保持するノードにてその部分領域の寄与を求め、それを全体にわたって加算して部分領域全体重ね合わせ運動マトリックスを作成する手段、
該部分領域の重ね合わせ運動から初期変位を設定し、設定した初期変位から初期残差を求め、初期残差ベクトルを各ノードの担当部分領域分のみを保持する手段、
各ノードの担当分について対角スケーリング前処理を行う手段、
部分領域全体の重ね合わせ運動を求め、該運動の初期値を設定しその値を担当する部分領域のみ該当ノードに保持し、全自由度のCoarse Grid前処理を行う手段、
初期残差に基づいて全自由度のCG法探索方向ベクトル初期値を担当部分領域に関して設定する手段、
全自由度のCG法探索方向ベクトル初期値から出発して、反復ステップにおいて全自由度の変位を更新し、同様に反復ステップにおいて全自由度の残差を更新する手段、
反復ステップにおいて更新された全自由度の残差に対して対角スケーリング前処理を行う手段、

10

20

反復ステップにおいて全自由度の C o a r s e G r i d 前処理を行う手段、
 反復ステップにおいて全自由度の残差に基づいて全自由度の C G 法探索方向ベクトルを更新する手段、
 更新した全自由度の反復処理が収束していない場合は、全自由度の変位の更新に戻り再度実行し、全自由度の反復処理が収束した場合は計算を終了する全自由度の前処理つき射影 C G 法反復計算手段、
 及び全自由度の反復処理が収束した場合に全自由度の変位を変位解とし、変位解を出力する手段を備えたことを特徴とする並列有限要素法計算システム。

【請求項 2】

自由度 1 0 0 万以上の超大規模構造問題を解く並列有限要素計算システムにおいて、 10
 全体領域を複数の部分領域に分割する領域分割手段、
 該分割された部分領域を各計算ノード (C P U) に割り当てる部分領域分配手段、
 各ノードにおいて受け持ちの部分領域に対する剛性マトリックスを作成する手段、
 全自由度表示の c o a r s e 空間の基底を各ノードの担当部分領域に対して作成し、各部分領域の剛性マトリックスを保持するノードにてその部分領域の寄与を求め、それを全体にわたって加算して部分領域全体重ね合わせ運動マトリックスを作成する手段、
 該部分領域の重ね合わせ運動から初期変位を設定し、設定した初期変位から初期残差を求め、初期残差ベクトルを各ノードの担当部分領域分のみを保持する手段、
 各ノードの担当分について対角スケーリング前処理を行う手段、
 部分領域全体の重ね合わせ運動を求め、該運動の初期値を設定しその値を担当する部分領域のみ該当ノードに保持し、全自由度の C o a r s e G r i d 前処理を行う手段、 20
 初期残差に基づいて全自由度の C G 法探索方向ベクトル初期値を担当部分領域に関して設定する手段、
 全自由度の C G 法探索方向ベクトル初期値から出発して、反復ステップにおいて全自由度の変位を更新し、同様に反復ステップにおいて全自由度の残差を更新する手段、
 反復ステップにおいて更新された全自由度の残差に対して対角スケーリング前処理を行う手段、
 反復ステップにおいて全自由度の C o a r s e G r i d 前処理を行う手段、
 反復ステップにおいて全自由度の残差に基づいて全自由度の C G 法探索方向ベクトルを更新する手段、 30
 更新した全自由度の反復処理が収束していない場合は、全自由度の変位の更新に戻り再度実行し、全自由度の反復処理が収束した場合は計算を終了する全自由度の前処理つき射影 C G 法反復計算手段、
 及び全自由度の反復処理が収束した場合に全自由度の変位を変位解とし、変位解を出力する手段として機能させるための並列有限要素法計算プログラム。

【請求項 3】

自由度 1 0 0 万以上の超大規模構造問題を解く並列有限要素計算システムにおいて、
 全体領域を複数の部分領域に分割する領域分割手段、
 該分割された部分領域を各計算ノード (C P U) に割り当てる部分領域分配手段、
 各ノードにおいて受け持ちの部分領域に対する剛性マトリックスを作成する手段、 40
 全自由度表示の c o a r s e 空間の基底を各ノードの担当部分領域に対して作成し、各部分領域の剛性マトリックスを保持するノードにてその部分領域の寄与を求め、それを全体にわたって加算して部分領域全体重ね合わせ運動マトリックスを作成する手段、
 該部分領域の重ね合わせ運動から初期変位を設定し、設定した初期変位から初期残差を求め、初期残差ベクトルを各ノードの担当部分領域分のみを保持する手段、
 各ノードの担当分について対角スケーリング前処理を行う手段、
 部分領域全体の重ね合わせ運動を求め、該運動の初期値を設定しその値を担当する部分領域のみ該当ノードに保持し、全自由度の C o a r s e G r i d 前処理を行う手段、
 初期残差に基づいて全自由度の C G 法探索方向ベクトル初期値を担当部分領域に関して設定する手段、 50

全自由度のCG法探索方向ベクトル初期値から出発して、反復ステップにおいて全自由度の変位を更新し、同様に反復ステップにおいて全自由度の残差を更新する手段、
反復ステップにおいて更新された全自由度の残差に対して対角スケーリング前処理を行う手段、

反復ステップにおいて全自由度のCoarse Grid前処理を行う手段、

反復ステップにおいて全自由度の残差に基づいて全自由度のCG法探索方向ベクトルを更新する手段、

更新した全自由度の反復処理が収束していない場合は、全自由度の変位の更新に戻り再度実行し、全自由度の反復処理が収束した場合は計算を終了する全自由度の前処理つき射影CG法反復計算手段、

及び全自由度の反復処理が収束した場合に全自由度の変位を変位解とし、変位解を出力する手段として機能させるための並列有限要素法計算プログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体。

10

【発明の詳細な説明】

技術分野

本発明は、自由度100万以上の超大規模構造問題を効果的に解く、超大規模並列有限要素法ソルバアルゴリズムに関する。並列CGアルゴリズムを基盤とし、領域分割(Domain Decomposition)に基づく共役射影勾配法アルゴリズムを取入れたものである。当該アルゴリズムを「CGCG法」(Coarse Grid CG method, CGCG method)と称する。Kを当該構造問題の剛性行列とし、領域分割による部分領域単位の自由度の空間をcoarse空間、それにK-直交な補空間をfine空間と称する。CGCG法は、射影としてfine空間へのK-直交射影を採用した共役射影勾配(Conjugate Projected Gradient algorithm: 以下射影CG法と称する)を並列処理で行なうものである。

20

背景技術

構造問題は、通常次のように扱われる。まず、対象となる構造物を連続体として定式化し、連続体の運動方程式(静的問題の場合は釣合い方程式)を定める。この方程式はほとんどの場合厳密に解くことが不可能であり、数値解析的に解かざるを得ない。そのための連続体問題の離散近似的再定式法が必要となる。その方法の一つとして有限要素法(日本機械学会 計算力学ハンドブック(I有限要素法 構造編)日本機械学会1998)がある。有限要素法では、まず連続体の占める空間領域を複数の要素(有限要素法の要素)に分割し、非ゼロの値をとる領域が各要素に局在した関数(形状関数)を導入して、連続体変位場をそれらの関数の重ね合わせで表現されるものに限定する近似により、連続体の変位場およびその運動方程式(あるいは釣合い方程式)を離散化する。この離散化により、方程式は一つ(静的線形問題の場合)あるいは複数(例えば非線形問題の場合増分ステップ毎、動的問題の場合時間ステップ毎)の線形方程式に帰着される。有限要素法による連続体領域の要素分割の分割数により線形方程式が扱う自由度(次元)数が異なり、一般に近似をよくするために分割数を増やせば自由度数は増加し、対応する線形方程式の求解の難易度が高まる。

30

微小変形の静的構造問題は有限要素法においては式1のような、有限次元内積ベクトル空間V上の線形問題に帰着される。

40

【式1】

$Ku = F$

ここで、Vは許容変位場(変位場の境界条件を満たすベクトル場)の空間、KはVの次元dim V次剛性マトリクス(正定値対称)、

u は v の変数ベクトル、 F は外力を表わす $Kv = v$ の定ベクトル

である。Vの次元dim Vは問題の自由度数と等しい。Vの中から式1を満たすベクトルuを探し出すことがソルバの課題になる。

先ず、本発明の基盤となる共役射影勾配法(CPG: Conjugate Projected Gradient Algorithm: C.Farhat F.-X. Roux: Implicit Parallel Processing in Structural Mechanics, Computational Mechanics Advances 2,1-124,1994)について説明する。一般に有限次元

50

内積ベクトル空間V上の線型方程式式 2

【式 2】

$$Ku = F, \quad u, F \in V$$

を考える。Kは正定値対称線形変換である。Vの部分空間Yを一つ選ぶ。VをYへK-直交射影するK-直交射影子 $P^{(Y)}$, $KP^{(Y)} = P^{(Y)T}K$ が一意に決まる。 $P^{(Y)T}$ は $P^{(Y)}$ の転置である。さら

に条件 $P^{(Y)} + P^{(a)} = 1$ を満たすK-直交射影子 $P^{(a)}$ ($P^{(Y)}$ の補射影子), $KP^{(a)} = P^{(a)T}K$ が一意に決まり、全空間 V は $P^{(Y)}$ と $P^{(a)}$ の像空間 Y, $V^{(a)}$ へ式 3 とK-直交直和分解される。

【式 3】

$$V = Y \oplus V^{(a)}, \quad Y \perp_K V^{(a)}, \quad \begin{pmatrix} Y \\ V^{(a)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P^{(Y)} \\ P^{(a)} \end{pmatrix} V$$

また、 $P^{(Y)}$ と $P^{(a)}$ のK-直交性をまとめて書けば式 4 なので、

【式 4】

$$K \begin{pmatrix} P^{(Y)} \\ P^{(a)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P^{(Y)T} \\ P^{(a)T} \end{pmatrix} K$$

線形方程式 式 2 は

【式 5】

$$K \begin{pmatrix} P^{(Y)} \\ P^{(a)} \end{pmatrix} u = \begin{pmatrix} P^{(Y)T} \\ P^{(a)T} \end{pmatrix} F$$

式 5 と分解され、F の KY-成分 $P^{(Y)T}F$ と $KV^{(a)}$ -成分 $P^{(a)T}F$ 、あるいは u の Y-成分 $P^{(Y)}u$ と $V^{(a)}$ -成分 $P^{(a)}u$ は独立に扱えることに

なる。つまり方程式式 2 は独立な 2 つの方程式式 6、式 7 に式 8 とK-直交直和分離される。便宜のため、以下Yを直接法空間、YのK-直交補空間となる $V^{(a)}$ を反復法空間と称する。

【式 6】

$$Ku^{(Y)} = F_{(Y)}, \quad u^{(Y)} \in Y, \quad F_{(Y)} \in KY$$

【式 7】

$$Ku^{(a)} = F_{(a)}, \quad u^{(a)} \in V^{(a)}, \quad F_{(a)} \in KV^{(a)}$$

【式 8】

$$u = u^{(a)} + u^{(Y)}, \quad F = F_{(a)} + F_{(Y)}$$

直接法空間Yの部分空間Wを特別に設定することを考える。このWを以下coarse空間と称する。WのK-直交補空間をfine空間と称する。YをWとWのK-直交補空間 W^c にK-直交直和分解すれば、方程式式 6 と同様にW上の方程式式 9

【式 9】

$$u^{(W)} \in W : Ku^{(W)} = F_{(W)}, \quad F_{(W)} = P^{(W)T}F \in P^{(W)T}V = KW$$

が設定される。ここで $P^{(W)}$ はWへのK-直交射影子である。この方程式は coarse grid 問題と称される。W がその基底 $\{e_j^{(W)}\}_j$ の

設定により定義されている場合、式 9 は具体的に式 10 と定式化される。

【式 10】

$$u^{(W)} = e_j^{(W)} u^j, \quad K_{ij}^{(W)} u^j = F_i$$

ここで、式 11 と定義する。

【式 11】

10

20

30

$$K_{ij}^{(w)} = e_i^{(w)} \cdot K e_j^{(w)}, \quad F_i = e_i^{(w)} \cdot F = e_i^{(w)} \cdot F^{(w)}$$

$K_{ij}^{(w)}$ は coarse grid マトリクスと呼ばれる。第二式の等号は w と

fine 空間 $w^c \oplus_K V^{(a)}$ の K による像空間 $K(w^c \oplus_K V^{(a)})$ とが直交す

ることからくる。

K -直交直和分解した方程式のうち式 6 を直接法で、式 7 を反復法で解くことを考える。方程式 式 7 に反復法を適用すると第 n ステップ反復式が式 1 2、式 1 3 と書ける。

【式 1 2】

$$K u_n^{(a)} + r_{(a)n} = F_{(a)}, \quad u_n^{(a)} \in V^{(a)}, \quad F_{(a)} \in K V^{(a)}$$

【式 1 3】

$$r_{(a)n} = F_{(a)} - K u_n^{(a)}, \quad u_n = u^{(y)} + u_n^{(a)}$$

$r_{(a)n}$ は第 n ステップの残差である。 $r_{(a)n} \in K V^{(a)}$ である。反復法とし

て $P^{(a)} G P^{(a)T}$ (G は対称) を前処理行列にもつ前処理つき $C G$ 法 :

$P^{(a)} G P^{(a)T}$ - $C G$ 法、式 1 4 ~ 式 1 6 を採用する。

【式 1 4】

$$p_0 = P^{(a)} G r_{(a)0} \in V^{(a)}$$

20

【式 1 5】

$$u_{n+1}^{(a)} = u_n^{(a)} + \alpha_n p_n, \quad r_{(a)n+1} = r_{(a)n} - \alpha_n K p_n, \quad \alpha_n = \frac{r_{(a)n} \cdot G r_{(a)n}}{p_n \cdot K p_n}$$

【式 1 6】

$$p_{n+1} = P^{(a)} G r_{(a)n+1} + \beta_n p_n, \quad \beta_n = \frac{r_{(a)n+1} \cdot G r_{(a)n+1}}{r_{(a)n} \cdot G r_{(a)n}}$$

ここで、 p_n は $P^{(a)} G P^{(a)T}$ - $C G$ 法探索方向ベクトルである。 $P^{(a)T} r_{(a)n} = r_{(a)n}$

$K V^{(a)}$ に注意。このように、 K -直交直和分解した方程式のうち片方について前処理付き $C G$ 法で解く方法を共役射影勾配法 ($C P G$ 法) と称する。もう片方の方程式を直接法で

30

解くことも含めて、便宜上以下、これを射影 $C G$ 法と称する。

部分空間 $w \oplus_K V^{(a)}$ への K -直交射影子を $P^{(w+a)}$ と記す。 $P^{(a)}$ そ

のものを直接計算することは不可能だが、 $P^{(w+a)}$ は計算可能で w の

基底 $\{e_j^{(w)}\}_j$ が与えられている場合を考える。その場合は 式 1 4、

式 1 6 での前処理 $P^{(a)} G r_{(a)n}$ の計算は次のように行なう。 $P^{(a)} G r_{(a)n}$ は

式 1 7 と書けて、

【式 1 7】

$$P^{(a)} G r_{(a)n} = P^{(w+a)} G r_{(a)n} - \mu_n^{(w)}, \quad K \mu_n^{(w)} = P^{(w)T} K G r_{(a)n}$$

40

式 4 から $\mu_n^{(w)} \in w$ がわかる。そこで、前処理計算 $P^{(a)} G r_{(a)n}$ を coarse

grid 問題式 1 8 に帰着させる。

【式 1 8】

$$\mu_n^{(w)} \in w : K \mu_n^{(w)} = P^{(w)T} K G r_{(a)n}$$

coarse grid 問題は式 1 0 の手順にしたがって解くことができる。

$C G C G$ 法の特徴づけのため、既存の有限要素法並列ソルバアルゴリズム $D D M$ 、 $B D D$ 法、並列 $C G$ 法を説明する。以下に述べるとおり、領域分割に基づいた既存の有限要素法

50

並列ソルバルゴリズム DDM、BDD法は、K-直交直和分解法に基づいた射影CG法の一種とみなせる。以下、有限要素法にしたがい定式化された構造問題の全自由度の空間を V とし、解くべき線形方程式を式 19 とする。

【式 19】

$$Ku = F, \quad u, F \in V$$

ここで、 K は剛性マトリクスと呼ばれる。

超大規模な（自由度が 100 万程度以上の）問題を効率的に（特に並列処理で）解くことを目的に考案された方法の一つとして領域分割法（DDM: Domain Decomposition Method）がある。有限要素法により分割された各要素を互いに隣接するもの同士で適当にグループ分けする。各グループの占める空間領域を部分領域（subdomain）と称する（第 1 図参照）。これにより、全領域がまず部分領域へ分割され、次に各部分領域の有限要素へ分割されるという具合に空間が階層的に分割離散化されることになる。これにしたがい、領域全体に関する処理が各部分領域ごとの処理と部分領域間の処理の 2 段階に分けられる。特に各部分領域ごとの処理は並列に行なうことができる。上記の処理の 2 段階分離は具体的には、領域全体の変位場を、部分領域内部に働く外力に応答する部分領域内部の変位場と、部分領域間の境界（内部境界と呼ぶ）上に働く外力に応答する残りの変位場に分けて別々に処理することにより実現している。後者の変位場はさらに部分領域内部の変位場と内部境界上の変位場に分けられ、前者は後者の従属変数になる。独立変数である内部境界の自由度については CG 法により解く。内部境界について解けば、部分領域内部の変位場はその境界上の変位を境界条件とし負荷ゼロの変位場として定まる。

詳しく述べると、まず構造物の占める空間領域全体 $\bar{\Omega}$ をその境界 Γ 、部分領域内部全部の合併領域 Ω_i および内部境界 Γ_i に分ける。 Γ と Γ_i は一部重複する。 $\bar{\Omega}$ 上の許容変位場の自由度空間が全自由度空間 V を成す。規格直交基底として形状関数列 $\{\varphi_\alpha\}_\alpha$ をとることで V に内積を定義する。この内積は $\{\varphi_\alpha\}_\alpha$ に依存し、離

散化の方法により変わる計算の便宜上設定されるものであり、物理的あるいは客観的意味はない。領域 $\bar{\Omega} - \Gamma_i$ は Ω_i を含む。 $\bar{\Omega} - \Gamma_i$ 上の許容変位場の自由度の空間 V^i と内部境界 Γ_i 上の許容変位場の自由度の空間 V^s は直交し、全自由度空間 V は式 20 のように V^i と V^s に直交直和分解する。

【式 20】

$$V = V^i \oplus V^s, \quad V^i \perp V^s$$

この直和分解に基づき V 上の正定値対称線形変換 K は $K = \begin{pmatrix} K_{ii} & K_{is} \\ K_{si} & K_{ss} \end{pmatrix}$

とブロック分解されるが、これに基づき式 21 とブロック対角化する。

【式 21】

$$K = \begin{pmatrix} K_{ii} & K_{is} \\ K_{si} & K_{ss} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & K_{ii}K_{ii}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{ii} & \\ & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & K_{ii}^{-1}K_{is} \\ & 1 \end{pmatrix}$$

S は Schur の補元と呼ばれる。射影子 $P^{(i)}$ 、 $P^{(s)}$ を式 22 と定義する。

【式 22】

$$P^{(i)} = \begin{pmatrix} 1 & K_{ii}^{-1}K_{is} \\ & 0 \end{pmatrix}, \quad P^{(s)} = 1 - P^{(i)} = \begin{pmatrix} 0 & -K_{ii}^{-1}K_{is} \\ & 1 \end{pmatrix}$$

$P^{(s)}$ は内部境界 Γ_i 上の変位場を、それを境界条件とし外力を受けない $\bar{\Omega} - \Gamma_i$ 上の変位場に対応づける。定義から式 23、式 24 であるから、

【式 23】

10

20

30

40

$$KP^{(i)} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & K_{si}K_{ii}^{-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{ii} & \\ & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & K_{ii}^{-1}K_{is} \\ & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_{ii} & K_{is} \\ K_{si} & K_{si}K_{ii}^{-1}K_{is} \end{pmatrix}$$

【式 2 4】

$$KP^{(s)} = \begin{pmatrix} 0 \\ S \end{pmatrix}$$

式 2 5 となり、

【式 2 5】

$$K \begin{pmatrix} P^{(i)} \\ P^{(s)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P^{(i)T} \\ P^{(s)T} \end{pmatrix} K$$

10

$P^{(i)}$, $P^{(s)}$ は条件 $P^{(i)} + P^{(s)} = 1$ を満たす K -直交射影子である。特に、

$$\begin{pmatrix} 0 \\ S \end{pmatrix} = P^{(s)T} K P^{(s)} \text{ に注意。したがってこれら射影子により、} v \text{ が}$$

式 2 6 と

【式 2 6】

$$V = V^{(i)} \oplus V^{(s)}, \quad V^{(i)} \perp_K V^{(s)}, \quad V^{(i)} = P^{(i)}V, \quad V^{(s)} = P^{(s)}V$$

K -直交直和分解される。 $(V^i \ V^s)$ と $(V^{(i)} \ V^{(s)})$ の関係は式 2 7 で

ある。

20

【式 2 7】

$$V^{(i)} = V^i, \quad KV^{(s)} = \begin{pmatrix} 0 \\ SV^s \end{pmatrix}, \quad V^{(s)} = P^{(s)}V^s = \begin{pmatrix} -K_{ii}^{-1}K_{is} \\ 1 \end{pmatrix} V^s$$

$V^{(s)}$ については次のことがわかる。まず第 2 式は $V^{(s)}$ が $\bar{\Omega}-\Gamma_s$

上の反力がゼロであるような変位場の空間であることを示している。一方第 3 式は、 $V^{(s)}$ が $\bar{\Omega}$ 上の変位場を幾何的境界条件として持つ

$\bar{\Omega}$ 上の変位場の空間であることを示しており、これら $V^{(s)}$ につい

ての 2 つの特徴づけは等価である。また、射影子 $P^{(s)}$ の固有値 0 に属する固有空間すなわち $\ker P^{(s)}$ について $\ker P^{(s)} = V^{(i)} = V^i$ だから V^s と $V^{(s)}$ は線形同型である。したがって、 $P^{(s)}$ の V^s への制限 $V^s \rightarrow V^{(s)}$ は線形同型であることがわかる。このことは、 $V^{(s)}$ が変数空間である場合、代わりに V^s を変数空間にとることができることを示している。

30

空間及び方程式の K -直交直和分解の直接法空間 Y と反復法空間 $V^{(a)}$ を式 2 8 とおき、

【式 2 8】

$$Y = V^{(i)}, \quad V^{(a)} = V^{(s)}$$

式 1 4 ~ 式 1 6 の前処理行列 G を単位行列 $G=1$ ととって射影 CG 法 (J.Mandel, M.Brezina : Balancing Domain Decomposition: Theory and Performance in two and Three Dimensions, MGNet, <http://casper.cs.yale.edu/mgnet/www/mgnet-papers.html>) を適用したものが領域分割法 (DDM) である。 $V^{(i)}$ は $\bar{\Omega}-\Gamma_s$ 上の許容変位場の

40

自由度の空間、 $V^{(s)}$ は $\bar{\Omega}$ 上の許容変位場とそれを境界条件 (正確

には変位拘束条件) としてもつ $\bar{\Omega}$ 上の外力を受けない変位場の自

由度の空間を表わす。 $KV^{(s)}$ は $V^{(s)}$ の変位場に対応する内部境界上の反力の自由度の空間である。通常の DDM アルゴリズムは上記にしたがい $V^{(s)}$ の代わりに V^s を変数空間にとる

。単位行列以外の G を設定することにより前処理つき DDM も可能

である。一般の前処理行列 G に関して、 $G = S^{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ S^{-1} \end{pmatrix} = P^{(s)}K^{-1}P^{(s)T}$ の

とき前処理として有効であるといえる。

50

DDMのCG法に用いる前処理として、Neumann前処理 (P.Le.Taltec: Domain decomposition methods in computational mechanics, Computational Mechanics Advances 1(2) (1994) 121-220)がある。これは上記の前処理行列Gを単位行列1ではなくNeumann前処理行列にとったものである。Neumann前処理行列は各部分領域Iの局所剛性マトリクス K^I のSchur補元 S^I (局所 Schur 補元と呼ばれる) の一般逆行列 s^I を使って式24に相当するブロック分解表示で式29で定義される。

【式29】

$$G = \begin{pmatrix} 0 \\ \sum N^I D^I S^I D^{I^T} N^{I^T} \end{pmatrix} \quad 10$$

ここで、Iは領域分割による部分領域のインデックス、 N^I は部分領域Iの自由度を領域全体の自由度へ写像する0-1成分行列、 $\{D^I\}$ は

1の各部分領域への分解行列の集合 $1 = \sum N^I D^I N^{I^T}$ である。この前処

理は、一般逆行列 s^I の選び方によっては条件 $G = S$ を満たさない

可能性がある。

DDMにNeumann前処理を適用すると、 s^I の選び方の任意性に

よって部分領域ごとの不定の剛体変位が反復処理ごとに混入する。これは部分領域ごとにばらばらの浮遊運動を生じさせ、反復収束効

率を悪化させる原因となる。前節で述べた、条件 $G = S$ を満たさない

原因でもある。BDD法 (Balancing Domain Decomposition method, J.Mandel: Balancing Domain Decomposition, Communications on Numerical Methods in Engineering 9(1993) 233-341., J.Mandel, M. Brezina: Balancing Domain Decomposition: Theory and Performance in Two and Three Dimensions, MGNet, <http://casper.cs.yale.edu/mgnet/www/mgnet-papers.html>, ARASOL An Integrated Programming Environment for Parallel Sparse Matrix Solvers (Project No. 20160), Deliverable D 2.4e Final report Domain Decomposition Algorithms for Large Scale Industrial Finite Element Problems, July 30, 1999.)はDDMに基づき、内部境界上の変位について前処理つきCG法を用い

て解く解法であり、特に線形材料微小変形の静的問題に関しては、内部境界上に働く外力に応答する変位場を部分領域ごとの剛体変位と残りのひずみ変位とに分け、前者の自由度だけ先に直接法で解き、後者の自由度を次の前処理つきCG法で解くものである。つまり、Neumann前処理に、先に解いた部分領域ごとの剛体変位の自由度の混入を排する射影を反復ごとに追加する。もう少し詳しく述べると、この射影は部分領域にでたらめな浮遊運動を生じさせるような外力を削除するという形で行なわれ、K-直交直和分解された方程式7、式8でいうと $F = F_{(a)}$ の対応、射影CG法アルゴリズムでいえば残差の射影 $r = r_{(a)}$ である。このように、Neumann前処理つきDDMを改善して部分領域ごとの浮遊運動を押さえる上記の射影処理をbalancingと称する。

具体的には、DDMにおける部分空間 $V^{(s)} = P^{(s)} V^s$ をさらに次のようにK-直交直和分解する。ker S^I を含む部分空間のIにわたる和空間、例えば部分領域ごとの剛体変位を部分領域全部について重ね合わせた運動を考え、その自由度の空間をcoarse空間Wとする。Wは $V^{(s)}$ の部分空間である。 $V^{(s)}$ をWとその $V^{(s)}$ でのK-直交補空間 $V^{(t)}$ にK-直交直和分解する。対応するK-直交射影子のペアを $P^{(w)}$, $P^{(t)}$ とする。式30が成立する。

【式30】

$$P^{(s)} = P^{(w)} + P^{(t)}, \quad K \begin{pmatrix} P^{(w)} \\ P^{(t)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P^{(w)^T} \\ P^{(t)^T} \end{pmatrix} K$$

全自由度空間Vは式31、式32とK-直交直和分解される。

【式31】

$$V = V^{(i)} \oplus W \oplus V^{(t)}, \quad V^{(i)} \perp_K W, \quad V^{(i)} \perp_K V^{(s)}, \quad W \perp_K V^{(t)}$$

【式 3 2】

$$W = P^{(w)}V, \quad V^{(t)} = P^{(t)}V$$

空間及び方程式のK-直交直和分解の直接法空間と反復法空間を式 3 3 とし、

【式 3 3】

$$Y = V^{(i)} \oplus_K W, \quad V^{(s)} = V^{(t)}$$

式 1 4 ~ 式 1 6 の前処理行列GをNeumann前処理行列にとって射影CG法 (J. Mandel, M. Brezina: Balancing Domain Decomposition: Theory and Performance in Two and Three Dimensions, MGNet, <http://casper.cs.yale.edu/mgnet/www/mgnet-papers.html>) を適用したものがBDD法である。特に、式 1 7、式 1 8 に相当する前処理は $P^{(w+a)} = P^{(s)}$ であることから式 3 4、式 3 5 となる。

【式 3 4】

$$P^{(s)}Gr_{(s)n} = P^{(s)}Gr_{(s)n} - \mu_n^{(w)}$$

【式 3 5】

$$\mu_n^{(w)} \in W : K\mu_n^{(w)} = P^{(w)T}KGr_{(s)n}$$

射影処理 $Gr_{(s)n} \rightarrow P^{(s)}Gr_{(s)n}$ の計算は 式 2 2 をそのまま計算する。

BDD法の反復法空間 $V^{(t)}$ は同時に、後に局所coarse空間の W' の定義のところで一緒に定義されるbalanced空間でもある。

balanced 空間の像空間 $SV^{(s)}$ への K^{-1} -直交射影 $r_{(s)n} \in SV^s \rightarrow$

$P^{(s)T}r_{(s)n} \in SV^{(s)}$ を **balancing** と称する (J. Mandel: Balancing Domain

Decomposition, Communications on Numerical Methods in Engineering 9 (1993) 233-341., J. Mandel, M. Brezina: Balancing Domain Decomposition: Theory and Performance in Two and Three Dimensions, MGNet, <http://casper.cs.yale.edu/mgnet/www/mgnet-papers.html>)。BalancingはBDD法に適用した射影CG法アルゴリズム式 1 4 ~ 式 1 6 には直接現われず、K-

直交射影 $Gr_{(s)n} \in V^s \subset V \rightarrow P^{(s)}Gr_{(s)n} \in V^{(s)}$ 式 1 4、式 1 6 がそれに対応

する。DDMの場合と対照的にBDD法の場合は、Gは $G \neq S^{-1}$ であつ

ても $P^{(s)}GP^{(s)T} = P^{(s)}S^{-1}P^{(s)T} = P^{(s)}K^{-1}P^{(s)T}$ であれば前処理として有効であ

る。Neumann前処理行列式 2 9 はこの条件を満たし、本節冒頭で提示したNeumann前処理つきDDMの問題点が解決する。

並列CG法は領域分割を行わず、全自由度空間VをそのままCG法で処理する。VのK-直交直和分解も行わない。直接法空間を $Y = \{0\}$ ととることに相当する。問題が大規模で、ベクトル空間Vの次元が大きい場合は、解析対象の空間領域を幾つかに分割し(これを部分(part)と称する)、それに伴うVの分解(境界の重複した分解)にしたがって各々の部分空間についての自由度を別々のプロセッサが処理する。ベクトルの内積や行列-ベクトル積のように部分空間相互の情報交換が必要な計算を行なうときに限りプロセス間通信が必要になる。

以上、超大規模構造問題を解く方法として、領域分割法 (DDM: Domain Decomposition Method)、Neumann前処理つきDDM、BDD法 (Balancing Domain Decomposition Method)、並列CG法の解法について説明した。しかし、これらの方法では、超大規模構造問題を解く場合、発散して解が求まらない、計算時間が極めて長くなるという問題が指摘されている。本発明は、このような状況に鑑みてなされたもので、自由度が100万以上の超大規模構造問題を解く際、解が発散することなく求まり、反復計算の回数が少なく、短時間の計算時間で解が求まる、超大規模構造問題を解くシステムCGCG法を提供しようとするものである。

10

20

30

40

50

発明の開示

本発明は、超大規模構造問題を解くシステム、該システムを機能させるためのプログラム及び該プログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体を含むものである。CGCG法は、領域分割を行ない、それに基づいて部分領域の内部と境界の区別をすることなしにcoarse空間を設定し、前処理として簡便な対角スケールリングを採用した前処理つき射影CG法を用いる、超大規模構造問題のための有限要素法ソルバアルゴリズムである。自由度100万以上の超大規模構造問題を解く並列有限要素計算システムであって、全体領域を複数の部分領域に分割する領域分割手段、該分割された部分領域を各計算ノード(CPU)に割り当てる部分領域分配手段、各ノードにおいて受け持ちの部分領域に対する剛性マトリックスを作成する手段、全自由度表示のcoarse空間の基底を各ノードの担当部分領域に対して作成し、各部分領域の剛性マトリックスを保持するノードにてその部分領域の寄与を求め、それを全体にわたって加算して部分領域全体重ね合わせ運動マトリックスを作成する手段、該部分領域の重ね合わせ運動から初期変位を設定し、設定した初期変位から初期残差を求め、初期残差ベクトルを各ノードの担当部分領域分のみを保持する手段、各ノードの担当分について対角スケールリング前処理を行う手段、部分領域全体の重ね合わせ運動を求め、該運動の初期値を設定しその値を担当する部分領域のみ該当ノードに保持し、全自由度のCoarse Grid前処理を行う手段、初期残差に基づいて全自由度のCG法探索方向ベクトル初期値を担当部分領域に関して設定する手段、全自由度のCG法探索方向ベクトル初期値から出発して、反復ステップにおいて全自由度の変位を更新し、同様に反復ステップにおいて全自由度の残差を更新する手段、反復ステップにおいて更新された全自由度の残差に対して対角スケールリング前処理を行う手段、反復ステップにおいて全自由度のCoarse Grid前処理を行う手段、反復ステップにおいて全自由度の残差に基づいて全自由度のCG法探索方向ベクトルを更新する手段、更新した全自由度の反復処理が収束していない場合は、全自由度の変位の更新に戻り再度実行し、全自由度の反復処理が収束した場合は計算を終了する全自由度の前処理つき射影CG法反復計算手段、及び全自由度の反復処理が収束した場合に全自由度の変位を変位解とし、変位解を出力する手段を備えたことを特徴とする並列有限要素法計算システムである。また、本発明は、上記システムを機能させるプログラムでもあり、更に上記システムを機能させるプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体でもある。

【図面の簡単な説明】

第1図は領域分割を説明する図であり、第2図はCGCG法の計算フローチャートである。

発明を実施するための最良の形態

CGCG法は、領域分割を行ない、それに基づいて部分領域の内部と境界の区別をすることなしにcoarse空間を設定し、前処理として簡便な対角スケールリングを採用した前処理つき射影CG法を用いる、超大規模構造問題のための有限要素法ソルバアルゴリズムである。DDM、BDD法と同様、CGCG法は領域分割に基づいた射影CG法を基盤とする。まず $Y=W$ ととり、射影CG法で式3に倣って全自由度空間 V を式36

【式36】

$$V = W \oplus V^{(a)}, \quad W \perp_K V^{(a)}, \quad \begin{pmatrix} W \\ V^{(a)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P^{(W)} \\ P^{(a)} \end{pmatrix} V$$

と K -直交分解する。この際、coarse空間 W として V のどの部分空間を選ぶかが問題になる。CGCG法では、 W として領域分割における部分領域ごとのある限定された運動(例えば剛体運動)を表わす V の部分空間を選ぶ。

例えば W としてBDD法と同様に、部分領域ごとの剛体変位を部分領域全部について重ね合わせた運動の自由度の空間を採用した場合、 $V^{(a)}$ は部分領域内部のひずみ運動を表わす変位場の空間を成す。つまりBDD法の設定式33と比較して直接法空間と反復法空間を式37ととることになる。

【式37】

$$Y = W, \quad V^{(a)} = V^{(i)} \oplus V^{(j)}, \quad V^{(i)} \perp_K V^{(j)}$$

この場合、B D D法が $V^{(i)}$ の自由度については直接法で解くのに対し、C G C G法ではそれも含めてC G法で解く。この意味で、C G C G法の方がB D D法よりC G法の負担が重く直接法の負担が軽い。射影C G法前処理でもC G C G法ではB D D法における式34の射影

処理 $Gr_{r(a)_n} \rightarrow P^{(a)}Gr_{r(a)_n}$ のない分直接法の役割が少ない。

Coarse空間Wの実装面での取扱いもD D M法と並列C G法の相違を反映して次のように異なってくる。D D M法では、 V^s を変数空間にとるため、領域全体の変位場を部分領域内の変位と内部境界上の変位に分けて扱う。並列C G法では、部分領域をその内部と内部境界とに分けることをせず、部分領域はその内部と境界を一体として扱う。B D D法でのcoarse空間Wは次のように設定される。各部分領域の境界(内部境界の一部)の剛体変位を先に定式化し、その部分領域全部にわたる重ね合わせの空間 W^s を設定する。それを式22の $P^{(s)}$ でK-直交射影して部分領域内の剛体変位に拡張してWとする($W=P^{(s)}W^s$)。一方、C G C G法でのcoarse空間Wは、各部分領域ごとにその内部と境界全体の剛体変位を直接定式化してその部分領域全部にわたる重ね合わせで設定する。これにしたがい、射影C G法の前処理では、空間 W^s の自由度の求解のほかに部分領域ごとの直接法処理の手間が掛かっている(Shur補元の計算のため)B D D法に対し、C G C G法では、その内部も含めた部分領域ごとの剛体変位の自由度について解くだけでよい。

方程式 式1を式6~式8に倣って式38、式39、式40

【式38】

$$Ku^{(W)} = F_{(W)}, \quad u^{(W)} \in W, \quad F_{(W)} \in KW$$

【式39】

$$Ku^{(a)} = F_{(a)}, \quad u^{(a)} \in V^{(a)}, \quad F_{(a)} \in KV^{(a)}$$

【式40】

$$u = u^{(a)} + u^{(W)}, \quad F = F_{(a)} + F_{(W)}$$

と分解する。式38は変位場W-成分 $u^{(W)}$ を決定するcoarse grid問題、式39は変位場 $V^{(a)}$ -成分 $u^{(a)}$ を決定する方程式である。C G C G法では射影C G法に倣って式38を直接法である修正コレスキー法、式39を射影C G法の前処理つきC G反復処理で解く。前処理つき

C G反復処理の前処理行列 \bar{G} は式14~式16で $G = D_K^{-1}$ と選んで式41

【式41】

$$\bar{G} = P^{(a)}D_K^{-1}P^{(a)T}$$

と設定する。ここで、 D_K^{-1} は D_K の逆行列、 D_K はKの対角行列(対角成分がKの対角成分と等しい対角行列)である。残差 $r_{r(a)_n} \in KV^{(a)}$ への作用は実質的には $\bar{G}r_{r(a)_n} = P^{(a)}D_K^{-1}r_{r(a)_n}$ すなわち、C G C G法の前処理は

Kの対角スケーリングと反復法空間 $V^{(a)}$ へのK-直交射影 $P^{(a)}$ の合成である。

B D D法ではNeumann前処理という、各部分領域で局所Schur

補元 S^l の一般逆行列 S^{lT} の計算を行なうという重い前処理を行なうの

に対し、C G C G法では対角スケーリングという、簡便な前処理で計算コストとメモリ使用量を大幅に削減している。

C G C G法でのK-直交分解式36におけるcoarse空間Wの定義を述べる。Iを領域分割による部分領域のインデックスとする。部分領域I内の自由度が成すベクトル空間を V^I とする。 V^I の部分空間 W^I を定める。これを局所coarse空間と呼ぶことにする。coarse空間Wを $\{W^I\}_I$ の重み付き重ね合わせで式42を定義する。

【式42】

$$W \equiv \text{span} \{ N^I D^I W^I \}_I = \bigoplus_I N^I D^I W^I$$

ここで、 $\{D^I\}_I$ はNeumann前処理と同様1の各部分領域への分解

10

20

30

40

50

$1 = \sum_I N^I D^I N^{I^T}$ である。 W^I は部分領域 I の規定された運動（例えば剛

体運動）を表わす変位場の空間である。 $m^I = \dim W^I$ を W^I の次元、
 $\{Z_j^I\}_{j=1, \dots, m^I}$ を W^I の基底とする。

【式 4 3】

$$\left\{ N^I D^I Z_j^I \right\}_{j=1, \dots, m^I}$$

式 4 3 は、 W の基底を成し、 W の次元は $\sum_I m^I$ である。

10

特に、 W^I が条件 $\ker S^I \cap W^I$ を満たすとき、対応する fine 空間の部分空間を balanced 空間と称する。 B D D 法では、 Neumann 前処理を行なうため、 W^I は $\ker S^I \cap W^I$ を満たす必要があるが C G C G 法ではそのような制約がない。すなわち C G C G 法の反復法空間 $V^{(a)}$ は balanced 空間である必要がない。

部分領域 I の規定された運動として剛体運動を考える。このとき W^I は具体的には次のように構成できる。部分領域 I の剛体運動は次の

ように表現できる。 \mathbf{x}_α^I を部分領域 I 上の節点 α の初期座標、 \mathbf{x}_α^I を変形後の座標として、式 4 4、式 1 5、式 4 5 となる。

【式 4 4】

$$\mathbf{x}_\alpha^I = \mathbf{P}_j \mathbf{v}^j + \mathbf{e}^{0, \theta^j} \mathbf{X}_\alpha^I$$

20

【式 4 5】

$$\mathbf{P}_1 \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_3 \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

【式 4 6】

$$\mathbf{O}_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ & -1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{O}_2 \equiv \begin{pmatrix} & & 1 \\ & 0 & \\ -1 & & \end{pmatrix}, \quad \mathbf{O}_3 \equiv \begin{pmatrix} & -1 & \\ & & \\ 1 & & 0 \end{pmatrix}$$

微小変形を考えると、式 4 7、式 4 8 である。

30

【式 4 7】

$$\mathbf{x}_\alpha^I \cong \mathbf{P}_j \mathbf{v}^j + (1 + \mathbf{O}_j \theta^j) \mathbf{X}_\alpha^I$$

【式 4 8】

$$\mathbf{u}_\alpha^I \cong \mathbf{P}_j \mathbf{v}^j + \mathbf{O}_j \mathbf{X}_\alpha^I \theta^j = \mathbf{v} + \boldsymbol{\theta} \times \mathbf{X}_\alpha^I, \quad \mathbf{v} \equiv \begin{pmatrix} v^1 \\ v^2 \\ v^3 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} \equiv \begin{pmatrix} \theta^1 \\ \theta^2 \\ \theta^3 \end{pmatrix}$$

そこで W^I を、次の条件で定義される部分領域 I 上の 6 つの変位場

$\{Z_j^I\}_{j=1, \dots, 6}$ を基底とする、6 次元ベクトル空間で定義する。即ち、式

40

4 9、式 5 0 である。

【式 4 9】

$$\begin{aligned} Z_j^I &: Z_j^I(\mathbf{X}_\alpha^I) = \mathbf{P}_j \\ Z_{3+j}^I &: Z_{3+j}^I(\mathbf{X}_\alpha^I) = \mathbf{O}_j \mathbf{X}_\alpha^I, \quad j=1, 2, 3 \end{aligned}$$

【式 5 0】

$$W^I \equiv \left\{ \sum_{j=1}^{m^I} Z_j^I \mu^j \mid \mu^j \in \mathbf{R} \right\}, \quad m^I \leq 6$$

ただし、式 5 0 では次の事情を考慮している。部分領域によっては、

50

その剛体運動の自由度が 5 以下の場合があり得る。その場合は Z_j^I の番号 j を振り直し、その基底が $\{Z_j^I\}_{j=1,\dots,m^I}$ 、 $m^I = \dim W^I \leq 6$ となるよう

にする。番号 j の振り直しには Gram-Schmidt の直交化法を用いる。BDD 法では、式 4 9 で定義される $\{Z_j^I\}_{j=1,\dots,6}$ として部分領域 I 上

ではなく、その内部境界上の 6 つの変位場を定めるところが CGCG 法と異なる。上記の規定された運動としての剛体運動の定式を微小変形問題ソリッドモデルの剛体運動へ適用することは容易である。ソリッドモデルの場合、式 4 9 で定義される部分領域 I 上の 6 つの変位場

$\{Z_j^I\}_{j=1,\dots,6}$ はその節点 α の成分が式 5 1 となる。

【式 5 1】

$$\{Z_1^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_2^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_3^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_4^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_5^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_6^I(\mathbf{X}_\alpha^I)\}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & X^{\alpha^3} & -X^{\alpha^2} \\ 0 & 1 & 0 & -X^{\alpha^3} & 0 & X^{\alpha^1} \\ 0 & 0 & 1 & X^{\alpha^2} & -X^{\alpha^1} & 0 \end{pmatrix}$$

ここで、 \mathbf{X}_α^I は部分領域 I 上の節点 α の初期座標である。

つぎに、微小変形問題シェルモデルへの適用を述べる。節点 α におけるシェル中立面の接空間の規格直交基底を一つ選んで $(\mathbf{e}_1^\alpha, \mathbf{e}_2^\alpha)$

とする。 \mathbf{e}_3^α を節点 α の初期ディレクタとする。あるシェル要素上の点の座標 $\mathbf{x} = x(\xi^1, \xi^2, \xi^3)$ は式 5 2 と書ける。

【式 5 2】

$$\mathbf{x} = \sum_{\alpha} N_{\alpha}(\xi^1, \xi^2) \left(\mathbf{X}^{\alpha} + \mathbf{U}^{\alpha} + \frac{a^{\alpha} \xi^3}{2} (1 + \varphi^{\alpha} \mathbf{x}) \mathbf{e}_3^{\alpha} \right)$$

ここで (ξ^1, ξ^2, ξ^3) は当該シェル要素の局所座標である。また N_{α} 、 \mathbf{X}^{α} 、 \mathbf{U}^{α} は節点 α のそれぞれシェル中立面上で定義された形状関数、初期節点座標、現節点変位、現ディレクタの回転量である。 \sum_{α} は

当該シェル要素に含まれる節点にわたる和を示す。

まず、シェルの微小平行移動 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{a}$ は式 5 3 である。

【式 5 3】

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x} + \mathbf{a} = \sum_{\alpha} N_{\alpha} \left[\mathbf{X}^{\alpha} + \mathbf{U}^{\alpha} + \mathbf{a} + \frac{a^{\alpha} \xi^3}{2} (1 + \varphi^{\alpha} \mathbf{x}) \mathbf{e}_3^{\alpha} \right]$$

つまり節点変位 \mathbf{U}^{α} と現ディレクタの回転量 φ^{α} の変化でまとめると式 5 4 である。

【式 5 4】

$$\begin{pmatrix} \mathbf{U}^{\alpha} \\ \varphi^{\alpha} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{U}^{\alpha} + \mathbf{a} \\ \varphi^{\alpha} \end{pmatrix}$$

次にシェルの微小剛体回転を考える。変位 \mathbf{U}^{α} および現ディレクタの回転 φ^{α} は微小とする。座標 $\mathbf{x} = x(\xi^1, \xi^2, \xi^3)$ に微小剛体回転 $1 + \mathbf{O}_i$ 、 $i = 1, 2, 3$ を作用させる。ここで、 $\{\mathbf{O}_i\}_{i=1,2,3}$ は式 4 6 で定義されたマトリクス、 $\mathbf{a} = (\xi^1, \xi^2, \xi^3)^T$ は回転方向ベクトルである。微小剛体

回転による現節点座標 $\mathbf{X}^{\alpha} + \mathbf{U}^{\alpha}$ 、現ディレクタ $\varphi^{\alpha} \equiv (1 + \varphi^{\alpha} \mathbf{x}) \mathbf{e}_3^{\alpha}$ の変化量

は微小量一次まで考えて式 5 5 である。

20

30

40

50

【式 5 5】

$$\theta \times (\mathbf{X}^\alpha + \mathbf{U}^\alpha) \cong \theta \times \mathbf{X}^\alpha, \quad \theta \times (1 + \varphi^\alpha) \mathbf{e}_3^\alpha \cong \theta \times \mathbf{e}_3^\alpha = \theta^\alpha \times \mathbf{e}_3^\alpha$$

ここで、 θ^α は θ を節点 α におけるシェル中立面の接空間 ($\mathbf{e}_1^\alpha, \mathbf{e}_2^\alpha$) で

張られる部分空間) に射影したベクトル式 5 6 である。

【式 5 6】

$$\theta^\alpha = (\mathbf{e}_1^\alpha \ \mathbf{e}_2^\alpha) \begin{pmatrix} \mathbf{e}_1^\alpha \cdot \theta \\ \mathbf{e}_2^\alpha \cdot \theta \end{pmatrix}$$

10

従って、微小剛体回転による座標 x 全体の変化量は式 5 7 となる。

【式 5 7】

$$\theta \times \mathbf{x} \cong \sum_{\alpha} N_{\alpha} \left(\theta \times \mathbf{X}^{\alpha} + \frac{a^{\alpha} \mathbf{e}_3^{\alpha}}{2} \theta^{\alpha} \times \mathbf{e}_3^{\alpha} \right)$$

従って、シェルの微小剛体回転は節点変位 \mathbf{U} と現ディレクタの回転量 φ の変化でまとめると式 5 8 である。

【式 5 8】

$$\begin{pmatrix} \mathbf{U}^{\alpha} \\ \varphi^{\alpha} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{U}^{\alpha} + \theta \times \mathbf{X}^{\alpha} \\ \varphi^{\alpha} + \theta^{\alpha} \end{pmatrix}$$

20

微小平行移動 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{a}$ と微小剛体回転 $\mathbf{x} \rightarrow (1 + \theta \times) \mathbf{x}$ を合わせると式 5 9 である。

【式 5 9】

$$\begin{pmatrix} \mathbf{U}^{\alpha} \\ \varphi^{\alpha} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{U}^{\alpha} + \mathbf{a} + \theta \times \mathbf{X}^{\alpha} \\ \varphi^{\alpha} + \theta^{\alpha} \end{pmatrix}$$

追加分 $\begin{pmatrix} \mathbf{a} + \theta \times \mathbf{X}^{\alpha} \\ \theta^{\alpha} \end{pmatrix}$ を成分で書けば式 6 0 となる。

【式 6 0】

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a} + \theta \times \mathbf{X}^{\alpha} \\ \theta^{\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & X^{\alpha 3} & -X^{\alpha 2} \\ 0 & 1 & 0 & -X^{\alpha 3} & 0 & X^{\alpha 1} \\ 0 & 0 & 1 & X^{\alpha 2} & -X^{\alpha 1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{e}_1^{\alpha 1} & \mathbf{e}_1^{\alpha 2} & \mathbf{e}_1^{\alpha 3} \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{e}_2^{\alpha 1} & \mathbf{e}_2^{\alpha 2} & \mathbf{e}_2^{\alpha 3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^1 \\ \mathbf{a}^2 \\ \mathbf{a}^3 \\ \theta^1 \\ \theta^2 \\ \theta^3 \end{pmatrix}$$

30

となる。すなわち、式 4 9 で定義される部分領域 I 上の 6 つの変位場 $\{Z_j^I\}_{j=1, \dots, 6}$ はその節点 α の成分が式 6 1 となる。

【式 6 1】

$$\{Z_1^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_2^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_3^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_4^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_5^I(\mathbf{X}_\alpha^I), Z_6^I(\mathbf{X}_\alpha^I)\}$$

40

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & X^{\alpha 3} & -X^{\alpha 2} \\ 0 & 1 & 0 & -X^{\alpha 3} & 0 & X^{\alpha 1} \\ 0 & 0 & 1 & X^{\alpha 2} & -X^{\alpha 1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{e}_1^{\alpha 1} & \mathbf{e}_1^{\alpha 2} & \mathbf{e}_1^{\alpha 3} \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{e}_2^{\alpha 1} & \mathbf{e}_2^{\alpha 2} & \mathbf{e}_2^{\alpha 3} \end{pmatrix}$$

\mathbf{X}_α^I は部分領域 I 上の節点 α の初期座標である。

部分領域 I の規定された運動としてアフィン変換 (直線を直線に写し、その上の有向線分比を変えないと特徴づけられる変換) で表現される運動 (以下、アフィン変換運動と呼ぶ

50

ことにする) を考える。つまり、前節で扱った剛体運動を一般化したものであり、並進運動と一般線形変換運動の合成である。この場合 W^I は具体的に次のように構成できる。

部分領域 I のアフィン変換運動は次のように表現できる。 X_α^I を部分領域 I 上の節点 α の初期座標、 x_α^I を変形後の座標として、

【式 6 2】

$$x_\alpha^I = P_j v^j + e^{E_j^I \alpha^j + E_j^I \theta^j + O_j \theta^j} X_\alpha^I$$

【式 6 3】

$$E_1^e \equiv \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \quad E_2^e \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 1 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \quad E_3^e \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 0 & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

10

【式 6 4】

$$E_1^s \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}, \quad E_2^s \equiv \begin{pmatrix} & & 1 \\ & 0 & \\ 1 & & \end{pmatrix}, \quad E_3^s \equiv \begin{pmatrix} & & 1 \\ 1 & & \\ & & 0 \end{pmatrix}$$

あるいは、式 6 5、式 6 6、式 6 7、式 6 8 である。

【式 6 5】

$$x_\alpha^I = P_j v^j + e^{E_j \theta^j} X_\alpha^I$$

20

【式 6 6】

$$E_{11} \equiv \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \quad E_{12} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \quad E_{13} \equiv \begin{pmatrix} 0 & & 1 \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}$$

【式 6 7】

$$E_{21} \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ 1 & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \quad E_{22} \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 1 & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \quad E_{23} \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 0 & 1 \\ & & 0 \end{pmatrix}$$

【式 6 8】

$$E_{31} \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 0 & \\ 1 & & 0 \end{pmatrix}, \quad E_{32} \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 0 & \\ & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad E_{33} \equiv \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 0 & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

30

微小変形を考えて、式 6 9、式 7 0 である。

【式 6 9】

$$x_\alpha^I \cong P_j v^j + (1 + E_{ij} \theta^j) X_\alpha^I$$

【式 7 0】

$$u_\alpha^I \cong P_j v^j + E_{ij} X_\alpha^I \theta^j, \quad v \equiv \begin{pmatrix} v^1 \\ v^2 \\ v^3 \end{pmatrix}, \quad \theta^j \equiv \begin{pmatrix} \theta^{11} & \theta^{12} & \theta^{13} \\ \theta^{21} & \theta^{22} & \theta^{23} \\ \theta^{31} & \theta^{32} & \theta^{33} \end{pmatrix}$$

40

そこで W^I を、次の条件で定義される部分領域 I 上の 1 2 の変位場 $\{Z_j^I\}_{j=1, \dots, 12}$ を基底とする、1 2 次元ベクトル空間で定義する。即ち、式 7 1 で

【式 7 1】

$$Z_j^I : Z_j^I(X_\alpha^I) = P_j, \quad i=1, 2, 3, \quad j=1, 2, 3$$

$$Z_{3i+j}^I : Z_{3i+j}^I(X_\alpha^I) = E_{ij} X_\alpha^I$$

式 7 2 である。

【式 7 2】

$$W^I \equiv \left\{ \sum_{j=1}^{m^I} Z_j^I \mu^j \mid \mu^j \in \mathbf{R} \right\}, \quad m^I \leq 12$$

剛体運動の場合と同様、式 7 2 では次の事情を考慮している。部分領域によっては、そのアフィン変換運動の自由度が 1 1 以下の場合

があり得る。その場合は Z_j^I の番号 j を振り直し、その基底が $\{Z_j^I\}_{j=1, \dots, m^I}$ 、

$m^I = \dim W^I \leq 12$ となるようにする。番号 j の振り直しには

Gram-Schmidtの直交化法を用いる。

次に、C G C G法による並列有限要素法ソルバの具体的な計算手順を述べる。 10

1. 領域分割

解析領域全体を複数の部分領域に分割する。

2. 部分領域の各プロセッサの担当する部分への分配

分割した部分領域の各計算ノード (CPU) への割り当てを決める。すなわち、各計算ノード (CPU) は、1つまたは複数の部分領域を担当する。各ノードが担当する部分領域全体を部分と称する (第 1 図参照)。

3. 剛性マトリックスの作成

各ノードにおいて、受け持ちの部分領域に対する剛性マトリックスを作成する。

4. 部分領域全体重ね合わせ運動設定

4. 1 全自由度表示の射影子作成 20

部分領域全体重ね合わせ運動を抜き出すための全自由度表示のcoarse空間の基底 (部分空間の基底はその部分空間への射影子とみ

なせる) $D^I Z^I \equiv \{ D^I Z_j^I \}_{j=1, \dots, m^I}$ を各ノードの担当部分領域に対して作成

する。

4. 2 部分領域全体重ね合わせ運動マトリックス K_{rgd} の作成

部分領域全体重ね合わせ運動マトリックス $K_{rgd} = K_{rgd_j}^{I^j} = D^I Z_j^I \cdot K D^I Z_j^I$

を作成する。この計算は、各部分領域の剛性マトリックス K^I を保持するノードにてその部分領域からの寄与を求め、それを全体にわたって足しあわせることで求められる。 30

4. 3 部分領域全体重ね合わせ運動マトリックス K_{rgd} の L U 分解

K_{rgd} に対し、L U 分解 $K_{rgd} = L_{rgd} U_{rgd}$ を行なう。この L U 分解された L_{rgd} , U_{rgd} をすべてのノードで保持しておく。

5. 全自由度の前処理つき射影 C G 法初期設定

5. 1 全自由度の初期変位設定

5. 1. 1 部分領域全体重ね合わせ運動 $\mu^{(w)}$

次の方程式式 7 3 を $\mu^{(w)}$ について解く。

【式 7 3】

$$K_{rgd} \mu^{(w)} = (NDZ)^T F$$

ここで、 $NDZ \equiv \{ N^I D^I Z_j^I \}_{j=1, \dots, m^I}$ である。F は各ノードが担当部分領域

に関して保持しており、各ノードで $(NDZ)^T F$ を求めた後通信して領域全体にわたる右辺ベクトルを作成し、すべてのノードで L U 分解した K_{rgd} を用いて $\mu^{(w)}$ を求める。式 1 0 の $u^{(w)}$ に相当するものは $u^{(w)} = NDZ \mu^{(w)}$ である。

5. 1. 2 初期変位 u_0 の設定

初期変位 u_0 を式 7 4 で設定する。

【式 7 4】

$$u_0 = NDZ \mu^{(w)}$$

この u_0 は各ノードの担当領域部分に対してのみ保持する。 50

5.2 全自由度の初期残差 g_0 の計算

初期残差 g_0 を式 75 で求める。

【式 75】

$$g_0 = Ku_0 - F$$

この残差ベクトルは各ノードの担当分のみ保持する。式 14 ~ 式

16 で説明した残差 $r_{(i)}^n$ と符号が逆であることに注意。

5.3 対角スケーリング前処理計算

残差 g_0 に対し $D_k^{-1}g_0$ を求める (対角スケーリング前処理)。ここで、 D_k^{-1} は D_k の逆行列、 D_k は K の対角行列 (対角成分が K の対角成

分と等しい対角行列) である。各ノードにて担当部分について求める。

5.4 全自由度の Coarse Grid 前処理計算

以下のとおり、Coarse Grid 前処理 $P^{(s)}Gg_0 = \bar{G}g_0$ を行なう。

5.4.1 部分領域全体重ね合わせ運動変数 $\mu^{(w)}$

次の方程式式 76 を $\mu^{(w)}$ について解く。

【式 76】

$$K_{red}\mu^{(w)} = -(NDZ)^T KD_k^{-1}g_0$$

右辺ベクトルは、通信してすべてのノードで全体領域にわたって作成し、すべてのノードで $\mu^{(w)}$ を求める。

5.4.2 $\mu_0^{(w)}$ の設定

$\mu_0^{(w)}$ を式 77 の通り設定する。

【式 77】

$$\mu_0^{(w)} = NDZ\mu^{(w)}$$

$\mu_0^{(w)}$ は担当部分のみ保持する。

5.4.3 $P^{(s)}Gg_0 = \bar{G}g_0$ の計算

$\bar{G}g_0$ を式 78 のとおり計算する。

【式 78】

$$\bar{G}g_0 = \mu_0^{(w)} + D_k^{-1}g_0$$

担当部分に関して求める。

5.5 全自由度の CG 法探索方向ベクトル初期値 w_0 の設定

全自由度の CG 法探索方向ベクトル初期値 w_0 を式 79 で設定する。

【式 79】

$$w_0 = \bar{G}g_0$$

担当部分に関して求める。

6. 全自由度の前処理つき射影 CG 法反復計算

6.1 全自由度の変位更新

$n \geq 1$ に対して、以下の手順にて全自由度の変位 u_{n-1} を更新する。

6.1.1 Kw_{n-1} の計算

Kw_{n-1} を担当部分に関して求める。

6.1.2 α_n の計算

通信を行ない、全ノードにて α_n を式 80 のとおり求める。

【式 80】

$$\alpha_n = \frac{g_{n-1} \cdot \bar{G}g_{n-1}}{w_{n-1} \cdot Kw_{n-1}}$$

6.1.3 u_{n-1} の担当部分の更新

式 81 により u_{n-1} の担当部分を更新する。

10

20

30

40

50

【式 8 1】

$$u_n = u_{n-1} - \alpha_n w_{n-1}$$

6.2 全自由度の残差更新

$n \geq 1$ に対して、全自由度の残差 g_{n-1} の担当部分を式 8 2 に従って更新する。

【式 8 2】

$$g_n = g_{n-1} - \alpha_n K w_{n-1}$$

6.3 対角スケーリング前処理 $D_K^{-1} g_n$ の計算

5.3 と同様に、残差 g_n に対し $D_K^{-1} g_n$ を各ノードにて担当部分に関

10

して求める。(対角スケーリング前処理)。

6.4 全自由度の Coarse Grid 前処理 $\bar{G} g_n$ の計算

5.4 と同じ手順にて、 $\bar{G} g_n$ を担当部分に関して求める。すなわち 2 つの方程式式 8 3、式 8 4 を解き式 8 5 とする。

【式 8 3】

$$K_{rgd} \mu^{(w)} = -(NDZ)^T K D_K^{-1} g_n$$

【式 8 4】

$$\mu_n^{(w)} = NDZ \mu^{(w)}$$

【式 8 5】

$$\bar{G} g_n = \mu_n^{(w)} + D_K^{-1} g_n$$

20

6.5 全自由度の C G 法探索方向ベクトル w_{n-1} の更新

次のとおり w_{n-1} を更新する。

6.5.1 β_n の計算

β_n を式 8 6 のとおり、通信して全ノードにて求める。

【式 8 6】

$$\beta_n = \frac{g_n \cdot \bar{G} g_n}{g_{n-1} \cdot \bar{G} g_{n-1}}$$

6.5.2 w_{n-1} の更新

w_{n-1} を式 8 7 のとおり担当部分ごとに更新する。

30

【式 8 7】

$$w_n = \bar{G} g_n + \beta_n w_{n-1}$$

6.6 収束判定

更新した残差 g_n より収束を判定する。収束していない場合は、6.1 に戻りそれ以降を再度実行する。

7. 変位解 u の出力

前処理つき C G 法収束時点での u_n を変位解 u とする。必要なら u より歪みや応力を求める。この計算手順は、第 2 図に示した。

実施例

以下実施例に基づいて、C G C G 法が、D D M、並列 C G 法、B D D と比較して、計算パフォーマンスに優れていることを説明する。鉄道台車をモデルとする有限要素法における計算パフォーマンスを比較する。このモデルでは、要素が 4 面体 1 次要素、節点数が 3 2 3, 6 3 9、要素数が 1, 1 2 3, 8 3 6、自由度数が 9 7 0, 9 1 1 (6 自由度のみ拘束) であり、計算環境は、計算機 Dual Pentium III 600MHz 4 台、P E 数 4 (各マシンに 1 プロセス)、計算条件は C G 法トレランス 1.0×10^{-6} であった。計算パフォーマンスの比較を第 1 表に示した。第 1 表から、次のことがわかる。即ち C G C G 法は D D M、並列 C G 法に比較して、反復ステップ数、計算時間共に極めて少ない。C G C G 法は反復ステップ数に関しては B D D 法に劣るが、計算速度に関しては B D D 法の 3 倍近く早い。

40

第 1 表

50

計算方法	部分領域数	反復ステップ数	計算時間 (分)	メモリー使用量 (MB/PE)
CGCG法	1,600	599	15	167
並列CG法	4	28,565	201	90
DDM	12,000	20,358	377	167
BDD法	2,400	293	40	440

比較例 1

第 1 表には、Neumann前処理つき D D Mとの比較は示されていないが、D D M、及びNeumann前処理つき D D Mの二者の計算パフォーマンスを比較した計算比較例がある。比較例の計算パフォーマンスを第 2 表に示した。この比較例は、複数の直方体を組み合わせて作った簡易モデルにおいて、要素が 4 面体 2 次要素、節点数が 1,029、要素数が 504、自由度数が 3,087 (底面を完全固定、上面に強制変位) であり、計算環境は計算機 Alpha21164 600MHz 1 台、P E 数は 1、計算条件は C G 法でトレランスが 1.0×10^{-7} であった。第 2 表は、D D MとNeumann前処理つき D D Mの計算時間と反復ステップ数を示している。Neumann前処理つき D D Mで短縮された時間は 13%程度、反復ステップ数もせいぜい 1/2 程度である。この比較例 1 と実施例から、本発明の C G C G 法は、超大規模構造問題の解法として従来知られている D D M、並列 C G 法、Neumann前処理つき D D Mに比較して、計算時間が極めて短く、高速化及びロバスト性向上を目的として開発された B D D 法と比べてもより速い。反復ステップ数に関しては、B D D 法には劣るが、D D M、並列 C G 法及びNeumann前処理付き D D Mとの比較では極めて少なくなることがわかる。このように、C G C G 法は、超構造問題の解法として計算パフォーマンスが極めて高いことがわかる。

第 2 表

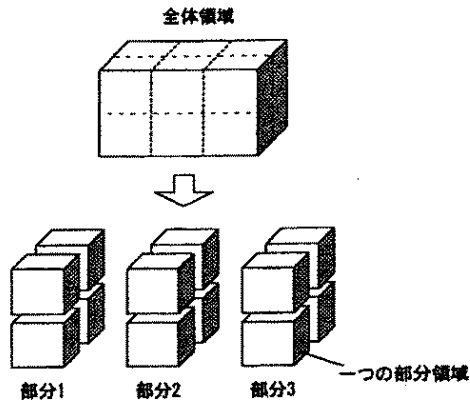
計算方法	部分領域数	反復ステップ数	計算時間 (秒)
DDM	12	420	480
Neumann 前処理 DDM	12	240	420

産業上の利用可能性

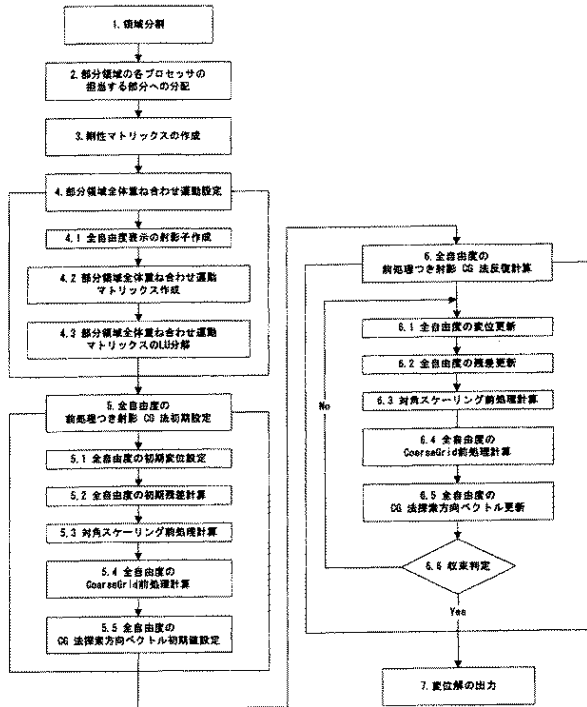
C G C G 法は、大規模な問題を有効に解く有限要素法ソルバアルゴリズムであり、有限要素法に基づく解析一般に適用可能である。たとえば、有限要素法によって定式化される連続体力学全般、固体力学、構造力学、流体力学、熱伝導問題、電磁場問題に利用できる。また、有限要素法は微分方程式を支配方程式とする境界値問題の一般的解法とみなされるので、その意味で、C G C G 法は、微分方程式を支配方程式とする境界値問題全般の解法として適用可能である。どの問題においても、C G C G 法の適用は大規模な問題を効率よく解くことに有効である。C G C G 法は、大規模な問題を解く有限要素法ソルバアルゴリズムとして従来から知られている、D D M、並列 C G 法及びNeumann前処理付き D D Mに比較して計算時間が極めて短くなり、計算反復ステップが極めて少なくなるという特徴を有する。

更に、C G C G 法は計算時間に関して、高速化を目的として開発された B D D 法に比較してもより高い性能を示す。

【 図 1 】
第 1 図



【 図 2 】
第 2 図



フロントページの続き

(72)発明者 大山 知信

東京都品川区大井1丁目2番17号 株式会社アライドエンジニアリング内

(72)発明者 鈴木 正文

東京都品川区大井1丁目2番17号 株式会社アライドエンジニアリング内

審査官 鳥居 稔

(56)参考文献 特開平03-265066(JP,A)

特開2001-167073(JP,A)

秋葉博,大規模パラレルコンピューティングの応用,日本機械学会 第14回計算力学講演会後援論文集,日本,2001年11月,679-680,URL,http://www.alde.co.jp/paper/jsme14cm200111.pdf

秋葉博,鈴木正文,大山知信,野口裕久,吉村忍,分散メモリ型並列構造解析システムADventureClusterの高速CGCG法ソルバ,日本機械学会 第11回設計工学・システム部門講演会講演論文集,日本,2001年11月,223-224,URL,http://www.alde.co.jp/paper/jsme11ds200111.pdf

鈴木正文,大山知信,秋葉博,野口裕久,吉村忍,大規模有限要素解析のための高速頑健な並列ソルバCGCG法の開発,日本機械学会論文集A編,653,日本,2002年7月,1010-1017

和田哲也,秋葉博,吉村忍,ADVENTUREとADVENTURECluster:並列構造解析システム,日本計算工学会講演論文集,Vol.7-2,日本,2002年5月20日,337-338

(58)調査した分野(Int.Cl.,DB名)

G06F 17/13

G01M 19/00